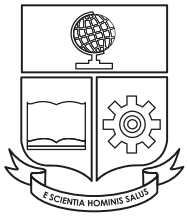
revista politécnica

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

ISSN: 1390-0129
eISSN: 2477-8990
Volumen 46, No. 1 Agosto · Octubre 2020

revista politécnica



ESCUELA
POLITÉCNICA
NACIONAL

ISSN: 1390-0129
eISSN: 2477-8990
Volumen 46, No. 1 Agosto · Octubre 2020

Temática y Alcance

La Revista Politécnica es una publicación periódica trimestral, editada por la Escuela Politécnica Nacional del Ecuador, cuyo objetivo es contribuir al conocimiento científico y tecnológico, mediante la publicación de estudios científicos relacionados a las áreas de ciencias básicas (física, química y matemática) e ingenierías (agroindustria, ambiental, civil, eléctrica, electrónica, geología, mecánica, petróleos, sistemas y química). La Revista Politécnica está dirigida a profesionales e investigadores que trabajan en estos campos del conocimiento.

Editor

Oscar Eduardo Camacho, Ph.D.
Escuela Politécnica Nacional
editor.rp@epn.edu.ec

Co-Editora

Jenny Gabriela Torres, Ph.D.
Escuela Politécnica Nacional
coeditor.rp@epn.edu.ec

Consejo Editorial

Ph.D. José Aguilar
Universidad de los Andes, Venezuela

Ph.D. Santiago Arellano
Chalmers University of Technology, Suecia

Ph.D. Carlos Avila
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Leonardo Basile
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Silvia Calderón
Universidad de los Andes, Venezuela

Ph.D. Jean François Dulhoste
Universidad de los Andes, Venezuela

Dr. Pamela Flores
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Carlos Gallardo
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Victor Hugo Hidalgo
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Edinzo Iglesias
Universidad de los Andes, Venezuela

Ph.D. Francisco León
Universidad de los Andes, Venezuela

Ph.D. Orestes Llanes
Universidad Tecnológica de la Habana, Cuba

Ph.D. Diego Ordoñez
Universidad Tecnológica Equinoccial, Ecuador

Ph.D. Rui Pedro Paiva
University of Coimbra, Portugal

Ph.D. José Luis Paz
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Nelson Pérez
Universidad de los Andes, Venezuela

Ph.D. Franklin Rivas
Universidad Técnica Federico Santamaría, Chile

Ph.D. Andrés Rosales
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Gabriel Salazar
Organización Latinoamericana de Energía, Ecuador

Ph.D. Pablo Samaniego
Instituto de Investigación para el Desarrollo (IRD), Francia

Ph.D. Gustavo Scaglia
Universidad Nacional de San Juan, Argentina

Ph.D. Hebertt Sira-Ramirez
Center for Research and Advanced Studies of the National Polytechnic Institute, México

Ph.D. Carlos Smith
University of South Florida, Estados Unidos

Ph.D. Sebastian Taco
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Cristian Vallejo
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Marcos Villacis
Escuela Politécnica Nacional, Ecuador

Ph.D. Cesar Witt
Université des Sciences et Technologies de Lille, Francia

La Revista Politécnica está incluida en Scientific Electronic Library Online (SciELO), Catálogo 2.0 de Latindex, Directory of Open Access Journals (DOAJ), Red Iberoamericana de Innovación y Conocimiento Científico (REDIB), Matriz de Información para el Análisis de Revistas (MIAR), Bielefeld Academic Search Engine (BASE), CiteFactor, PKP Index, Google Scholar, ResearchBib, International Institute of Organized Research (I2OR).

Se autoriza la reproducción total o parcial de su contenido siempre y cuando se cite la fuente. Los conceptos expresados son de responsabilidad exclusiva de sus autores.

Coordinador Técnico Operativo

Ing. Ricardo Villarroel
ricardo.villarroel@epn.edu.ec

Ing. Katherine Aro
katherine.aro@epn.edu.ec

Proofreader

MSc. María Eufemia Torres

Diseño de Portada

Ing. Cristian Basurto

Autoridades

Escuela Politécnica Nacional

Vicerrectora de Investigación, Innovación y Vinculación
Alexandra Alvarado, Ph.D.

Rectora
Florinella Muñoz, Ph.D.

Vicerrector de Docencia
Iván Bernal, Ph.D.

Palabras del Editor

El Volumen 46 N° 1 de la Revista Politécnica presenta seis artículos asociados a diferentes áreas del conocimiento. Estos artículos presentan temas de actualidad y de importancia para el país, estamos seguros que captará el interés de investigadores, docentes y estudiantes en su quehacer diario. Un resumen de cada uno de estos temas se muestra a continuación:

El primer artículo es presentado por González-Paz y colaboradores. En este artículo los autores proponen evaluar los fitoquímicos Piperina_ID_638024, EPGG_ID_65064, Curcumina_ID_969516, y Capsaicina_ID_1548943 frente a la RNA polimerasa del SARS-CoV-2 (PDB_ID_6NUR), usando Remdesivir_ID_121304016 como control, mediante análisis computacional, comparativo y multivariado de las funciones de puntuación ADV, PLANTS, MolDock, Rerank y DockT considerando la solubilidad de ligandos e hidrofobicidad de las cavidades implicadas en las interacciones, para aumentar la precisión en la predicción de los mejores acoplamientos de los compuestos naturales frente al COVID-19. Se encuentra que 4/5 de las funciones de puntuación exceptuando ADV predijeron el acoplamiento termodinámicamente más favorable con Piperina, superando a Remdesivir. También se observa que las calificaciones de PLANTS, ADV y DockT se afectan por la solubilidad del ligando e hidrofobicidad de cavidades. Bajo las condiciones de este estudio, los autores concluyen que los algoritmos MolDock y Rerank son más adecuados para el cribado rápido y la reorganización de acoplamientos, cuando se trabaja con ligandos solubles (Rp = 0.70 para ambos), indistintamente de su polaridad, y dirigidos a cavidades hidrofóbicas de la RNA polimerasa del SARS-CoV-2 (Rp = 0.95 y Rp = 0.90, respectivamente), especialmente para los enfoques computacionales en el contexto de la investigación de fármacos frente al COVID-19.

Arteaga, y coautores realizan el segundo trabajo. En este documento se describe el desarrollo de un programa que permite la estimación de propiedades de Presión, Volumen y Temperatura (PVT) en los pozos del Oriente Ecuatoriano. El prototipo cuenta con la recopilación de correlaciones más adecuadas para crudo ecuatoriano, visualización y generación de reportes de los pozos que se encuentren perforados sujeta a información geográfica. Como primer punto, es necesario contar con expresiones matemáticas PVT calibradas a datos de laboratorio correspondientes a la arena U inferior del crudo de la región. Para esta parte, la metodología desarrollada constituye la adquisición, procesamiento y ajuste de datos de información de laboratorio, con el fin de obtener un manejo adecuado de los mismos. La aplicación desarrollada proporcionará la estimación de las propiedades PVT del petróleo más acordes a la Cuenca Oriente.

El tercer trabajo es presentado por Sánchez-Oñate y colaboradores. Los autores en su estudio elaboraron probetas de hormigón armado utilizando agregados obtenidos de la mina San Roque ubicada en la provincia de Imbabura, Ecuador y se obtuvo el módulo estático de elasticidad del hormigón usando el método ASTM C 469. Los resultados obtenidos mostraron que la forma de cálculo del módulo estático de elasticidad del hormigón propuesto por el ACI no es aplicable para hormigones fabricados con agregados obtenidos de la mina San Roque.

Molina y coautores presentan el cuarto artículo. En este trabajo se evalúa la modificación de almidón de achira vía radiación gamma, y subsecuente modificación química para la formulación de adhesivos. El almidón nativo fue irradiado empleando un acelerador lineal con una tasa media de 19.5 kGy/min a temperatura ambiente y presión atmosférica. La modificación química de almidón irradiado consistió en un proceso de hidrólisis, seguido de la obtención de carbamatos a partir del almidón hidrolizado usando urea, ácido sulfúrico y etanol. Para la elaboración de adhesivos, se probó almidón nativo, almidón modificado y doblemente modificado en diferentes proporciones con una solución de polivinil alcohol (PVA). El análisis por Espectroscopía

Infrarroja por Transformadas de Fourier (FTIR) mostró que los almidones modificados tuvieron una menor intensidad en la banda entre 1100 y 900 cm-1 debido al daño en los enlaces glucosídicos. Solo los almidones con modificación simple evidenciaron la banda característica a 1715 cm-1, correspondiente al grupo carbonilo (C=O) del carbamato. La viscosidad de los adhesivos de almidón nativo aumentó con la relación de almidón-PVA, al contrario de los adhesivos con almidón simple y doblemente modificado. Los resultados de la resistencia al cizallamiento indicaron que la modificación del almidón con urea o con irradiación no afectó significativamente esta propiedad. La combinación de hidrólisis con el ataque del haz de electrones causó un fuerte daño en la estructura del almidón. Sin embargo, la capacidad de adhesión de los almidones no irradiados es similar en todos los casos.

El quinto trabajo es presentado por Vargas y colaboradores. En este artículo, se simula la estrategia de una futura implementación de vehículos eléctricos en el sistema nacional de transporte terrestre. El estudio de prospectiva y planificación energética en el sector transporte se realizó con ayuda del Modelo de Simulación y Análisis de la Matriz Energética – SAME, perteneciente a la Organización Latinoamericana de Energía OLADE. A través de un tablero virtual, se simula en el año 2035 la sustitución de combustibles fósiles: gasolina y diésel por electricidad, minimizando así el volumen de importaciones de los derivados del petróleo. El objetivo del presente trabajo es demostrar la viabilidad técnica de electrificación del sector de transporte y desacoplamiento de los derivados del petróleo. Como resultados de una primera aproximación estratégica en esta sustitución implicaría una reducción de 86.223,0 kbep de diésel del consumo nacional, además, una importante reducción de importaciones de gasolina. De esta manera, al año 2035, sólo se importaría alrededor de 19.650,9 kbep, destinados al consumo de sectores comercial, residencial y construcción.

El sexto artículo es presentado por Rivera y Sotomayor, los autores en su trabajo presentan una solución sencilla para el diseño de un controlador de un conversor integrado al panel fotovoltaico basado en un inversor tipo Flyback de baja potencia con control nolineal de la corriente del primario con el propósito de controlar la potencia inyectada a la red eléctrica con factor de potencia unitario. La corriente de referencia es obtenida utilizando el algoritmo de Conductancia Incremental (IC) y en consecuencia obtener la potencia máxima del panel solar ante cualquier cambio de las condiciones atmosféricas. El controlador no-lineal es diseñado para trabajar en el modo de conducción discontinua (DCM) y de esta manera facilitar el diseño si se compara con la complejidad de diseño que presentan este tipo de conversores cuando funciona en el modo de conducción continua (CCM) debido a que la función de transferencia de la corriente del inversor tipo Flyback presenta un cero en el semiplano derecho (RHP). Adicionalmente, se desarrolla el análisis de estabilidad utilizando el método de Lyapunov para demostrar la estabilidad y delimitación de las señales del sistema en lazo cerrado. Los resultados de la simulación validan el funcionamiento y robustez del controlador.

Oscar Eduardo Camacho Quintero, Ph.D.

EDITOR

Contenido
Vol. 46, No. 1
Agosto 2020 – Octubre 2020

7

González-Paz Lenin; Paz José Luis; Vera-Villalobos Joan; Alvarado Ysaias J.

Compuestos Fitoquímicos Dirigidos al Bloqueo de la Polimerasa Viral del SARS-CoV-2 Causante del COVID-19: un Análisis Comparativo de Funciones de Puntuación para Acoplamientos con Interés Biomédico

Phytochemical Compounds Targeted for Viral Polymerase Blocking of SARS-CoV-2 Causing COVID-19: A Comparative Analysis of Scoring Functions for Docking with Biomedical Interest

21

Arteaga Jimmy; Gómez Franklin; Iza Anabel; Izurieta Álvaro; Jiménez Tamia; Valencia Raúl; Zurita Kevin

Desarrollo de una Herramienta Informática para la Simulación de Reportes PVT en los Pozos del Oriente Ecuatoriano de la Arena U Inferior

Development of a Computer Tool for PVT Report Simulation in the Ecuadorian Wells for the Lower U Sand

29

Sánchez Oñate Diego M.; Chiliquinga Cando Jessica P.; Flores Montalvo Edwin P.; Orosco Tacuri Marcia K.

Módulo Estático de Elasticidad del Hormigón Fabricado con Agregados de la Mina de San Roque, Imbabura, Ecuador

Concrete Modulus of Elasticity Based on Compressive Strength Made with Materials of San Roque Mine Located in Imbabura, Ecuador

39

Molina Pamela; Borja Samantha; Valle Vladimir; Mena Lisbeth; Cadena Francisco

Dual Modification of Starch Via Gamma Irradiation and Subsequent Chemical Treatment with Urea for the Development of Adhesives

Doble Modificación de Almidón, Vía Irradiación Gamma y Posterior Tratamiento Químico con Urea, para el Desarrollo de Adhesivos

47

Vargas Carlos; Guamán Jesús; Ríos Alberto; Otorongo Manuel

Simulación de una Estrategia en Implementación de Vehículos Eléctricos en el Transporte Terrestre del Ecuador en el Horizonte 2014 – 2035

Simulation of a Strategy in Electric Vehicles Implementation in the Land Transport of Ecuador in the Horizon 2014 - 2035

59

Rivera Pablo; Sotomayor Nelson

Microinversor Tipo Flyback con Control Nolineal para Aplicaciones Fotovoltaicas de Baja Potencia

Flyback Microinverter with Nonlinear Control for Low Power Photovoltaic Applications

Compuestos Fitoquímicos Dirigidos al Bloqueo de la Polimerasa Viral del SARS-CoV-2 Causante del COVID-19: un Análisis Comparativo de Funciones de Puntuación para Acoplamientos con Interés Biomédico

González-Paz, Lenin[1, *]; Paz, José Luis[2]; Vera-Villalobos, Joan[3]; Alvarado, Ysaias J. [4]

[1]Universidad del Zulia (L.U.Z). Facultad Experimental de Ciencias (F.E.C). Departamento de Biología. Laboratorio de Genética y Biología Molecular (L.G.B.M). Maracaibo, Venezuela.
[2]Escuela Politécnica Nacional, Departamento de Física, Quito- Ecuador.
[3]Escuela Superior Politécnica del Litoral, Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas. Departamento de Química y Ciencias Ambientales. Laboratorio de Análisis Químico Instrumental (LAQUINS), Ecuador
[4]Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (I.V.I.C)- Zulia. Centro de Investigación y Tecnología de Materiales (CITeMA). Laboratorio de Caracterización Molecular y Biomolecular. Maracaibo, Venezuela.

Resumen: La pandemia mundial del COVID-19 causada por el SARS-CoV-2 ha hecho necesario buscar alternativas de tratamiento. La OMS ha recomendado el fármaco aprobado por la FDA Remdesivir dirigido a la RNA polimerasa viral. Adicionalmente, se han evaluado computacionalmente compuestos naturales con propiedades antivirales. Sin embargo, estos estudios se centran en el uso de la función de puntuación del algoritmo AutoDock Vina (ADV) para predecir los candidatos. Aquí proponemos evaluar los fitoquímicos Piperina_ID_638024, EPGG_ID_65064, Curcumina_ID_969516, y Capsaicina_ID_1548943 frente a la RNA polimerasa del SARS-CoV-2 (PDB_ID_6NUR), usando Remdesivir_ID_121304016 como control, mediante análisis computacional, comparativo y multivariado de las funciones de puntuación ADV, PLANTS, MolDock, Rerank y DockT considerando la solubilidad de ligandos e hidrofobicidad de las cavidades implicadas en las interacciones, para aumentar la precisión en la predicción de los mejores acoplamientos de los compuestos naturales frente al COVID-19. Encontramos que 4/5 de las funciones de puntuación exceptuando ADV predijeron el acoplamiento termodinámicamente más favorable con Piperina, superando a Remdesivir. También observamos que las calificaciones de PLANTS, ADV y DockT se afectan por la solubilidad del ligando e hidrofobicidad de cavidades. Bajo las condiciones de este estudio concluimos que los algoritmos MolDock y Rerank son más adecuados para el cribado rápido y la reorganización de acoplamientos, cuando se trabaje con ligandos solubles (Rp = 0.70 para ambos), indistintamente de su polaridad, y dirigidos a cavidades hidrofóbicas de la RNA polimerasa del SARS-CoV-2 (Rp = 0.95 y Rp = 0.90, respectivamente), especialmente para los enfoques computacionales en el contexto de la investigación de fármacos frente al COVID-19.

Palabras clave: Remdesivir, compuestos naturales, bioinformática, RNA polimerasa, acoplamiento molecular.

Phytochemical Compounds Targeted for Viral Polymerase Blocking of SARS-CoV-2 Causing COVID-19: A Comparative Analysis of Scoring Functions for Docking with Biomedical Interest

Abstract: The worldwide pandemic of COVID-19 caused by SARS-CoV-2 has made it necessary to search for treatment alternatives. The WHO has recommended the FDA-approved drug Remdesivir targeting viral RNA polymerase. Additionally, natural compounds with antiviral properties have been computationally evaluated. However, these studies focus on using the AutoDock Vina (ADV) algorithm scoring function to predict candidates. We propose to evaluate the phytochemicals Piperina_ID_638024, EPGG_ID_65064, Curcumina_ID_969516, and Capsaicina_ID_1548943 against the RNA polymerase of SARS-CoV-2 (PDB_ID_6NUR), using Remdesivir_ID_121304016 as control, through computational, comparative and multivariate analysis of the scoring functions ADV, PLANTS, MolDock, Rerank and DockT considering the solubility of ligands and hydrophobicity of the cavities involved in the interactions, to increase the precision in predicting the best docking of natural compounds

[*]lgonzalezpaz@gmail.com
Recibido: 25/05/2020
Aceptado: 07/07/2020
Publicado: 31/08/2020
10.33333/rp.vol46n1.01
CC BY 4.0

in front of COVID-19. We found that 4/5 of the scoring functions except ADV predicted that the most thermodynamically favorable docking occurs with Piperine, outperforming Remdesivir. We also observe that the scores of the PLANTS, ADV and DockT functions are affected by the solubility of the ligand and the hydrophobicity of cavities. Therefore, under the conditions of this study, we conclude by proposing the MolDock and Rerank algorithms for rapid screening and reorganization of couplings, respectively, when working with soluble ligands (Rp=0.70), regardless of their polarity, and targeting hydrophobic cavities (Rp=0.95 and Rp=0.90, respectively) of the SARS-CoV-2 RNA polymerase, especially for computational approaches in the context of drug research versus COVID-19.

Keywords: Remdesivir, natural compounds, bioinformatics, RNA polymerase, molecular docking.

1. INTRODUCCIÓN

El coronavirus denominado SARS-CoV-2 causante de la enfermedad COVID-19 fue reportado por primera vez en diciembre de 2019 en la ciudad de Wuhan, en la P.R. China (Xu *y col.,* 2020) y fue declarado pocos meses después pandemia por la Organización Mundial de la Salud (OMS). Este virus para principios de mayo de 2020 ya había causado más de 4.000.000 de casos confirmados y más de 250.000 muertes a nivel mundial (WHO, 2020). Lo que ameritó una acelerada carrera para la búsqueda de una vacuna no disponible aún para la fecha (Jiang *y col*., 2020). Sin embargo, diversos especialistas han recomendado considerar drogas previamente aprobadas por la FDA para ser estudiadas como potenciales agentes alternativos de tratamiento, incluyendo diversos compuestos naturales ampliamente conocidos (Chang *y col*., 2020; Contini, 2020). De hecho, se han realizado amplios estudios teóricos y bioinformáticos para predecir la potencialidad de diversos compuestos fitoquímicos dirigidos al acoplamiento molecular y a la perturbación estructural de proteínas estructurales y funcionales del SARS-CoV-2 (Khaerunnisa *y col*., 2020; Qamar *y col.,* 2020; Sharma y Kaur, 2020; Chandel *y col*., 2020; Adem *y col*., 2020; Gentile *y col*., 2020; Sun *y col.,* 2020a,b) siendo la RNA polimerasa una de las dianas de mayor interés terapéutico (Chang *y col.,* 2020; Elfiky, 2020a; Gordon *y col*., 2020).

Sin embargo, los estudios computacionales destinados a predecir los mejores acoplamientos moleculares se han centrado en el uso del algoritmo y función de puntuación AutoDock Vina (Chang *y col*., 2020; Zhang *y col*., 2020; Chandel *y col*., 2020; Sekhar, 2020; Gentile *y col*., 2020; Alamri *y col.,* 2020). AutoDock Vina es una nueva función de puntuación basada en el conocimiento que utiliza una variante de X-Score, con un ajuste usando PDBbind, y considerando además las contribuciones inter e intramoleculares, su técnica de muestreo se basa en el optimizador global de Búsqueda Local Iterativa, en su variante Broyden – Fletcher – Goldfarb - Shanno (BFGS) (Pagadala *y col.,* 2017). En este sentido, además del uso del AutoDock Vina, en el siguiente estudio nosotros proponemos realizar un análisis comparativo entre los acoplamientos de diversos algoritmos incluidos en el paquete Molegro Molecular (Thomsen y Christensen, 2006). Específicamente, consideramos a MolDock el cual es un nuevo algoritmo híbrido de búsqueda heurística que combina la evolución diferencial con un algoritmo de predicción de cavidades, y aplica como función de puntuación una extensión del Potencial Lineal por Partes (PLP) que considera la direccionalidad, cargas del puente de hidrógeno e interacciones electrostáticas, y ha demostrado ser una de las más precisas para cribados rápidos porque las poses mejor clasificadas son re-clasificadas mediante un re-ranking que utiliza una función de puntuación más compleja que agrega un término de torsión sp2-sp2 al cálculo de puentes de hidrógeno y un término potencial de Lennard-Jones a la puntuación (Torktaz *y col*., 2013; Naeem *y col*., 2013).

En paralelo se calculó el algoritmo Rerank también integrado en el Molegro, que se basa en funciones de clasificación de tipo Relación cuantitativa Estructura-Actividad (QSAR, por sus siglas en ingles), el cual representa una función muy costosa para su cálculo en medio o durante la simulación de acoplamiento, pero que es generalmente mejor que la función de puntuación de acoplamiento por defecto para rectificar o determinar la mejor pose entre ciertas poses que emergen del ligando. En Molegro la función Rerank proporciona una evaluación del poder de las interacciones, y tiende a ser exitoso al reorganizar varias posturas de un mismo ligando (Velraj y Chand, 2019).

Por otro lado, para adquirir u obtener una evaluación aproximada de las poses mejor clasificadas, se usó una estimación de afinidad vinculante, por lo que también fue considerado el algoritmo PLANTS (Protein-Ligand ANT System), que se fundamenta en un algoritmo de optimización estocástica llamado optimización de colonias de hormigas (ACO, por sus siglas en inglés) y cuya función de puntuación empírica está basada de igual manera en un PLP similar al utilizado por MolDock, pero integra más tipos de interacción (repulsivas, atractivas, no polares, enlaces de hidrógeno y metálico) por lo que al ser más conservador que MolDock, se ha recomendado como estrategia de re-ranking posterior (Torktaz *y col*., 2013).

También comparamos los acoplamientos arrojados por el algoritmo DockT del servidor DockThor, el cual implementa un método basado en la cuadrícula que emplea un algoritmo genético de estado estable para múltiples soluciones como motor de búsqueda y el campo de fuerza MMFF94S como la función de puntuación para la evaluación de pose. Esta función de puntuación se obtiene mediante regresión lineal y técnicas de aprendizaje automático más sofisticadas para problemas no lineales utilizando el conjunto refinado PDBbind (Da Silveira *y col.,* 2019; Dos Santos *y col*., 2020).

Todas estas funciones empíricas anteriormente descritas coinciden en estar apoyadas en análisis de regresión que

usan diferentes términos para describir contactos vdW, cobertura superficial lipofílica, enlaces de hidrógeno, desolvatación, tensión y flexibilidad de ligando (Pecina *y col*., 2016) para evaluar y clasificar con mayor precisión las poses predichas utilizando una función de puntuación. Sin embargo, como fue definido, las cinco estrategias de acoplamiento consideradas en este estudio, poseen funciones de puntuación con algunas divergencias. En este sentido, proponemos evaluar un grupo destacado de compuestos fitoquímicos con actividad antiviral reportada y dirigidos al bloqueo de la RNA polimerasa del SARS-CoV-2, mediante un análisis computacional comparativo y multivariado de las funciones de puntuación MolDock, Rerank, PLANTS, DockT y AutoDock Vina considerando los términos de solubilidad y liposolubilidad de los ligandos, así como la relación total de hidrofobicidad e índices de hidropatía de las cavidades involucradas en los acoplamientos con la finalidad de aumentar la precisión en la rápida predicción de los mejores acoplamientos durante los estudios teóricos de potenciales compuestos con interés biomédico frente al COVID-19.

2. METODOLOGÍA

Cribado de Acoplamiento Molecular: En este estudio, se consideró la estructura funcional asociada con el SARS-CoV-2 nsp12 Polimerasa (PDB: 6NUR). La cual se obtuvo de la base de datos de proteínas RCSB Protein Data Bank. Y con base en lo descrito en literatura, probamos los siguientes compuestos fitoquímicos con posible actividad antiviral reportada incluidos aquellos con algún tipo de actividad in silico frente el SARS-CoV-2: Capsaicina, Curcumina y Piperina (Chandani *y col.,* 2019; Tang *y col.,* 2020; Bonfim *y col.,* 2020; Gonzalez-Paz *y col.*, 2020), y Epigallocatechin Gallate (EPGG) (Mohammad y *col.,* 2020). Además, hemos utilizado como control de acoplamiento molecular para la RNA polimerasa el medicamento aprobado por la FDA Remdesivir, un "*análogo de nucleótido en investigación*" (Hendaus, 2020) activo frente a los virus del Ébola, Marburgo, virus sincitial respiratorio, Junín, fiebre de Lassa, MERS, Nipah, Hendra y el SARS, por lo que se ha recomendado para el tratamiento de pacientes con COVID-19 (Al-Tawfiq *y col.,* 2020).

Para esto todas las estructuras 2D de los compuestos se obtuvieron de PubChem (https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/) en formato SDF, y se utilizó el convertidor en línea SMILES (https://cactus.nci.nih.gov/translate/) para obtener formatos PDB. Para simular la unión ligando-proteína, se construyeron los complejos en formato PDB en el servidor DockThor (https://dockthor.lncc.br/v2/) utilizando el algoritmo de flexibilidad y el acoplamiento ciego que implementa un método basado en la cuadrícula con un algoritmo genético de estado estable para múltiples soluciones, calculando en paralelo la función de puntuación DockT (Da Silveira *y col.,* 2019; Dos Santos *y col.,* 2020). La posición más favorecida se analizó con las herramientas del Molegro Molecular MMV_2019_7.0.0, calculando también las funciones MolDock Score, Rerank Score y PLANTS Score (Thomsen y Christensen, 2006). También se calculó la función de puntuación AutoDock usando el algoritmo AutoDock Vina del servidor DINC 2.0 (Antunes *y col.,* 2017).

Análisis complementarios: el servidor Molinspiration (Cheminformatics, 2020; Reena Roy *y col*., 2020) y las herramientas del Grupo de Modelado Molecular de la SIB | Instituto Suizo de Bioinformática (Zoete *y col.,* 2016; Daina *y col.,* 2017) se utilizaron para los cálculos de bioactividad. Para el cálculo de hidropatía (GRAVY, por las siglas en inglés de *Grand Average Hydropathy Value*) y hidrofobicidad total se utilizó el servidor APD3 (http://aps.unmc.edu/AP/prediction/prediction_main.php). Estos parámetros se corroboraron con la herramienta CellPPD, con el sitio WEB dado por https://webs.iiitd.edu.in/raghava/cellppd/index.html.

También se aplicó como modelo estadístico el análisis de componentes principales (ACP) para realizar una reducción de variables y establecer previa determinación de co-linealidades (partiendo de correlaciones simples y múltiples según sea el caso) aquellas variables ortogonales que permitan obtener el mayor porcentaje de variabilidad explicada; así mismo se utilizó un modelo multivariado de tipo discriminante (ADC) con las variables resultantes con la finalidad de proponer la función de puntuación de acoplamiento con mayor peso clasificatorio con base a las condiciones de este estudio basado en solubilidad de ligandos y características hidrofóbicas de las cavidades. Todos los análisis se realizaron con el paquete estadístico IBM SPSS-23.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la Tabla 1, se muestran los resultados del acoplamiento de la Piperina_ID_638024, EPGG_ID_65064, Curcumina_ID_969516, Capsaicina_ID_1548943 y el control Remdesivir_ID_121304016 (ver Figura 1) con la estructura proteica de SARS-CoV-2 nsp12 polimerasa (PDB ID: 6NUR). Estas puntuaciones representan la afinidad de unión en energía libre (ΔG) obtenida con el paquete Molegro Molecular (funciones de puntación MolDock, Rerank y PLANTS) y los servidores DockThor (función de puntuación DockT) y DINC 2.0 (función AutoDock Vina). Todos los algoritmos y sus funciones de puntuación exceptuando AutoDock Vina predijeron que el acoplamiento termodinámicamente más favorable ocurre entre la Piperina y la polimerasa viral. AutoDock Vina fue el único algoritmo que difirió en la predicción del acoplamiento con respecto al resto. Coincidiendo solo en la segunda predicción más probable y favorable termodinámicamente calculada por las otras funciones de puntuación, representado por el acoplamiento entre el fitoquímico EPGG y la polimerasa. Un acoplamiento que ya se ha descrito como favorable (Mohammad *y col.,* 2020) y el cual solo la función de puntuación DockT difirió en la predicción. Adicionalmente, el acoplamiento termodinámicamente más favorecido de la piperina frente al EPGG observado; aquí ya se ha reportado (Tripathi *y col.,* 2020), aunque nuestros resultados difieren de lo predicho por otras funciones de puntuación (Mohammad *y col.,* 2020).

Interesantemente el 80% (4/5) de las funciones de puntuación predijeron que aproximadamente el 50% de los compuestos naturales probados presentan energías de acoplamiento termodinámicamente más favorables que el control Remdesivir. De hecho, ninguna de las funciones de puntuación predijo un acoplamiento de esta molécula más favorable que el resto de los compuestos. Una observación que coincide con el reportado por otros autores para estos compuestos y en relación a otros fármacos controles considerados en sus estudios (Vardhan y Sahoo, 2020). Un hallazgo importante si consideramos que el Remdesivir se ha recomendado para el tratamiento de pacientes con COVID-19 (Al-Tawfiq *y col.,* 2020) y especialmente porque algunos estudios establecen que el Remdesivir no ha aportado beneficios significativos comparado con los placebos (Wang *y col.,* 2020; Grein *y col*., 2020).

Los acoplamientos más favorables predichos por MolDock, Rerank, PLANTS y DockT fueron de -40.62 kcal/mol, -38.05 kcal/mol, -33.77 kcal/mol y -7.24 kcal/mol para el complejo Piperina-polimerasa, respectivamente; y con AutoDock Vina de -7.40 kcal/mol para EPGG-polimerasa. Lo que representaría una diferencia con respecto al control Remdesivir relativo a cada función de puntuación de aproximadamente 19 kcal/mol, 16 kcal/mol, 4 kcal/mol, 0 kcal/mol para los complejos con Piperina, y de 0.3 kcal/mol para EPGG, respectivamente. Con una diferencia entre el primer y segundo mejor acoplamiento, según sea el caso, de 15 kcal/mol, 9 kcal/mol, 0.8 kcal/mol para la Piperina frente a EPGG, 0.4 kcal/mol para la Piperina frente a Curcumina, y 0.3 kcal/mol para EPGG frente al control. Todos los acoplamientos fueron favorecidos por una media de entre el 85-100% de interacciones estéricas/hidrofóbicas, con residuos que promovían al mismo tiempo interacciones de tipo puentes de hidrógeno. Específicamente, el 100% de las interacciones entre los residuos de la polimerasa y los compuestos EPGG, Capsaicina y Curcumina estuvieron favorecidas por acoplamientos estéricos, con residuos que al mismo tiempo contribuyeron con un 20% para EPGG y Capsaicina, y un 13% para Curcumina de interacciones de tipo puentes de hidrogeno. Mientras que el 94% de las interacciones entre la Piperina y la proteína fueron netamente estéricas con un restante 6% representadas por puentes de hidrógeno. En contraste el fármaco control mostró un 14% de interacciones basadas en puentes de hidrogeno.

El 60% (3/5) de los algoritmos predijeron las interacciones entre EPGG, Curcumina y Capsaicina en la misma cavidad, con una ligera diferencia entre las interacciones calculadas para EPGG y Curcumina, quienes difieren en aproximadamente un par de residuos. Por otro lado, las interacciones predichas para la Piperina, así como para el control Remdesivir, fueron en bolsillos únicos en relación con los residuos involucrados, pero predichas en una misma cavidad ubicada en una región más superficial que la calculada para el resto de los compuestos. Todas las cavidades predichas tienen un tamaño aproximado de ≥ 1700 $Å^3$. Nuestros resultados muestran que, existe una moderada correlación entre la profundidad de la cavidad muestreada (y, por ende, con el tipo y numero de interacciones posibles), y el acoplamiento termodinámicamente más favorable clasificado por todas las funciones de puntuación consideradas en este estudio con un coeficiente $Rp = 0.50$ (ver Tabla 1).

Es importante señalar que el compuesto GS-441524, es un antiviral análogo de nucleótido de adenosina, similar al Remdesivir (GS-5734), este último tras la administración, se metaboliza en su forma activa GS-441524; por lo tanto, al ser GS-5734 un pro-fármaco del GS-441524 los acoplamientos predichos podrían presentar variaciones, sin embargo, frente a esto, diversos autores justifican el uso del Remdesivir (en lugar del GS-441524) bajo la denominación de "*análogo de nucleótido en investigación*" por ser una forma con un mejor coeficiente de partición y solubilidad (ver Tabla 2) que la forma activa GS-441524 ($log\ K_{ow}$: -0.88 a -1.35; valores predichos con Molinspiration y el Grupo de Modelado Molecular de la SIB). Estas variaciones contribuyen en parte con la falta de consenso a la hora de realizar investigaciones con estos metabolitos (Agostini *y col.,* 2018; Jordania *y col*., 2018; Siegel y col., 2017; Tchesnokov *y col.,* 2019; Hendaus, 2020). Y a pesar de que probablemente la predicción de los acoplamientos puede verse comprometida por no utilizar la forma activa GS-441524, nosotros encontramos que bajo las condiciones de este estudio la diferencia entre la media termodinámica para el acoplamiento de Remdesivir y GS-441524 con la estructura proteica 6NUR es de aproximadamente -1 kcal/mol (resultados no mostrados) y que se corresponden con lo reportado por otros autores que incluso predicen un acoplamiento más favorable para el Remdesivir (Joshi *y col.*, 2020; Huynh y Luan, 2020). Estas variaciones en la biodisponibilidad, la similitud entre las energías de acoplamiento y otros aspectos que favorecen al Remdesivir (como ser la forma farmacéutica patentada y recomendada por la OMS) son algunas de las razones por las cuales consideramos en este trabajo a Remdesivir (o GS-5734) al igual que lo reportado por otros estudios (Elfiky, 2020a,b; Joshi *y col*., 2020; Yu *y col*., 2020). No obstante, recomendamos más estudios teóricos que realicen este tipo de análisis comparativo bajo las condiciones de este estudio.

Tabla 1. Resultados del Cribado virtual con la estructura SARS-CoV nsp12 polimerasa. Se muestran el acoplamiento de los compuestos fitoquímicos considerados y del fármaco control Remdesivir aprobado por la FDA y recomendado para el tratamiento del COVID-19.

	SARS-CoV-2 nsp12 Polimerasa (PDB ID: 6NUR)					
Compuesto*	MolDock Score (kcal/mol)	Rerank Score (kcal/mol)	PLANTS Score (kcal/mol)	DockT Score (kcal/mol)	AutoDock Score (kcal/mol)	Interacciones
Piperina_ID_638024	-40.62	-38.05	-33.77	-7.24	-6.30	Arg349(A)^{HB}, Leu265(A)^{SI}, Ile266(A)^{SI}, Trp268(A)^{SI}, Ser255(A)^{SI}, Val320(A)^{SI}, Phe321(A)^{SI}, Pro322(A)^{SI}, Pro323(A)^{SI}, Thr319(A)^{SI}, Pro461(A)^{SI}, Asn459(A)^{SI}, Phe396(A)^{SI}, Thr393(A)^{SI}, Cys395(A)^{SI}, Pro677(A)^{SI}
EPGG_ID_65064	-25.95	-28.95	-32.96	-6.81	-7.40	Ser814(A)$^{HB-SI}$, Asp760(A)$^{HB-SI}$, Ser759(A)$^{HB-SI}$, Leu758(A)^{SI}, Cys813(A)^{SI}, Asp761(A)^{SI}, Lys621(A)^{SI}, Arg553(A)^{SI}, Asp623(A)^{SI}, Pro620(A)^{SI}, Asp618(A)^{SI}, Tyr619(A)^{SI}, Cys622(A)^{SI}, Thr680(A)^{SI}, Thr687(A)^{SI}, Ser682(A)^{SI}
Curcumina_ID_969516	-20.64	-25.66	-22.42	-6.89	-6.70	Asp618(A)$^{HB-SI}$, Lys798(A)$^{HB-SI}$, Leu758(A)^{SI}, Asp760(A)^{SI}, Ser814(A)^{SI}, Cys813(A)^{SI}, Asp761(A)^{SI}, Ser759(A)^{SI}, Asp623(A)^{SI}, Cys622(A)^{SI}, Arg553(A)^{SI}, Lys551(A)^{SI}, Tyr619(A)^{SI}, Lys621(A)^{SI}, Pro620(A)^{SI}
Capsaicina_ID_1548943	-25.60	-22.67	-26.79	-6.67	-6.50	Asp760(A)$^{HB-SI}$, Asp618(A)$^{HB-SI}$, Tyr619(A)^{SI}, Pro620(A)^{SI}, Lys621(A)^{SI}, Arg553(A)^{SI}, Asp623(A)^{SI}, Cys622(A)^{SI}, Ser759(A)^{SI}, Leu758(A)^{SI}
Remdesivir_ID_121304016	-22.17	-22.47	-29.85	-7.24	-7.10	Asp454(A)$^{HB-SI}$, Arg392(A)$^{HB-SI}$, Ser451(A)^{SI}, Arg457(A)^{SI}, Pro133(B)^{SI}, Asn447(A)^{SI}, Ala30(C)^{SI}, Ser26(C)^{SI}, Leu180(B)^{SI}, Lys27(C)^{SI}, Asp134(B)^{SI}, Gln31(C)^{SI}, Gln34(C)^{SI}, Trp182(B)^{SI}

^{HB}, puentes de hidrógeno; ^{SI}, interacciones estéricas/hidrofóbicas; *Todos los compuestos fueron obtenidos de la base de datos PubChem (https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/).

Por otro lado, es importante señalar que luego de estudiar las propiedades moleculares y las características estructurales de estos compuestos, se determinó que todos los ligandos fitoquímicos cumplen con todos los criterios establecidos por las reglas de Lipinski garantizando una buena bioacumulación y su posible administración por vía oral en términos de absorción, distribución, metabolismo, y excreción ("ADME") (ver Tabla 2). Exceptuando al EPGG, el cual, sin embargo, a pesar de no cumplir con el número de grupos aceptores y donadores de enlaces de hidrógeno, y al ser características incompatibles con las reglas de Lipinski, esta molécula tiene un buen peso molecular, y un coeficiente de partición < 5, por lo que, aunque es una molécula con algunas dificultades en su permeabilidad, es capaz de bioacumularse con un coeficiente alto de acuerdo con los estándares establecidos (Leo *y col*., 1971; Ghose *y col.,* 1999; Bhal, 2007). Curiosamente, en términos generales los fisicoquímicos estudiados exhiben mejores características de tipo ADME que las presentadas por el control.

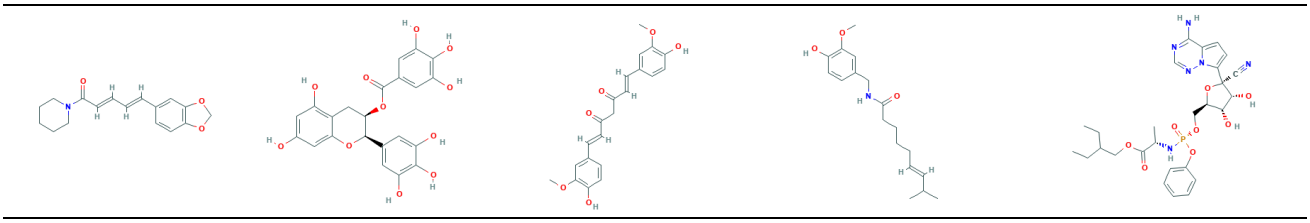


Figura 1. Visualización de las estructuras químicas de los compuestos considerados en este estudio.

Tabla 2. Cálculo de características consideradas asociadas a la bioactividad y solubilidad de ligandos usando el servidor Molinspiration y las herramientas del Grupo de Modelado Molecular de la SIB | Instituto Suizo de Bioinformática.

Compuesto	***MW* (*g/mol*)**	**Coeficiente de Partición (*log Kow*)***	**HBA**	**HBD**	**Solubilidad (log*S*)**	**Liposolubilidad (Log*Po/w*)**
Piperina_ID_638024	285.34	3.33	3	0	-3.0 / -3.96	3.04
EPGG_ID_65064	458.38	2.25	11	8	-2.50 / -4.91	1.01
Curcumina_ID_969516	368.40	3.29	6	2	-3.94 / -4.83	3.03
Capsaicina_ID_1548943	305.40	3.04	3	2	-3.53 / -4.87	3.43
Remdesivir_ID_121304016	602.59	2.82	13	4	-4.12 / -6.01	1.50

*log K_{ow}, 2 – 5 (Leo *et al*., 1971; Ghose *et al.,* 1999; Bhal, 2007). Todos los parámetros fueron validados con la base de datos PubChem (https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/).

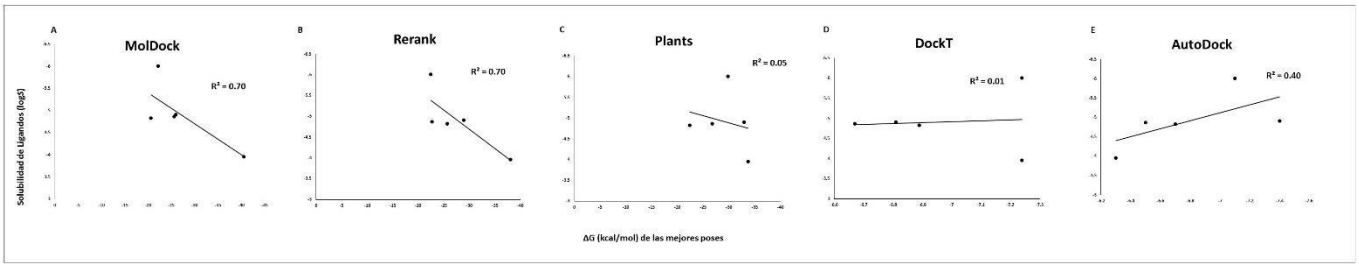


Figura 2. Valores de puntuación de las mejores posiciones calificadas durante los acoplamientos correlacionadas frente al coeficiente de solubilidad de cada ligando. Se muestran las 5 funciones de puntuación consideradas para la evaluación de los 5 ligandos probados frente a la RNA polimerasa del SARS-CoV-2. A: MolDock; B: Rerank; C: PLANTS; D: DockT y E: AutoDock.

Adicionalmente, encontramos que existe una correlación significativa entre la solubilidad del ligando y las funciones de puntuación MolDock y Rerank *Rp* = 0.70, mientras que para el resto de las funciones de puntuación la correlación fue de débiles a nulas (ver Figura 2). Por otro lado, la función de puntuación AutoDock Vina fue la única que presentó una correlación fuerte con la baja liposolubilidad de los ligandos (*Rp* = 0.90) (ver Figura 3). En términos de la relación total de hidrofobicidad de las cavidades, encontramos que solo las funciones Rerank y MolDock mostraron una fuerte correlación con esta propiedad siendo esta de *Rp* = 0.95 y *Rp* = 0.90, respectivamente. La correlación mostrada por el resto de las funciones fue débil en términos de hidrofobicidad de las cavidades (ver Figura 4). Estos resultados son similares a los arrojados para el término de hidropaticidad con una correlación significativa para MolDock (*Rp* = 0.82) y perfecta para Rerank (*Rp* = 0.98) y débil para el resto de las funciones (ver Figura 5). Por lo tanto, se pone en evidencia que las condiciones de acoplamiento propuestas en este estudio aunado al grupo de ligandos considerados, que las calificaciones de los mejores acoplamientos obtenidos a partir de las funciones de puntuación PLANTS, AutoDock Vina y DockT (en menor medida para DockT Score) disminuyen por la solubilidad los ligandos, así como por la relación total de hidrofobicidad e índices de hidropatía de las cavidades. Específicamente, mientras que las funciones de puntuación MolDock y Rerank favorecen a ligandos más solubles acoplados a cavidades más hidrofóbicas, y con una hidropaticidad >0 como en el caso de la piperina. La función de puntuación AutoDock Vina tiende por el contrario a clasificar mejor a los ligandos por menor liposolubilidad acoplados a cavidades con una relación total de hidrofobicidad ≤ 25%, o bien, con una hidropaticidad ≤ -0.89 como la exhibida por las cavidades o bolsillos en los que se acopló el resto de los ligandos considerados en este estudio. Las características consideradas asociadas a la solubilidad e hidropatías de ligandos y proteínas, respectivamente, se detallan en la Tabla 2 y Tabla 3, correspondientes.

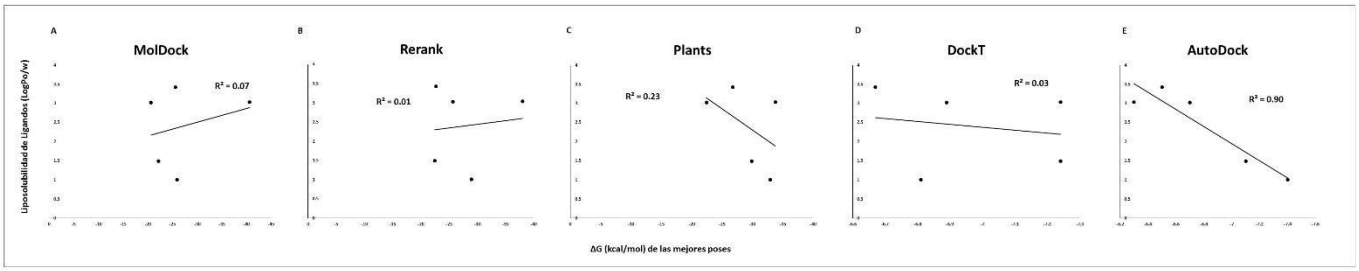


Figura 3. Correlación entre los valores de puntuación de las mejores posiciones calificadas durante los acoplamientos y la liposolubilidad de cada ligando. Se muestran los resultados para las 5 funciones de puntuación consideradas para la evaluación de los 5 ligandos probados frente a la RNA polimerasa del SARS-CoV-2. A: MolDock; B: Rerank; C: PLANTS; D: DockT y E: AutoDock.

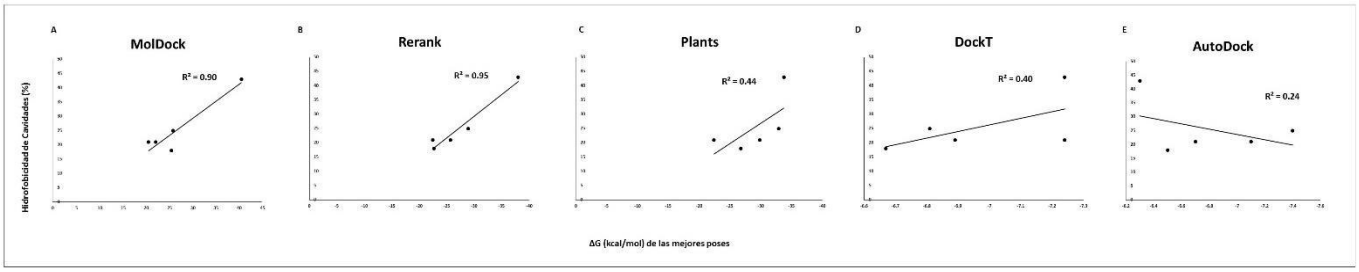


Figura 4. Correlación entre los valores de puntuación de las mejores posiciones calificadas durante los acoplamientos frente a la relación total de hidrofobicidad predicha para las cavidades muestreadas. Se muestran los valores para las 5 funciones de puntuación consideradas para la evaluación de los 5 ligandos probados frente a la RNA polimerasa del SARS-CoV-2. A: MolDock; B: Rerank; C: PLANTS; D: DockT y E: AutoDock.

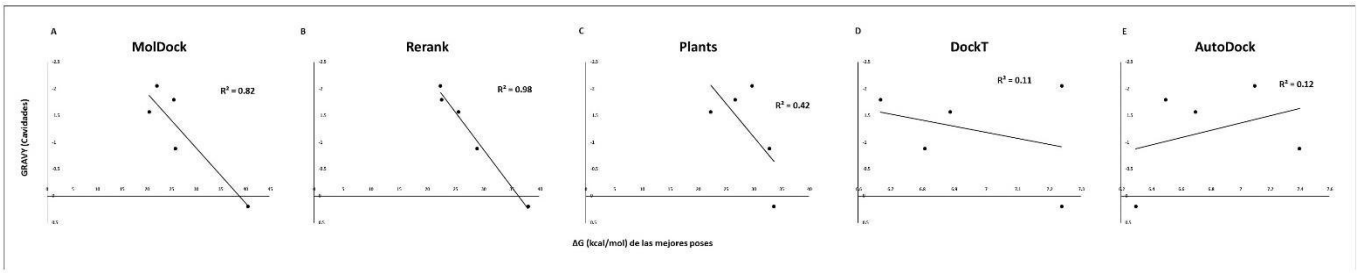


Figura 5. Correlación entre los valores de puntuación de las mejores posiciones calificadas durante los acoplamientos frente al índice de hidropatía (GRAVY) de las cavidades muestreadas. Se muestran los resultados para las 5 funciones de puntuación consideradas para la evaluación de los 5 ligandos probados frente a la RNA polimerasa del SARS-CoV-2. A: MolDock; B: Rerank; C: PLANTS; D: DockT y E: AutoDock.

Tabla 3. Predicción de las características consideradas asociadas a hidropatía (GRAVY) y a la relación total de hidrofobicidad de las cavidades involucradas en los acoplamientos.

Cavidad o Bolsillo	**SARS-CoV-2 nsp12 Polimerasa (PDB ID: 6NUR)**			
	Localización	**Hidrofobicidad (%)**	**GRAVY**	**Ligandos Acoplados**
1	Interna	18-25	-0.89 / -1.80	EPGG / Curcumina / Capsaicina
2	Externa/superficial	~20	~-0.06	Remdesivir
3	Externa/superficial	~40	~0.19	Piperina

GRAVY, siglas en ingles de *Grand Average Hydropathy Value*.

Este análisis comparativo y la importancia de las divergencias entre el acoplamiento de los ligando se facilitó gracias a que la diferencia entre la relación total de hidrofobicidad del bolsillo predicho para la piperina (fitoquímico mejor clasificado) y del segundo mejor clasificado (EPGG) fue de ≥18%, un margen considerable si se toma en cuenta que la relación total de hidrofobicidad del bolsillo acoplado a uno de los fitoquímicos peor clasificados (Capsaicina) es del aproximadamente 18%. Estas observaciones son coherentes con nuestras simulaciones teóricas por ACP que comprueban la importancia de las características hidrofóbicas de la cavidad, así como las del ligando para establecer las interacciones más favorecidas en la predicción de un complejo, y agrupan a las variables según el aporte en magnitud al componente 1 que explica aproximadamente el

55% del fenómeno de la siguiente manera: Rerank > MolDock > PLANTS > DockT, incluyendo a la función AutoDock Vina en el componente 2 responsable de un aproximadamente 32% del peso total de la variabilidad explicada (ver Figura 6a). Un resultado similar al obtenido por el modelo ADC el cual predijo que la funciones con mayor peso clasificatorio o predictivo para la categorización de la relación entre las características de hidrofobicidad y las funciones de puntuación podrían ordenarse de la siguiente manera: MolDock > Rerank > PLANTS excluyendo a DockT y AutoDock Vina (ver Figura 6b). Ambos modelos coinciden en el peso explicativo, predictor y clasificatorio de las funciones Rerank, MolDock y PLANTS.

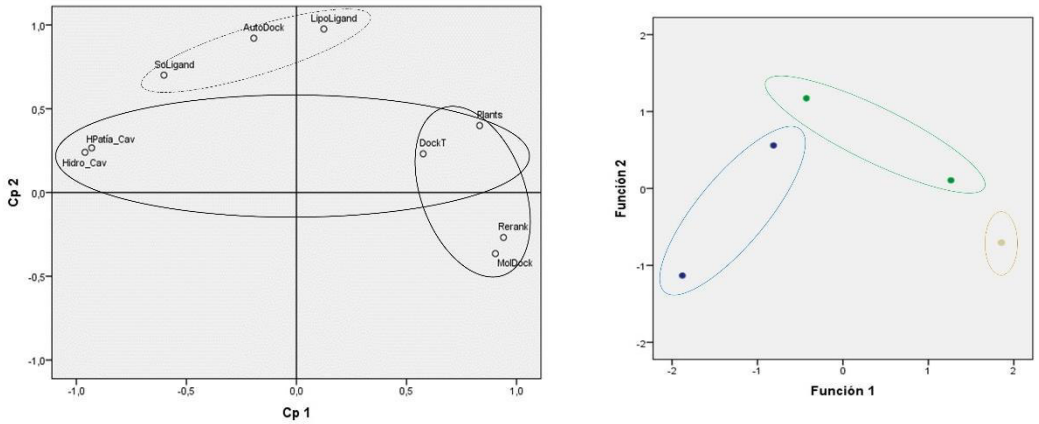


Figura 6. A) Análisis de componentes principales entre las variables consideradas en este estudio incluidas las funciones de puntuación, y las basadas en solubilidad de ligandos y características hidrofóbicas de las cavidades. Se muestra el componente principal numero 1 (Cp1) el cual agrupa a las funciones de puntuación MolDock, Rerank, PLANTS y DockT, y a las variables asociadas a la hidrofobicidad de las cavidades (puntos agrupados en los anillos negro-solido); y al componente 2 (Cp2) que agrupó a la función AutoDock y a las variables relacionadas con la solubilidad del ligando (puntos agrupados en el anillo negro-punteado). Estos componentes 1 y 2 (o variables latentes) generados por la agrupación de las variables primarias permiten explicar el 55% y 32% de la variabilidad observada; B) Análisis discriminante entre las variables consideradas en este estudio que incluye todas las funciones de puntuación, la solubilidad de ligandos y las características hidrofóbicas de las cavidades. La función discriminante con mayor peso clasificatorio o predictivo para la categorización de la relación entre las características de solubilidad e hidrofobicidad y las funciones de puntuación está representada por MolDock (función 1, que agrupa los puntos de color azul) y Rerank (función 2, que agrupa los puntos de color verde). Estas funciones discriminantes permitieron clasificar correctamente el 100% de las observaciones bajo las condiciones de nuestro estudio.

En este sentido, estos resultados preliminares sugieren que la eficacia de las funciones de puntuación, para una correcta clasificación de los acoplamientos obtenidos bajo las condiciones de muestreo de este estudio, y en concreto para aquellos ligandos solubles con átomos o grupos químicos que puedan establecer enlaces tanto polares como no polares acoplados a cavidades hidrofóbicas, se puede ordenar de la siguiente manera: [Rerank > MolDock > PLANTS > AutoDock Vina > DockT]. Esta categorización es producto de las predicciones de los modelos ACP, ADC y del análisis de los coeficientes *Rp* discutidos en este estudio, y son similares a los reportados por otros autores cuyos análisis de correlación entre poses experimentales y teóricas ordenan las funciones de puntuación de la siguiente manera: PLANTS > MolDock > AutoDock Vina según *Pearson*, y MolDock > PLANTS > AutoDock Vina según *Spearman* (Xu *y col.,* 2015). Resultados consistentes con la posición relativa obtenida en nuestro estudio para MolDock en relación a AutoDock Vina.

Estos resultados son relevantes debido a que se ha reportado sobre la importancia del efecto de la hidrofobicidad del bolsillo de unión, y se ha descrito el rendimiento de algoritmos híbridos empíricos como Glide que son mejores para los bolsillos de unión hidrofóbicos o hidrófilos que para los bolsillos con hidrofobicidad intermedia, mientras que otros algoritmos genéticos con funciones de puntuación basadas en campo de fuerza y PLP como Gold, tienden a funcionar mejor solo con los bolsillos hidrofóbicos. Además, se ha señalado que estos algoritmos en términos generales tienen un rendimiento relativamente mejor para ligandos hidrófobos pequeños (Chaput y Mouawad, 2017). Por lo tanto, no hay una función de puntuación o protocolo en particular que pueda recomendarse exclusivamente para proteínas o ligandos específicos, y aunque algunos programas se han sugerido por funcionar globalmente mejor que otros, como Glide y Gold (Chaput y Mouawad, 2017), curiosamente, otros autores han evaluado la precisión en la predicción del acoplamiento de MolDock y han obtenido mejores resultados que los arrojados precisamente por Glide y GOLD (Thomsen y Christensen, 2006).

Consecuentemente, debido a los más de 160 algoritmos de acoplamiento desarrollados y a las más de 109 funciones de puntuación descritas (Rawal *y col.,* 2019), y dada la diversidad bioquímica de ligandos y proteínas, nosotros proponemos con base en la evidencia y a los resultados obtenidos en este estudio, el uso del algoritmo híbrido MolDock para cribados rápidos y al Rerank para reorganizar la clasificación de los acoplamientos obtenidos cuando se trabaje con ligandos solubles como la piperina, indistintamente de la polaridad, y que estén dirigidos a cavidades hidrofóbicas como las de la RNA polimerasa viral del SARS-CoV-2, especialmente para los enfoques

computacionales en el contexto del desarrollo rápido de fármacos. También recomendamos validar la reproducibilidad de estos resultados con un número mayor de ligandos y proteínas, con la finalidad de proponer el desarrollo y aplicación de un algoritmo de reclasificación basado en características hidrofóbicas de los complejos ligando-proteína y que funcione de manera genérica acoplado a las funciones de puntación ya descritas derivadas de los algoritmos de acoplamiento, para continuar con la optimización de la discriminación de los mejores fármacos durante la investigación y desarrollo de candidatos en las etapas in silico.

Adicionalmente, para validar el impacto que tengan otros aspectos no considerados como las perturbaciones estructurales que podrían ser inducidas en la proteína por los ligandos estudiados sobre las recalificaciones obtenidas con las funciones de puntuación propuestas, nuestra investigación contempla una segunda etapa incorporando variables asociadas a la dinámica molecular (DM) de los complejos derivados, proponiendo realizar simulaciones de acoplamiento con tres propósitos: (1) estudiar la estabilidad relativa del ligando que reside en la cavidad de unión; (2) muestrear las conformaciones de mínima energía para calcular la perturbación de la estabilidad termodinámica y estructural de los complejos; y (3) analizar la distribución de cavidades y los coeficientes de deformación estructural en las conformaciones de mínima energía muestreadas. Para esto es importante modelar sistemas basados en una copia de la polimerasa viral, una copia del ligando acoplado y aproximadamente 50 iones Na+ y Cl- para simular condiciones fisiológicas. Todo el sistema tiene que ser neutralizado. Estos sistemas que proponemos deben ser sometidos a una serie de procedimientos de minimización representados por tres fases de DM: relajación, equilibrio y muestreo, como se recomienda (Wang, 2020).

Igualmente debe ser considerada la incorporación en este tipo de modelos de reclasificación de funciones de puntuación variables asociadas a la actividad biológica, tales como pIC50, previos ajustes inherentes a la incompatibilidad conocida entre las funciones de puntuación y los valores de pIC50 (Huang *y* Zou, 2010). Especialmente, porque nosotros encontramos en análisis preliminares mediante el uso del algoritmo PASS (*Prediction of Activity Spectra for Substances*) (Lagunin y col., 2018) que la posibilidad de que muchos de nuestros compuestos estudiados pertenezcan a la subclase de compuestos activos es tan alta como la del Remdesivir. Lo que corresponde con las predicciones previas en términos de logIC50 (μM) que realizamos en diversas líneas celulares mediante el uso del servidor DiPCell (Kumar y col., 2014) y que muestran como algunos de nuestros compuestos pueden presentar una actividad inhibitoria teórica más favorable que Remdesivir (resultados no mostrados). Consideraciones que, de ser incorporadas en nuestro modelo en estudios posteriores, pero ajustadas después de un análisis profundo de todas las variables involucradas a la interacción ligando-proteína podrían predecir de manera más realista el comportamiento de estas moléculas en ensayos *in vitro*, y más aún si se busca una aplicación inmediata de este tipo de compuestos frente al COVID-19.

4. CONCLUSIONES

Todos los compuestos fitoquímicos probados son capaces de establecer interacciones termodinámicamente favorables con la RNA polimerasa viral según la predicción realizada por los algoritmos probados y las funciones de puntuación consideradas. El fitoquímico capaz de establecer el acoplamiento más favorable con la proteína viral fue la piperina, superando al control Remdesivir. La mitad de los fitoquímicos evaluados presentó acoplamientos más favorables que el antiviral comercial, así como una mejor bioacumulación teórica global. Las calificaciones derivadas de las funciones de puntuación se ven afectadas por las condiciones de los acoplamientos, especialmente por la solubilidad de los ligandos, la relación total de hidrofobicidad e índices de hidropatía de las cavidades. La eficacia de las funciones de puntuación, para una correcta clasificación de los acoplamientos para ligandos solubles con átomos o grupos químicos que puedan establecer enlaces tanto polares como no polares acoplados a cavidades hidrofóbicas, se puede ordenar de la siguiente manera: Rerank > MolDock > PLANTS > AutoDock Vina > DockT. Se propone el uso del algoritmo MolDock para cribados rápidos y al Rerank para reorganizar la clasificación de los acoplamientos cuando se trabaje con ligandos solubles, indistintamente de la polaridad, y que estén dirigidos a cavidades hidrofóbicas de la RNA polimerasa viral del SARS-CoV-2. Se necesita validar la reproducibilidad de estos resultados con un número mayor de ligandos y proteínas, así como incorporar nuevas variables asociadas a la dinámica molecular y actividad biológica para proponer el desarrollo y aplicación de un algoritmo de reclasificación basado en características hidrofóbicas de los complejos ligando-proteína y que funcione de manera genérica acoplado a las funciones de puntación ya descritas derivadas de los algoritmos de acoplamiento, para continuar con la optimización de la discriminación de los mejores fármacos durante la investigación y desarrollo de candidatos en las etapas in silico frente al COVID-19.

AGRADECIMIENTOS

JLP agradece al Vice-Rectorado de Investigación, Innovación y Vinculación de la Escuela Politécnica Nacional, Ecuador.

REFERENCIAS

Adem, S.; Eyupoglu, V.; Sarfraz, I.; Rasul, A.; Ali, M. (2020). Identification of Potent COVID-19 Main Protease (Mpro) Inhibitors from Natural Polyphenols: An in Silico Strategy Unveils a Hope against CORONA. *Preprints*, 2020030333. doi: 10.20944/preprints202003.0333.v1

Agostini, M.; Andres, E.; Sims, A.; Graham, R.; Sheahan, T.; Lu, X.; Smith, E.; Case, J.; Feng, J.; Jordan, R.;

Ray, A.; Cihlar, T.; Siege, l.; Mackman, R.; Clarke, M.; Baric, R.; Denison, M. (2018). Coronavirus susceptibility to the antiviral remdesivir (GS-5734) is mediated by the viral polymerase and the proofreading exoribonuclease. *mBio*, 9(2), 1–15. DOI: 10.1128/mBio.00221-18

Alamri, M.; ul Qamar, M.; Alqahtani, S. (2020). Pharmacoinformatics and molecular dynamic simulation studies reveal potential inhibitors of SARS-CoV-2 main protease 3CLpro. *Preprints*, 2020020308. DOI: 10.1080/07391102.2020.1782768

Al-Tawfiq, J.; Al-Homoud, A.; Memish, Z. (2020). Remdesivir as a possible therapeutic option for the COVID-19. *Travel medicine and infectious disease*. PMID: 32145386, 34:101615. doi:10.1016/j.tmaid.2020.101615

Antunes, D.; Moll, M.; Devaurs, D.; Jackson, K.; Lizée, G.; Kavraki, L. (2017). DINC 2.0: A new protein–peptide docking webserver using an incremental approach. *Cancer research*, 77(21), e55-e57. DOI: 10.1158/0008-5472.CAN-17-0511

Bhal, S. (2007). LogP—Making sense of the value. *Advanced chemistry development*, Toronto, ON, Canada, 1-4.

Bonfim, C.; Monteleoni, L.; Calmon, M.; Cândido, N.; Provazzi, P.; Lino, V.; Melli, P. (2020). Antiviral activity of curcumin-nanoemulsion associated with photodynamic therapy in vulvar cell lines transducing different variants of HPV-16. *Artificial Cells, Nanomedicine, and Biotechnology*, 48(1), 515-524. doi:10.1080/21691401.2020.1725023

Chandani, S.; Thorat, P.; Nanda, R.; Chitlange, S. (2019). Docking of phytoconstituents of Cynodon dactylon on NS2B NS3 protease domain of dengue virus. *Research Journal of Pharmacy and Technology*, 12(12), 5865-5870. DOI: 10.5958/0974-360X.2019.01017.5

Chandel, V.; Raj, S.; Rathi, B.; Kumar, D. (2020). In Silico Identification of Potent COVID-19 Main Protease Inhibitors from FDA Approved Antiviral Compounds and Active Phytochemicals through Molecular Docking: A Drug Repurposing Approach. *Preprints*, 2020030349. doi: 10.20944/preprints202003.0349.v1

Chang, Y.; Tung, Y.; Lee, K.; Chen, T.; Hsiao, Y.; Chang, H; and Shih, S. (2020). Potential therapeutic agents for COVID-19 based on the analysis of protease and RNA polymerase docking. *Preprints*, 2020020242. doi: 10.20944/preprints202002.0242.v1

Chaput, L.; Mouawad, L. (2017). Efficient conformational sampling and weak scoring in docking programs? Strategy of the wisdom of crowds. *Journal of cheminformatics*, 9(1): 1-37. https://doi.org/10.1186/s13321-017-0227-x

Cheminformatics, M. (2020). Molinspiration. Web-enabled software for large-scale calculation of molecular properties and database searches, *Free online molecular descriptor calculations*, https://www.molinspiration.com/cgi-bin/properties.

Contini, A. (2020). Virtual screening of an FDA approved drugs database on two COVID-19 coronavirus proteins. *ChemRxiv*, 10.26434/chemrxiv.11847381.v1.

Da Silveira, N.; Pereira, F.; Elias, T.; Henrique, T. (2019). Web Services for Molecular Docking Simulations. In Docking Screens for Drug Discovery (pp. 221-229). *Humana*, New York, NY. DOI: 10.1007/978-1-4939-9752-7_14

Daina, A.; Michielin, O.; Zoete, V. (2017). SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific reports*, 7, 42717. https://doi.org/10.1038/srep42717

Dos Santos, K.; Guedes, I.; Karl, A.; Dardenne, L. (2020). Highly Flexible Ligand Docking: Benchmarking of the DockThor Program on the LEADS-PEP Protein-peptide Dataset. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 60(2), 667-683. https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00905

Elfiky, A. (2020a). Ribavirin, Remdesivir, Sofosbuvir, Galidesivir, and Tenofovir against SARS-CoV-2 RNA dependent RNA polymerase (RdRp): A molecular docking study. *Life sciences*, PMID: 32222463, 253:117592. doi:10.1016/j.lfs.2020.117592

Elfiky, A. A. (2020b). SARS-CoV-2 RNA dependent RNA polymerase (RdRp) targeting: An in silico perspective. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 1-9. Advance online publication. https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1761882

Gentile, D.; Patamia, V.; Scala, A.; Sciortino, M.T.; Piperno, A.; Rescifina, A. (2020). Inhibitors of SARS-CoV-2 Main Protease from a Library of Marine Natural Products: A Virtual Screening and Molecular Modeling Study. *Preprints*, 2020030372.

Ghose, A.; Viswanadhan, V.; Wendoloski, J. (1999). A knowledge-based approach in designing combinatorial or medicinal chemistry libraries for drug discovery. 1. A qualitative and quantitative characterization of known drug databases. *J. Comb. Chem.*, 1(1), 55-68. https://doi.org/10.1021/cc9800071

Gonzalez-Paz, L.; Lossada, C.; Moncayo, L.; Romero, F.; Paz, J.; Vera-Villalobos, J.; Pérez, A.; San-Blas, E.;

Alvarado, Y. (2020). Theoretical Molecular Docking Study of the Structural Disruption of the Viral 3CL-Protease of COVID19 Induced by Binding of Capsaicin, Piperine and Curcumin Part 1: A Comparative Study with Chloroquine and Hydrochloroquine Two Antimalaric Drugs, *Preprint* (Version 1) available at Research Square, 10.21203/rs.3.rs-21206/v1.

Gordon, C.; Tchesnokov, E.; Feng, J.; Porter, D.; Götte, M. (2020). The antiviral compound remdesivir potently inhibits RNA-dependent RNA polymerase from Middle East respiratory syndrome coronavirus. *Journal of Biological Chemistry*, 295(15), 4773-4779. https://doi.org/10.1074/jbc.AC120.013056

Grein, J.; Ohmagari, N.; Shin, D.; Diaz, G.; Asperges, E.; Castagna, A.; Feldt, T.; Green, G.; Green, M.; Lescure, F.; Nicastri, E.; Oda, R.; Yo, K.; Quiros-Roldan, E.; Studemeister, A.; Redinski, J.; Ahmed, S.; Bernett, J.; Chelliah, D.; Chen, D.; Chihara, S.; Cohen, S.; Cunningham, J.; D'Arminio, A.; Ismail, S.; Kato, H.; Lapadula, G.; L'Her, E.; Maeno, T.; Majumder, S.; Massari, M.; Mora-Rillo, M.; Mutoh, Y.; Nguyen, D.; Verweij, E.; Zoufaly, A.; Osinusi, A.; DeZure, A.; Zhao, Y.; Zhong, L.; Chokkalingam, A.; Elboudwarej, E.; Telep, L.; Timbs, L.; Henne, I.; Sellers, S.; Cao, H.; Tan, S.; Winterbourne, L.; Desai, P.; Mera, R.; Gaggar, A.; Myers, R.; Brainard, D.; Childs, R.; Flanigan, T. (2020). Compassionate use of remdesivir for patients with severe Covid-19. *New England Journal of Medicine*, NEJMoa2007016, 1-10. DOI: 10.1056/NEJMoa2007016

Hendaus, M. (2020). Remdesivir in the treatment of Coronavirus Disease 2019 (COVID-19): A simplified summary. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, (just-accepted), 1-10. DOI: 10.1080/07391102.2020.1767691

Huang, S.; Zou, X. (2010). Advances and challenges in protein-ligand docking. *International journal of molecular sciences*, 11(8), 3016–3034. https://doi.org/10.3390/ijms11083016

Huynh, T.; Luan, B. (2020). in silico Exploration of Molecular Mechanism and Potency Ranking of Clinically Oriented Drugs for Inhibiting SARS-CoV-2's Main Protease. *ChemRxiv*, 10.26434/chemrxiv.12045549.v1.

Jiang, F.; Deng, L.; Zhang, L.; Cai, Y.; Cheung, C; and Xia, Z. (2020). Review of the clinical characteristics of coronavirus disease 2019 (COVID-19). *Journal of General Internal Medicine*, PMCID: PMC7088708, 35(5), 1545–1549. https://doi.org/10.1007/s11606-020-05762-w

Jordan, P.; Liu, C., Raynaud, P., Lo, M.; Spiropoulou, C.; Symons, J.; Beigelman, L.; Deval, J. (2018). Initiation, extension, and termination of RNA synthesis by a paramyxovirus polymerase. *PLoS Pathogens*, 14(2), e1006889. https://doi.org/10.1371/journal.ppat.1006889

Joshi, R., Giri, A.; Kulkarni, M.; Verma, S., Chaudhary, D., Deshmukh, N., Chugh, A. (2020). Rationale Based Selection and Prioritization of Antiviral Drugs for COVID-19 Management. *ChemRxiv*, 10.26434/chemrxiv.12429629.v1.

Khaerunnisa, S.; Kurniawan, H.; Awaluddin, R.; Suhartati, S.; Soetjipto, S. (2020). Potential Inhibitor of COVID-19 Main Protease (Mpro) From Several Medicinal Plant Compounds by Molecular Docking Study. *Preprints*, 2020030226. doi: 10.20944/preprints202003.0226.v1

Kumar, R.; Chaudhary, K.; Singla, D.; Gautam, A.; Raghava, G. (2014). Designing of promiscuous inhibitors against pancreatic cancer cell lines. *Scientific reports*, 4, 4668. https://doi.org/10.1038/srep04668

Lagunin, A.; Dubovskaja, V.; Rudik, A.; Pogodin, P.; Druzhilovskiy, D.; Gloriozova, T.; Filimonov, D.; Sastry, G.; Poroikov, V. (2018). CLC-Pred: a freely available web-service for in silico prediction of human cell line cytotoxicity for drug-like compounds. *PLOS One*, 13 (1), e0191838. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0191838

Leo, A.; Hansch, C.; Elkins, D. (1971). Partition coefficients and their uses. *Chem. Rev*. 71 (6): 525-616. https://doi.org/10.1021/cr60274a001

Mohammad, F.; Moshin, A.; Zaw, A.; Tanveer, A.; Waseem, A. (2020). Identification of Dietary Molecules as Therapeutic Agents to Combat SARS-COV-2 using Molecular Docking Studies, *Preprint* (Version 1) available at research Square, http://doi.org/10.21203/rs.3.rs-19560/v1

Naeem, S.; Hylands, P.; Barlow, D. (2013). Docking studies of chlorogenic acid against aldose redutcase by using molgro virtual docker software. *Journal of Applied Pharmaceutical Science*, 3(1), 13-20. https://doi.org/10.7324/JAPS.2013.30104

Pagadala, N.; Syed, K.; Tuszynski, J. (2017). Software for molecular docking: a review. *Biophysical reviews*, 9(2), 91-102. doi:10.1007/s12551-016-0247-1

Pecina, A.; Meier, R.; Fanfrlík, J.; Lepšík, M.; Řezáč, J.; Hobza, P.; Baldauf, C. (2016). The SQM/COSMO filter: reliable native pose identification based on the quantum-mechanical description of protein–ligand interactions and implicit COSMO solvation. *Chemical communications*, 52(16), 3312-3315. https://doi.org/10.1039/C5CC09499B

Qamar, M.; Alqahtani, S.; Alamri, M. and Chen, L. (2020). Structural basis of SARS-CoV-2 3CLpro and anti-COVID-19 drug discovery from medicinal PLANTS. *Preprints*, 2020030455. https://doi.org/10.1016/j.jpha.2020.03.009

Rawal, K.; Khurana, T.; Sharma, H.; Verma, S.; Gupta, S.; Kubba, C.; Strych, U.; Hotez, P.; Bottazzi, M. (2019). An extensive survey of molecular docking tools and their applications using text mining and deep curation strategies. *PeerJ Preprints*, 7, e27538v1. https://doi.org/10.7287/peerj.preprints.27538v1

Reena Roy, D.; Kandagalla, S.; Krishnappa, M. (2020). Exploring the ethnomycological potential of Lentinus squarrosulus Mont. through GC–MS and chemoinformatics tools. *Mycology*, 11(1), 78-89. https://doi.org/10.1080/21501203.2019.1707724

Sekhar, T. (2020). Virtual Screening based prediction of potential drugs for COVID-19. *Preprints*, 2020020418. doi: 10.20944/preprints202002.0418.v2

Sharma, A.D.; Kaur, I. (2020). Eucalyptol (1,8 cineole) from Eucalyptus Essential Oil a Potential Inhibitor of COVID 19 Corona Virus Infection by Molecular Docking Studies. *Preprints* 2020030455. doi: 10.20944/preprints202003.0455.v1

Siegel, D.; Hui, H.; Doerffler, E.; Clarke, M.; Chun, K.; Zhang, L.; Neville, S.; Carra, E.; Lew, W.; Ross, B.; Wang, Q.; Wolfe, L.; Jordan, R.; Soloveva, V.; Knox, J.; Perry, J.; Perron, M.; Stray, K.; Barauskas, O., … Mackman, R. (2017). Discovery and synthesis of a phosphoramidate prodrug of a pyrrolo[2,1-f][triazin-4-amino] adenine C-nucleoside (GS-5734) for the treatment of Ebola and emerging viruses. *Journal of Medicinal Chemistry*, 60(5), 1648–1661. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.6b01594.

Sun, N.; Wong, W.; Guo, J. (2020b). Prediction of Potential 3CLpro-Targeting Anti-SARS-CoV-2 Compounds from Chinese Medicine. *Preprints*, 2020030247. doi: 10.20944/preprints202003.0247.v1

Sun, Y.; Yang, A. W.; and Lenon, G. (2020a). Phytochemistry, ethnopharmacology, pharmacokinetics and toxicology of Cnidium monnieri (L.) Cusson. *International Journal of Molecular Sciences*, PMID: 32028721, 21(3), 1006. doi:10.3390/ijms21031006

Tang, K.; Zhang, X.; Guo, Y. (2020). Identification of the dietary supplement capsaicin as an inhibitor of Lassa virus entry. *Acta Pharmaceutica Sinica B*. In Press, Corrected Proof, 10.1016/j.apsb.2020.02.014.

Tchesnokov, E.; Feng, J.; Porter, D.; Gotte, M. (2019). Mechanism of inhibition of Ebola virus RNA-dependent RNA polymerase by remdesivir. *Viruses*, 11(4), 326. https://doi.org/10.3390/v11040326

Thomsen, R.; Christensen, M. (2006). MolDock: a new technique for high-accuracy molecular docking. *Journal of Medicinal Chemistry*, 49(11), 3315-3321. https://doi.org/10.1021/jm051197e

Torktaz, I.; Mohamadhashem, F.; Esmaeili, A.; Behjati, M.; Sharifzadeh, S. (2013). Virtual screening and pharmacophore design for a novel theoretical inhibitor of macrophage stimulating factor as a metastatic agent. *BioImpacts*: BI, 3(3), 141-144. https://doi.org/10.5681/bi.2013.026

Tripathi, V.; Mishra, A.; Pathak, Y. (2020). Natural compounds as potential inhibitors of novel coronavirus (COVID-19) main protease: An in silico study. *Preprint*, https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-22839/v1

Vardhan, S.; Sahoo, S. (2020). Searching inhibitors for three important proteins of COVID-19 through molecular docking studies. *arXiv Preprint*, 2004.08095.

Velraj, M.; Chand, P. (2019). Molecular docking approach of potent natural inhibitors against 3D4Z, 4TRO and 5ACS receptors for anti-tubercular activity. *International Journal of Research in Pharmaceutical Sciences*, 10(1), 303-312. DOI: 10.26452/ijrps.v10i1.1824

Wang, Y.; Zhang, D.; Du, G.; Du, R.; Zhao, J.; Jin, Y.; Fu, S.; Gao, L.; Cheng, Z.; Lu, Q.; Hu, Y.; Luo, G.; Wang, K.; Lu, Y.; Li, H.; Wang, S.; Ruan, S.; Yang, C.; Wang, C. (2020). Remdesivir in adults with severe COVID-19: a randomised, double-blind, placebo-controlled, multicentre trial. *The Lancet*. 395(10236), 1569-1578. https://doi.org/10.1016/S0140-6736(20)31022-9

World Health Organization (WHO) (2020). *Coronavirus disease 2019 (COVID-19): situation report*, 112.

Xu, X.; Chen, P.; Wang, J.; Feng, J.; Zhou, H.; Li, X.; Hao, P. (2020). Evolution of the novel coronavirus from the ongoing Wuhan outbreak and modeling of its spike protein for risk of human transmission. *Sci. China Life Sci.*, 63(3), 457-460. https://doi.org/10.1007/s11427-020-1637-5

Xu, W.; Lucke, A.; Fairlie, D. (2015). Comparing sixteen scoring functions for predicting biological activities of ligands for protein targets. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, PMID: 25682361, 57, 76-88. https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2015.01.009

Yu, R., Chen, L., Lan, R., Shen, R., Li, P. (2020). Computational screening of antagonist against the SARS-CoV-2 (COVID-19) coronavirus by molecular docking. *International Journal of*

Antimicrobial Agents, 106012. https://doi.org/10.1016/j.ijantimicag.2020.106012

Wang, J. (2020). Fast Identification of Possible Drug Treatment of Coronavirus Disease-19 (COVID-19) through Computational Drug Repurposing Study. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 60 (6), 3277-3286. DOI: 10.1021/acs.jcim.0c00179

Zhang, J.; Shen, X.; Yan, Y.; Yan, W.; Cheng, Y. (2020). Discovery of anti-SARS-CoV-2 agents from commercially available flavor via docking screening. *OSF Preprints*, 10.31219/osf.io/vjch2.

Zoete, V.; Daina, A.; Bovigny, C.; Michielin, O. (2016). SwissSimilarity: A Web Tool for Low to Ultra High Throughput Ligand-Based Virtual Screening., *J. Chem. Inf. Model.*, 56(8), 1399-1404. https://doi.org/10.1021/acs.jcim.6b00174

BIOGRAFÍAS

Lenin A. González-Paz. Licenciado en Biología (2013) egresado de la Facultad Experimental de Ciencias (FEC) en La Universidad del Zulia (LUZ). Magister Scientiarum en Microbiología (2017) egresado de la FEC-LUZ. Auxiliar de Farmacia adscrito al Servicio Autónomo de Contraloría Sanitaria (SACS) de Venezuela. Docente e Investigador de la UA de Biología Celular y Molecular, y del Eje Curricular de Biotecnología, Departamento de Biología de la FEC-LUZ. Adscrito al Laboratorio de Genética y Biología Molecular, FEC-LUZ. Fundador del Diplomado en I+D de Biofármacos, FEC-LUZ, y de Farmacogenómica, FEC-LUZ. Líneas de Investigación: Factores Genético-Moleculares de Patogenicidad y Virulencia Microbiana; I+D de Biofármacos; y Bioinformática Genómica. ORCID: 0000-0003-0023-7342

José Luis Paz. Licenciado en Química (1983), M.Sc en Química (1985) y Doctorado en Química (Universidad Central de Venezuela, 1988). Postdoctorado en Optica Cuántica UNAM. Profesor Jubilado Emérito (2014)-de la Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela. Individuo de Número de la Academia de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales, Venezuela (2009). Investigador Senior Prometeo (2014-2017) Ecuador. Línea de investigación en Óptica No lineal y Óptica Cuántica. Docente a tiempo completo EPN. ORCID: 0000-0002-6177-7919. https://www.researchgate.net/profile/Jose_Paz3

Joan R. Vera Villalobos. Doctor en Química, Facultad Experimental de Ciencias, Universidad del Zulia, Venezuela. Profesional Asociado a la Investigación y Posdoctorante del Laboratorio de Caracterización Molecular y Biomolecular, Centro de Investigaciones y Tecnologías de Materiales del Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, Venezuela. Profesor de la Facultad de Ciencias de la Salud de la UTM-Ecuador. Profesor de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas. Director del Laboratorio de Análisis Químico Instrumental. Investigador del Laboratorio de Síntesis y Caracterización Química. ESPOL-Ecuador. Sus intereses se centran en el estudio biofisicoquímico de los mecanismos de interacción proteína-ligando, a través de aplicaciones espectroscópicas y modelaje molecular. ORCID ID: 0000-0002-7782-9664

Ysaias J. Alvarado. Licenciado en Química (1992) en la Universidad del Zulia, Venezuela. Doctorado en Química (1996) en el Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC) Venezuela. Profesor Titular en la Facultad Experimental de Ciencias de la Universidad del Zulia (LUZ). Fundador del Laboratorio de Electrónica Molecular en LUZ. Miembro fundador del Doctorado en Química en LUZ. Investigador Asociado Titular del Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC). Fundador del Laboratorio de Caracterización Molecular y Biomolecular del Centro de Investigación y Tecnología de Materiales (CITeMA) del IVIC. Jefe del CITeMA del IVIC. Química Biofísica y Fisicoquímica son su interés de investigación. ORCID: 0000-0002-2709-409X

Desarrollo de una Herramienta Informática para la Simulación de Reportes PVT en los Pozos del Oriente Ecuatoriano de la Arena U Inferior

Arteaga, Jimmy [1]; Gómez, Franklin [1]; Iza, Anabel [1,*]; Izurieta, Álvaro [2]; Jiménez, Tamia [1]; Valencia, Raúl [1]; Zurita, Kevin [1]

[1]Escuela Politécnica Nacional, Facultad de Ingeniería en Geología y Petróleos, Quito, Ecuador
[2]Halliburton, Quito, Ecuador

Resumen: En el presente artículo se describe el desarrollo de un programa que permita la estimación de propiedades de Presión, Volumen y Temperatura (PVT) en los pozos del Oriente Ecuatoriano. El prototipo cuenta con la recopilación de correlaciones más adecuadas para crudo Ecuatoriano, visualización y generación de reportes de los pozos que se encuentren perforados sujeta a información geográfica. Como primer punto, es necesario contar con expresiones matemáticas PVT calibradas a datos de laboratorio correspondientes a la arena U inferior del crudo de la región. Para esta parte, la metodología desarrollada constituye la adquisición, procesamiento y ajuste de datos de información de laboratorio, con el fin de obtener un manejo adecuado de los mismos. La aplicación desarrollada proporcionará la estimación de las propiedades PVT del petróleo más acordes a la Cuenca Oriente. En tal virtud, los resultados experimentales podrán ser utilizados en los diferentes cálculos requeridos para la producción de hidrocarburos de la industria local y para la academia permitirá ampliar las fronteras de estudio.

Palabras clave: PVT, propiedades, petróleo, prototipo, correlaciones, metodología.

Development of a Computer Tool for PVT Report Simulation in the Ecuadorian Wells for the Lower U Sand

Abstract: This article describes the development of a software that estimates the Pressure, Volume and Temperature (PVT) properties for the Lower U sandstone in Ecuador. The prototype has a collection of PVT correlations more suitable for Ecuadorian Crude Oils, visualization and report generation of the wells based on geographic information. As a first step, it is necessary to have mathematical PVT expressions calibrated to laboratory data. The software developed will provide an estimation of PVT properties to better suit to the Oriente Basin. Therefore, the experimental results can be used in different calculations required for hydrocarbon production of the local industry and for the academy it will allow to expand the study frontiers.

Keywords: PVT, properties, oil, software, correlations, methodology.

1. INTRODUCCIÓN

Las correlaciones PVT que permiten estimar las propiedades físicas del petróleo son de uso común en la industria como en la academia. La aplicación de estas expresiones matemáticas implica una ventaja y a la par una limitante debido a que los valores estimados pueden mostrar desviaciones significativas respecto del comportamiento real de la propiedad estudiada. Esto se da por que la gran mayoría fueron desarrolladas para crudos de diferentes regiones (i.e. composición química diferente a la del crudo ecuatoriano) lo que limita los rangos de aplicación de cada correlación (Farías & Merola, 2014).

De la gran variedad de correlaciones disponibles en la literatura ninguna de ellas se ajusta al comportamiento de crudo ecuatoriano, solo proporcionan valores puntuales.

En la presente investigación se modifican los coeficientes originales de las correlaciones de la literatura; las propiedades a evaluar son: relación gas-petróleo (R_s), factor volumétrico del petróleo (B_o) y compresibilidad del petróleo (C_o). Los rangos de presión que se contemplan en el análisis de estas propiedades son mayores, menores e iguales a la presión de burbuja.

*izaanabel114@gmail.com
Recibido: 30/03/2020
Aceptado: 02/06/2020
Publicado: 31/08/2020
10.33333/rp.vol46n1.02
CC BY 4.0

Adicionalmente, una potencial herramienta informática se diseña y desarrolla para recopilar las correlaciones modificadas y toda la información experimental proveniente de los reportes PVT. De la misma forma permitirá realizar la estimación de las propiedades PVT del petróleo ecuatoriano de la arena U inferior. Esta aplicación se limita a realizar estudios PVT en los campos que actualmente se encuentran en desarrollo.

2. OBJETIVOS

- Generar un conjunto de correlaciones PVT modificadas al comportamiento del crudo ecuatoriano de la arena U inferior.
- Generar una base de datos PVT comprensiva.
- Modificar las correlaciones seleccionadas mediante recursos estadísticos y/o numéricos.
- Realizar análisis de datos con el fin de mejorar las correlaciones modificadas en forma general.
- Desarrollar un programa de cómputo para el cálculo de propiedades PVT del petróleo.

3. METODOLOGÍA

3.1 Información de laboratorio (Reportes PVT)

Los reportes PVT proceden del resultado de pruebas experimentales realizadas a la muestra de fluido (petróleo) considerando tres parámetros de variación presión, volumen y temperatura los mismos que gobiernan el comportamiento volumétrico del fluido desde el reservorio hasta las instalaciones de superficie (Bujowicz, 1988). Las pruebas experimentales que permiten caracterizar el fluido del reservorio (crudo ecuatoriano) son: expansión a composición constante, liberación diferencial, prueba del separador y viscosidad. De cada una de ellas se obtiene información en sus propiedades: presión de burbuja, compresibilidad isotérmica, factor volumétrico y relación de solubilidad y viscosidad en función de la presión (Iza, 2017).

Para el desarrollo de esta investigación se considera el siguiente flujo de trabajo (Iza, 2017):

Recopilación de reportes PVT correspondientes a las muestras de fluido de los diferentes campos petroleros de la Cuenca Oriente. La información obtenida pasa por un proceso de clasificación de muestras, debido a que las muestras de fluido proceden de diferentes fuentes como fondo del pozo, cabezal de producción o separador de producción. Por otro lado, es importante mencionar que las pruebas de laboratorio utilizadas en este estudio corresponden a muestras de fondo que cumplen con las características necesarias para su uso (comportamiento físico real y ensayos de laboratorio completos para el cálculo de las propiedades PVT). Con estos antecedentes varios reportes fueron descartados y un total de 311 son utilizados para posteriores pasos.

3.2 Validación de información

Este apartado hace referencia al procesamiento y ajuste de la información, la cual consta de lo siguiente (Izurieta & Iza, 2017):

- Verificación del comportamiento de curvas de las propiedades físicas del petróleo (B_o, C_o, R_s,) con la presión.
- Información completa de pruebas de laboratorio (si se tiene todos los parámetros B_o, C_o, R_s, U_o).
- Ecuaciones de ajuste de B_o y R_s de la prueba de liberación diferencial a condiciones de separador.

Las Figuras 1-3 muestran el comportamiento establecido para cada propiedad en análisis en función de la presión.

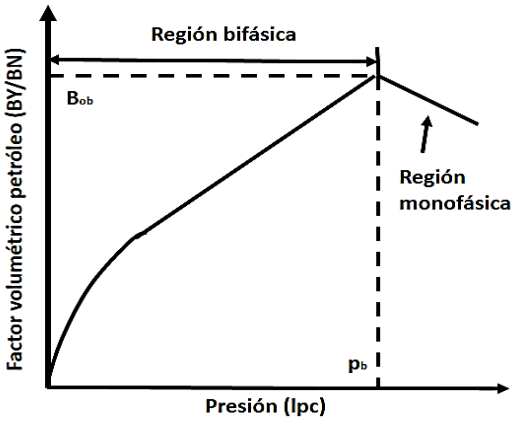


Figura 1. Comportamiento Bo vs P.

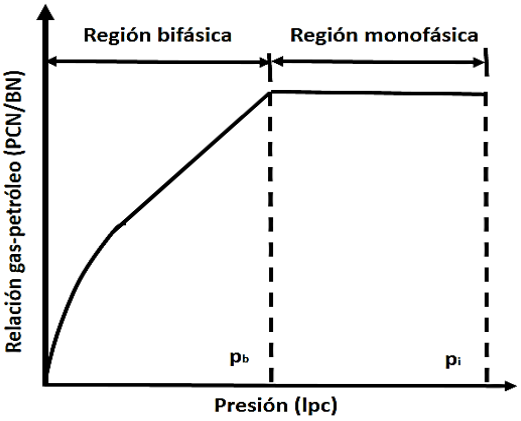


Figura 2. Comportamiento Rs vs P.

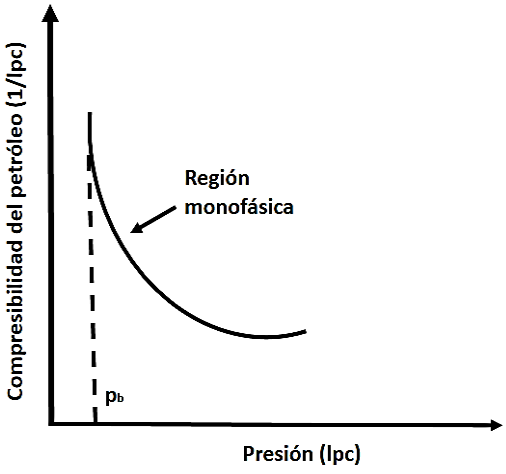


Figura 3. Comportamiento Co vs P.

3.3 Correlaciones PVT

Las expresiones de correlación fueron seleccionadas considerando los parámetros del reservorio como temperatura (T), gravedad específica del petróleo (°API), gravedad específica del gas (γ_g) y relación de solubilidad (R_s) (Izurieta e Iza, 2017), de esta manera se excluye las formulaciones complejas que presenten procedimientos iterativos.

Las correlaciones seleccionadas fueron elegidas considerando lo siguiente y se enlistan en la Tabla 1:

- Para el factor volumétrico del petróleo, modelo de Al Marhoun (1988) y para la relación gas-petróleo, modelo de Standing (1947) respectivamente, se recomiendan en la investigación de Jiménez & Zurita por tener menor error estadístico en comparación con otros modelos.

Para estas dos propiedades se consideró rangos de presión mayores, menores e iguales a la presión de burbuja.

- Para la compresibilidad de petróleo se trabajó con rangos de presión mayores e iguales a la presión de burbuja, no se contó con información experimental bajo este rango. Kartoatmodjo-Schmidt (1991) es el modelo con menor error estadístico propuesto (Jiménez & Zurita, 2019).

Tabla 1. Correlaciones PVT del petróleo.

Propiedad	Autor
Relación gas-petroleo R_s	Petrosky-Farshad 1993
Factor volumétrico del petróleo B_o	Al Marhoun 1988
Compresibilidad del petróleo C_o	Kartoatmodjo-Schmidt 1991

3.4 Modificación de correlaciones PVT

Las correlaciones seleccionadas por propiedad fueron evaluadas sin modificación y luego con modificación de sus coeficientes originales, para este último se empleó la herramienta Solver-Excel con el fin de calibrar los coeficientes a datos de laboratorio. Para este fin fue necesario realizar una macro que permita la comunicación de la herramienta Solver a cada muestra mediante la aplicación Visual Basic Application (VBA); esto permite determinar el porcentaje de error y si el mismo excede el 10% se usa la herramienta Solver hasta lograr reducir el error al rango predefinido.

Para las correlaciones modificadas por propiedad se constató los siguientes criterios (Iza, 2017):

- Gráfico valores estimados y valores experimentales y comportamiento de cada propiedad estimada con la presión.
- Porcentaje de error.
- Coeficiente de correlación (r).

3.5 Desarrollo y descripción del programa

Previo al desarrollo del prototipo se elaboró una base de datos en el gestor Microsoft Access, el cual cuenta con una estructura lógica y es la encargada de almacenar, administrar y ordenar la información de acuerdo a lo siguiente:

- Activos
- Campos
- Pozos
- Constantes de las correlaciones
- Propiedades PVT
- Usuarios
- Administradores

El programa cuenta con 4 etapas importantes:

1. Conexión a la base de datos.
2. Envío de información (Activo, Campo, Pozo, Propiedad) a través del software a la base de datos por medio de procedimientos almacenados (lenguaje de programación).
3. Lectura de la información desde la base de datos hacia la aplicación.
4. Visualización de los resultados (tablas y gráficos).

La aplicación permite la consulta de propiedades con base en los reportes existentes o de requerirse escogerá mediante coordenadas geográficas el pozo A (base de datos) más cercano al pozo B (que no cuenta con datos PVT) asociado a él un grupo de correlaciones para la estimación de las propiedades de petróleo (datos PVT del pozo B).

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 Correlaciones PVT modificadas

Las correlaciones modificadas no cambiaron en forma, los coeficientes fueron adecuados a la información experimental (PVT); es decir para cada muestra se obtuvo un grupo de coeficientes asociados a cada propiedad. Las "Ecuaciones (1-3)" están incluidas en el funcionamiento del programa.

- **Factor volumétrico**

Al Marhoun 1988

$$Bo = a + b\,T + c\left(Rs^{d}\,\gamma_g{}^{e}\,\gamma_o{}^{f}\right) + g\,(Rs^{d}\,\gamma_g{}^{e}\,\gamma_o{}^{f})^{h} \quad (1)$$

- **Relación gas-petróleo**

Standing 1947

$$Rs = \left[\gamma_g{}^{a}\left(\frac{P}{b} + c\right)10^{(d\,API^{e} - f\,T^{g})}\right]^{h} \quad (2)$$

- **Compresibilidad**

Kartoatmodjo - Schmidt 1991

$$Co = a \times Rs^{b} \times P \times T^{c} \times \gamma_g{}^{d} \quad (3)$$

4.2 Desarrollo de la aplicación

La Figura 4 muestra la interfaz del prototipo el cual contiene la base de datos descrita en el punto 3.5 de este trabajo.

Figura 4. Interfaz de la aplicación.

Una de las secciones diseñadas en esta versión del programa es el módulo PVT. En esta sección se observan los resultados como tablas, gráficos, etc., como se muestra en las Figuras 5-7.

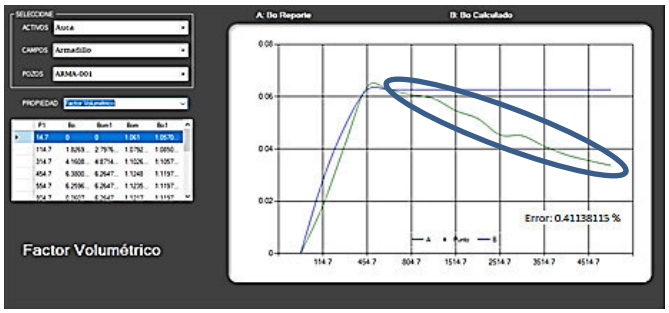


Figura 5. Resultado del Factor volumétrico del petróleo vs Presión.

Pese a que el error presentado para el factor volumétrico es menor al 1%, se evidencia que el comportamiento de esta propiedad para rangos mayores a la presión de burbuja no se ajusta a los datos experimentales por lo que buscándose, disminuye el error aplicando un multiplicador de ajuste para que coincida con los parámetros PVT. De la misma forma que se realizó en un trabajo del 2014 publicado por Austin & Sunday.

En la Figura 6, se observa el resultado desplegado para la relación gas – petróleo con un error despreciable menor al 1%, al presentarse esto se evidencia la precisión del modelo matemático.

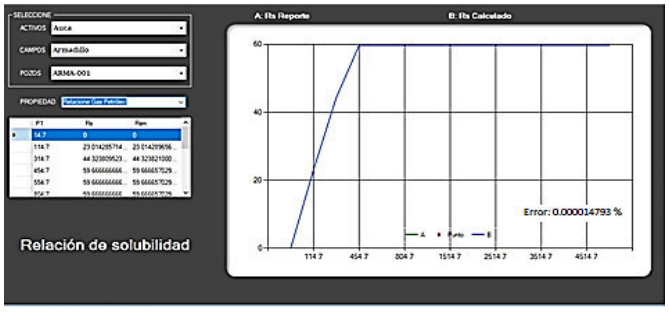


Figura 6. Resultado de la Relación de solubilidad del petróleo vs Presión.

Para la compresibilidad del petróleo se observa que los valores estimados poseen sobrestimación (a leve escala), curva azul sobrepasa la curva verde. El error presentado es aproximadamente del 3 % (Ver Figura 7).

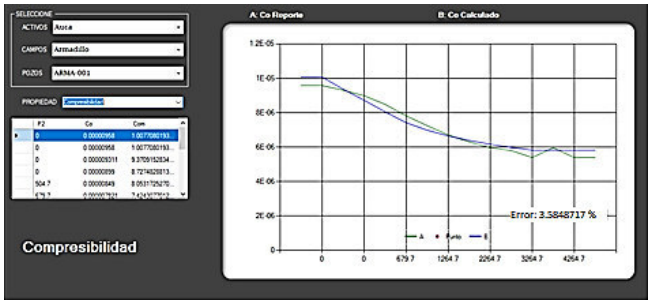


Figura 7. Resultado de la Compresibilidad de petróleo vs Presión.

Las Figura 8 muestra la interfaz de la base de datos de coordenadas geográficas diseñada con Visual Studio, la cual permite seleccionar los reportes existentes o ingresar las coordenadas del pozo en estudio Latitud y Longitud para el cálculo de las propiedades.

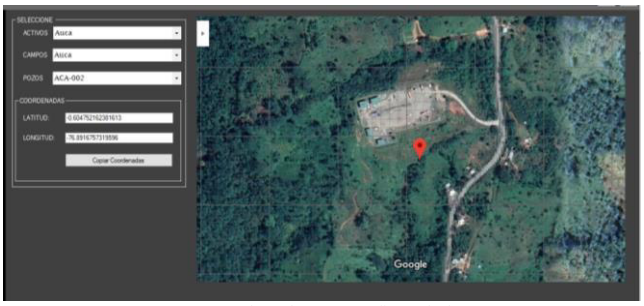


Figura 8. Coordenadas geográficas de los pozos.

La Figura 9 muestra los resultados de un pozo (nuevo o sin PVT) utilizando la base de coordenadas geográficas.

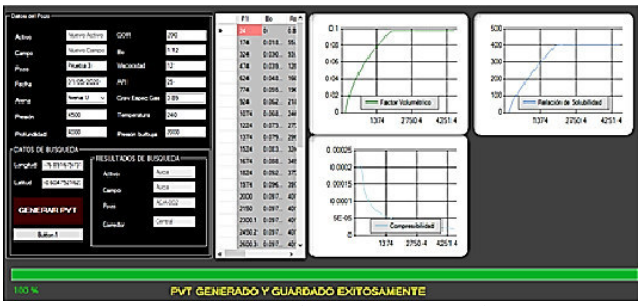


Figura 9. Reporte PVT de un pozo (nuevo o sin PVT).

En el Ecuador existen varios trabajos asociados al análisis, generación y estandarización de correlaciones PVT por campo, arena y área geográfica (como muestra véase, Murillo, J y Yépez, C (2013); Izurieta, A e Iza, A (2017); Iza, A (2017); Jiménez, T y Zurita, K (2019)), que incluyen varios criterios de investigación y herramientas de desarrollo innovadores. La diferencia de este trabajo en comparación con los mencionados anteriormente radica en el despliegue de resultados obtenidos, gráficas, tablas, reportes nuevos, así como la generación de una base de datos comprensiva.

La implementación de nuevos mecanismos como redes neuronales artificiales puede contribuir en la modificación de correlaciones tanto en el aspecto cuantitativo (error) como en el cualitativo (gráfica), recientes publicaciones han ganado popularidad en la Industria Petrolera (Muzammil y Abdulazeez, 2015).

5. CONCLUSIONES

Las correlaciones modificadas fueron desarrolladas para rangos de presión mayores, menores e iguales a la presión de burbuja a excepción de la compresibilidad de petróleo.

La mayoría de correlaciones contemplan parámetros de producción como temperatura, gravedad API, gravedad especifica del gas y presión los mismos que se presentan en los reportes PVT.

Los criterios de evaluación utilizados no solo en este estudio sino en otros trabajos (Izurieta e Iza, 2017; Iza, 2017; Jiménez y Zurita, 2019) presentan gran aceptación en cuanto a la precisión y exactitud de datos y expresiones matemáticas.

El desarrollo del prototipo marca una gran expectativa para la Academia pues será capaz de interactuar de una forma más real e ingenieril.

El cálculo de propiedades PVT es de gran importancia para las diferentes fases de producción de hidrocarburo, el uso de esta aplicación disminuye significativamente la incertidumbre en los mismos.

No siempre se tienen reportes PVT disponibles para todos los reservorios, por ello el software contribuye como una fuente de consulta y cálculo para diferentes proyectos en la Industria Petrolera.

Es importante realizar un análisis de los resultados experimentales (reportes PVT) debido a que no siempre contienen datos confiables debido a las condiciones de muestreo.

Esta es la primera versión del software por lo que es posible expandir el rango de estudio a otros reservorios y mayor cantidad de propiedades.

REFERENCIAS

Al-Marhoun, M. A. (1988). PVT Correlations for Middle East Crude Oils. *J Pet Technol*, 40(5), 650–666. https://doi.org/10.2118/13718-PA.

Al-Marhoun, M. A. (2001). Adjustment of Differential Liberation Data to Separator Conditions. *Society of Petroleum Engineers*, 6(3), 142–146. https://doi.org/10.2118/68234-MS.

Al-Marhoun, M. A. (2003). Evaluation of empirically derived PVT properties for Middle East crude oils. *J Pet Sci & Eng*, 42(2004), 209–221. https://doi.org/10.1016/j.petrol.2003.12.012.

Al-Shammasi, A. A. (1999). Bubble Point Pressure and Oil Formation Volume Factor Correlations. *Society of Petroleum Engineers*, 1–17. https://doi.org/10.2118/53185-MS.

Almehaideb, R. A. (1997). Improved PVT Correlations for UAE Crude Oils. *Society of Petroleum Engineers*, 109–120. https://doi.org/10.2118/37691-MS.

Austin, K., & Sunday, I. (2014). Globalization of Black Oil PVT Correlations. *Society of Petroleum Engineers*, 1–18. https://doi.org/10.2118/172494-MS.

Beal, C. (1946). The Viscosity of Air, Water, Natural Gas, Crude Oil and Its Associated Gases at Oil Field Temperatures and Pressures. *Trans AIME*, 165(1), 94–115. https://doi.org/10.2118/946094-G.

Beggs, H. D., & Robinson, J. R. (1975). Estimating the Viscosity of Crude Oil Systems. *J Pet Technol*, 27(9), 1140–1141. https://doi.org/10.2118/5434-PA.

Bujowicz, R. (1988). PVT Data Generation Reporting and General Uses. Petroleum Society of Canada, 1-14. https://doi.org/10.2118/88-39-66.

Dindoruk, B., & Christman, P. G. (2001). PVT Properties and Viscosity Correlations for Gulf of Mexico Oils. *Society of Petroleum Engineer s*, 1-14. https://doi.org/10.2118/71633-MS.

Dokla, M. E., & Osman, M. E. (1992). Correlation of PVT Properties for UAE Crudes (includes associated papers 26135 and 26316). *Society of Petroleum Engineers*, 7(1), 41–46. https://doi.org/10.2118/20989-PA.

Farías, L., & Merola, V. (2014). *Propiedades de los fluidos del Yacimiento*, 212-248; 253-254. Barcelona: Reverté S.A.

Frashad, F., Le Blanc, J. L., Garber, J. D., & Osorio, J. G. (1996). Empirical PVT Correlations for Colombian Crude Oils. *Society of Petroleum Engineers*, 311-320. https://doi.org/10.2118/36105-MS.

Ghetto, G. De, Paone, F., Villa, M., & S.p.A., A. (1995). Pressure-Volume-Temperature Correlations for Heavy and Extra Heavy Oils. *Society of Petroleum Engineers*. https://doi.org/10.2118/30316-MS.

Hanafy, H. ., Macary, S. M., El Nady, Y. M., Bayomi, A. A., & El Batanony, M. H. (1997). A New Approach for Predicting the Crude Oil Properties. *Society of Petroleum Engineers*. https://doi.org/10.2118/37439-MS.

Hemmati, M. N., & Kharrat, R. (2007). A Correlation Approach for Prediction of Crude-Oil PVT Properties. *Society of Petroleum Engineers*, 1–15. https://doi.org/10.2118/104543-MS.

Izurieta, A. J., Iza, A. C. (2017). The PVT Properties of the Ecuadorian Crude Oils. *Society of Petroleum Engineers*, 1–29. https://doi.org/10.2118/185483-MS.

Iza, A. (2017). Análisis y Generación de Correlaciones PVT del Petróleo y su Aplicabilidad en el Ecuador. (Tesis de grado) Quito, Ecuador: Escuela Politécnica Nacional.

Jiménez, T. y Zurita, K (2019). Generación de Correlaciones de Presión, Volumen e Temperatura para el Petróleo de los Activos Andes, Auca y Repsol. (Tesis de grado) Quito, Ecuador: Escuela Politécnica Nacional.

Jr, W. D. M., & Valko, P. P. (2002). Reservoir oil bubblepoint pressures revisited; solution gas – oil ratios and surface gas specific gravities. *J Pet Sci & Eng*, 37(2003), 153–169. https://doi.org/10.1016/S0920-4105(02)00319-4.

Kartoatmodjo, T., & Schmidt, Z. (1991). New Correlations for Crude Oil Physical Properties. *Society of Petroleum Engineers*. Obtenido de la base de datos OnePetro.

Khan, S. A., Al-Marhoun, M. A., Duffuaa, S. O., & Abu-Khamsin, S. A. (1987). Viscosity Correlations for Saudi Arabian Crude Oils. *Society of Petroleum*

Engineers, 251–258. https://doi.org/10.2118/15720-MS.

McCain Jr., W. D. (2002). Analysis of Black Oil PVT Reports Revisited. *Society of Petroleum Engineers*. https://doi.org/10.2118/77386-MS.

McCain, W., Spivey, J., & Lenn, C. (2011). *Petroleum Reservoir Fluid Property Correlations*, 35-133. Tusla: PennWell.

Murillo, J. y Yépez, C (2013). Recopilación de los Análisis P.V.T. y Análisis Convencional de Núcleos para la Generación y Estandarización de Correlaciones para los Campos del Área Auca. (Tesis de grado) Quito, Ecuador: Escuela Politécnica Nacional.

Muzammil, R & Abdulazeez, A. (2015). PVT correlations for Pakistani crude oils using artificial neural network, 217-233. Springer. Obtneido de: https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/s13202-016-0232-z.pdf

Petrosky, G. E., & Farshad, F. F. (1995). Viscosity Correlations for Gulf of Mexico Crude Oils. *Society of Petroleum Engineers*. https://doi.org/10.2118/29468-MS.

Petrosky Jr., G. E., & Farshad, F. (1993). Pressure-Volume-Temperature Correlations for Gulf of Mexico Crude Oils. *Society of Petroleum Engineers*, 1(5), 395–406. https://doi.org/10.2118/26644-MS.

Standing, M. B. (1947). A Pressure-Volume-Temperature Correlation For Mixtures Of California Oils And Gases. *Drilling and Production Practice*, API, 275–287. Obtenido de la base de datos OnePetro.

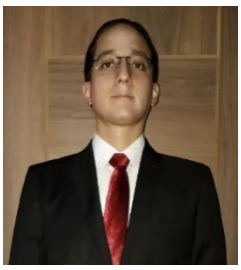
Velarde, J., Blasingame, T. . A., & McCain Jr, W. D. (1997). Correlation of Black Oil Properties at Pressures Below Bubble Point Pressure-A New Approach. *Petroleum Society*, 38(13), 10. https://doi.org/10.2118/97-93.

BIOGRAFÍAS

Jimmy Darío Arteaga Tuz. Estudiante de la Facultad de Geología y Petróleos, desde los primeros semestres mostro una gran habilidad en la programación y desarrolló una visión de cómo la programación combinado con la Ingeniería en Petróleos puede ayudar al País desarrollando software Nacional. Actualmente se encuentra en desarrollo de cuatro algoritmos de Ingeniería en Petróleos, incluido el de la presente investigación, todo esto para la implementación de software Nacional en la industria. Sus intereses actuales son: creación y posicionamiento de empresas en cualquier ámbito, finanzas personales y empresariales, administración de talento humano e inversiones en la bolsa de valores. Identificador digital ORCID: https://orcid.org/0000-0002-8116-1409.

Franklin Vinicio Gómez Soto. Ingeniero en Petróleos de la Escuela Politécnica Nacional (2010), Asistente de Cátedra en el Departamento de Petróleos de la EPN (2011-2012). Hizo la maestría en Termodinámica de Fluidos en la Universidad de Valladolid, España (UVA, 2012). Su proyecto de fin de master fue publicado en "The Journal of Supercritical Fluids'', ELSEVIER. Trabajó como Coordinador Petrolero en Triboil Gas CIA. LTDA durante el año 2013 y 2014. Se reincorporó a la Escuela Politécnica Nacional como docente titular Auxiliar desde octubre del año 2014. Es jefe del Laboratorio de Fluidos de Perforación y Petrofísica de la EPN. Se interesa en Fracturamiento Hidráulico y Reacondicionamiento de pozos (reservorios de petróleo y gas). Identificador Digital ORCID: https://orcid.org/0000-0003-4367-4972.

Anabel Cristina Iza Toapanta. Obtuvo el Diploma de Bachillerato en Ciencias especialidad Físico-Matemáticas (Unidad Educativa Liceo Naval, 2010). Se graduó de Ingeniera en Petróleos de la Escuela Politécnica Nacional (2017). Realizó prácticas pre-profesionales en diversas empresas como Sólidos y Lodos Nacionales S.A., Petroamazonas y OCP en el año 2016. Colaboró en un proyecto interno para el Departamento de Petróleos de la EPN (2018-2019). Coautora de un artículo académico publicado en la Sociedad de Ingenieros Petroleros (SPE). Participó como expositor en el evento Sinergia 2019 de la EPN y en el Next Wave Paper Contest 2019 de la SPE Sección Ecuador. Identificador digital ORCID: https://orcid.org/0000-0002-3097-1313.



Álvaro Javier Izurieta Ballesteros. Ingeniero en Petróleos, Escuela Politécnica Nacional (2010), Especialista Industria Petroquímica, Universidad Nacional General San Martin (2017) se desempeña actualmente como Asesor Técnico para Halliburton. Sus intereses son la optimización de producción mediante fracturamiento hidráulico, estimulación acida, ingeniería de producción de petróleo e ingeniería de producción. Es autor y coautor de varios estudios técnicos para la Sociedad de Ingenieros Petroleros (SPE) y Congreso Mexicano del Petróleo (CMP). Identificador digital ORCID: https://orcid.org/0000-0002-5615-5621.

Tamia Fernanda Jiménez Escobar. Obtuvo el Diploma de Bachillerato en Ciencias General (Colegio Técnico Experimental de Aviación Civil "COTAC", 2011). A partir de ese momento supo que quería estudiar una ingeniería y graduarse con excelencia lo cual lo lograría en la Escuela Politécnica Nacional al graduarse de Ingeniera en Petróleos (2019). Durante su carrera trabajo en varias empresas de Petróleo como pasante en las cuales están Halliburton y Schlumberger en el año 2017 y Petrobell en 2018. Una vez titulado se fue a perfeccionar el idioma inglés al Reino Unido. Está interesada en trabajar en una empresa internacional que se ocupe en Operaciones en el país. Identificador digital ORCID: https://orcid.org/0000-0002-1248-6402.

Raúl Armando Valencia Tapia. Ingeniero en Petróleos y Magister en Ingeniería Industrial, ambos de la Escuela Politécnica Nacional. Se desempeña como profesor Titular a tiempo completo en la carrera de Ingeniería en Petróleos desde el año 1998; además, fue profesor en la Facultad de Ciencias de la Ingeniería en la Universidad Tecnológica equinoccial. Desde hace siete años hasta la actualidad se desempeña como Jefe del Departamento de Petróleo. Sus intereses en investigación se centran el Área de Petróleos, específicamente en la Línea de Yacimientos de Hidrocarburos y Recuperación Mejorada. Identificador digital ORCID: https://orcid.org/0000-0001-8341-8864.

Kevin Fabricio Zurita Pedraza. Bachiller en la especialidad Físico-Matemático (Unidad Educativa Municipal Sucre, 2011), participó en las Olimpiadas Matemáticas realizadas en la EPN, 2010. Se gradúo de Ingeniero en Petróleos en la Escuela Politécnica Nacional en 2019, fue ayudante del Laboratorio de Fluidos de Perforación de la Facultad de Geología y Petróleos. Actualmente Docente de Matemáticas del Colegio Virtual José Moncada Sánchez. Esta interesando en libros de aportes de la ciencia a la humanidad y deportes como natación. Identificador digital ORCID: https://orcid.org/0000-0003-1446-2241.

Módulo Estático de Elasticidad del Hormigón Fabricado con Agregados de la Mina de San Roque, Imbabura, Ecuador

Sánchez Oñate, Diego M. [1,*]; Chiliquinga Cando, Jessica P. [1]; Flores Montalvo, Edwin P. [1]; Orosco Tacuri, Marcia K. [1]

[1]*Universidad Central del Ecuador, Facultad de Ingeniería, Ciencias Físicas y Matemática, Quito, Ecuador*

Resumen: El Módulo estático de elasticidad del hormigón es un parámetro que se utiliza para el cálculo y control de desplazamientos y deformaciones en una estructura de hormigón armado. El valor del módulo estático de elasticidad del hormigón depende en gran medida del módulo estático de elasticidad del agregado con el cual se fabrica el hormigón. El código ACI establece que, para calcular el módulo estático de elasticidad de un hormigón de peso normal, se debe usar como dato la resistencia a la compresión del hormigón. En el presente estudio se elaboraron probetas de hormigón armado utilizando agregados obtenidos de la mina San Roque ubicada en la provincia de Imbabura, Ecuador y se obtuvo el módulo estático de elasticidad del hormigón usando el método ASTM C 469. Los resultados obtenidos mostraron que la forma de cálculo del módulo estático de elasticidad del hormigón propuesto por el ACI no es aplicable para hormigones fabricados con agregados obtenidos de la mina San Roque.

Palabras clave: Deformaciones**,** derivas, desplazamientos, módulo de elasticidad, hormigón.

Concrete Modulus of Elasticity Based on Compressive Strength Made with Materials of San Roque Mine Located in Imbabura, Ecuador

Abstract: Static Modulus of Elasticity of Concrete is used to control the displacements and deformations in reinforced concrete structures. Static Modulus of Elasticity of Concrete depends mainly of the modulus of elasticity of the aggregate. The ACI code establishes that static modulus of elasticity of a normal weight concrete is taken by using concrete compression strength. In this study, reinforced concrete specimens were made using aggregates obtained from the San Roque mine located in the province of Imbabura, Ecuador. Modulus of elasticity was obtained using ASTM C 469 method. The results showed that the ACI method to calculate the static modulus of elasticity of concrete is not applicable for those made with aggregates obtained from the San Roque mine.

Keywords: Concrete, deformations, displacements, drift, modulus of elasticity.

1. INTRODUCCIÓN

El hormigón armado es el material más usado en la industria de la construcción en el Ecuador. Las propiedades mecánicas que adquiere el hormigón dependen en gran medida de la calidad de cada uno de sus componentes, así como del volumen que ocupan dentro de la mezcla (American Concrete Institute, 2015). El módulo estático de elasticidad del concreto es una propiedad mecánica que permite caracterizar el comportamiento elástico del concreto, el cual puede ser obtenido aplicando cargas conocidas sobre un espécimen para evaluar la deformación del material (Serrano & Pérez, 2010). La relación agua-cemento es otro factor importante, ya que a menor relación agua-cemento, mayor es la resistencia a la compresión. Según el American Concrete Institute (2015) el Módulo estático de elasticidad se puede calcular usando la resistencia a la compresión del hormigón, y su valor se ve incrementado cuando la resistencia del hormigón es mayor. La ecuación que establece el American Concrete Institute (2015) para el cálculo del módulo estático de elasticidad del hormigón es la siguiente:

$$Ec = 4\,700\sqrt{f'c} \quad (1)$$

[*]dmsanchezo@uce.edu.ec
Recibido: 02/03/2020
Aceptado: 12/06/2020
Publicado: 31/08/2020
10.33333/rp.vol46n1.03
CC BY 4.0

Donde Ec es el módulo estático de elasticidad del hormigón en MPa y f'c es la resistencia a la compresión del hormigón en MPa. Esta recomendación del American Concrete Institute (2015) ha sido replicada en la Norma Ecuatoriana de la Construcción (2015). En su capítulo NEC_SE_HM se establece que el módulo estático de elasticidad del hormigón se puede calcular mediante la siguiente expresión:

$$Ec = 4{,}7\sqrt{f'c} \qquad (2)$$

Donde Ec es el módulo estático de elasticidad del hormigón en GPa y f'c es la resistencia a la compresión del hormigón en MPa. En el Ecuador, se han realizado varios estudios para comprobar que esta ecuación es válida para el cálculo del módulo estático de elasticidad utilizando agregados locales. A continuación, se presenta un cuadro con los resultados obtenidos.

Tabla 1. Resultados de estudios realizados para determinar el módulo estático de elasticidad del hormigón con materiales de distintas minas en el Ecuador.

Procedencia del Material	f 'c obtenido	Módulo de elasticidad (MPa)		Relación
		Teórico	Experimental	Experimental / teórico
	(MPa)	ACI318-14	ASTM-C469	
Mitad del Mundo (Pichincha) (Espinoza & Martínez, 2010)	20,40	21 341,90	11 505,89	53,91%
Mitad del Mundo (Pichincha) (Espinoza & Martínez, 2010)	23,30	22 815,97	13 447,32	58,94%
Mitad del Mundo (Pichincha) (Espinoza & Martínez, 2010)	26,70	24 418,20	13 842,30	56,69%
Pifo (Pichincha) (Herrería & Villegas, 2008)	35,00	27 805,57	20 483,60	73,67%
Pifo (Pichincha) (Herrería & Villegas, 2008)	35,70	28 082,25	20 647,90	73,53%
Pifo (Pichincha) (Herrería & Villegas, 2008)	35,70	28 082,25	20 309,30	72,32%
Pifo (Pichincha) (Herrería & Villegas, 2008)	35,00	27 805,57	20 700,00	74,45%
Mina de Guayllabamba (Pichincha) (Morales, Ojeda, Rodríguez, & Rosero, 2012)	30,97	26 155,83	24 370,26	93,17%
Mina de Guayllabamba (Pichincha) (Morales, Ojeda, Rodríguez, & Rosero, 2012)	35,19	27 880,95	24 574,11	88,14%
Mina San Ramón (Cotopaxi) (Carvajal, 2013)	28,74	25 196,56	18 587,95	73,77%
Mina San Ramón (Cotopaxi) (Rivadeneira, 2013)	30,14	25 802,96	19 018,93	73,71%
Mina San Ramón (Cotopaxi) (Yancha, 2013)	31,49	26 374,50	19 232,96	72,92%
San Joaquín (Cotopaxi) (Arequipa, Coba, Garzón, & Vargas, 2013)	26,71	24 290,41	16 583,22	68,27%
San Joaquín (Cotopaxi) (Arequipa, Coba, Garzón, & Vargas, 2013)	30,18	25 820,07	18 323,13	70,96%
Mina Villacres (Tungurahua) (Ulloa, 2013)	30,50	25 956,60	19 212,73	74,02%
Mina Villacres (Tungurahua) (García, 2013)	33,03	27 011,71	20 087,08	74,36%
Mina Villacres (Tungurahua) (Anasi, 2013)	34,90	27 765,82	20 629,59	74,30%
Playa Llagchoa, Villacrés y de la Planta Industrial de Trituración de Áridos. (Tungurahua) (Sánchez, 2013)	21,00	21 538,11	19 073,56	88,56%
Playa Llagchoa, Villacrés y de la Planta Industrial de Trituración de Áridos. (Tungurahua) (Sánchez, 2013)	24,00	23 025,20	20 569,76	89,34%
Playa Llagchoa, Villacrés y de la Planta Industrial de Trituración de Áridos. (Tungurahua) (Sánchez, 2013)	28,00	24 870,06	22 465,80	90,33%

Al observar los resultados obtenidos en investigaciones previas es evidente que el módulo estático de elasticidad obtenido de forma experimental es diferente al obtenido de forma teórica usando la ecuación planteada por el American Concrete Institute y la norma ecuatoriana de la construcción.

2. IMPORTANCIA DEL ESTUDIO

Para estimar deformaciones debidas a cargas de corta duración, donde se puede admitir un comportamiento elástico sin errores importantes, es necesario definir un valor del módulo estático de elasticidad (Cuevas & Fernández, 2005). Todas las obras civiles

para su cálculo y diseño dependen del Módulo estático de elasticidad. En el Ecuador, el material de mayor consumo dentro del campo de la construcción es el hormigón (Diario El Universo, 2018), de aquí la importancia de contar con datos experimentales que comprueben que la forma de cálculo propuesta por el American Concrete Institute (2015), que permite determinar el Módulo estático de elasticidad en función de la resistencia a la compresión, es aplicable a los hormigones fabricados con materiales que se encuentran en el Ecuador. En el control de calidad del hormigón en las obras civiles se da mayor importancia al valor de la resistencia a la compresión. Sin embargo, se debe considerar que el valor del módulo estático de elasticidad real del hormigón es igual de importante. El control de este parámetro tiene por objeto asegurar que la estructura se comporte de la forma en la fue diseñada (Guaño, 2015). Como un aporte al desarrollo de la construcción en el Ecuador, se realizó este estudio utilizando materiales de la mina San Roque - Cantón Antonio Ante - Provincia de Imbabura.

3. DESCRIPCIÓN DEL ENSAYO

3.1 Propiedades de los materiales y diseño de mezclas.

Previo a realizar el diseño de mezclas, es necesario determinar las propiedades mecánicas de los agregados (American Society for Testing and Materials, 2014). Los agregados usados en la fabricación del hormigón fueron obtenidos de la mina de San Roque ubicada en la provincia de Imbabura, Ecuador. En los agregados se realizaron ensayos de abrasión, colorimetría, masa específica, capacidad de absorción, contenido de humedad, densidad aparente suelta y compactada, densidad óptima y granulometría. En el cemento se realizó ensayos de densidad absoluta y consistencia normal. Los resultados obtenidos se muestran a continuación.

Tabla 2. Propiedades mecánicas del agregado grueso obtenido de la mina se San Roque, Imbabura, Ecuador

Propiedades mecánicas de los materiales	Valor
Tamaño nominal máximo (Pulgadas)	1,50
Densidad suelta (g/cm3)	1,31
Densidad compactada (g/cm3)	1,47
Densidad saturado superficie seca (g/cm3)	2,54
Porcentaje de absorción (%)	2,64
Abrasión (%)	47,54

Tabla 3. Propiedades mecánicas del agregado fino obtenido de la mina se San Roque, Imbabura, Ecuador

Propiedades mecánicas de los materiales	Valor
Módulo de finura	3,26
Densidad suelta (g/cm3)	1,63
Densidad compactada (g/cm3)	1,82
Densidad saturado superficie seca (g/cm3)	2,61
Porcentaje de absorción	2,22

Una vez obtenidas las propiedades mecánicas de los agregados, se realizó el diseño de mezclas usando el método American Concrete Institute (2002) cuyo procedimiento se estableció por el comité 211. El diseño se lo realizó para obtener resistencias de 26MPa y 30MPa.

3.2 Descripción de las probetas

Usando el diseño de mezclas obtenido mediante el método del ACI, se construyeron 18 cilindros de hormigón cuya resistencia esperada fue de 26MPa y 18 cilindros de hormigón cuya resistencia esperada fue de 30MPa. Las dimensiones de los cilindros fueron de 150mm de diámetro y 300mm de altura. Estas dimensiones son estándar para la norma ACI y también para el Ecuador (Instituto Ecuatoriano de Normalización, 2011). Los 18 cilindros fueron ensayados para obtener la resistencia a la compresión del hormigón. Las resistencias obtenidas fueron las mismas para las cuales se diseñó la mezcla, por lo tanto, se usó este diseño de mezclas para elaborar las probetas con las cuales se obtuvo el módulo estático de elasticidad.

3.3 Módulo estático de elasticidad experimental

Para obtener el módulo estático de elasticidad experimental se utilizó el procedimiento establecido en la norma ASTM C 469 (American Society for Testing and Materials, 2014) que establece que el módulo de rigidez experimental se puede determinar mediante la siguiente expresión (American Society for Testing and Materials, 2014):

$$E = \frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon} = \frac{0{,}40\sigma r - \sigma 1}{\varepsilon x - 0{,}00005} \tag{3}$$

En donde E es el módulo estático de elasticidad del hormigón en MPa, σr es el esfuerzo máximo en MPa que soporta la probeta, $\sigma 1$ es el esfuerzo en MPa correspondiente a una deformación unitaria de 0,00005 y εx es la deformación unitaria que ocurre para el esfuerzo de $0{,}40\sigma r$.

Una vez obtenidas las resistencias de diseño requeridas, se construyeron 30 cilindros de 150mm de diámetro y 300mm de altura de resistencias de 26MPa y 30MPa. 20 de estos cilindros fueron utilizados para realizar ensayos de compresión. Se ensayaron 5 cilindros a los 7 días, 5 cilindros a los 14 días, 5 cilindros a los 21 días y 5 cilindros a los 28 días. Los 10 cilindros restantes se utilizaron para obtener el módulo estático de elasticidad. Para la resistencia de 26MPa se consideraron 9 cilindros para el cálculo del módulo estático de elasticidad. Para la resistencia de 30MPa se consideraron 8 cilindros para el cálculo del módulo estático de elasticidad. Esto debido a que tres cilindros en total se descartaron debido a que presentaban errores en su fabricación.

3.4 Ensayo

El procedimiento para obtener el módulo estático de elasticidad es el que se indica en la norma ASTM C469. Los pasos son los

siguientes: En la probeta, se colocan abrazaderas unidas mediante pivotes. Las abrazaderas se unen a la probeta usando puntos de sujeción al eje de la misma. Finalmente se coloca un deformímetro para medir la deformación que se presenta en la probeta debido a la carga de compresión. Un esquema de los componentes colocado en la probeta se muestra a continuación.

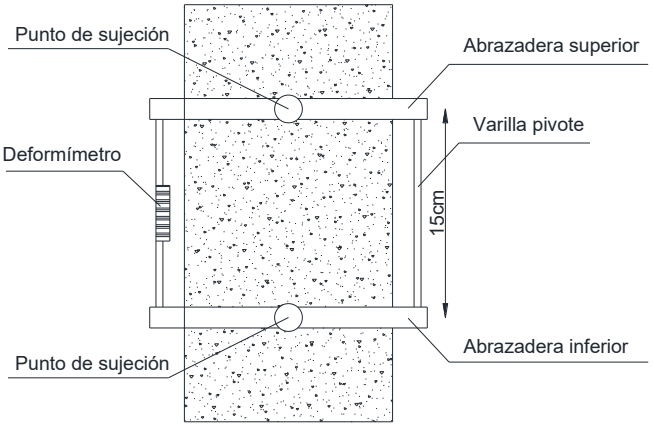


Figura 1. Esquema de colocación de equipos en la probeta para determinar el módulo estático de elasticidad del hormigón.

Los datos del ensayo fueron recopilados por dos observadores. El primero reportó la carga aplicada a la probeta, el otro observador reportó la deformación que se presentó en la probeta. El valor que se lee en el deformímetro se divide entre 2 debido al esquema con el cual se miden las deformaciones.

Se utilizaron dos ciclos de carga. El límite para el primer ciclo de carga fue de 400kN. Esto debido a que el esfuerzo correspondiente a esta carga es aproximadamente 22,60MPa. Este valor supera el 40% de esfuerzo máximo para el cual las probetas fueron diseñadas. Estos datos son suficientes para determinar el módulo estático de elasticidad del hormigón ya que el mismo se calcula usando una deformación unitaria correspondiente al 40% del esfuerzo máximo que soporta la probeta (American Society for Testing and Materials, 2014). Para el segundo ciclo de carga no existió límite, se aplicó carga a la probeta hasta que se produjo la falla a compresión.

4. RESULTADOS ESPERADOS

4.1 Resistencia a la compresión

De acuerdo con el diseño de mezclas utilizado para elaborar el primer grupo de especímenes de hormigón, la resistencia esperada es de 26MPa. Para el segundo grupo de especímenes, se utilizó un diseño de mezclas cuya Resistencia esperada es de 30MPa.

4.2 Módulo estático de elasticidad

El módulo estático de elasticidad esperado se calcula considerando la resistencia a la compresión esperada (American Concrete Institute, 2015), para ello se utiliza la ecuación (1). El valor esperado para el módulo estático de elasticidad del hormigón de 26MPa es 23965,39MPa. El valor esperado para el módulo estático de elasticidad del hormigón de 30MPa es de 25742,96MPa.

5. RESULTADOS OBTENIDOS

5.1 Resistencia a la compresión

La resistencia a la compresión promedio obtenida para el primer diseño de mezclas fue de 26,71MPa. Para el segundo diseño de mezclas, la resistencia a la compresión obtenida fue de 30,86MPa. Estos valores son muy cercanos a los cuales se esperaba obtener.

5.2 Diagrama esfuerzo - deformación unitaria de las probetas.

Con los datos recopilados por los observadores se obtuvieron los diagramas esfuerzo deformación para cada cilindro. Estos diagramas fueron usados para determinar el módulo estático de elasticidad del hormigón.

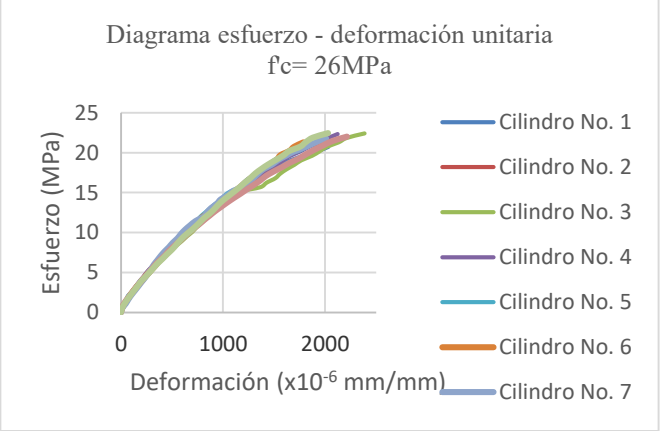


Figura 2. Diagrama esfuerzo deformación para cilindros de 26MPa.

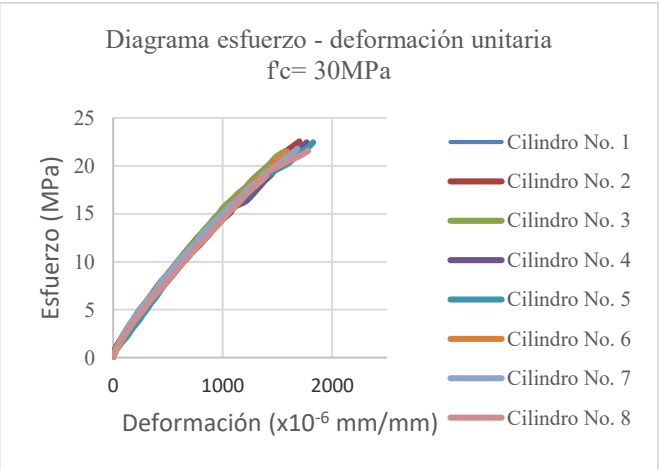


Figura 3. Diagrama esfuerzo deformación para cilindros de 30MPa.

5.3 Módulo estático de elasticidad del hormigón

El módulo estático de elasticidad se obtuvo utilizando la ecuación (3). A continuación, se muestra un diagrama de esfuerzo deformación en el cual se ha colocado la recta cuya pendiente se define como el módulo estático de elasticidad del hormigón.

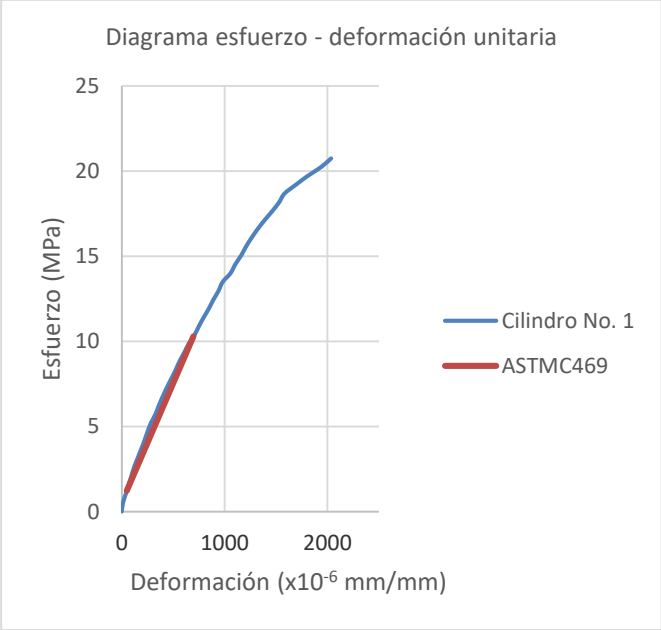


Figura 4. Diagrama esfuerzo deformación y módulo estático de elasticidad del hormigón.

El módulo estático de elasticidad obtenido experimentalmente, para una resistencia a la compresión de 26,71MPa fue de 14368,07MPa. El módulo estático de elasticidad obtenido experimentalmente para una resistencia a la compresión de 30,86 MPa fue de 14818,07MPa.

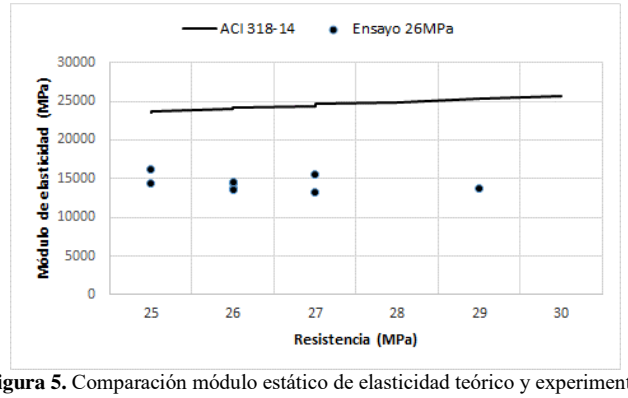


Figura 5. Comparación módulo estático de elasticidad teórico y experimental para una resistencia a la compresión de 26MPa.

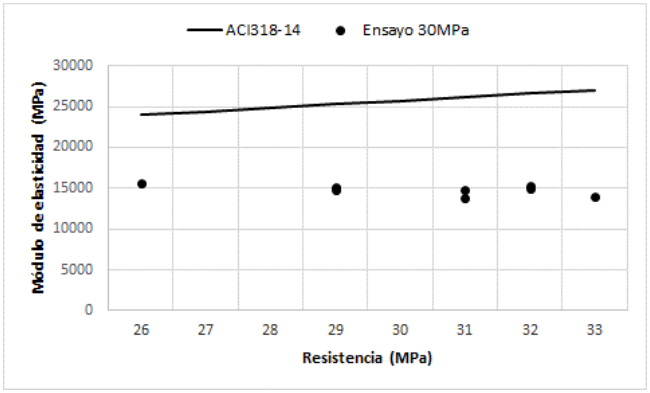


Figura 6. Comparación módulo estático de elasticidad teórico y experimental para una resistencia a la compresión de 30MPa.

6. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En cuanto a la resistencia a la compresión, los resultados esperados y los resultados experimentales tiene valores muy similares. En cuanto al módulo estático de elasticidad, los resultados teóricos y experimentales presentan valores muy diferentes. A continuación, se presenta un cuadro comparativo de los resultados obtenidos para el módulo estático de elasticidad.

Tabla 4. Resultados de resistencia a la compresión y módulo estático de elasticidad.

Resistencia a la compresión (MPa)	Módulo de elasticidad (MPa)	Módulo de elasticidad (MPa)
	ACI318-14	ASTM C469-64
	Teórico	Experimental
26,71	24290,41	14368,07
30,86	26109,34	14818,07

El módulo estático de elasticidad teórico fue calculado usando la ecuación (1). El módulo estático de elasticidad experimental se calculó usando lo establecido en la norma ASTM C469 (American Society for Testing and Materials, 2014).

Claramente se observa que los resultados teóricos y experimentales del módulo estático de elasticidad son muy diferentes.

Si estos valores se expresan en porcentaje, para el primer diseño de mezclas, el módulo estático de elasticidad obtenido experimentalmente es el 59,15% respecto al valor teórico. En el segundo diseño de mezclas, el módulo estático de elasticidad obtenido experimentalmente es del 56,75% respecto al valor teórico.

Usando estos resultados, se obtuvieron coeficientes que relacionen la resistencia del hormigón con el módulo estático de elasticidad. El coeficiente obtenido en esta investigación es de

2 780,11 para una resistencia a la compresión de 26,71MPa. Es decir, adoptando el formato de la ecuación (1), el módulo estático de elasticidad se podría calcular con la siguiente expresión:

$$Ec = 2780\sqrt{f'c} \quad (4)$$

Para la resistencia a la compresión de 30.86MPa, el coeficiente obtenido es de 2667.43. Adoptando nuevamente el formato de la ecuación (1) el módulo estático de elasticidad se podría calcular con la siguiente expresión:

$$Ec = 2667\sqrt{f'c} \quad (5)$$

En esta investigación, se propone usar la ecuación (5) en lugar de la ecuación (1) para obtener el módulo estático de elasticidad del hormigón si se fabrica utilizando como agregados los materiales obtenidos de la mina de San Roque ubicada en Imbabura, Ecuador.

Se propone la ecuación (5) y no la (4) debido a que la ecuación (5) es más conservadora.

En resumen:

En la presente investigación se realizaron dos diseños de mezclas de hormigón, se elaboraron probetas y se ensayaron a compresión. Adicionalmente, se obtuvo de forma experimental el módulo estático de elasticidad del hormigón para compararlo con el módulo estático de elasticidad teórico.

El primer diseño de mezclas dio como resultado una resistencia a la compresión de 26,71MPa.

Para este diseño de mezclas se obtuvo el módulo estático de elasticidad experimental del hormigón usando el método establecido por la ASTM C469 (American Society for Testing and Materials, 2014), el resultado obtenido fue de 14368,07MPa.

El resultado teórico del módulo estático de elasticidad para el primer diseño de mezclas, considerando que su resistencia a la compresión fue de 26,71MPa, es de 24290,4MPa.

Para este diseño, el módulo estático de elasticidad obtenido experimentalmente es el 59,15% respecto al valor teórico.

El segundo diseño de mezclas dio como resultado una resistencia a la compresión de 30,86MPa.

Para este diseño de mezclas se obtuvo el módulo estático de elasticidad experimental del hormigón usando el método establecido por la ASTM C469 (American Society for Testing and Materials, 2014), el resultado obtenido fue de 14818,07MPa.

El resultado teórico del módulo estático de elasticidad para este diseño de mezclas, considerando que su resistencia a la compresión fue de 30,86MPa, es de 26109,30MPa.

Para este diseño, el módulo estático de elasticidad obtenido experimentalmente es el 56,75% respecto al valor teórico.

7. CONCLUSIONES

Se evidencia que, en ninguno de los dos ensayos de laboratorio, los resultados del módulo estático de elasticidad del hormigón obtenidos experimentalmente son iguales a los obtenidos de forma teórica con la ecuación (1), la cual es establecida por el American Concrete Institute (2015).

Esta diferencia en los resultados se presenta debido a que el módulo de elasticidad del hormigón puede variar dependiendo de las propiedades de los agregados. Esto implica la necesidad de obtener datos experimentales de los agregados utilizados en cada región del país.

El American Concrete Institute (2015), de acuerdo con la ecuación (1) establece que el módulo estático de elasticidad se puede calcular utilizando la resistencia a la compresión del hormigón; sin embargo, en los ensayos realizados se observa que, aunque se incrementa la resistencia a la compresión, no se incrementa significativamente el módulo estático de elasticidad del hormigón.

El American Concrete Institute (2015) establece que el módulo estático de elasticidad del hormigón es sensible al módulo estático de elasticidad del agregado y a la dosificación de la mezcla de concreto y que los valores medidos del módulo estático de elasticidad pueden varían entre el 80 y el 120 por ciento de los valores calculados. Sin embargo, en este estudio, la variación fue de hasta el 56 por ciento.

De acuerdo con los resultados obtenidos, no es conveniente utilizar la ecuación (1), que establece el American Concrete Institute (2015) para calcular el módulo estático de elasticidad del hormigón en todas las regiones. Esto debido a que las características de los agregados varían en cada región.

En el código NEC-15 (Norma Ecuatoriana de la Construcción, 2015) en la sección 3.3.3 se establece la forma de cálculo del módulo estático de elasticidad para el hormigón. Esta ecuación es la misma que se utiliza en el American Concrete Institute (2015). Por lo tanto, la forma de cálculo del módulo estático de elasticidad en la Norma Ecuatoriana de la Construcción (2015) tampoco se puede aplicar para el agregado obtenido de la mina San Roque, Imbabura.

Es necesario establecer una forma de cálculo del módulo estático de elasticidad del hormigón para cada país o región debido a la diferencia en las características de los agregados que se utilizan en la fabricación del hormigón.

En esta investigación se sugiere la siguiente expresión para el cálculo del módulo estático de elasticidad del hormigón cuando se fabrique usando agregados de la mina de San Roque, Imbabura.

$$Ec = 2667\sqrt{f'c} \quad (6)$$

Es necesario realizar investigaciones del mismo tipo para las minas principales de la cuales se extraen los agregados para elaborar hormigón en el Ecuador, esto con el fin de lograr una mejor estimación en el cálculo del módulo estático de elasticidad del hormigón.

El cálculo adecuado en el módulo estático de elasticidad del hormigón permitirá que no se subestimen las deformaciones en las estructuras de hormigón armado.

La norma ecuatoriana de la construcción (2015) establece que la deriva máxima de piso en estructuras de hormigón armado debe ser de 0.02. La deriva de piso depende entre otros factores del módulo estático de elasticidad del hormigón. Sobreestimar el módulo estático de elasticidad del hormigón provocará que la deriva provocada en un movimiento sísmica sea mayor a la obtenida en el análisis estructural.

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo ha sido posible gracias al apoyo brindado por el Laboratorio de Ensayo de Materiales y Modelos de la Facultad de Ingeniería, Ciencias Físicas y Matemática de la Universidad Central del Ecuador.

REFERENCIAS

American Concrete Institute. (2002). *Standard Practice for Selecting Proportions for Normal, Heavyweight, and Mass Concrete.*

American Concrete Institute. (2015). *ACI318-14.* Farmington Hills, USA, USA: IHS.

American Society for Testing and Materials. (2014). *Standard test method for static modulus of elasticity and poisson's ratio of concrete in compression.*

Anasi, N. (2013). *Módulo estático de elasticidad del hormigón, en base a su resitencia a la compresión: fc = 28 MPa, fabricado con materiales de la Mina Villacres, ubicada en el sector de la Península Cantón Ambato en la Provincia de Tungurahua y cemento holcim.* Quito, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Central del Ecuador. Retrieved from http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/2218

Arequipa, E., Coba, W., Garzón, D., & Vargas, L. (2013). *Módulo estático de elasticidad del hormigón en base a su resistencia a la compresión simple fc= 21MPa y 30 MPa elaborado con agregados de la Mina San Joaquín Provincia del Cotopaxi y el cemento Selva Alegre.* Quito, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Central del Ecuador. Retrieved from http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/155

Carvajal, J. (2013). *Módulo estático de elasticidad del hormigón en base a su resistencia a la compresión (Fc=21MPa), fabricado con materiales de la Mina San Ramón, ubicada en la Parroquia de Mulaló en la Provincia de Cotopaxi y Cemento Chimborazo.* Quito, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Central del Ecuador. Retrieved from http://www.dspace.uce.edu.ec/bitstream/25000/1719/1/T-UCE-0011-48.pdf

Cuevas, G., & Fernández, R. (2005). *Aspectos Fundamentales del Concreto Reforzado 4ta edición.* México.

Diario El Universo. (2018, Septiembre 14). El hormigón es el más usado para construir viviendas en Ecuador. *El Universo*. Retrieved from https://www.eluniverso.com/noticias/2018/09/14/nota/6951929/hormigon-es-mas-usado-construir-viviendas-ecuador

Espinoza, D., & Martínez, M. (2010). *Investigación y Determinación del Módulo Estático de Elasticidad del Hormigón Fabricados con Materiales de la Mitad del Mundo, Ecuador.* Quito, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Central del Ecuador.

García, E. (2013). *Módulo estático de elasticidad del hormigón, en base a su resistencia a la compresión: fc = 24 MPa, fabricado con materiales de la Mina Villacres, ubicada en el sector de la Península Cantón Ambato en la Provincia de Tungurahua y cemento holcim.* Quito, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Central del Ecuador. Retrieved from http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/2219

Guaño, C. (2015). *MÓDULO DE ELASTICIDAD DEL HORMIGÓN EN BASE A SU RESISTENCIA A LA COMPRESIÓN DE 21 MPA, ELABORADO CON AGREGADOS DEL SECTOR LA PROVIDENCIA Y CEMENTO CHIMBORAZO.* Riobamba, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Nacional de

Chimborazo. Retrieved from http://dspace.unach.edu.ec/handle/51000/564

Herrería, S., & Villegas, F. (2008). *Módulos De Elasticidad Y Curvas De Esfuerzo Deformación, En Base A La Compresión Del Hormigón A 21, 28, 35 Mpa.* Sangolquí, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Escuela Politécnica del Ejército. Retrieved from https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwiDlrDeuNTnAhWEJ80KHWVzDywQFjAAegQIAxAB&url=https%3A%2F%2Frepositorio.espe.edu.ec%2Fbitstream%2F21000%2F1783%2F1%2FT-ESPE-025382.pdf&usg=AOvVaw09UJEuoOMTC3mwJDcVRo5A

Morales, D., Ojeda, F., Rodríguez, D., & Rosero, A. (2012). *Módulo estático de elasticidad del hormigón, en base a su resistencia a la compresión: fc=21 y 28 MPa, fabricado con materiales de la Mina de Guayllabamba-Pichincha y Cemento Selva Alegre.* Quito, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Central del Ecuador. Retrieved from http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/245

Norma Ecuatoriana de la Construcción. (2015). *NEC15.* Quito, Ecuaodor.

Rivadeneira, B. (2013). *Módulo estático de elasticidad del hormigón en base a su resistencia a la compresión (Fc=24MPa), fabricado con materiales de la Mina San Ramón, ubicada en la Parroquia de Mulaló en la Provincia de Cotopaxi y Cemento Chimborazo.* Quito, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Central del Ecuador. Retrieved from http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/1786

Sánchez, J. (2013). *La Resistencia A La Compresión Del Hormigón Y Su Influencia En El Módulo De Elasticidad Estático En El Cantón Ambato,Provincia De Tungurahua.* Ambato, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Técnica de Ambato. Retrieved from https://repositorio.uta.edu.ec/jspui/bitstream/123456789/6031/1/Tesis%20745%20-%20S%C3%A1nchez%20Garc%C3%ADa%20Jorge%20Luis.pdf

Serrano, M., & Pérez, D. (2010). Análisis de sensibilidad para estimar el módulo de elasticidad estático del concreto. *Concreto y cemento. Investigación y desarrollo*.

Ulloa, V. (2013). *Módulo estático de elasticidad del hormigón en base a su resistencia a la compresión fc= 21 MPa, fabricado con materiales de la Mina Villacres, ubicada en el sector de la Península, Cantón Ambato en la Provincia de Tungurahua y cemento Holcim.* Quito, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil). Universidad Central del Ecuador. Retrieved from http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/2220

Yancha, A. (2013). *Módulo estático de elasticidad del hormigón en base a su resistencia a la compresión (Fc=28MPa), fabricado con materiales de la Mina San Ramón, ubicada en la Parroquia de Mulaló en la Provincia de Cotopaxi y Cemento Chimborazo.* Quito, Ecuador: (Tesis de Ingeniería Civil).Universidad Central del Ecuador. Retrieved from http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/1657

BIOGRAFÍAS

Diego Sánchez Oñate Ingeniero Civil, Universidad Central del Ecuador. Magister en Estructuras, Escuela Politécnica Nacional. Profesor en la Universidad Central del Ecuador desde 2018. Profesor Universidad Indoamérica desde 2020. Consultor estructural para el diseño de 30 edificios públicos y privados en el Ecuador entre los que se encuentran hospitales, iglesias, centros comerciales, conjuntos habitacionales, escuelas y colegios. Consultor estructural para el reforzamiento de estructuras en la ciudad de Quito. Constructor de proyectos públicos y privados.

Jessica Chiliquinga Cando, Ingeniera Civil, graduada de en la Universidad Central del Ecuador. Ha laborado como Técnica Vial e Infraestructura Comunitaria en el Gobierno Autónomo Descentralizado Municipal de Archidona. Analista Técnica y Fiscalizadora en la Empresa Pública Ecuador Estratégico EP. Analista en Ingeniería Aeroportuaria en la Dirección General de Aviación Civil -Regional III. Coordinadora de Fiscalización en la Empresa Pública EP-EMPRODECO. Especialista de Infraestructura en la Universidad Regional Amazónica Ikiam.

Edwin Patricio Flores Montalvo, Ingeniero Civil graduado en la Universidad Central del Ecuador, Constructor de Redes de Agua Potable y Alcantarillado en obras Publicas con la EPMAPSQ y Privadas destacan la construcción de la Red de Alcantarillado Para la empresa BOPP del Ecuador en el Sector de Yaruqui, construcción del sistema de Agua potable para la Empresa Casabaca, para las bodegas de autos ubicados en Carapungo-Quito y Recientemente la construcción del Sistema de Agua Potable, Alcantantarillado y adoquinado en el Barrio 27 de Julio sector Pomasqui.

Marcia Katherine Orosco Tacuri, Ingeniero Civil, Universidad Central del Ecuador, profesional con 8 años de experiencia laboral en Diseño Hidrosanitario y de Infraestructura de Alcantarillado y Agua Potable, en proyectos públicos y privados del Ecuador aplicados a Conjuntos Habitacionales, Hospitales, Cuarteles y Universidades. Residente Hidrosanitario en Construcciones Públicas en Obras de Rehabilitación de Establecimientos Educativos, Campamentos Militares y Edificaciones.

Dual Modification of Starch Via Gamma Irradiation and Subsequent Chemical Treatment with Urea for the Development of Adhesives

Molina, Pamela [1]; Borja, Samantha [1]; Valle, Vladimir [1, *]; Mena, Lisbeth [1]; Cadena, Francisco [1]

[1]*Escuela Politécnica Nacional, Facultad de Ingeniería Química y Agroindustrial, Quito, Ecuador*

Abstract: This research evaluates achira starch modification via gamma radiation, chemical modification and the subsequent adhesives formulation. Native starch was irradiated using a linear accelerator; the mean dose rate used was 19.5 kGy/min at ambient temperature and normal pressure. The chemical modification of irradiated starch consisted of a hydrolysis process, followed by the obtention of carbamates from the hydrolyzed starch with urea, sulphuric acid and ethanol. In order to prepare adhesives; native, modified and dual-modified starches were tested in different proportions with a polyvinyl alcohol (PVA) solution. Fourier Transformed Infrared Spectroscopy (FTIR) analysis showed all modified starches had a lower intensity in the band between 1100 and 900 cm^{-1} due to the damage in the glycosidic bonds. Only single modified starches evidenced a characteristic band at 1715 cm^{-1}, which corresponds to the group carbonyl (C=O) of carbamates. The viscosity of native starch adhesives increased with the starch-PVA, unlike, single and dual-modified starch adhesives. The shear bond strength did not change significantly in the adhesives formulated either with starch modified by urea or electron beam irradiation. The combination of hydrolysis with gamma radiation caused strong damage in the starch structure. However, despite the molecular destruction of polysaccharide, the adhesion capacity for non-irradiated starches is similar in all cases.

Keywords: adhesives, modification, starch, irradiation, urea.

Doble Modificación de Almidón, Vía Irradiación Gamma y Posterior Tratamiento Químico con Urea, para el Desarrollo de Adhesivos

Resumen: Esta investigación evalúa la modificación de almidón de achira vía radiación gamma, y subsecuente modificación química para la formulación de adhesivos. El almidón nativo fue irradiado empleando un acelerador lineal con una tasa media de 19.5 kGy/min a temperatura ambiente y presión atmosférica. La modificación química de almidón irradiado consistió en un proceso de hidrólisis, seguido de la obtención de carbamatos a partir del almidón hidrolizado usando urea, ácido sulfúrico y etanol. Para la elaboración de adhesivos, se probó almidón nativo, almidón modificado y doblemente modificado en diferentes proporciones con una solución de polivinil alcohol (PVA). El análisis por Espectroscopía Infrarroja por Transformadas de Fourier (FTIR) mostró que los almidones modificados tuvieron una menor intensidad en la banda entre 1100 y 900 cm^{-1} debido al daño en los enlaces glucosídicos. Solo los almidones con modificación simple evidenciaron la banda característica a 1715 cm^{-1}, correspondiente al grupo carbonilo (C=O) del carbamato. La viscosidad de los adhesivos de almidón nativo aumentó con la relación de almidón-PVA, al contrario de los adhesivos con almidón simple y doblemente modificado. Los resultados de la resistencia al cizallamiento indicaron que la modificación del almidón con urea o con irradiación no afectó significativamente esta propiedad. La combinación de hidrólisis con el ataque del haz de electrones causó un fuerte daño en la estructura del almidón. Sin embargo, la capacidad de adhesión de los almidones no irradiados es similar en todos los casos.

Palabras clave: adhesivos, modificación, almidón, irradiación, urea.

1. INTRODUCTION

Synthetic adhesives derivate from petroleum resources are used in countless applications, due to their versatile mechanical, physical and chemical properties (Dinte and Sylvester, 2018). As a result of the excessive dependence on fossil-raw-materials and environmental concern; greater efforts have focused on the development of bio-based

*vladimir.valle@epn.edu.ec
Recibido: 28/03/2020
Aceptado: 05/06/2020
Publicado: 31/08/2020
10.33333/rp.vol46n1.04
CC BY 4.0

alternatives than traditional adhesives (Heinrich, 2019; Richter, et al., 2018).

Polyvinyl alcohol (PVA) is a thermoplastic synthetic biodegradable polymer. Its physicochemical characteristics and low cost had expanded the use of PVA in food, packaging, textile, manufacturing, paper and paint industries as well as in medical and pharmaceutical applications (Demerlis and Schoneker, 2003; Limpan, et al, 2012). Due to its nontoxic nature and water solubility; PVA becomes a potential alternative to develop bio adhesives (Maria, et al., 2008).

Over the last decades numerous bio-based adhesives have developed with a number of different renewable raw materials such as proteins, polysaccharides, polyphenols and lipids (Ferdosian, et al., 2017; Heinrich, 2019; Pizzi and Mittal, 2017). Starch, a naturally occurring hydrophilic polysaccharide, is formed by amylose and amylopectin; though, the ratio of these components vary depending on edaphoclimatic factors (Ferdosian et al., 2017; Zhang et al., 2015). Starch is currently used in adhesives, carpets, textiles, paper and water treatments as well as in medical applications as excipient, absorbent, and encapsulant (Kavlani, Sharma and Lalit, 2012; Menzel et al., 2017).

From the perspective of adhesive formulation, native starch shows some limitations in terms of bonding capacity, thermal decomposition and storage stability. Therefore, the modification of starch microstructure is highly required. Particularly, modified starches increase the solids content leading to shorter drying times and higher bond strength (Qiao et al., 2017). Furthermore, it has been reported that some modification procedures reduce retrogradation phenomena (Ashogbon, 2018).

Physical, chemical, enzymatic, and genetic modifications are commonly used for starch derivatization (Gadhave, et al., 2017; Kaur, et al., 2012). Nevertheless, chemical modification is one of the most versatile route due to starch molecule separation into small units and potential reactivity of hydroxyl groups (Bhattacharyya, et al., 2015; Kavlani et al., 2012). Furthermore, chemical derivatization has been combined with other modification methods such as extrusion and microwave to enhance starch properties (Kaur et al., 2012; Kavlani et al., 2012).

Urea derivatization, a well-known chemical modification method, has widely been used to carbamate formation (Sun, Gu, Tan, Zhang, and Huo, 2018). Moreover, starch carbamate is produced as result of the reaction of the starch with urea in solid state at high temperatures. In this context, it has been proposed that starch carbamate improve bonding capacity of adhesives (Menzel et al., 2017; Tomasik, 2003).

Additionally, several investigations have focused on starch modification through emerging technologies like high hydrostatic pressure, ultrasound, electrical pulses and radiation. These technologies are environmentally friendly and less polluting, than traditional techniques. Specifically, radiation has shown significant benefits in chemical modification of starches (Ashogbon, 2018). Low levels of γ-radiation promote the formation of free radicals which in turn generate not only solubility increase but also reduction of viscosity and swelling power (Atrous et al., 2015; Sokhey and Hanna, 1993). However, doses greater than 100 kGy have shown to damage the structure of the polysaccharide (Sokhey and Hanna, 1993).

In recent years, several starches namely, wheat, corn, rice, cassava and potato have been studied in eco-adhesives elaboration (Gadhave et al., 2017; Turunen et al., 2003). However, limited number of investigations focused on non-traditional Andean starches have been reported in specialized literature. In order to contribute with alternatives to reduce non-renewable resources dependence, the aim of this research is to study single chemical modification and dual modification (gamma irradiation and chemical modification with urea) of achira (*Canna edulis*) starch to develop bio-based adhesives.

2. METHODOLOGY

2.1. Materials

PVA (88 % hydrolyzed) was procured from Sekisui Chemical Co., Ltd. (Japan). Food grade achira starch (23,8 % amylose) was purchased from Colinas Verdes Foundation (Ecuador). All reagents (urea, sulfuric acid, ethanol, glycerol, sodium carbonate and hydrochloric acid) used were of analytical grade. Plywood veneers were obtained from Endesa-Botrosa (Ecuador) and cut into strips (100 mm x 15mm). The thickness of veneers was 3 mm.

2.2. Methods

The starch used in this research was modified in two stages:

-Electron Beam Processing

Native achira starch was dried at 40 °C for 24 h and packed up in polyethylene bags (thickness of 49 mm, area of 70 mm x 80 mm). Then it was treated with a scanned electron beam using a linear accelerator ELU-6U with 6,8 MeV mean energy and mean dose rate of 19,5 kGy/min at ambient temperature and normal pressure. The irradiation dose (50 kGy) was checked using cellulose triacetate film.

-Chemical modification of starch

For the production of starch carbamate, irradiated starch was initially hydrolyzed, following the methodology proposed by Mostafa, (2003). Starch and 1 N HCl (1:5) were mixed at 50 °C for 60 min and neutralized with 14% sodium carbonate solution. Ethanol was added to precipitate the hydrolyzed starch. The product was dried in an oven at 60°C for 2 h.

Starch carbamate was prepared according the method proposed by Menzel et al., (2017). Urea (20 % of the amount of starch), 1 mL sulfuric acid and 15 mL ethanol were blended with hydrolyzed starch. The mix was heated in an oven at 100 °C for 3 h. The product was washed in ethanol:water (70:30) and centrifuged at 1000g for 10 min.

Characterization of modified starch:

- FTIR

Infrared analysis of starch was recorded on a spectrometer Perkin Elmer, model Spectrum One. Data were collected over 16 scans with a resolution of 4 cm^{-1} in a range of wavenumber from 4000 to 650 cm^{-1}.

-Water binding capacity

Water binding capacity was measured according to Yousif, et al., (2012). A gram of starch and 15 mL distilled water were centrifuged at 1250g for 20 min. The supernatant was discarded, and the weight of water bound by the dried sample was measured.

Preparation of adhesives

Water, glycerol, ethanol, and mineral oil were stirred for three minutes at 200 rpm. PVA was added to unheated solution in ratio 1:5 under continuous agitation and the suspension was heated at 85 °C and stirred for 30 minutes at 75 rpm. The solution composition is presented in Table 1.

Table 1. Composition of PVA solution

Component	Percentage on the PVA solution (%)
PVA	20,00
Water	68,00
Glycerol	10,00
Ethanol	20,00
Mineral oil	2,00

Once the PVA solution was obtained; starch, 0,2 g of sodium benzoate and five grams of water for each gram of starch were added to the solution with continuous stirring. The final composition of each adhesive, with PVA composition constant, is described in Table 2.

Table 2. Starch-PVA adhesives composition

Sample	Starch	Composition (g starch/g PVA solution)
M1		0,06
M2	Native	0,17
M3		0,28
M4		0,06
M5	Modified	0,17
M6		0,28
M7		0,06
M8	Dual-modified	0,17
M9		0,28

Adhesive characterization

-Shear bond strength test

Shear bond strength was performed according to the methodology proposed by Kim and Netravali, (2013) using a universal testing machine Instron, model 3365. Plywood strips were sanded with a 600 grit-sandpaper. Two plywood strips were settled as shown in Figure 1; adhesive was applied on a 15 mm x 15mm area at the end of the strips with a multiple clearance square applicator (5 mils). The crosshead speed was 1mm/min.

Shear bond strength τ was calculated by equation (1), where *Pm* is the maximum load at break and *A* is the joint overlap area. Five specimens were tested for each sample.

$$\tau = \frac{P_m}{A} \quad (1)$$

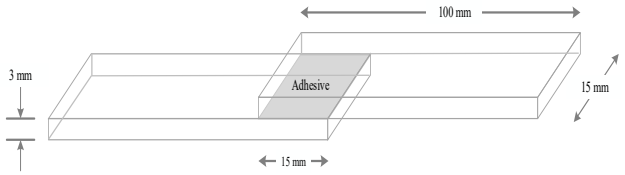


Figure 1. Schematic of the adhesive shear bond strength test- specimen

-Determination of apparent viscosity

Apparent viscosity of adhesives was determined with rotational viscometer Fungilab, model EVO Expert at 4 rpm using spindle number TL9. The viscosity was measured in triplicate at 25 ± 1 °C.

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1 FTIR evaluation

FTIR results are presented in Figure 2. On the whole, infrared spectrums showed a broad band in the range of 3600-3000 cm^{-1} corresponding to OH stretching vibration and CH stretching functional groups (Kizil, et al., 2002). A band at 3440 cm^{-1}, ascribed to NH asymmetric stretching of carbamate group, was identified in modified starch spectrum (Menzel et al., 2017). Moreover, the band at 1715 cm^{-1} corresponding to carbonyl (C=O) stretching vibrations ratified starch carbamate formation. (Siemion, et al., 2004).

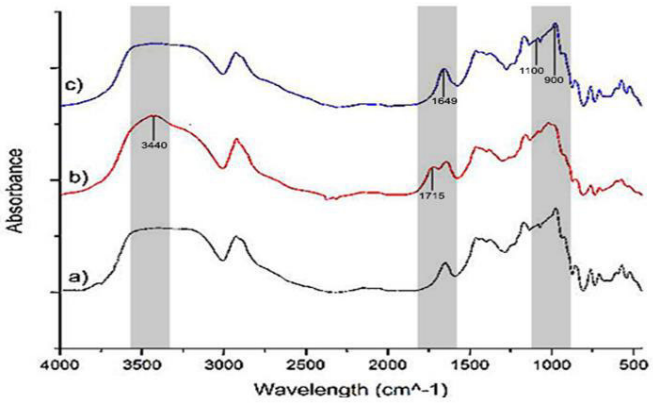


Figure 2. FTIR spectrum of a) native b) modified and c) dual-modified starches

Dual-modified starch did not present NH and C=O bands, suggesting electron beam action inhibited the formation of starch carbamate. This behavior is probably associated to the higher degradation caused by radiation in comparison with the chemical route (Wu and Song, 2006). According to Wang, et al., (2017) the absence of C=O band could be a result of high degree of deterioration of active sites in starch.

Furthermore, the variation of the band intensity located at 1649 cm^{-1} was observed. This corresponds to the water

absorbed in the amorphous starch region (Kizil et al., 2002). As a result, greater amount of water could be absorbed (Menzel et al., 2017). The destruction of the crystalline structure of the starch by the electron beam is greater than the action caused by chemical substances, since the radiation achieves a greater penetration into polysaccharide structure (Wu and Song, 2006). Otherwise, Warren, et al., (2015), reported that modification treatments decrease intensity of the bands associated with C-O and C-C stretching vibrations and C-O-H bending from glycosidic bonds.

3.2 Water binding capacity

Table 3 shows the binding capacity of native and modified starches. It is noticed that global modification treatment affected hydrogen bonds. The results suggest that high polarity of starch carbamates had an important influence in water binding capacity (Darmanin and Guittard, 2015). In addition, hydrogen bond formation occurs preferentially between starch carbamate and nearby starch molecules (Menzel et al., 2017; Wilpiszewska and Spychaj, 2007).

Table 3. Water binding capacity of native and modified starches

Sample	Water binding capacity (g/g)
Native starch	0,91 ± 0,02
Modified starch	1,26 ± 0,13
Dual-modified starch	1,18 ± 0,09

On the other hand, gamma irradiation doses contribute to the acidity and solubility in water as well as to the decrease of viscosity in starches. The enhanced solubility was produced due to the division of the chain under irradiation and consequently decrease of hydrogen bonds between chains and the formation of smaller molecules such as sugars and dextrins (Mathias, et al., 2016). Despite this, the reason for the lower value (1,18 ± 0,09) for irradiated starches, in comparison with chemically modified starches (1,26 ± 0,13), is due to the absence of C=O carbamate group.

Starch molecules experienced significant changes in their structure due to the degradation phenomenon induced by ionizing radiation processing (Liu, Ma, Xue and Shi, 2012). According to Bhat and Karim, (2009), the application of ionizing radiation generates free radicals which are able to promote molecular changes and fragmentation of starch. This property has been suggested to be one of the main mechanisms underlying physicochemical changes in starch, like reduction of viscosity and high-water solubility.

3.3 Characterization of adhesives

-Shear bond strength test

Figure 3 shows shear bond strength results. Overall, no significant differences among samples were observed. However, it is noticed that shear bond strength of dual modified starch (M7, M8 and M9) was slightly lower than the other samples. This characteristic is related not only to the number of polar functional groups (Mathias et al., 2016) but also with the molecular weight decrease due to radiation process (Kamal et al., 2007). Besides, the high polarity of C=O groups allowed to improve adhesion on lignocellulosic substrates (Mathias et al., 2016; Neuman, 2004).

Imam et al., (1999) reported that increase of starch concentration leads to a better interaction between starch and cellulose derivatives of the wood. However, this trend was not identified in the presented study which is possibly ascribed to non-controlled adhesive thickness applied in plywood (Mathias et al., 2016). Indeed, viscosity variation of tested samples leads to heterogeneous thickness applied and consequently changes in shear bond strength.

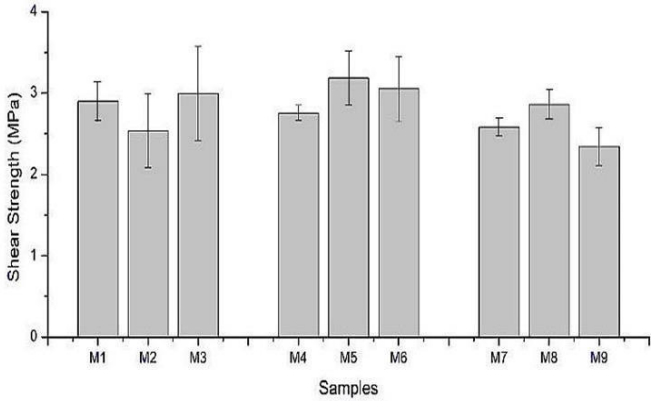


Figure 3. Shear bond strength of starch-PVA adhesives

-Apparent viscosity

Viscosity is a determining factor in adhesives production, since it allows to control its wettability on substrates. Adhesives with high viscosity cannot spread appropriately on adherent surface, and consequently have a low bond strength. On the other hand, adhesives with low viscosity flow easily, spill from the surface, and do not achieve good adhesion (Wang et al., 2017).

Results of apparent viscosity are presented in Figure 4. Noticed that the viscosity of native starch adhesives exhibits an increasing trend as a function of the increment of starch-PVA ratio.

The gelatinization process is associated to the starch concentration due to the leaching of amylose that occurs when the starch granules are heated, swell and break their structure (Menzel et al., 2017). The viscosity increases due to the greater interaction between the hydrogen bonds of the polysaccharide molecules with those of water (Lewicka, Siemion and Kurcok, 2015).

Contrary to the results of native starch samples, the viscosity of the modified and dual-modified starch adhesives decreases as the starch-PVA ratio increases. It should be noted that, in both cases, the starch used in the adhesives was subjected to a process of depolymerization by acid attack, which causes the polysaccharide chains to break (Ashogbon and Akintayo, 2014). Moreover, with the dual-modified starch, there was a previous process of depolymerization by the attack of the electron beam, which increased this degradation (Lee et al., 2006).

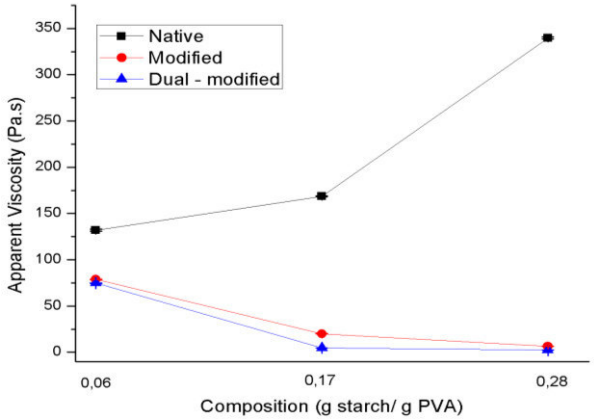


Figure 4. Apparent viscosity of starch-PVA adhesives

Kamal et al., (2007) points out that starches exposed to modifications by chain decomposition exhibit low viscosities due to the breakdown of glycosidic bonds between glucose molecules. Once these bonds are cut, they cannot be joined again with the same force and the viscosity of the modified starches is always lower than that of the native ones (Kaur et al., 2012).

4. CONCLUSIONS

This research studied two methods of starch modification and their effect on the shear bond strength and apparent viscosity. The single modified starch showed two characteristic bands at 3440 cm^{-1} and 1715 cm^{-1} corresponding to NH stretching of starch carbamate and C=O stretching vibrations, respectively. However, the presence of either NH or C=O bands were not observed in dual-modified starch. Furthermore, the combination of electron beam with the hydrolysis of chemical treatment, in dual modification, produced strong degradation in starch structure.

The viscosity of the native starch adhesives showed a direct relationship with the starch concentration. However, the opposite behaviour was observed in both modified and dual-modified starch adhesives. This particularity was attributed to the inability to form polymer networks between starch and water, due to excess degradation in the structure of the polysaccharide. Finally, the improvement in shear resistance was related to the presence C=O group of the starch carbamate. Nevertheless, similar results were observed with starches without this group in their structure.

Future prospective would be focused on testing the effect of microstructure of other lignocellulosic substrates (oak, guayacan, ebony, eucalyptus, teak, pine, etc.) on adhesion mechanism. Further characterization in terms of storage stability, and biodegradability will also be necessary.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors gratefully acknowledge the financial support provided by Escuela Politécnica Nacional, for the development of the project PIJ-16-11 *¨Desarrollo de adhesivos y encolantes formulados a partir de almidón modificado y polivinil alcohol¨*.

REFERENCES

Ashogbon, A. (2018). Current Research Addressing Physical Modification of Starch from Various Botanical Sources. *Global Nutrition and Dietetics*, *1*(1), 1–7. Retrieved from https://scientonline.org/open-access/current-research-addressing-physical-modification-of-starch-from-various-botanical-sources.pdf

Ashogbon, A., and Akintayo, E. (2014). Recent trend in the physical and chemical modification of starches from different botanical sources: A review. *Starch/Staerke*, *66*(1–2), 41–57. doi:10.1002/star.201300106

Atrous, H., Benbettaieb, N., Hosni, F., Danthine, S., Blecker, C., Attia, H., and Ghorbel, D. (2015). Effect of γ-radiation on free radicals formation, structural changes and functional properties of wheat starch. *International Journal of Biological Macromolecules*, *80*, 64–76. doi:10.1016/j.ijbiomac.2015.06.014

Bhat, R., and Karim, A. A. (2009). Impact of Radiation Processing on Starch. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, *8*, 1–20. doi:10.1111/j.1541-4337.2008.00066.x

Bhattacharyya, D., Spychaj, S., Spychaj, T., Wilpiszewska, K., and Fakirov, S. (2015). Starch-Urethane Polymers: Physicochemical Aspects, Properties, Application. *Handbook of Engineering Biopolymers*, 155–191. doi:10.3139/9783446442504.005

Darmanin, T., and Guittard, F. (2015). Highly Polar Linkers (Urea , Carbamate , Thiocarbamate) for Superoleophobic / Superhydrophobic or Oleophobic / Hydrophilic Properties. *Advanced Material Interfaces*, *40*(4), 1–7. doi:10.1002/admi.201500081

Demerlis, C. C., and Schoneker, D. R. (2003). Review of the oral toxicity of polyvinyl alcohol (PVA). *Food and Chemical Toxicology*, *41*(3), 319–326. doi:10.1016/S0278-6915(02)00258-2

Dinte, E., and Sylvester, B. (2018). Adhesives: Applications and Recent Advances. *Applied Adhesive Bonding in Science and Technology*. doi:10.5772/intechopen.71854

Ferdosian, F., Pan, Z., Gao, G., and Zhao, B. (2017). Bio-based adhesives and evaluation for wood composites application. *Polymers*, *9*(2), 10–29. doi:10.3390/polym9020070

Gadhave, R., Mahanwar, P., and Gadekar, P. (2017). Starch-Based Adhesives for Wood/Wood Composite Bonding: Review. *Open Journal of Polymer Chemistry*, *07*(02), 19–32. doi:10.4236/ojpchem.2017.72002

Heinrich, L. (2019). Future opportunities for bio-based adhesives-advantages beyond renewability. *Green Chemistry*, *21*(8), 1866–1888. doi:10.1039/c8gc03746a

Imam, S., Mao, L., Diego, S., Chen, L., and Greene, R. (1999). Wood Adhesive from Crosslinked Poly(Vinyl Alcohol) and Partially Gelatinized Starch Preparation and Properties. *Starch - Stärke*, *51*, 225–229. doi:10.1002/(SICI)1521-379X(199906)51:6<225::AID-STAR225>3.0.CO;2-F

Kamal, H., Sabry, G., Lotfy, S., Abdallah, N., Ulanski, P., Rosiak, J., and Hegazy, E. (2007). Controlling of degradation effects in radiation processing of starch. *Journal of Macromolecular Science, Part A: Pure and Applied Chemistry*, *44*(8), 865–875. doi:10.1080/10601320701407961

Kaur, B., Ariffin, F., Bhat, R., and Karim, A. (2012). Progress in starch modification in the last decade. *Food Hydrocolloids*, *26*(2), 398–404. doi:10.1016/j.foodhyd.2011.02.016

Kavlani, N., Sharma, V., and Lalit, S. (2012). Various techniques for modification of starch and applications of its derivatives. *International Research Journal of Pharmacy*, *3*(5), 25–31. doi:10.7897/2230-8407

Kim, J., and Netravali, A. (2013). Performance of protein-based wood bioadhesives and development of small-scale test method for characterizing properties of adhesive-bonded wood specimens. *Journal of Adhesion Science and Technology*, *27*(18–19), 2083–2093. doi:10.1080/01694243.2012.697658

Kizil, R., Irudayaraj, J., and Seetharaman, K. (2002). Characterization of irradiated starches by using FT-Raman and FTIR spectroscopy. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, *50*(14), 3912–3918. doi:10.1021/jf011652p

Lee, Y., Kim, S., Lim, S., Han, S., Kim, H., and Kang, I. (2006). Physicochemical Properties of Gamma Irradiated Corn Starch. *Food Science and Nutrition*, *11*(1), 146–154. doi:10.3746/jfn.2006.11.2.146

Lewicka, K., Siemion, P., and Kurcok, P. (2015). Chemical modifications of starch: Microwave effect. *International Journal of Polymer Science*, *2015*, 1–10. doi:10.1155/2015/867697

Limpan, N., Prodpran, T., Benjakul, S., and Prasarpran, S. (2012). Influences of degree of hydrolysis and molecular weight of poly(vinyl alcohol) (PVA) on properties of fish myofibrillar protein/PVA blend films. *Food Hydrocolloids*, *29*(1), 226–233. doi:10.1016/j.foodhyd.2012.03.007

Liu, T., Ma, Y., Xue, S., and Shi, J. (2012). Modifications of structure and physicochemical properties of maize starch by γ-irradiation treatments. *LWT - Food Science and Technology*, *46*(1), 156–163. doi:10.1016/j.lwt.2011.10.012

Maria, T., de Carvalho, R, Sobral, P., Habitante, A., and Solorza, J. (2008). The effect of the degree of hydrolysis of the PVA and the plasticizer concentration on the color, opacity, and thermal and mechanical properties of films based on PVA and gelatin blends. *Journal of Food Engineering*, *87*(2), 191–199. doi:10.1016/j.jfoodeng.2007.11.026

Mathias, J., Grédiac, M., y Michaud, P. (2016). Bio-based adhesives. In Volodymyr, I. (Ed.), *Biopolymers and Biotech Admixtures for Eco-Efficient Construction Materials* (pp. 369–385). Waltham, United States: Woodhead Publishing

Menzel, C., Seisenbaeva, G., Agback, P., Gällstedt, M., Boldizar, A., and Koch, K. (2017). Wheat starch carbamate: Production, molecular characterization, and film forming properties. *Carbohydrate Polymers*, *172*(2), 365–373. doi:10.1016/j.carbpol.2017.05.053

Mostafa, K. (2003). Evaluation of nitrogen containing starch and hydrolyzed starch derivatives as a size base materials for cotton yarns. *Carbohydrate Polymers*, *51*(1), 63–68. doi:10.1016/S0144-8617(02)00106-6

Neuman, R. (2004). Carbonyl Compounds : Ketones , Aldehydes , Carboxylic Acids. In Neuman, R.(Ed.), *Organic Chemist*ry (pp.3-33). California, United States: University of California Riverside.

Pizzi, A., and Mittal, K. (2017). *Handbook of Adhesive Technology* (3th. ed.). New York, United States: Taylor y Francis Group

Qiao, Z., Lv, S., Gu, J., Tan, H., Shi, J., and Zhang, Y. (2017). Influence of acid hydrolysis on properties of maize starch adhesive. *Pigment and Resin Technology*, *46*(2), 148–155. doi:10.1108/PRT-10-2015-0105

Richter, K., Grunwald, I., y Byern, J. (2018). *Bioadhesives* (1th. ed.). Bremen, Germany: Springer International Publishing AG

Siemion, P., Jabłońska, J., Kapuśniak, J., and Kozioł, J. (2004). Solid state reactions of potato starch with urea and biuret. *Journal of Polymers and the Environment*, *12*(4), 247–255. doi:10.1007/s10924-004-8152-2

Sokhey, A., and Hanna, M. (1993). Properties of Irradiated Starches, *Food Structure, 12*(4), 397–410. doi:10.1.1.820.4733

Sun, Y., Gu, J., Tan, H., Zhang, Y., and Huo, P. (2018). Physicochemical properties of starch adhesives enhanced by esterification modification with dodecenyl succinic anhydride. *International Journal of Biological Macromolecules*, *112*, 1257–1263. doi:10.1016/j.ijbiomac.2018.01.222

Tomasik, P. (2003). Nonnutritional Apliccations of Saccharides and Polysaccharides. In P. Tomasik (Ed.), *Chemical and functional properties of food saccharides* (pp. 315–324). Boca Ratón, United States: Taylor and Francis Group.

Turunen, M., Alvila, L., Pakkanen, T., and Rainio, J. (2003). Modification of phenol-formaldehyde resol resins by lignin, starch, and urea. *Journal of Applied Polymer Science*, *88*(2), 582–588. doi:10.1002/app.11776

Wang, Y., Xiong, H., Wang, Z., Zia, D., and Chen, L. (2017). Effects of different durations of acid hydrolysis on the properties of starch-based wood adhesive. *International Journal of Biological Macromolecules*, *103*, 819–828. doi:10.1016/j.ijbiomac.2017.05.102

Warren, F., Gidley, M., and Flanagan, B. (2015). Infrared spectroscopy as a tool to characterise starch ordered structure- a joint FTIR-ATR, NMR, XRD and DSC study. *Carbohydrate Polymers*. *139,* 35-42. doi:10.1016/j.carbpol.2015.11.066

Wilpiszewska, K., and Spychaj, T. (2007). Chemical modification of starch with hexamethylene diisocyanate derivatives. *Carbohydrate Polymers, 70*, 334–340. doi:10.1016/j.carbpol.2007.04.023

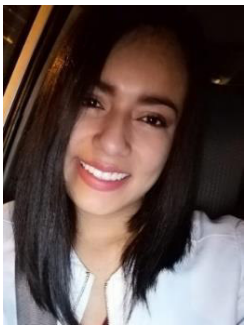
Wu, Z., and Song, X. (2006). Carboxymethylation of γ-irradiated starch. *Journal of Applied Polymer Science*, *101*(4), 2210–2215. doi:10.1002/app.23479

Yousif, E., Gadallah, M., and Sorour, A. (2012). Physico-chemical and rheological properties of modified corn starches and its effect on noodle quality. *Annals of Agricultural Sciences*, *57*(1), 19–27. doi:10.1016/j.aoas.2012.03.008

Zhang, Y., Ding, L., Gu, J., Tan, H., and Zhu, L. (2015). Preparation and properties of a starch-based wood adhesive with high bonding strength and water resistance. *Carbohydrate Polymers*, *115*, 32–57. doi:10.1016/j.carbpol.2014.08.063

BIOGRAFÍAS

Pamela Molina, received her degree in Agro-industrial Engineering from Escuela Politécnica Nacional, Ecuador. She is a student of the Sustainable Systems Engineering Master program at the Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Germany. She has participated in research projects related to starches for film and adhesive applications. Her research interests are bio-based polymers and bio-inspired materials.
ORCID: https://orcid.org/0000-0001-6829-9190



Samantha Borja, Born on 29 October 1996 in Quito, Ecuador. She has previously participated as speaker at CONEIQ 2018, held at the San Francisco University in Quito, with the subject: "Degradation of azoic dye Direct Blue BRL through two absorption techniques:Fenton and Persulfate ions. She is currently developing her degree project on "Development of adhesives from polyvinyl alcohol and achira (*Canna Edulis)* modified starch *",* to obtain the degree of Chemical Engineer at the National Polytechnic School.
ORCID: https://orcid.org/0000-0003-1837-9517

Vladimir Valle, received his MSc in Advanced Materials Science and Engineering from Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, Spain and Luleå University of Technology, Luleå, Sweden. He is currently a researcher at Centro de Investigaciones Aplicadas a Polímeros−Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador. His research fields are material processing, bio-based polymers, and greater durability composites based on agroindustry wastes.
ORCID: https://orcid.org/0000-0003-3344-8111

Lisbeth Mena, She has been awarded with a scholarship under the Emerging Leaders in the Americas Program (ELAP) by the Canadian Bureau for International Education (CBIE) (2016- 2017). Through it, she worked as an exchange research student in the Catalytic Ozonation Laboratory of the Chemical Engineering Faculty at the University of Saskatchewan, (Saskatoon-Canada). She developed research on Advanced Oxidation Processes (POA's) for wastewater treatment, under the supervision of the professor Jafar Soltan. She has contributed for poster presentations at the 3rd Iberoamerican Conference on Advanced Oxidation Technologies (III CIPOA) and at the 67th Canadian Chemical Engineering Conference. Chemical Engineer from the National Polytechnic School (2018). She has played roles within the pharmaceutical industry, teaching and research scopes.
ORCID: https://orcid.org/0000-0002-8851-4465

Francisco Cadena, Chemical Engineer, Faculty of Chemical Engineering, National Polytechnic School (EPN). Scientific internship Materials Department, Lausanne Federal Polytechnic School (EPFL), Switzerland. Doctorate (PhD) Polytechnic University of Catalonia (UPC). Postdoctoral University of the Basque Country. President of the Council for Evaluation, Accreditation and Quality Assurance (CEAACES) Ecuador. Member of the Council of Higher Education of Ecuador (CES). Advisor to the Ministry of Education of Ecuador. External pair in the evaluation University of Havana. Visiting Professor University of the Basque Country. Guest Professor University of Holguín. Guest Professor University of Havana. Member of the Technical Committee Latincorr NACE.
ORCID: https://orcid.org/0000-0003-4510-1844

Simulación de una Estrategia en Implementación de Vehículos Eléctricos en el Transporte Terrestre del Ecuador en el Horizonte 2014 – 2035

Vargas, Carlos [1]; Guamán, Jesús [1]; Ríos, Alberto [1,*]; Otorongo, Manuel [1]

[1]*Universidad Técnica de Ambato, Facultad de Ingeniería en Sistemas, Electrónica e Industrial, Ambato, Ecuador.*

Resumen: En el Ecuador, el principal consumidor final de energía es el sector transporte. En el año 2014, el consumo de energía alcanzó el 42% del consumo nacional total. El Estado ecuatoriano debe importar un importante volumen de derivados de petróleo para garantizar la demanda total de los combustibles fósiles empleados en el sector transporte. Además, el expendio de combustible fósil está subvencionado, implicando un sustancial gasto de recursos económicos. En el presente artículo, se simula la estrategia de una futura implementación de vehículos eléctricos en el sistema nacional de transporte terrestre. El estudio de prospectiva y planificación energética en el sector transporte se realizó con ayuda del Modelo de Simulación y Análisis de la Matriz Energética – SAME, perteneciente a la Organización Latinoamericana de Energía OLADE. A través de un tablero virtual, se simula en el año 2035 la sustitución de combustibles fósiles: gasolina y diésel por electricidad, minimizando así el volumen de importaciones de los derivados del petróleo. El objetivo del presente trabajo es demostrar la viabilidad técnica de electrificación del sector de transporte y desacoplamiento de los derivados del petróleo. Como resultados de una primera aproximación estratégica en esta sustitución implicaría una reducción de 86.223,0 kbep de diésel del consumo nacional, además, una importante reducción de importaciones de gasolina. De esta manera, al año 2035, sólo se importaría alrededor de 19.650,9 kbep, destinados al consumo de sectores comercial, residencial y construcción.

Palabras clave: Combustibles Fósiles, Consumo Energético, Sustitución Eléctrica, Matriz Energética.

Simulation of a Strategy in Electric Vehicles Implementation in the Land Transport of Ecuador in the Horizon 2014 - 2035

Abstract: In Ecuador, the main final consumer of energy is the transport sector. In 2014, energy consumption reached 42% of total national consumption. The Ecuadorian State must import a significant volume of oil to guarantee the total demand of fossil fuels used in the transport sector. In addition, the fuel expense is subsidized, implying a substantial expenditure of economic resources. In the present article, the strategy of a future implementation of electric vehicles in the national terrestrial transport system is simulated. The study of prospective and energy planning in the transport sector was carried out with the help of the Simulation and Analysis Model of the Energy Matrix - SAME, belonging to the OLADE Latin American Energy Organization. Through a virtual board, it simulates in the year 2035 the substitution of fossil fuels: gasoline and electricity for electricity, thus minimizing the volume of imports of petroleum derivatives. The objective of this work is to demonstrate the technical viability of the electrification of the transport and decoupling sector of petroleum derivatives. As a result of a first strategic approach in this substitution, a reduction of 86.223,0 kbep of diesel of national consumption, would eliminate gasoline imports. Thus, by the year 2035, only about 19.650,99 kbep would be imported, destined for the consumption of commercial, residential and construction sectors.

Keywords: Fossil fuels, Energy consumption, Electrical Substitution, Energy Matrix.

1. INTRODUCCIÓN

En el año 2014, el consumo final de energía en el Ecuador alcanzó los 101 millones de barriles equivalentes de petróleo. El sector transporte, con un consumo final de energía equivalente a 42 millones de barriles, es el principal sector consumidor de energía con un 42% del total (Estratégicos, 2015).

Asimismo, es importante indicar, que el consumo de energía en el sector transporte se incrementó en una tasa promedio anual del 4,3% en el periodo 2004-2014, Figura 2, debido

*a.rios@uta.edu.ec
Recibido: 27/09/2018
Aceptado: 06/07/2020
Publicado: 31/08/2020
10.33333/rp.vol46n1.05
CC BY 4.0

fundamentalmente al incremento del parque automotor del Ecuador y al crecimiento económico experimentado por el país en el periodo analizado.

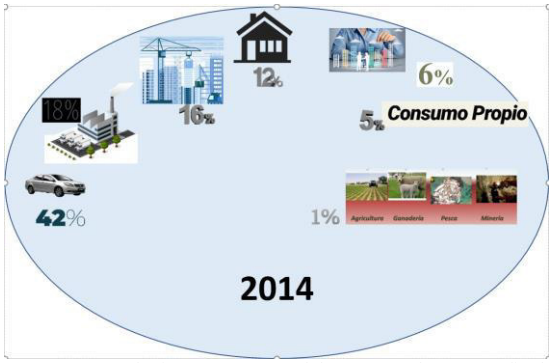


Figura 1. Evolución y estructura del consumo de energía final por sectores en el Ecuador a diciembre del año 2014 (Estratégicos, 2015).

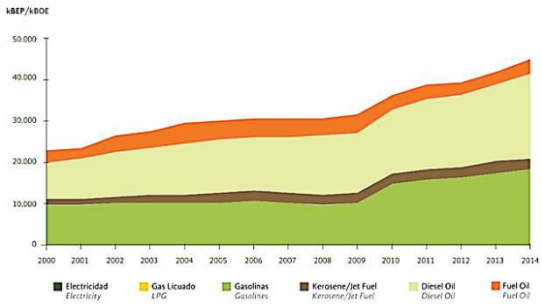


Figura 2. Evolución y estructura del consumo final de energía en el sector transporte en el Ecuador a diciembre del año 2014 (Estratégicos, 2015).

En el año 2014, el 93% del consumo final de energía en el sector transporte correspondió principalmente a tres derivados de petróleo: diésel, gasolinas y fuel oil, como se muestra en la Figura 3, básicamente empleados en el sector transporte terrestre y marítimo. En el transporte marítimo se utilizan principalmente dos tipos de combustibles: diésel oíl y fuel oíl, quedando limitado el uso del gas oíl a motores rápidos de poca potencia para generación de energía eléctrica y en buques de recreo. El 7% restante del consumo, fundamentalmente empleado en el transporte aéreo, es cubierto por el kerosene/jet fuel. La participación del GLP y de la electricidad en cubrir la demanda de energía en el transporte es ínfima, 0,2% y 0,01%, respectivamente.

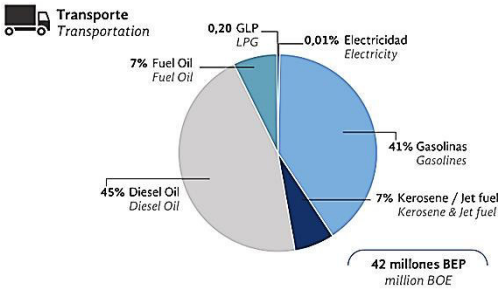


Figura 3. Estructura del consumo de energía por sectores en el Ecuador a diciembre del año 2014 (Estratégicos, 2015).

En el Ecuador, para garantizar la demanda total de diésel, gasolinas y fuel se debe importar importantes volúmenes de derivados de petróleo, necesarios para la movilidad y transporte de alimentos y personas, y que además son subvencionados por el Estado, implicando un sustancial gasto de recursos económicos. En la Figura 4, se observa la oferta y demanda de derivados de petróleo a nivel nacional en el año 2014. El Ecuador importó el 69% y el 60% del total de la demanda de diésel y gasolinas en el año 2014, respectivamente. En el caso del Gas Licuado de Petróleo, GLP, el 83% de la demanda total es cubierta por importaciones. Tan sólo la demanda de fuel oíl y kerosene/Jet Fuel es cubierta en un 94% y 91%, respectivamente, por producción obtenida en refinerías nacionales, Figura 4.

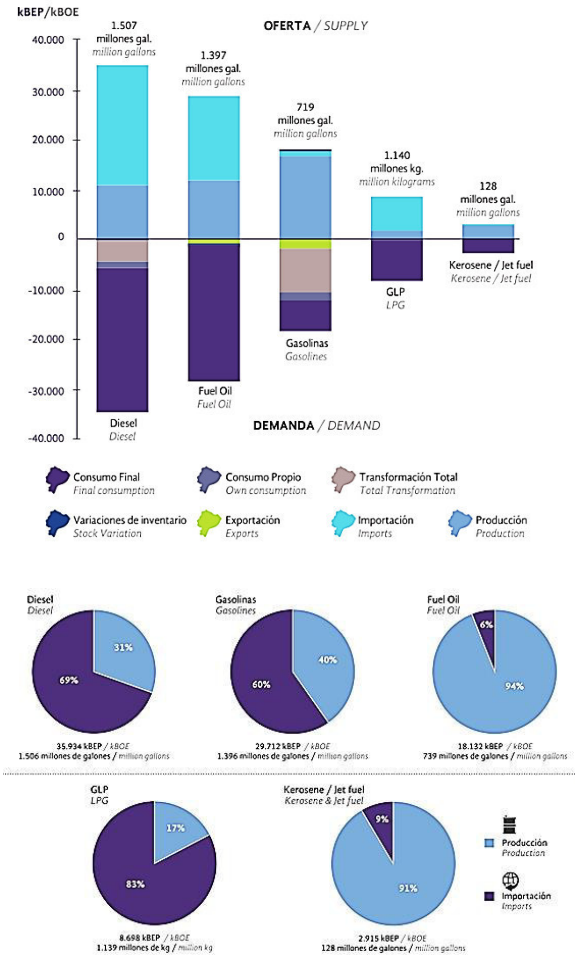


Figura 4. Estructura de la oferta y demanda de derivados de petróleo a diciembre del año 2014 (Estratégicos, 2015).

En el Ecuador, en el año 2014, el consumo final de energía en el sector transporte fue de 42 millones de bep. El transporte terrestre demanda el 86% del total de productos derivados de petróleo. El transporte aéreo y marítimo consumen el 6 y 8%, respectivamente, de la demanda final de energía empleada en el sector transporte, Figura 5. Asimismo, en la Figura 5, se observa que el transporte de carga pesada y liviana son los mayores consumidores de derivados de petróleo, asumiendo un 70% del total de la demanda final de energía en el sector transporte.

Es importante indicar que los vehículos de transporte de personas como buses, taxis, jeeps y autos representan, conjuntamente, el 26% del total de la demanda final de

energía en el sector transporte. La demanda de energía en el sector transporte terrestre en el año 2014 fue de 36 mil 558 kbep.

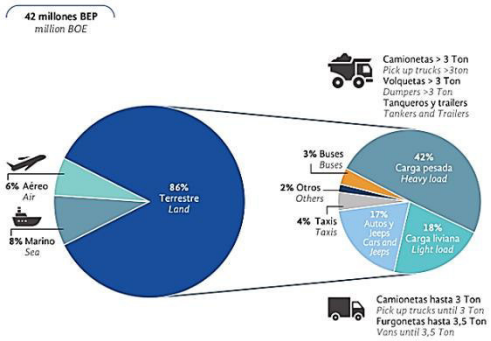


Figura 5. Estructura de la demanda final de energía por tipo de transporte a diciembre del año 2014 (Estratégicos, 2015).

En la Figura 6, se presenta el porcentaje de la demanda final total de diésel y gasolinas empleadas en el sector transporte. En el Ecuador, a finales de diciembre del año 2014, el 65% y 96% del consumo final total de diésel y gasolinas correspondió al sector transporte, respectivamente. En el año 2014, se consumieron 811,4 millones de galones de gasolinas y 811,8 millones de galones de diésel, Figura 6.

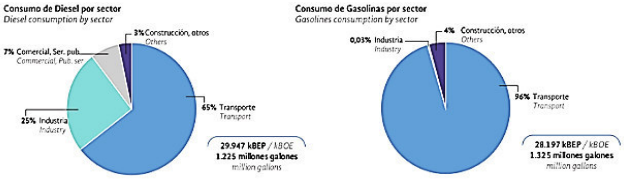


Figura 6. Estructura de la demanda por sectores económicos de diésel y gasolinas a diciembre del año 2014 (Estratégicos, 2015).

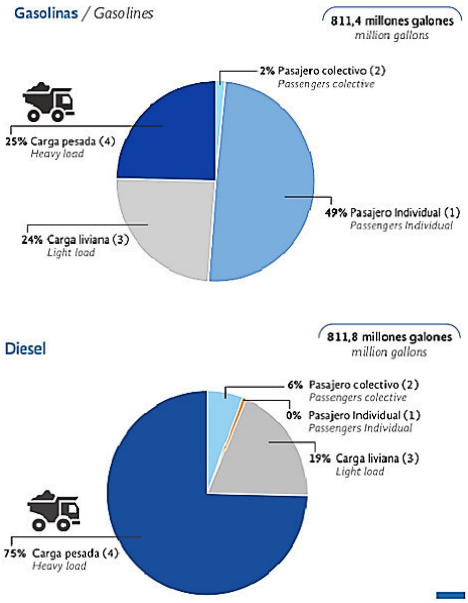


Figura 7. Distribución porcentual del consumo de diésel y gasolinas por tipo de vehículo (Estratégicos, 2015).

Asimismo, en la Figura 7, se presenta la distribución porcentual del consumo de diésel y gasolinas por tipo de vehículos. Se verifica que los vehículos de carga liviana y pesada representan un significativo porcentaje de la demanda final de energía, tanto de diésel como de gasolinas. Así, el transporte de carga liviana y pesada representa el 49% del consumo final de gasolina, mientras que los vehículos de carga pesada y liviana consumen el 94% del consumo final de diésel. Destaca el importante consumo de gasolina en vehículos de uso privado, con un 49% del consumo final de gasolina.

En la Tabla 1, se presenta la evolución de la demanda de energía en el sector transporte por tipo de combustible en el Ecuador entre los años 2004 y 2014 en kbep.

Tabla 1. Evolución de la demanda de energía en el sector transporte por tipo de combustible (Estratégicos, 2015).

	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	Var. (%) 2014/2013
Electricidad *Electricity*	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	-
Gas Licuado *LPG*	-	-	-	-	8	72	88	75	82	73	86	17,5
Gasolinas *Gasolines*	9.497	9.852	9.931	9.488	9.195	9.658	13.759	14.875	15-611	16.452	17.228	4,7
Kerosene/Jet Fuel *Keronese/Jet Fuel*		2.313	2.417	2.531	2.543	2.479	2.483	2.520	2.430	2.748	2.765	0,6
Diesel Oil *Diesel Oil*	11.512	12.041	12.492	12.925	13.207	13.676	14.540	15.775	16.258	17.638	19.330	9,6
Fuel Oil *Fuel Oil*	4.892	4.624	4.354	4.312	4.302	4.320	3.788	3.741	3.088	2.837	3.098	9,2
Total ***Total***	**27.959**	**28.836**	**29.200**	**29.262**	**29.261**	**30.211**	**34.663**	**36.993**	**37.474**	**39.754**	**42.513**	**6,9**

De la Tabla 1 se observa que el consumo de electricidad en el sector se ha estancado en 6 kbep, los mismos que corresponden al único sistema de transporte electrificado urbano que tiene el Ecuador, trolebús que funciona en la ciudad de Quito, con un recorrido de 24 kilómetros.

Actualmente, el trolebús de Quito cuenta con un total de 113 unidades articuladas. Se calcula que un promedio de 83 unidades, circulan por hora, mientras que en horario pico el número aumenta a 96 unidades por hora. Es importante indicar que, en el Ecuador, a finales del año 2014 existían 35 vehículos eléctricos matriculados en el Ecuador (INER, 2017). El consumo eléctrico de estos vehículos no afecta sustancialmente la demanda total de electricidad en el sector transporte. No obstante, en un proceso de electrificación del transporte de personas y mercancías, el consumo de electricidad deberá sustituir a los derivados de petróleo en un horizonte de 20-30 años.

En el caso del GLP, utilizado en el sector transporte, a pesar de su rápido incremento entre el año 2008 y 2009, entre el año 2010 y 2014 su empleo se ha estancado por debajo de los 88 kbep, correspondiente a la demanda de 449 vehículos a GLP, debido al interés del gobierno de sustituir el subsidio del GLP. Esto significa que el consumo de GLP se extinguirá a medida que el Estado ecuatoriano implemente políticas de sinceramiento de precios del GLP. Entre los años 2004 y 2014, el consumo de fuel oil ha experimentado un importante retroceso, debido principalmente a la modernización de los vehículos de carga liviana y pesada. Actualmente su principal uso en el sector transporte se encuentra en el transporte marítimo. El consumo de fuel oil, en el sector transporte, en 10 años se ha reducido de 4892 kbep a 3098 kbep.

Fuera del sector transporte, el fuel oil se emplea principalmente para la generación eléctrica y en calderas, hornos y motores estacionario. En el año 2014, el fuel oil empleado para la generación eléctrica representó el 28,6% de

la energía secundaria empleada, superior incluso a la energía primaria hidráulica. La integración al sistema eléctrico del Ecuador de la central hidroeléctrica Coca Codo-Sinclair redujo al mínimo la participación del fuel oil en la generación eléctrica, quedando como unidades de reserva de emergencia Tan en el sector de transporte marítimo como en el sector transporte aéreo, el uso de kerosene/jet fuel, al parecer, no dispone de un sustituto energético comercialmente viable en la actualidad. Aunque existen innovadoras experiencias internacionales de sustitución de combustibles fósiles empleados en el sector marítimo y aéreo, una estrategia de sustitución de fuel oil y kerosene/jet fuel deberá analizar detalladamente la evolución tecnológica de las propuestas actualmente existentes. En el Ecuador, el consumo de kerosene/jet fuel se incrementado muy lentamente en los últimos años, asociado al aumento de los vuelos nacionales e internacionales. Así, entre 2004 y 2014, la demanda de kerosene/jet fuel paso de 2 mil 313 kbep a 2 mil 765 kbep. Por otro lado, en el Ecuador, el consumo de gasolinas casi se ha duplicado entre el año 2004 y 2014, pasando de 9 mil 497 kbep a 17 mil 228 kbep. Una situación parecida ha experimentado en el consumo de diésel, que ha pasado de 11 mil 512 kbep a 19 mil 330 kbep. Por tanto, se ha producido un significativo incremento del consumo de diésel y gasolina en el sector transporte.

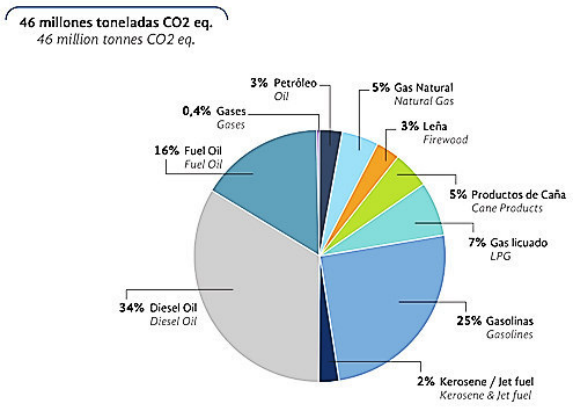


Figura 8. Estructura de las emisiones contaminantes sectores y por tipo de combustible (Estratégicos, 2015).

Finalmente, el sector transporte es el principal contaminante de emisiones de efecto invernadero, con un 39% del total de emisiones al año 2014, Figura 8. Las centrales eléctricas y los autoproductores conforman el segundo mayor emisor de contaminantes del país con una participación del 14%. Por fuente de energía, el diésel es el principal energético contaminante, con un 34% del total de emisiones, seguido por las gasolinas con el 25% y el fuel oil con el 16%, Figura 8. En el análisis realizado surge la hipótesis que la soberanía e independencia energética del país, así como la reducción de las emisiones contaminantes para las futuras generaciones de Ecuador se puede alcanzar a través de plantear estrategias de sustitución de combustibles fósiles en el sector transporte por soluciones eléctricas, que permitan garantizar un mejor servicio de movilidad en el país.

En una estrategia de sustitución de combustibles fósiles, en la actualidad, los vehículos convencionales de carga pesada y liviana podrían ser reemplazados por innovadores vehículos eléctricos, con almacenamiento de energía eléctrica en baterías y con catenarias análogas a los tranvías y trolebuses, o por un sistema de transporte ferroviario electrificado. Asimismo, desde una perspectiva tecnológica, los buses, taxis, jeeps y autos pueden ser sustituidos por vehículos eléctricos. La única limitación existente, actualmente en el Ecuador, es la falta de una infraestructura masificada de recarga de vehículos eléctricos privados y públicos. En una estrategia de sustitución de combustibles fósiles en el sector transporte a largo plazo, el diésel y la gasolina son los dos principales combustibles para sustituir en una estrategia de implementación de tecnologías limpias y sostenibles en el sector transporte del Ecuador.

La implementación de la estrategia propuesta permitiría a la economía ecuatoriana, altamente dependiente de este recurso natural, reducir su vulnerabilidad energética un entorno geopolítico internacional complejo, disponiendo además de una nueva fuente de ingresos económicos.

En este contexto se planea una simulación de una Estrategia en Implementación de Vehículos Eléctricos en el Transporte Terrestre del Ecuador en el Horizonte 2014 – 2035. Para ello se proponen la siguiente metodología:

Recolección de la información del consumo energético del parque automotor del Ecuador en el año base 2014.

Evaluación del consumo de energía eléctrica que implicaría la sustitución del parque automotor del Ecuador.

Propuesta de diferentes escenarios para la sustitución del sistema de trasporte convencional con un sistema de trasporte electrificado.

Simulación de los diferentes escenarios que tratan de minimizar el consumo de combustibles fósiles y sustituirse por energía eléctrica con ayuda del Modelo de Simulación y Análisis de la Matriz Energética SAME de OLADE.

Análisis de los resultados de la simulación la estrategia de implementación de vehículos eléctricos en el transporte terrestre

2. CONSUMO ENERGÉTICO DEL PARQUE AUTOMOTOR DEL ECUADOR

En el año 2014, se matricularon en el país 1 millón 752 mil 712 vehículos, según el Anuario de Estadísticas de Transportes 2014 (INER, 2017). En la Tabla 2 se presenta el parque automotor del Ecuador a finales del año 2014 por tipo de vehículos y combustibles empleados. Se observa que en el parque automotor predominan los vehículos a gasolina con más de un millón 553 mil unidades. En segundo lugar por número de unidades se encuentran los vehículos a diésel con más de 194 mil 900 unidades. Entre ambos tipos de combustible conforman el 99,74% de todas los vehículos del sector transporte terrestre del Ecuador, Figura 9. El restante 0,26% corresponde a 4055 vehículos híbridos, 449 unidades a GLP y 35 autos eléctricos, Figura 10.

Tabla 2. Estructura del parque automotor del Ecuador por tipo de vehículo y combustible empleado, elaboración propia.

Tipo de Vehículo	*Tipo de Combustible*					
	Diésel	*Gasolina*	*Híbrido*	*GLP*	*Eléctrico*	*Total*
Automóvil	1233	526274	1833	170	11	529521
Autobús	11092	206		1	1	11300
Camión	74389	4261		1	1	78652
Camioneta	63749	304951	93	92	5	368890
Furgoneta de Carga	13744	18493		5		32242
Furgoneta de Pasajeros	2238	39070	46	20		41374
Jeep	4950	253767	2080	66	14	260877
Motocicleta	91	404985	2	94	1	405173
Tanquero	2384	127				2511
Trailer	6839	76			2	6917
Volqueta	9646	296				9942
Otros	4587	725	1			5313
Total	194942	1553231	4055	449	35	1752712

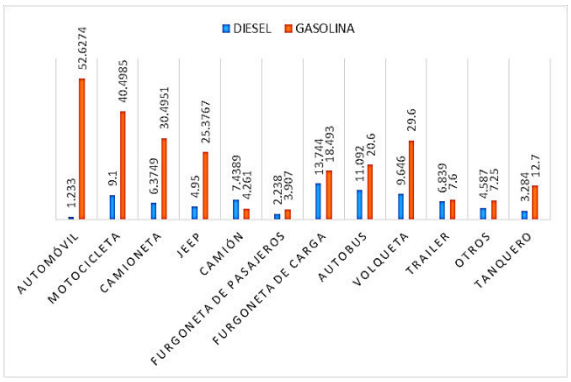


Figura 9. Estructura del parque automotor del Ecuador por tipo de vehículo para motores Diésel y Otto, elaboración propia.

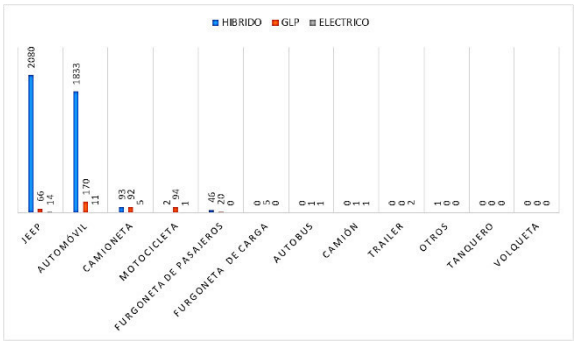


Figura 10. Estructura del parque automotor del Ecuador por tipo de vehículo para vehículos híbridos, GLP y eléctricos, elaboración propia.

Para simplificar el cálculo del consumo energético de los vehículos del parque automotor en el Ecuador a sustituir por vehículos menos contaminantes y más eficientes, en una simulación de estrategia de implementación de transporte sostenible, sólo se evaluará el consumo de energía fósil de los diferentes vehículos a diésel y a gasolina del parque automotor (Garc, Direcci, Estudios, Semana, & Econom, 2013). El cálculo del consumo energético anual para cada tipo de vehículo, diésel y gasolina, exige disponer del rendimiento energético por kilómetro de los diferentes vehículos evaluados, tanto con motor Otto como con motor Diésel. Asimismo, es necesario disponer de un promedio aproximado de los kilómetros recorridos anuales para los diferentes tipos de vehículos evaluados En la Tabla 3 se presentan los valores de rendimiento por kilómetro por tipos de vehículos y combustible del parque automotor del Ecuador al año 2014, así como los recorridos promedios de los vehículos evaluados. Asimismo, en la Tabla 3 se calcula el consumo energético específico de cada tipo de vehículo evaluado tanto a diésel como a gasolina. En la Tabla 4 y en la Figura 11, se muestra el consumo energético anual del parque automotor del Ecuador en kbep, por tipo de vehículos para motores a diésel y gasolina en el año 2014. Los automóviles híbridos, los vehículos eléctricos y las unidades a GLP no se han considerado en el cálculo realizado por su escasa aportación energética al consumo total del parque automotor**.**

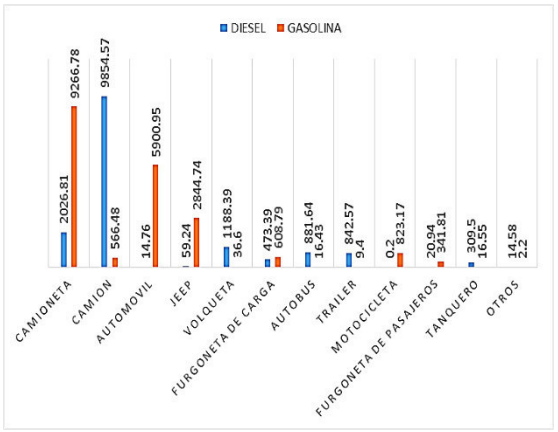


Figura 11. Consumo energético anual del parque automotor del Ecuador al año 2014 para motores Diésel y Otto, elaboración propia.

Tabla 3: Rendimiento, recorrido promedio anual y consumo energético específico del parque automotor por tipo de vehículo.

Consumo Energético Anual por Tipo de Vehículo y Combustible					
Tipo de Vehículo	***Rendimiento km/galón***		***Recorrido Promedio Anual, km***	***Consumo Específico Anual, bep/vehículo***	
	Diésel	***Gasolina***		***Diésel***	***Gasolina***
Automóvil	***45***	***42***	***16000,00***	***8,48***	***8,10***
Autobús	***16***	***16***	***180000,00***	***268,26***	***239,30***
Camión	***18***	***16***	***100000,00***	***132,47***	***132,95***
Camioneta	***45***	***42***	***55000,00***	***29,14***	***27,86***
Furgoneta de Carga	***45***	***42***	***72000,00***	***38,15***	***36,47***
Furgoneta de Pasajeros	***45***	***42***	***16000,00***	***8,48***	***8,10***
Jeep	***45***	***42***	***15000,00***	***7,95***	***7,60***
Motocicleta	***92***	***90***	***8610,00***	***2,23***	***2,03***
Tanquero	***18***	***16***	***160000,00***	***211,96***	***212,71***
Trailer	***18***	***16***	***162800,00***	***215,67***	***216,44***
Volqueta	***18***	***16***	***160000,00***	***211,96***	***212,71***
Otros	***45***	***42***	***10000,00***	***5,30***	***5,06***

Tabla 4: Consumo energético anual del parque automotor del Ecuador al año 2014, elaboración propia.

Tipo de Vehículo	***Consumo Energético Anual Parque Automotor Ecuador, kbep***		
	Diésel	***Gasolina***	***Total***
Automóvil	10,45	4264,61	4275,06
Autobus	2975,53	49,30	3024,82
Camión	9854,57	566,48	10421,06
Camioneta	1857,91	8494,54	10352,46
Furgoneta de Carga	524,37	674,35	1198,72
Furgoneta de Pasajeros	18,97	316,60	335,57
Jeep	39,34	1927,85	1967,20
Motocicleta	0,20	824,13	824,33
Tanquero	505,31	27,01	532,32
Trailer	1474,95	16,45	1491,40
Volqueta	2044,54	62,96	2107,51
Otros	24,31	3,67	27,98
Total	19330,46	17227,97	36558,43

Los valores obtenidos de consumo energético anual del parque automotor del Ecuador corresponden a los porcentajes de consumo energético por agrupación de tipos de vehículos presentados en la Figura 5. Así, el 86% del consumo total de energía del sector transporte corresponde al sector de transporte terrestre igual a 36 mil 558 kbep (Yascaribay & Vidal, 2016). Asimismo, el 60% del consumo total de energía en el sector transporte corresponde a la demanda energética de los vehículos de carga pesada – camionetas y volquetas mayores a 3 toneladas, tanqueros y tráileres – y de los vehículos de carga liviana – camionetas y volquetas menores a 3 toneladas y furgonetas –, sumando 25.452,6 kbep (Energ et al., 2014). Al emplear los datos del parque automotor, el consumo de 25.452,6 kbep corresponde a la suma de los consumos energéticos anuales de las unidades de camiones, camionetas, furgonetas de carga, tanqueros tráileres y volquetas, presentados en la Tabla 2. Asimismo, en la Figura 5 se indica que el consumo energético de autos y jeeps representan 17% del consumo total de energía en el sector transporte, igual a 7.211,57 kbep, mientras que los taxis, con un 4% del total de la demanda de energía en el transporte, consumen 1696,84 kbep. En total, según los datos del parque automotor de la Tabla 2, los vehículos – agrupados en autos y taxis – y los jeeps consumen el 21% del total de la demanda de energía en el sector transporte, igual a 8.908,41 kbep. Los buses, que agrupan autobuses y furgonetas de pasajeros, consumen un 3% del total de la demanda de energía total equivalente a 1.272,63 kbep (INER, 2014). Finalmente, el segmento otros, con un 2% de la demanda total del sector transporte, que incluye a motocicletas y vehículos de otra clase como vehículos de la policía, bomberos, ambulancias públicas y privadas, en el año 2014, consumió 848,42 kbep (INER, 2013).

3. CONSUMO ENERGÉTICO DE LOS VEHÍCULOS DE SUSTITUCIÓN DE COMBUSTIBLES FÓSILES

El consumo energético en el sector transporte del Ecuador puede ser reemplazado dos tipos de vehículos: los vehículos eléctricos y los vehículos a biocarburantes (IDAE Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía, 2005). En la actualidad, todos los vehículos a diésel y a gasolina del parque automotor del Ecuador pueden ser reemplazados por vehículos eléctricos, en la Tabla 5 se presentan los valores de rendimiento, recorrido promedio, consumo energético específico y consumo energético del parque automotor del Ecuador si todos los vehículos convencionales del parque sean reemplazados por vehículos eléctricos. En la Figura 12, se muestra el consumo eléctrico anual del parque automotor del Ecuador en kbep, por tipo de vehículo eléctrico en el año 2014.

Una estrategia de implementación de vehículos eléctricos en el sector de transporte terrestre permitiría desencadenar al país del consumo de derivados de petróleo, Por otro lado, la masiva integración de vehículos eléctrico implica el diseño e instalación de una estructura de recarga eléctrica que garantice el suministro de energía eléctrica a los usuarios de vehículos eléctricos. Asimismo, exige la realización de estudios del potencial de recursos energéticos autóctonos que permitan garantizar la demanda de un sistema electrificado de transporte.

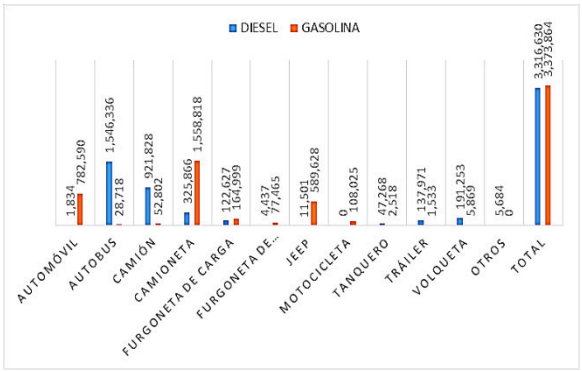


Figura 12. Consumo energético anual del parque automotor del Ecuador para vehículos eléctricos, elaboración propia.

4. SIMULACIÓN DE ESCENARIOS DE IMPLEMENTACIÓN DE VEHÍCULOS SOSTENIBLES EN EL ECUADOR.

La elevada dependencia del sector transporte de los derivados del petróleo y la contaminación medioambiental, asociada a los procesos de transformación final de los vehículos, exige la necesidad de implementar estrategias de sustitución de combustibles fósiles (INER, 2013). En la actualidad, existen las tecnologías de sustitución sostenible del transporte convencional que permitirá conformar un futuro sistema de transporte sostenible, basado en la integración de vehículos eléctricos y vehículos a biodiésel y/o etanol en sustitución de las unidades convencionales con motores de combustión Otto y Diésel.

En este sentido, se propone evaluar un escenario de sustitución de vehículos fósiles para un horizonte de análisis al año 2035, un escenario de transporte terrestre 100% eléctrico. Para la simulación de escenarios propuestos se empleará el software de simulación de escenarios energéticos SAME, Modelo de Simulación de la Matriz Energética, elaborado y desarrollado por la Organización Latinoamericana de Energía, OLADE ("SAME - OLADE," n.d.).

El sistema de planificación SAME es un modelo de simulación y análisis de la matriz energética que permite simular de manera integrada la implementación de diferentes políticas de desarrollo energético en un país o una región y observar sus efectos sobre los indicadores de sostenibilidad de su matriz energética.

Tabla 5: Rendimiento, recorrido anual y consumo energético específico y anual del parque automotor por tipo de vehículo eléctrico.

Consumo Energético Anual por Tipo de Vehículo Eléctrico						
Tipo de Vehículo	***Rendimiento kWh/km***	***Recorrido Promedio Anual, km***	***Consumo Específico Anual, Bep***	***Consumo Energético Anual, Kbep***		***Total***
				Diésel	*Gasolina*	
Automóvil	*0,15*	*16000,00*	*1,487*	*1,834*	*782,590*	*784,424*
Autobús	*1,25*	*180000,00*	*139,410*	*1546,336*	*28,718*	*1575,054*
Camión	*0,20*	*100000,00*	*12,392*	*921,828*	*52,802*	*974,631*
Camioneta	*0,15*	*55000,00*	*5,112*	*325,866*	*1558,818*	*1884,684*
Furgoneta de Carga	*0,20*	*72000,00*	*8,922*	*122,627*	*164,999*	*287,626*
Furgoneta de Pasajeros	*0,20*	*16000,00*	*1,983*	*4,437*	*77,465*	*81,902*
Jeep	*0,25*	*15000,00*	*2,324*	*11,501*	*589,628*	*601,129*
Motocicleta	*0,05*	*8610,00*	*0,267*	*0,024*	*108,025*	*108,049*
Tanquero	*0,20*	*160000,00*	*19,827*	*47,268*	*2,518*	*49,786*
Tráiler	*0,20*	*162800,00*	*20,174*	*137,971*	*1,533*	*139,504*
Volqueta	*0,20*	*160000,00*	*19,827*	*191,253*	*5,869*	*197,122*
Otros	*0,20*	*10000,00*	*1,239*	*5,684*	*0,898*	*6,583*
Total	*3,25*	*955410,00*	*232,964*	*3316,630*	*3373,864*	*6690,494*

El modelo de simulación SAME exige la siguiente información:

- Balance de energía final para el año base, que puede ser un año histórico, actual o futuro.
- Información de las tecnologías de oferta de energía como: capacidad instalada, eficiencias medias, factores de planta, costos unitarios de producción, costos unitarios de inversión, factores de emisión de GEI, etc.
- Información de reservas y potenciales.
- Información de eficiencias relativas de tecnologías de uso final como cocción, iluminación, transporte, refrigeración, etc.

El sistema de simulación SAME presenta las siguientes funcionalidades:

- Realiza de manera simple proyecciones de estados factibles y coherentes de la matriz energética para un año futuro, con base al estado actual de dicha matriz.
- Actualiza los resultados de estudios de prospectiva simulando el efecto de nuevas hipótesis y políticas de desarrollo.
- Cuantifica los beneficios energéticos, económicos y ambientales de una diversificación de la matriz energética, de la aplicación de medidas de eficiencia energética o un cambio en los patrones de consumo final.
- Analiza alternativas para enfrentar eventos críticos, como agotamiento de reservas, restricción o encarecimiento de fuentes energéticas importadas, entre otros.

El SAME es un sistema computacional, provisto de un tablero de control virtual, que permite obtener un panorama integral de los efectos que una determinada política en el sector energético, aplicada a corto, mediano o largo plazo. El sistema de planificación SAME permite la generación de un conjunto de indicadores de la matriz energética de un país o una región. Entre los indicadores más importante del sistema de planificación SAME destacan:

- Equilibrio en el balance de energía final.
- Estructura de la matriz de oferta y de consumo
- Factor medio de emisiones de Gases de Efecto Invernadero
- Costo medio de la oferta interna de energía.
- Índice de renovabilidad de la matriz energética
- Índice de suficiencia o soberanía energética
- Eficiencia en el consumo final.
- Alcance de reservas y potenciales.
- Matriz de la generación eléctrica.

La pantalla SAME permite simular el incremento de penetración de electricidad en el sector residencial. Así, el desplazamiento de electricidad en el sector residencial causaría un déficit en la oferta energética que podría ser suministrada por sistemas renovables de generación eléctrica.

La reducción de consumo de GLP permitiría reducir las importaciones de recursos fósiles y proporcionar un efecto positivo en la reducción de emisiones de efecto invernadero.

4.1 Escenario 100% Transporte Terrestre Eléctrico

En el Ecuador, en un hipotético escenario de sustitución total del diésel y gasolina por vehículos eléctricos en el transporte terrestre, el consumo de 36 mil 558 kbep de diésel y gasolina del año 2014 es inicialmente proyectado al año 2035, en un escenario denominado BAU, Bussiness As Usual, Figura 13. Se observa que, si no se implementan políticas de sustitución de derivados de petróleo, al año 2035, el diésel y gasolina conformarán el mayor porcentaje del suministro energético en el sector del transporte terrestre, con un total de 133.040,73 kbep.

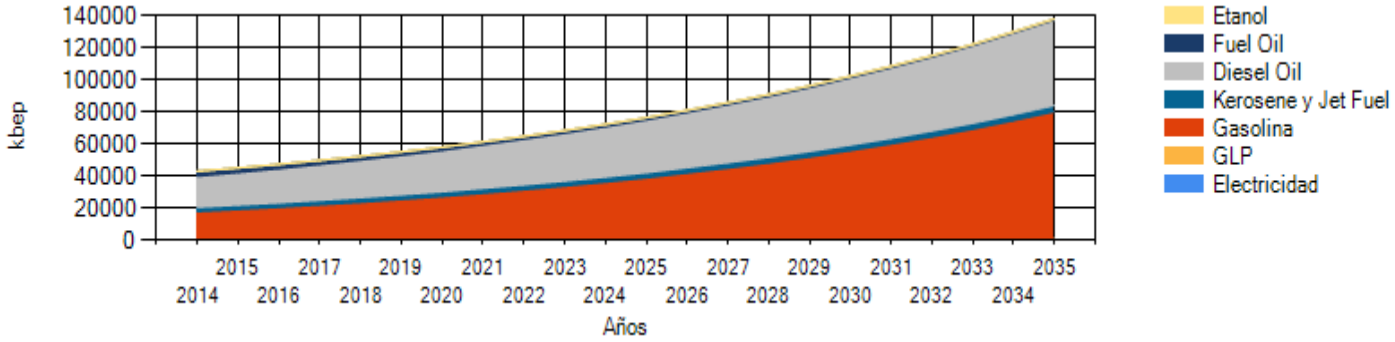


Figura 13. Evolución del consumo energético en el sector transporte por tipo de combustible al año 2035, en un escenario BAU.

El SAME dispone de un tablero de control virtual que permite sustituir el consumo de diésel y gasolina en el transporte del Ecuador. Al sustituirse el consumo de diésel y gasolina, en el año 2035, se genera un desbalance energético.

Puesto que el Ecuador, al año 2035, importará 105.873,90 kbep de diésel, una estrategia de sustitución permitirá reducir el consumo de diésel en el transporte igual a 86.223,0 kbep del total de importaciones. Debido a que el diésel se consume el sector comercial, residencial y en la construcción, a pesar de la importante reducción del consumo de diésel, se deberá importar 19.650,9 kbep.

Para minimizar el remanente de importaciones, se deberá implementar acciones adicionales para reducir el consumo del diésel en otros sectores de la economía ecuatoriana. El SAME permite eliminar las importaciones asociadas al consumo de diésel en el transporte, garantizando el balance energético del diésel en el sistema energético, Figura 14.

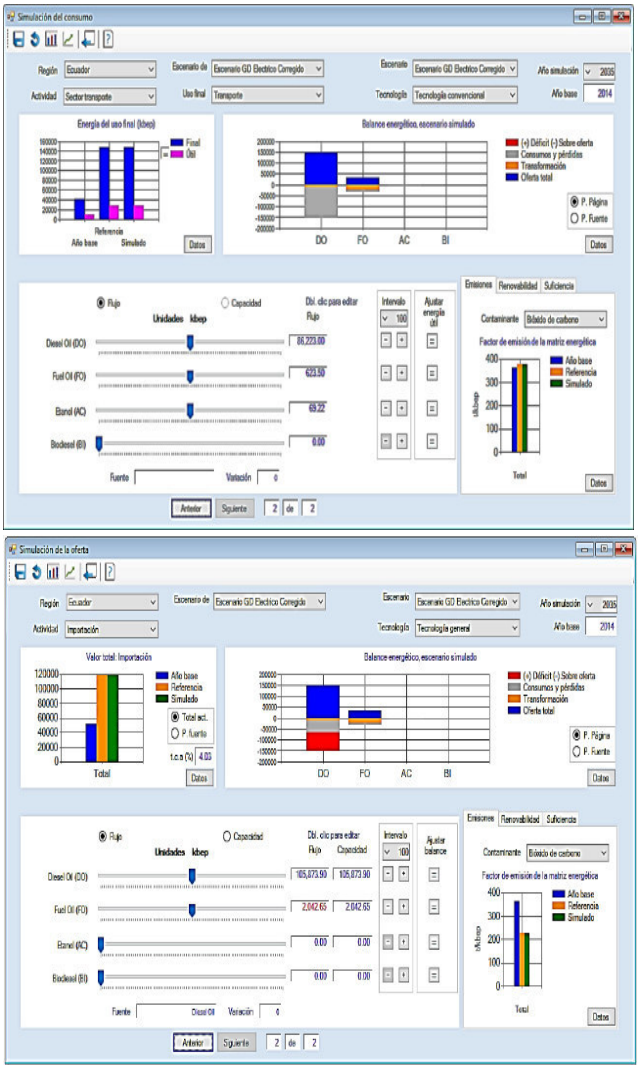


Figura 14. Balance Energético de los combustibles fósiles en el Ecuador para el escenario base.

En el caso de la gasolina, el 96% de la producción e importación de gasolina se dedica al sector transporte. Las refinerías del Ecuador suministran el 40% del consumo nacional de gasolina y un pequeño volumen de gasolinas se exporta. Al sustituirse los 55.883,49 kbep de gasolina del transporte terrestre, se eliminan el total de las importaciones de gasolinas correspondientes al 2035 al valor de 44.803,06 kbep.

El remanente de gasolina restante iguala a 11.080,43 kbep se deberá exportar para que el SAME pueda equilibrar la cadena energética de la gasolina al sustituirse la gasolina por electricidad, Figura 15. Al año 2035, con la sustitución de todo el consumo de gasolina en el transporte, el país tendría capacidad de exportar un total de 13.917,31 kbep.

Figura 15. Balance Energético de los combustibles fósiles en el Ecuador para el escenario de simulación.

La sustitución del diésel y gasolina por electricidad genera un déficit de generación eléctrica, que deberá ser cubierta por las centrales eléctricas al año 2035, Figura 16. Se observa que para el año 2035, la generación eléctrica se incrementa de 17.285,34 kbep a 43.014,54 kbep, es decir, para sustituir la demanda en el transporte terrestre de 142.106,49 kbep, correspondiente a diésel y gasolina, se necesitará 25.729,2 kbep de energía eléctrica, Figura 16.

Una vez realizados los equilibrios energéticos en el diésel, gasolina y generación eléctrica, el SAME realiza una simulación evolutiva regresiva desde el año 2035 hasta el año 2014, año inicial de simulación, considerando el año 2014 como año base. La mencionada simulación permite visualizar la evolución del consumo de diésel y gasolina en el transporte terrestre del Ecuador. El consumo de diésel y gasolina se incrementan hasta alcanzar un pico máximo, para posteriormente reducirse hasta alcanzar un valor igual a cero en el año 2035, Figura 17

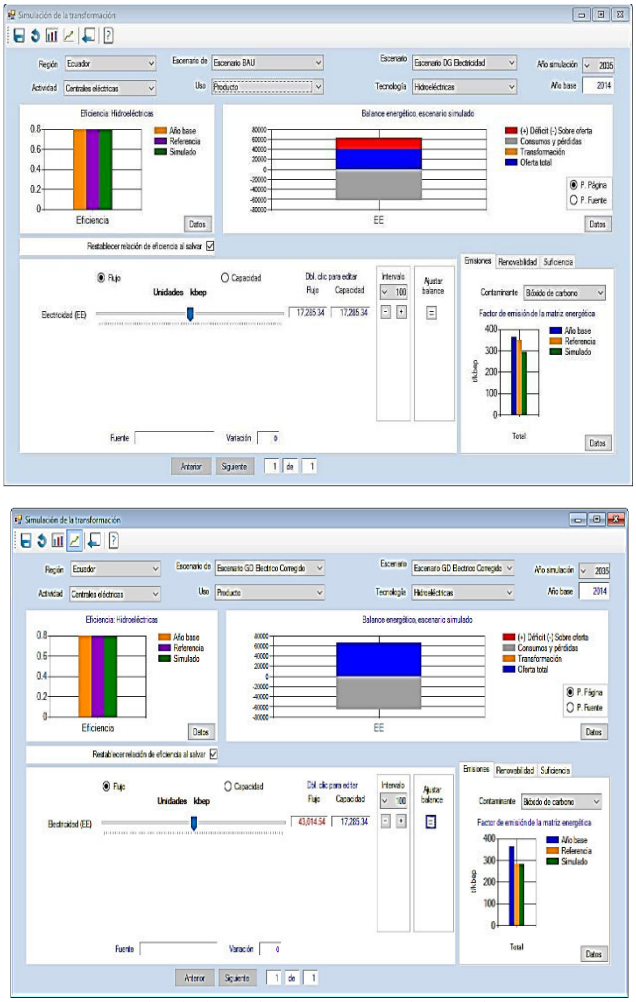


Figura 16. Simulación del Balance Energético ante la sustitución de electricidad por combustibles fósiles en el horizonte 2014-2035.

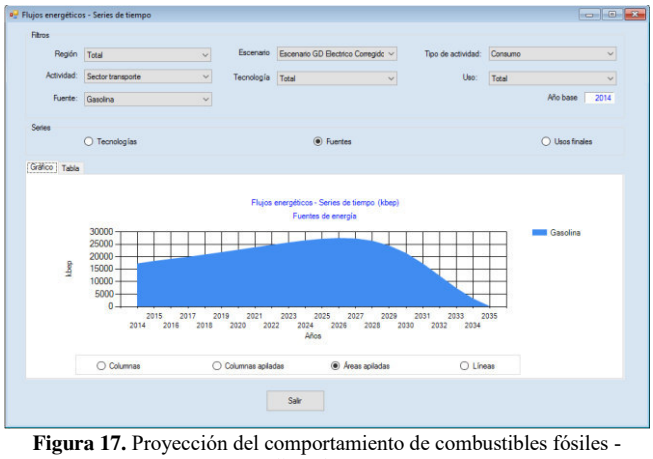


Figura 17. Proyección del comportamiento de combustibles fósiles - gasolina al año 2035.

Asimismo, de forma paralela, la generación eléctrica suministra la energía necesaria para sustituir el diésel y gasolina por vehículos eléctricos, maximizando su producción de electricidad al año 2035, Figura 18.

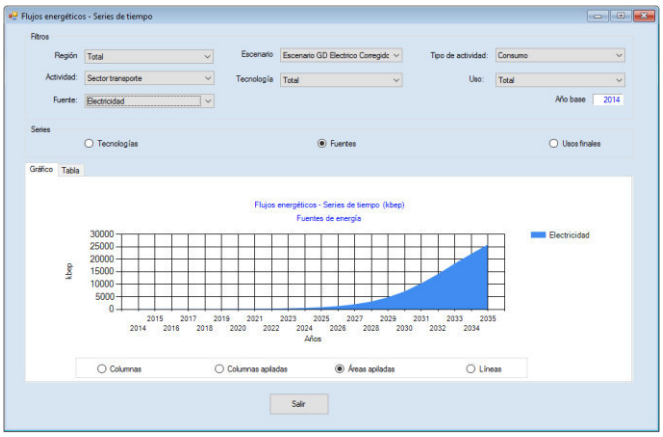


Figura 18. Incidencia causada por la sustitución de electricidad por gasolina en el transporte terrestre del Ecuador al año 2035.

Finalmente, en la Figura 19, se presenta la evolución de las fuentes de energía en el sector del transporte del Ecuador. Se observa que a pesar de la reducción de la gasolina y el diésel, aún existe un consumo energético asociado al kerosene/jet fuel, al fuel oil y a etanol. Asimismo, la electricidad en el año 2035 juega un rol predominante en el suministro energético del sector transporte del Ecuador, reduciendo la dependencia de los derivados de petróleo y las emisiones de gases de efecto invernadero.

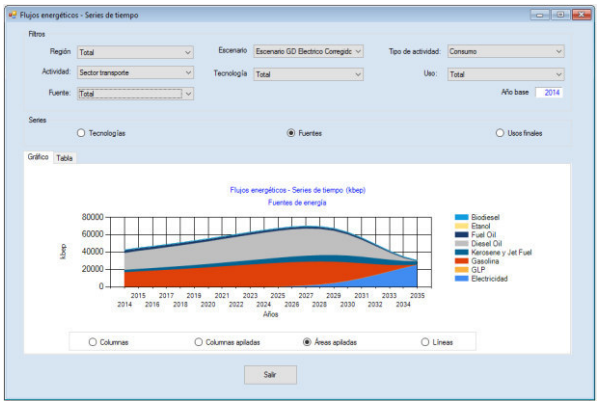


Figura 19. Transición de los combustibles fósiles y de la electricidad al año 2035 con el cambio de la matriz energética.

5. CONCLUSIONES

La estrategia de una futura implementación de vehículos eléctricos en el sector transporte permitiría una reducción de 86.223,0 kbep de diésel del consumo nacional, además, se eliminarían las importaciones de gasolina.

El volumen de diésel importado en el año 2035 sería alrededor de 19.650,9 kbep, que se consumen en los sectores comercial, residencial y construcción. Si en el año 2035, el Ecuador dejase de consumir combustibles fósiles tendría una capacidad de volumen de exportación de gasolina equivalente a 13.917,31 kbep.

En el Ecuador, en un hipotético escenario de sustitución total del diésel y gasolina por vehículos eléctricos, en el transporte terrestre, supondría una eficiencia relativa de la electricidad en 5,5 veces mayor a la de los combustibles fósiles.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer al Secretaria de Educación Superior, Ciencia, Tecnología e Innovación, SENESCYT, por su especial apoyo en el desarrollo de la presente propuesta, gracias a la financiación del Proyecto de Investigación PROMETEO: “Evaluación Técnico-Económica y Medioambiental de la Integración de Energías Renovables y Técnicas de Diseño y Gestión Eficiente en Sistemas de Edificación y Transporte Sostenibles, Aplicación Práctica a la Ciudad de Ambato”, y a la Dirección de Investigación y Desarrollo, DIDE de la Universidad Técnica de Ambato por su especial apoyo en el desarrollo de la presente propuesta gracias a la financiación del proyecto "Planificación y Optimización del Sistema Integral de Transporte Electrificado y Movilidad Sostenible en la Ciudad de Ambato". Finalmente, agradecemos a la Dirección de Tránsito, Transporte y Movilidad del Gobierno Autónomo Descentralizado Municipalidad de Ambato, GADMA, por facilitarnos la información de los contratos de operación de las cooperativas de transporte urbano de la ciudad de Ambato.

REFERENCIAS

Energ, D. E. L. A. I., Industrial, S., Residencial, S., Ie, L., Ie, L., Ie, L., & Ie, L. (2014). I. Conclusiones y recomendaciones, 1–28.

Estratégicos, M. C. de S. (2015). Balance Energético Nacional 2015. *Ministerio Coodinador de Sectores Estrategicos*, 48. https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004

Garc, F., Direcci, E. D. E. L. A., Estudios, D. E., Semana, P., & Econom, D. E. L. A. (2013). SITUACIÓN ACTUAL Y PERSPECTIVAS DEL SECTOR ENERGÉTICO EN.

IDAE Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía. (2005). Combustibles y vehículos alternativos, 7–11.

INER. (2013). Identificación de Necesidades de Eficiencia Energética en Transporte.

INER. (2014). Eficiencia energética en Transporte, 1–10. https://doi.org/10.1093/molbev/mst271

INER. (2017). *INER*. (E. Z. A. Parodi, Ed.). Quito. https://doi.org/9789942862068

SAME - OLADE. (n.d.). Retrieved October 30, 2018, from http://www.olade.org/producto/same-2/

Yascaribay, C., & Vidal, W. (2016). Determinación del consumo de combustible de vehículos en base a los ciclos de conducción EPA FTP75 y EPA HWFET en dinamómetro de chasis, *2*(Ftp 75), 1–7.

BIOGRAFÍAS

Carlos Luis Vargas Guevara. Nació en Ambato, Ecuador en 1991. Ingeniero en Electrónica y Comunicaciones por la Universidad Técnica de Ambato, 2015. Asistente de Investigación en la Unidad Operativa de Investigación y Desarrollo de la Facultad de Ingeniería en Sistemas, Electrónica e Industrial de la Universidad Técnica de Ambato. En la actualidad se encuentra realizando sus estudios de Posgrado en la Escuela Politécnica Nacional en la Maestría en Electricidad mención Redes Eléctricas Inteligentes.

Jesús Guamán Molina. Nació en Latacunga, Ecuador en 1990. Ingeniero en Electrónica y Comunicaciones por la Universidad Técnica de Ambato, 2015. Desde el año 2015, trabaja en calidad de Asistente de Investigación en la Unidad Operativa de Investigación y Desarrollo de la Facultad de Ingeniería en Sistemas, Electrónica e Industrial de la Universidad Técnica de Ambato. En la actualidad se encuentra realizando sus estudios de Posgrado en la Escuela Politécnica Nacional en la Maestría en Electricidad mención Redes Eléctricas Inteligentes.

Alberto Ríos Villacorta. Dr. Ingeniero Eléctrico por Universidad Carlos III de Madrid, 2007. Master en Energías Renovables por la Universidad Europea de Madrid, 2004. Ingeniero Eléctrico en Sistemas y Redes Eléctricas por el Instituto Politécnico de Bielorrusia, 1993. Profesor Ayudante de la Universidad Carlos III de Madrid, 1998 - 2001. Profesor Adjunto de la Universidad Europea de Madrid, 2001-2014. Director Técnico del Laboratorio de Ensayos de Turbinas Eólicas y Simulaciones de parques Eólicos, Energy to Quality, 2005-2006. Director del Master Oficial de Energías Renovables de la Universidad Europea de Madrid, 2007-2011. Investigador Postdoctoral en la Universidad Técnica de Ambato entre los años 2014 y 2017, Beca Prometeo, SENESCYT, Ecuador. Profesor Titular Principal de la Universidad Técnica de Ambato desde el año 2017. Consultor Internacional, Especialista en Energías Renovables y Eficiencia

Manuel Otorongo Cornejo. Nació en Ambato, Ecuador. Ingeniero eléctrico en sistemas eléctricos de potencia, Escuela Politécnica Nacional, Master en redes/ telecomunicación en la Universidad Técnica de Ambato, culminó sus estudios de economía en la Facultad de ciencias económicas, Universidad Central del Ecuador. Ha sido Presidente del Comité técnico nacional de normalización para transformadores de distribución (2002-2007, 2010-2011). Fue Jefe de Área y Jefe de Sección en Empresa Eléctrica Ambato S.A., Especialista, Director y Gerente de Distribución en Empresa Eléctrica Quito. Actualmente es Profesor en la Universidad Técnica de Ambato. Sus áreas de interés son la Planificación, Optimización y Automatización de los Sistemas de Distribución.

Microinversor Tipo Flyback con Control Nolineal para Aplicaciones Fotovoltaicas de Baja Potencia

Rivera, Pablo [1,*]; Sotomayor, Nelson [1]

[1]*Escuela Politécnica Nacional, Departamento de Automatización y Control Industrial, Quito, Ecuador*

Resumen. En este trabajo se presenta una solución sencilla para el diseño de un controlador de un conversor integrado al panel fotovoltaico basado en un inversor tipo Flyback de baja potencia con control nolineal de la corriente del primario con el propósito de controlar la potencia inyectada a la red eléctrica con factor de potencia unitario. La corriente de referencia es obtenida utilizando el algoritmo de Conductancia Incremental (IC) y en consecuencia obtener la potencia máxima del panel solar ante cualquier cambio de las condiciones atmosféricas. El controlador no-lineal es diseñado para trabajar en el modo de conducción discontinua (DCM) y de esta manera facilitar el diseño si se compara con la complejidad de diseño que presenta este tipo de conversores cuando funciona en el modo de conducción continua (CCM) debido a que la función de transferencia de la corriente del inversor tipo Flyback presenta un cero en el semiplano derecho (RHP). Adicionalmente, se desarrolla el análisis de estabilidad utilizando el método de Lyapunov para demostrar la estabilidad y delimitación de las señales del sistema en lazo cerrado. Los resultados de la simulación validan el funcionamiento y robustez del controlador.

Palabras clave: Inversor, Flyback, Celda Fotovoltaica, Control Nolineal.

Flyback Microinverter with Nonlinear Control for Low Power Photovoltaic Applications

Abstract: This work presents a simple solution for the design of a controller of an integrated converter into the photovoltaic panel based on a low power Flyback type inverter with nonlinear control of the primary current to control the power injected into the grid with unit power factor. The reference current is obtained using the Incremental Conductance (IC) algorithm and consequently attain the maximum power of the solar panel regardless of the atmospheric conditions. The nonlinear controller is designed to work in discontinuous conduction mode (DCM) facilitating the design when compared to the design complexity of this type of converters when operating in continuous conduction mode (CCM) due to the current transfer function of the Flyback inverter has a right half-plane (RHP) zero. Additionally, the stability analysis is developed using the Lyapunov method to demonstrate the stability of the system and the boundedness of the closed-loop system signals. The simulation results validate the performance and robustness of the controller.

Keywords: Inverter, Flyback, Photovoltaic Cell, Nonlinear Control.

1. INTRODUCCIÓN

La energía fotovoltaica es una de las más importantes fuentes de energía renovable que aparece como solución al rápido crecimiento de la demanda de energía e incremento de la contaminación ambiental debido al uso de combustibles fósiles. Abbou et al. (2016).

La alta incursión de sistemas fotovoltaicos monofásicos de baja potencia a las redes de generación distribuida, ha centrado la atención de las investigaciones de sistemas fotovoltaicos con microinversores integrados a cada panel solar con la finalidad de suplir las pérdidas de potencia debido al efecto sombra o a las características distintas de las celdas fotovoltaicas. En la mayoría de las aplicaciones fotovoltaicas, los paneles solares son conectados en serie y/o en paralelo para alimentar un conversor central pero la confiabilidad del sistema disminuye en caso de falla del inversor central. Islam et al. (2015). Para obtener el máximo punto de operación se utilizan distintos algoritmos de seguimiento del punto de máxima potencia (MPPT), pero una pérdida considerable de energía puede producirse debido a la orientación variable de los paneles solares y al efecto de sombra (Romero et al., 2013).

Con el fin de solucionar los problemas de eficiencia debido al efecto sombra, en la literatura existen muchas investigaciones sobre métodos para obtener el punto de máxima potencia tales como en Ji et al. (2015) y MacAlpine et al. (2013). El uso de los conversores flyback conectados a un inversor para obtener corriente alterna desde un panel solar, ha llamado la atención

*pablo.rivera@epn.edu.ec
Recibido: 17/04/2020
Aceptado: 07/07/2020
Publicado: 31/08/2020
10.33333/rp.vol46n1.06
CC BY 4.0

de los investigadores por ser simple en estructura, bajo costo y alta eficiencia si se compara con otras topologías de inversores aislados (Li et al., 2012). En la literatura científica existen estudios de módulos fotovoltaicos con inversor integrado, cuya topología tiene como enlace entre el módulo fotovoltaico y el inversor un conversor flyback. Las técnicas de control utilizadas son Control PI, Control Fuzzy, Control Optimo, Proporcional Resonante tal como en Li et al. (2012), Hamad et al. (2013), Fonkwe et al. (2014), Zhang et al. (2013) y Lee et al. (2016). Sin embargo, Lee et al. (2016) manifiesta que el diseño de los controladores es complejo debido a que, este tipo de configuraciones son muy inestables por la presencia del cero en el semiplano derecho (RHP) cuando funcionan en el modo de conducción continua (CCM) y no tienen un amplio rango de control. En tal sentido, Lee et al. (2016) presenta un control repetitivo (RC) tipo discreto con realimentación de la corriente de salida para asegurar la estabilidad del sistema en lazo cerrado funcionando en modo CCM. Pero de igual manera, el diseño del sistema es altamente complejo y el control repetitivo sufre de una inherente respuesta lenta (Dai et al., 2008).

En el presente trabajo, se propone el diseño de un sistema fotovoltaico conectado a la red eléctrica basado en micro inversor con conversor flyback y control nolineal tal como se indica en la Figura 1. A diferencia de otros trabajos como el presentado por Lee et al. (2016), se propone un método sencillo de control basado en control nolineal para seguir la trayectoria de corriente del primario actuando en el modo de conducción discontinua (DCM) cuya referencia de corriente, en este trabajo, es obtenida del algoritmo de Conductancia Incremental para seguir el Punto Máximo de Potencia (MPP) para cualquier valor de irradiación y/o de temperatura. Para inyectar potencia activa a la red cuya corriente esté en fase con el voltaje de la red eléctrica, se propone primeramente obtener en el primario del trasformador una onda de corriente DC pulsante cuya envolvente sinusoidal es similar a un sistema de rectificación. Para esto, la señal de control del transistor T1 será una onda sinusoidal PWM modulada con una señal sinusoidal rectificada (RSPWM) sincronizada a la frecuencia de la red eléctrica. La relación de trabajo es obtenida de un controlador nolineal. Los elementos de potencia de la etapa inversora (T2 y T3) son conmutados de manera alternada para obtener corriente alterna. La corriente alterna generada es inyectada a la red eléctrica la misma que está en fase con el voltaje de la red, garantizando de esta manera un factor de potencia unitario. La corriente alterna obtenida desde el inversor es conectada a la red eléctrica a través de un filtro de salida para garantizar una corriente sinusoidal con bajo contenido armónico.

2. MODELO DEL INVERSOR FLYBACK

El circuito equivalente del conversor flyback es similar al circuito del conversor buck-boost con la diferencia de que la inductancia fija es reemplazada por un transformador de doble devanado en el secundario. Cada secundario del trasformador es conectado a un inversor formado por diodos (D2, D3) y transistores (T2,T3) tal como se indica en la Figura 1, conmutados alternadamente cada transistor a una frecuencia de 120 Hz de tal manera de obtener una onda de alterna de frecuencia $f = 60Hz$ sincronizada con la red de alimentación.

Para el análisis se utiliza el modelo de un transformador ideal el que incluye la inductancia de magnetización L_m.

Además, se asume que la corriente del primario i_{pri} es modulada por una onda sinusoidal rectificada de tal manera

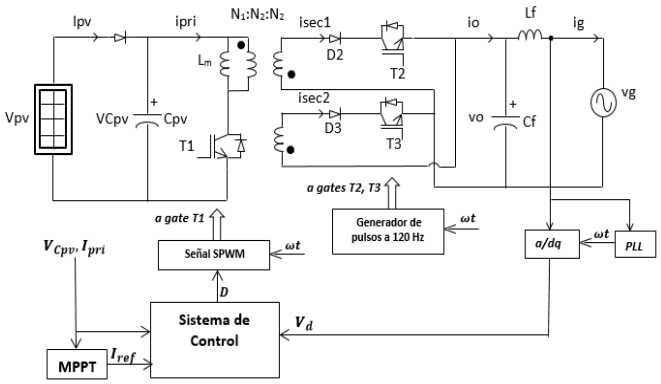


Figura 1. Circuito del inversor tipo Flyback conectado a la red eléctrica

que la corriente máxima del primario varíe sinusoidalmente. El transistor T1 es conmutado con la señal de control RSPWM a una frecuencia de conmutación f_s. La inductancia de magnetización es calculada de tal manera que el circuito funcione en el modo de conducción discontinua.

2.1. Modo de Conducción Discontinua

La Figura 2 indica una versión amplificada de la forma de onda de la corriente de magnetización cuya corriente del primario se da durante el tiempo Ton_n de activado del transistor T1.

En el modo de conducción discontinua se cumple que:

$$Ton_n + Tfall_n < Ts \quad (1)$$

donde:
Ton_n es el tiempo de subida de la corriente del primario del transformador.
$Tfall_n$ es el tiempo de bajada de la corriente de magnetización.
Ts es el tiempo de conmutación = $\frac{1}{fs}$

$$Ton_n = D_n Ts \quad (2)$$

$$Tfall_n = d_{1n} Ts \quad (3)$$

D_n Relación de trabajo, donde "n" varía de 1 a $\frac{fs}{2f}$
d_{1n} relación de trabajo de bajada de la corriente de magnetización.

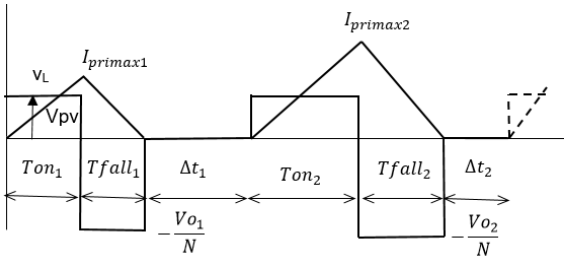


Figura 2. Forma de onda de voltaje y corriente de la inductancia de magnetización

En conducción discontinua, el tiempo de apagado $Toff_n$ está dado por la siguiente expresión:

$$Toff_n = Tfall_n + \Delta t_n \tag{4}$$

donde $\Delta t_n = d_{2n} Ts$;
d_{2n} relación de trabajo en corriente cero.

Asumiendo despreciable las pérdidas en el diodo anti-retorno, el valor máximo de la corriente del primario del transformador I_{primax} varía sinusoidalmente de acuerdo a la siguiente relación tal como es presentada en Fonkwe et al. (2014):

$$I_{primax}(t) = \frac{Vpv.D(t).T_s}{Lm} \tag{5}$$

donde:
Vpv es el voltaje de la celda fotovoltaica.
D(t) es la relación de trabajo.
Lm es la inductancia de magnetización.

Durante el tiempo de activado *Ton* del transistor T1 la corriente media del primario $I_{pri}(t)$ está dada por la siguiente relación:

$$I_{pri}(t) = \frac{1}{2} D(t) I_{primax}(t) \tag{6}$$

Reemplazando Ecuación (5) en Ecuación (6) se obtiene lo siguiente:

$$I_{pri}(t) = \frac{1}{2} \frac{Vpv.D^2(t).T_s}{Lm} \tag{7}$$

Asumiendo despreciables las pérdidas en el inversor y en el filtro de salida L_f, la potencia generada por la celda fotovoltaica *Pin* es igual a la potencia de salida *Po* (Le et al., 2016).

$$Vpv.Ipv = Vg_{rms} Ig_{rms} \tag{8}$$

Vpv es el voltaje medio de la celda fotovoltaica
Ipv es la corriente media de la celda fotovoltaica.
Vg_{rms} es el valor *rms* del voltaje de la red
Ig_{rms} es el valor *rms* de la corriente de la red.

Utilizando el principio de balance de potencia y asumiendo el factor de potencia unitario en el punto de acoplamiento común, el valor de la potencia instantánea está dado por la siguiente relación:

$$Vpv.I_{pri}(t) = 2Vg_{rms} Ig_{rms}.sin^2 wt \tag{9}$$

donde w es la frecuencia angular igual a $2\pi f$.

Reemplazando las Ecuaciones (7) y (8) en la Ecuación (9) y luego de algunas operaciones matemáticas se obtiene el valor de la relación de trabajo en el modo de conducción discontinua:

$$D(t) = 2\sqrt{\frac{Ipv.Lm.fs}{Vpv}}\,|sinwt| \tag{10}$$

Para determinar el valor crítico de la inductancia de magnetización, primeramente, se considera que el sistema funciona en conducción continua. Entonces, asumiendo funcionamiento en estado estable e igualando a cero la integral del voltaje en la inductancia de magnetización en el periodo *Ts* se obtiene la siguiente relación, (Le et al., 2016):

$$D(t) = \frac{\sqrt{2}Vg_{rms}.|sinwt|}{NVpv + \sqrt{2}Vg_{rms}.|sinwt|} \tag{11}$$

Donde N es la relación de transformación; $N = \frac{N2}{N1}$, N>1
El valor crítico de la inductancia de magnetización se calcula considerando la condición más crítica; esto es, el valor máximo de la relación de trabajo en el límite de conducción continua y discontinua se determina en el valor pico del voltaje de la red es decir cuando $sinwt = 1$. Luego, igualando las Ecuaciones (10) y (11) y después de algunas operaciones matemáticas se obtiene la expresión para determinar el valor crítico de la inductancia de magnetización $Lm_{critico}$.

$$Lm_{critico} = \frac{Vg_{rms}^2.Vpv}{2.Ipv.fs.\left(N.Vpv + \sqrt{2}Vg_{rms}\right)^2} \tag{12}$$

3. DISEÑO DEL SISTEMA DE CONTROL

El controlador no lineal asegura que el valor medio de la corriente del primario $I_{pri}(t)$ siga la referencia de corriente $I_{ref}(t)$ obtenida del algoritmo seguidor del punto de máxima potencia (MPPT). El propósito del esquema de control es diseñar la relación de trabajo $D(t)$ de tal manera que $I_{pri}(t) \rightarrow I_{ref}(t)$ conforme $t \rightarrow \infty$ y de esta manera controlar la potencia activa entregada a la red eléctrica.

Para el diseño del controlador se asume lo siguiente:

Asunción 1. R_s , C_{pv}, L_m, *N* son parámetros conocidos del sistema.
Asunción 2. El voltaje de la red eléctrica es simétrico y sinusoidal entonces la componente en eje directo $Vd = \sqrt{2}Vg_{rms}$ y la componente en eje en cuadratura *Vq* es cero.
Asunción 3. El voltaje V_{Cpv} y corriente I_{pri} de la celda fotovoltaica son medibles.
Asunción 4. La corriente I_{pri} es delimitada conociendo que el voltaje V_{Cpv} es delimitado.
Asunción 5. La referencia de corriente I_{ref} es delimitada y suficientemente diferenciable.

3.1 Modelo del sistema

El circuito equivalente del sistema sin tomar en cuenta el efecto del filtro de salida es indicado en la Figura 3. Considerando que la resistencia Rs representa la resistencia serie interna del diodo anti-retorno conectado entre el capacitor de filtro C_{pv} y la celda fotovoltaica, y que la corriente i_{Lm} en la inductancia de magnetización L_m es igual a la corriente del primario i_{pri} durante el tiempo de activado del transistor T1, las ecuaciones del modelo continuo son indicadas a continuación (Fonkwe et al., 2014).

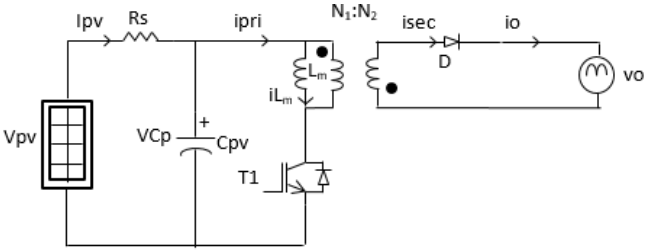


Figura 3. Modelo del inversor tipo Flyback

$$\dot{V}_{Cpv} = -\frac{V_{Cpv}}{R_s C_{pv}} - \frac{D}{C_{pv}} I_{pri} + \frac{Vpv}{R_s C_{pv}} \tag{13}$$

$$\dot{I}_{pri} = \frac{D.V_{Cpv}}{L_m} - \frac{(1-D)}{N.L_m} V_o \tag{14}$$

Para conseguir la corriente deseada y de esta manera controlar la potencia activa abastecida a la red eléctrica, la señal de error $e_1(t)$ y su derivada son definidas como:

$$e_1 \triangleq I_{pri} - I_{ref} \tag{15}$$

$$\dot{e}_1 \triangleq \dot{I}_{pri} - \dot{I}_{ref} \tag{16}$$

donde $e_1(t) \in \mathbb{R}$.

El sistema en lazo abierto es desarrollado reemplazando la ecuación (14) en (16) como sigue:

$$L_m \dot{e}_1 = DV_{Cpv} - \frac{(1-D)}{N} V_0 - L_m \dot{I}_{ref} \tag{17}$$

Para asegurar que la señal de error $e_1(t) \to 0$ conforme $t \to \infty$, la señal en lazo cerrado del error se escoge como:

$$L_m \dot{e}_1 = -K_1 e_1 \tag{18}$$

donde $K_1 \in \mathbb{R}^+$ y representa la ganancia de control.

Substituyendo (18) en (17), luego de algunas operaciones matemáticas y considerando que $V_0 = |V_g|$ se obtiene la expresión que determina la señal de la relación de trabajo *D*.

$$D = \left(-K_1 e_1 + \frac{|V_g|}{N} + L_m \dot{I}_{ref} \right) \frac{1}{\left(V_{Cpv} + \frac{|V_g|}{N} \right)} \tag{19}$$

donde $|V_g|$ es valor pico de la señal rectificada del voltaje de la red.

3.2 Análisis de la estabilidad

Se escoge una función de Lyapunov no-negativa como sigue:

$$V_1 \triangleq \frac{1}{2} L_m e_1^2 \tag{20}$$

La derivada de la Ecuación (20) es:

$$\dot{V}_1 = e_1 L_m \dot{e}_1 \tag{21}$$

Para garantizar que la señal de error $e_1(t) \to 0$ conforme $t \to \infty$, la señal en lazo cerrado del error es definida por la Ecuación (18). Luego, reemplazando (18) en (21) se obtiene la siguiente expresión:

$$\dot{V}_1 = -K_1 e_1^2 \tag{22}$$

Puesto que la ganancia de control $K_1 \in \mathbb{R}^+$ es claro evidenciar que (22) es una función negativa definida. De Ecuación (22), $\dot{V}_1$ puede ser delimitada por el límite superior de la siguiente manera:

$$\dot{V}_1 \leq -K_1 e_1^2 \tag{23}$$

De Ecuaciones (20) y (22) la señal de error e_1 es delimitada. De asunción 4 y conociendo que la señal de error e_1 es delimitado, de la ecuación (15) se concluye que I_{ref} es delimitada.

Tomando en cuenta la asunción 1, 2 y 5 conjuntamente con lo delimitaciones demostradas anteriormente, de la Ecuación (19) se puede determinar que D es delimitado. De lo demostrado arriba y la Ecuación (14) $\dot{I}_{pri}$ es circunscrita. Entonces, conociendo que $\dot{I}_{ref}$ es delimitada de acuerdo a asunción 5 y tomando en cuenta la Ecuación (16), se puede determinar que $\dot{e}_1$ es delimitada. Finalmente, utilizando el teorema de estabilidad exponencial, propuesto por Khalil (2015), se puede demostrar que el origen; $e_1(t) = (0)$, es globalmente estable de manera exponencial.

4. RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

El paquete de simulación Matlab/Simulink con Simscape Power System se utilizó para modelar la dinámica del circuito del sistema fotovoltaico el que incluye el controlador no-linear. La simulación numérica fue desarrollada para validar el diseño del sistema de control. Los parámetros del sistema fotovoltaico son indicados en la Tabla 1, en donde el valor del capacitor del filtro C_{pv} fue calculado de acuerdo a Hasan et al. (2017). El valor de la constante K_1 del controlador fue determinado por el método de ensayo y error hasta que la señal de error $e_1(t)$ en estado estable sea cero. Los valores de C_f y L_f fueron determinados para eliminar el rizado de las componentes de la frecuencia f_s de la corriente de salida de acuerdo a Macedo et al. (2016) y El Iysaouy et al. (2018).

4.1 Cálculo de la Inductancia Crítica

Para el cálculo de la inductancia crítica se consideran los parámetros de voltaje y corriente de la celda fotovoltaica

indicados en la Tabla 1 para obtener la potencia máxima a una irradiación de $1000W/m^2$.
De Ecuación (12), considerando la relación de transformación N=10 para obtener el voltaje pico de la red eléctrica igual a $\sqrt{2}V_g$ y una frecuencia de conmutación $f_s = 24KHz$, se obtiene lo siguiente:

$$Lm_{critico} = 5{,}56x10^{-6}$$

Tabla 1. Parámetros del Sistema Fotovoltaico

MPP de la Celda a 25 ^0C			
Irradiancia (W/m²)	**Corriente Ipv (A)**	**Voltaje Vpv (V)**	**Potencia P (W)**
600	4,79	18,11	86,75
800	6,37	17,89	113,96
1000	7,94	17,6	139,9
Parámetro	**Valor**	**Parámetro**	**Valor**
C_{pv}	$12mF$	N	10
C_f	$2{,}2uF$	f	$60Hz$
L_f	$10mH$	V_g	$120\ Vrms$
L_m	$0{,}004mH$	K_1	2,7
$f_s = 24\ KHz$			

Para garantizar conducción discontinua, la inductancia para conducción discontinua Lm_{DCM} debe ser menor que $Lm_{critico}$, luego se asume que:

$$Lm_{DCM} = 80\%Lm_{critico}$$

$$Lm_{DCM} \approx 4{,}4 * 10^{-6}$$

Con este valor de inductancia, se verifica si las relaciones de trabajo pico, calculadas utilizando la Ecuación (10), coinciden con los valores obtenidos de la simulación aplicando el control no-lineal para distintos valores de irradiación.

$$D(t)_{1000W/m2} = 2\sqrt{\frac{7{,}94 * 0{,}004 * 10^{-3} * 24 * 10^{3}}{17{,}6}}|sinwt|$$

$$D(t)_{1000W/m2} = 0{,}41|sinwt|$$
$$D(t)_{800W/m2} = 0{,}36|sinwt|$$
$$D(t)_{600W/m2} = 0{,}31|sinwt|$$

La Figura 4 indica la relación de trabajo D(t) obtenida del controlador multiplicada por una señal unitaria sinusoidal rectificada para valores de irradiación que varían de $600W/m^2$ a $800W/m^2$, a $1000W/m^2$ y finalmente a $800W/m^2$ en tiempos t=0,0.4,0.8,1.2 segundos. Como se puede ver en esta figura, los valores pico obtenidos del controlador son similares a los determinados analíticamente y la relación de trabajo varía de acuerdo a $|sinwt|$.

La Figura 5 indica las formas de onda de la corriente del primario i_{pri} y las corrientes en los secundarios del trasformador i_{sec1} y i_{sec2}. Como se puede ver en esta figura, la corriente del primario tiene una envolvente sinusoidal rectificada con un pico de 75,4 A cuando la irradiancia es de $1000\ W/m^2$. De igual manera, las corrientes del secundario tienen un pico de 7,53 A corroborando la relación de transformación de $N = 10$ considerada en este diseño. Es importante anotar que la desventaja del alto valor de la corriente pico cuando se trabaja en el modo de conducción discontinua es compensada por la facilidad de diseño del controlador no-lineal propuesto y la calidad de la energía obtenida.

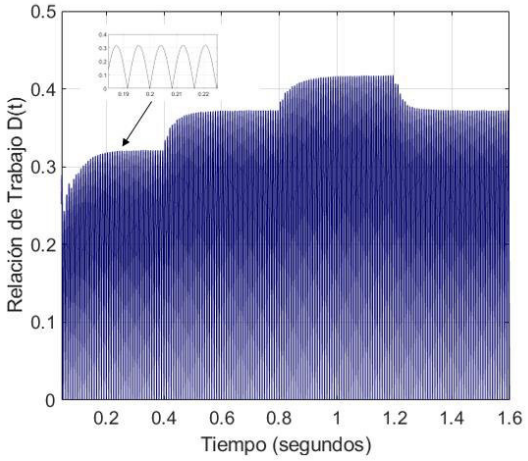


Figura 4. Forma de onda de la relación de trabajo $D(t)$

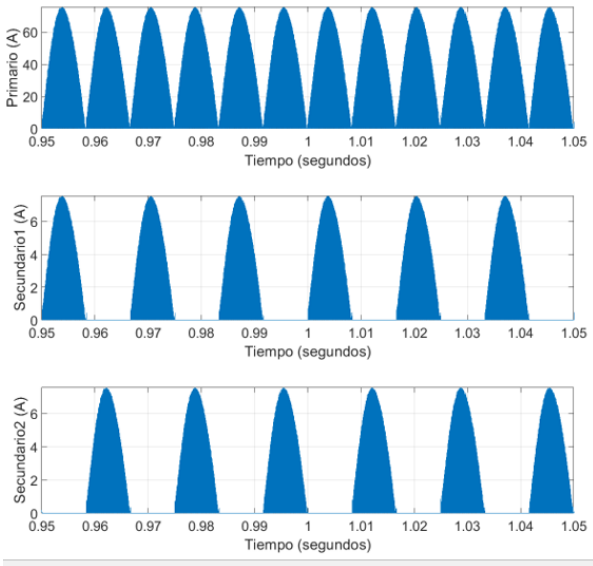


Figura 5. Formas de onda de la corriente del primario i_{pri} y las corrientes del secundario i_{sec1} y i_{sec2} a una irradiancia de $1000W/m^2$

4.2 Cambio de la Irradiancia

Para verificar el correcto funcionamiento del controlador propuesto ante cambios bruscos de las condiciones atmosféricas, la irradiancia fue cambiada en pasos desde $600\ W/m^2$ a $800\ W/m^2$ a $1000\ W/m^2$ y luego una reducción a $800W/m^2$ en tiempos t=0, 0.4, 0.8,1.2 segundos respectivamente manteniendo la temperatura en 25°C. La Figura 6 indica la corriente de referencia I_{ref}, obtenida del algoritmo Conductancia Incremental (IC); algoritmo adoptado en este trabajo debido a sus aplicaciones y buen desenvolvimiento en el seguimiento del MPP tal como manifiesta Ezinwanne et al. (2016), y el valor medio de la corriente del primario I_{pri}.

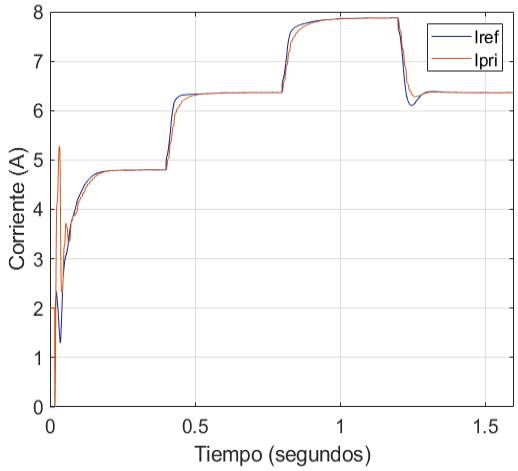


Figura 6. Formas de onda de la corriente de referencia Iref y el valor medio de la corriente del primario I_{pri}

Como se puede ver en esta figura, la corriente I_{pri} sigue la referencia de corriente I_{ref}. Además, se puede ver en esta figura que en estado estable los valores medios de la corriente son aproximadamente iguales a los especificados por el fabricante del panel fotovoltaico para irradiancias de $600W/m^2$, $800W/m^2$ y $1000W/m^2$, validando de esta manera el uso del algoritmo IC para obtener una corriente de referencia al cual se obtiene la máxima potencia y el algoritmo de control propuesto.

La potencia de salida P_{pv} obtenida del sistema fotovoltaico y la potencial máxima ideal es indicado en la Figura 7. Se puede ver en esta figura que la Potencia P_{pv} tiene una pequeña desviación de aproximadamente 2.2 W dando una eficiencia de aproximadamente 99.1 % tomando como base la Potencia máxima ideal. Porcentaje aceptable al utilizar el algoritmo de Conductancia Incremental tal como el presentado por Kareim et al. (2013).

Para ver la respuesta de la corriente inyectada a la red ante cambios bruscos de la irradiación, para efectos de visualización y análisis, se toma el intervalo de tiempo entre 1.1 seg. y 1.3 seg. tal como se indica en la Figura 8. De igual manera, para efectos de visualización la forma de onda de corriente fue escala en 10 veces. La Figura 8 indica el voltaje y la corriente inyectada a la red cuando la irradiancia cambia de $1000W/m^2$ a $800W/m^2$ en el tiempo t=1.2 segundos. Como se puede ver en la figura, cuando la irradiancia disminuye de $1000W/m^2$ a $800W/m^2$, la corriente disminuye de 16 Apico a 13.2 Apico (valores escalados). Además, se puede ver que la corriente inyectada a la red es sinusoidal y en fase con el voltaje de la red con un factor de potencia aproximado a la unidad inclusive en los puntos de cambios de la irradiancia, validando de esta manera la efectividad y rigidez del sistema fotovoltaico propuesto con control nolineal de la corriente del primario.

La Figura 9 indica la distorsión armónica total (TDH) para una irradiancia de $800W/m^2$. Se puede ver que el THD es de aproximadamente del 4.19% lo cual cumple con los límites especificados en las normas IEEE-519.

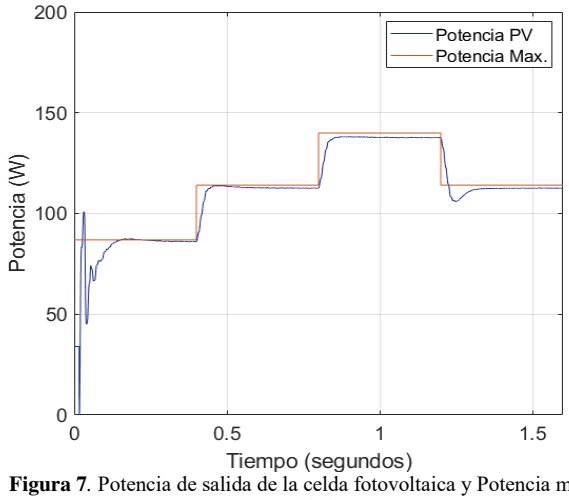


Figura 7. Potencia de salida de la celda fotovoltaica y Potencia máxima ideal

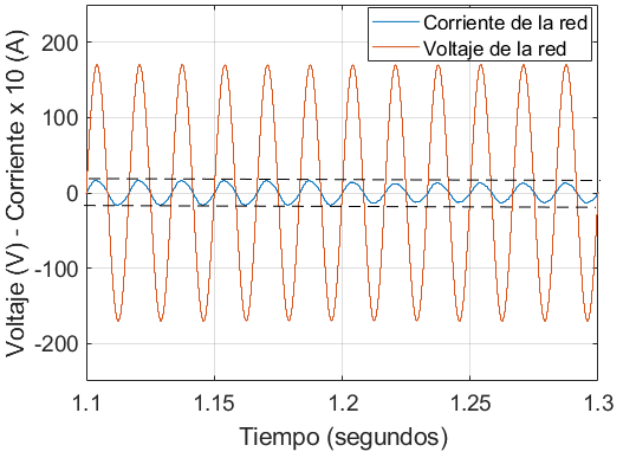


Figura 8. Voltaje y corriente de la red ante un cambio brusco de la irradiación al tiempo t=1.2 segundos

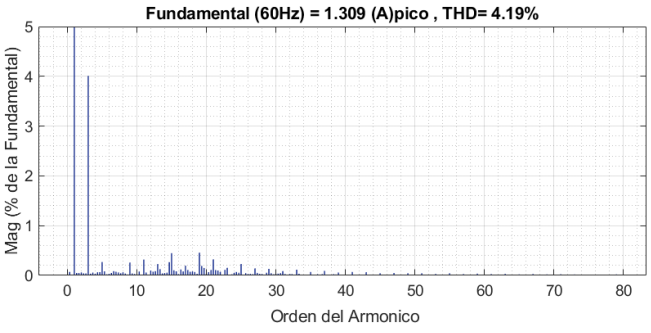


Figura 9. Distorsión armónica total de la corriente de la red a $800W/m^2$

5. CONCLUSIONES

Se demostró que el control nolineal propuesto fue efectivo en seguir la referencia de corriente obtenida del MPPT.

Se demostró la efectividad y robustez del control no lineal en inyectar una corriente sinusoidal a la red eléctrica con factor de potencia muy cercano a la unidad ante cambios bruscos de la irradiancia.

Con el método de control propuesto no existe distorsión en los cruces por cero de la corriente alimentada a la red tal como lo

manifiesta Li et al. (2012) debido a la conmutación alternada de los transistores del inversor, demostrando la efectividad del controlador en la obtención de una onda de corriente sinusoidal.

Sin embargo, de la desventaja que tienen este tipo de conversores al trabajar en el modo de conducción discontinua debido a la necesidad transistores con altos valores de corriente, esto se ve compensado por la sencillez del control nolineal propuesto y la calidad de energía y eficiencia obtenida.

REFERENCIAS

Abbou A., Skik N, (2016). Robust Adaptive Integral Backstepping Control for MPPT and UPF of PV System Connected to the Grid. *7th International Renewable Energy Congress (IREC)*, 1-6. https://doi.org/10.1109/IREC.2016.7478857

Dai M, Marwali M, Jung J, Keyhani A. (2008). A Three-Phase Four-Wire Inverter Control Technique for a Single Distributed Generation Unit in Island Mode. *IEEE Transactions on Power Electronics,*23(1), 322-331. DOI: 10.1109/TPEL.2007.911816

El Iysaouy L, Baskys A., Bielskis E, Lahbabi M, Oumnad A. (2018). Impact of Flyback Transformer and Switch Parameters on Efficiency of Single Stage Photovoltaic Microinverter. *IEEE 2018 Open Conference of Electrical, Electronic and Information Sciences*, 1-5. doi:10.1109/eStream.2018.8394122

Ezinwanne O, Zhongwen F, Zhijun L. (2016). Energy Performance and Cost Comparison of MPPT Techniques for Photovoltaics and other Applications. *3rd International Conference on Energy and Environment Research, ICEER,* 107, 297-303. DOI: 10.1016/j.egypro.2016.12.156

Fonkwe E, Xiao W, Khadkikar V. (2014). Dynamic Modeling and Control of Interleaved Flyback Module-Integrated Converter for PV Power Applications. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 61(3),1377-1388. DOI: 10.1109/TIE.2013.2258309

Hamad M, Fahmy A, Abdel-Geliel M. (2013). Power Quality Improvement of a Single-Phase Grid- Connected PV System with Fuzzy MPPT Controller. *39th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics,*1839-1844. DOI: 10.1109/IECON.2013.6699411

Hasan R, Mekhilef S, Seyedmahmoudian M, Horan B. (2017). Grid-connected Insolated PV Microinverters: A Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 67, 1065-1080. DOI: 10.1016/j.rser.2016.09.082

Islam M, Mekhilef S, Hasan M. (2015). Single Phase Transformerless Inverter Topologies for Grid-Tied Photovoltaic System: A Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 46. DOI: 10.1016/j.rser.2015.01.009

Ji Y, Jung D, Kim J.G, Kim J.H, Lee T, Won C. (2011). A Real Maximum Power Point Tracking Method for Mismatching Compensation in PV Array Under Partially Shaded Conditions. *IEEE Transactions on Power Electronics,* 26(4), 1001-1009.

Kareim A, Mansor M. (2013). Efficiency improvement of the maximum power point tracking for PV systems using support vector machine technique. *4th International Conference on Energy and Environment*, 16, 1-10. DOI: 10.1088/1755-1315/16/1/012099

Khalil H. (2015). *Nonlinear Control.* Edinburgh, England: Pearson.

Lee S, Cha W, Kwon B, Kin M. (2016). Discrete-Time Repetitive Control of Flyback CCM Inverter for PV Power Applications, *IEEE Transactions on Industrial Electronics*,63(2), 976-984. DOI: 10.1109/TIE.2015.2477484

Lee S, Cha W, Kwon J, Kwon B. (2016). Control Strategy of Flyback Microinverter with Hybrid Mode for PV AC Modules. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 63(2), 995-1002. DOI: 10.1109/TIE.2015.2481365

Li Y, Oruganti R. (2012). A Low Cost Flyback CCM Inverter for AC Module Application. *IEEE Transactions on Power Electronics,* 27(3), 1295-1303. DOI: 10.1109/TPEL.2011.2164941

MacAlpine S, Erickson R, Brandemuehl M. (2013). Characterization of Power Optimizer Potential to Increase Energy Capture in Photovoltaic Systems Operating Under Non-Uniform Conditions. *IEEE Transactions on Power Electronics,* 26(4), 2936 – 2945. DOI: 10.1109/TPEL.2012.2226476

Macedo G, Martins D, Coelho R. (2016). Design and Comparative Analysis of CL, CLCL and Trap-CL filters for Current Source Inverters, *12th IEEE International Conference on Industry Applications (INDUSON)*, 1-8.

Romero E, Spagnuolo G, Franquelo L, Ramos C, Suntio T, Xiao W. (2013). Grid Connected Photovoltaic Generations Plants. *IEEE Industrial Electronics Magazine,* 6(3), 6-20. DOI: 10.1109/MIE.2013.2264540

Zhang Z, He X, Liu Y. (2013). An Optimal Control Method for Photovoltaic Grid-Tied-Interleaved Flyback Microinverters to Achieve High Efficiency in Wide Load Range. *IEEE Transactions on Power Electronics*, 28(11), 5074 – 5087. DOI: 10.1109/TPEL.2013.2245919

BIOGRAFÍAS

Pablo R. Rivera. Se graduó de Ingeniero en Electrónica y Control en la Escuela Politécnica Nacional, Ecuador en 1986. Obtuvo el grado Master of Science in Power Electronics en la Universidad de Bradford, Inglaterra en 1993, y el grado de PhD. in Electrical Engineering en la Universidad de Louisville, U.S.A. en 2018. Durante su estancia en la Universidad de Louisville, se unió al grupo de Investigación de Sistemas de Energía Eléctrica. Es profesor de la Facultad de Ingeniería y Electrónica de la Politécnica Nacional. Ha dirigido algunos proyectos de grado y de investigación y ha ocupado cargos tales como Coordinador de Carrera, de Postgrado y Decano de la Facultad de Ingeniería Eléctrica y Electrónica. ORCID: https://orcid.org/0000-0002-1228-2063

Nelson Gonzalo Sotomayor Orozco, MSc. Nació en Quito-Ecuador en septiembre de 1971. Se graduó en la Escuela Politécnica Nacional como Ingeniero en Electrónica y Control en 1999. Obtuvo su título de Magíster en Ingeniería industrial en junio del 2006 en la Escuela Politécnica Nacional. En septiembre del 2008 como becario del Gobierno de México y la Agencia de Cooperación Internacional del Japón (JICA), participó en el IV Curso Internacional de Robótica Aplicada, en el Centro Nacional de Actualización Docente CNAD, CD México. Trabaja como Profesor Principal T/C en el Departamento de Automatización y Control Industrial de la Escuela Politécnica Nacional. Fue Jefe del Departamento de Automatización y Control Industrial (2011- 2013). Desde abril del 2017 se desempeña como Coordinador de la Carrera de Ingeniería en Electrónica y Control. Código ORCID: https://orcid.org/0000-0001-8446-001X

Preparación de Artículos para la Revista Politécnica Utilizar Mayúsculas en cada Palabra en el Caso del Título

Resumen: Las siguientes instrucciones establecen las pautas para la preparación de artículos para la Revista Politécnica. Los artículos pueden ser escritos en español o en inglés, pero tendrán un resumen de máximo 250 palabras en los dos idiomas. Los autores pueden hacer uso de este documento como una plantilla para componer su artículo si están utilizando Microsoft Word 2013 o superior. Caso contrario, este documento puede ser utilizado como una guía de instrucciones. El número mínimo de páginas será 6 y el máximo 15, Para el envío de los artículos, los autores deben seguir las instrucciones colocadas en el sistema de recepción de artículos del sitio web de la Revista Politécnica (revistapolitecnica.epn.edu.ec). En caso de que su artículo sea en inglés colocar el título y el resumen en los dos idiomas.

Palabras clave: Incluir una lista de 3 a 6 palabras.

Title of Manuscript

Abstract: These instructions give you guidelines for preparing papers for EPN Journal. Papers can be written in Spanish or English; however, an abstract of maximum 250 words and written in both languages is required. Use this document as a template to compose your paper if you are using Microsoft Word2013 or later. Otherwise, use this document as an instruction set. The minimum number of pages will be 6 and the maximum will be 15. For submission guidelines, follow instructions on paper submission system from the EPN Journal website(revistapolitecnica.epn.edu.ec).

Keywords:Include a list of 3 to 6 words.

1. SECCIÓN I

Este documento es una plantilla para versiones Microsoft Word 2013 o posteriores. Si está leyendo una versión impresa de este documento, por favor descargue el archivo electrónico, **revistapolitécnicaformato2020.docx**. En caso de que el autor desee enviar el artículo en formato LaTex por favor comunicarse con la coordinación de edición (epnjournal@epn.edu.ec). *Por favor, no coloque numeración ni pie de página en el documento presentado.*

No cambie los tamaños de fuente o espaciado de renglones para ajustar el texto a un número limitado de páginas. Utilice cursiva o negrita para dar énfasis a un texto, no subrayado.

2. SECCIÓN II

Para las pautas de presentación, siga las instrucciones emitidas por el sistema del sitio web de la revista de la EPN.

La presentación inicial debe tomar en cuenta todas las indicaciones que se presentan en la plantilla, para de esta manera tener una buena estimación de la longitud del artículo a publicarse. Además, de esta manera el esfuerzo necesario para la presentación final del manuscrito será mínimo.

Como sugerencia, es importante tomar en cuenta que, el primer autor es el investigador que hizo la mayor parte del trabajo, mientras que el último autor suele ser el profesor quien es el líder intelectual y, a menudo edita y presenta el borrador final del documento.

La Revista Politécnica pondrá en marcha un sistema de transferencia electrónica de derechos de autor en su momento. Por favor, "no" enviar formularios de derecho de autor por correo o fax. A continuación se detallan las consideraciones que se deben tener en cuenta para la presentación final del artículo.

3. SECCIÓN III

3.1 Figuras, tablas y márgenes

Todas las figuras deben ser incorporadas en el documento. Al incluir la imagen, asegúrese de insertar la actual en lugar de un

enlace a su equipo local. Los archivos de: figuras, dibujos, fotografías, etc., deberán enviarse en formato png, con al menos 1200 puntos (resolución) en uno de sus ejes, con leyendas legibles y de tamaño adecuado. El artículo debe contener entre tablas y figuras un máximo de 10.

Las etiquetas de los ejes de las figuras son a menudo una fuente de confusión. Utilice las palabras en lugar de símbolos. Por ejemplo, escriba la cantidad "Magnetización," o "Magnetización M" no sólo "M".

Las figuras y tablas deben estar en la parte superior e inferior de las columnas. Evite colocarlas en medio de ellas. Las figuras y tablas grandes pueden extenderse a lo largo de ambas columnas. Las leyendas de las figuras deben estar centradas debajo de las figuras, los títulos de las tablas deben estar centrados sobre ellas. Evite colocar figuras y tablas antes de su primera mención en el texto. Para la mención de figuras, tablas o ecuaciones utilice las palabras completas con la primera letra en mayúscula, por ejemplo "Figura 1".

Coloque las unidades entre paréntesis. No etiquete los ejes sólo con unidades. Por ejemplo, escriba "Magnetización (A/m)" o "Magnetización (Am^{-1})", no sólo "Magnetización A/m." No etiquete los ejes con una relación de cantidades y unidades. Por ejemplo, escriba "Temperatura (K)", no "Temperatura K".

Los multiplicadores pueden ser especialmente confusos. Escriba "Magnetización (kA/m)" o "Magnetización (103A/m)". No escriba "Magnetización (A/m) x 1000" porque el lector no sabrá si la etiqueta del eje de arriba significa 16000 A/m o 0,016 A/m. Las etiquetas de las figuras deben ser legibles, con un valor de 8 y sin espacio de separación con la figura.

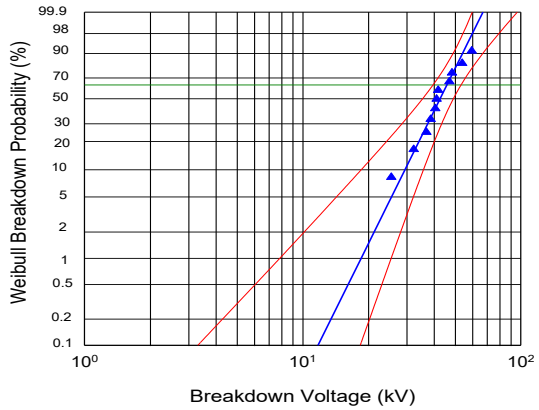


Figura 1. *Distribución* Weibull de 60 Hz voltajes de ruptura11 cables α = 45,9 kV picoβ = 5,08.Intervalo de Confidencia 95%

Los autores deben trabajar activamente con los márgenes solicitados. Los documentos de la revista serán marcados con los datos del registro de la revista y paginados para su inclusión en la edición final. Si la sangría de los márgenes en su manuscrito no es correcta, se le pedirá que lo vuelva a presentar y esto, podría retrasar la preparación final durante el proceso de edición.

Por favor, no modificar los márgenes de esta plantilla. Si está creando un documento por su cuenta, considere los márgenes que se enumeran en la Tabla 1. Todas las medidas están en **centímetros**.

Tabla 1.Márgenes de página

Página	Superior	Inferior	Izquierda/ Derecha
Primera	2,0	2,5	1,5
Resto	2,0	2,5	1,5

3.2 Ecuaciones

Si está usando MSWord, sugerimos utilizar el *Editor de ecuaciones de Microsoft* o el *MathType*add-on para las ecuaciones en su documento (*Insertar/Objeto/Crear Nuevo/Microsoft Ecuación o Ecuación MathType*). La opción "flotar sobre el texto" no se debe elegir.'

Enumere las ecuaciones consecutivamente con los números de la ecuación en paréntesis contra el margen derecho, como en (1). Utilice el editor de ecuaciones para crear la ecuación y esta debe estar localizada en el margen derecho, como se muestra en el ejemplo siguiente:

$$\int_0^{r_2} F(r,\varphi)\, dr\, d\varphi = [\sigma r_2 / (2\mu_0)] \qquad (1)$$

Asegúrese de que los símbolos en su ecuación han sido definidos antes de que aparezcan en la ecuación o inmediatamente después. Ponga en cursiva los símbolos (T podría referirse a la temperatura, pero T es la unidad tesla). Para referirse a la ecuación se escribe por ejemplo "Ecuación (1) "

3.3 Unidades

Utilice el SI como unidades primarias. Otras unidades pueden ser utilizadas como unidades secundarias (en paréntesis). Por ejemplo, escriba "15 Gb/cm^2 (100 Gb/in^2)". Evite combinar las unidades del SI y CGS, como la corriente en amperios y el campo magnético en oerstedios. Esto a menudo lleva a confusión porque las ecuaciones no cuadran dimensionalmente. Si tiene que usar unidades mixtas, aclare las unidades para cada cantidad en una ecuación.

Por ejemplo, en el SI la unidad de fuerza de campo magnético Hes A/m. Sin embargo, si desea utilizar unidades de T, o bien se refiere a la densidad de flujo magnético B o la fuerza del campo magnético simbolizadas como $\mu_0 H$. Use un punto en el centro para separar las unidades compuestas, por ejemplo, "$A \cdot m^2$."

3.4 Abreviaturas y Siglas

Defina las abreviaciones y acrónimos la primera vez que se utilizan en el texto, incluso después de que ya han sido definidos en el resumen. No utilice abreviaturas en el título a menos que sea inevitable.

3.5 Otras recomendaciones

- Para expresar valores decimales se usarán comas, por ejemplo 3,45. Use un cero antes del decimal.
- Se incluirá un espacio entre números para indicar los valores de miles, por ejemplo 463 690.
- Utilice notación científica para expresar números con más de 3 cifras hacia la derecha o izquierda, es decir, mayores a 2,50E+05 o menores a 4,8E-03.
- Finalmente, de ser necesario y de manera opcional, se pueden incluir conclusiones, recomendaciones y agradecimiento.

REFERENCIAS

La lista de **referencias debe estar en Formato APA ordenada alfabéticamente** de acuerdo con el apellido del primer autor del artículo. El agregado et al no debe ir en cursiva. Por favor nótese que todas las referencias listadas aquí deben estar directamente citadas en el cuerpo del texto usando (Apellido, año). Las notas al pie deben evitarse en la medida de lo posible.
El artículo debe contener un mínimo de 6 referencias.

Seguir el formato indicado a continuación de acuerdo al tipo de referencia a:

Formato básico para referenciar libros:

Apellido, Inicial Nombre. (Año). *Título del libro.* Ciudad, País: Editorial.

- **Libros con un autor:**

En las referencias:
King, M. (2000). *Wrestling with the angel: A life of Janet Frame.* Auckland, New Zealand: Viking.

Cita en el texto:
(King, 2000) o King (2000) argumenta que ...

- **Libros con dos autores:**

En las referencias:
Treviño, L. K., y Nelson, K. A. (2007). *Managing business ethics: Straight talk about how to do it right*. Hoboken, NJ: Wiley

Cita en el texto:
(Treviño y Nelson, 2007) oTreviño y Nelson (2007) ilustran…

- **Libros con dos o más autores:**

En las referencias:
Krause, K.-L., Bochner, S., y Duchesne, S. (2006). *Educational psychology for learning and teaching* (2nd ed.). South Melbourne, VIC., Australia: Thomson.

Cita en el texto:
De acuerdo con Mezey et al. (2002) o ... (Mezey et al., 2002).

Formato básico para referenciar artículos científicos

Apellido, Inicial Nombre. (Año). Título del Artículo. *Título/Iniciales de la Revista.* Número de Volumen (Tomo), páginas

- **Artículos en revistas:**

En las referencias:
Sainaghi, R. (2008). Strategic position and performance of winter destinations. *TourismReview, 63*(4), 40-57.

Cita en el texto:
(Sainaghi, 2008) oSainaghi (2008) sugiere ...

- **Artículos con DOI**

En lasreferencias:
Shepherd, R., Barnett, J., Cooper, H., Coyle, A., Moran-Ellis, J., Senior, V., & Walton, C. (2007). Towards an understanding of British public attitudes concerning human cloning. *Social Science& Medicine, 65*(2), 377-392. http://dx.doi.org/10.1016/j.socscimed.2007.03.018

Cita en el texto:
Shepherd et al. (2007) o Shepherd et al. (2007) resaltan la...

- **Artículos sin DOI**

En las referencias
Harrison, B., & Papa, R. (2005). The development of an indigenous knowledge program in a New Zealand Maori-language immersion school. *Anthropology and EducationQuarterly, 36*(1), 57-72. Obtenido de la base de datos AcademicResearch Library

Cita en el texto:
(Harrison y Papa, 2005) o En su investigación, Harrison y Papa (2005) establecieron...

- **Artículos en línea**

En lasreferencias:
Snell, D., & Hodgetts, D. (n.d.). The psychology of heavy metal communities and white supremacy. *Te KuraKeteAronui, 1*. Obtenido de: http://www.waikato.ac.nz/wfass/tkka. (Mayo, 2015).

Cita en el texto:
(Snell y Hodgetts, n.d.) oSnell y Hodgetts (n.d.) identificaron "..."

INDEXACIONES

revistapolitecnica.epn.edu.ec

ESCUELA
POLITÉCNICA
NACIONAL

EPN
editorial

revistapolitecnica.epn.edu.ec
www.epn.edu.ec

ESCUELA
POLITÉCNICA
NACIONAL

EPN
editorial

revistapolitecnica.epn.edu.ec
www.epn.edu.ec