

Congreso Latinoamericano

CLICAP

Ingeniería y Ciencias Aplicadas

2022

MEMORIAS

6, 7 Y 8 DE ABRIL

SAN RAFAEL MENDOZA REPUBLICA ARGENTINA



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO



FACULTAD DE
**CIENCIAS APLICADAS
A LA INDUSTRIA**

CLICAP 2022
Congreso Latinoamericano de Ingeniería y Ciencias Aplicadas
San Rafael – Mendoza – Argentina
06, 07 y 08 de Abril de 2022

Universidad Nacional de Cuyo

(Mendoza, República Argentina)

Rector: Ing. Agr. Daniel Ricardo Pizzi

Vicerrector: Dr. Prof. Jorge Horacio Barón

Facultad de Ciencias Aplicadas a la Industria

(San Rafael, Mendoza, República Argentina)

Decano: Dr. Ing. Daniel Alfredo Castro

Vicedecano: Mgter. Ing. Rogelio Oscar Di Santo



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO



FACULTAD DE
**CIENCIAS APLICADAS
A LA INDUSTRIA**

Congreso Latinoamericano
CLICAP
Ingeniería y Ciencias Aplicadas

San Rafael – Mendoza –Argentina
2022

Universidad Nacional de Cuyo- Facultad de Ciencias Aplicadas a la Industria
CLICAP 2022: Congreso Latinoamericano de Ingeniería y Ciencias Aplicadas / compilación de
Mónica Beatriz Barrera ... [et al.]. - 1a ed. - San Rafael: Facultad de Ciencias Aplicadas a la
Industria de la Universidad Nacional de Cuyo, 2022.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online
ISBN 978-987-46333-3-0

1. Ingeniería. 2. Congreso. I. Barrera, Mónica Beatriz, comp. II. Título.
CDD 607.1

Fecha de catalogación: 04/03/2022

San Rafael, Mendoza, 1ª Edición 2022.

ISBN: 978-987-46333-3-0
Facultad de Ciencias Aplicadas a la Industria
Bernardo de Irigoyen 375, 5600. San Rafael, Mendoza, Argentina

Autoridades Facultad de Ciencias Aplicadas a la Industria

Decano

Dr. Ing. Daniel Alfredo CASTRO
dcastro@fcai.uncu.edu.ar

Vicedecano

Mgter. Ing. Rogelio Oscar DI SANTO
rdisanto@fcai.uncu.edu.ar

Secretaría Académica

Esp. Ing. María Eugenia CASTRO - mecastro@fcai.uncu.edu.ar

Secretaría de Ciencia, Técnica y Posgrado

Dra. Ing. Silvia Cristina CLAVIJO - scclavijo@fcai.uncu.edu.ar

Secretaría de Asuntos Estudiantiles

Ing. Yanina Nahir ALÍAS - ynalias@fcai.uncu.edu.ar

Secretaría Administrativa Financiera

Cont. Liliana Rosa PÉREZ - liperez@fcai.uncu.edu.ar

Secretaría de Comunicaciones e Informática

Ing. Fabián Rafael TALIO - ftalio@fcai.uncu.edu.ar

Secretaría de Extensión y Vinculación

Ing. Martín A. MOYANO - mamoyano@fcai.uncu.edu.ar

Comité Científico

- Dra. María Esther Balanza
- Dr. Aldo Roberto Boccaccini
- Dra. María Silvina Cabeza
- Dr. Daniel Alfredo Castro
- Dra. Lidia Catalán
- Dr. Andrés Ciolino
- Dra. Silvia Cristina Clavijo
- Dra. Sonia Concari
- Dra. Diana Constenla
- Dr. Guillermo Crapiste
- Dra. María Guadalupe Cuitiño
- Mgter. Jorge De Ondarra
- Dr. Martín Leandro Fanzone
- Dra. Gabriela Feresin
- Dra. Cecilia Adriana Flores
- Dra. Carina Llano
- Dr. Rodrigo Javier López Plantey
- Mgter. Laura Lucero
- Dra. María Eugenia Márquez
- Dra. María Carolina Martín
- Dr. Carlos Martínez
- Dr. Rodolfo Mascheroni
- Dra. María Gabriela Merín
- Dr. Daniel Millán
- Dr. Marcelo Molina
- Dra. Vilma Morata
- Dra. Verónica Cecilia Musale
- Esp. Ing. Laura Najjar
- Dr. Claudio Nambuena
- Dr. Mario Ninago
- Dra. Alicia Ordóñez
- Dra. Nora Beatríz Pece
- Dra. María Élide Pirovani
- Dra. Luciana Prendes
- Dra. Ana Gabriela Qüesta
- Dr. Franco Leonardo Redondo
- Dra. Andrea Ridolfi
- Dr. Augusto Roggiero
- Dra. Carina Rubau
- Mgter. Graciela Serrano
- Dra. Delia Paola Urfalino
- Dr. Marcelo Villar
- Dra. Noemí Zaritzky

Comité Organizador

Presidente de la Organización:

- Dra. Silvia Cristina Clavijo

Integrantes:

- Prof. Mónica Barrera
- Ing. Marianela del Carmen Bignert
- Ing. Raúl Carrión
- Ing. Enrique Cerioni
- Tec. Luis Finocchio
- Ing. Daniela Funes
- Ing. María Carolina Giaroli
- Dra. María Carolina Martín
- Ing. Silvana Martínez
- Ing. Martín Moyano
- Prof. Camila Macarena Muñoz
- Dra. Verónica Cecilia Musale
- Dr. Mario Ninago
- Dra. Alicia Ordóñez
- Lic. Andrés Peñasco
- Cont. Liliana Pérez
- Lic. Guillermo Poblete
- Ing. Heber Noé Possa
- Dr. Augusto Roggiero
- Ing. Alicia María Sánchez
- Mgter. Graciela Serrano
- Ing. Sergio Sini
- Ing. Fabián Talio
- Dra. Delia Paola Urfalino

Presentación

Bienvenidos a la 6° Edición del Congreso Latinoamericano de Ingeniería y Ciencias Aplicadas “CLICAP 2022” y su evento asociado el 5° Encuentro AUSAL, que se desarrollará, los días 6, 7 y 8 de Abril de 2022, en la sede de la Facultad de Ciencias Aplicadas a la Industria de la Universidad Nacional de Cuyo, sede San Rafael.

El momento que vivimos hoy muestra la relevancia de impulsar un evento como este, en el país, reuniendo a reconocidos especialistas de diferentes partes del mundo, con el fin de encontrar soluciones que contribuyan a la recuperación que tanto necesita el sector industrial.

La edición anterior del CLICAP contó con la asistencia de investigadores provenientes de Universidades e Institutos científicos de BRASIL, CHILE, COLOMBIA, VENEZUELA, ECUADOR, ARGENTINA, ESPAÑA con la presentación de 281 ponencias orales de trabajos de investigación, seis mesas redondas y cuatro conferencias contando con más de 400 inscriptos.

La Institución se encuentra movilizada esperando una gran concurrencia de investigadores, alumnos y profesionales sumando conocimiento, desarrollo e innovación a los desafíos por venir.

Deseamos que el evento supere ampliamente las expectativas y que disfruten de la cordialidad de nuestra casa de estudios.

Comisión Organizadora

CLICAP 2022

**ÁREA INGENIERÍA QUÍMICA Y
CIENCIAS AMBIENTALES
TRABAJOS COMPLETOS**

ÍNDICE

01TCQA - Análisis exergético y ambiental para el secado de pulpa de zapallo.....	359
02TCQA - Análisis exergo-ecológico y de ciclo de vida (LCA) para el proceso de pirólisis de 12 biorresiduos.....	366
03TCQA - Comparación de eficiencias teóricas y rendimientos térmicos experimentales en tres prototipos de destiladores solares	373
04TCQA - Construcción de un colector solar experimental con materiales reciclados para calentamiento de agua.....	385
05TCQA - Estudio del proceso de recuperación de agua a partir de salmueras en un destilador solar.....	394
06TCQA - Una contribución al impacto hidrológico cero: zanjas rellenas de agregados.....	401
07TCQA - Estabilidad ambiental de biomarcadores del petróleo en suelo y agua de mar	411
08TCQA - Cambio climático. Una mirada desde la Lexicometría.	420
09TCQA - Análisis de costos en la industrialización de alfalfa para promover el aumento del área cultivada como acción para mitigar la Emergencia Ambiental de la Cuenca del Morro.	427
10TCQA - Embalse El Nihuil: Características hidroquímicas, macro y microflora acuática y estado trófico.....	436
11TCQA - Fabricación de morteros de cemento con sustitución parcial de carozo de oliva.	446
12TCQA - Biomateriales constructivos: Reutilización de cáscaras de naranja con micelio de <i>Pleurotus ostreatus</i>	452
13TCQA - Evaluación térmica y espectrofotométrica de materiales compuestos elaborados a partir de raquis de palma africana y resina termoplástica.	459
14TCQA - Estudio cinético de la pirólisis lenta de bio-residuos de membrillo antes y después de la extracción de pectina.....	465
15TCQA - Ensayos a escala laboratorio del alcohol bencílico como trazador químico para futuras aplicaciones en la industria petrolera.....	478
16TCQA - Ensayos de barridos dinámicos para incrementar la recuperación de petróleo con diferentes fluidos desplazantes.....	488
17TCQA - Estudios reológicos de polímeros lineales, asociativos y sus mezclas para su aplicación en la recuperación mejorada de petróleo.....	500
18TCQA - Cristalización isotérmica de poli(ϵ -caprolactona) PCL, en copolímeros ramificados	513
19TCQA - Calibración del proceso de molienda de maíz bajo el enfoque de modelado por elementos discretos.....	521
20TCQA - Estudio de las curvas de adsorción en una columna de lecho fijo.....	531
21TCQA - Reconciliación No lineal de Datos Robusta con incertidumbre paramétrica y mediciones no gaussianas.....	537
23TCQA - Evaluación de la incidencia de las fases de la digestión anaerobia en la degradación de bisfenol A y sildenafil	548

24TCQA - Optimización mediante dFBA de la producción de lípidos en cultivo batch alimentado a partir de <i>Rhodospiridium toruloides</i>	555
26TCQA - Diseño de redes de sensores para observabilidad de procesos químicos no lineales ...	565
27TCQA - Localización óptima de sensores para estimación de estados en procesos químicos ...	573
28TCQA - Recubrimientos precursores del componente mineral óseo obtenido por deposición electroforética.	581
29TCQA - La respuesta de la comunidad de barros activados ante la presencia de Cloruro de Benzalconio se relaciona con el tiempo de exposición al desinfectante	588
30TCQA - Proceso combinado de electrocoagulación y electrooxidación para el tratamiento de aguas residuales de la industria pesquera.	595
31TCQA - Remoción de cianobacterias mediante tratamientos convencionales de potabilización.	603
32TCQA - Inactivación de una peroxidasa comercial por peróxido de hidrógeno.	615
33TCQA - Soporte de carbón activado diseñado para el transporte de dacarbazina: dependencia de la adsorción con el pH.	622
34TCQA - Síntesis, caracterización y evaluación de la remoción de Arsénico en matrices de quitosano con hierro.....	630
35TCQA - Colorimetría mediante imágenes digitales para el monitoreo en campo de la eficiencia de la etapa floculación-filtración de una planta de remoción de arsénico.....	637
36TCQA - Adsorbente eco-compatible de PVA/quitosano para la remoción de colorantes sintéticos: Estudio del equilibrio, cinética de adsorción y estabilidad	643
37TCQA - Evaluación de adsorción del colorante Rojo Reactivo 195 mediante ensayos batch y dinámicos usando matriz biocompuesta de quitosano/pellet de alúmina.....	655
38TCQA - Secuestro de Cu ²⁺ por matrices poliméricas de alginato: propiedades reológicas y estudio de eficacia	667
39TCQA - Relevancia de la morfología de la superficie de la sílica en la adsorción del fármaco ampyra.	672
40TCQA - Síntesis de 5-hidroximetilfurfural a partir de melaza de remolacha sintética mediante tratamiento hidrotermal asistido por microondas	681
41TCQA - Isótopos Estables de Carbono como Proxy de Estrés Hídrico: Tendencias en Vides de Mendoza.....	691
42TCQA - Valoración de la calidad nutricional de ensilados de sorgo elaborados por productores familiares de la localidad de Vaqueros (Salta, Argentina).....	700
43TCQA - Nano y microfibras orientadas funcionalizadas con aceite esencial de <i>Mentha piperita</i>	707
44TCQA - Gestión integrada del agua en la puna salteña.....	714
45TCQA - Gestión de sustancias y residuos peligrosos en la universidad.....	723
46TCQA - Ensayos con rociado térmico de aluminio por arco eléctrico en la pintura naval.	730

19TCQA - Calibración del proceso de molienda de maíz bajo el enfoque de modelado por elementos discretos

Calibration of the corn milling process under discrete element modeling

Alejandro Gabriel Chiaravalle¹, Jacqueline Claudia Lobos de Ponga¹, Ivana María Cotabarren^{1,2}, Juliana Piña^{1,2}

1. Departamento de Ingeniería Química (DIQ), Universidad Nacional del Sur (UNS), Bahía Blanca, Argentina.
2. Planta Piloto de Ingeniería Química (PLAPIQUI, UNS-CONICET), Bahía Blanca, Argentina.
achiaravalle@plapiqui.edu.ar

Resumen

En el presente trabajo se realizó la calibración del proceso de molienda de granos individuales de maíz bajo el enfoque de modelado por elementos discretos (DEM), utilizando el modelo de rotura de Tavares, disponible en el software Rocky DEM. Para ello, se realizaron 60 ensayos de compresión controlada sobre granos individuales, empleado un texturómetro (TA instruments). Se registró una cantidad de dos fragmentos generados por rotura, y una energía y potencia de rotura promedio de 0,1013 J y 2,1963 W, respectivamente. Por su parte, la energía y potencia específicas de rotura resultaron en 156,92 J/kg y 3332,66 W/kg, para un grano de maíz cuya forma se aproximó a un paralelepípedo rectangular, de masa promedio de 0,664 g. Estos ensayos fueron replicados en Rocky DEM, implementando el experimento virtual sobre una partícula de forma paralelepípeda generada con la misma masa y forma, previa calibración de los parámetros de rotura correspondientes al modelo. Se logró simular adecuadamente el proceso en DEM, obteniendo los mismos resultados cualitativos de rotura y valores cuantitativos dentro del rango de la distribución de valores experimentales. Los resultados de este trabajo constituyen la base para la posterior implementación del proceso de molienda de maíz en DEM.

Palabras clave: maíz, rotura, calibración, DEM.

Abstract

In the present work, the calibration of individual corn kernels breakage under the discrete element modeling (DEM) approach with the Tavares Breakage model available in Rocky DEM was developed. In order to gather the required experimental information, 60 controlled compression tests were carried out on individual grains, using a texturometer (TA instruments). Two fragments generated by breakage were observed, and an average breakage energy and power of 0.1013 J and 2.1963 W were recorded, respectively. The specific breakage energy and power resulted in 156.92 J/kg and 3332.66 W/kg, for a corn kernel approximated to a rectangular parallelepiped with an average mass of 0.664 g. These tests were replicated in Rocky DEM, implementing the virtual experiment on a particle of parallelepiped shape generated with the same mass and shape, after fitting the corresponding breakage model parameters. The process was adequately simulated in DEM, obtaining the same qualitative breakage results and quantitative values within the range of the distribution of experimental values. The results of this work constitute the base for the subsequent implementation of the corn milling process in DEM.

Keywords: corn, breakage, calibration, DEM.

1. Introducción

La reducción de tamaño o molienda es una operación unitaria fundamental, utilizada en gran variedad de procesos de manufactura en continuo. A pesar de la importancia que reviste, continúa siendo altamente ineficiente debido a la escasez de modelos predictivos adecuados. En este marco, es necesario contribuir a su operación racional mediante el desarrollo de herramientas de simulación, que combinen el modelado basado en primeros principios con experimentación para su validación.

En la actualidad, resulta relevante abordar la operación en la industria alimentaria, donde la manufactura continua está instalada, pero requiere procesos optimizados. En particular, el maíz constituye uno de los componentes principales de la formulación de diversos alimentos, siendo la molienda una de las operaciones unitarias de mayor impacto sobre la calidad del producto final.

El tamaño final de las partículas en un proceso de molienda depende de las características del material, el tipo de equipo utilizado y las condiciones operativas (Cotabarren *et al.*, 2008). Por lo tanto, una descripción sistemática de esta operación resulta un desafío.

El método de elementos discretos (*discrete element method*, DEM) ha alcanzado relevancia para simular operaciones que involucran material particulado (Tavares *et al.*, 2021). En este enfoque, el material se modela como un conjunto de partículas individuales que interactúan entre sí y con los elementos de su entorno, a medida que se mueven a través del espacio y colisionan. Es de naturaleza mecánica y sensible a los parámetros del proceso, la geometría del equipo y las propiedades del material (Barrasso *et al.*, 2015). Si bien los modelos DEM son computacionalmente intensivos y requieren calibración de las propiedades de los materiales, presentan capacidades predictivas más allá que otros enfoques de modelado. La trayectoria y velocidad de cada partícula se calcula en intervalos de tiempo discretos, lo que proporciona información como la frecuencia de colisiones, la duración del contacto y los perfiles de velocidad (Hlosta *et al.*, 2018).

Los primeros estudios de las propiedades de maíz en DEM fueron desarrollados por Coetzee *et al.* (2009). Los autores replicaron ensayos de compresión y corte, realizados en escala laboratorio, en el entorno de DEM, implementando diferentes modelos con el objetivo de calibrar los coeficientes de fricción intergranulares y entre la partícula y el entorno. González-Montellano *et al.* (2012) determinaron experimentalmente diversas propiedades del maíz,

como los coeficientes de restitución, de fricción, y el módulo de Young. Hlosta *et al.* (2018) trabajaron exhaustivamente en la medición del coeficiente de restitución intergranular, mediante el ensayo de doble péndulo. Por su parte, Markauskas *et al.* (2015) implementaron los experimentos sobre granos de maíz en DEM en tres dimensiones, aproximando la partícula a un cúmulo de esferas. Moussaviraad *et al.* (2017) trabajaron con el flujo de granos de maíz a través de un tornillo transportador, para lo cual determinaron experimentalmente las propiedades físicas y parámetros de interacción. Además, calibraron en el entorno de DEM los correspondientes coeficientes de fricción.

Sin embargo, no se han encontrado a la fecha artículos publicados en los que se describa el proceso de reducción de tamaño del maíz mediante DEM. En el contexto descripto, el objetivo general del presente trabajo es estudiar el comportamiento de la rotura de granos individuales de maíz en DEM, a partir de ensayos de compresión individuales, registrando la probabilidad de rotura, cantidad de fragmentos generados, y la energía y potencia consumida. Para representar el ensayo de compresión virtual en DEM se utilizó el modelo de Tavares, disponible en Rocky DEM. Los datos experimentales se utilizaron para ajustar los parámetros del modelo y validar las simulaciones.

2. Materiales y métodos

a. Modelo de contacto en DEM

Las interacciones entre partículas (o entre partículas y su entorno) son evaluadas para cada contacto, modelando el movimiento para cada partícula individual. Fundamentalmente, DEM utiliza las leyes de movimiento de Newton para resolver los balances de fuerza sobre partículas individuales, en intervalos de tiempo discretos (Coetzee *et al.* 2017). Este método, originalmente propuesto por Cundal y Strack (1979), es capaz de calcular cualquier movimiento mediante la adecuada selección del modelo de contacto, siendo uno de los más utilizados el modelo de Hertz-Mindlin. Descripciones detalladas del mismo pueden encontrarse en la literatura (Coetzee *et al.*, 2017; González-Montellano *et al.*, 2012).

b. Rocky DEM

Para el desarrollo de este trabajo se utilizó el software Rocky DEM (ESSS). Rocky DEM es un entorno de modelado potente y robusto que cuenta con una serie de herramientas que lo destacan de otros softwares DEM comerciales, tales como el modelado del proceso de rotura basado en fragmentación de poliedros, y la posibilidad de

combinar diferentes formas y tamaños de partículas para crear conjuntos muy cercanos a la realidad (de Lima *et al.*, 2021).

Además de la selección del modelo de contacto adecuado, la simulación DEM requiere un conjunto de parámetros de colisión y propiedades del material que deben determinarse cuidadosamente para obtener resultados acertados. Estos incluyen propiedades físicas de los materiales (maíz, y materiales de las superficies de contacto, como metal, madera o plástico), como densidad, módulo de Young, y coeficiente de Poisson; parámetros de interacción entre materiales, como los coeficientes de restitución y de fricción (partícula-partícula y partícula-entorno), macro propiedades, como la densidad a granel, ángulo de fricción interna y ángulo de reposo, utilizados para la posterior calibración de propiedades que no pueden medirse experimentalmente; y distribuciones de forma y tamaño de las partículas (*particle size distribution, PSD*). Dichas propiedades fueron determinadas con anterioridad por el grupo de trabajo (Quezada Herny *et al.* 2020) mediante la realización de ensayos experimentales y su posterior replicación en Rocky DEM.

c. Modelo de Rotura

Rocky DEM cuenta, entre otros, con el modelo de rotura desarrollado por Tavares *et al.* (2010). Este modelo comprende una serie de ecuaciones que describen la fragmentación de partículas sujetas a estrés de magnitudes variadas (Rocky DEM, 2021). Específicamente, evalúa la energía asociada a cada contacto para determinar si ocurrirá rotura, comparándola con la energía de fractura particular del material, y genera una distribución de fragmentos en base a al algoritmo de fragmentación de Laguerre-Voronoi (Tavares *et al.*, 2020). Mediante el correcto ajuste de sus parámetros, este modelo es idealmente capaz de representar la rotura de cualquier material.

i. Cálculos del modelo

Las energías específicas de fractura de partícula en sucesivos eventos de carga sin fractura pueden cuantificarse con la ecuación (1):

$$E_n = E_{n-1} \cdot (1 - D_n^*) \quad (1)$$

siendo D_n^* el daño sostenido en el n-ésimo ciclo de carga, igual a la ecuación (2):

$$D_n^* = [2\gamma / (2\gamma - 5D_n^* + 5) \cdot (E_{k,n} / E_{n-1})]^{2\gamma/5} \quad (2)$$

donde γ es el coeficiente de acumulación de daño.

La distribución de tamaño de los fragmentos generados por los impactos de energía específica $E_{k,n}$ sobre partículas de una misma clase, se calcula estimando la fracción del material que pasa a 1/10 del tamaño original de partícula (t_{10}) mediante la ecuación (3):

$$t_{10} = A [1 - \exp(-b' E_{k,n}/E)] \quad (3)$$

donde A y b' son parámetros del modelo, y E es la energía específica de fractura de las partículas que se rompen con una energía de impacto $E_{k,n}$. La PSD completa puede ser expresada mediante la función Beta Incompleta (ver sección 2.5.4.).

Se ha demostrado que al volverse más finas las partículas, se tornan también más duras y se incrementa su energía específica de fractura. La ecuación (4) se utiliza para describir esta variación, calculando la variación en la mediana de la distribución de energías (E_{50}):

$$E_{50} = E_{\infty} \cdot [1 + (d_0/d)^{\varphi}] \quad (4)$$

donde d_0 , E_{∞} y φ son parámetros del modelo que se ajustan con datos experimentales, y d es el tamaño medio de las partículas. Estos parámetros varían significativamente según el tipo de material. La ecuación (5) define la distribución de la energía específica de fractura como:

$$P_0(E) = 1/2 [1 + \operatorname{erf} (\ln(E^*) - \ln(E_{50}) / (2\sigma^2)^{1/2})] \quad (5)$$

Donde σ^2 es la varianza de la distribución normal logarítmica de energías de fractura, E_{50} es la mediana de energía específica media de fractura y E^* es la energía específica relativa de fractura, obtenida mediante la ecuación (6):

$$E^* = (E_{\max} \cdot E) / (E_{\max} - E) \quad (6)$$

donde E_{\max} es la máxima energía específica de fractura de una distribución.

Los parámetros que afectan la rotura son inherentes a cada modelo. Para obtener sus valores, se deben implementar experimentos de rotura sobre partículas individuales, o realizar simulaciones en el entorno de DEM ajustándolos hasta obtener resultados (Tavares *et al.*, 2020).

d. Ensayos experimentales

Se realizaron un total de 60 ensayos de compresión sobre granos de maíz individuales. El equipo empleado fue un texturómetro (TA Instruments, ver Figura 1). Este equipo consiste en una celda que aplica condiciones controladas de tensión a muestras de alimentos, midiendo su perfil completo de textura. Permite determinar con precisión la fuerza y la posición de la compresión a cada instante de tiempo.



Los ensayos fueron realizados a velocidad constante, modificando su valor en las sucesivas pruebas para determinar su influencia sobre la fracturabilidad del maíz, entre 1 y 10 mm/min.

La carga máxima para el equipo se fijó en 500 N para todos los ensayos, mientras que el límite de compresión establecido dependió de la orientación del grano hacia la celda.

Figura 1. Texturómetro utilizado en los ensayos.

La celda utilizada es cilíndrica, de modo de que la superficie de contacto entre la misma y el maíz es plana.

El criterio de selección de los granos de maíz consistió en identificar aquellos de dimensiones similares entre sí, siendo éstas la altura A, longitud B, y espesor E, asemejando la forma del grano a un paralelepípedo rectangular (Figura 2). A su vez, estas dimensiones determinan los planos AB, AE y BE, de modo que los ensayos se realizaron orientando uno de estos tres planos de cara a la celda. Las medidas fueron tomadas empleando un calibre digital.

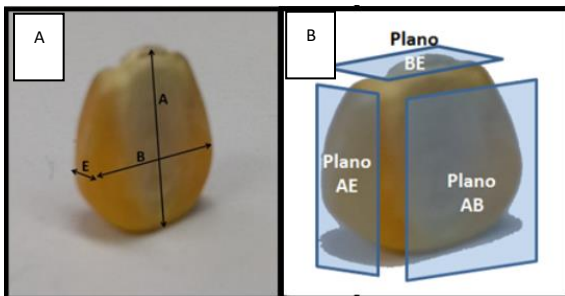


Figura 2. A) Medidas de un grano de maíz. B) Planos de un grano de maíz.

Los granos presentan una parte convexa denominada germen, la cual debió ser tenida en cuenta en los ensayos realizados colocando el plano AB de cara a la celda, debido a que altera la superficie de contacto celda-grano (Figura 3).



Figura 3. A) Grano con el germen hacia arriba, de cara a la celda. B) Grano con el germen hacia abajo.

Al aproximar los granos a un paralelepípedo, se determinó su masa mediante la ecuación (7).

$$m = A.B.E.\rho \quad (7)$$

Donde m es la masa del grano aproximado, A, B y E son sus medidas, y ρ es la densidad del maíz. Esta fue determinada mediante picnometría (Quezada Hery *et al.* 2020), resultando en un valor de 1.231 kg/m³.

i. Energía y potencia de rotura

La energía de rotura fue calculada multiplicando el desplazamiento de la celda por el correspondiente valor de fuerza registrada en cada intervalo de tiempo, y posteriormente realizando la sumatoria de todos los valores de energía entre el instante de inicio del contacto celda-grano y el instante de rotura, para obtener la energía de rotura acumulada.

Por su parte, para determinar la potencia, se dividió la energía calculada para cada punto por su correspondiente intervalo de tiempo, obteniendo la potencia puntual. De manera análoga a la energía, se procedió a sumar todos estos valores para obtener la potencia acumulada a la primera rotura.

e. Ajuste de parámetros del modelo

En general (Rocky DEM, 2021), para realizar la estimación de los parámetros de rotura del modelo de Tavares, se debe evaluar la energía de rotura registrada de los ensayos realizados sobre cada clase de tamaño que constituye la muestra, integrando luego la fuerza por el desplazamiento del modo descrito en la sección 2.4.1. (Rocky DEM, 2021) La

distribución de energía específica constituye entonces la base de cálculo.

i. σ^2 y E_{50}

En primer lugar, se debe determinar la distribución del logaritmo de la energía específica, a la cual se le calcula la varianza al cuadrado para obtener el primer parámetro, σ^2 . Posteriormente, la mediana de la distribución de energía específica, E_{50} , se obtiene de la ecuación (8):

$$E_{50} = 10^{\sigma^2} \quad (8)$$

ii. E_{∞} , d_0 y ϕ

Realizando este procedimiento para todas las clases, es posible graficar E_{50} vs el tamaño medio de cada clase, con el fin de ajustar la curva descrita por la ecuación (4) y obtener el valor de los parámetros E_{∞} , d_0 y ϕ . Dado que el maíz seleccionado para este trabajo pertenece a una única clase de tamaño, se decidió establecer d_0 y ϕ en los valores por defecto (Rocky DEM, 2021) e iguales a 0,4 mm y 0,45, respectivamente, y se despejó E_{∞} de la ecuación (4).

Por lo tanto, el tamaño d utilizado en la ecuación (4) fue la mayor dimensión de los granos aproximados a paralelepípedos rectangulares, es decir, la diagonal del plano AB, cuyo valor promedio resultó igual a 16,80 mm.

iii. A y b'

En general, el cálculo de A y b' implica la obtención del t_{10} de sucesivas pruebas realizadas sobre la energía de compresión o de impacto creciente, mediante el posterior tamizado de los fragmentos generados. Esto permite generar una curva de t_{10} en función de la relación entre la energía de impacto y la E_{50} ($E_{k,n}/E_{50}$), para ajustar A y b' de la ecuación (3).

Debido a que en este trabajo se realizaron experimentos de compresión de maíz a un único rango de energía, se decidió implementar un método de ajuste más sencillo, que consistió en modificar iterativamente los valores de A y b' en Rocky DEM hasta obtener resultados de rotura similares a la realidad, analizando exclusivamente la PSD generada.

iv. Función Beta Incompleta

La función Beta Incompleta, generalización de la Integral de Euler, es una función que suele utilizarse en aplicaciones probabilísticas para definir

densidades de población acumulada en intervalos de clase. Graficar los diferentes t_n (t_2 , t_4 , t_{25} , t_{50} y t_{75}), es decir, la cantidad porcentual de fragmentos que pasan $1/n$ del tamaño original de la partícula, en función del t_{10} , permite obtener los valores de esta función para todos los tamaños necesarios y así construir la PSD completa.

En este trabajo y en función de la PSD obtenida en los ensayos experimentales, se decidió asignar valores a las variables de la función Beta Incompleta para cada uno de los t_n , de modo de obtener la misma PSD al simular los ensayos en Rocky DEM.

Por último, se dejó el parámetro de acumulación de daño γ , en su valor por defecto, igual a 5.

v. E_{min} , E_{max} y tamaño mínimo

E_{min} es la mínima energía específica que puede causar daño a una partícula, la cual suele definirse en 1 J/kg para aplicaciones como molienda (Rocky DEM, 2021). Por su parte, E_{max} , descrita en la sección 2.3.1., debe determinarse de la distribución de energías.

El tamaño mínimo de fragmentos generables es un parámetro inherente al modelo que no se encuentra en las ecuaciones explícitas de la sección 2.3.1., pero que es utilizado en el código de Rocky DEM como límite del tamaño que pueden tener los fragmentos generados tras un evento de tensión. Dependiendo de la operación que se quiera simular, su valor se establece en una fracción del tamaño original promedio de las partículas.

f. Implementación de los ensayos en Rocky DEM

Se realizaron sucesivas simulaciones en el entorno de Rocky DEM, reproduciendo los ensayos experimentales. Se generó una única partícula de masa igual al promedio de la distribución de masa de los granos aproximados como paralelepípedos rectangulares. Se decidió emplear una partícula virtual poliédrica (*polyhedron* en Rocky DEM, Figura 4), cuyas dimensiones fueron determinadas de modo de conservar las proporciones de los granos reales y de no afectar considerablemente el tiempo de cómputos (Quezada Henry *et al.* 2020). El tamaño de la partícula definido fue el diámetro de una esfera de volumen equivalente al volumen promedio de los granos aproximados a paralelepípedos rectangulares, siendo

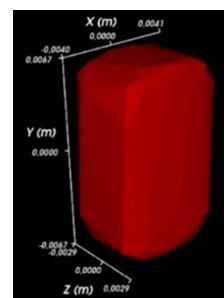


Figura 4. Partícula poliédrica generada en Rocky

este diámetro equivalente la opción de tamaño elegida para representar la partícula en DEM. Este diámetro fue de 10,10 mm, para un volumen promedio de 539,46 mm³.

Los materiales definidos fueron el maíz con sus propiedades, y el metal (acero inoxidable) de la celda y la base donde se apoya el grano para su compresión. Se generó una celda de iguales dimensiones y masa que la celda real, y se programó la simulación para que la celda descienda a una velocidad constante de 10 mm/min.

Se llevaron a cabo sucesivas iteraciones modificando propiedades de la simulación, como el tiempo neto de descenso de la celda a velocidad constante, el coeficiente de fricción partícula-entorno entre la base metálica y la partícula de maíz (para evitar su deslizamiento ante la presión de la celda), la posición de la partícula al inicio de la simulación, y parámetros del modelo de rotura inherentes al software, como el tamaño mínimo de fragmentos generables.

Se analizó la fuerza sobre la partícula al momento de rotura, la energía, potencia, energía específica y potencia específica, desde el instante en que se inicia el contacto partícula-celda hasta que ocurre la rotura. Se estudiaron los parámetros y variables a ajustar en el software para alcanzar una distribución de fragmentos igual a la experimental.

Se realizaron un total de 10 réplicas de cada simulación. Del total de 10 corridas, se tomó el promedio de cada resultado como valor final a reportar.

3. Resultados y Discusión

a. PSD experimental y ensayos de rotura

Se realizaron un total de 60 de rotura, registrando la ocurrencia o no de la misma. Los resultados se presentan en la Tabla 1.

Tabla 4. Probabilidad de rotura

Ensayos	60	Germen hacia arriba	32
		Germen hacia abajo	28
Rotura	33 / 60	Germen hacia arriba	20 / 32
		Germen hacia abajo	13 / 28

Es posible observar que, de orientar el germen hacia la celda, el grano ofrece una menor resistencia a la compresión. Por otro lado, incrementar la velocidad de descenso de la celda entre ensayos no resultó en

una mayor probabilidad de fractura (datos no mostrados).

Los perfiles registrados de fuerza vs tiempo y fuerza vs desplazamiento (Figura 5) permitieron observar que, una vez iniciado el contacto entre la celda y el grano, la fuerza crece siguiendo una tendencia lineal. El punto en el que ocurre la rotura se evidencia como una caída abrupta en la curva, debido a que la presión ejercida rompe el grano y se altera la superficie de contacto. A partir de este instante, la celda continúa ejerciendo presión sobre los fragmentos generados, de modo que la curva de fuerza comienza a crecer nuevamente.

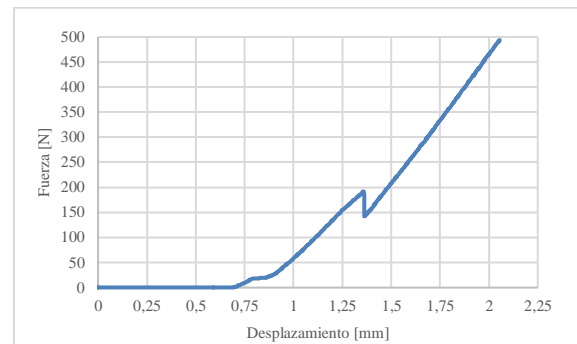


Figura 5. Gráfico de fuerza vs desplazamiento de uno de los ensayos realizados.

Para el análisis de energía y potencia de rotura, se tomó en cuenta el primer evento de rotura exclusivamente. Un 27% de los ensayos presentaron una o más roturas sucesivas, denotadas en el gráfico como sucesivas caídas abruptas en la pendiente de la curva.

La PSD generada fue de dos fragmentos para un 97% de los primeros eventos de rotura. Los granos se rompieron a lo largo de su eje vertical (plano AB) en dos fragmentos simétricos, como se observa en la Figura 6.

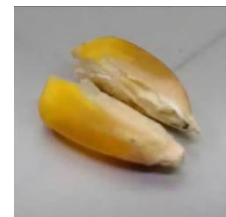


Figura 6. PSD generada.

b. Energía y potencia de rotura

En la Tabla 2 se presentan los valores promedio de energía y potencia de rotura junto con la masa considerada para la determinación de la energía y potencia específica, para los 33 ensayos en los que ocurrió una rotura.

Tabla 5. Resultados experimentales.

Parámetro	Valor
-----------	-------

Masa de paralelepípedos [g]	0,664
Energía de Rotura [J]	0,1013
Energía Especifica [J/kg]	156,92
Fuerza al momento de rotura [N]	260,46
Potencia de Rotura [W]	2,1963
Potencia Especifica [W/kg]	3.332,66

En las Figuras 7 y 8 se presentan las distribuciones normales de energía y potencia específicas obtenidas, respectivamente.

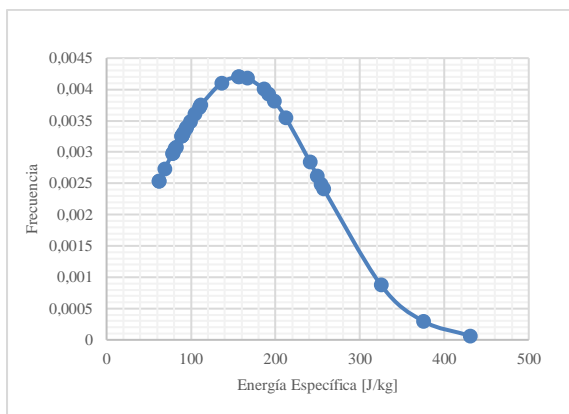


Figura 7. Distribución normal obtenida para la energía específica de rotura.

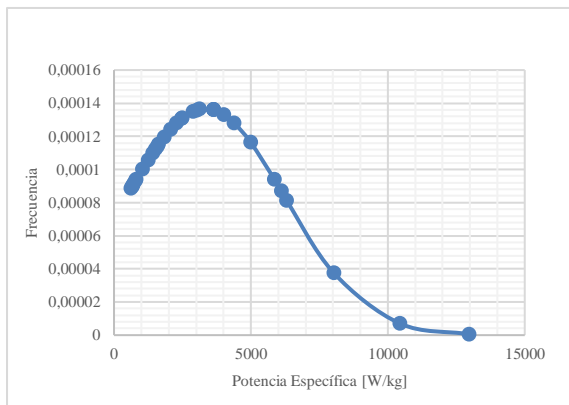


Figura 8. Distribución normal obtenida para la energía potencia de rotura.

Del análisis de las figuras anteriores, se observa que las distribuciones son simétricas, pero cuentan con valores muy por encima del promedio. Por otro lado, el máximo y mínimo valor registrados forman un amplio espectro de valores posibles.

Cabe mencionar que no se registraron tendencias en la fuerza, energía o potencia obtenida según la orientación del germen o entre ellas.

c. Parámetros de rotura

En la Tabla 3 se presentan los resultados obtenidos del proceso de ajuste experimental de parámetros del modelo de Tavares.

Tabla 6. Parámetros de rotura ajustados.

σ^2 [-]	0,0566	E max [J/kg]	430,56
E_{∞} [J/kg]	26,07	E 50 [J/kg]	134,63
Φ [-]	0,45	E max / E 50	3,20
d0 [mm]	400	γ [-]	5

Además, los valores para la función Beta Incompleta se presentan en la Tabla 4.

Tabla 7. Valores ajustados para la función Beta Incompleta.

tn	Alpha	Beta	tn	Alpha	Beta
1.2	0.001	15	25	5	0.1
1.5	0.001	15	50	5	0.1
2	0.001	15	75	5	0.1
4	0.5	10			

d. Simulaciones en Rocky DEM

Se implementó el sistema experimental en el entorno de Rocky DEM, generando una única partícula con una celda de velocidad de descenso constante, y asignando los valores obtenidos para los parámetros de rotura. Posteriormente, y para ajustar los parámetros restantes del modelo que no son posibles de determinar experimentalmente, se realizaron sucesivas simulaciones hasta replicar las PSD obtenida en los ensayos. De esta forma, los parámetros restantes del modelo son el tamaño mínimo de fragmentos generables, la mínima energía específica, y los parámetros A y b' de la ecuación (3). Los resultados se presentan en la Tabla 5. En la Tabla 6, se presentan las dimensiones de la partícula generada en DEM.

Tabla 8. Parámetros obtenidos el DEM.

A [-]	0,01	E min [J/kg]	1
b' [-]	0,033	Tamaño mínimo [mm]	4

Tabla 9. Dimensiones de la partícula poliédrica en DEM.

Relación de aspecto vertical	1,60	Número de Esquinas	60
Relación de aspecto horizontal	0,70	Grado super-cuadrático	10,00

Se logró obtener una PSD de dos fragmentos para el primer evento de rotura en todas las réplicas realizadas de las simulaciones, la cual se muestra en la Figura 9. Los fragmentos mostraron dimensiones similares entre sí, al igual que los fragmentos en los ensayos experimentales. Se analizaron la fuerza,

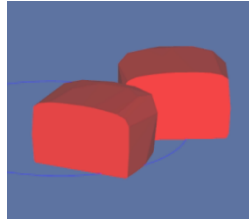


Figura 9. Fragmentos generados en DEM.

energía y potencia del proceso de rotura, de manera análoga a los ensayos experimentales. Se observó que los gráficos de fuerza vs tiempo y fuerza vs desplazamiento siguen una tendencia creciente; no obstante, la curva presenta picos y descensos, en lugar de un crecimiento continuo hasta la fractura. Esto se debe a que la partícula simulada no presenta la concavidad que poseen los granos reales (germen), por lo que es ligeramente desplazada de su posición por la presión de la celda, generando disipación de energía cinética. Esto no se observa en los casos experimentales, en los cuales el grano permanece inmóvil durante todo el ensayo. En la Figura 10 se presenta, a modo de ejemplo, la curva obtenida para una de las simulaciones, y en la Tabla 7 se encuentran los resultados cuantitativos promediados de todas las réplicas de simulaciones realizadas. Por último, cabe destacar que la distribución de energía y potencia específicas obtenidas en DEM son más acotadas que las experimentales, lo cual se observa en las Figuras 11 y 12.

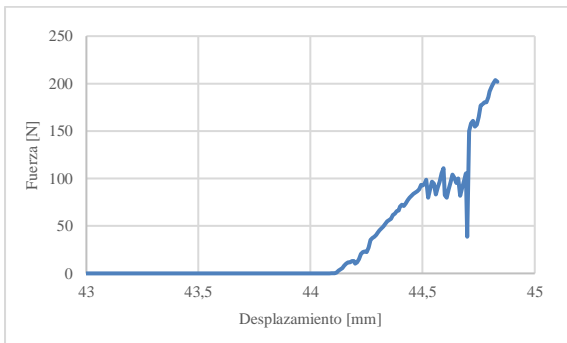


Figura 10. Fuerza vs desplazamiento de una de las réplicas en DEM.

Tabla 10. Resultados en Rocky DEM.

Fuerza al momento de rotura [N]	Energía de Rotura [J]	Potencia de Rotura [W]	Energía específica de Rotura [J/kg]	Potencia específica de Rotura [W/kg]
116,49	0,04479	0,89581	67,46	1349,11

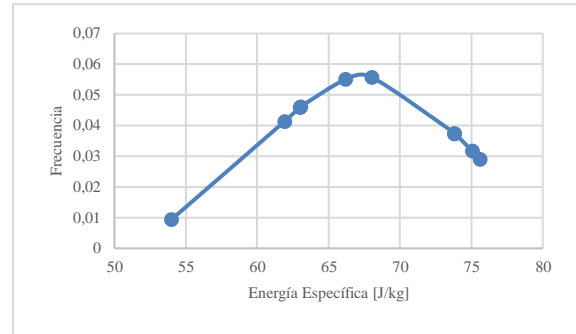


Figura 11. Distribución normal obtenida para la energía específica rotura en DEM.

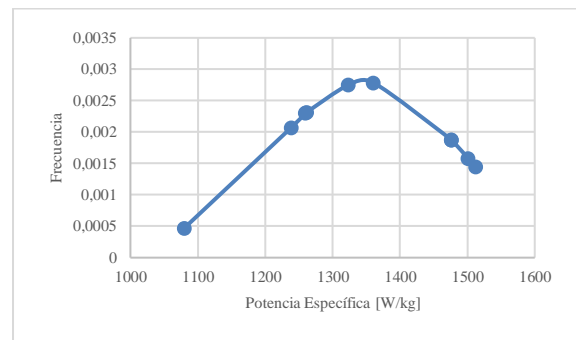


Figura 12. Distribución normal obtenida para la potencia específica rotura en DEM.

La Figura 13 presenta una curva de fuerza vs tiempo experimental junto con una generada en una simulación en DEM. Como se observa, ambas presentan la misma tendencia creciente hasta el momento de rotura, con diferencias en la pendiente que se atribuyen a la disipación de energía cinética que ocurre en la simulación. Consecuentemente, el valor de fuerza alcanzado al momento de rotura es más bajo en DEM que en su contraparte experimental.

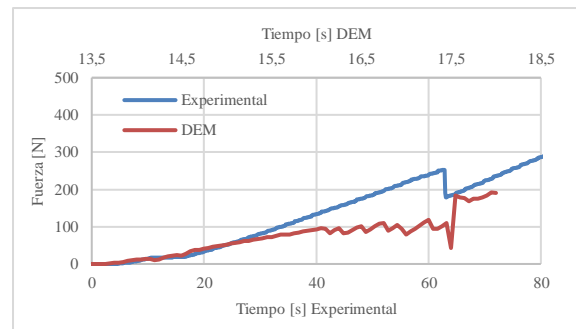


Figura 13. Fuerza vs tiempo experimental y simulado.

Por último, las Figuras 14 y 15 presentan las distribuciones de valores obtenidas experimentalmente para energía y potencia específicas, respectivamente, junto con el valor promedio obtenido para dichas variables en DEM (Tabla 10). Puede verse que el resultado de DEM se

encuentra dentro del rango de distribución de valores experimentales, aunque más cercano al límite inferior. Nuevamente, es posible atribuir la diferencia en el valor promedio obtenido a la disipación de energía por el movimiento de la partícula que se da en las simulaciones, debido a la ausencia del germen cóncavo que poseen las partículas reales.

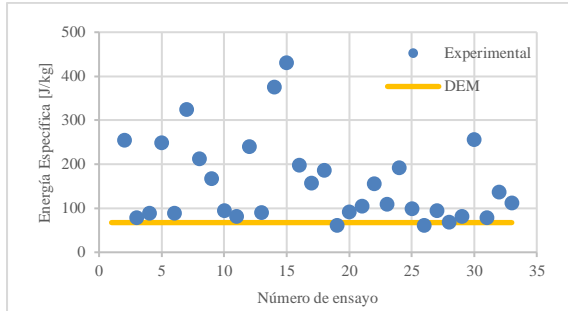


Figura 14. Distribución de energía específica de rotura.

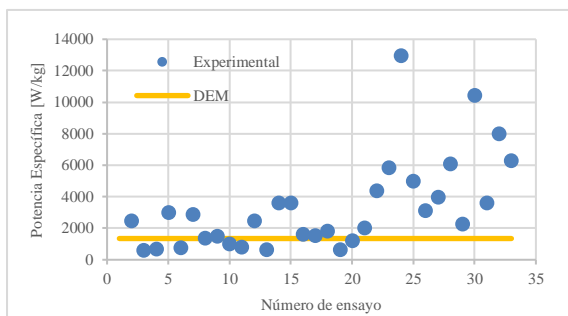


Figura 15. Distribución de potencia específica de rotura.

4. Conclusiones

Se logró ajustar adecuadamente los parámetros de rotura del modelo de Tavares para el maíz, implementando con éxito la fractura de partículas individuales en el software Rocky DEM. El modelo, tradicionalmente empleado para materiales de la industria minera, mostró ser satisfactorio para el modelado de un material de la industria alimenticia.

Se obtuvo una PSD acorde a la experimental, y energía y potencia de rotura dentro del rango de valores de las distribuciones obtenidas experimentalmente.

A futuro, se continuará trabajando en la obtención de datos experimentales en equipos de molienda de maíz a escala laboratorio y piloto, y se procederá a su simulación en Rocky DEM, a partir de los parámetros ajustados para la rotura en la escala partícula.

5. Referencias

Barrasso, D.; Eppinger, T.; Pereira, F. E.; Aglave, R.; Debus, K.; Bermingham, S. K.; Ramachandran (2015), *A multi-scale, mechanistic model of a wet granulation process using a novel bi-directional PBM-DEM coupling algorithm*, Chemical Engineering Science 123, 500–513.

Coetzee, C. J. (2017), *Review: Calibration of the discrete element method*, Powder Technology 310, 104–142.

Coetzee, C. J., Els, D. N. J. (2009), *Calibration of granular material parameters for DEM modelling and numerical verification by blade-granular material interaction*, Journal of Terramechanics 46, 15–26.

Cotabarren, I. M.; Schulz, P. G.; Bucalá, V.; Piña, J. (2008), *Modeling of an industrial double-roll crusher of a urea granulation circuit*, Powder Technol., 183 (2), 224–230.

Cundal, P.; Strack, O. (1979), *A discrete numerical model for granular assemblies*, Geotechnique 29 (2), 47–65.

de Lima, G. H.; Nogueira, L. Bharadwaj, R. (2021), *Particle breakage models for predicting comminution process in Rocky DEM*, Rocky DEM. Disponible en: [https://rocky.esss.co/library/]. Fecha de acceso: 1-11-2021.

González-Montellano, C.; Gómez, Á. R.; Fuentes, J. M.; Ayuga, F. J. (2012). *Determination of the mechanical properties of maize grains and olives required for use in DEM simulations*, Journal of Food Engineering 111, 553–562.

Hlosta, J.; Žurovec, D.; Rozbroj, J.; Ramírez-Gómez, Á.; Nečas, J.; Zegzulka (2018), *Experimental determination of particle-particle restitution coefficient via double pendulum method*, Journal of Chemical Engineering Research and Design 135, 222–233.

Markauskas, D.; Ramírez-Gómez, A.; Kacianauskas, R.; Zdancevicius, E (2015), *Maize grain shape approaches for DEM modelling*, Computers and Electronics in Agriculture 118, 247–258.

Mousaviraad, M.; Tekeste, M.; Rosentrater, K. A. (2017), *Calibration and Validation of a Discrete Element Model of Corn Using Grain Flow Simulation in a Commercial Screw Grain Auger*,

Agricultural and Biosystems Engineering, Iowa State University.

Quezada Henry, M.; Chiaravalle, A. G.; Piña, J., Cotabarren, I. M. (2020), *Modelado mecánico de procesos de molienda de maíz: Calibración de parámetros para el modelado por elementos discretos (DEM)*, International Conference of Production Research – Americas 2020.

Rocky DEM (2021), *Tavares Breakage Model Description & Calibration Guidelines*. Disponible en: [<https://rocky.esss.co/library/>]. Fecha de acceso: 1-11-2021.

Tavares, L. M.; André, F. P. (2020), *Simulating a laboratory-scale cone crusher in DEM using polyhedral particles*, Powder Technology 372, 362-371.

Tavares, L. M.; Carvalho, R. (2010), *A mechanistic model of batch grinding in ball mills*, XXV INTERNATIONAL MINERAL PROCESSING CONGRESS (IMPC) 2010, 1287-1297.

Tavares, L.M.; Rodríguez, V.A.; Sousani, M.; Pardos, C.B.; Ooi, J.Y. (2021). *An effective sphere-based model for breakage simulation in DEM*, Powder Technology 392, 473–488.

Congreso Latinoamericano **CLICAP** Ingeniería y Ciencias Aplicadas



Certificamos que:

Alejandro Gabriel Chiaravalle, Jacqueline Claudia Lobos de Ponga, Ivana María Cotabarren, Juliana Piña

Ha/n expuesto en modalidad Exposición Oral el trabajo:

CALIBRACIÓN DEL PROCESO DE MOLIENDA DE MAÍZ BAJO EL ENFOQUE DE MODELADO POR ELEMENTOS DISCRETOS

En el CONGRESO LATINOAMERICANO DE INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS, realizado en la sede de la Facultad de Ciencias Aplicadas a la Industria, Universidad Nacional de Cuyo, durante los días 6, 7 y 8 de abril de 2022 en la ciudad de San Rafael, Mendoza, República Argentina.

Mgter. Rogelio Di Santo
Vicedecano Facultad de Ciencias
Aplicadas a la Industria

Dr. Daniel Castro
Decano Facultad de Ciencias
Aplicadas a la Industria