



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

Análisis de un sistema de combustión alimentado con
combustibles sostenibles (e-fuels) usando redes
neuronales

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Mecánica

AUTOR/A: Carrabs Goncalves, Leonel Alfonso

Tutor/a: Bracho León, Gabriela Cristina

CURSO ACADÉMICO: 2021/2022



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

TRABAJO FINAL DEL

REALIZADO POR

TUTORIZADO POR

CURSO ACADÉMICO: 2021/2022

“El éxito no es un accidente. Es trabajo duro, perseverancia, aprendizaje, estudio, sacrificio y, sobre todo, amor por lo que estás haciendo o aprendiendo a hacer.”

Pelé

Resumen

Los procesos físico-químicos que ocurren en la cámara de combustión de sistemas de propulsión actuales se caracterizan por ser complejos y no-lineales. En general, la predicción de estos procesos se realiza a partir de modelos de dinámica de fluido computacional (CFD), los cuales son modelos que han sido altamente desarrollados, pero son costosos.

En este trabajo se propone una metodología alternativa para predecir parámetros relevantes del proceso de combustión, como son las emisiones contaminantes y el rendimiento. La metodología consiste en implementar técnicas de redes neuronales (Machine Learning - ML), que permitan reproducir el comportamiento no lineal de las variables de estudio, y que proporcionen resultados en un tiempo razonable de cálculo. Los parámetros que definen el sistema de combustión y que se varían durante el estudio son 5: número de orificios del inyector, ángulo del chorro, presión de inyección de combustible, número de swirl y tasa de EGR. Posteriormente, utilizando el modelo simulado, se propone reducir las emisiones contaminantes NO_x y aumentar el rendimiento térmico del motor.

Abstract

The physical-chemical processes that occur in the combustion chamber of current propulsion systems are characterized by being complex and non-linear. In general, the prediction of these processes is made from Computational Fluid Dynamics (CFD) models, which have been highly developed, but are expensive.

In this work, an alternative methodology is proposed to predict relevant parameters of the combustion process, such as pollutant emissions and efficiency. The methodology consists of implementing neural network techniques (Machine Learning - ML), which allow reproducing the non-linear behavior of the studied variables providing results in a reasonable calculation time. The parameters that define the combustion system and vary during the study are five: number of injector holes, jet angle, fuel injection pressure, swirl number and EGR rate. Subsequently, using the simulated model, it is proposed to reduce NO_x pollutant emissions and increase the efficiency of the engine.

Resum

Els processos físic-químics que ocorren en la cambra de combustió de sistemes de propulsió actuals es caracteritzen per ser complexos i no-lineals. En general, la predicció d'aquests processos es realitza a partir de models de dinàmica de fluid computacional (CFD), els quals són models que han sigut altament desenvolupats, però són costosos.

En aquest treball es proposa una metodologia alternativa per a predir paràmetres rellevants del procés de combustió, com són les emissions contaminants i el rendiment. La metodologia consisteix a implementar tècniques de xarxes neuronals (Machine Learning - ML), que permeten reproduir el comportament no lineal de les variables d'estudi, i que proporcionen resultats en un temps raonable de càlcul. Els paràmetres que defineixen el sistema de combustió i que es varien durant l'estudi són 5: nombre d'orificis de l'injector, angle del doll, pressió d'injecció de combustible, número de swirl i taxa de EGR. Posteriorment, utilitzant el model simulat, es proposa reduir les emissions contaminants NO_x i augmentar el rendiment tèrmic del motor.

Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a mi tutora Gabriela Cristina Bracho León, quien con todos sus conocimientos me guio a través de todo el trayecto de esta investigación para lograr los resultados que se buscaban, resolviendo cualquier duda y cualquier problema que se presentaba. En especial, estoy agradecido por animarme cuando no veía posible realizar este proyecto en simultáneo con mi trabajo.

También, quiero agradecer a la Universidad Simón Bolívar y a la Universidad Politécnica de València por brindarme todas las herramientas y competencias que fueron necesarias para llevar a cabo este proyecto y que, me ayudan constantemente a seguir desarrollándome como profesional. Ambas organizaciones me ayudaron a desarrollar habilidades totalmente distintas que definen quien soy actualmente.

Por último, agradecer a mi familia y amigos, por apoyarme constantemente durante estos años de estudios aun cuando mis ganas desaparecían algunas veces. Gracias a esos compañeros de estudio que me ayudaron a hacer más llevadero este camino y que actualmente se convirtieron en compañeros de aventura.

Índice de contenidos

I. MEMORIA	1
1. Introducción	3
1.1. Objetivos	3
1.2. Motivación	3
1.3. Justificación	4
1. Estado del arte del motor	5
1.1. Consideraciones previas.....	5
1.1.1. Motores de cuatro tiempos (4T)	7
1.1.2. Motores de dos tiempos (2T).....	8
1.2. Diferencias MEC Y MEP	9
1.2.1. Eficiencia térmica	10
1.3. Motores de encendido por compresión (MEC).....	11
1.3.1. Análisis termodinámico (Ciclo de trabajo)	11
1.3.2. Inyección	12
1.3.3. Combustión	14
1.3.4. Emisiones contaminantes en la combustión.....	15
3. Uso de e-fuels para sistemas de transporte sostenibles	18
3.1. Estructura química de los combustibles	18
3.2. Propiedades de los combustibles.....	19
3.3. E-fuel utilizado (Éter de Oximetileno).....	20
3.4. Sistema de combustión a estudiar	22
4. Herramientas y métodos numéricos.....	23
4.1. OpenFOAM (CFD)	23
4.2. Statgraphics.....	24
4.2.1. Regresión simple	26
4.2.2. Regresión No Lineal.....	30
4.3. Matlab	33
4.3.1. Machine Learning y redes neuronales	33
4.3.2. Regression Learner APP.....	36

5.	Metodología.....	38
5.1.	Variables a estudiar.....	38
5.1.1.	Variables principales	38
5.1.2.	Variables secundarias o no estudiadas	40
5.2.	Punto de operación del motor	40
5.3.	Pasos iniciales.....	41
5.3.1.	Filtrado de datos por Función Objetivo	41
5.3.2.	División de datos (70% y 30%)	42
5.3.3.	Ajustes utilizando la herramienta Statgraphics	43
5.3.4.	Matlab	44
5.3.5.	Excel.....	46
6.	Resultados y análisis.....	48
6.1.	Regresión simple (Statgraphics)	48
6.1.1.	<i>NOx</i> vs EGR	48
6.1.2.	<i>NOx</i> vs NOZZLES	51
6.1.3.	<i>NOx</i> vs Injection Pressure (IP)	53
6.1.4.	<i>NOx</i> Vs Spray Angle (SPRAY).....	54
6.1.5.	<i>NOx</i> vs Swirl Number (SWIRL).....	56
6.2.	Regresión No Lineal (Statgraphics)	58
6.3.	Modelos ajustados con la herramienta "Regression Learner".....	63
6.3.1.	<i>NOx</i>	63
6.3.2.	Eff (Eficiencia térmica).....	66
6.3.3.	Verificación de los puntos	70
7.	Conclusiones y trabajos futuros	75
7.1.	Conclusiones.....	75
7.2.	Trabajos futuros	76
	Bibliografía	78
II.	PLIEGO DE CONDICIONES.....	81
1.	Pliego de condiciones.....	83
1.1.	Condiciones técnicas.....	83
1.1.1.	Especificaciones de equipos y material.....	83
1.1.2.	Condiciones de garantía y mantenimiento	85
1.1.3.	Reclamaciones.....	85
1.1.4.	Condiciones legales y contractuales	85
1.1.5.	Revisión de los precios	85
1.1.6.	Fianza.....	85

1.1.7.	Aceptación.....	86
1.1.	Condiciones de seguridad y salud	86
1.1.1.	Real Decreto-ley 28/2020 de trabajo a distancia.....	86
1.1.2.	Real Decreto 488/1997 del 14 de abril	88
III.	PRESUPUESTO	92
1.	Presupuesto	94
1.1.1.	Licencias informáticas (Softwares).....	94
1.1.2.	Capital Humano.....	95
1.1.3.	Material	96

Índice de figuras

Figura 1. Clasificación de las máquinas de fluido [1].	5
Figura 2. MCIA y sus partes mecánicas principales [3].	6
Figura 3. Fases de un MCIA de 4T [3].	7
Figura 4. Diagrama indicado del motor MCIA de 4T [2].	8
Figura 5. Fases de un MCIA de 2T [4].	8
Figura 6. Diagrama indicado del motor MCIA de 2T.	9
Figura 7. Diagrama P-V del ciclo Diesel [6].	11
Figura 8. Diagrama P-V del ciclo mixto [6].	12
Figura 9. Inyección directa Common-Rail [6].	13
Figura 10. Inyección directa Bomba-inyector [8].	14
Figura 11. 1 Tasa de inyección del combustible. 2 Tasa de liberación de calor. 3 Tasa de presión en la cámara en función del ángulo del cigüeñal [10].	15
Figura 12. Estructura de la llama difusiva – Diesel [12].	16
Figura 13. Compuestos resultantes de la combustión [13].	18
Figura 14. Diagrama de flujo de la metodología numérica del CFD [18].	24
Figura 15. Interfaz principal de Statgraphics. Fichero de datos [20].	25
Figura 16. Resumen del análisis de una regresión simple en Statgraphics [20].	28
Figura 17. Grafico del modelo ajustado en Statgraphics.	29
Figura 18. Grafico Valor observado vs Valor Predicho de la variable dependiente “chlorine”.	30
Figura 19. Ventana de ingreso de datos en Regresión No Lineal en Statgraphics.	31
Figura 20. Ventana de estimados iniciales de parámetros en Regresión No Lineal en Statgraphics.	31
Figura 21. Resumen del análisis de una regresión simple en Statgraphic.	32
Figura 22. Gráfica Observado vs Predicho en Regresión No Lineal.	33
Figura 23. Técnicas de aprendizaje del Machine Learning [25].	34
Figura 24. Red neuronal totalmente conectada [26].	35
Figura 25. Interfaz de Regression Learner APP en Matlab [28].	36
Figura 26. Diagrama de flujo de trabajo de Regression Learner APP en Matlab [28].	37
Figura 27. División de variables a estudiar.	42
Figura 28. Distribución de los ensayos en ambos grupos.	43
Figura 29. Modelos de regresión en Regression Learner.	46
Figura 30. Modelo lineal NO_x vs EGR.	49
Figura 31. Modelo cuadrático NO_x vs EGR.	49
Figura 32. Modelo exponencial NO_x vs EGR.	50
Figura 33. Modelo raíz cuadrada NO_x vs EGR.	50
Figura 34. Modelo lineal NO_x vs NOZZLES.	51
Figura 35. Modelo exponencial NO_x vs NOZZLES.	52
Figura 36.. Modelo lineal NO_x vs IP.	53
Figura 37. Modelo exponencial NO_x vs IP.	53
Figura 38.. Modelo lineal NO_x vs SPRAY.	55
Figura 39. Modelo exponencial NO_x vs SPRAY.	55
Figura 40. Modelo raíz cuadrada NO_x vs SWIRL.	56

Figura 41. Modelo Inversa-Y Ln-X NO_x vs SWIRL.	57
Figura 42. Gráfica Observado vs Predicho Caso 1.....	58
Figura 43. Gráfica Observado vs Predicho Caso 2.....	59
Figura 44. Gráfica Observado vs Predicho Caso 3.....	59
Figura 45. Gráfica Observado vs Predicho Caso 4.....	60
Figura 46. Gráfica Observado vs Predicho Caso 5.....	60
Figura 47. Gráfica Observado vs Predicho Caso 5.....	62
Figura 48. Gráfica Observado vs Predicho modelo final NO_x	64
Figura 49. Gráfica Observado vs Predicho modelo desfavorable NO_x	65
Figura 50. Gráfica Observado vs Predicho primer modelo Eff con puntos anómalos.	67
Figura 51. Gráfica Observado vs Predicho modelo final Eff con puntos anómalos.	68
Figura 52. Gráfica Observado vs Predicho modelo final Eff.....	68
Figura 53. Gráfica Observado vs Predicho modelo desfavorable Eff.....	69
Figura 54. Comparación de los resultados CFD del punto óptimo Caso 1 de minimización de NO_x y del caso de referencia con OME_1	71
Figura 55. Comparación de los resultados CFD del punto óptimo Caso 2 de maximización de EFF y del caso de referencia con OME_1	73

Índice de Tablas

Tabla 1. Comparación entre MEP y MEC [1]	10
Tabla 2. Propiedades fisicoquímicas de OME comparadas con diesel convencional [16].	21
Tabla 3. Modelos disponibles en la Función Regresión Simple de Statgraphics [21].	27
Tabla 4. Rango de trabajo del motor estudiado.....	41
Tabla 5. Casos estudiados con Regresión Simple en Statgraphics.	43
Tabla 6. Casos estudiados con Regresión No Lineal en Statgraphics.....	44
Tabla 7. Resultados de los diferentes ajustes NOx vs EGR.....	51
Tabla 8. Resultados de los diferentes ajustes NOx vs NOZZLES.....	52
Tabla 9. Resultados de los diferentes ajustes NOx vs IP.	54
Tabla 10. Resultados de los diferentes ajustes NOx vs SPRAY.	56
Tabla 11. Resultados de los diferentes ajustes NOx vs SWIRL.	57
Tabla 12. Resultados de las diferentes regresiones no lineales.....	61
Tabla 13. Matriz de correlación variables independientes Caso 5.	62
Tabla 14. Parámetros característicos modelo NOx	63
Tabla 15. Parámetros característicos modelo desfavorable NOx	64
Tabla 16. Puntos óptimos baja emisión NOx	65
Tabla 17. Parámetros característicos primer modelo Eff con puntos anómalos.	66
Tabla 18. Parámetros característicos modelo final Eff.	67
Tabla 19. Parámetros característicos modelo desfavorable Eff.....	69
Tabla 20. Puntos óptimos eficiencia térmica (Eff).	70
Tabla 21. Presupuesto parcial de los softwares.....	95
Tabla 22. Presupuesto parcial del Capital Humano.	96
Tabla 23. Presupuesto parcial de materiales.	96
Tabla 24. Presupuesto global del proyecto.....	97

Parte I

MEMORIA

Capítulo 1

1. Introducción

1.1. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo de investigación es encontrar modelos de regresión basados en machine Learning y redes neuronales que permitan predecir las emisiones NO_x y la eficiencia térmica de un motor diesel que trabaja con un combustible obtenido de fuentes renovables (OMEs). La predicción se realiza a partir de distintos parámetros de entrada que caracterizan la combustión.

Esta predicción tiene como objetivo poder optimizar los valores de estas dos variables de salida nombradas anteriormente, es decir, encontrar los puntos donde se puede minimizar el valor de las emisiones NO_x y maximizar el valor de la eficiencia térmica. Se realiza con la intención de conseguir modelos que requieran menor coste computacional y menos tiempo de trabajo en comparación a los métodos numéricos disponibles para modelar (CFD).

1.2. Motivación

El mundo de la automotriz está en constante desarrollo e investigación para optimizar ciertos parámetros de la combustión, para ello se necesita tecnologías con las cuales poder predecir comportamientos que se asemejen a la realidad. Este trabajo de investigación se centra en el desarrollo de nuevos modelos obtenidos a través de machine Learning que optimicen tanto el tiempo de trabajo como el coste de investigaciones futuras.

A lo anterior, se le suma la existencia de un problema que no se puede ignorar: la contaminación que generan los procesos de combustión. Los MEC, al igual que los MEP, son responsables de la emisión de contaminantes que deterioran el medio ambiente. Las emisiones más nocivas son los óxidos de nitrógeno (NO_x), las partículas de hollín, el monóxido de carbono (CO) y los hidrocarburos sin quemar. Es por esto que este trabajo se centra en el uso de e-fuel OMEs, el cual reportó menos cantidad de emisiones contaminantes en estudios previos.

Las normativas vigentes toman un papel importante en la investigación ya que para el año 2025, está prevista la entrada en vigor de la Euro 7, la cual establecerá unos nuevos límites aún más bajos de los actuales, donde los NO_x , pasarán de los 80mg/km permitidos en los turismos Diesel a 10mg/km.

1.3. Justificación

El resultado de esta investigación ayuda en un proyecto de investigación para la mejora de las prestaciones de un motor diesel utilizando e-fuel (OMEs), enfocado a la reducción de emisiones contaminantes y mejora del rendimiento térmico.

Se emplea tanto para realizar predicciones de algunos parámetros de salida con rapidez y bajo coste computacional, como para encontrar los puntos más favorables donde estén optimizados estos parámetros sin pasar por CFD, el cual supone mucho tiempo computacional. Sustituyéndolo por el uso del Machine Learning (ML), capaz de predecir resultados a partir de unos datos de entrenamiento sin necesidad de realizar una simulación para cada caso.

Capítulo 2

1. Estado del arte del motor

1.1. Consideraciones previas

Para poder definir el objeto principal de estudio se tiene que definir o desarrollar unos conceptos previos necesarios.

En primer lugar, se introduce el término de Máquinas de fluido: son máquinas por las que circula un fluido de trabajo, y está compuesta por un conjunto de elementos que permiten el intercambio de energía mecánica con el exterior (añadiendo o extrayendo energía al fluido).

Estas máquinas están clasificadas según la compresibilidad del fluido en:

- Máquinas hidráulicas: trabajan con fluido incompresible.
- Máquinas térmicas: trabajan con fluido compresible.

Estos equipos, a su vez, están clasificadas en la Figura 1 de la siguiente manera:

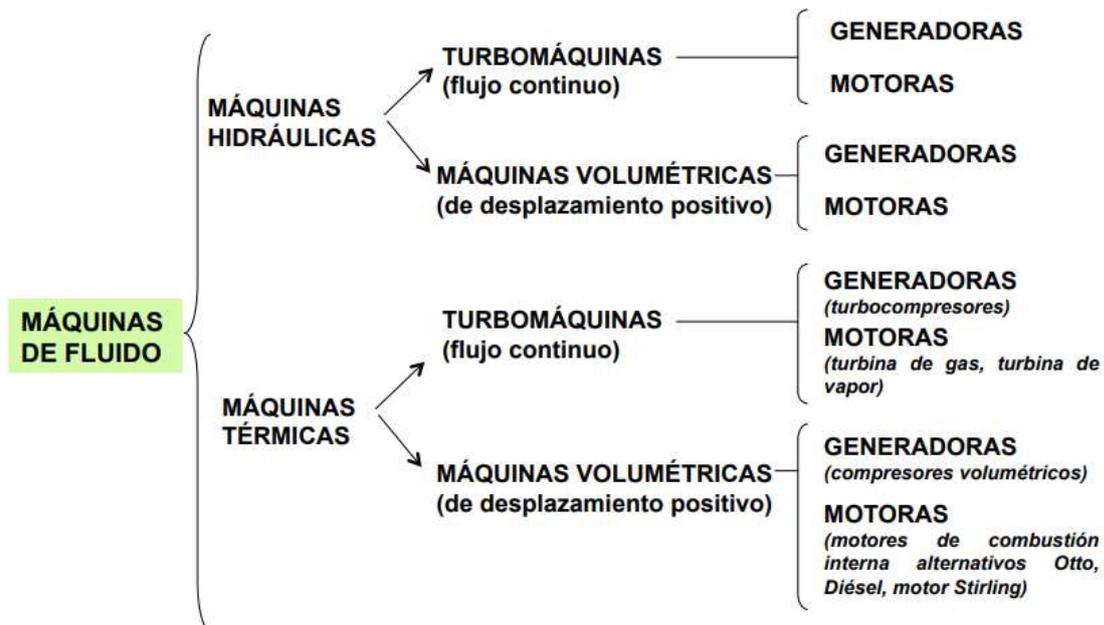


Figura 1. Clasificación de las máquinas de fluido [1].

El documento se enfoca en las máquinas térmicas, ya que el motor de estudio es una subcategoría de las mismas. El fluido mientras trabaja en estas máquinas cambia de densidad y hasta de fase líquido-vapor, es por esto que se llaman fluidos compresibles. Los motores térmicos también se pueden clasificar de la siguiente manera:

- Según la forma en cómo se produce la combustión (forma de aportar la energía térmica): **motores de combustión externa**, donde el proceso de combustión se realiza fuera de la máquina, y los **motores de combustión interna**, que son aquéllos en los que el combustible se quema dentro de la máquina [2].

- Según el tipo de movimiento de las piezas en su interior: motores **alternativos** que están basados en el mecanismo de pistón-biela-cigüeñal, **rotativos**, que tienen piezas giratorias y **motores de chorro**, que funcionan con en el principio de acción y reacción.

Luego de haber definido los anteriores términos se puede introducir los motores de combustión interna alternativos (MCIA), los cuales son el objeto principal de este proyecto. Estos son máquinas térmicas motoras que logran convertir la energía química de un fluido de trabajo, siendo este generalmente una mezcla de aire-combustible, en energía mecánica en un proceso en el que se comprime y se expande dicho fluido, logrando el movimiento del pistón. Si se observa la Figura 1 se concluye que, un MCIA es una máquina térmica volumétrica motora. En la Figura 2 hay un ejemplo de cilindro-pistón donde ocurre esta transferencia de energía indicando sus partes mecánicas principales:

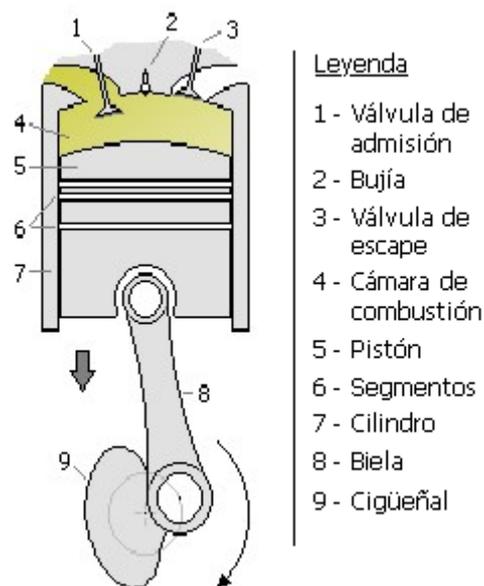


Figura 2. MCIA y sus partes mecánicas principales [3].

Estos motores se pueden clasificar por el proceso de combustión: motores de encendido provocado (MEP) y en motores de encendido por compresión (MEC).

Los MICA también se pueden clasificar según el ciclo de trabajo, pueden ser motores de cuatro tiempos (4T) y motores de dos tiempos (2T). La diferencia entre estos dos tipos de motores tiene que ver con el escape y admisión (proceso de renovación de la carga).

1.1.1. Motores de cuatro tiempos (4T)

Los motores realizan el ciclo termodinámico en dos vueltas de cigüeñal que corresponden a cuatro carreras del émbolo del mecanismo. Los procesos son:

1. Aspiración - Admisión de los gases.

(Movimiento del émbolo de $0^\circ \rightarrow 180^\circ$ de ángulo de cigüeñal)

2. Compresión.

(Movimiento del émbolo $180^\circ \rightarrow 360^\circ$ de ángulo de cigüeñal.)

3. Expansión - Combustión.

(Movimiento del émbolo $360^\circ \rightarrow 540^\circ$ de ángulo de cigüeñal)

4. Evacuación - Escape de los gases.

(Movimiento del émbolo $540^\circ \rightarrow 720^\circ$ de ángulo de cigüeñal)

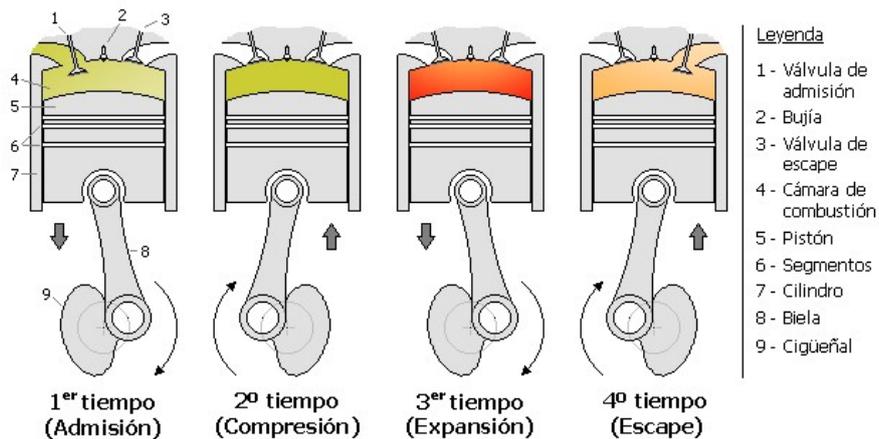


Figura 3. Fases de un MICA de 4T [3].

Las evoluciones o procesos enumerados anteriormente se pueden apreciar de manera más clara en el siguiente diagrama termodinámico de la figura 4 denominado

“Diagrama Indicado del motor” donde se grafica la evolución de la presión de la cámara de combustión respecto al volumen definido por el movimiento del pistón-cigüeñal.

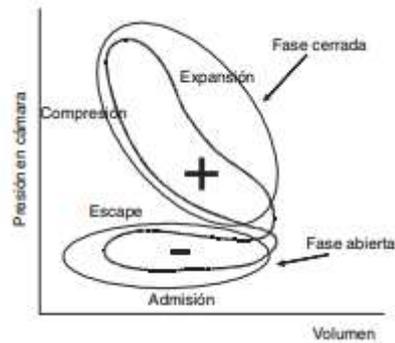


Figura 4. Diagrama indicado del motor MCI de 4T [2].

En la anterior figura se puede apreciar un trabajo negativo o trabajo de bombeo (recorrido en sentido horario) en la fase abierta y un trabajo positivo (recorrido en sentido horario) en la fase cerrada.

Algunos ejemplos para estos motores de 4T son: los motores MEP se utilizan en motocicletas, embarcaciones pequeñas, turismos y pequeñas avionetas. Los MEC se utilizan en turismos, maquinaria agrícola y ferrocarriles.

1.1.2. Motores de dos tiempos (2T)

El motor de 2T es que se completa el ciclo solamente en 2 carreras de embolo, es decir, una vuelta del cigüeñal. Comparado con el motor 4T, tiene una duración angular menor o también se puede decir que tiene una velocidad angular mayor donde la mayoría de las veces, los procesos de admisión y escape ocurren de manera simultánea en la carrera ascendente y durante la carrera descendente, los procesos de combustión-expansión y escape [4].

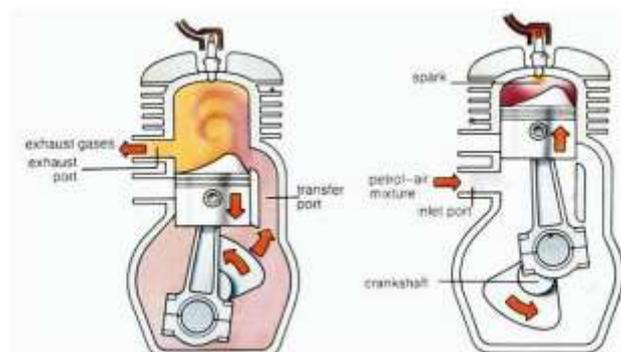


Figura 5. Fases de un MCI de 2T [4].

Los procesos comentados anteriormente se pueden apreciar de manera más clara en el siguiente diagrama termodinámico de la figura 6 denominado “Diagrama Indicado del motor” donde se grafica la evolución de la presión de la cámara de combustión respecto al volumen definido por el movimiento del pistón-cigüeñal. En esta figura se puede ver como no existe lazo de bombeo, ya que el trabajo de compresión no es realizado por el émbolo.

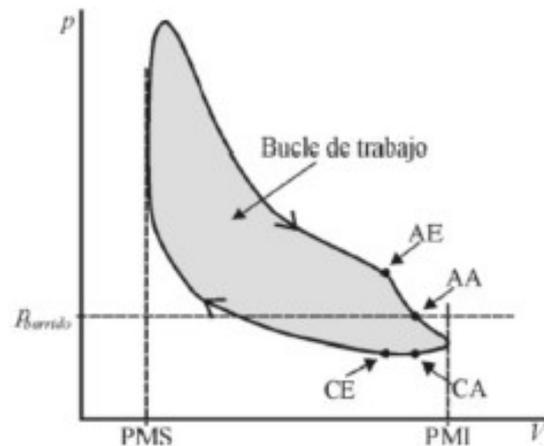


Figura 6. Diagrama indicado del motor MCI de 2T.

Igual que en el caso anterior, algunos ejemplos del uso de los motores de 2T son: Los motores MEP, se encuentran en ciclomotores y pequeñas herramientas, y los motores MEC se encuentran en grandes embarcaciones y grandes motores (estacionarios).

1.2. Diferencias MEC Y MEP

En el apartado anterior se comentó una clasificación importante de los MCI, por el proceso de combustión; el proceso de encendido de la mezcla aire-combustible, y la evolución de la combustión. Estos motores son los siguientes:

En los **Motores de encendido por compresión** o **MEC** se tiene que conseguir una alta temperatura en la cámara de combustión y evitar que el combustible esté mucho tiempo en contacto con el aire ya que puede provocar un encendido sin control; para lograr esto, la mezcla debe ocurrir al final de la carrera en la fase de compresión. El combustible se inyecta directamente en la cámara. Para controlar la carga, se tiene que variar solo la cantidad de combustible ya que la cantidad de aire permitido permanece casi constante.

Los **Motores de Encendido provocado** o **MEP**, el encendido se provoca por aporte de energía del exterior conocida como chispa provocada por la bujía, a partir de esta se inicia la propagación de un frente de llama. Normalmente es necesario conseguir

una mezcla homogénea en toda la cámara y para esto, tenemos que el proceso de la mezcla tiene que ser muy pronto en el ciclo (admisión). Además, tenemos que evitar que el fluido se autoencienda durante la compresión y esto se logra limitando la temperatura en la cámara. Por esto la regulación de la carga se realiza controlando ambas masas (combustible y aire) [4].

Los combustibles utilizados en ambos casos son diferentes (ver Tabla 1). También, existen diferencias geométricas en el sistema cilindro-pistón: Los pistones en los MEC tienen la cámara de combustión labrada, ya que se necesita presiones elevadas y en los MEP los pistones son lisos para que la explosión se extienda de manera uniforme. En la tabla 1 se resumen las principales diferencias de ambos tipos de motor.

Característica	MEP	MEC
Formación de la mezcla	Durante la compresión	Final de la compresión
Encendido de la mezcla	Mediante chispa eléctrica	Autoencendido
Regulación de la carga	Cuantitativa	Cualitativa
Combustibles	Ligeros de alto octanaje (ej. Gasolina)	Pesados (ej. Gasoil)
Fluido operante	Aire + combustible	Aire
Relación de compresión	9 - 11	12 - 22
Régimen de giro máximo en automoción [rpm]	7500	5000
Rendimiento	0.3 - 0.35	0.35 - 0.55
Dosado	≈ 1	< 0.95 (global)
Potencia específica [kW/l]	Automoción: 100 Competición: 250	Automoción: 100 Competición: 120

Tabla 1. Comparación entre MEP y MEC [1]

1.2.1. Eficiencia térmica

La eficiencia térmica de un motor es la capacidad de un motor para transformar la energía aportada por el combustible durante la combustión en energía mecánica. Siempre se busca de forma ideal conseguir un motor de eficiencias 100% pero esto no es posible, ya que la eficiencia se ve afectada por el rozamiento de las piezas, la pérdida en forma de calor, etc [5]. Este parámetro es muy relevante en esta investigación, ya que se buscará optimizarlo lo máximo posible.

En los coches de turismo, los motores de gasolina (MEP) tienen un rendimiento térmico del 30% mientras que en el motor diésel (MEC), la eficiencia es un poco mejor, con 40%, ya que tienen un mayor nivel de compresión [5].

1.3. Motores de encendido por compresión (MEC)

Entre ambos tipos de motor definidos en el apartado anterior, nos quedaremos con los motores MEC, ya que nuestro motor estudiado es de este tipo. A continuación, se desarrollarán los puntos más relevantes para entender nuestro sistema.

1.3.1. Análisis termodinámico (Ciclo de trabajo)

Las evoluciones termodinámicas de este tipo de motor se pueden simular de forma simple con el ciclo teórico diesel, siendo la compresión lenta o en plena carga. El ciclo consta de cuatro etapas principales y dos etapas secundarias (Admisión y Escape) como se ve en la figura 7.

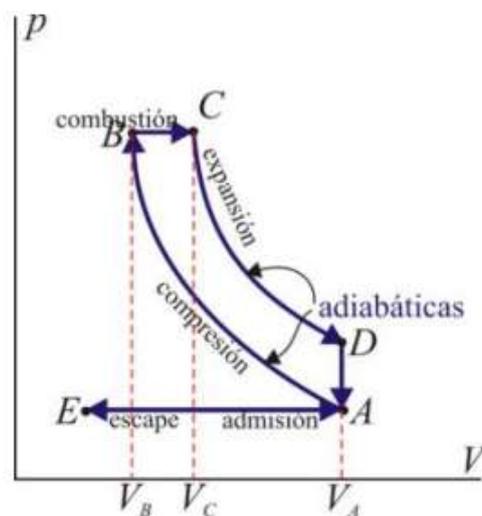


Figura 7. Diagrama P-V del ciclo Diesel [6].

- **A-B:** Proceso isentrópico de compresión desde el V_a (Punto Muerto Inferior o PMI) hasta el V_b (Punto Muerto superior o PMS).
- **B-C:** Aporte de calor a presión constante, representando a la combustión controlada por el proceso de inyección (no se consideran pérdidas de calor).
- **C-D:** Expansión adiabática y reversible del pistón hasta llegar al PMI. El sistema realiza trabajo.
- **D-A:** Se cede calor al foco frío a volumen constante. Se considera instantánea la cesión de calor [6].

Para representar los motores rápidos o a carga parcial se puede representar con el ciclo mixto o de presión limitada (Figura 8). Si lo comparamos con el ciclo Diesel podemos encontrar una diferencia clara y es que, el aporte de calor en este ciclo mixto

se lleva a cabo durante una fase a volumen constante y también a presión constante, mientras que en el ciclo Diesel solo se aporta el calor en una fase a presión constante.

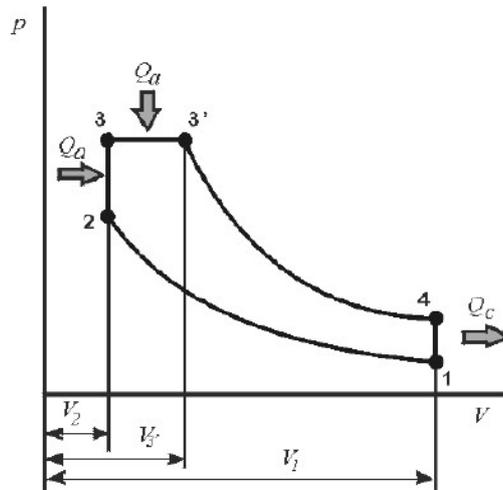


Figura 8. Diagrama P-V del ciclo mixto [6].

Es importante comentar que todos estos modelos sirven para acercarnos al ciclo real o ciclo indicado (Figura 4), el cual tiene ciertas pérdidas y desviaciones.

1.3.2. Inyección

Este apartado es muy importante en todo el proceso de combustión de este tipo de motores ya que afecta de forma directa a la combustión y, a su vez, afecta a la emisión de las sustancias contaminantes. El mezclado del combustible con el aire se realiza en el cilindro tras la inyección de combustible cerca del PMS. Como se comentó en los apartados anteriores, la combustión mejora mientras mejor sea la distribución del combustible (de forma homogénea) en el aire de la cámara de combustión y mientras mejor atomizado, ya que asegura una mayor superficie de contacto con el aire y así, facilitar la evaporación.

Existen dos tipos de inyección: Inyección Directa e Inyección Indirecta (muy antigua).

- **Inyección Directa:** inyectan directamente el combustible en la cámara de combustión, controlándose exactamente la cantidad. Para mejorar la mezcla de los fluidos, se suele aportar al aire un movimiento de rotación alrededor del cilindro conocido como "Swirl". Este movimiento es provocado a través del diseño de la pipa de admisión. Además, los motores de Inyección directa producen menos emisiones contaminantes, lo cual es fundamental [2].

Se distinguen dos tipos de inyección directa:

- **Sistema de inyección Common-Rail:** es un mecanismo de inyección de combustible en el que el diesel se aspira desde el depósito (almacenado a baja presión) hasta la bomba de alta presión, pasando previamente por una primera bomba de transferencia [7]. Esta lo traslada a un carril común de alta presión que llega a los cilindros a través de los inyectores (ver Figura 9). En este caso, el sistema tiene como objetivo una atomización del combustible muy superior a la obtenida por la inyección convencional.

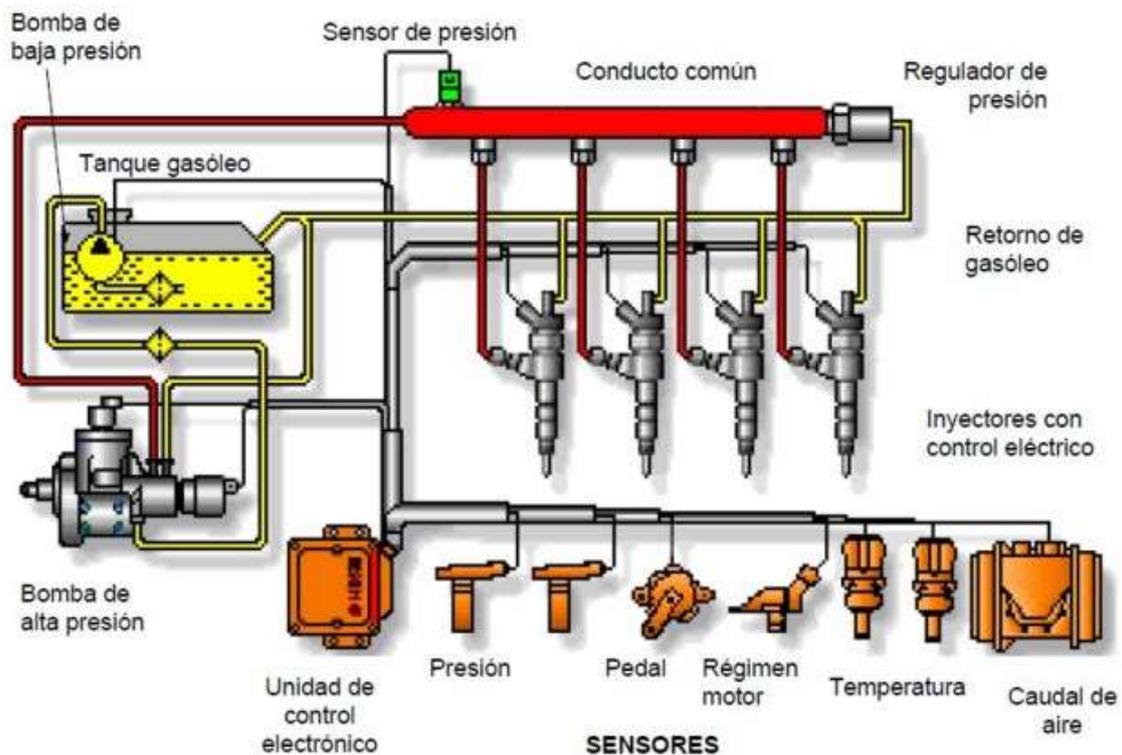


Figura 9. Inyección directa Common-Rail [6].

- **Bomba-inyector:** en este sistema, la bomba inyectora y el inyector son un mismo componente. En cada cilindro se coloca una bomba-inyector en la culata y se acciona por medio de un un balancín del árbol de levas [8]. Con este sistema se pueden alcanzar las mayores presiones de inyección (ver Figura 10).

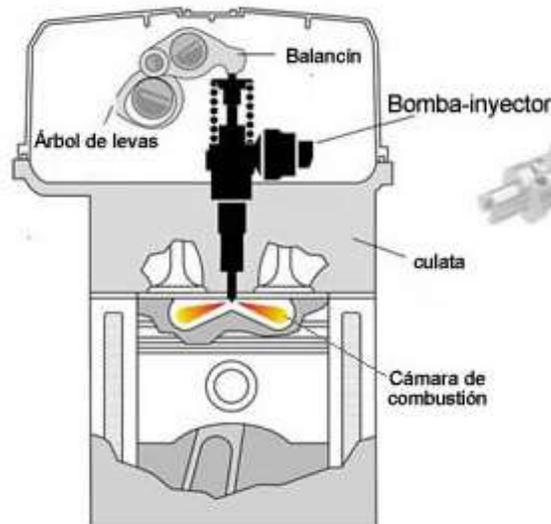


Figura 10. Inyección directa Bomba-inyector [8].

1.3.3. Combustión

El proceso de combustión comienza posterior a la inyección del combustible a altas presiones, logrando su atomización y mezclado con el aire que se encuentra en la cámara. La mezcla es muy inestable químicamente a altas temperaturas y esto genera el autoencendido de la misma en muy corto tiempo. El proceso generalmente tiene las siguientes condiciones en el interior de la cámara de combustión:

- Presión de inyección entre 500 y 2200 bar.
- Temperatura del aire en cámara de entre 900 y 1000 K.
- Densidad del aire en cámara entre 10 y 50 kg/m³ [9].

En la evolución temporal de la combustión aparecen una serie de etapas (3) que se aprecian en la Figura 10 (I, II y III), donde aparecen distintos parámetros que son interesantes para definir las siguientes fases:

1. **Retraso del autoencendido (ángulo de retraso):** es la primera etapa del proceso de combustión y abarca desde el inicio de la inyección hasta el inicio de la combustión. Durante toda esta fase ocurren varios procesos importantes como la atomización, la evaporación y la mezcla del combustible con el aire (retraso físico) pero a su vez, también ocurren una serie de pre-reacciones necesarias para darle paso a la combustión (retraso químico).
2. **Combustión premezclada:** comienza el autoencendido de la premezcla de forma rápida y brusca, donde se quema gran parte de combustible; esto depende de la cantidad de masa inyectada en la etapa anterior [6]. En este proceso ocurre un aumento notorio de la tasa de liberación de calor, de presión (ruido) y de

temperatura. También ocurre la formación de compuestos finales como H_2O y CO_2 y compuestos intermedios que terminan siendo hollín.

3. **Combustión por difusión:** ocurre una combustión progresiva tanto del combustible que no se ha podido quemar en la fase anterior como del nuevo combustible aportado, y está controlada por la tasa de inyección, la evaporación del combustible y la mezcla con el aire. Cuando la inyección cesa, la combustión continua pero decrece la tasa de liberación de calor hasta que se consume todo el combustible [9].

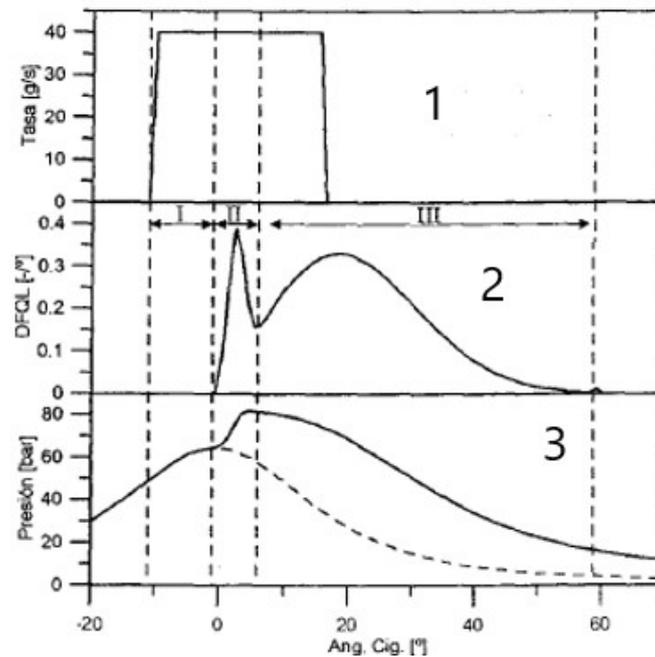


Figura 11. 1 Tasa de inyección del combustible. 2 Tasa de liberación de calor. 3 Tasa de presión en la cámara en función del ángulo del cigüeñal [10].

En la Figura 10 se puede observar algunos detalles importantes, tales como: el punto más alto de la presión y la tasa de liberación de calor ocurre en la fase de combustión premezclada y que la inyección de combustible ocurre durante las tres fases pero cesa en la última (combustión por difusión).

1.3.4. Emisiones contaminantes en la combustión

Existen dos emisiones importantes que se producen en los motores diésel, los **óxidos de nitrógeno (NO_x)** y el **hollín** [11], mientras que los monóxidos de carbono y los hidrocarburos sin quemar quedan en un segundo plano porque se producen en menor cantidad.

Introduciremos el modelo conceptual de una llama en este tipo de motores (Figura 11); suponiendo que no existe ninguna interacción entre la llama y superficies adyacentes, es decir, donde el chorro pueda evolucionar sin ningún problema. En la llama de la Figura 11 se puede apreciar la evolución física de la combustión (en el apartado anterior se explicó la evolución temporal); está compuesta por tres partes significativas de izquierda a derecha: longitud de despegue de llama o lift-off (parecida a la fase i), combustión premezclada y combustión por difusión.

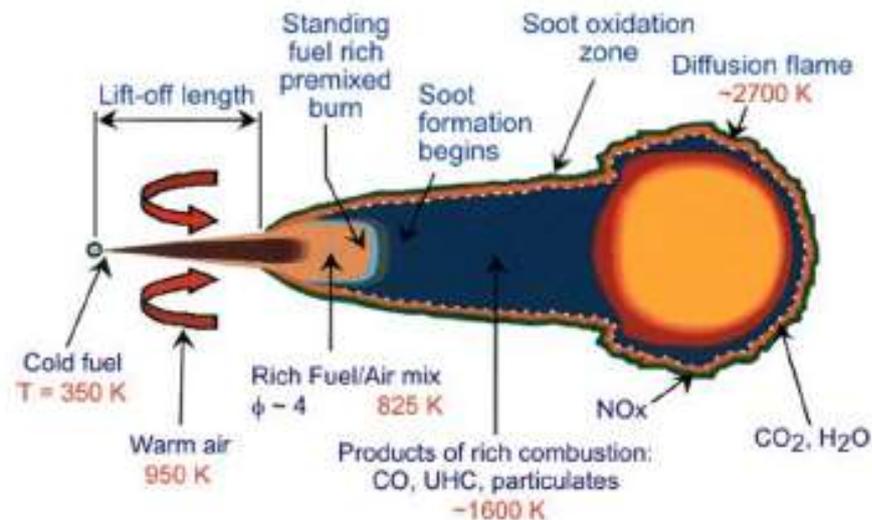


Figura 12. Estructura de la llama difusiva – Diesel [12].

El hollín se forma en condiciones de alta temperatura y dosado rico, por esto, los compuestos precursores del hollín se producen durante la combustión premezclada; fase caracterizada por dosados ricos. Luego, en la fase de combustión por difusión se produce la formación del hollín a partir de las especies precursoras debido a temperaturas altas (entre 1300 y 1600 K) [4] y los dosados ricos en el interior de la llama. La concentración máxima de estos compuestos se localiza en la parte frontal, logrando oxidarse en el frente de llamas.

Es importante tratar y regular las emisiones de las partículas de hollín, ya que estas son muy perjudiciales para la salud: tienen efectos sobre el sistema respiratorio causando a corto plazo irritaciones pero logrando a largo plazo desarrollar un efecto cancerígeno.

Los NO_x también requieren de temperaturas muy altas para poder generarse pero necesitan exceso de aire. La formación de NO_x se desarrolla en la zona externa de la llama (Figura 11), donde el dosado es pobre y se encuentra con el oxígeno; alcanzando su concentración más alta en las cercanías al frente de llama (donde las temperaturas son muy elevadas). Estos compuestos son unos de los principales responsables del efecto invernadero (generado por el óxido nítrico – NO), smog fotoquímico, de la lluvia ácida y de la reducción de la capa de ozono (generado por el Óxido nítrico – NO). Estos compuestos son importantes en nuestra investigación ya que se intentará minimizarlos.

Existen varios parámetros a estudiar que afectan directamente a la producción de las emisiones contaminantes nombradas anteriormente. Los principales estudiados en este proyecto son los 5 primeros:

- Número de orificios del inyector.
- Presión de inyección.
- Ángulo de inyección.
- “Swirl number” (flujo turbulento)
- Porcentaje de gases de escape recirculados (EGR - del inglés “Exhaust Gas Recirculation”). Se busca desviar parte de los gases de escape hacia el colector de admisión para disminuir la temperatura de combustión y así, disminuir las emisiones de NO_x .
- Modificación del diseño de la cámara de combustión (no es objeto principal en esta investigación) [1].

Capítulo 3

3. Uso de e-fuels para sistemas de transporte sostenibles

La industria del transporte está constantemente intentando buscar métodos para reducir las emisiones contaminantes, ya que es uno de los mayores productores de CO_2 en el mundo. Una de las formas para contribuir en la reducción de la emisión de estos compuestos es sustituir los combustibles tradicionales por nuevas tecnologías como combustibles sintéticos provenientes de fuentes renovables. Para colaborar con la problemática, esta investigación se centra en un e-fuel llamado Éter de Oximetileno (Oxymethylene Ethers - OME).

3.1. Estructura química de los combustibles

Los combustibles están compuestos principalmente por carbono (C) e hidrógeno (H_2). Pasando por un proceso llamado oxidación al quemarse con el aire, donde se consume el oxígeno (O_2) formando nuevos enlaces:

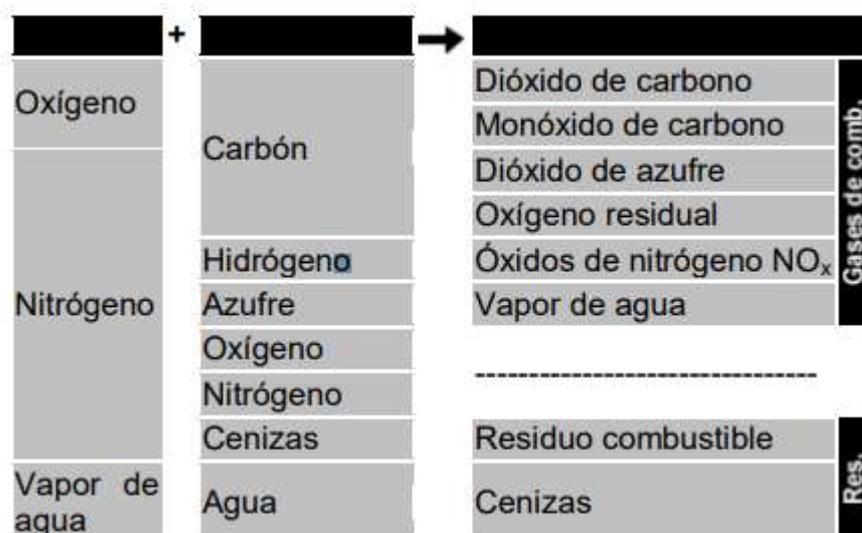
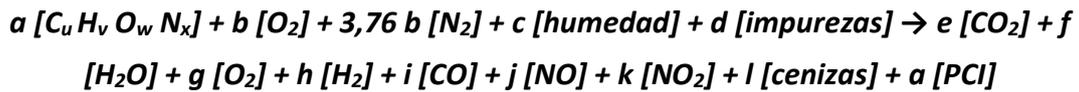


Figura 13. Compuestos resultantes de la combustión [13].

La reacción real genérica de la combustión es la siguiente:



Donde $[C_u H_v O_w N_x]$ es un mol de materia combustible, ya sea compuesto o mezcla, y suele tomarse $a=1$ (por mol de combustible) o bien $e + f + g + h + i + j + k = 1$ (por mol de producto gaseoso) [14].

Existen numerosos tipos de combustibles y pueden encontrarse en distintos estados:

- **Combustibles sólidos:** los componentes principales de estos combustibles son carbono (C), hidrógeno (H_2), oxígeno (O_2) y pequeñas cantidades de azufre (S) y agua (H_2O) [13]. Se caracterizan por su poder calorífico, siendo el carbón el de mayor poder calorífico. El principal inconveniente de su uso es la gran cantidad de cenizas, partículas sólidas y hollín que generan. Algunos combustibles sólidos son la madera, carbón bituminoso, paja y turba.
- **Combustibles líquidos:** los combustibles líquidos tradicionales son derivados del petróleo, tratándose en refinerías obteniéndose gasoil ligero, medio y pesado. El punto de inflamación es una propiedad muy importante en estos casos, ya que lo que arde no es el líquido sino sus vapores. El combustible usado en este estudio (OME) se encuentra en estado líquido proveniente del metanol, lo que permite estrategias de producción sostenibles a partir de CO_2 y fuentes renovables (principalmente eólica, fotovoltaica e hidráulica).
- **Combustibles gaseosos:** son uno de los combustibles más usados. Los componentes de gases combustibles son hidrocarburos (ej. metano, butano), monóxido de carbono (CO) e hidrógeno (H_2). Presentan sobre los sólidos y líquidos ventajas de transporte y almacenamiento, mayor luminosidad de llama y mayor poder calorífico, debido a que tienen mayor facilidad de mezcla con el comburente [13]. La desventaja que tienen es que por estar en fase gaseosa, tienen poca energía por unidad de volumen.

3.2. Propiedades de los combustibles

Son numerosas las propiedades fisicoquímicas de los combustibles pero en este apartado se resaltan las más significativas que afectan directamente la combustión. Estas son:

- **Volatilidad:** se refiere a la facilidad con la que se vaporiza el combustible; afecta la tendencia de humo en el escape.

- **Valor/Poder calorífico:** es la cantidad de energía desprendida en la combustión completa, referida a la unidad de masa del combustible. Se busca el combustible con mayor valor calorífico, la densidad y el punto de ebullición tienen influencia en esta característica.
- **Calidad de ignición/Índice de cetano:** es una de las características más importantes para evaluar la calidad de la combustión de un combustible diesel [13]. En el caso de los e-fuels, este índice está influenciado por su composición de ácidos grasos. Este valor sirve como referencia para conocer el grado de inflamabilidad del fluido; indica la demora de la ignición, y entre mayor sea su valor, menor será la demora.
- **Punto de inflamación/Flash Point:** se conoce como la temperatura mínima en la que el combustible comienza a formar vapores inflamables; una propiedad muy importante refiriéndose al peligro de incendio y explosión.
- **Viscosidad:** influye en la inyección atomizada del combustible para la combustión. Existen mínimos límites de esta para prevenir que el combustible afecte la bomba de inyección del combustible.
- **Contenidos de sulfuros:** los sulfuros son parte de las emisiones de un MEC, ya que durante la combustión los componentes de sulfuro reaccionan para formar subproductos sólidos, que a su vez, forman sulfuros en los gases de escape. Por esto, si se controla el nivel de sulfuros de un combustible se reduce el nivel de emisiones contaminantes [13].

3.3. E-fuel utilizado (Éter de Oximetileno)

Los Éteres de Oximetileno (OMEs) es un e-fuel utilizado para reducir las emisiones de gases de efecto invernadero. Es un combustible sintético proveniente de fuentes renovables; la producción está basada en metanol por diferentes procesos de síntesis. [15]

Los OMEs son combustibles líquidos casi incoloros que pueden emplearse como combustibles y sustituir al diesel convencional en los motores usados hoy en día sin modificarlos drásticamente. OME tiene altos niveles de oxígeno (O_2) en comparación con el diesel y esto ayuda a reducir notoriamente las emisiones de hollín y NO_x ; esto último es gracias a trabajar con un alto EGR (recirculación de gases de combustión). Las propiedades fisicoquímicas son relativamente parecidas entre ambos tipos de combustible (Tabla 2); exceptuando por la viscosidad, densidad y poder calorífico. En la

tabla 2 se aprecian los diferentes compuestos resultantes al sintetizar (OME_n) pero en esta investigación se trabaja con $n=1$ [16]; refiriéndose a partir de ahora como OME_1 .

Parameter	Unit	Diesel	OME_1	OME_2	OME_3	OME_4	OME_5
Structure	–	$C_m H_n$ ($< C_8 H_{18}$)	$C_3 H_8 O_2$	$C_4 H_{10} O_3$	$C_5 H_{12} O_4$	$C_6 H_{14} O_5$	$C_7 H_{16} O_6$
Oxygen percentage	wt. %	0	42,1	45,2	47	48,1	48,9
Density (15 °C)	kg/m^3	0,82-0,845	0,870	0,972	1,039	1,083	1,114
Heating Value	kJ/g	43,2	23,3	20,3	19,6	19,0	18,5
Flashing Point	°C	> 55	< -20	16	54	88	115
Cetane Number		> 51	28	67	72	84	93
Boiling Point	°C	180-390	42	105	156	202	242
Viscosity (40°C)	mm^2/s	2-4,5	Sample evaporated before measurement	0,559	0,866	1,33	1,96

Tabla 2. Propiedades fisicoquímicas de OME comparadas con diesel convencional [16].

En la tabla se observa que la principal propiedad diferente en comparación al diesel y que afecta de forma directa al proceso de combustión, es el bajo poder calorífico (desventajas del e-fuel). Existen varios métodos para compensar esta cantidad de energía liberada en la combustión:

- Extender la duración de la inyección para obtener más cantidad de combustible en la cámara, pero parte de la combustión ocurre luego afectando a la eficiencia de forma negativa.
- Aumentar la presión de inyección y así, obtener un mayor flujo másico del combustible manteniendo la duración de la inyección. Esto es complicado debido a los límites físicos del sistema de bombeo y que afecta a la estructura del spray.
- Aumentar el área del inyector, ya sea alterando la superficie de los orificios o aumentando el número de estos. Tomando en cuenta que también existe un límite físico por la dificultad de producción de estas piezas tan pequeñas (difícil aumentar el número de orificios). [15]

En este estudio se experimentará con las últimas dos opciones, siempre tomando en cuenta las limitaciones comentadas anteriormente para que sea lo más real posible.

3.4. Sistema de combustión a estudiar

En este apartado se resume los datos necesarios para entender el sistema a estudiar. El equipo tiene las siguientes características:

- Máquina térmica volumétrica (Máquina de fluido).
- Motor de combustión interna alternativo (MCIA).
- Motor de encendido por compresión (MEC).
- Motor de cuatro tiempos (4T).
- Pertenece a un vehículo de transporte de mercancía (servicio mediano).
- Inyección tipo common-rail (inyección directa).
- Contiene Turbocompresor.
- Tecnología EGR (Recirculación de gases de combustión)
- Combustible utilizado: Éter de Oximetileno (OME_1).

Capítulo 4

4. Herramientas y métodos numéricos

Para poder entender los trabajos realizados en esta investigación, es importante desarrollar algunas características básicas sobre las herramientas computacionales que son utilizadas.

Los datos utilizados en este estudio fueron obtenidos previamente en CFD (Computational Fluid Dynamics – Fluidodinámica computacional); y posteriormente, se emplearon dos softwares principales para la obtención de las expresiones matemáticas que predicen el comportamiento de estos motores sin utilizar CFD, ahorrando tiempo y capital.

4.1. OpenFOAM (CFD)

Los datos de partida de esta investigación fueron obtenidos tras la simulación y predicción del comportamiento de los fluidos mediante métodos numéricos y algoritmos; esto se conoce como dinámica de fluidos computacional (CFD). El software utilizado en este estudio fue OpenFOAM. Para poder resolver las diferentes condiciones que se quiera predecir en softwares CFD, es necesario el uso de ordenadores con gran capacidad y de última generación debido a la gran cantidad de cálculos y a la dificultad que estos tienen.

La resolución de las diferentes simulaciones por CFD requiere una discretización, la cual es la división del dominio en varios volúmenes de control más pequeños para facilitar la resolución de las ecuaciones [17]. Esto se realiza creando una malla computacional donde se calculan las variables de cada celda con ecuaciones lineales (más sencillas que las ecuaciones complejas) creando matrices que se resuelven de forma iterativa hasta que el residuo sea casi nulo. Este proceso requiere de mucho tiempo ya que son millones de celdas. En la figura 14 se observa que el CFD presenta 3 etapas:

- **Preprocesador:** etapa inicial donde se introducen los datos y que abarca la definición del dominio y la geometría con su generación de malla.
- **Solver:** fase donde aparece la discretización y se resuelven las ecuaciones comprobando su convergencia. Es necesario definir las condiciones de contorno

e iniciales, las propiedades del fluido utilizado y los modelos de los procesos presentes.

- **Post-proceso:** en esta fase se obtienen los resultados en y se analizan evaluando ciertos criterios como la sensibilidad de la malla aplicada. Además, se valida el modelo con los datos experimentales. Etapa donde está basada esta investigación. Este proyecto se encuentra en esta etapa.

Para la simulación de este sistema de combustión fue utilizado Lib-ICE; este código es la base de la tecnología de OpenFOAM. Para simplificar el estudio se aplicó los principios de simetría axial en la cámara de combustión, donde la geometría estudiada está en función del número de orificios del inyector [15].

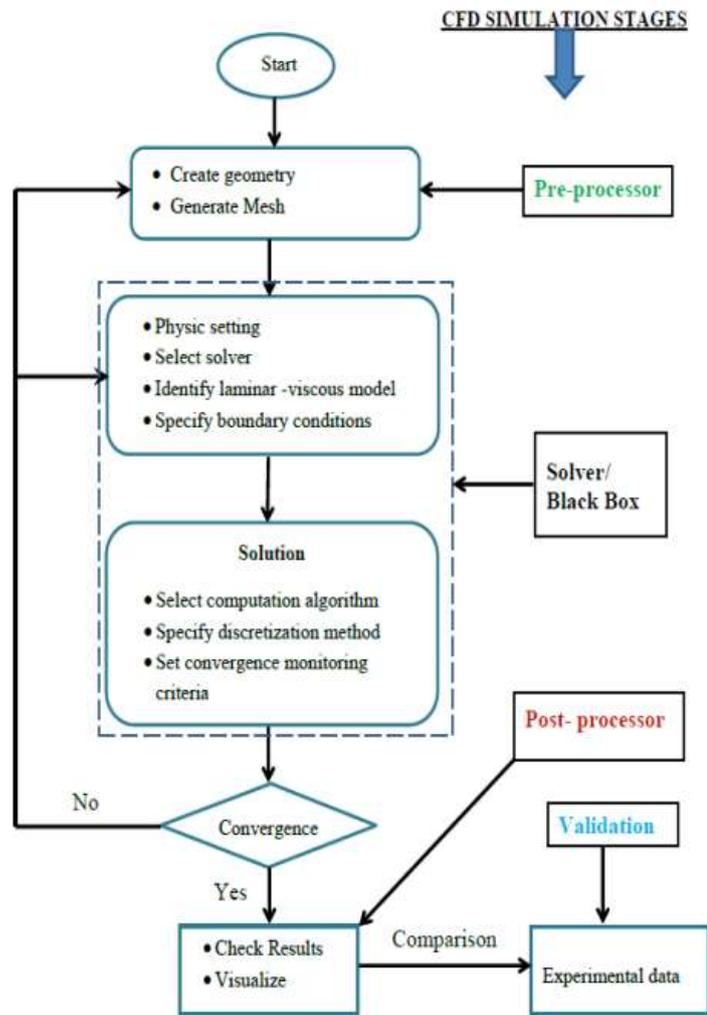


Figura 14. Diagrama de flujo de la metodología numérica del CFD [18].

4.2. Statgraphics

Con los datos obtenidos en el CFD se procedió a su estudio estadístico, evaluando las relaciones entre las diferentes variables, ya sean variables de entrada o de salida mediante aproximaciones conocidas (lineales, logarítmicas, etc). El software utilizado en esta parte del estudio fue Statgraphics.

El programa Statgraphics es un paquete profesional que está diseñado para facilitar el análisis estadístico de datos. Es posible realizar un análisis descriptivo de una variable o varias, utilizando gráficos que expliquen su distribución y también calculando sus parámetros característicos [19]. Este software usa varios tipos de ficheros, entre los más importantes están:

- **Ficheros de datos:** En ellos se introducen los datos a analizar, ya sea, importándolos desde archivos externos como Excel o introduciéndolos manualmente (Figura 15). Esta modalidad es la empleada en este proyecto.
- **Ficheros Statfolio:** es posible almacenar los resultados obtenidos en los análisis realizados para poder trabajar con ellos posteriormente [20]. El Statfolio incluye también el fichero de datos y las ventanas de resultado.
- **Statreporter:** funciona para escribir un informe mientras que se analizan los datos.

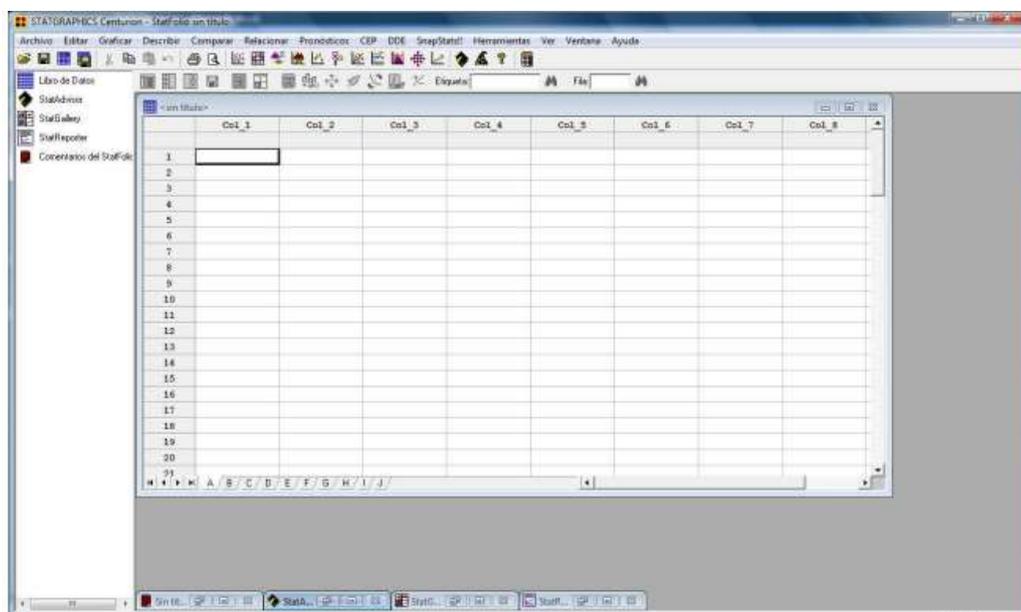


Figura 15. Interfaz principal de Statgraphics. Fichero de datos [20].

A continuación se explicaran brevemente algunas funciones y características principales de este software que fueron empleadas en la investigación.

4.2.1. Regresión simple

Esta herramienta está diseñada para construir un modelo estadístico que describa el efecto de un factor cuantitativo X (dominio) sobre una variable dependiente Y. Posee 27 modelos lineales y no lineales (ver Tabla 3) que pueden ser ajustados empleando dos vías: el procedimiento de mínimos cuadrados o el procedimiento de estimación resistente. Se puede graficar el modelo escogido con límites de confianza o de predicción pero también es posible graficar los residuos [21].

Para ajustar los modelos usando menú clásico: seleccionar *Relacionar – Un Factor – Regresión simple*. Posteriormente, se ingresa la variable dependiente y la independiente.

Modelo	Ecuación	Transformación en Y	Transformación en X
Lineal	$y = \beta_0 + \beta_1 x$	ninguna	ninguna
Raíz cuadrada de Y	$y = (\beta_0 + \beta_1 x)^2$	raíz cuadrada	ninguna
Exponencial	$y = e^{(\beta_0 + \beta_1 x)}$	logaritmo	ninguna
Inverso de Y	$y = (\beta_0 + \beta_1 x)^{-1}$	inverso	ninguna
Y Cuadrática	$y = \sqrt{\beta_0 + \beta_1 x}$	cuadrado	ninguna
Raíz cuadrada de X	$y = \beta_0 + \beta_1 \sqrt{x}$	ninguna	raíz cuadrada
Raíz cuadrada doble	$y = (\beta_0 + \beta_1 \sqrt{x})^2$	raíz cuadrada	raíz cuadrada
Y Logarítmico- X Cuadrática	$y = e^{(\beta_0 + \beta_1 \sqrt{x})}$	logaritmo	raíz cuadrada
Y Inversa- raíz cuadrada de X	$y = (\beta_0 + \beta_1 \sqrt{x})^{-1}$	inverso	raíz cuadrada
Y cuadrática- raíz cuadrada de X	$y = \sqrt{\beta_0 + \beta_1 \sqrt{x}}$	raíz cuadrada	raíz cuadrada
X Logarítmico	$y = \beta_0 + \beta_1 \ln(x)$	ninguna	Logaritmo
Raíz cuadrada de Y- logaritmo de X	$y = (\beta_0 + \beta_1 \ln(x))^2$	raíz cuadrada	Logaritmo
Multiplicativo	$y = \beta_0 x^{\beta_1}$	logaritmo	Logaritmo
Y Inverso, X logarítmico	$y = \frac{1}{\beta_0 + \beta_1 \ln(x)}$	inverso	Logaritmo
Y cuadrática - logaritmo de X	$y = \sqrt{\beta_0 + \beta_1 \ln(x)}$	cuadrado	Logaritmo
Inverso de X	$y = \beta_0 + \beta_1 / x$	ninguna	inverso
Raíz cuadrada de Y -inverso de X	$y = (\beta_0 + \beta_1 / x)^2$	raíz cuadrada	inverso
Curva S	$y = e^{(\beta_0 + \beta_1 / x)}$	logaritmo	inverso
Doble inverso	$y = [\beta_0 + \beta_1 / x]^{-1}$	inverso	inverso
Y cuadrática- inverso de X	$y = \sqrt{\beta_0 + \beta_1 / x}$	cuadrado	inversa
X Cuadrática	$y = \beta_0 + \beta_1 x^2$	ninguna	cuadrado
Raíz cuadrada de Y- cuadrado de X.	$y = (\beta_0 + \beta_1 x^2)^2$	raíz cuadrada	cuadrado
Y Logarítmico- X Cuadrático	$y = e^{(\beta_0 + \beta_1 x^2)}$	logaritmo	cuadrado
Y Inverso, X cuadrático	$y = (\beta_0 + \beta_1 x^2)^{-1}$	inverso	cuadrático
Doble cuadrático	$y = \sqrt{\beta_0 + \beta_1 x^2}$	cuadrado	cuadrado
Logístico	$y = \frac{e^{(\beta_0 + \beta_1 x)}}{1 + e^{(\beta_0 + \beta_1 x)}}$	$y/(1-y)$	ninguna
Log probit	$y = \varphi(\beta_0 + \beta_1 \ln(x))$	$\varphi^{-1}(y)$ (inv. normal)	Logaritmo

Tabla 3. Modelos disponibles en la Función Regresión Simple de Statgraphics [21].

Luego de seleccionar el modelo, se procede a escoger las tablas y gráficos que se necesiten para el análisis de resultados. En este proyecto se trabajan tres opciones: Resumen del análisis, gráfico del modelo ajustado y gráfico del valor observado vs predicho.

1. Resumen del análisis

En esta opción se muestra la información destacable del modelo ajustado (Figura 14).

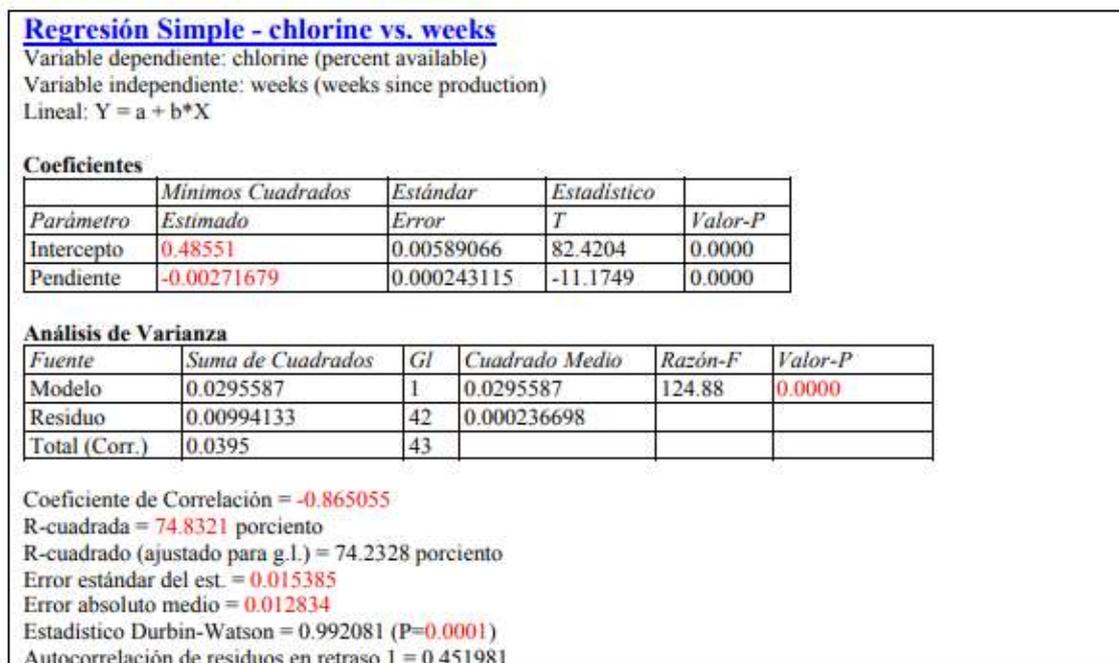


Figura 16. Resumen del análisis de una regresión simple en Statgraphics [20].

A continuación, se explicará brevemente los datos importantes que aparecen en este resumen (solo los utilizados en este trabajo):

- Coeficientes: aparecen los coeficientes estimados, errores estándares, t-estadísticas y P values.
 - Los estimadores de los coeficientes del modelo escriben la ecuación ajustada; en el ejemplo es: $X = 0.48551 - 0.00271679Y$.
- Análisis de Varianza: sirve para comparar dos o más medias. Consiste en descomponer la variación de la variable dependiente (Y) dentro de un modelo de suma de cuadrados (también del residuo o error) [22]. Comparando ambos estimadores con la prueba de la F se contrasta la existencia de correlación [21].
 - Un pequeño P-Value (menor que 0,05) señala que la relación estadística del modelo existe entre Y y X.
- Estadísticos: aparece el resumen estadístico del modelo.
 - R-cuadrada o coeficiente de determinación: El coeficiente de determinación es la proporción de la varianza de la variable dependiente explicada por la regresión en un rango que va de 0 a 100% [23].

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$$

- Coeficiente de correlación: es la medida específica que cuantifica la intensidad de la relación lineal entre dos variables en un análisis de correlación.

$$r = \frac{\sum[(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})]}{\sqrt{\sum[(x_i - \bar{x})^2(y_i - \bar{y})^2]}}$$

- Error Estándar del Estimador: señala las desviaciones alrededor del modelo utilizado, es decir, la desviación estándar de los residuos (estimada) [21].
- Error Absoluto Medio: señala el valor absoluto promedio de los residuos.

2. Gráfico del modelo ajustado

Esta opción muestra los modelos ajustados, graficando la variable dependiente y la independiente, es decir, se obtiene La línea del mejor ajuste o ecuación de predicción. Es posible graficar los límites de confianza y de predicción si son necesarios.

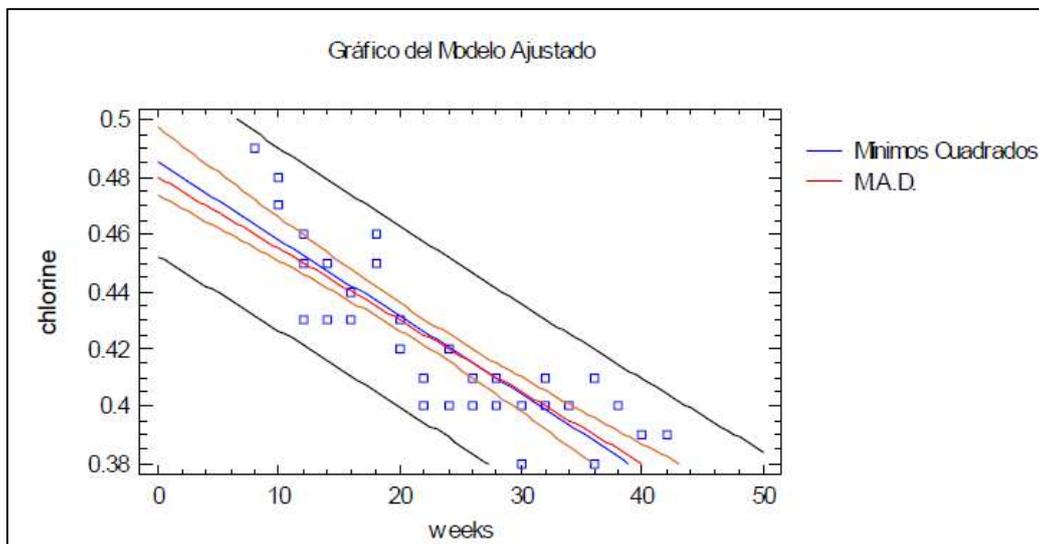


Figura 17. Gráfico del modelo ajustado en Statgraphics.

3. Gráfico del valor observado vs Valor predicho

Esta gráfica como su nombre lo indica, muestra los valores observados de Y en el eje vertical y los valores de predicción sobre el eje horizontal, mostrando una recta donde coinciden los puntos (Y=X). Siendo esta, la situación ideal.

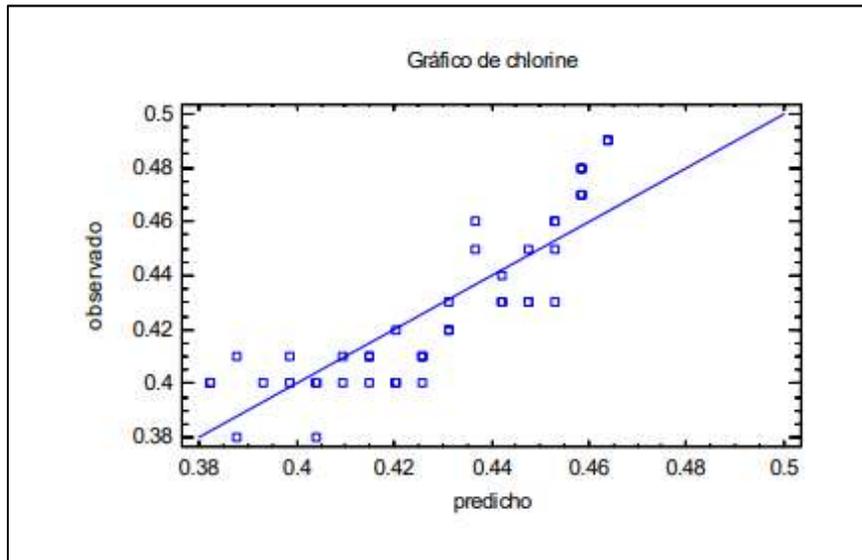


Figura 18. Grafico Valor observado vs Valor Predicho de la variable dependiente "chlorine".

Esta función permite validar el modelo escogido, ya que puedes observar las desviaciones entre ambos valores (observado y predicho). Para saber si el modelo se ajusta bien, se tiene que observar que los puntos estén ubicados lo más cerca posible de la recta (diagonal). En el ejemplo de la figura 17 se puede concluir que el modelo escogido no es muy acertado.

4.2.2. Regresión No Lineal

Esta herramienta ajusta una función indicada por el usuario relacionando una variable dependiente Y con una o más variables X (independientes). Por defecto, el modelo se estima usando cuadrados mínimos no lineales pero es posible elegir otros métodos.

Para ajustar los modelos usando menú clásico: seleccionar *Relacionar – Varios Factores – Regresión No Lineal*. Luego, es necesario ingresar la variable dependiente y el caso de la función que se quiera estudiar; escribiendo las variables con sus coeficientes (Ver ejemplo Figura 18 – A, B y C). Aparecen otras cajas de diálogo que no se aplican en este estudio como: pesos (que se aplican al cuadrado de los residuos cuando se lleve a cabo el ajuste) y selección (de un subgrupo de datos).

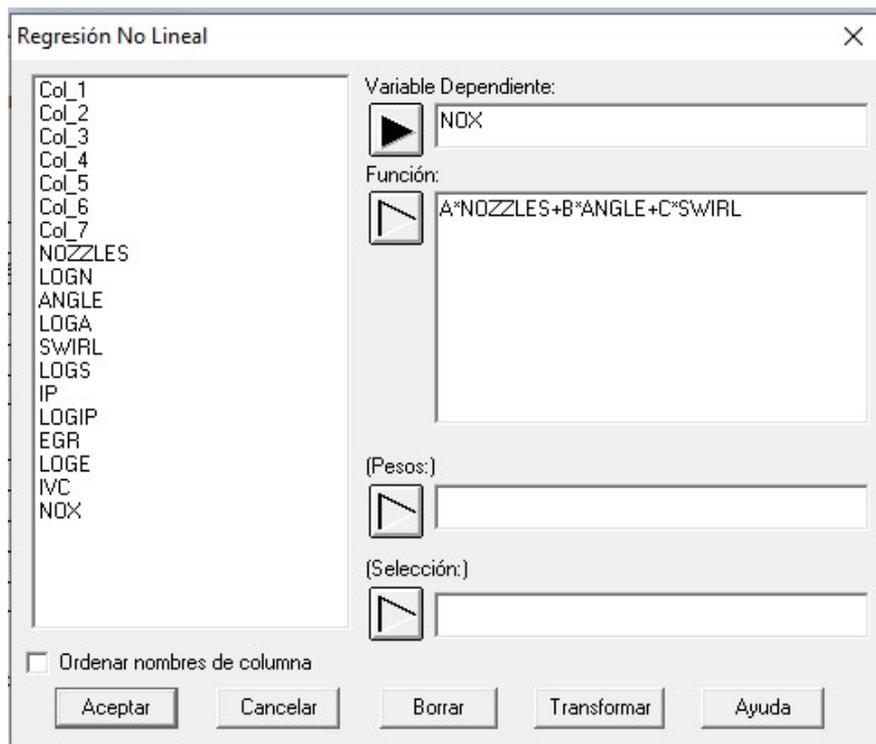


Figura 19. Ventana de ingreso de datos en Regresión No Lineal en Statgraphics.

En la segunda caja de diálogo se ingresan los estimados iniciales o “valores semilla” para cada uno de los coeficientes desconocidos del modelo. El valor inicial por defecto es 0,1 y realizará una búsqueda numérica para encontrar los valores que minimicen la suma de cuadrados de los residuos:

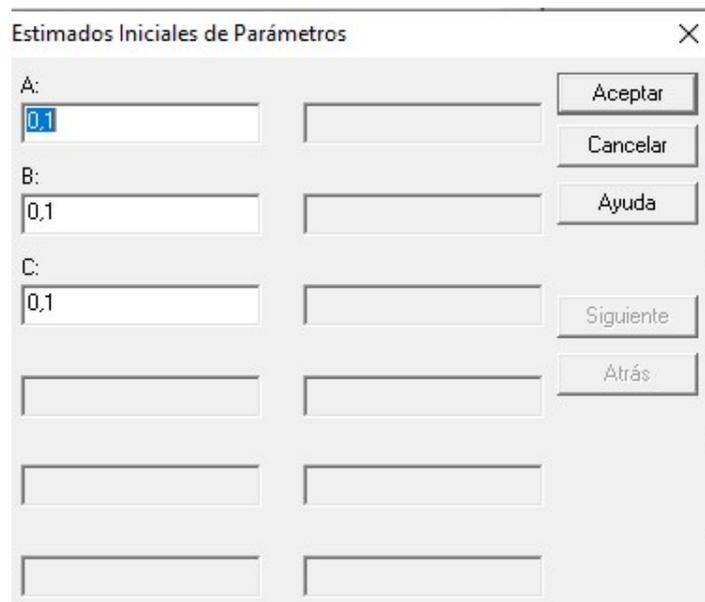


Figura 20. Ventana de estimados iniciales de parámetros en Regresión No Lineal en Statgraphics.

A partir de esto, se obtienen los resultados para su posterior análisis. Las tres opciones de esta herramienta que se utilizaron en este trabajo, son las mismas que se explicaron en la regresión simple:

1. Resumen del análisis.

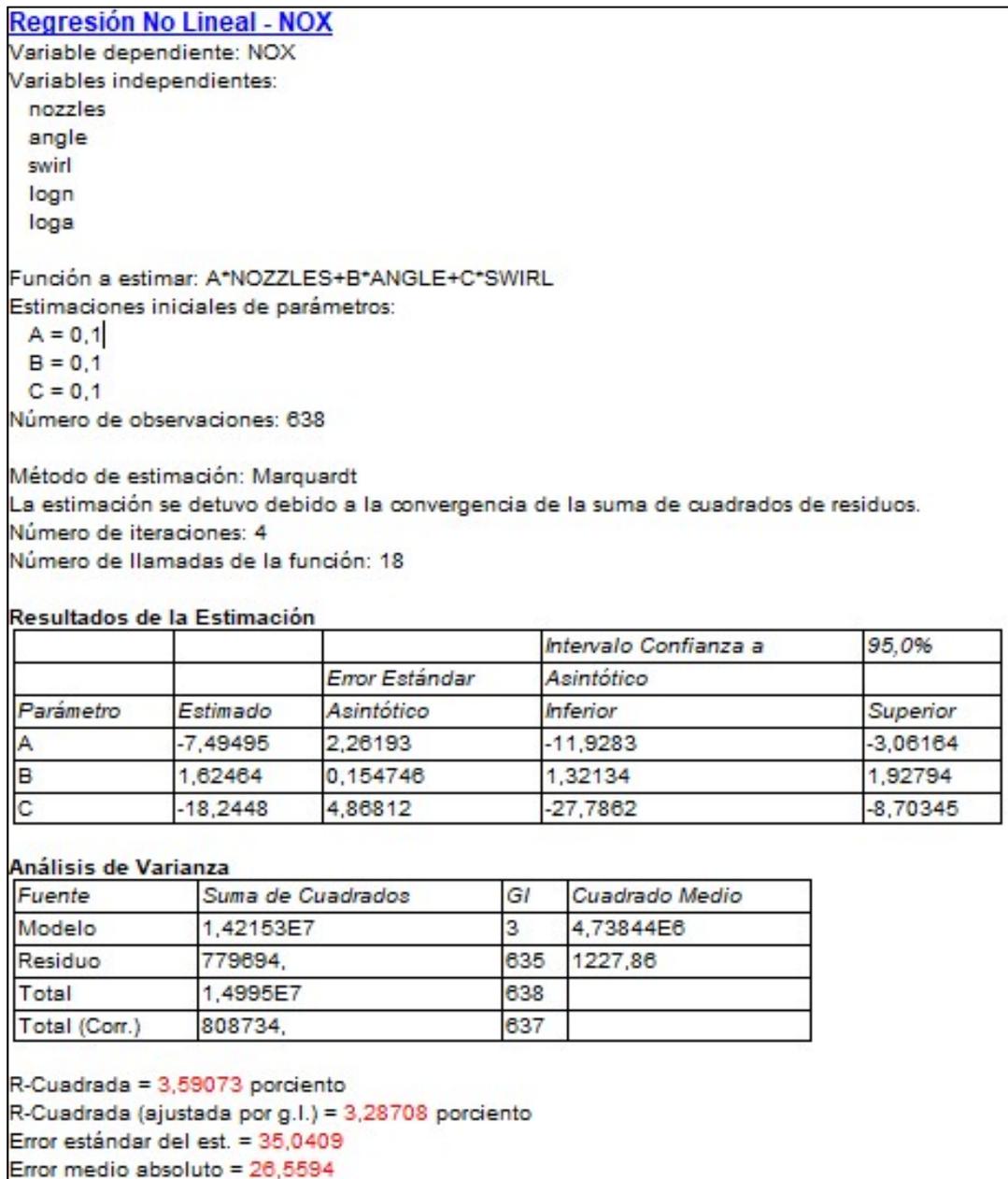


Figura 21. Resumen del análisis de una regresión simple en Statgraphic.

- Gráfico del modelo ajustado:** a diferencia de las regresiones simples, se tiene que seleccionar la variable independiente X que se desea graficar, es decir, existe una gráfica por variable X.
- Gráfico Observado vs Predicho:** mismo principio que en la regresión lineal pero se observa que los puntos se aproximan más a la recta.

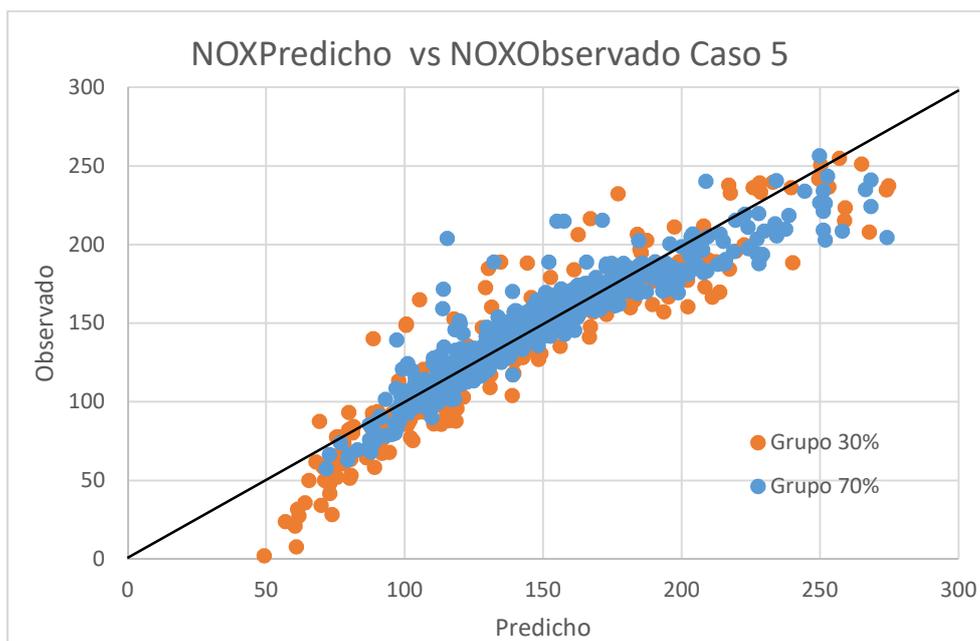


Figura 22. Gráfica Observado vs Predicho en Regresión No Lineal.

4.3. Matlab

MATLAB es el nombre abreviado de “MATriz LABoratory”, es un software matemático desarrollado por MATHWORKS desde 1984. Esta aplicación cuenta con su propio lenguaje de programación llamado M-Code con el que se puede realizar numerosos cálculos con matrices, vectores, funciones e incluso comunicarse con otros lenguajes de programación como C++ o Java [24].

Una de las características más importantes de este programa es que tiene muchas herramientas que se agrupan en Toolbox (también llamada librería) donde se puede almacenar funciones creadas por los usuarios o programas predefinidos. Una de las extensiones más importante que se utiliza en este proyecto es “The Regression Learner app”, donde se emplean los principios de Machine Learning y redes neuronales.

Es importante comentar que los datos utilizados de CFD se guardan en un archivo Excel y posteriormente se puede importar directamente a Matlab convirtiéndose en una matriz, a la cual se le puede asignar un nombre de una variable y así, evitar copiar todos los datos manualmente.

Para poder presentar la herramienta o aplicación que se utilizó en Matlab para este trabajo, es necesario introducir una serie de conceptos previamente.

4.3.1. Machine Learning y redes neuronales

El Machine Learning (ML) cuenta con ventajas que permiten simplificar y acelerar muchos procesos de optimización en los MCIAs como controlar el consumo y las emisiones (el caso de esta investigación) pero su desarrollo es un proceso laborioso por su complejidad y la necesidad de un entrenamiento.

ML es una herramienta que utiliza numerosos métodos computacionales para “aprender” información de los datos sin depender de una ecuación predeterminada como modelo, es decir, enseña a las computadoras a “aprender” de la experiencia [25]. El rendimiento depende del número de muestras disponibles para el aprendizaje. Esta herramienta usa principalmente dos tipos de técnicas (Ver Figura 21):

- **Aprendizaje supervisado:** entrena un modelo conociendo los datos tanto de entrada como de salida y así, predecir futuros datos de salida. Es necesario la intervención humana. Esta técnica, a su vez, se divide en dos tipos de datos: Clasificación (Classification), donde se clasifican los objetos dentro de diversas clases y Regresión (Regression), donde predice un valor numérico (**como se hizo en este proyecto**).
- **Aprendizaje no supervisado:** este método encuentra patrones y estructuras intrínsecas basado en datos de entrada. No es necesario intervención humana. La técnica más utilizada en estos casos se llama Agrupación (Clustering) [25].

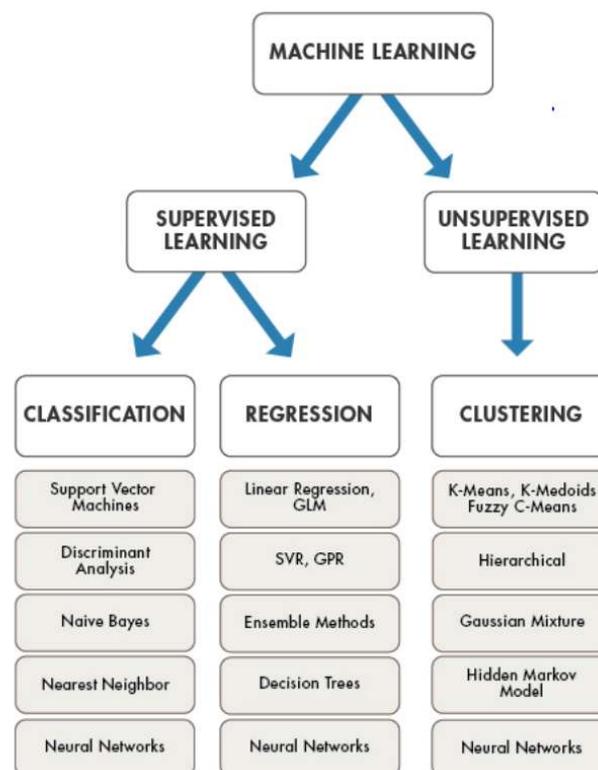


Figura 23. Técnicas de aprendizaje del Machine Learning [25].

En la Figura 21 se observan los diferentes algoritmos que se pueden utilizar para predecir comportamientos por el método de Regresión, pero este documento se centrará en Redes Neuronales Artificiales (Artificial Neural Network, ANN). Las ANN son redes interconectadas masivamente en paralelo de elementos simples (normalmente adaptativos) y con organización a distintos niveles [26]. Este algoritmo está inspirado en modelos biológicos.

Para que las ANN puedan reproducir el comportamiento de cualquier sistema es necesario un entrenamiento previo. Esto es posible si se aporta a la red, datos de todos los posibles comportamientos del sistema (datos de entrada y de salida). En la Figura 22 es posible observar un esquema neuronal donde la misma está constituida por tres capas normalmente:

- **Capa de entrada:** donde ingresan los datos.
- **Capa oculta:** proporciona grados de libertad a la red neuronal; podría estar constituida por varias capas. Estas capas se pueden clasificar según el flujo de datos: feedforward (unidireccionales), cuando circula en un único sentido o feedback (retroalimentadas), cuando circula en cualquier sentido [27].
- **Capa de salida:** como su nombre lo indica, es por donde salen los datos.

En este estudio los datos de entrada son los especificados en el apartado de variables (número de orificios, EGR, presión de inyección, entre otras) y los datos de salida son los resultantes del CFD.

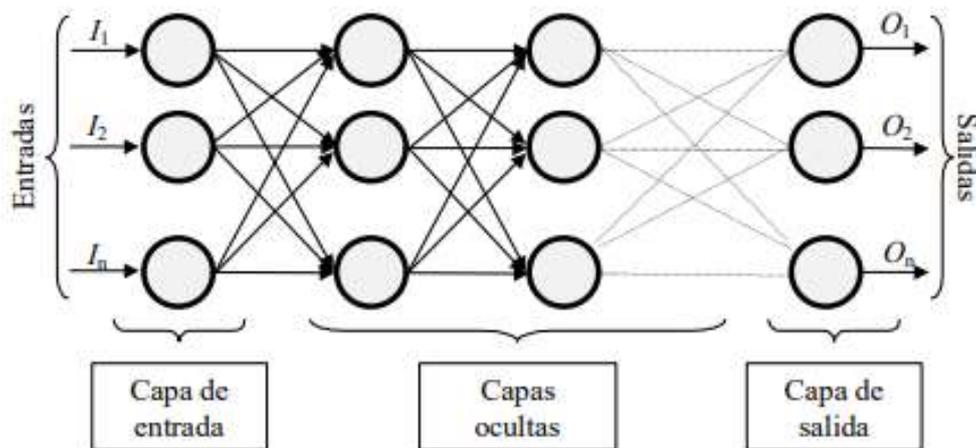


Figura 24. Red neuronal totalmente conectada [26].

Estos conocimientos básicos ayudan a entender la herramienta de Matlab que se utilizó en este proyecto para encontrar el modelo y que se explicará a continuación.

4.3.2. Regression Learner APP

Esta herramienta emplea modelos de regresión para predecir datos. Hay métodos automatizados donde el programa el mejor modelo de regresión para los datos seleccionados [28]. Esto incluye:

- Procesos Gaussianos.
- Métodos Kernel para clasificación.
- Vector de soporte.
- Árboles de regresión.
- Conjuntos de árboles de regresión.
- Redes neuronales.
- Regresiones lineales.

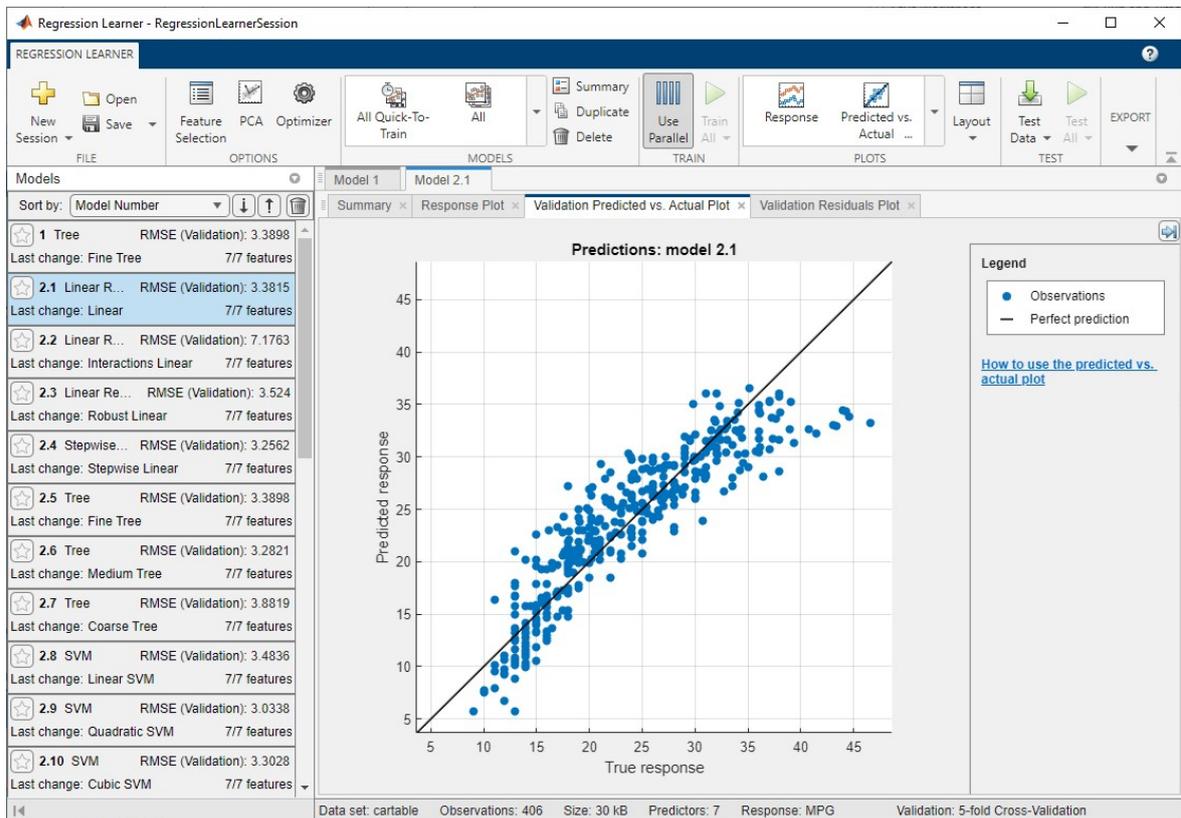


Figura 25. Interfaz de Regression Learner APP en Matlab [28].

Regression Learner APP emplea la tecnología ML (comentada en el apartado anterior), prediciendo a partir de un conjunto de datos de entrada (predictores) y respuestas conocidas. Luego de entrenar el modelo, es posible generar nuevas respuestas con nuevos datos de entrada; exportando el modelo al espacio de trabajo o

generando el código de Matlab para recrearlo. En la Figura 24 se puede observar el flujo de trabajo de cómo actúa esta aplicación.

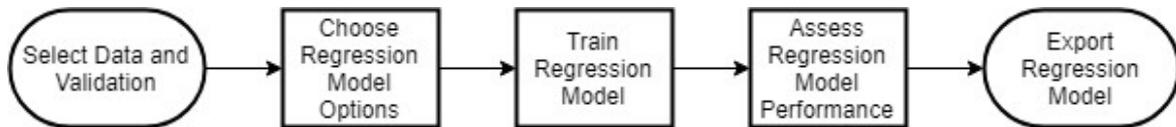


Figura 26. Diagrama de flujo de trabajo de Regression Learner APP en Matlab [28].

Además de entrenar los nuevos datos en el modelo que se obtuvo como resultado para su validación, esta herramienta proporciona otras opciones que son importantes y se utilizaron en esta investigación como: el **gráfico de observado Vs Predicho** (también en Statgraphics) y la **optimización de los hiperparámetros**.

La optimización de los hiperparámetros o parámetros internos del modelo afecta directamente a este, mejorándolo. Esta aplicación tiene la opción de automatizar la selección de los valores de estos parámetros, ya que puede ser muy engorroso realizarlo manualmente. Esto es posible mediante una optimización que busca minimizar el error cuadrático medio (MSE) del modelo probando diferentes combinaciones de los hiperparámetros. El modelo que se obtiene como resultado se puede exportar y trabajar posteriormente con ellos, como en los otros casos.

Capítulo 5

5. Metodología

Es importante comentar cuales fueron los pasos que se siguieron en esta investigación para poder comprender los resultados. En primer lugar, se presentan las diferentes variables que intervinieron durante el desarrollo de este proyecto.

5.1. Variables a estudiar

Como se comenta anteriormente, los datos utilizados en este estudio provenientes de CFD están representados por variables que explicaremos en este apartado. Algunas se utilizan como datos de entrada (inputs) y otros como datos de salida o datos a predecir (outputs). Estas variables se dividen en: principales y secundarias o no estudiadas.

5.1.1. Variables principales

Estas variables principales son las que se evalúan en este estudio, es decir, que cualquier cambio que se realice en ellas, afecta los resultados de manera significativa.

A continuación, serán brevemente explicadas junto con los nombres con los que fueron introducidos en las herramientas computacionales (en negrita). Las 5 primeras variables son los valores de entrada (inputs) y las otras 4 variables son los valores de salida (outputs):

1. Número de orificios del inyector (Num nozzle - **NOZZLES**): variando la cantidad de orificios afecta a la combustión notablemente; en la pulverización del combustible y a la cantidad de e-fuel inyectada (se necesita más cantidad que el diesel por el bajo poder calorífico).
2. Presión de inyección (Injection Pressure - **IP**): como la variable anterior, afecta a la cantidad de combustible que ingresa en la cámara de combustión. Variable limitada por factores físicos de la bomba de inyección en el common-rail. Además, afecta a la velocidad de suministro

de combustible (mayor presión de inyección se traduce en mayor velocidad del flujo a la salida del inyector). Esto se demuestra con el principio de Bernoulli:

$$P_1 + \frac{1}{2}\rho V_1 + \rho gh_1 = P_2 + \frac{1}{2}\rho V_2 + \rho gh_2$$

Donde el primer término es la energía de presión, el segundo es la energía cinética (unidad de volumen) y el tercer término es la energía potencial (unidad volumen). Siendo el punto 1 el lugar de mayor presión y el punto 2, la salida del inyector donde la velocidad aumenta.

3. Ángulo de inyección (Spray angle - **SPRAY**): el ángulo en el que el combustible es inyectado en la cámara afecta de forma directa a uno de los principales problemas, las emisiones contaminantes resultantes de la combustión; principalmente CO y NO_x [29].
4. Número de torbellino (Swirl number - **SWIRL**): es un número adimensional que se utiliza para caracterizar los flujos giratorios o en remolino; es relación entre el flujo axial del momento tangencial y el flujo axial del momento axial. La temperatura de llama se ve afectada por esta variable [30].
5. Gases de escape recirculados (Exhaust Gas Recirculation – **EGR**): afecta a la temperatura de combustión y, a su vez, las emisiones de NO_x
6. Óxidos de nitrógeno (NO_x): como una de las principales desventajas de este tipo de motor, se busca disminuir constantemente el valor de esta variable. Es uno de los valores a predecir en este proyecto.
7. Eficiencia térmica (**Eff**): Es otro de los variables a predecir en este trabajo. Se intenta maximizar el valor pero existen numerosas pérdidas que impiden esto.
8. Hollín (**Soot** – mg/s): emisión contaminante resultante de la combustión. Se tiene como fin, minimizar el valor de este.
9. Función Objetivo (**OF** - adimensional): función que toma en cuenta todos los parámetros de salida; funciona para evaluar la viabilidad del ensayo.

Es importante comentar que las variables que se buscan optimizar son de salida y son las siguientes: NO_x y **Eff**.

5.1.2. Variables secundarias o no estudiadas

A diferencia de las variables anteriores, no se tomaron en cuenta en la investigación pero fueron empleadas para obtener los valores outputs con el CFD (datos de partida). Es importante comentar que también tienen un papel importante en la combustión.

A continuación, serán nombradas junto con los nombres con los que fueron introducidos en las herramientas computacionales (en negrita):

1. Identificación del caso o configuración (**Case** - adimensional): nombre de la configuración estudiada.
2. Variables geométricas (**Geom 1, Geom 2, Geom 3, Geom 4, Geom 5, Geom 6** - coordenadas): de la cámara de combustión.
3. Presión de cierre de la válvula de admisión (Intake Valve Closing - **IVC Pressure** - bar): esta variable no se toma en cuenta porque en análisis previos se probó que este parámetro era poco significativo en comparación con las demás variables.
4. Consumo específico de combustible indicado (**ISFC** – g/kWh): es la tasa de flujo de combustible total por unidad de potencia indicada (salida) [31]. No se estudia esta variable porque está interrelacionada con la eficiencia del motor (son inversamente proporcionales).

5.2. Punto de operación del motor

El motor usado en la investigación es un motor diesel de servicio mediano para transportación de bienes con las siguientes características:

- Relación de compresión: 16
- 3750 rpm
- 18 bar IMEP (Presión Media Efectiva Indicada)

Los datos estudiados se encuentran dentro de unos rangos que se definen en este apartado, junto con un resumen de algunas propiedades importantes que ayudan a entender el estudio (ver Tabla 4).

VARIABLE	UNIDAD	VALOR MIN.	VALOR MAX.	TIPO DE VARIABLE
NUM ORIFICIOS	--	7	12	Entrada
ÁNGULO DE INYECCIÓN	grados (°)	155	170	Entrada
NUMERO DE SWIRL	-	1	3	Entrada
PRESIÓN DE INYECCIÓN	Bar	1600	2400	Entrada
EGR	%	0	25,5	Entrada
NO_x	mg/s	-	-	salida
EFF	%	-	-	salida
HOLLÍN	mg/s	-	-	salida
OF	-	0	10000	salida

Tabla 4. Rango de trabajo del motor estudiado.

5.3. Pasos iniciales

5.3.1. Filtrado de datos por Función Objetivo

En primer lugar, los casos exportados del CFD fueron **977** pero se filtró previamente antes de empezar con el estudio. El filtro consiste en descartar todos los casos donde el valor de la variable OF sea mayor de 10000. Esta variable estudia la viabilidad del ensayo, tomando en cuenta todos los parámetros de salida (eficiencia, emisiones, etc). Los ensayos mayores a 10000 se consideran no viables porque exceden enormemente las emisiones contaminantes o porque el rendimiento estaba muy por debajo del punto de referencia inicial y por lo tanto, se descartan automáticamente del estudio. Luego de este paso, los casos a estudiar pasaron a ser **908**, es decir, se descartaron 69 casos.

Este proceso se llevó a cabo en Excel, donde se ordenaron los ensayos por los valores de la variable OF, de menor a mayor. Luego, se busca el caso donde superaba el valor comentado para proceder con el descarte.

5.3.2. División de datos (70% y 30%)

Para poder proceder con el estudio de los datos, se realiza la división de los ensayos en dos grupos:

- **70%:** sirven para entrenar el modelo.
- **30%:** sirven para la validación de los modelos.

Esto se realizó en Excel asignando a los casos los valores “1” o “0”; cumpliendo el siguiente orden: “0-0-1” (ver Figura 25). Posteriormente, se separan los casos con el valor “0”, formando el grupo 70% y los casos restantes o “1”, el grupo 30%.

Outputs							Nº ORDEN
EGR rat	IVC Pressure	Nox	Soot	ISFC	eff	OF	
[0 0.25]	[339622 439622]	[mg/s]	[mg/s]	[g/kWh]	[-]	[-]	[-]
0,17298	4,04E+05	148,32	2,37E-17	378,93	0,4241	0,93526	0
0,17141	4,04E+05	161,86	1,65E-17	378,35	0,4248	0,93617	0
0,17853	4,11E+05	144,11	3,57E-17	379,56	0,4234	0,93654	1

Figura 27. División de variables a estudiar.

La división se realiza de esta manera porque así, se puede asegurar que en ambos grupos se encuentren los valores en un rango igual o parecido, es decir, que los valores sean igual de aleatorios y no cumplan un patrón. Con esta división es posible validar posteriormente todos los modelos encontrados y poder observar su viabilidad. Graficando NO_x vs $\text{Log}(\text{SOOT})$ se puede verificar la aleatoriedad de los casos en ambos grupos (Ver figura 26).

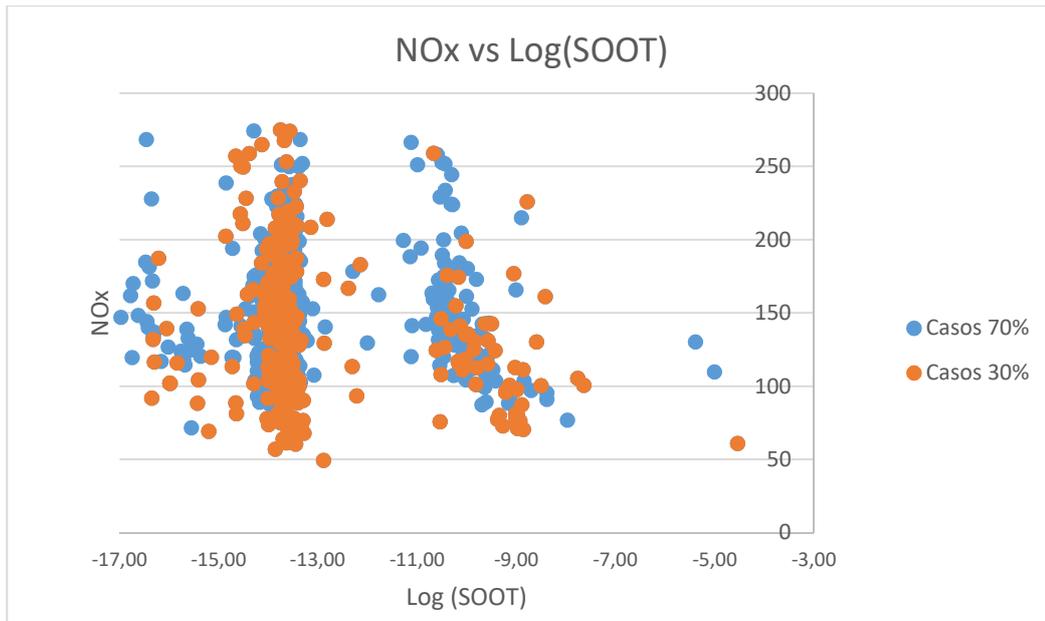


Figura 28. Distribución de los ensayos en ambos grupos.

5.3.3. Ajustes utilizando la herramienta Statgraphics

Luego de tener los dos grupos creados se procede a realizar el ajuste con las herramientas de Statgraphics los datos del 70% para empezar a analizar su comportamiento y propiedades. En primer lugar, se comparan algunas variables utilizando la herramienta "Regresión simple" con los siguientes casos:

Gráfica (Variable dependiente vs Variable Independiente)	Función
NO_x vs EGR	Lineal
	Cuadrática
	Exponencial
	Raíz cuadrada
NO_x vs NOZZLES	Lineal
	Exponencial
NO_x vs Injection Pressure (IP)	lineal
	Exponencial
NO_x vs Spray Angle (SPRAY)	lineal
	Exponencial
NO_x vs Swirl Number (SWIRL)	Cuadrática
	Inversa- $\ln NO_x$ -SWIRL

Tabla 5. Casos estudiados con Regresión Simple en Statgraphics.

Una vez realizado el estudio de las cinco variables de entrada con la variable principal a optimizar en la herramienta comentada, se procede a estudiarlas todas como un conjunto en la herramienta "Regresión No lineal"; Ingresando manualmente las diferentes funciones o modelos. Además, en algunos casos se estudia la correlación de las diferentes variables independientes con la función "Matriz de correlación". Los modelos estudiados son los siguientes:

Caso	Variable depend.	Variab. ind.	Modelo/Función
1	NO_x	EGR NOZZLES IP SPRAY SWIRL	$NO_x = A * EGR + B * INJECTIONP + C * SWIRL + D * NOZZLE + E * SPRAY$
2			$NO_x = A * EGR^2 + B * INJECTIONP^2 + C * SWIRL^2 + D * NOZZLE^2 + E * SPRAY^2$
3			$NO_x = A * EGR + B * LOG(IP)^2 + C * LOG(SWIRL)^2 + D * LOG(NOZZLE)^2 + E * LOG(SPRAY)^2$
4			$NO_x = A * EGR + B * \left(\frac{1}{IP}\right)^2 + C * \frac{1}{SWIRL} + D * \frac{1}{ANGLE} + E * \frac{1}{NOZZLES}$
5			$NO_x = A * EGR + B * LOG(IP)^{25} + C * LOG(S)^8 + D * LOG(N)^8 + E * \left(\frac{1}{LOG(A)}\right)^2$

Tabla 6. Casos estudiados con Regresión No Lineal en Statgraphics.

Posteriormente, se escoge la opción más favorable, basándose en el Coeficiente de determinación (R^2) mayor para graficar la variable dependiente NO_x Observado vs NO_x Predicho de ambos grupos (70% y 30%), y así, validar el modelo. Para obtener el gráfico del grupo "30%" es necesario extraer el modelo o función resultante de la regresión e introducir los valores de las variables en Excel para obtener el NO_x predicho y luego, graficar. Con esto acaba el estudio en esta aplicación y se comienza con el software Matlab.

5.3.4. Matlab

Empleando la opción de importación de datos desde Excel, se toman los mismos datos que se evaluaron en Statgraphics, previamente filtrados y divididos en los dos

grupos. En este caso se cargan los dos grupos y se asignan nombres (variables) a cada uno para estudiarlos por separado.

En este software se realiza el estudio de las dos variables importantes en este proyecto, NO_x y **Eff** (Eficiencia térmica). Se aplican, en ambos casos, los mismos pasos que se explican a continuación:

- En primer lugar, se abre la aplicación “Regression Learner” (modelos y funciones de regresión) donde es necesario iniciar una nueva sesión con la opción de cargar las variables desde el espacio de trabajo (workspace).
- Posteriormente, se seleccionan las variables independientes y dependientes a estudiar; que en este caso son las cinco comentadas en los apartados anteriores y NO_x /Eff.
- Se inicia el análisis de regresión y para agilizar el proceso, se elige la opción “All”, donde es posible entrenar todos los modelos sin necesidad de seleccionar uno por uno (ver Figura 27). Para obtener los resultados es necesario seleccionar “Train”.
- Luego de observar los resultados, se procede a optimizar los hiperparámetros de cada modelo en la misma barra donde se selecciona la opción “All”. Estas opciones comienzan con la palabra “Optimizable”, es decir, si se desea trabajar con Procesos Gaussianos se tiene que seleccionar “Optimizable Gaussian Process Regression Models” (ver Figura 27).
- Basándose en R^2 y en el RMSE (Error cuadrático medio), se escoge el mejor modelo y se exporta al workspace asignándole un nombre.
- Una vez exportado, se procede a predecir los valores de las variables dependientes de ambos grupos (70% y 30%) con la siguiente función:

$$yfit = trainedModel.predictFcn(T)$$

Donde “yfit” es el nombre editable de la variable donde se guardarán los resultados. “TrainedModel” es el nombre del modelo y “T” es la variable donde se encuentran los datos independientes. Los resultados se exportan a Excel para su posterior análisis.

- Se realiza el mismo procedimiento pero con un modelo que arroje resultados de bajo rendimiento para poder validar el modelo correcto y evaluar las diferencias.

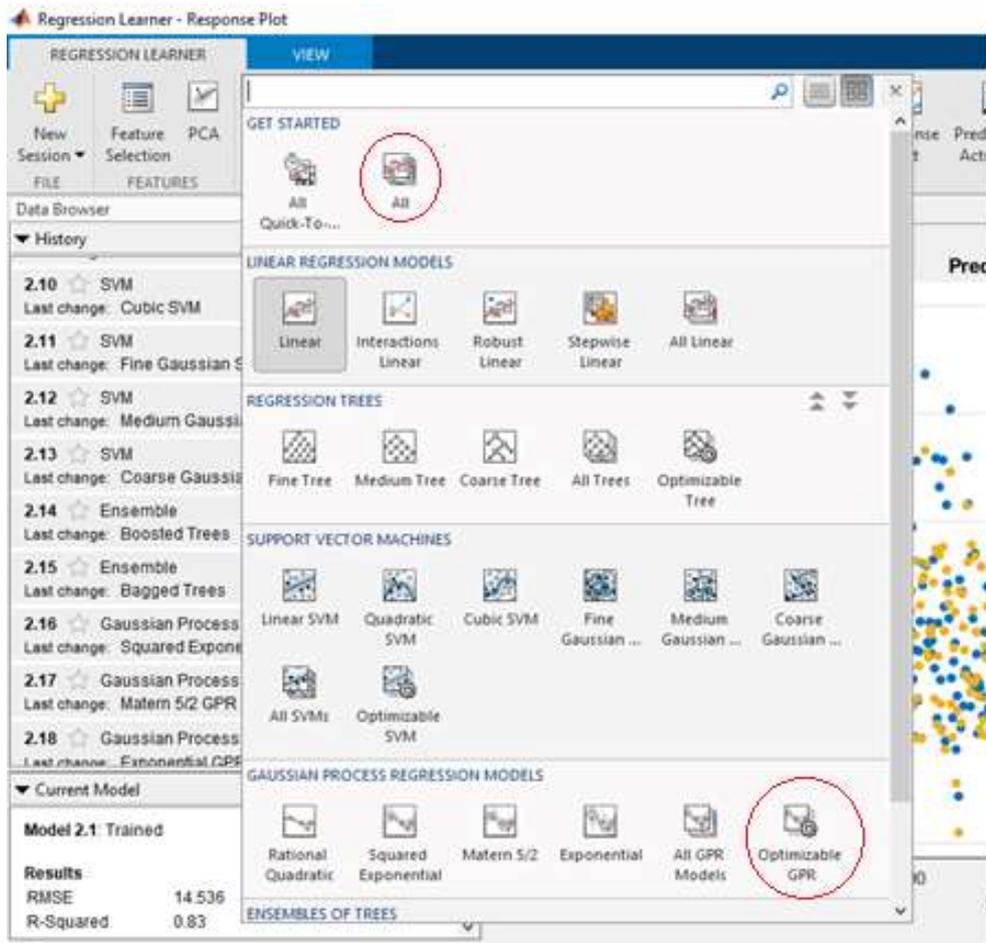


Figura 29. Modelos de regresión en Regression Learner.

5.3.5. Excel

Para continuar el estudio, existe una retroalimentación entre Matlab y Excel. Una vez exportados los datos de ambos grupos de Matlab a Excel, se analizan y se trabajan de la siguiente manera (para NO_x y para Eff):

- Se grafica Observado vs Predicho en ambos grupos para validar el modelo. Previamente se eliminan los puntos anómalos o que perjudican el estudio; estos son los que no corresponden con el modelo buscado (Realizado en el caso Eff). Además, se calcula el RMSE manualmente para corroborar el ajuste.
- Este procedimiento se realiza de manera análoga para otro modelo con un nivel de ajuste más bajo, con la finalidad de comparar y entender tendencias.

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\text{Predicho} - \text{Observado})^2}{n}}$$

- Por último, se buscan dos puntos óptimos en cada caso; iterando los datos de las variables independientes manualmente basándose en los resultados obtenidos.
- Luego de realizar el cambio de los valores, se importan a Matlab donde se predicen con el modelo escogido (modelo correcto) y luego, se exportan los resultados a Excel. Recordando que los puntos óptimos buscados en el caso del NO_x es el mínimo valor posible y en el caso de Eff, es el máximo valor posible.

En esta parte se ordenan los datos por orden: en el caso del NO_x , de menor a mayor y en el caso de Eff, de mayor a menor.

Capítulo 6

6. Resultados y análisis

Una vez explicados los pasos que se siguieron para realizar esta investigación, es necesario plasmar los resultados y verificarlos para poder llegar a una conclusión y así, observar si son válidos para su posterior uso. En este apartado se analizarán dichos resultados.

6.1. Regresión simple (Statgraphics)

Se obtuvieron los siguientes resultados tras analizar las variables según la tabla 5 en Statgraphics empleando la herramienta “*Regresión simple*”:

6.1.1. NO_x vs EGR

Se entrenaron 4 modelos obteniéndose las siguientes gráficas del “Modelo ajustado” y datos importantes para el estudio de este como: coeficiente de correlación, R^2 y la ecuación obtenida. Es importante comentar que en estas gráficas están presentes los límites de confianza junto con la línea de tendencia escogida.

- **Modelo lineal**

Se observa que existe una relación inversamente proporcional entre el EGR y la formación de NO_x , tal como era de esperar. A mayor tasa de recirculación de gases de escape, menor es la temperatura de la mezcla durante la combustión, evitando la formación de óxidos de nitrógeno. Aunque el ajuste lineal es capaz de reproducir esta tendencia, el mejor ajuste se consigue con una función exponencial (ver figuras 31, 32 y 33).

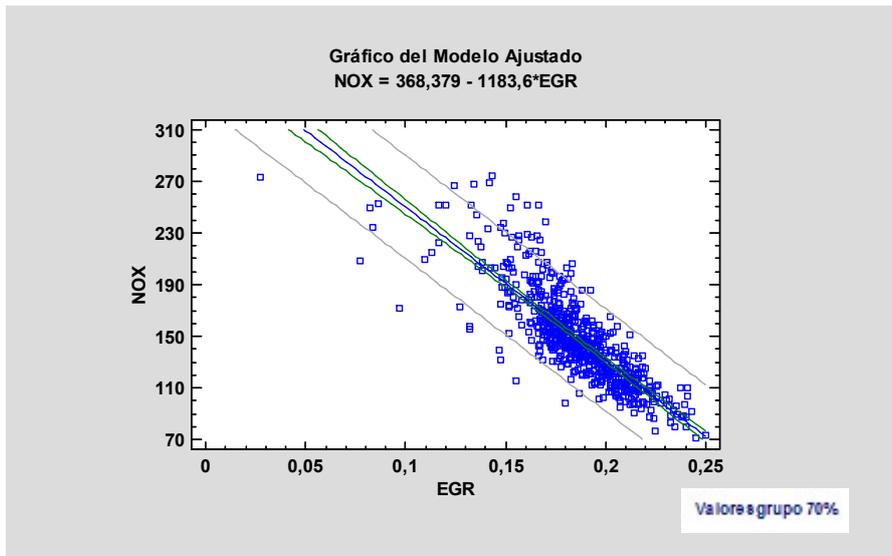


Figura 30. Modelo lineal NO_x vs EGR.

- **Modelo cuadrático**

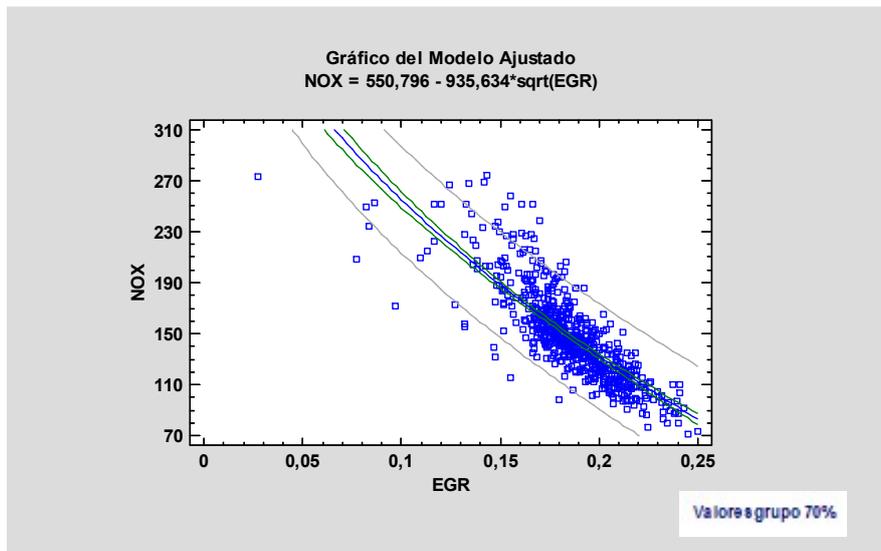


Figura 31. Modelo cuadrático NO_x vs EGR.

- **Modelo exponencial**

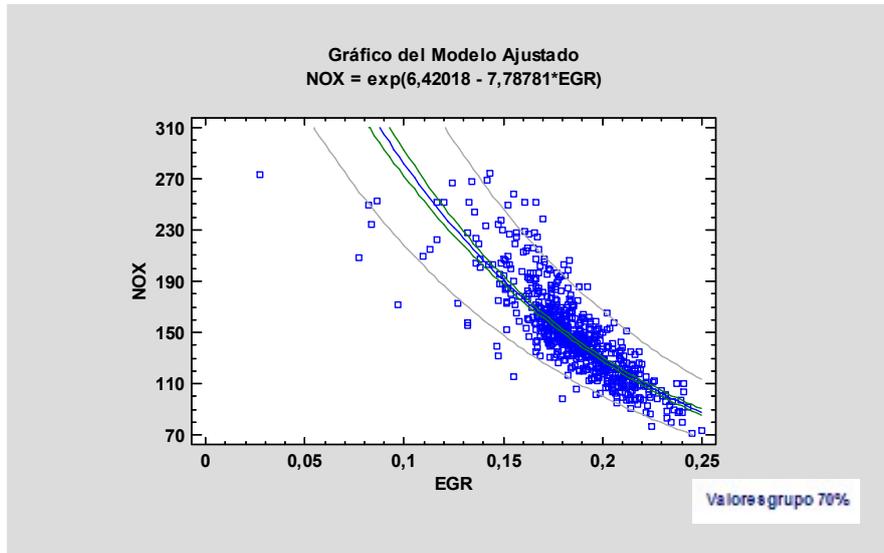


Figura 32. Modelo exponencial NO_x vs EGR.

- **Modelo Raíz cuadrada**

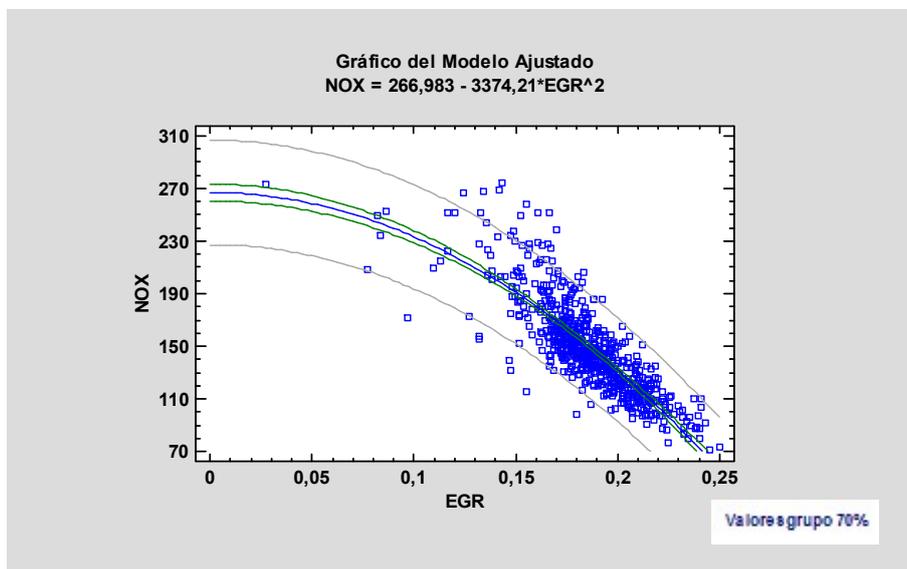


Figura 33. Modelo raíz cuadrada NO_x vs EGR.

Los datos importantes se resumen en la siguiente tabla para poder realizar una comparación entre los modelos nombrados anteriormente.

Modelo	Lineal	Cuadrático	Exponencial	Raíz cuadrada
R^2 (%)	67,9	68,4	68,8	65,0
Coefficiente de correlación	-0,824	-0,827	-0,830	-0,806
Ecuación	$NO_x = 368,38 - 1183,6 * EGR$	$NO_x = 266,98 - 3374,21 * EGR^2$	$NO_x = e^{(6,42 - 7,79 * EGR)}$	$NO_x = 550,80 - 935,63 * \sqrt{EGR}$

Tabla 7. Resultados de los diferentes ajustes NO_x vs EGR.

En los cuatro casos se obtuvo un coeficiente de determinación (R^2) muy parecido pero ninguno es concluyente, es decir, no son modelos que se ajusten perfectamente a la variable real. Si se tuviese que escoger uno, sería el modelo exponencial al tener este, un r-cuadrado mayor. Además, se observa que los valores de los coeficientes de correlación indican una relación moderadamente fuerte entre las variables de forma negativa, es decir, que mientras el valor de EGR aumenta, las emisiones de disminuyen (viceversa). A continuación, se estudiarán dos modelos por cada caso ya que arrojan valores muy desalentadores y es posible llegar a conclusiones a partir de estos.

6.1.2. NO_x vs NOZZLES

Se entrenaron 2 modelos obteniéndose las siguientes gráficas del “Modelo ajustado” y datos característicos para el estudio de este como: coeficiente de correlación, R^2 y la ecuación obtenida.

- **Modelo lineal**

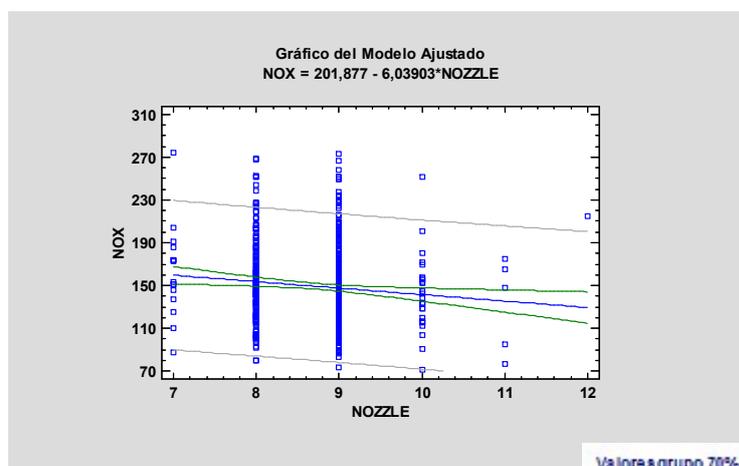


Figura 34. Modelo lineal NO_x vs NOZZLES.

- **Modelo exponencial**

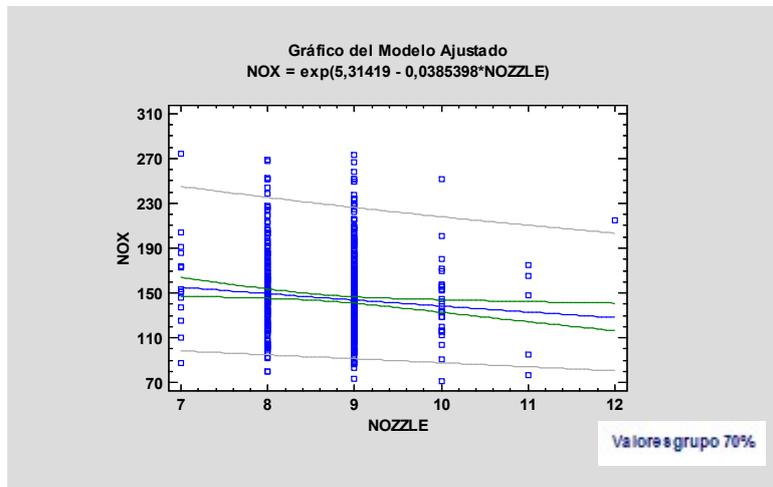


Figura 35. Modelo exponencial NO_x vs NOZZLES.

Para observar estos gráficos hay que tomar en cuenta que el número de orificios es una variable discreta, es por esto que las gráficas tienen una forma vertical característica; es difícil predecir una línea de tendencia. Además, tiene efecto cruzado con otras variables. Los datos importantes se resumen en la Tabla 8 para poder realizar una comparación entre los modelos nombrados anteriormente.

Modelo	Lineal	Exponencial
R^2 (%)	1,1	1,1
Coefficiente de correlación	-0,106	-0,103
Ecuación	$NO_x = 201,88 - 6,03903 * NOZZLE$	$NO_x = e^{(5,314 - 0,039 * NOZZLE)}$

Tabla 8. Resultados de los diferentes ajustes NO_x vs NOZZLES.

En los dos casos se obtuvo un coeficiente de determinación (R^2) muy parecido y muy bajo, es decir, las estimaciones se ajustan muy mal a la variable real. En este caso no se puede escoger ningún modelo. Además, se observa que los valores de los coeficientes de correlación indican una relación relativamente débil entre las variables de forma negativa, es decir, el número de orificios de inyección y las emisiones de NO_x son independientes si no se toman en cuenta otras variables.

6.1.3. NO_x vs Injection Pressure (IP)

Se entrenaron 2 modelos obteniéndose las siguientes gráficas del “Modelo ajustado” y datos característicos para el estudio de este como: coeficiente de correlación, R^2 y la ecuación obtenida.

- **Modelo lineal**

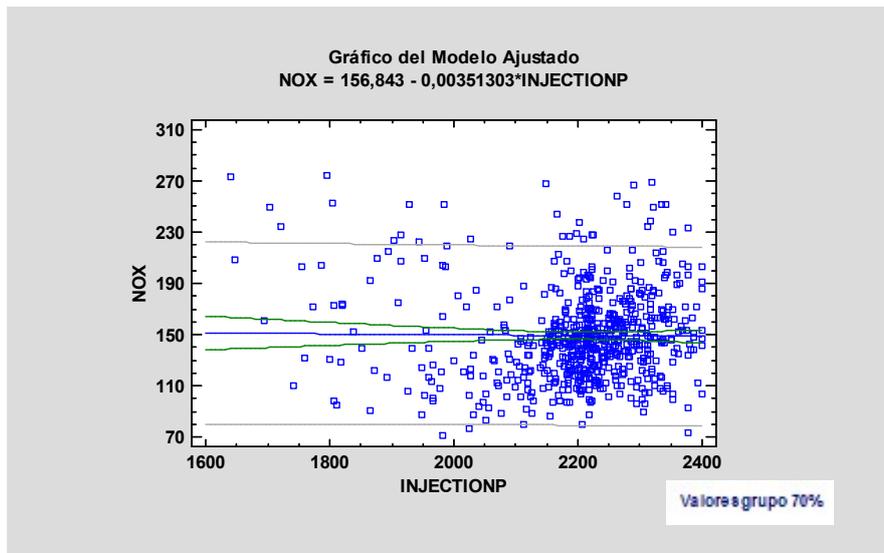


Figura 36.. Modelo lineal NO_x vs IP.

- **Modelo exponencial**

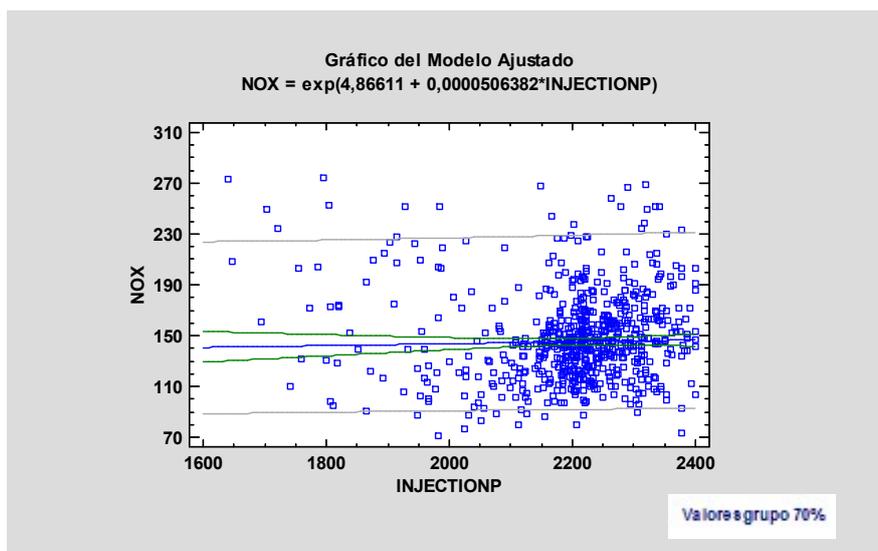


Figura 37. Modelo exponencial NO_x vs IP.

En ambos casos, los valores tienen una dispersión muy alta; es difícil que siga una línea de tendencia. Los datos importantes se resumen en la siguiente tabla para poder realizar una comparación entre los modelos nombrados anteriormente. Estos resultados han sido sorprendentes, porque en la literatura se pueden encontrar trabajos que indican que altas presiones de inyección tienden a producir más cantidad de NO_x . En este caso en particular, la relación débil (o que no se pueda predecir con una función lineal o exponencial), puede ser porque tendrá inter-relación o efecto cruzado con otras variables que participan en el estudio.

Modelo	Lineal	Exponencial
R^2 (%)	0,01	0,08
Coefficiente de correlación	-0,141	-0,078
Ecuación	$NO_x = 156,84 - 0,0035 * INJECTIONP$	$NO_x = e^{(4,87 + 0,0000506*INJECTIONP)}$

Tabla 9. Resultados de los diferentes ajustes NO_x vs IP.

En los dos casos se obtuvo un coeficiente de determinación (R^2) muy parecido y muy bajo, es decir, las estimaciones se ajustan muy mal a la variable real. En este caso no es conveniente escoger algún modelo. Además, se observa que los valores de los coeficientes de correlación indican una relación relativamente débil entre las variables de forma negativa, es decir, el valor de la presión de inyección y las emisiones de NO_x son independientes si no se toman en cuenta otras variables.

6.1.4. NO_x Vs Spray Angle (SPRAY)

Se entrenaron 2 modelos obteniéndose las siguientes gráficas del “Modelo ajustado” y datos importantes para el estudio de este como: coeficiente de correlación, R^2 y la ecuación obtenida.

- **Modelo lineal**

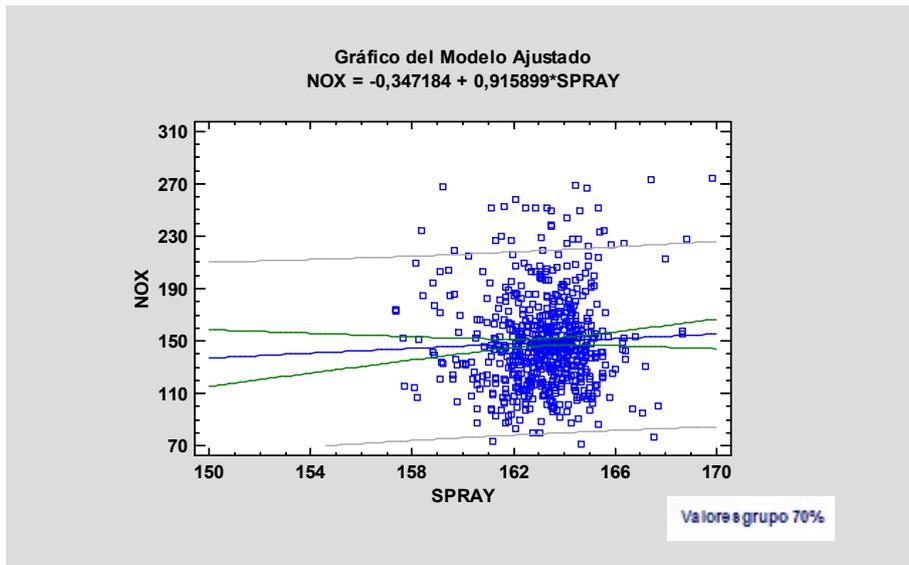


Figura 38.. Modelo lineal NO_x vs SPRAY.

- **Modelo exponencial**

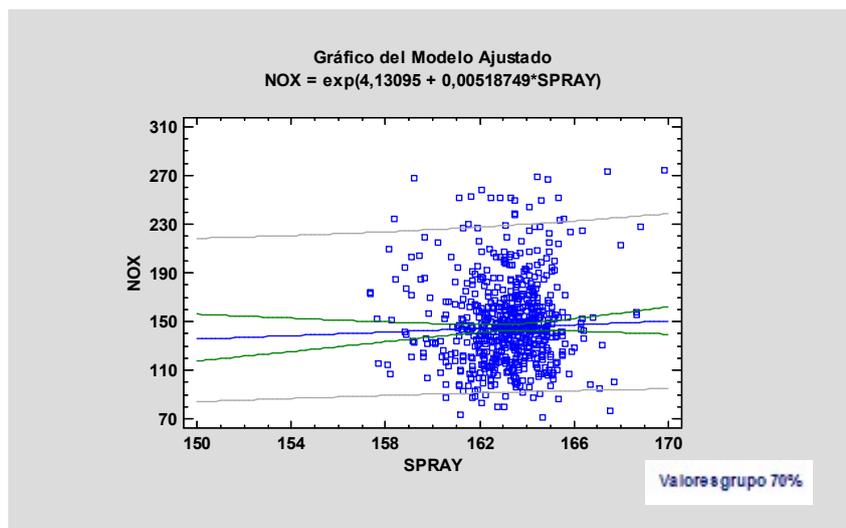


Figura 39. Modelo exponencial NO_x vs SPRAY.

Se observa que los valores no obedecen una tendencia a simple vista y que en ambos casos, los valores tienen una dispersión muy alta. De manera análoga, los datos importantes se resumen en la siguiente tabla para poder realizar una comparación entre los modelos nombrados anteriormente.

Modelo	Lineal	Exponencial
$R^2(\%)$	0,04	0,14
Coefficiente de correlación	0,043	0,038
Ecuación	$NO_x = -0,347 + 0,916 * SPRAY$	$NO_x = e^{(4,131 + 0,0052 * SPRAY)}$

Tabla 10. Resultados de los diferentes ajustes NO_x vs $SPRAY$.

En los dos casos se obtuvo un coeficiente de determinación (R^2) muy parecido y muy bajo, es decir, las estimaciones se ajustan muy mal a la variable real. En este caso no es conveniente escoger algún modelo. Además, se observa que los valores de los coeficientes de correlación indican una relación relativamente débil entre las variables de forma positiva, es decir, el valor del ángulo de inyección y las emisiones de NO_x son independientes si no se toman en cuenta otras variables.

6.1.5. NO_x vs Swirl Number (SWIRL)

Se entrenaron 2 modelos obteniéndose las siguientes gráficas del “Modelo ajustado” y datos característicos para el estudio de este como: coeficiente de correlación, R^2 y la ecuación obtenida.

- **Modelo raíz cuadrada**

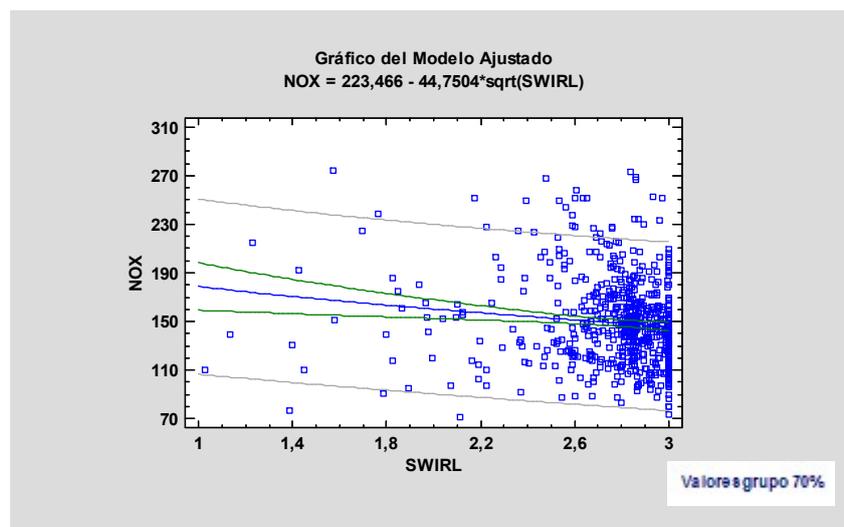


Figura 40. Modelo raíz cuadrada NO_x vs $SWIRL$.

- **Modelo Inversa-Y Log-X**

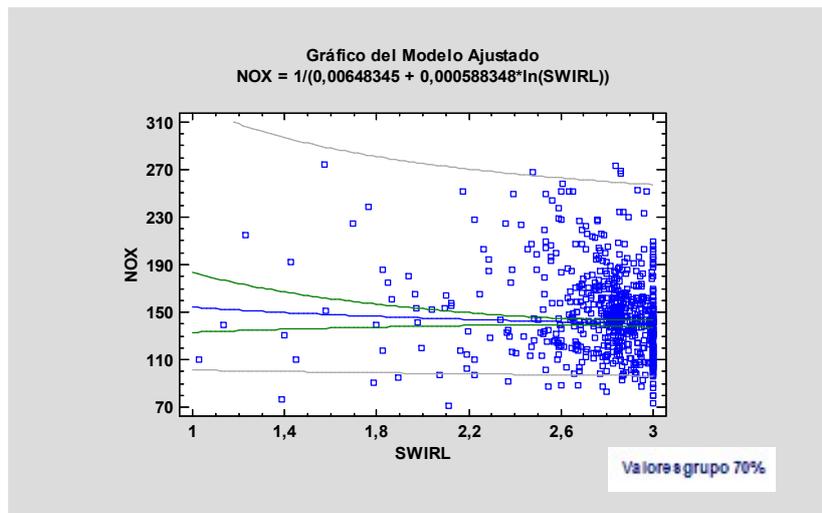


Figura 41. Modelo Inversa-Y Ln-X NO_x vs SWIRL.

Se observa que los valores no obedecen una tendencia a simple vista y que en ambos casos, los valores tienen una dispersión muy alta. Los datos importantes se resumen en la siguiente tabla para poder realizar una comparación entre los modelos nombrados anteriormente. Esto también se puede deber a que la población de puntos está hacia la derecha (es decir, la distribución de los puntos es sesgada, hay más densidad de puntos en el rango de 2,5 - 3 que en el rango de 1-2,5, y este efecto puede alterar el proceso de ajuste.)

La razón para que la muestra no esté uniformemente distribuida es porque proviene de un estudio previo que genera la población de una manera más o menos aleatoria, pero que tiende a un óptimo.

Modelo	Raíz cuadrada	Inversa-Y Ln-X NO_x
$R^2(\%)$	1,4	0,2
Coefficiente de correlación	-0,119	0,045
Ecuación	$NO_x = 223,47 - 44,75 * \sqrt{SWIRL}$	$NO_x = \frac{1}{(0,0064 + 0,00059 * \ln(SWIRL))}$

Tabla 11. Resultados de los diferentes ajustes NO_x vs SWIRL.

En los dos casos se obtuvo un coeficiente de determinación (R^2) muy parecido y muy bajo, es decir, las estimaciones se ajustan muy mal a la variable real. En este caso no se puede escoger ningún modelo. Además, se observa que los valores de los coeficientes de correlación indican una relación relativamente débil entre las variables

de forma positiva y negativa, es decir, el valor del SWIRL y las emisiones de NO_x son independientes si no se toman en cuenta otras variables.

En resumen, la única variable, si se estudia aislada, de las cinco analizadas que tiene una correlación notable con los valores de emisión NO_x , y se podría aproximar a un modelo simple sería la recirculación de los gases de escape (EGR). Esta información se usa en el siguiente apartado cuando se configura los diferentes casos; esta variable permanece lineal en 4 de 5 casos.

6.2. Regresión No Lineal (Statgraphics)

Posteriormente, se analizan los cinco modelos entrenados con la herramienta de Statgraphics, llamada "Regresión No Lineal". En este caso, se recuerda que no se estudian las variables de manera aislada sino como un conjunto intentando parecerse a la realidad: 5 variables dependientes y 1 dependiente.

Para ello, se grafican Observado vs Predicho de las 5 expresiones evaluadas y se realiza una tabla comparativa (tabla 12) para poder analizar los resultados de manera más fácil.

- **Caso 1:**

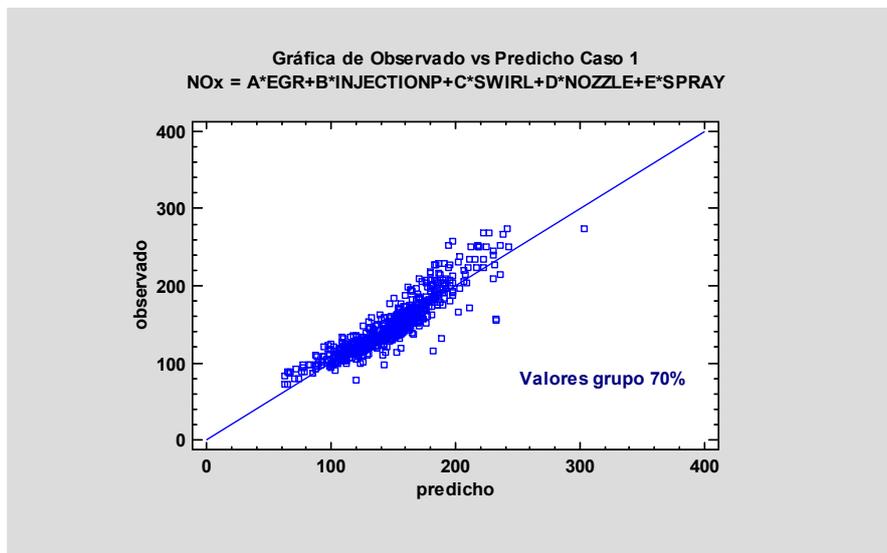


Figura 42. Gráfica Observado vs Predicho Caso 1.

- **Caso 2:**

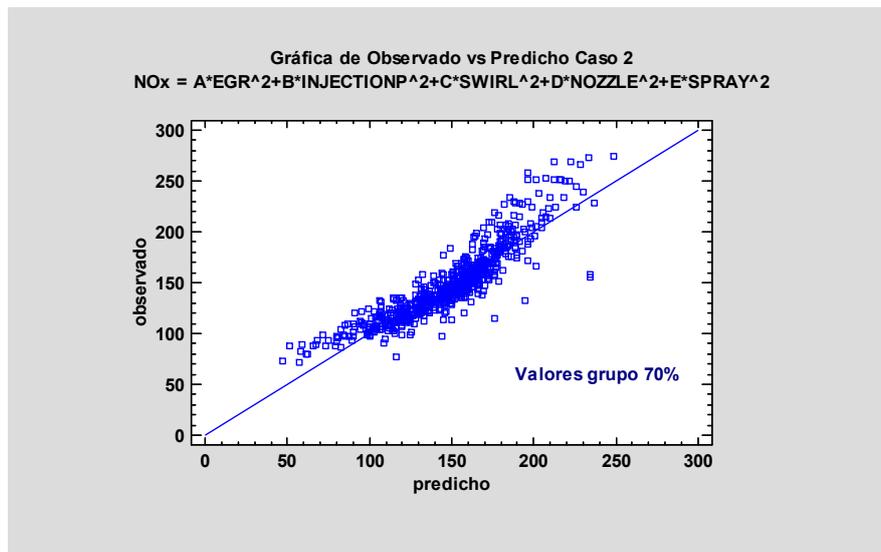


Figura 43. Gráfica Observado vs Predicho Caso 2.

- **Caso 3:**

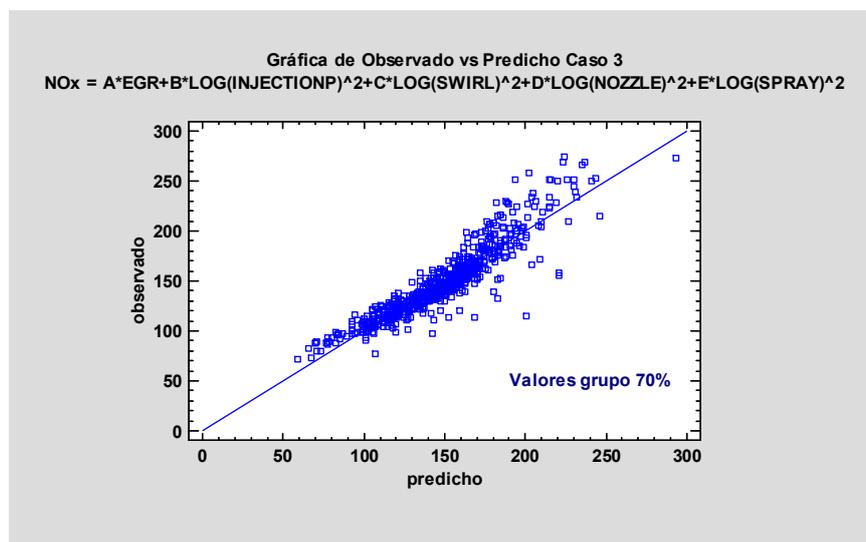


Figura 44. Gráfica Observado vs Predicho Caso 3.

- **Caso 4**

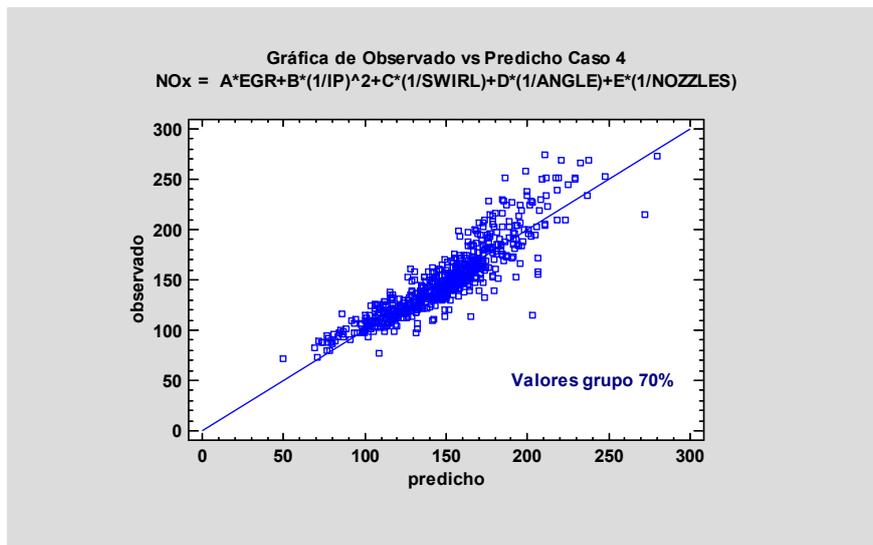


Figura 45. Gráfica Observado vs Predicho Caso 4.

- **Caso 5**

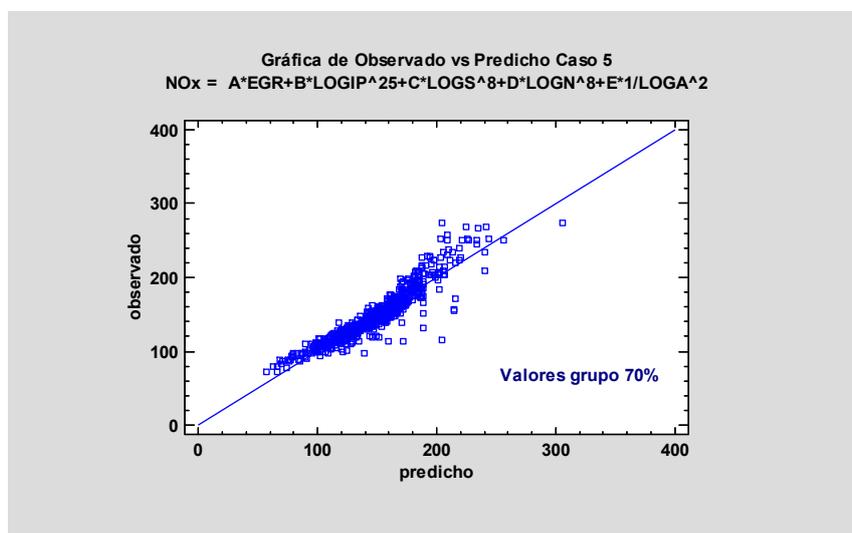


Figura 46. Gráfica Observado vs Predicho Caso 5.

Para que el ajuste se considere correcto, los puntos de la gráfica describirían perfectamente la línea diagonal que está descrita en ella, sin ninguna desviación. Esto querría decir que, el resultado experimental (observado) es el mismo que el valor predicho con los modelos entrenados. En las 5 expresiones propuestas, se puede concluir que se aproximan a la recta pero no coinciden totalmente. El caso en el que se observa la mejor aproximación es el **caso 5**.

Para corroborar los resultados observados en las gráficas, se tiene la siguiente tabla comparativa con los datos estadísticos de importancia:

Caso	R ² (%)	Modelo/Función
1	82,3	$NO_x = -1340,16 * EGR + 0,11 * INJECTIONP - 40,38 * SWIRL - 9,94 * NOZZLE + 2,17803 * SPRAY$
2	79,7	$NO_x = -3641,34 * EGR^2 + 0,000023 * INJECTIONP^2 - 8,62 * SWIRL^2 - 0,56 * NOZZLE^2 + 0,01 * SPRAY^2$
3	84,1	$NO_x = -1375,75 * EGR + 14,57 * LOG(INJECTIONP)^2 - 58,20 * LOG(SWIRL)^2 - 20,04 * LOG(NOZZLE)^2 - 11,72 * LOG(SPRAY)^2$
4	80,4	$NO_x = -1379,46 * EGR - 4,47E8 * (\frac{1}{IP})^2 + 159,03 * \frac{1}{SWIRL} + 58493,1 * \frac{1}{ANGLE} + 706,32 * \frac{1}{NOZZLES}$
5	86,4	$NO_x = -1346,49 * EGR + 6,13E^{-12} * LOG(IP)^{25} - 17008,5 * LOG(S)^8 - 37,58 * LOG(N)^8 + 1827,47 * (\frac{1}{LOG(A)})^2$

Tabla 12. Resultados de las diferentes regresiones no lineales.

Se observa que en 4 casos se mantiene la variable EGR lineal por la correlación demostrada en el apartado anterior. Las R² obtenidas en los cinco casos son alentadoras (en comparación con las regresiones lineales del apartado anterior) pero el **caso 5** es el caso más favorable como se comentó anteriormente analizando las gráficas, con un valor de 86,37%. Es por esto que se encuentra en color verde. Aunque no es un valor 95-100%, es un buen comienzo para la obtención del modelo final. Una vez escogido el mejor caso, se procede a realizar las verificaciones pertinentes para validarlo con los datos del otro grupo que no se utilizaron para encontrar el modelo.

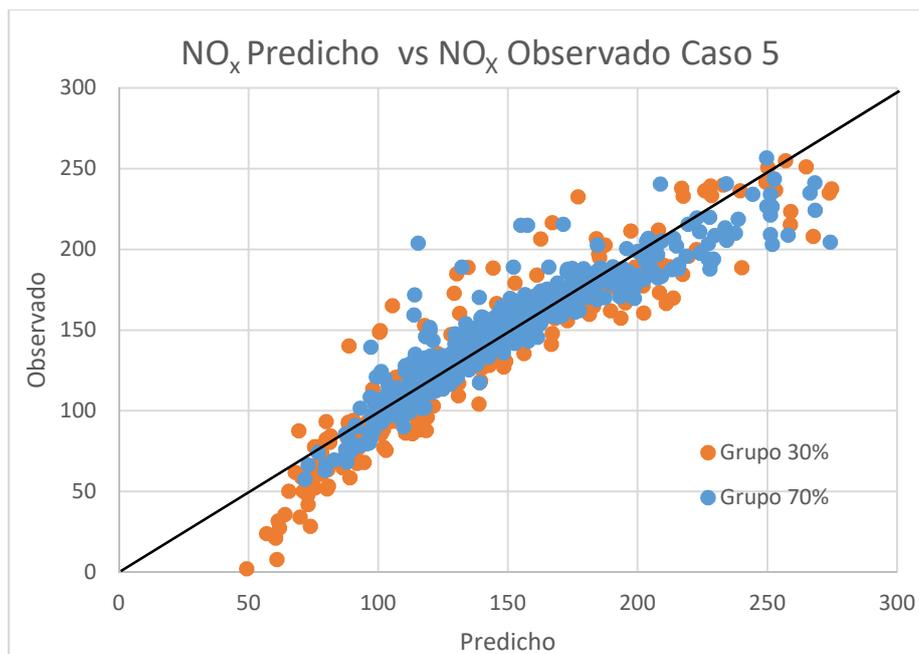


Figura 47. Gráfica Observado vs Predicho Caso 5.

Ambos grupos (puntos azules y puntos naranjas) se comportan de manera parecida con el modelo escogido; se observa una dispersión parecida y una aproximación visible a la recta de color negro (recta ideal). De esta manera se puede concluir que el modelo es válido. Además, se realizó la matriz de correlación para obtener más información sobre las variables independientes estudiadas:

Coeficiente	A	B	C	D	E
A	1,0000	-0,2794	0,1191	0,0567	-0,6771
B	-0,2794	1,0000	-0,3702	-0,0421	-0,3286
C	0,1191	-0,3702	1,0000	0,1445	-0,1628
D	0,0567	-0,0421	0,1445	1,0000	-0,4526
E	-0,6771	-0,3286	-0,1628	-0,4526	1,0000

Tabla 13. Matriz de correlación variables independientes Caso 5.

Estas correlaciones pueden usarse para detectar la presencia de multicolinealidad seria, es decir, correlación entre las variables predictoras. En este caso, hay 1 correlación con valor absoluto mayor que 0,5: **entre EGR y $1/\log(\text{SPRAY})$** . Al ser negativo, quiere decir que son inversamente proporcionales. En conclusión, cuando el valor de una de las variables aumenta, la otra debería disminuir.

6.3. Modelos ajustados con la herramienta "Regression Learner"

Tras el análisis estadístico de las variables, el cual aportó algunas conclusiones, se procede a encontrar los modelos optimizados de las dos variables. Recordando que se realizó el mismo proceso tanto para la variable dependiente NO_x como para la variable Eff en Matlab.

6.3.1. NO_x

El modelo que mejor se adapta para esta variable, basándose en el RMSE y R^2 se muestra en la siguiente tabla, junto con sus parámetros característicos:

Modelo final	GAUSSIAN PROCESS REGRESSION OPTIMIZABLE GPR
R^2	0,91
RMS	10,66

Tabla 14. Parámetros característicos modelo NO_x .

El modelo escogido se obtuvo posterior a la optimización de los hiperparámetros, es por esto que la última parte se llama "Optimizable GPR". Además, los procesos de regresión Gaussianos son modelos probabilísticos no paramétricos basados en Kernel. Los valores característicos 91% y 10,66 indican que es un modelo que se ajusta notablemente a la variable real y que, puede servir para predecir nuevos casos. Al predecir las emisiones de ambos grupos se obtiene la siguiente gráfica de Observado vs Predicho:

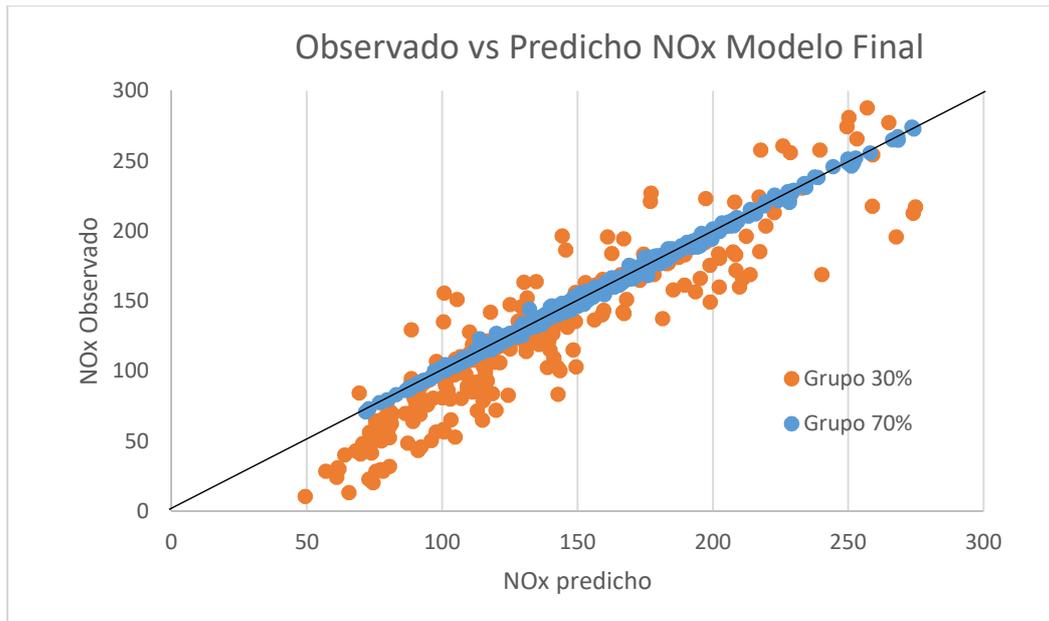


Figura 48. Gráfica Observado vs Predicho modelo final NO_x .

Los valores del grupo 70% se ajustan casi perfectamente a la recta, debido a que el modelo estaba entrenado con estos valores y el grupo de 30% está un poco disperso porque son otros valores que se utilizan para verificar y no fueron tomados en cuenta en el momento de la búsqueda de este modelo. Esta dispersión se evidencia al calcularse el RMSE del grupo 30%: 24,76. Tiene una diferencia con el grupo 70% de 14,10 por lo comentado anteriormente.

Se escoge el modelo más desfavorable para poder validar y verificar el modelo escogido, en este caso se muestran los resultados en la siguiente tabla y gráfica:

Modelo final	FINE GAUSSIAN SVM
R^2	0,35
RMS	28,67

Tabla 15. Parámetros característicos modelo desfavorable NO_x .

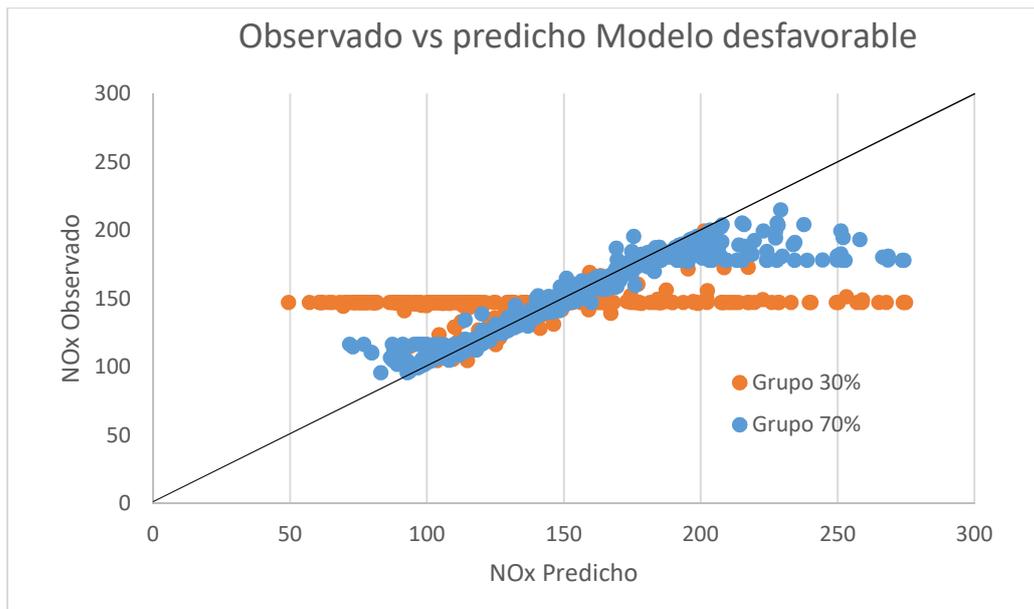


Figura 49. Gráfica Observado vs Predicho modelo desfavorable NO_x .

Esta gráfica sirve como ejemplo de los modelos que no se ajustan convenientemente, y no sirven para reproducir el proceso físico que se está analizando en este trabajo. Esto evidencia el valor obtenido R^2 de 35%. Además, el valor RMSE calculado del grupo 30% resultó 48,72; casi el doble que en el caso anterior (modelo final). Se puede concluir que el modelo “GAUSSIAN PROCESS REGRESSION OPTIMIZABLE GPR” es la mejor opción encontrada.

Posteriormente, los puntos óptimos basándose en la máxima reducción de las emisiones NO_x encontradas con el modelo escogido (indicado en la tabla 14) son los siguientes:

Puntos Óptimos	Num Nozzle	Spray Angle (°)	Swirl number	IP (Bar)	EGR rate	NO_x Predicho (mg/s)
1	11	168,1	2,8	1852,7	0,252	1,47
2	12	152,5	2,8	2399,6	0,250	0,58

Tabla 16. Puntos óptimos baja emisión NO_x .

Estos dos puntos tienen algunas similitudes y diferencias: con respecto al Swirl number y al EGR rate son muy parecidos, es decir, que las nuevas simulaciones en CFD se podrían realizar alrededor de estos valores. Entre las otras variables hay más diferencia.

El punto 2 a pesar de ser más favorable por su emisión de NO_x tan baja, tiene algunas variables en el límite y fuera del rango señalado en la Tabla 4. Hay que tener

mucho cuidado, ya que existen limitaciones físicas/mecánicas con estas variables: no se puede aumentar más la presión de inyección porque la bomba tiene sus límites físicos. Tampoco se puede aumentar el número de orificios en el inyector porque es más complejo de mecanizar (se necesita mucha precisión) y porque el área es muy pequeña para albergar más orificios. Además, puede haber efectos de interacción del flujo interno entre los orificios (que pueden originar cavitación), y puede haber efectos de interacción chorro a chorro. Recordando que se busca aumentar estos valores porque el OME_1 tiene un poder calorífico muy bajo en comparación al diesel (explicado en el apartado del E-fuel utilizado).

Si se escoge una presión de inyección de 2399 bares, se estaría aumentando alrededor de un 15% de su valor en el caso de los motores que trabajan con diesel (rango entre 1.500 y 2.000 bar) y se estaría logrando el objetivo de aumentar el flujo másico y así, compensar la cantidad de energía liberada en la combustión. Lo mismo ocurre en el caso del número de orificios, donde se utilizan normalmente de 6 a 8 orificios en los motores diesel convencionales, mientras que en este estudio los dos puntos señalan un aumento de orificios (11-12).

Con respecto al ángulo de inyección, el valor del punto 1 se encuentra en el límite superior del rango (155°-170°), mientras que el punto 2 sale del rango establecido anteriormente. Por este motivo, se **descartaría el punto 2 y se trabajaría con el punto 1**. Además, Se podría concluir que mientras se aumenta la presión de inyección, se tiene que disminuir el ángulo de inyección para reducir las emisiones de NO_x

6.3.2. Eff (Eficiencia térmica)

En el primer intento para encontrar el mejor modelo que se ajusta, se encontraron unos resultados no muy alentadores debido a algunos puntos que alteraban el estudio en el grupo 70% (grupo con el que se entrenan los modelos). Los resultados se muestran en la siguiente tabla, junto con sus parámetros característicos:

Modelo final	GAUSSIAN PROCESS REGRESSION OPTIMIZABLE GPR
R^2	0,38
RMS	0,656

Tabla 17. Parámetros característicos primer modelo Eff con puntos anómalos.

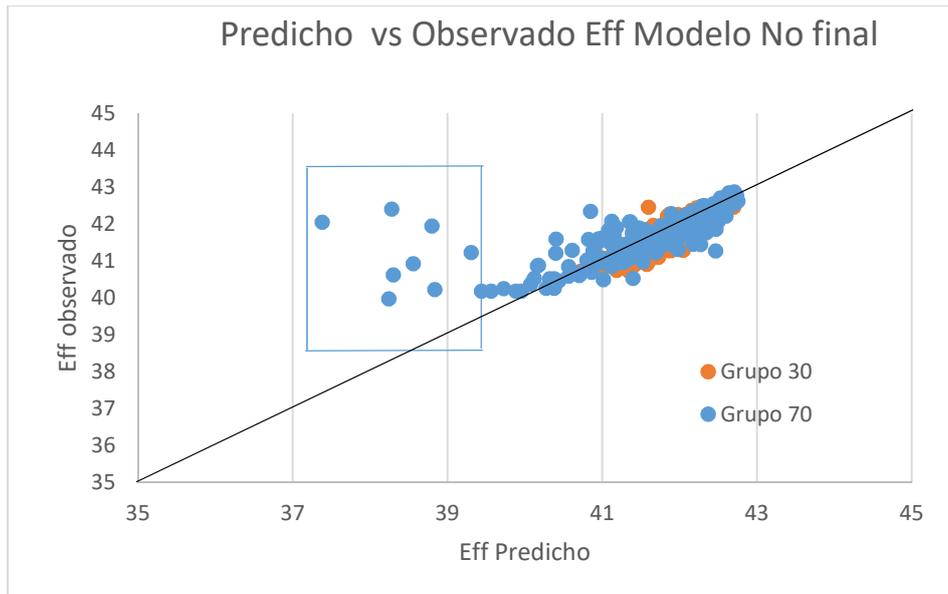


Figura 50. Gráfica Observado vs Predicho primer modelo Eff con puntos anómalos.

En la Figura 50 se muestran los puntos anómalos que se descartan, siendo el criterio de descarte, una eficiencia menor a 40% (en total son 12). Posteriormente, tras un nuevo entrenamiento, el modelo que mejor se adapta para esta variable, basándose en el RMSE y R^2 se muestra en la siguiente tabla, junto con sus parámetros característicos:

Modelo final	GAUSSIAN PROCESS REGRESSION OPTIMIZABLE GPR
R^2	0,81
RMS	0,219

Tabla 18. Parámetros característicos modelo final Eff.

El modelo escogido se obtuvo posterior a la optimización de los hiperparámetros, es por esto que la última parte se llama “Optimizable GPR”. Los valores característicos 81% y 0,219 indican que es un modelo que se ajusta medianamente a la variable real y que, puede servir para predecir nuevos casos. Al predecir las emisiones de ambos grupos se obtiene la siguiente gráfica de Observado vs Predicho:

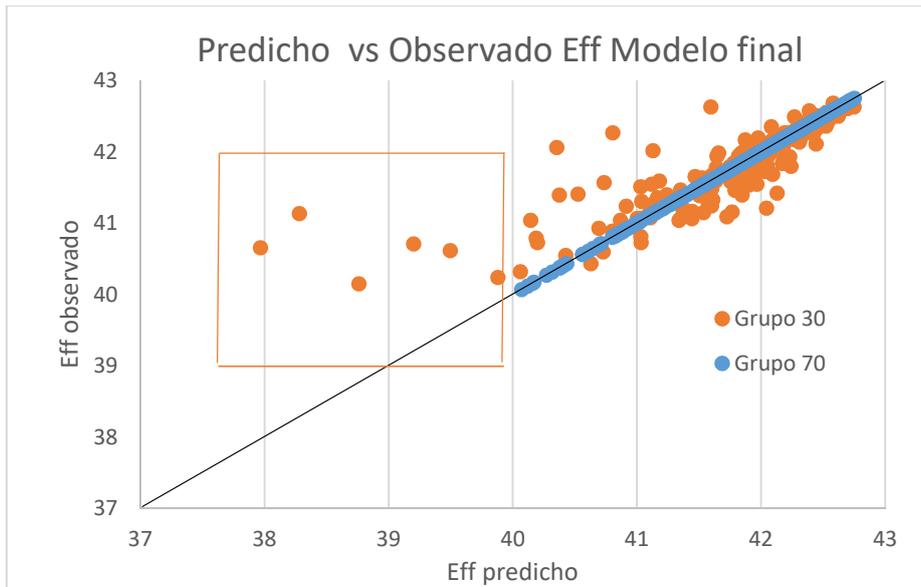


Figura 51. Gráfica Observado vs Predicho modelo final Eff con puntos anómalos.

Los valores del grupo 70% se ajustan casi perfectamente a la recta, debido a que el modelo estaba entrenado con estos valores y el grupo de 30% está muy disperso, obteniéndose un RMSE de 0,9369 (valor muy diferente al de la Tabla 18). Además, tiene unos puntos anómalos donde la eficiencia tiene un valor menor que 40%, los cuales no se eliminaron anteriormente, ya que solo se descartaron en el grupo 70% para encontrar el modelo. En total se descartan unos 8 puntos, obteniéndose la siguiente gráfica:

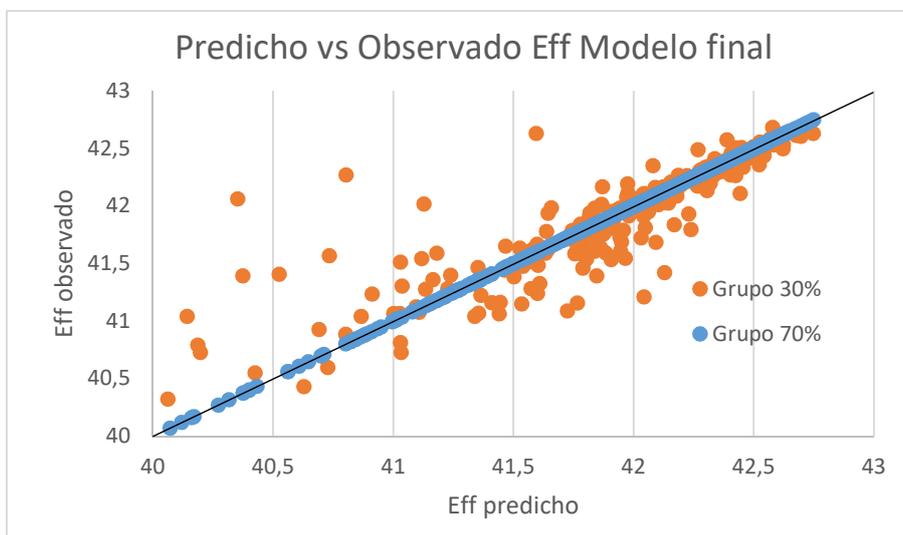


Figura 52. Gráfica Observado vs Predicho modelo final Eff.

En este caso, los puntos del grupo 30% se ajustan mucho mejor; obteniéndose un RMSE de 0,2506 (valor cercano al de la Tabla 18).

Se escoge el modelo más desfavorable con los puntos ya descartados para poder validar y verificar el modelo escogido, en este caso se muestran los resultados en la siguiente tabla y gráfica:

Modelo final	ROBUST LINEAR
R^2	0,32
RMS	0,417

Tabla 19. Parámetros característicos modelo desfavorable Eff.

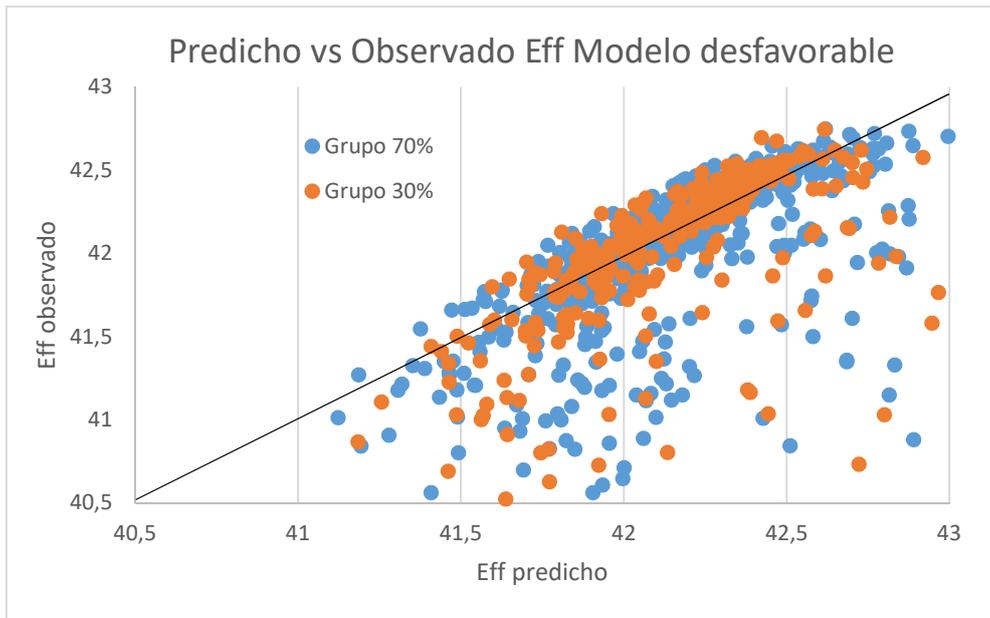


Figura 53. Gráfica Observado vs Predicho modelo desfavorable Eff.

En la gráfica está totalmente claro que el grupo 70% no se ajusta a la recta como en el caso anterior y el grupo 30%, tampoco. Esto evidencia el valor obtenido R^2 de 32%. Además, el valor RMSE calculado del grupo 30% resultó 0,4326; casi el doble que en el caso anterior (modelo final). Se puede concluir que el modelo “GAUSSIAN PROCESS REGRESSION OPTIMIZABLE GPR” es la mejor opción encontrada.

Posteriormente, los puntos óptimos basándose en los máximos rendimientos térmicos encontrados con el modelo escogido son los siguientes:

Puntos Óptimos	Num Nozzle	Spray Angle (°)	Swirl number	IP (Bar)	EGR rate	Eff (%)
1	9	163,9	2,9	2402	0,145	42,78
2	9	162,9	2,7	2258	0,149	42,69

Tabla 20. Puntos óptimos eficiencia térmica (Eff).

Estos dos puntos son muy parecidos, es decir, que las nuevas simulaciones en CFD se podrían realizar alrededor de estos valores. Es importante comentar que el valor más alto de la eficiencia obtenido con CFD es de 42,74% y el valor obtenido en el punto 1 es de 42,78%, es decir, se encontró un punto de funcionamiento ligeramente más eficiente utilizando el modelo de predicción con Matlab (punto 1 de la Tabla 20); utilizando una técnica computación mucho más rápida.

La presión de inyección de 2300-2400 bares de ambos puntos, indican un aumento alrededor de un 15%-17% de su valor en el caso de los motores que trabajan con diesel (rango entre 1.500 y 2.000 bar) y se estaría logrando el objetivo de aumentar el flujo másico y así, compensar la cantidad de energía liberada en la combustión. El valor de la presión del punto se encuentra en el límite superior del rango de trabajo (Tabla 4) y existen algunas restricciones mecánicas (bombas de inyección) si se desea seguir aumentado.

En el caso del número de orificios: se utilizan normalmente de 6 a 10 orificios en los motores diesel convencionales, mientras que en este estudio los dos puntos señalan un aumento de orificios a 9, valor que se encuentra en el rango de trabajo.

6.3.3. Verificación de los puntos

- **Verificación del punto óptimo 1 del estudio de minimización de NO_x.**

Con la finalidad de verificar los resultados obtenidos en el proceso de optimización seguido en este TFG, se ha escogido el punto óptimo 1 de la Tabla 16 (a partir de ahora, Caso 1) y se ha realizado una simulación CFD con los parámetros que minimizan la producción de emisiones de NO_x (número de orificios: 11; ángulo del chorro: 168,1°; swirl: 2,8; presión de inyección: 1852,7 bar, y tasa de EGR: 0,252).

El estudio CFD se realiza usando el modelo de referencia del motor desarrollado en OpenFoam, alimentado con el OME₁, y el cual ha sido validado previamente tal como se explica en [15]. La geometría del pistón es la misma, ya que en este estudio los parámetros geométricos no han intervenido como variables en el ajuste de machine learning. Las condiciones de contorno de temperatura, presión y de concentraciones de especies también son idénticas a las del caso inicial CFD de referencia. La simulación de CFD se realiza en ciclo cerrado, es decir desde el cierre de la válvula de admisión (IVC por su nombre en inglés) hasta la apertura de la válvula de escape (EVO por su nombre

en inglés). La malla utilizada en la simulación es la correspondiente a un solo chorro de combustible, aprovechando la simetría del sistema y con una configuración de malla gruesa (indicada también en [15]). Ambas estrategias se utilizan para acelerar el proceso de cálculo. Esta malla tiene 26900 celdas en el instante de punto muerto superior, donde el volumen de la cámara de combustión es el mínimo. Para la realización de estas simulaciones se ha contado con soporte técnico del personal de investigación del Instituto CMT-Motores Térmicos.

La ejecución de la simulación se ha desarrollado en 4 procesadores y ha tenido una duración de 45 horas en total. Los resultados del CFD se presentan en la Figura 54, donde la gráfica a) muestra la evolución de la presión en el cilindro, en la gráfica b) se observa la evolución de la temperatura en el cilindro, en la c) los niveles de NO_x en la cámara de combustión (en mg/s) y en la d) la tasa de liberación de calor. En todas ellas, la curva negra 'Optimized case' representa al mejor caso obtenido usando el método de optimización que combina herramientas CFD y algoritmos evolucionarios (PSO) descritos en [15], mientras que la curva roja 'Case 1' corresponde a la simulación del punto 1 de la Tabla 16.

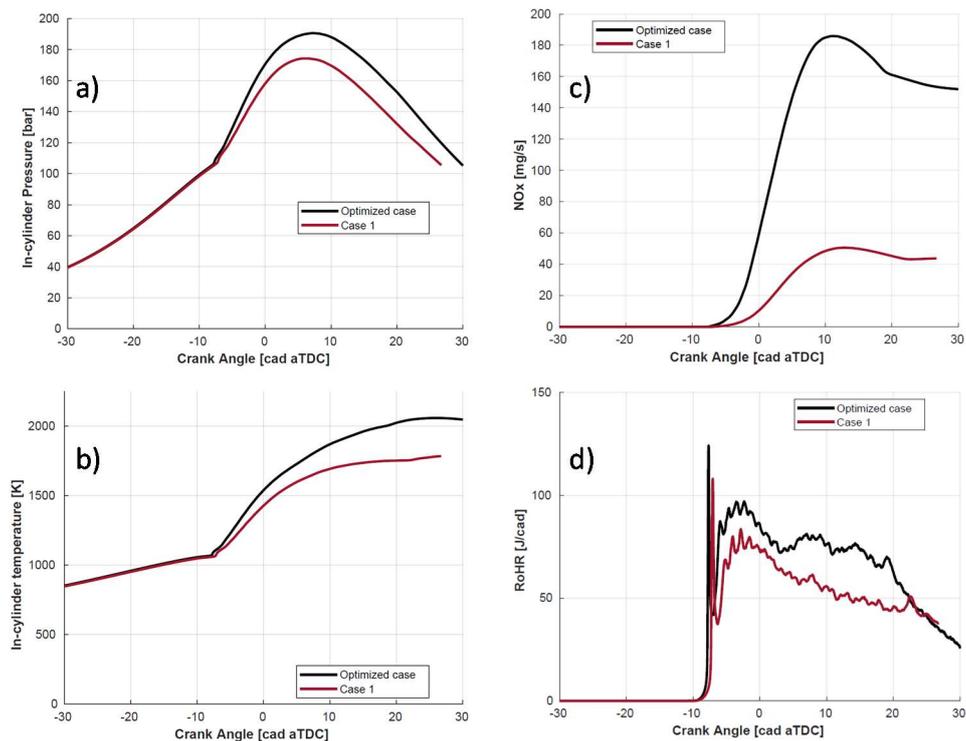


Figura 54. Comparación de los resultados CFD del punto óptimo Caso 1 de minimización de NO_x y del caso de referencia con OME₁.

Se observa que los comportamientos de los parámetros de combustión son diferentes cuando la configuración del sistema corresponde al Caso 1. Desde el inicio de la combustión se puede ver como la presión y temperatura en el cilindro son más bajas producto de un mayor número de orificios (con menor diámetro para mantener la misma masa de combustible inyectada en el ciclo), y de una presión de inyección menor.

La principal consecuencia de tener una temperatura más baja es la menor producción de NO_x, lo que va alineado con lo que había predicho el modelo ajustado de machine learning desarrollado en este TFG. La mejora en términos de emisiones de NO_x es sustancial, ya que el valor en esta configuración propuesta es un tercio de la mejor configuración obtenida en la optimización inicial. A pesar de que el valor de NO_x es considerablemente bueno, no es exactamente el valor obtenido por la función de machine learning. Cabe recordar, que el CFD contempla modelos físicos y químicos del proceso de combustión, que son opacos para el ajuste de machine learning.

Así mismo, se puede observar en la Figura 54. que la curva de liberación de energía es más baja, lo que da una idea de un proceso de combustión más ralentizado, que puede influir en el rendimiento final de la combustión.

- **Verificación del punto óptimo 2 del estudio de maximización de eficiencia.**

De manera análoga que con el estudio de emisiones de NO_x, con el fin de verificar los resultados obtenidos en la maximización de la eficiencia, se ha escogido el punto óptimo 2 de la Tabla 20 (a partir de ahora, Caso 2) y se ha realizado una simulación CFD con los parámetros que maximizan la eficiencia del motor (número de orificios: 9; ángulo del chorro: 162,9°; swirl: 2,7; presión de inyección: 2258 bar, y tasa de EGR: 0,149). La razón de escoger el Caso 2 en lugar del Caso 1, es porque en el Caso 1, aunque tiene una eficiencia mayor, la presión de inyección es más elevada que el rango estándar de operación en una bomba de inyección, tal como se comentó en el apartado anterior.

El estudio CFD se realiza siguiendo la misma metodología descrita en el apartado anterior, y de manera análoga, se ha contado con la asistencia del personal técnico de investigación del Instituto CMT-Motores Térmicos.

La ejecución de la simulación se ha desarrollado en 4 procesadores y ha tenido una duración de 32 horas en total. Los resultados del CFD se presentan en la Figura 55, donde la gráfica a) muestra la evolución de la presión en el cilindro, en la b) se observa la evolución de la temperatura, en la c) la liberación de energía acumulada y en la d) la tasa de liberación de calor. En todas ellas, la curva negra 'Optimized case' representa al mejor caso obtenido usando el método de optimización que combina herramientas CFD y algoritmos evolucionarios (PSO) descritos en [15], mientras que la curva azul 'Case 2' corresponde a la simulación del punto 2 de la Tabla 20.

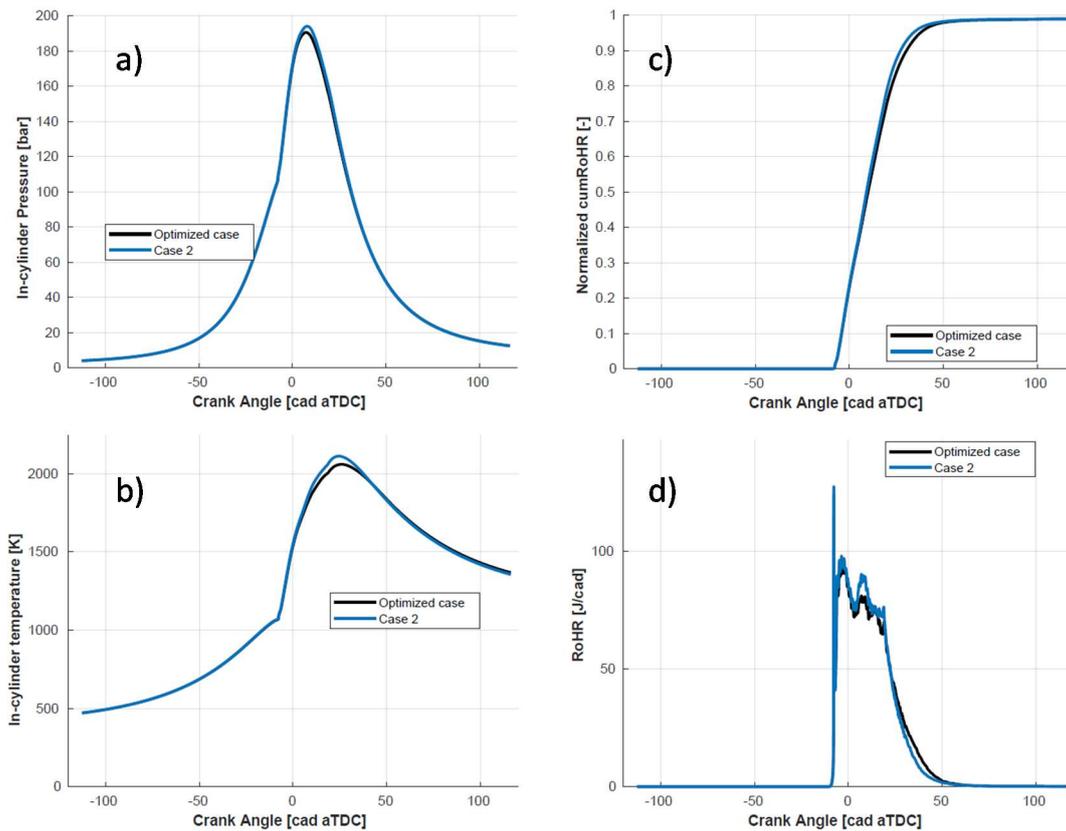


Figura 55. Comparación de los resultados CFD del punto óptimo Caso 2 de maximización de EFF y del caso de referencia con OME₁.

En líneas generales, los dos casos tienen un comportamiento bastante similar, sin embargo, la configuración del Caso 2 permite obtener una presión y temperatura en cilindro ligeramente mayor, que implica una combustión sutilmente más rápida, lo que produce mejor eficiencia térmica, que era la variable objetivo a maximizar en este apartado. De hecho, luego de post-procesar los datos, se ha obtenido el siguiente valor para el caso 2 simulado en CFD: **Eficiencia = 42.76 [%]**. Este resultado es muy cercano al predicho por el modelo de ajustado con machine learning de 42.69% y le da validez al estudio desarrollado en este trabajo. Esta mejora puede parecer pequeña, pero hay que recordar que se parte de un sistema que ya ha sido optimizado anteriormente y que está en el borde del estado del arte actual. Las pequeñas discrepancias se deben a que el modelo CFD considera con más detalle los fenómenos físico-químicos que participan en el proceso de combustión. Aun así, este resultado es prometedor, porque la evaluación del modelo de eficiencia ajustado con machine learning es mucho más rápida del orden de los minutos, mientras que la evaluación de la función en CFD es del orden de días.

Por último, los resultados de CFD arrojan unos valores de NO_x para el Caso 2 de 240.3 [mg/s], relativamente altos. Esto es una consecuencia de la temperatura alta en el cilindro, y es consistente con el trade-off comentado anteriormente entre eficiencia y emisiones.

En comparación con los puntos de trabajo de NO_x , se puede concluir que es muy difícil lograr optimizar ambas variables al mismo tiempo, ya que, se necesitan números de orificio, EGR y número de torbellino muy diferentes. Es por ello, que para futuros trabajos se propone continuar con estas actividades de ajustes de modelos, a fin de poder optimizar estas dos variables simultáneamente.

Capítulo 7

7. Conclusiones y trabajos futuros

7.1. Conclusiones

El objetivo principal establecido en este trabajo es entrenar modelos de regresión basado en machine Learning y redes neuronales, capaces de predecir dos características fundamentales en los motores MEC, emisiones NO_x y la eficiencia térmica en función del valor de diversas variables referidas al sistema de combustión utilizando OME_1 ; con la intención de que se tratase de un método rápido y eficaz.

Derivado de este objetivo principal, surgen unos objetivos intermedios y a su vez, unas conclusiones que se comentan a continuación:

- Los modelos de regresión basados en Machine Learning son una forma efectiva de predicción, obteniéndose resultados coherentes. Se han generado dos modelos capaces de predecir las emisiones NO_x y la eficiencia energética de diferentes configuraciones en los MEC.
- Se ha llegado a la conclusión de que los modelos escogidos requieren un coste computacional y un tiempo de ejecución mucho menor que los modelos de dinámica de fluidos computacional. Pero el CFD no deja de ser imprescindible, ya que es necesario para poder entrenar los modelos si no se dispone de datos experimentales.
- Se ha llegado a la conclusión que los modelos obtenidos luego de la optimización de los hiperparámetros se adaptan mejor a la realidad, es decir, se obtienen mejores resultados de predicción que los modelos sin optimizar.
- Se obtuvo 1 punto de trabajo dentro del rango de valores establecido, capaz de disminuir las emisiones de NO_x . Se obtuvieron 2 puntos de trabajo dentro del rango de valores establecido, capaz de aumentar la eficiencia obtenida empleando solo CFD.
- Se ha llegado a la conclusión de que el OME_1 es una buena opción para sustituir el Diesel en motores MEC pero es necesario aumentar tanto el

número de orificios de inyección como la presión de inyección para combatir el bajo poder calorífico que este tiene.

7.2. Trabajos futuros

Para que estos modelos sean implementados a nivel comercial, es necesario reducir la dispersión de estos y asegurarse de que se asemejan a la realidad. Para esto es necesario tomar en cuenta todas las variables que actúan en la combustión, no solo las 5 variables de entrada sino también variables geométricas de la cámara de combustión, porque se ha demostrado el efecto cruzado que tienen.

Además, es importante entrenar también modelos para los distintos compuestos resultantes tras la combustión, como el hollín y el CO_2 , ya que están regulados actualmente por la legislación como los NO_x por su nivel de contaminación. Una vez realizado lo anterior, sería ideal encontrar 1 configuración utilizando estos modelos para reducir estas emisiones pero sin olvidar aumentar la eficiencia térmica del motor.

Por último, se podría aplicar estos procedimientos a distintos sistemas de combustión sostenibles (como los que se basan en el uso hidrógeno como combustible).

Bibliografía

- [1] N. Muñoz Navarro, «ESTUDIO Y EVALUACIÓN DEL ALGORITMO PSO ACOPLADO A UN MODELO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA LA OPTIMIZACIÓN DE UN MOTOR DE ENCENDIDO POR COMPRESIÓN,» UPV, Valencia, 2021.
- [2] J. A. Álvarez Floréz y I. Callejón Agramunt, Máquinas Térmicas Motoras - 1, Barcelona: EDICIONS UPC, 2002.
- [3] G. F. Samaniego FLor y C. P. Samaniego FLor, «COMPARACIÓN DE LAS CARACTERÍSTICAS DE EFICIENCIA DE UN MOTOR SUZUKI FORSA G10 SOHC AL VARIAR SECUENCIALMENTE ELEMENTOS POSIBLES DE TRUCAJE PARA COMPETICIÓN A TRAVÉS DE UN BANCO DE PRUEBAS,» Latacunga, 2006.
- [4] A. Alcázar López, «ESTUDIO ENERGÉTICO DE UN MOTOR DE ENCENDIDO POR COMPRESIÓN Y ARQUITECTURA 2-TIEMPOS OPERANDO CON EL CONCEPTO DE COMBUSTIÓN PARCIALMENTE PREMEZCLADA,» UPV, Valencia, 2016.
- [5] Isaac, «ActualidadMotor,» ActualidadMotor, 13 02 2017. [En línea]. Available: <https://www.actualidadmotor.com/eficiencia-termica-rendimiento-termico-motor/>. [Último acceso: 17 04 22].
- [6] J. M. Desantes y F. Payri, Motores de combustión interna, Barcelona: Reverté, 2015.
- [7] D. Plaza, «Motor.es,» Motor.es, 10 12 2018. [En línea]. Available: <https://www.motor.es/que-es/common-rail>. [Último acceso: 17 04 2022].
- [8] A. «ActualidadMotor,» ActualidadMotor, 04 08 2015. [En línea]. Available: <https://www.actualidadmotor.com/la-inyeccion-diesel-por-inyector-bomba/>. [Último acceso: 02 04 2022].
- [9] C. Guardiola, «Proceso de combustión en MEC,» CMT, Valencia, 2012.
- [10] G. Alarcón Rojas, «Motores de encendido por compresión (MEC),» Comisión 2, Sevilla, 2018.
- [11] M. García Medina, «Desarrollo Algoritmos de Inteligencia Artificial para predecir emisiones contaminantes en motores de encendido por compresión,» UPV, Valencia, 2021.
- [12] D. A. Cepeda Cuartas, N. D. Cubillos Escobar y E. F. Gutiérrez Guevara , «Explicación de combustión en motores de encendido a compresión (M.E.C),» USBMed, Medellín, 2019.
- [13] S. Consuegra Pacheco, Motores Diesel, Fonseca: ITSA, 2007.

- [14] T. C. «Textos Científicos,» Textos Científicos, 25 09 2006. [En línea]. Available: <https://www.textoscientificos.com/quimica/combustion/tipo-combustion>. [Último acceso: 09 05 2022].
- [15] R. Novella, G. Bracho, J. Gomez-Soriano, C. S. Fernandes y T. Lucchini, «Combustion system optimization for the integration of e-fuels (Oxymethylene Ether) in compression ignition engines,» *ELSEVIER*, vol. 305, nº 121580, pp. 1-12, 2021.
- [16] Y. Wu, I. Ays y M. Geimer , «Analysis and Preliminary Design of Oxymethylene ether (OME) Driven Mobile Machines,» Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe, 2019.
- [17] B. M. Viñes, «Modelado CFD del movimiento del aire en el cilindro de un motor maqueta de dos tiempos,» UPV, Valencia, 2018.
- [18] P. Irungu Muiruri y O. Seraga Motsamai, «Three dimensional CFD simulations of a wind turbine blade section; Validation,» *JESTR*, vol. 11, nº 10.25103, pp. 138-145, 02 2018.
- [19] C. Batanero Bernabeu y M. C. Diaz Batanero, Análisis de datos con Statgraphics, Granada: La Gioconda, S. L., 2008.
- [20] C. «MANUAL DE STATGRAPHICS,» CHEMO, MADRID, 2018.
- [21] S. T. Inc, STATGRAPHICS ® CENTURION XVII, Estados Unidos de América: Statpoint Technologies, Inc, 2014.
- [22] C. Balsalobre Rodriguez, L. del Río Alonso y A. Maurandi López, Fundamentos estadísticos para investigación. introducción a R., Murcia: Bubok Publishing S.L., 2013.
- [23] J. F. López, «Economipedia,» Economipedia, 15 julio 2019. [En línea]. Available: <https://economipedia.com/definiciones/r-cuadrado-coeficiente-determinacion.html>. [Último acceso: 26 04 2022].
- [24] T. M. Inc, Matlab primer, Massachusetts: The MathWorks, Inc., 2022.
- [25] T. M. Inc., Statistics and Machine Learning Toolbox™ User's Guide, Natick: The MathWorks, Inc., 2020.
- [26] D. J. Matich, «Redes Neuronales: Conceptos Básicos y Aplicaciones.,» Grupo de Investigación Aplicada a la Ingeniería Química (GIAIQ), ROSARIO, 2001.
- [27] E. Barrero Viciado, B. Fernandez Díaz y O. Llanes Santiago, «Propuesta de procedimiento para configurar una red neuronal artificial de Base Radial con aplicaciones en el diagnóstico de fallos,» *RIELAC*, vol. XXXV 3/2014, nº 1815-5928, pp. 60-75, 2014.
- [28] T. M. Inc, «MathWorks,» The MathWorks, Inc., 12 01 2022. [En línea]. Available: <https://es.mathworks.com/help/stats/regressionlearner-app.html>. [Último acceso: 02 05 2022].
- [29] J. Shu, J. Fu, Y. Ma, S. Wang, B. Deng y D. Zeng, «Effects of injector spray angle on combustion and emissions characteristics of a natural gas (NG)-diesel dual fuel engine

based on CFD coupled with reduced chemical kinetic model,» *Applied Energy ELSEVIER*, Vols. %1 de %2233-234, nº 1, pp. 182-195, 2019.

- [30] G. Vignat, D. Durox y S. Candel, «The suitability of different swirl number definitions for describing swirl flows: Accurate, common and (over-) simplified formulations,» *Progress in Energy and Combustion Science - ELSEVIER*, vol. 89, nº 100969, p. 1, 2022.
- [31] F. Lodi, A. Zare, P. Arora, S. Stevanovic, M. Jafari, Z. Ristovski, R. J. Brown y T. Bodisco, «Engine Performance and Emissions Analysis in a Cold, Intermediate and Hot Start Diesel Engine,» MDPI, Brisbane, 2020.

Parte II
PLIEGO DE CONDICIONES

Capítulo 1

1. Pliego de condiciones

El Pliego de Condiciones recoge las indicaciones o normas a seguir para la correcta obtención de resultados y que estos resulten válidos. Se detallan las condiciones técnicas y de seguridad que deberán cumplirse.

Esta es una investigación de uso de software con datos adquiridos de forma previa por el grupo de investigación con CFD. Dicho CFD ha sido validado previamente con datos experimentales. Por lo anterior, no se requieren grandes instalaciones o complejos equipos. Se necesita principalmente un hardware, softwares (junto a sus licencias), conexión a internet, material adicional relacionado que sirva como guía para la investigación (proyectos previos, estudios, tesis, etc.) y personal preparado para una adecuada supervisión.

1.1. Condiciones técnicas

1.1.1. Especificaciones de equipos y material

En este apartado se explicará con detalle los materiales y equipos comentados en el apartado anterior:

- **Software**

El proyecto fue tratado con programas para la obtención de resultados, desde la primera base de datos hasta los modelos entrenados. Los softwares utilizados son los siguientes:

1. OpenFOAM
2. Statgraphics
3. Matlab
4. Microsoft Excel
5. Microsoft Word
6. Microsoft Powerpoint

7. PDF Reader
8. Adobe Acrobat Standard
9. Microsoft Paint

- **Hardware**

Es necesario un hardware capaz de soportar programas y procesos de cálculo necesarios en este proyecto. Se debe garantizar una rápida convergencia de los casos estudiados para poder ejecutar todas las pruebas necesarias a lo largo de la investigación.

- **Conexión a internet**

Una conexión estable a internet es necesario en esta investigación, ya que el estudio fue realizado y supervisado a distancia. También, es importante para la constante búsqueda bibliográfica necesaria en páginas web y documentos que subidos a la red.

- **Conocimientos previos**

Es necesario contar con cierta formación para realizar la investigación, que esté enfocada a la ingeniería, especialmente sobre los conceptos de combustión, turbulencia, métodos numéricos, estadística, motores de combustión interna alternativos, específicamente los de encendido por compresión, ya que este proyecto está basado en él.

Además, es necesario tener nociones previas en las herramientas utilizadas para realizar la investigación y resolver los problemas de forma rápida. Durante el proyecto se desarrollan los conocimientos sobre el manejo de estos programas utilizados.

- **Supervisión**

El/la tutor encargado de supervisar esta investigación debe de tener experiencia y conocimientos en las áreas que abarca la misma. Además, debe contar con disponibilidad para resolver las dudas que surjan durante el proyecto.

- **Material adicional**

Es necesario tener acceso a documentación técnica sobre el tema a estudiar, ya que es frecuente la búsqueda de información durante la investigación para poder complementar el trabajo.

1.1.2. Condiciones de garantía y mantenimiento

La empresa contratada para la realización del proyecto garantiza durante el periodo de un año, el cual comienza tras la recepción de los modelos entrenados. Se compromete a subsanar las posibles averías que surjan durante su uso y ofrece un servicio de atención al cliente ante cualquier duda. Estos modelos no necesitan de un mantenimiento estipulado. La garantía quedará invalidada si no se cumplen las pautas de uso que se especifican en el pliego.

1.1.3. Reclamaciones

Se atenderán las reclamaciones emitidas por escrito dentro de un plazo de **quince días hábiles** a partir de la entrega de los modelos finales entrenados (un mes si la entrega es fuera de España). Si los modelos resultan defectuosos, la empresa se compromete al cambio de los mismos.

1.1.4. Condiciones legales y contractuales

Si el comprador quisiera extender el contrato a otros productos, será necesario la realización de un nuevo presupuesto. En el caso de modificaciones u otras causas que supongan el retraso o la cesión de la entrega del producto, será posible solicitar una prórroga equivalente del término del ejecutivo contractual, con la condición de que se adelante la petición antes de que el período haya finalizado.

1.1.5. Revisión de los precios

Los precios mostrados en el presupuesto varían según el IPC anual.

1.1.6. Fianza

El contratista deberá obtener un aval bancario a favor del comprador en concepto de fianza del 5% del valor total del presupuesto. Esta fianza se devolverá una vez finalizada el período de garantía.

1.1.7. Aceptación

La aceptación de todos los puntos será cumplida mediante el uso de los programas establecidos por la empresa vendedora. La aceptación se producirá en el lugar de la instalación (si el vendedor es el encargado de instalarla) una vez que se haya demostrado el correcto funcionamiento del producto.

Si la instalación se demora más de treinta días (30) de la fecha de entrega por motivos del comprador, el vendedor podrá considerar que todos los puntos han sido aceptados el trigésimo primer día (31) desde la fecha de entrega.

1.1. Condiciones de seguridad y salud

En este apartado se desarrollan las ordenanzas a tomar en cuenta en el desarrollo de este proyecto, tomando en cuenta que la investigación se realizó a distancia y no se realizó experimentación en un banco o laboratorio, porque ya se disponían de datos previos.

1.1.1. Real Decreto-ley 28/2020 de trabajo a distancia

Las personas que desarrollan trabajo a distancia se beneficiarán de los mismos derechos que los garantizados por la legislación y los convenios colectivos aplicables a las personas comparables que trabajen o, de existir, trabajasen, en los locales de la empresa, sin que dicha modalidad de organización suponga cambio alguno en el estatus jurídico de la persona trabajadora, ni constituya causa justificativa por sí misma para modificar las condiciones laborales ni para extinguir la relación de trabajo. No obstante, teniendo en cuenta las peculiaridades del trabajo a distancia, el real decreto-ley recoge aspectos complementarios, que resultan necesarios precisamente para garantizar que se mantiene el mismo nivel de protección.

Así, elementos como la entrega e instalación de equipos y medios necesarios para el desarrollo del trabajo a distancia, los costes asociados a su uso y mantenimiento, el ejercicio de acciones formativas adecuadas y específicas, la identidad de acceso, de trato y conocimiento puntual en las oportunidades de promoción profesional, la instalación de medios de control y vigilancia, la correcta aplicación de las medidas de seguridad y salud, las limitaciones al acceso del lugar de trabajo cuando coincide con el domicilio de la persona trabajadora, la organización del tiempo de trabajo, incluidas la flexibilidad, los periodos de disponibilidad y el adecuado registro, la vinculación necesaria a un centro de trabajo, etc., son condiciones esenciales que deben figurar de

manera expresa sin perjuicio de la legislación estatutaria y de los convenios colectivos aplicables.

- **Artículo 1. Ámbito de aplicación.**

Se entenderá que es regular el trabajo a distancia que se preste, en un periodo de referencia de tres meses, un mínimo del treinta por ciento de la jornada, o el porcentaje proporcional equivalente en función de la duración del contrato de trabajo.

- **Artículo 2. Definiciones.**

Se entenderá por:

- Trabajo a distancia: forma de organización del trabajo o de realización de la actividad laboral conforme a la cual esta se presta en el domicilio de la persona trabajadora o en el lugar elegido por esta, durante toda su jornada o parte de ella, con carácter regular.
- Teletrabajo: aquel trabajo a distancia que se lleva a cabo mediante el uso exclusivo o prevalente de medios y sistemas informáticos, telemáticos y de telecomunicación.
- Trabajo presencial: aquel trabajo que se presta en el centro de trabajo o en el lugar determinado por la empresa.

- **Artículo 11. Derecho a la dotación suficiente y mantenimiento de medios, equipos y herramientas.**

Apartado 1:

Las personas que trabajan a distancia tendrán derecho a la dotación y mantenimiento adecuado por parte de la empresa de todos los medios, equipos y herramientas necesarios para el desarrollo de la actividad. Especialmente en el caso del teletrabajo, se garantizará la atención precisa en el caso de dificultades técnicas.

- **Artículo 13. Derecho al horario flexible en los términos del acuerdo.**

Se deberán respetar los tiempos de disponibilidad obligatoria y la normativa sobre tiempo de trabajo y descanso, la persona que desarrolla trabajo a distancia podrá flexibilizar el horario de prestación de servicios establecido.

- **Artículo 17. Derecho a la intimidad y a la protección de datos.**

Apartado 2:

La empresa no podrá exigir la instalación de programas o aplicaciones en dispositivos propiedad de la persona trabajadora, ni la utilización de estos dispositivos en el desarrollo del trabajo a distancia.

Apartado 3:

Las empresas deberán establecer criterios de utilización de los dispositivos digitales respetando en todo caso los estándares mínimos de protección de su intimidad de acuerdo con los usos sociales y los derechos reconocidos legal y constitucionalmente.

- **Artículo 18. Derecho a la desconexión digital.**

Apartado 1:

El deber empresarial de garantizar la desconexión conlleva una limitación del uso de los medios tecnológicos de comunicación empresarial y de trabajo durante los periodos de descanso, así como el respeto a la duración máxima de la jornada y a cualesquiera límites y precauciones en materia de jornada que dispongan la normativa legal o convencional aplicables.

1.1.2. Real Decreto 488/1997 del 14 de abril

- **Artículo 1. Objeto**

Apartado 1:

El presente Real Decreto establece las disposiciones mínimas de seguridad y de salud para la utilización por los trabajadores de equipos que incluyan pantallas de visualización.

Apartado 2:

Las disposiciones de la Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales, se aplicarán plenamente al conjunto del ámbito contemplado en el apartado anterior.

Apartado 1:

Quedan excluidos del ámbito de aplicación de este Real Decreto:

- a. Los puestos de conducción de vehículos o máquinas.
- b. Los sistemas informáticos embarcados en un medio de transporte
- c. Los sistemas informáticos destinados prioritariamente a ser utilizados por el público.
- d. Los sistemas llamados portátiles, siempre y cuando no se utilicen de modo continuado en un puesto de trabajo.
- e. Las calculadoras, cajas registradoras y todos aquellos equipos que tengan un pequeño dispositivo de visualización de datos o medidas necesario para la utilización directa de dichos equipos.
- f. Las máquinas de escribir de diseño clásico, conocidas como máquinas de ventanilla.

- **Artículo 3. Obligaciones generales del empresario**

Apartado 1:

El empresario adoptará las medidas necesarias para que la utilización por los trabajadores de equipos con pantallas de visualización no suponga riesgos para su seguridad o salud o, si ello no fuera posible, para que tales riesgos se reduzcan al mínimo. En cualquier caso, los puestos de trabajo a que se refiere el presente Real Decreto deberán cumplir las disposiciones mínimas establecidas en el anexo del mismo.

Apartado 2:

A efectos de lo dispuesto en el primer párrafo del apartado anterior, el empresario deberá evaluar los riesgos para la seguridad y salud de los trabajadores, teniendo en cuenta en particular los posibles riesgos para la vista y los problemas físicos y de carga mental, así como el posible efecto añadido o combinado de los mismos. La evaluación se realizará tomando en consideración las características propias del puesto de trabajo y las exigencias de la tarea y entre estas, especialmente, las siguientes:

- a. El tiempo promedio de utilización diaria del equipo.
- b. El tiempo máximo de atención continua a la pantalla requerido por la tarea habitual.
- c. El grado de atención que requiera dicha tarea.

Apartado 3:

Si la evaluación pone de manifiesto que la utilización por los trabajadores de equipos con pantallas de visualización supone o puede suponer un riesgo para su seguridad o salud, el empresario adoptará las medidas técnicas u organizativas necesarias para eliminar o reducir el riesgo al mínimo posible. En particular, deberá reducir la duración máxima del trabajo continuado en pantalla, organizando la actividad diaria de forma que esta tarea se alterne con otras o estableciendo pausas necesarias cuando la alternancia de las tareas no sea posible o no baste para disminuir el riesgo suficiente.

Apartado 4:

En los convenios colectivos podrá acordarse la periodicidad, duración y condiciones de organización de los cambios de actividad y pausas a que se refiere el apartado anterior.

- **Artículo 4. Vigilancia de la salud**

Apartado 1:

El empresario garantizará el derecho de los trabajadores a una vigilancia adecuada de su salud, teniendo en cuenta en particular los riesgos para la vista y los problemas físicos y de carga mental, el posible efecto añadido o combinado de los

mismos, y la eventual patología acompañante. Tal vigilancia será realizada por personal sanitario competente y según determinen las autoridades sanitarias en las pautas y protocolos que se elaboren, de conformidad con lo dispuesto en el apartado 3 del artículo 37 del Real Decreto 39/1997, del 17 de enero, por el que se aprueba el Reglamento de los Servicios de Prevención

Apartado 2:

Cuando los resultados de la vigilancia de la salud a que se refiere el apartado 1 lo hiciese necesario, los trabajadores tendrán derecho a un reconocimiento oftalmológico.

Apartado 3:

El empresario proporcionará gratuitamente a los trabajadores dispositivos correctores especiales para la protección de la vista adecuados al trabajo con el equipo del que se trate, si los resultados de la vigilancia de la salud a los que se refieren los apartados anteriores demuestran su necesidad y no pueden utilizarse dispositivos correctores normales.

- **Artículo 5. Obligaciones en materia de información y formación**

Apartado 1:

De conformidad con los artículos 18 y 19 de la Ley de Prevención de Riesgos Laborales, el empresario deberá garantizar que los trabajadores y los representantes de los trabajadores reciban una formación e información adecuadas sobre los riesgos derivados de la utilización de los equipos que incluyan pantallas de visualización, así como sobre las medidas de prevención y protección que hayan de adoptarse en aplicaciones del presente Real Decreto.

Apartado 3:

El empresario deberá garantizar que cada trabajador reciba una formación adecuada sobre las modalidades de uso de los equipos con pantallas de visualización, antes de comenzar este tipo de trabajo y cada vez que la organización del puesto de trabajo se modifique de manera apreciable.

Parte III

PRESUPUESTO

Capítulo 1

1. Presupuesto

En este apartado se detallan los costes derivados del desarrollo de esta investigación. En este se incluye capital humano, gastos de material y equipamiento/software. Es importante comentar que se toma al euro [€] como unidad monetaria y a la hora [h] como la unidad temporal.

1.1. Presupuesto parcial

En este apartado se especifican los costes tomados en cuenta en esta investigación. La amortización que se emplea en este caso es la amortización lineal:

$$\text{Amortización}(a) = \frac{\text{Valor de compra} - \text{Valor residual}}{\text{Período}}$$
$$\text{Tasa horaria } (t) = \frac{\text{Amortización/coste}}{\text{Horas trabajadas en un año}}$$

$$\text{Horas trabajadas en un año} = 1840 \text{ horas}$$

La unidad de la amortización es euros año y la unidad de la tasa horaria es euros/hora.

1.1.1. Licencias informáticas (Softwares)

En este apartado se especifican los costes que representan los diferentes softwares utilizado en esta investigación. Estos son los siguientes:

- Licencia OpenFOAM: es un software de código abierto y la licencia es gratuita.
- Licencia Microsoft Office 365 Empresa Básico: el valor de la licencia anual es de 61,2 €.

$$t = \frac{61,2}{1840} = 0,033 \frac{\text{euros}}{\text{hora}}$$

- Licencia Matlab: el valor de la licencia anual es de 800 €.

$$t = \frac{800}{1840} = 0,435 \frac{\text{euros}}{\text{hora}}$$

- Licencia Statgraphics Centurion: el valor de la licencia anual es de 8559 €.

$$t = \frac{8559}{1840} = 4,652 \frac{\text{euros}}{\text{hora}}$$

En resumen:

Licencia	Horas (h)	Precio (€/h)	Importe (€)
Microsoft Office 365 Empresa Básico	280	0,033	9,24
Matlab	120	0,435	52,2
Statgraphics Centurion	20	4,652	93,04
Total			154,48

Tabla 21. Presupuesto parcial de los softwares.

1.1.2. Capital Humano

- **Doctor de la Universidad (Tutor):** basados en la información encontrada en el Portal de Transparencia de la Universitat Politècnica de València se estima coste del tutor del TFG de 17 €/h.
- **Ingeniero de grado (Becario):** es el autor del TFG y se estima un coste de 4 €/h según la Beca de Colaboración del Ministerio de Educación y Formación Profesional del Gobierno de España.

En resumen:

Recurso	Horas (h)	Precio (€/h)	Importe (€)
Tutor (Doctor de la Universidad)	40	17	680
Becario (Ingeniero de grado)	340	4	1360
Total			2040

Tabla 22. Presupuesto parcial del Capital Humano.

1.1.3. Material

- **Equipo informático (Ordenador):** con un valor residual del 20% y un período de amortización de 5 años. En el desarrollo de este trabajo hicieron falta 2 ordenares con un coste medio aproximado de 1000€.

$$a = \frac{1000 - 200}{5} = 160 \text{ €/año}$$

$$t = \frac{160}{1840} = 0,087 \text{ €/h}$$

- **Material de oficina:** incluye todos los materiales empleados para el desarrollo de este proyecto que no sean los equipos informáticos ni los softwares. Estos son: folios, lápices, libretas, entre otros.

$$\text{Coste} = 15 \text{ €}$$

En resumen:

Material	Horas (h)	Precio (€/h)	Importe (€)
Ordenador 1	40	0,087	3,48
Ordenador 2	280	0,087	24,36
Material de oficina	-	-	15
Total			42,84

Tabla 23. Presupuesto parcial de materiales.

1.2. Presupuesto global

Luego de especificar los diferentes costes, se realiza un presupuesto global resumiendo toda la información donde también, aparecen algunos costes extras como: IVA (21%), gastos generales (13% del presupuesto total de recursos) y beneficio industrial (6% del presupuesto total de recursos).

Concepto	Importe(€)
Licencias	154,48
Capital Humano	2040,00
Material	42,84
Presupuesto total recursos	2237,32
Gastos generales (13%)	290,85
Beneficio Industrial (6%)	134,24
Total ejecución por contrata	2662,41
I.V.A (21%)	559,10
Total	3221,51

Tabla 24. Presupuesto global del proyecto.

El presupuesto total asciende a:

Tres mil doscientos veintiún euros con cincuenta y un céntimos.

