

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. Universidad Nacional del Sur (DIQ-UNS), Av. Alem 1253, Bahía Blanca (8000), Buenos Aires, Argentina.
2. Planta Piloto de Ingeniería Química (PLAPIQUI-CONICET), Camino La Carrindanga Km7 Bahía Blanca (8000), Buenos Aires, Argentina.

E-mail: 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, empleando 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 descrito, 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

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 Cundall 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).

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 Henry et al., 2020) mediante la

realización de ensayos experimentales y su posterior replicación en Rocky DEM.

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.

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):

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

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.

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).

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 **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**). 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.



Figura 1. Texturómetro utilizado en los ensayos.

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.

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 (**¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**). 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.

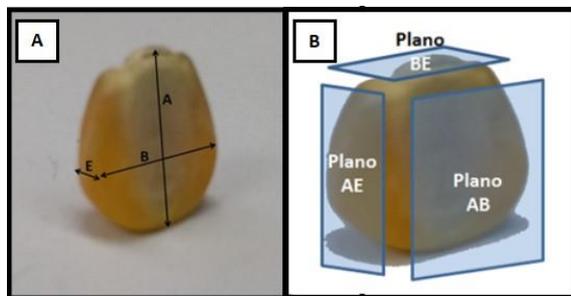


Figura 2. A) Medidas de un grano de maíz. B) Planos de un grano de maíz.

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 (**¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**).



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 Herny et al., 2020), resultando en un valor de 1.231 kg/m^3 .

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.

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.

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):

$$E_{50} = 10^{\text{promedio}[\log(E)]} \quad (8)$$

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 400 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.

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.

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.

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 Cálculos del modelo, 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 de Cálculos del modelo, 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.

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, **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**), 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 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.

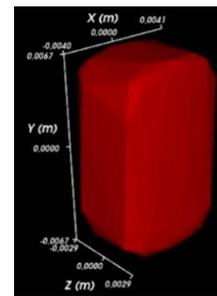


Figura 4. Partícula poliédrica generada en Rocky DEM.

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 descendiera 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

PSD experimental y ensayos de rotura

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

Tabla 1. 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.

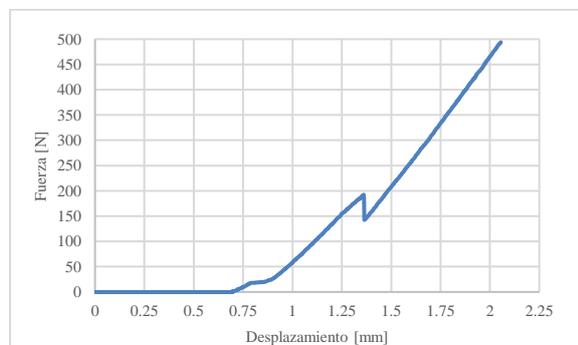


Figura 5. Gráfico de fuerza vs desplazamiento de uno de los ensayos realizados.

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.

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 2. Resultados experimentales.

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

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

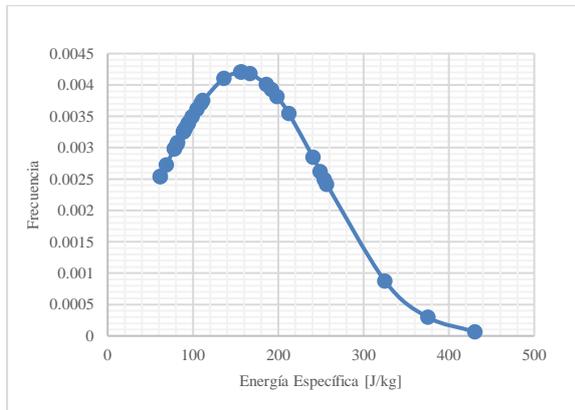


Figura 7. Distribución normal obtenida para la energía específica de rotura.

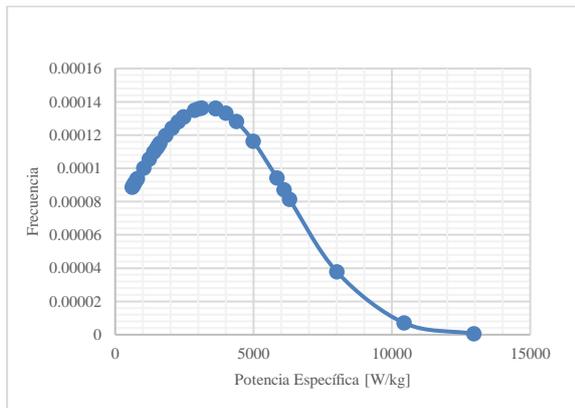


Figura 8. Distribución normal obtenida para la energía potencia de rotura.

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.

Parámetros de rotura

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

Tabla 3. 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

d_0 [mm]	400	γ [-]	5
------------	-----	--------------	---

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

Tabla 4. Valores ajustados para la función Beta Incompleta.

t_n	Alpha	Beta	t_n	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			

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 5. Parámetros obtenidos el DEM.

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

Tabla 6. Dimensiones de la partícula poliédrica en DEM.

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

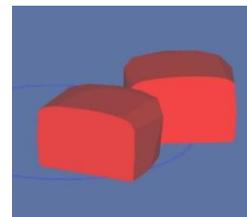


Figura 9. Fragmentos generados en DEM.

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, 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.

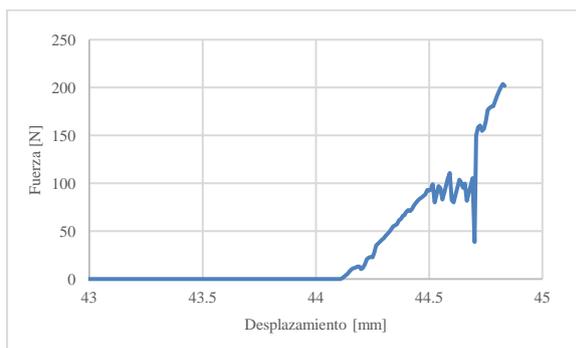


Figura 10. Fuerza vs desplazamiento de una de las réplicas en DEM.

Tabla 7. 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

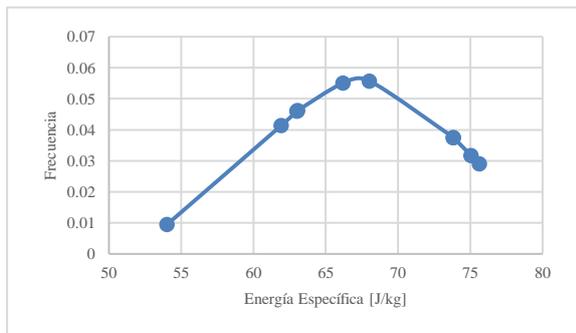


Figura 11. Distribución normal obtenida para la energía específica rotura en DEM.

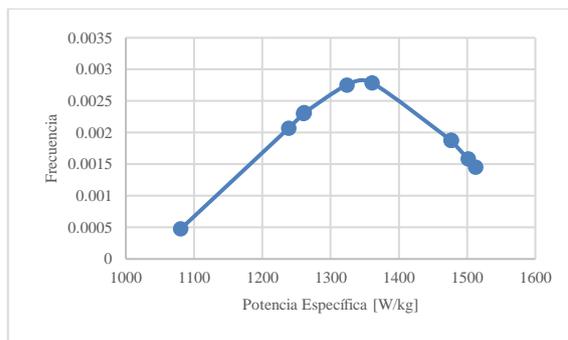


Figura 12. Distribución normal obtenida para la potencia específica rotura en DEM.

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.

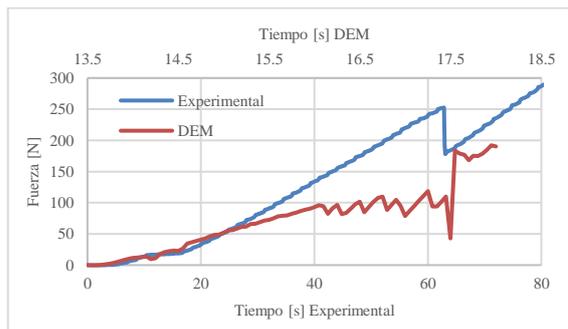


Figura 13. Fuerza vs tiempo experimental y simulado.

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 7). 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.

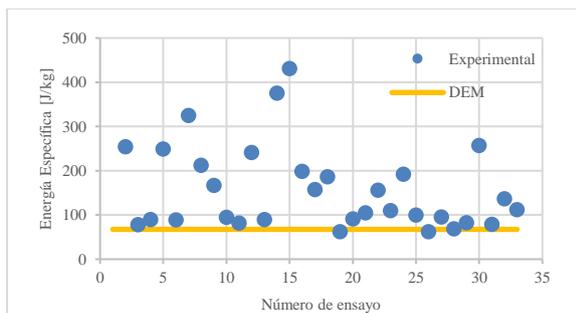


Figura 14. Distribución de energía específica de rotura.

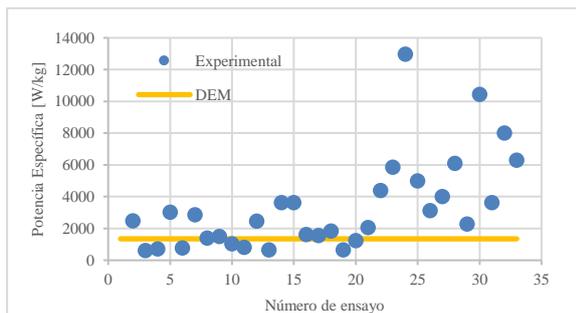


Figura 15. Distribución de potencia específica de rotura.

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., and Ramachandran, R. (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., and 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., and Piña, J. (2008). *Modeling of an industrial double-roll crusher of a urea granulation circuit*. Powder Technology, 183 (2), 224–230.

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

de Lima, G. H., Nogueira, L., and 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., and 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., and Zegzulka, J. (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., and Zdancevicius, E. (2015). *Maize grain shape approaches for DEM modelling*. Computers and Electronics in Agriculture, 118, 247–258.

Mousaviraad, M., Tekeste, M., and 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., y 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., and André, F. P. (2020). *Simulating a laboratory-scale cone crusher in DEM using polyhedral particles*. Powder Technology, 372, 362–371.

Tavares, L. M., and 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., and Ooi, J. Y. (2021). *An effective sphere-based model for breakage simulation in DEM*. Powder Technology, 392, 473–488.