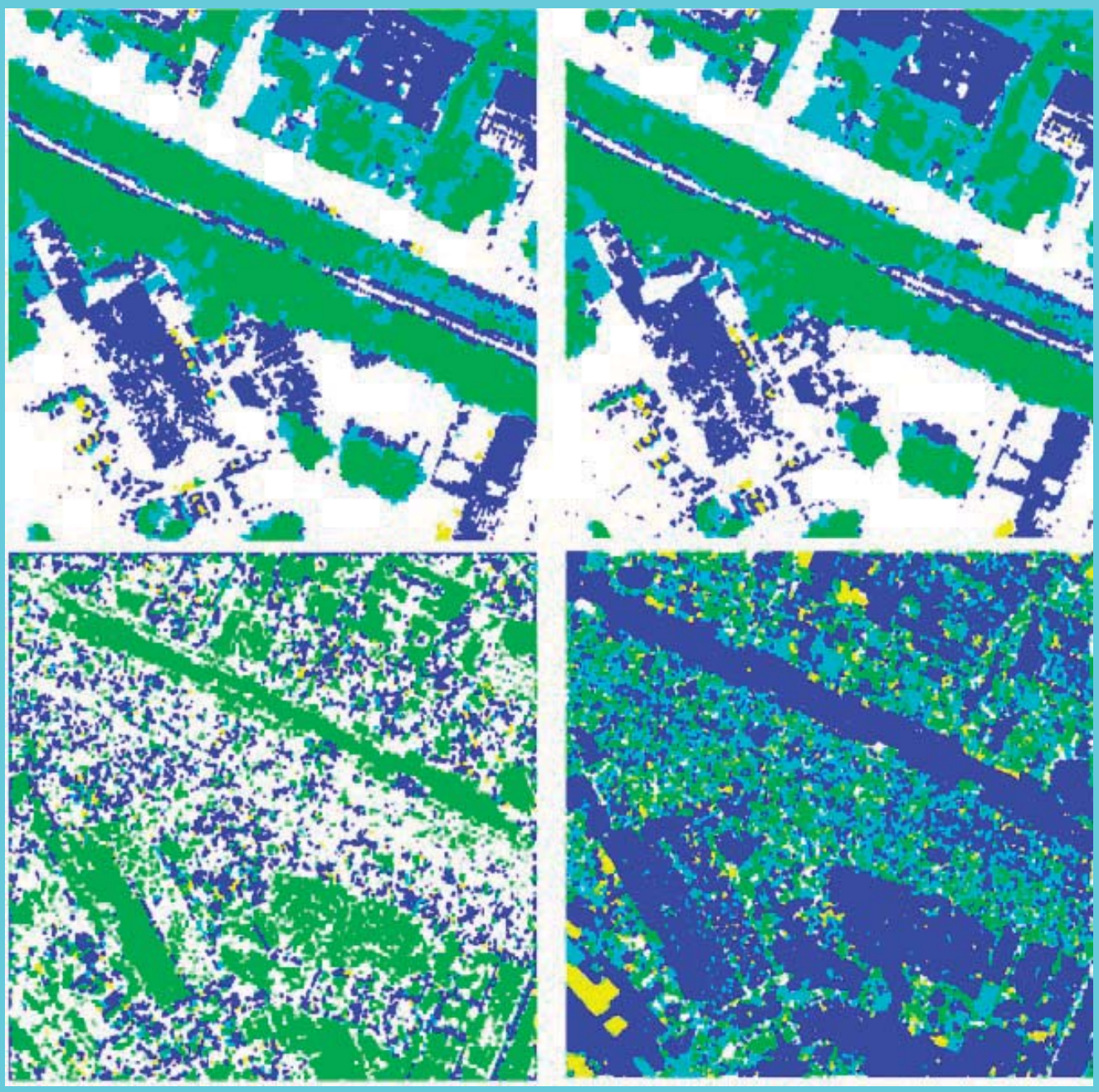
DYNA

Journal of the Facultad de Minas, Universidad Nacional de Colombia - Medellin Campus



DYNA 85 (204), March, 2018 - ISSN 0012-7353
Tarifa Postal Reducida No. 2014-287 4-72
La Red Postal de Colombia, Vence 31 de Dic. 2018.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

DYNA is an international journal published by the Facultad de Minas, Universidad Nacional de Colombia, Medellín Campus since 1933. DYNA publishes peer-reviewed scientific articles covering all aspects of engineering. Our objective is the dissemination of original, useful and relevant research presenting new knowledge about theoretical or practical aspects of methodologies and methods used in engineering or leading to improvements in professional practices. All conclusions presented in the articles must be based on the current state-of-the-art and supported by a rigorous analysis and a balanced appraisal. The journal publishes scientific and technological research articles, review articles and case studies.

DYNA publishes articles in the following areas:

Organizational Engineering
Civil Engineering
Materials and Mines Engineering
Geosciences and the Environment
Systems and Informatics
Chemistry and Petroleum
Mechatronics
Bio-engineering
Other areas related to engineering

Publication Information

DYNA (ISSN 0012-73533, printed; 2346-2183, online) is published by the Facultad de Minas, Universidad Nacional de Colombia, with a bimonthly periodicity (February, April, June, August, October, and December). Circulation License Resolution 000584 de 1976 from the Ministry of the Government.

Contact information
Web page: http://dyna.unalmed.edu.co
E-mail: dyna@unal.edu.co
Mail address: Revista DYNA
Facultad de Minas Universidad Nacional de Colombia - Medellín Campus
Carrera 80 No. 65-223 Bloque M9 - Of.:107
Telephone: (574) 4255068 Fax: (574) 4255343
Medellín - Colombia

© Copyright 2016. Universidad Nacional de Colombia
The complete or partial reproduction of texts with educational ends is permitted, granted that the source is duly cited. Unless indicated otherwise.

Notice
All statements, methods, instructions and ideas are only responsibility of the authors and not necessarily represent the view of the Universidad Nacional de Colombia. The publisher does not accept responsibility for any injury and/or damage for the use of the content of this journal.
The concepts and opinions expressed in the articles are the exclusive responsibility of the authors.

Institutional Exchange Request
DYNA may be requested as an institutional exchange through the e-mail canjebib_med@unal.edu.co or to the postal address:

Biblioteca Central “Efe Gómez”
Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín
Calle 59A No 63-20
Teléfono: (57+4) 430 97 86
Medellín - Colombia

Indexing and Databases

DYNA is admitted in:

The National System of Indexation and Homologation of Specialized Journals CT+I-PUBLINDEX, Category A1

Science Citation Index Expanded
Web of Science - WoS, Thomson Reuters
Journal Citation Reports - JCR
SCImago Journal & Country Rank - SJR
Science Direct
SCOPUS
Chemical Abstract - CAS
Scientific Electronic Library on Line - SciELO
GEOREF
PERIÓDICA Data Base
Latindex
Actualidad Iberoaméricana
RedALyC - Scientific Information System
Directory of Open Acces Journals - DOAJ
PASCAL
CAPES
UN Digital Library - SINAB
CAPES
EBSCO Host Research Databases

Publisher’s Office
Juan David Velásquez Henao, Director
Mónica del Pilar Rada T., Editorial Coordinator
Catalina Cardona A., Editorial Assistant
Amilkar Álvarez C., Diagrammer
Byron Llano V., Editorial Assistant
Landsoft S.A., IT

Reduced Postal Fee
Tarifa Postal Reducida # 2014-287 4-72. *La Red Postal de Colombia,* expires Dec. 31st, 2018

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

DYNA

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

COUNCIL OF THE FACULTAD DE MINAS

Dean
Pedro Nel Benjumea Hernández PhD

Vice-Dean
Ernesto Pérez González, PhD

Vice-Dean of Research and Extension
Santiago Arango Aramburo, PhD

Director of University Services
Santiago Medina Hurtado, PhD

Academic Secretary
Francisco Javier Díaz Serna, PhD

Representative of the Curricular Area Directors
Wilfredo Montealegre Rubio, PhD

Representative of the Curricular Area Directors
Evelio Andrés Gómez Giraldo, PhD

Representative of the Basic Units of Academic-Administrative Management
Juan David Velásquez Henao, PhD

Representative of the Basic Units of Academic-Administrative Management
Néstor Ricardo Rojas Reyes, PhD

Professor Representative
Luis Hernán Sánchez Arredondo, MSc

Delegate of the University Council
León Restrepo Mejía, PhD

Student representative (alternate) undergraduate at the Faculty Council
Alejandra Jiménez Upegui

FACULTY EDITORIAL BOARD

Dean
Pedro Nel Benjumea Hernández, PhD

Vice-Dean of Research and Extension
Santiago Arango Aramburo, PhD

Members
Oscar Jaime Restrepo Baena, PhD
Juan David Velásquez Henao, PhD
Jaime Aguirre Cardona, PhD
Alfonso Espinosa Parada, PhD
Mónica del Pilar Rada Tobón, MSc

JOURNAL EDITORIAL BOARD

Editor-in-Chief
Juan David Velásquez Henao, PhD
Universidad Nacional de Colombia, Colombia

Editors
George Barbastathis, PhD
Massachusetts Institute of Technology, USA

Tim A. Osswald, PhD
University of Wisconsin, USA

Juan De Pablo, PhD
University of Wisconsin, USA

Hans Christian Öttinger, PhD
Swiss Federal Institute of Technology (ETH), Switzerland

Patrick D. Anderson, PhD
Eindhoven University of Technology, the Netherlands

Igor Emri, PhD
Associate Professor, University of Ljubljana, Slovenia

Dietmar Drummer, PhD
Institute of Polymer Technology University Erlangen-Nürnberg, Germany

Ting-Chung Poon, PhD
Virginia Polytechnic Institute and State University, USA

Pierre Boulanger, PhD
University of Alberta, Canadá

Jordi Payá Bernabeu, Ph.D.
Instituto de Ciencia y Tecnología del Hormigón (ICITECH)
Universitat Politècnica de València, España

Javier Belzunce Varela, Ph.D.
Universidad de Oviedo, España

Luis Gonzaga Santos Sobral, PhD
Centro de Tecnología Mineral - CETEM, Brasil

Agustín Bueno, PhD
Universidad de Alicante, España

Henrique Lorenzo Cimadevila, PhD
Universidad de Vigo, España

Mauricio Trujillo, PhD
Universidad Nacional Autónoma de México, México

Carlos Palacio, PhD
Universidad de Antioquia, Colombia

Jorge Garcia-Sucerquia, PhD
Universidad Nacional de Colombia, Colombia

Juan Pablo Hernández, PhD
Universidad Nacional de Colombia, Colombia

John Willian Branch Bedoya, PhD
Universidad Nacional de Colombia, Colombia

Enrique Posada, Msc
INDISA S.A, Colombia

Oscar Jaime Restrepo Baena, PhD
Universidad Nacional de Colombia, Colombia

Moisés Oswaldo Bustamante Rúa, PhD
Universidad Nacional de Colombia, Colombia

Hernán Darío Álvarez, PhD
Universidad Nacional de Colombia, Colombia

Jaime Aguirre Cardona, PhD
Universidad Nacional de Colombia, Colombia

UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

DYNA 84 (204), March, 2018. Medellin. ISSN 0012-7353 Printed, ISSN 2346-2183 Online

CONTENTS

Development of a virtual earthquake engineering lab and its impact on education 9
Luis Felipe Guerrero-Mosquera, Daniel Gómez & Peter Thomson

Evaluation of different methods for efficient extraction of hemicelluloses leaves and tops of sugarcane 18
Luz Marina Flórez-Pardo, Andrea González-Córdoba & Jorge Enrique López-Galán

A new approach to multispectral image classification based on abstract complex cells 28
José Antonio Valero-Medina, Cristian David Dallos-Bustos & Ivan Lizarazo

Performance of drip emitters for different pressures and application of cashew nuts wastewater 38
Rafael Oliveira Batista, Ketson Bruno da Silva, Manoel Januário da Silva Júnior, Delfran Batista dos Santos & Rutilene Rodrigues da Cunha

Analysis of pressure and pressure derivative interference tests under linear and spherical flow conditions 44
Freddy Humberto Escobar-Macualo, Esteban Rojas-Borrego & Neila Tatiana Alarcón-Olaya

Comparative study of fire resistance and acoustic performance of ceramic brick walls in concern to NBR 15575 in residential buildings in Brazil 53
Sérgio Klippel Filho, Gustavo Luis Prager, Paulo Eduardo Mezzomo da Silva, Fabrício Longhi Bolina & Bernardo Fonseca Tutikian

Gaussian processes in ball bearing prognostics 59
Iván La Fé-Perdomo, Ramón Quiza & Marcelino Rivas-Santana

Sway reduction in tower-cranes through discrete-time resonant active disturbance rejection control 65
Horacio Coral-Enriquez & Santiago Pulido-Guerrero

Study of the plasma behavior produced by a vacuum arc discharge for different cathode materials 76
Sebastián Ramírez-Ramírez, Daniel Alejandro Sabogal-Suárez, Diego Fernando Devia-Narváez & Elisabeth Restrepo-Parra

Evaluation of post-graduate programs using a network data envelopment analysis model 83
Lidia Angulo Meza, João Carlos Correia Baptista Soares de Mello, Silvio Figueiredo Gomes Júnior & Plácido Moreno

Position analysis of a mechanism Stephenson type I using natural coordinates 91
Neider Nadid Romero-Núñez & Elkin Gregorio Flórez-Serrano

Calculation method for the determination of stresses in right-wing flywheels 98
Abdel Mendoza-Fernández, Rafael Goytisolo-Espinosa, Juan José Cabello-Eras & Reinier Jiménez-Borges

DNA fragment assembling using a novel GPU firefly algorithm 108
Pablo Javier Vidal & Ana Carolina Olivera

Evaluation of spectral similarity indices in unsupervised change detection approaches 117
Jeisson Fabián Ramos, Diego Renza & Dora M. Ballesteros-L.

Glulam beams reinforced with punched metal plates 127
Hernán Darío Cañola, César Echavarría & Beatriz Echavarría

Efficiency of cement-admixture systems in mortars with binary and ternary Portland cements 134
María Eva Sosa, Yury Andrés Villagrán-Zaccardi, Juan Pablo Peralta & Claudio Javier Zega

Thermal analysis and mass spectrometry in protonic conductors (PVDF/H3PO2) for implementation in fuel cells 143
Jolman Stiven Diaz-Ortiz, Miguel Iban Delgado-Rosero, Nori Magali Jurado-Meneses & Gladis Miriam Aparicio-Rojas

LTA and FAU zeolites from coal combustion and residue by-products for Chromium removal application 150
Juan Camilo Arroyave-Manco, Johana Catalina Arboleda, Dora Ángela Hoyos-Ayala, Adriana Patricia Echavarría-Isaza

Fast estimation of earthquake epicenter distance using a single seismological station with machine learning techniques 161
Luis H. Ochoa, Luis F. Niño & Carlos A. Vargas

CFD simulation of sugarcane bagasse combustion in an industrial grate boiler 169
Fabian Andrey Diaz-Mateus, Helver Crispiniano Alvarez-Castro & Arlex Chaves-Guerrero

Dynamic consumption representation of electric vehicles based on battery capacity 177
Adriana Marcela Quintero-Montenegro, Cristian Camilo Mendoza-Grosso, Francisco Santamaría & Jorge Alexander Alarcón-Villamil

Development of a fortified drink from the mixture of small colombian native fruits 185
Angélica María Serpa-Guerra, Jorge Andrés Velásquez-Cock, Jaime Alejandro Barajas-Gamboa, Lina María Vélez-Acosta, Beatriz Gómez-H & Robin Zuluaga-Gallego

Construction of index with artificial intelligence to evaluate vulnerability to climate change in Andean tropical micro-watersheds. Study case in Colombia 194
Viviana Vargas-Franco & Inés Restrepo-Tarquino

Water quality modeling of the Aguas Claras stream, canton Quevedo, Ecuador 204
Julio César Pazmiño-Rodríguez, Gabriela Lisseth Zambrano-Ganchozo & Hevert Aarón Coello-Burgos

Adoption's problems of information technology service management models. A systematic literature review 215
Karin Melendez-Llave & Abraham Davila-Ramón

Enzymatic modification of cassava starch (Corpoica M-Tai) around the pasting temperature 223
Jairo Salcedo-Mendoza, Sergio Paternina-Urzola, Deivis Lujan-Rhenals & Jorge Figueroa-Flórez

Study of different routes of renewable synthesis for Caprolactam production 231
Diego Alejandro Trujillo-Vera & Yesid Vélez-Salazar

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Sensitivity analysis of engine warm-up performance at idle conditions to the changes in compression ratio, ethanol content in gasoline fuel and cylinder head material 238
Carlos Alberto Romero-Piedrahita, Luz Adriana Mejía-Calderón & Yamid Alberto Carranza-Sánchez

Evaluation of coupled porewater pressure and stress-strain constitutive model in granular soils 248
Oscar Moreno-Torres, Gustavo Chang-Nieto & Andrés Salas-Montoya

A GIS approach based on user location to evaluate a bike-sharing program 257
Juan David Zuluaga, Diego Alexander Escobar & Camilo Younes

Swash excursion patterns at two contrasting beaches: Hollywood and Costa Verde beach, Colombia 264
Jennifer Montaño-Muñoz, Andrés F. Osorio & Luis Otero

Viability of probiotic bacteria Bacillus Polymyxa, Bacillus Megaterium and Lactobacillus Delbruekii subsp. bulgaricus microencapsulated under the spray-drying technique 272
Natalia De Araujo-Uribe, Orlando Simón Ruiz-Villadiego, Olga Inés Montoya-Campuzano & Luz Adriana Ramírez-Gutiérrez

Production of bioabsorbible nanoparticles of polycaprolactone by using a tubular recirculating system 277
Gabriel Jaime Colmenares-Roldan, Liliana Maria Agudelo-Gomez, Rodolfo Pinal & Lina Marcela Hoyos-Palacio

Hydrothermal synthesis of hydroxyapatite nanorods using a fruit extract template 283
Maritza Buitrago-Vásquez & Claudia Patricia Ossa-Orozco

Evaluation of management models of rural projects of drinking water and basic sanitation implemented in the llanos de Colombia 289
Alvaro Luis Rivera-Contreras

Direct stockpile scheduling: Mathematical formulation 296
Felipe Ribeiro Souza, Leonardo Soares, Hudson Burgarelli, Alizeibek Nader, Carlos Arroyo & Luiz Alberto

Effect of the addition of hydrocolloids and aloe vera gel (Aloe barbadensis Miller) on the rheological properties of a beverage of sweet corn (Zea mays var. saccharata) 302
Karen Paola Contreras-Lozano, Héctor José Ciro-Velasquez & Carlos Julio Márquez-Cardozo

M2M system for efficient water consumption in sanitary services, based on intelligent environment 311
Carlos González-Amarillo, Cristian Cárdenas-García & Miguel Mendoza-Moreno

Connectivity to the Internet in rural areas using DTT (DVB-RCT2) technologies, or mobile telephony (4G-LTE) 319
Ciro Diego Radicelli-García, Margarita Pomboza-Floril & Lexinton Cepeda-Astudillo

Mobile learning on higher educational institutions: how to encourage it?. Simulation approach 325
Luisa Fernanda Díez-Echavarría, Alejandro Valencia & Lorena Cadavid

Maps of Intrinsic Cost (IC) in reliability problems of medium voltage power distribution systems through a Fuzzy multi-objective model 334
Federico G. Camargo, Gustavo A. Schweickardt & Carlos A. Casanova

Conservation of "Paluma" guavas coated with cassava starch and pectin 344
Anny Karoline Quirino, Josenara Daiane de Souza Costa, Acácio Figueiredo Neto, Marylia de Sousa Costa & Carolina María Sánchez-Sáenz

Methodology to support decision-making in prioritization improvement plans aimed at agricultural sector: Case study 352
Nelson Javier Tovar-Perilla, Helga Patricia Bermeo-Andrade, José Fidel Torres-Delgado & Miguel Ignacio Gómez

Modeling Leakage Current of Ceramic Insulators Subject to High Pollution Levels for Improving Maintenance Activities 360
Rafael Castillo-Sierra, Oscar Oviedo-Trespalacios, John E. Candelo & Jose Daniel Soto-Ortiz

Our cover
Image alluding to Article:
A new approach to multispectral image classification based on abstract complex cells

Authors:
José Antonio Valero-Medina, Cristian David Dallos-Bustos & Ivan Lizarazo



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

DYNA 84 (204), March, 2018. Medellin. ISSN 0012-7353 Printed, ISSN 2346-2183 Online

CONTENIDO

Desarrollo de un laboratorio virtual de ingeniería sísmica y su impacto en la educación 9
Luis Felipe Guerrero-Mosquera, Daniel Gómez & Peter Thomson

Evaluación de diferentes métodos para la extracción eficiente de hemicelulosas de las hojas y cogollos de la caña de azúcar 18
Luz Marina Flórez-Pardo, Andrea González-Córdoba & Jorge Enrique López-Galán

Un nuevo enfoque para la clasificación de imágenes multiespectrales basado en complejos cartesianos 28
José Antonio Valero-Medina, Cristian David Dallos-Bustos & Ivan Lizarazo

Desempeño de goteros para diferentes presiones y aplicación de agua residual de castaña de cajú 38
Rafael Oliveira Batista, Ketson Bruno da Silva, Manoel Januário da Silva Júnior, Delfran Batista dos Santos & Rutilene Rodrigues da Cunha

Análisis de presión y derivada de presión en pruebas de interferencia en condiciones de flujos lineal y esférico 44
Freddy Humberto Escobar-Macualo, Esteban Rojas-Borrego & Neila Tatiana Alarcón-Olaya

Estudio comparativo de resistencia al fuego y desempeño acústico de paredes en bloques cerámicos en cuestión de NBR 15575 en edificios residenciales de Brasil 53
Sérgio Klippel Filho, Gustavo Luis Prager, Paulo Eduardo Mezzomo da Silva, Fabrício Longhi Bolina & Bernardo Fonseca Tutikian

Procesos gaussianos en el pronóstico de vida útil en rodamientos de bolas 59
Iván La Fé-Perdomo, Ramón Quiza & Marcelino Rivas-Santana

Atenuación de efectos pendulares en grúas-torre usando control por rechazo activo de perturbaciones en tiempo discreto con observador resonante 65
Horacio Coral-Enriquez & Santiago Pulido-Guerrero

Estudio del comportamiento del plasma producido en una descarga de arco en vacío para diferentes materiales del cátodo 76
Sebastián Ramírez-Ramírez, Daniel Alejandro Sabogal-Suárez, Diego Fernando Devia-Narváez & Elisabeth Restrepo-Parra

Evaluación de los programas de post-grado usando un modelo de análisis envolvente de datos en red 83
Lidia Angulo Meza, João Carlos Correia Baptista Soares de Mello, Silvio Figueiredo Gomes Júnior & Plácido Moreno

Análisis de posición de un mecanismo de Stephenson tipo I utilizando coordenadas naturales 91
Neider Nadid Romero-Núñez & Elkin Gregorio Flórez-Serrano

Método de cálculo para la determinación de las tensiones en volantes de rayos rectos 98
Abdel Mendoza-Fernández, Rafael Goytisolo-Espinosa, Juan José Cabello-Eras & Reinier Jiménez-Borges

Ensamblado de fragmentos de ADN utilizando un novedoso algoritmo de luciérnaga en GPU 108
Pablo Javier Vidal & Ana Carolina Olivera

Evaluación de índices de similitud espectral en esquemas de detección de cambios no supervisados 117
Jeisson Fabián Ramos, Diego Renza & Dora M. Ballesteros-L.

Vigas de madera laminada Glulam reforzadas con pletinas metálicas dentadas 127
Hernán Darío Cañola, César Echavarría & Beatriz Echavarría

Eficiencia de sistemas cemento-aditivo en morteros con cementos Portland binarios y ternarios 134
María Eva Sosa, Yury Andrés Villagrán-Zaccardi, Juan Pablo Peralta & Claudio Javier Zega

Análisis térmico y espectrometría de masas en conductores protónicos (PVDF/H3PO2) para implementación en celdas de combustible 143
Jolman Stiven Diaz-Ortiz, Miguel Iban Delgado-Rosero, Nori Magali Jurado-Meneses & Gladis Miriam Aparicio-Rojas

Zeolitas LTA y FAU obtenidas a partir de cenizas volantes y su aplicación en remoción de Cromo 150
Juan Camilo Arroyave-Manco, Johana Catalina Arboleda, Dora Ángela Hoyos-Ayala, Adriana Patricia Echavarría-Isaza

Estimación rápida de la distancia epicentral de un terremoto utilizando registros de una sola estación sismológica, mediante técnicas de aprendizaje de máquinas 161
Luis H. Ochoa, Luis F. Niño & Carlos A. Vargas

Simulación en CFD de la combustión de bagazo de caña en una caldera industrial con parrilla 169
Fabian Andrey Diaz-Mateus, Helver Crispiniano Alvarez-Castro & Arlex Chaves-Guerrero

Representación del consumo dinámico de los vehículos eléctricos en función de las capacidades de las baterías 177
Adriana Marcela Quintero-Montenegro, Cristian Camilo Mendoza-Grosso, Francisco Santamaría & Jorge Alexander Alarcón-Villamil

Desarrollo de un refresco fortificado con hierro a partir de la mezcla de frutas pequeñas nativas colombianas 185
Angélica María Serpa-Guerra, Jorge Andrés Velásquez-Cock, Jaime Alejandro Barajas-Gamboa, Lina María Vélez-Acosta, Beatriz Gómez-H. & Robin Zuluaga-Gallego

Construcción de índice con inteligencia artificial para evaluar vulnerabilidad al cambio climático en microcuencas andinas tropicales. Caso de estudio en Colombia 194
Viviana Vargas-Franco & Inés Restrepo-Tarquino

Modelización de la calidad del agua del estero aguas Claras, cantón Quevedo, Ecuador 204
Julio César Pazmiño-Rodríguez, Gabriela Lisseth Zambrano-Ganchozo & Hevert Aarón Coello-Burgos

Problemas en la adopción de modelos de gestión de servicios de tecnologías de información. Una revisión sistemática de la literatura 215
Karin Melendez-Llave & Abraham Davila-Ramón

Modificación enzimática de almidón de yuca (Corpoica M-Tai) alrededor de la temperatura de pasta 223
Jairo Salcedo-Mendoza, Sergio Paternina-Urzola, Deivis Lujan-Rhenals & Jorge Figueroa-Flórez

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Estudio de las diferentes rutas de síntesis renovables para la producción de Caprolactama 231
Diego Alejandro Trujillo-Vera & Yesid Vélez-Salazar

Estudio de sensibilidad del desempeño durante el calentamiento en vacío de un motor de combustión interna a cambios en su relación de compresión, el contenido de etanol en la mezcla combustible con gasolina y el material de la culata 238
Carlos Alberto Romero-Piedrahita, Luz Adriana Mejía-Calderón & Yamid Alberto Carranza-Sánchez

Evaluación de modelos constitutivos esfuerzo-deformación acoplados con presión de poros en suelos granulares 248
Oscar Moreno-Torres, Gustavo Chang-Nieto & Andrés Salas-Montoya

Aproximación GIS para la evaluación de programa para compartir bicicleta basado en la localización de los usuarios 257
Juan David Zuluaga, Diego Alexander Escobar & Camilo Younes

Patrones en las excursiones de swash en dos playas contrastantes: Playas Hollywood y Costa Verde, Colombia 264
Jennifer Montaño-Muñoz, Andrés F. Osorio & Luis Otero

Viabilidad de las bacterias probióticas Bacillus polymyxa, Bacillus megaterium y Lactobacillus delbruekii subsp. bulgaricus microencapsuladas bajo la técnica de secado por aspersión 272
Natalia De Araujo-Uribe, Orlando Simón Ruiz-Villadiego, Olga Inés Montoya-Campuzano & Luz Adriana Ramírez-Gutiérrez

Producción de nanopartículas bioabsorbibles de policaprolactona empleando un sistema de recirculación tubular 277
Gabriel Jaime Colmenares-Roldan, Liliana Maria Agudelo-Gomez, Rodolfo Pinal & Lina Marcela Hoyos-Palacio

Síntesis hidrotermal de nanobarras de hidroxiapatita usando plantillas de extractos de fruta 283
Maritza Buitrago-Vásquez & Claudia Patricia Ossa-Orozco

Evaluación de los modelos de gestión de proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico implementados en los llanos de Colombia 289
Alvaro Luis Rivera-Contreras

Programación directa de pilas de acopio: Formulación matemática 296
Felipe Ribeiro Souza, Leonardo Soares, Hudson Burgarelli, Alizeibek Nader, Carlos Arroyo & Luiz Alberto

Efecto de la adición de hidrocoloides y gel de aloe vera (Aloe barbadensis Miller) en las propiedades reológicas de una bebida de maíz dulce (Zea mays var. saccharata) 302
Karen Paola Contreras-Lozano, Héctor José Ciro-Velasquez & Carlos Julio Márquez-Cardozo

Sistema M2M para el consumo eficiente de agua en servicios sanitarios, basado en ambientes inteligentes 311
Carlos González-Amarillo, Cristian Cárdenas-García & Miguel Mendoza-Moreno

Conectividad a Internet en zonas rurales mediante tecnologías de TDT (DVB-RCT2), o telefonía móvil (4G-LTE) 319
Ciro Diego Radicelli-García, Margarita Pomboza-Floril & Lexinton Cepeda-Astudillo

Mobile learning en instituciones de educación superior: ¿cómo abordarlo? Una aproximación desde la simulación 325
Luisa Fernanda Díez-Echavarría, Alejandro Valencia & Lorena Cadavid

Mapas de Costo Intrínseco (IC) en problemas de confiabilidad de sistemas de distribución de potencia en media tensión a través de un modelo difuso multiobjetivo 334
Federico G. Camargo, Gustavo A. Schweickardt & Carlos A. Casanova

Conservación de las guayabas “Paluma” recubiertas con almidón de yuca y pectina 344
Anny Karoline Quirino, Josenara Daiane de Souza Costa, Acácio Figueiredo Neto, Marylia de Sousa Costa & Carolina María Sánchez-Sáenz

Metodología para soportar el proceso de toma de decisiones en la priorización de planes de mejora en el sector agrícola: Caso de estudio 352
Nelson Javier Tovar-Perilla, Helga Patricia Bermeo-Andrade, José Fidel Torres-Delgado & Miguel Ignacio Gómez

Modelo de Corriente de Fuga de Aisladores Cerámicos Sometidos a Altos Niveles de Polución para Mejorar las Actividades de Mantenimiento 360
Rafael Castillo-Sierra, Oscar Oviedo-Trespalacios, John E. Candelo & Jose Daniel Soto-Ortiz

Nuestra carátula
Imagen alusiva al artículo:
Un nuevo enfoque para la clasificación de imágenes multiespectrales basado en complejos cartesianos

Autores:
José Antonio Valero-Medina, Cristian David Dallos-Bustos & Ivan Lizarazo



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Development of a virtual earthquake engineering lab and its impact on education

Luis Felipe Guerrero-Mosquera, Daniel Gómez & Peter Thomson

Grupo de Investigación G-7. Escuela de Ingeniería Civil y Geomática, Universidad del Valle, Cali, Colombia. felipe.guerrero@correounivalle.edu.co, daniel.gomez@correounivalle.edu.co, peter.thomson@correounivalle.edu.co

Received: August 10th, de 2017. Received in revised form: October 23th, 2017. Accepted: November 3th, 2017

Abstract
The use of information and telecommunication technologies (ICT) for the development of educational tools such as virtual laboratories has become a valuable teaching support practice in different areas of professional training. Current applications range from virtualization practices in fundamental sciences, to virtual experimentation on specific engineering topics. This paper describes the development of the Virtual Earthquake Engineering Lab (SISMILAB). This lab includes different applications with the objective of becoming an aid in the process of understanding and applying fundamental concepts related to the field of earthquake engineering. The aim of the lab is to strengthen the academic and research experiences of students both inside and outside the classroom. Students have readily used SISMILAB and given positive feedback regarding its effectiveness in conveying concepts and aiding in the visualization and interpretation of results. Finally, the paper discusses the impact of the virtual laboratory based on metrics obtained from questionnaires regarding student and faculty satisfaction.

Keywords: virtual laboratory; earthquake engineering; information and telecommunication technologies; virtual education.

Desarrollo de un laboratorio virtual de ingeniería sísmica y su impacto en la educación

Resumen
El uso de las tecnologías de la información y las telecomunicaciones (TIC) para el desarrollo de instrumentos educativos como los laboratorios virtuales se ha convertido en una valiosa práctica de apoyo a la enseñanza en diferentes ámbitos de la formación profesional. En la actualidad se encuentran aplicaciones que van desde la virtualización de prácticas en ciencias básicas hasta la experimentación virtual en temas específicos de ingeniería. Este artículo describe el desarrollo del Laboratorio Virtual de Ingeniería Sísmica (SISMILAB) el cual incluye diferentes módulos con sus respectivas aplicaciones. Este laboratorio virtual fue desarrollado para facilitar el proceso de comprensión y aplicación de conceptos fundamentales relacionados con el campo de la ingeniería sísmica y fortalecer las experiencias académicas e investigativas del estudiante, dentro y fuera del aula. SISMILAB ha sido bien recibido por los estudiantes, facilitando la comprensión de conceptos, la interpretación de resultados y la enseñanza de diferentes fenómenos de la ingeniería sísmica. Finalmente, el artículo muestra el impacto en la enseñanza y el aprendizaje basado en métricas obtenidas de cuestionarios de evaluación realizados por estudiantes y profesores.

Palabras clave: laboratorio virtual; ingeniería sísmica; tecnologías de la información y las telecomunicaciones; educación virtual.

1. Introduction

Earthquake engineering is a multidisciplinary area comprising fields such as solid mechanics, structural dynamics, seismology, geotechnical sciences, geology, structural analysis and structural design. There is a need for a comprehensive learning process focused of earthquake-resistant structures and their impact on the prevention of human losses, damage to property and high infrastructure repair costs [1]. Approximately 70% of the Colombian

How to cite: Guerrero-Mosquera, L.F., Gómez, D. and Thomson P., Development of a virtual earthquake engineering lab and its impact on education. DYNA, 85(204), pp. 9-17, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

territory is located in areas of medium to high seismic hazard, where most of the major seismic events have been recorded in recent years, such as the Popayan event in 1983, Paez in 1994, and Armenia in 1999. These earthquakes have raised awareness among future engineers about the importance of structural design [1].

In professional practice, a civil engineer must have the ability to solve numerous problems based on theoretical knowledge and experience [2]. To create new knowledge and prepare future engineers, students must be engaged in meaningful learning experiences in which they can apply a "practical perspective" that is realistic [3]. Teaching with a practical engineering component is essential to complement a theoretical learning exercise with experimentation that enables the application of concepts and the verification of analytical results [1]. Physical, remote, and virtual laboratories help to foster a student's potential for learning how to process and make sense of scientific data [4]. A full-scale laboratory enables students to manipulate materials, instrumentation and equipment, therefore contributing to providing them with initiative and originality and allowing them to develop critical thinking. However, in traditional teaching conditions, practical resources sometimes are difficult to implement due to limitations in facilities or equipment. Earthquake engineering lab facilities with advanced technology that allow full-scale testing imply financial investments that most universities are unable to afford or unwilling to provide.

Simulated or virtual laboratories, which employ information and communication technologies (ICTs), are gaining importance [5] as the acquisition of new expensive equipment is not necessary. Many studies have demonstrated the benefits of virtual and interactive exploration of observable phenomena compared with physical experiments [6]. Interactivity is the characteristic that best defines a virtual lab, as the user gets to perform virtual experiments in a buildup way; in other words, to advance to the next step in the experiment, the student needs to input the appropriate data obtained from the previous step, therefore making it a tool that builds on previous steps [7]. One of the biggest advantages of virtual labs arise when students can observe phenomena that are difficult to visualize during physical experiments. Also, students have the freedom to repeat or modify previous experiments, depending on their level of interest, with quick and easy parameter change functionalities.

This paper describes the development and implementation of an educational tool designed to illustrate some concepts in different areas of earthquake engineering in a virtual laboratory. The laboratory consists of a structural dynamics module, a geotechnical module, and a structural analysis module. These modules allow laboratory practices to be simulated on a computer, which enables students to observe and perform virtual experiments. Once students have learned a technique, they can independently repeat the experiment or make changes to it, as often as desired to facilitate an understanding of the concepts of earthquake engineering.

2. Virtual earthquake engineering laboratory

The virtual earthquake engineering lab (SISMILAB) offers interactive simulations of illustrative and didactic concepts of earthquake engineering. SISMILAB consists of three modules, each of which has different applications. Each module has a user manual and comes with step-by-step validation problems. The virtual lab can be accessed at the webpage: http://sismilab.univalle.edu.co. All applications have the option of generating a report that includes data entered by the user, basic theory, procedure, and analysis of the results. The applications that comprise each module are described below.

2.1. Structural dynamics module

The structural dynamics module consists of two applications: one for modeling single degree of freedom systems (SDOF) and another for modeling multi-degree of freedom systems (MDOF). The SDOF application was developed in the MATLAB programming language environment [8], and its executable can be downloaded and installed as open-source software even if the user does not have MATLAB installed. This application enables the user to simulate the dynamic response of simple dynamic systems modelled as a single degree of freedom [9, 10]. The SDOF tool allows users to choose any of the following dynamic excitations: sinusoidal base acceleration, harmonic force on the structure, impulse excitation (unit step, triangular, square or ramp), arbitrary excitation and base displacement/acceleration. The user can also choose non-zero initial conditions along with no external excitation, to consider the free vibration response of a structure. The application has a graphical interface divided into four panels: Excitations, System Properties, Response, and Model Animation, as shown in Fig. 1.

In the System Properties panel, the user selects the type of simulation model from the following options: (1) mass-spring-damper system; (2) column model; and (3) shear-frame model. The user can then set the material properties and cross-section of all system elements accordingly. In addition, the user can choose from a series of numerical integration methods; namely, Newmark (average or linear acceleration), excitation interpolation, central differences or Runge-Kutta. Additionally, the app allows the user to select

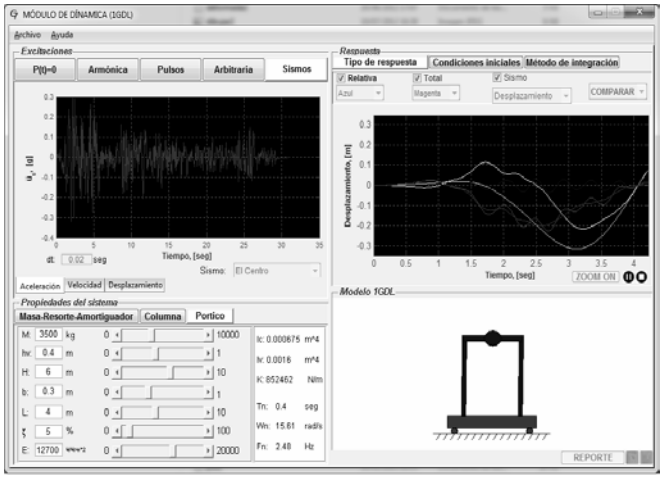


Figure 1. Graphical interface of the SDOF application.
Source: Solarte, 2014.

the time step Δt to ensure appropriate convergence of algorithms when calculating the discrete response at specified times. Once the user has fully defined the system and its excitation, the displacement, velocity and acceleration responses are plotted in the Response panel.

The MDOF system application allows the user to select the number of degrees of freedom (DOF) to create the desired structural system model using an interactive interface (see Fig. 2). This software is programmed in HTML5 and JavaScript, which enables it to run online directly from tablets and smart phones, making it an attractive tool for in-class activities. This application is based upon the drag-and-drop principle, where the user can drag the available predefined components on the initial panel (supports, beams, and columns) and drop them to a grid where the structural system is assembled. For the definition and allocation of the mass and damping, the user has different options such as concentrated masses, and dampers. Sensor elements are also available to observe the response of a DOF in the desired direction. The external dynamic excitation is also selected by the user and includes a harmonic force or acceleration and an earthquake excitation, which can be a predefined earthquake or upload a predefined time history [10]. The dynamic response of the modeled system is obtained by solving the equation of motion of a MDOF system using the fourth-order Runge-Kutta method. Thus, the dynamic response of the structure is obtained in terms of displacement, velocity or acceleration.

Several options are available for calculating the stiffness matrix, (1) static condensation of rotational degrees of freedom, (2) selection of a shear frame, and (3) selection of the desired number of DOF. In the assembly of the mass matrix, the user can choose between concentrated mass or consistent mass matrix. In the case of the damping matrix, either modal damping or Caughey damping can be chosen to assume proportional damping [11].

A user manual is provided along with the application and it specifies the basic procedure for creating a model and the types of analyses that can be performed on the structural model. Also, instructions are provided on how to obtain and download structural parameters (stiffness, mass, and damping matrices), dynamic properties (modal matrix and natural frequencies) and results, with the option of exporting them to a *.txt* file for subsequent analyses.

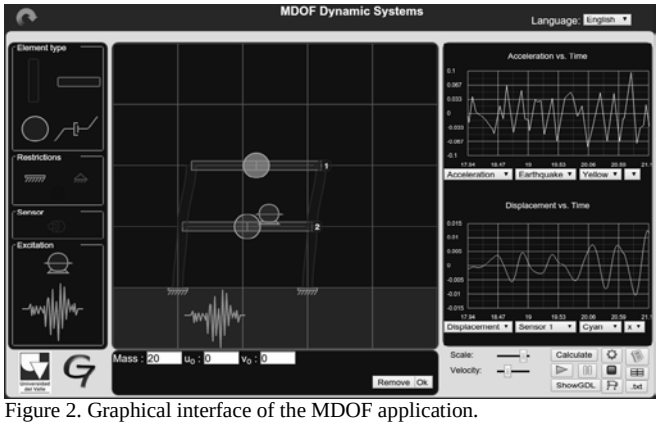


Figure 2. Graphical interface of the MDOF application.
Source: The authors.



Figure 3. Graphical interface of the EFE-SIO application.
Source: Mantilla, 2013.

2.2. Geotechnical module

The geotechnical module consists of one application programmed in MATLAB. This tool focuses on the analysis of site-effects and one-dimensional wave propagation for assessing the dynamic response in a soil column [12, 13]. The application has an intuitive graphical interface (refer to Fig. 3), in which the user can evaluate four types of stratigraphic profiles (undamped uniform soil on rigid rock, damped uniform soil on rigid rock, uniform soil damped on elastic material, and stratified soil damped on elastic material).

The user can specify earthquake characteristics, as well as the density and dynamic properties of the soil and rock (stratum height, dry unit weight, shear wave velocity, and damping), and perform an evaluation of the attenuation or amplification of the seismic waves for different soil layers. For such cases, a linear analysis, with wave propagation in the vertical direction, is performed. The application is limited to horizontally stratified soil profiles. The application provides graphical results of the soil stratum response to acceleration, velocity, shear stress and displacement. In addition, a report with input and output data for each case can be generated for further analysis [13].

2.3. Structural analysis module

The Structural Analysis module has two applications programmed in MATLAB. The first application, which is denominated SAM, performs a beam analysis based on energy methods and the Cross method. The second application is called MODES and performs analyses of plane and spatial frames using the stiffness matrix method. SAM (refer to Fig. 4) is an application for the structural analysis of statically determinate beams. The application also allows users to perform plane stress analysis and determine the geometrical properties of any cross-section. Using SAM, a user can determine moment, shear, and reaction diagrams applying three different methods: (1) the moment distribution method (Cross), (2) the deformation method, and (3) the flexibility method. Similarly, SAM offers additional capabilities for determining lines of influence for moments



Figure 4. Graphical interface of the SAM application.
Source: Saldarriaga, 2014.

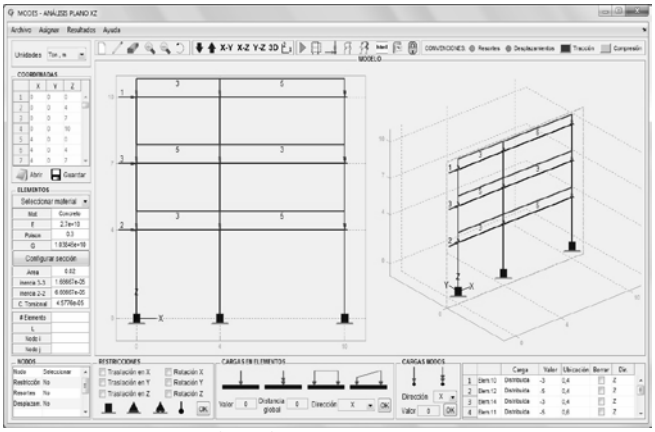


Figure 5. Graphical interface of the MODES application.
Source: Tocoche, 2014.

and shears in a previously user-defined system. This application also allows results to be sent to a PDF report, which includes a step-by-step procedure of the performed structural analysis [14].

The MODES application (Fig. 5) allows users to create frame structures in two or three dimensions and apply point loads (concentrated forces or moments) and distributed loads (constant or trapezoidal) to nodes and elements of the structures. Moreover, the user can apply restrictions to specific DOF and select the type of support accordingly. Other available options for supports are elastic supports (rotational and translational springs) and user defined initial displacements of the supports. The user can also choose optional analysis considerations, such as shear strain energy and P-Delta effects. Analysis outputs include diagrams of moments, shear and normal forces in the elements, support reactions, deformations (displacements and rotations of nodes) and a graphic display of the deformed structure [14,15].

The results of the structural analysis can be generated and directly downloaded into a PDF document. This report provides a detailed description of the analysis of the structure, from the construction of local matrices to the assembly of the global stiffness matrix. This module allows students to generate structural systems, attach desired forces and moments and obtain results that can be compared with their calculations. The level of detail in the procedure made available to the students is what sets apart this application from other apps commonly used in earthquake engineering.

3. Impact assessment

The impacts of SISMILAB in the teaching and learning process was assessed using a series of surveys that were conducted on students and professors of various civil engineering undergraduate and graduate level courses at the Universidad del Valle. These surveys were conducted both before and after the trial use of the application in the classroom. Perception measures were monitored for five semesters. The procedure for the implementation of surveys is described herein. Initially, material was briefly presented to students in the form of a lecture followed by a pre-survey, where the assimilation of concepts via traditional methodology, in a lecture-style class, was measured. Subsequently, a brief introduction was made of the virtual lab followed by its distribution, and users were given the assignment to go over the material. Finally, a post-survey was conducted and the assimilation of concepts using the application was measured.

The pre-survey questionnaire aimed at measuring the perception of the students, methodology and the teaching aids with ten questions, which users rated with a score from 1 to

Table 1.
Pre-survey questions

When using the current (traditional) methodology in class, on a scale of 1-5, being 5 the highest rating, please answer the following questions:
1. How would you rate the level of difficulty experienced when trying to understand and visualize the theoretical concepts? (1: very difficult; 5: very easy)
2. How would you rate the level of difficulty experienced when trying to understand the related mathematical components? (1: very difficult; 5: very easy)
3. How would you rate the level of difficulty experienced when trying to visualize and interpreting physical phenomena? (1: very difficult; 5: very easy)
4. How would you rate the level of clarity of the lecture regarding the class material to grasp related concepts? (1: not clear at all; 5: very clear)
5. How would you rate the level of relationship between the concepts presented in the course and real-life problems? (1: not related at all; 5: very related)
6. Please rate your proficiency for solving course-related problems. (1. not proficient at all; 5: proficient)
7. How would you rate the level of effectiveness of the class materials used during the course (literature, computational tools, and the Internet) for understanding the concepts? (1: not effective at all; 5: very effective)
8. With the mathematical formulation learned in class, how would you rate the level of difficulty experienced when trying to evaluate different results due to changes in the input parameters? (1: very difficult; 5: very easy)
9. Regarding the traditional computer tools used in the course to aid the understanding of concepts, would you say these are easy to use, intuitive and interactive? (1: not at all; 5: very helpful)
10. How would you rate the usefulness and interactivity of current computational tools to help understand course-related concepts? (1: not at all; very useful)

Source: The authors.

5, with 5 being the highest rating. The first six questions aim at providing a measure of the level of understanding and interpretation of theoretical concepts via the traditional methodology. The second group of questions (questions 7 to 10) is focused on determining the effectiveness of the available support material. Table 1 shows the pre-survey questionnaire.

The post-survey was conducted to evaluate the perception of students after using the computational tool as a methodological support for the course. The users assigned each question a score between 1 and 5, with 5 being the highest rating. Table 2 lists the questions of the post-survey.

Fig. 6 and Fig. 7 show the results of the first set of assessment surveys for the Structural Dynamics module in 2012. The survey population consisted of 31 undergraduate students in the Fundamentals of Structural Dynamics course and 17 graduate students in the Advanced Dynamics course. The results of question 10, which evaluates the usefulness of an application for supporting the teaching and learning processes, indicated that students initially had a higher expectation regarding the application. This information was used as feedback to improve the applications and make them more user-friendly based on suggestions and recommendations provided by the students.

As shown in Figs. 8-14, the rating of question 10 increased in the following years due to the improvements based on recommendations from the students. This indicates that applications are a complement instead of a replacement for current teaching methods, and suggests that the use of these tools are an advantage for learning and a complement to traditional lectures.

Table 2.
Post-survey questions

After trying the proposed computational tool in class, on a scale of 1-5, being 5 the highest rating, please answer the following questions:	
1.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of difficulty experienced when trying to understand and visualize the theoretical concepts? (1: very difficult; 5: very easy)
2.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of difficulty experienced when trying to understand the related mathematical components? (1: very difficult; 5: very easy)
3.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of difficulty experienced when trying to visualize and interpreting physical phenomena? (1: very difficult; 5: very easy)
4.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of clarity of the lecture regarding the class material to grasp related concepts? (1: not clear at all; 5: very clear)
5.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of relationship between the concepts presented in the course and real-life problems? (1: not related at all; 5: very related)
6.	After the computational tool has been used, please rate your proficiency for solving course-related problems. (1. not proficient at all; 5: proficient)
7.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of effectiveness of the proposed computational tool as a complement to the available course materials? (1: not effective at all; 5: very effective)
8.	With the proposed computational tool, how would you rate the level of difficulty experienced when trying to evaluate different results due to changes in the input parameters? (1: very difficult; 5: very easy)
9.	Compared to the traditional methodology you are used to, would you say that the proposed tool is easier to use, more intuitive and interactive? (1: not at all; 5: very helpful)
10.	How would you rate the usefulness and interactivity of proposed computational tool to help understand course-related concepts? (1: not at all; 5: very useful)

Source: The authors.

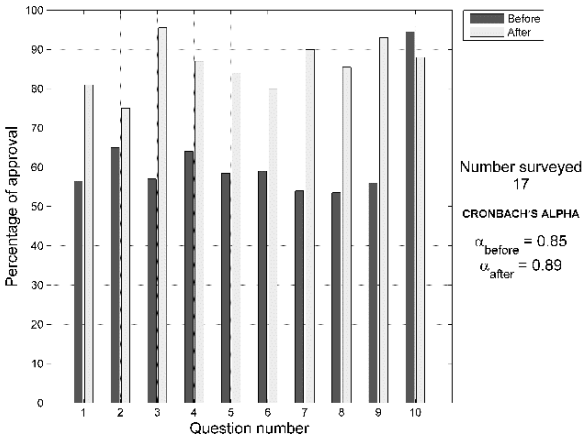


Figure 6. Survey of the Advanced Dynamics graduate course, Aug.- Dec. 2012.
Source: Solarte et al. 2014.

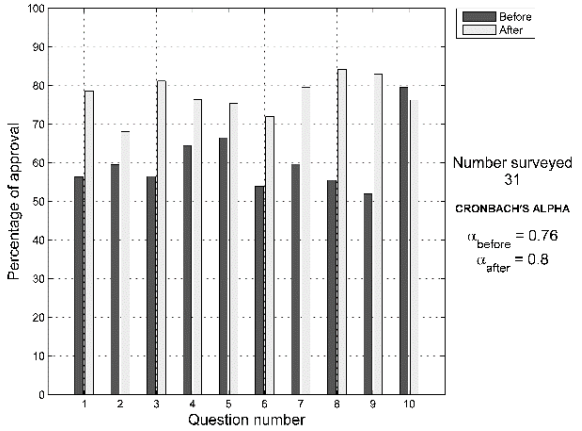


Figure 7. Survey of the Fundamentals of Structural Dynamics undergraduate course, Aug.- Dec. 2012.
Source: Solarte et al. 2014.

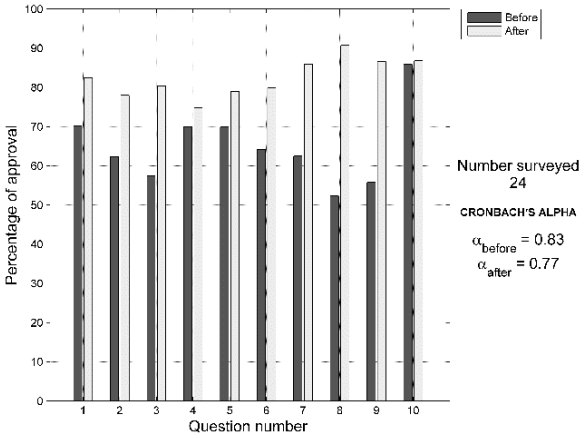


Figure 8. Survey of the Earthquake Engineering undergraduate course, Aug.- Dec. 2013.
Source: The authors.

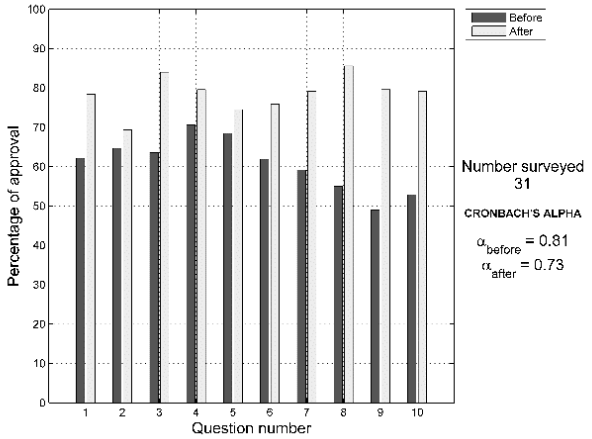


Figure 9. Survey of the Fundamentals of Structural Dynamics undergraduate course, Aug.- Dec. 2013.
Source: The authors.

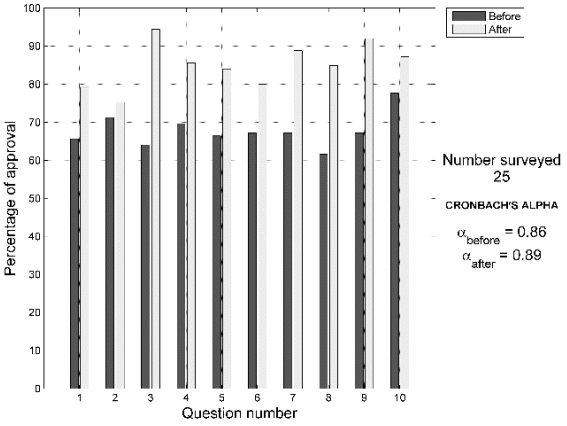


Figure 12. Survey of the Structural Analysis undergraduate course, Aug-Dec 2014.
Source: The authors.

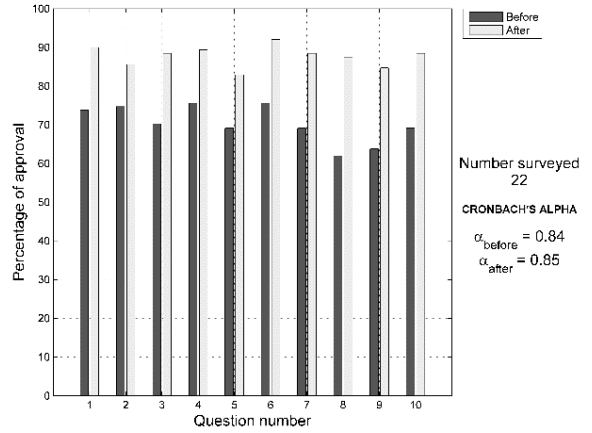


Figure 10. Survey of the Matrix Analysis of Structures undergraduate course, Feb.- Jun. 2014.
Source: The authors.

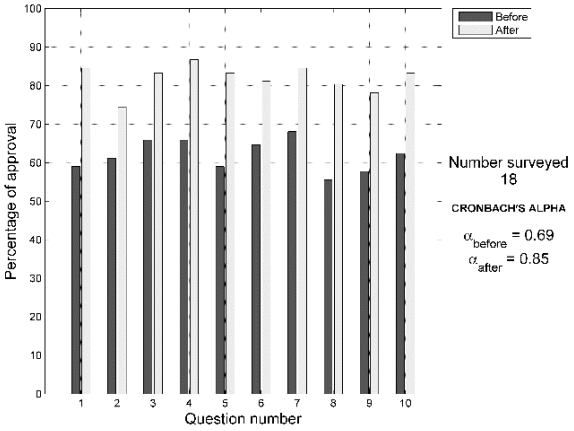


Figure 13. Survey of the Matrix Analysis of Structures undergraduate course, Feb.- Jun. 2015.
Source: The authors.

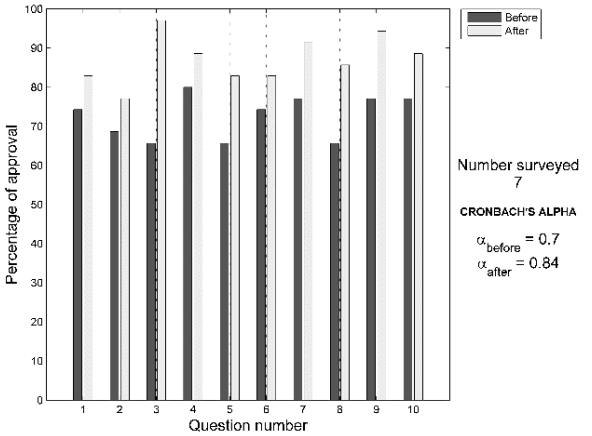


Figure 11. Survey of the Structural Analysis undergraduate course, Feb-Jun 2014.
Source: The authors.

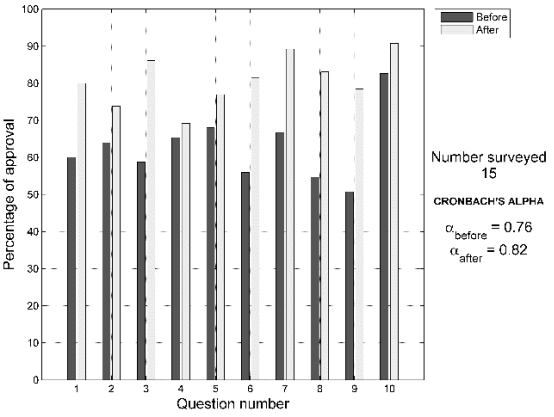


Figure 14. Survey of the Fundamentals of Structural Dynamics undergraduate course, Feb.- Jun. 2015.
Source: The authors.

In the specific case of the Structural Dynamics module, students considered that the computational tool simplified the visualization and interpretation of the physical phenomena presented in class. This finding is reflected in the increase of the post-survey rating given to question 3, in which the acceptance rates among undergraduate students and graduate students increased by at least 23% and 42% respectively with respect to pre-survey values. Another aspect highlighted by students is the effectiveness of the computational tool to supplement conventional course material, especially as it is an economical alternative to the practical component of the curriculum.

The analysis of the rating given by students of the Earthquake Engineering course indicates that the most valued feature of the application is the flexibility it gives the user to vary the properties of the selected system without creating a new model. Hence the application is a versatile, friendly and ideal tool for parametric studies. The rating given to Question 9 shows that students consider the computational tool to be intuitive and interactive, which encourages this type of aid in the student preparation process.

In the specific case of the Structural Analysis and Matrix Structural Analysis courses, students consider that the tool is intuitive and easy to understand compared with other commercially available resources, as reflected in the rating given to Question 9 of Figs. 10-13. They also noted that the computational tool enables simple visualization and interpretation of the theoretical concepts of the subject. The information collected by the surveys was tabulated to extract relevant statistical parameters, which indicate the characteristics of the population. The main parameters are the first- and second-order moments, which correspond to the average and the variance, respectively. Tables 3 and 4 summarize the statistical parameters of the data from the pre-survey and post-survey, respectively, of the Fundamentals of Structural Dynamics course in 2015.

Table 3.
Statistical parameters of the pre-survey

Question	Average	Variance
1	3	0.71
2	3	0.60
3	3	0.92
4	3	0.50
5	4	0.83
6	3	0.17
7	4	0.95
8	3	0.78
9	3	0.53
10	5	0.57

Source: The authors.

Table 4.
Statistical parameters of the post-survey

Question	Average	Variance
1	4	0.33
2	4	0.56
3	5	0.73
4	4	0.20
5	4	0.31
6	4	0.41
7	5	0.60
8	4	0.47
9	4	0.39
10	5	0.44

Source: The authors.

Cronbach's alpha reliability analysis of results was performed to the set of data [16]. This internal consistency index can be calculated using two methods: the variance of the items or a correlation matrix [17]. In this paper, Cronbach's alpha was calculated from the variance of the items using the formula in eq. (1)

$$\propto = \left[\frac{k}{k-1}\right] \times \left[1 - \frac{\sum_{i=1}^{k} V_i}{V_t}\right] \quad (1)$$

where V_i is the variance of each item, V_t is the total variance, and k is the number of questions. Cronbach's alpha produces values between 0 and 1, and shows the internal correlation among

Table 5.
Summary of statistical reliability

Cronbach's alpha		Number of students
Pre-survey	Post- survey	
0.85	0.89	17
0.76	0.80	31
0.83	0.77	24
0.81	0.73	31
0.84	0.85	22
0.70	0.84	7
0.86	0.89	25
0.69	0.85	18
0.76	0.82	15

Source: The authors.

Table 6.
Questions of the pre-survey for faculty members

When using the current (traditional) methodology in class, on a scale of 1-5, being 5 the highest rating, please answer the following questions:
1. How would you rate the level of difficulty experienced when trying to explain theoretical concepts to the students? (1: very difficult; 5: very easy)
2. How would you rate the level of the students' comprehension of the course's related mathematical component? (1: poor; 5: high)
3. How would you rate the performance of the students to visualize and physically understand simulation results? (1: low performance; 5: high performance)
4. How would you rate the level of comprehension of course-related concepts by students? (1: poor; 5: high)
5. How would you rate the level of relationship between the concepts presented in the course and real-life problems? (1: not related at all; 5: very related)
6. What is your perception regarding the ability of students to solve class-related problems? (1. low; 5: high).
7. How would you rate the level of adequacy of the material used in this course (literature, computational tools, and the internet) as aids for students to understand the concepts? (1: insufficient; 5: adequate)
8. How would you rate the level of difficulty when varying some of the structural parameters in a class problem to observe the impact on the results? (1: very difficult; 5: very easy)
9. Regarding the computer tools used in the course to aid the understanding of concepts, would you say these are easy to use, intuitive and interactive? (1: not at all; 5: very)
10. How would you rate the level of usefulness of a new computational tool as an aid to help students understand course-related concepts? (1: not at all useful; 5: very useful)

Source: The authors.

each of the questions. The minimum acceptable value for Cronbach's alpha coefficient is 0.70, and anything below this value reveals a weak relationship [18]. However, the maximum value expected for this coefficient is 0.90; above this value, redundancy or duplication is expected, and redundant items must be removed. Usually, alpha values between 0.80 and 0.90 are preferred [18]. Note that statistical uncertainties are dependent on the amount of data available for analysis and increase as the lack of information increases. To estimate the validity and reliability of the data collected in the pre-survey and post-survey, Cronbach indices were calculated as listed in Table 5. In one survey, the Cronbach's alpha index is below the acceptable minimum of 0.7; on six occasions, Cronbach's alpha index is less than 0.8, which demonstrates high reliability in the survey results.

In addition to the student surveys, pre and post-surveys were conducted on faculty members. In the pre-survey, the perception of faculty regarding the difficulty of explaining topics in a traditional manner and the effectiveness conveying information to students were evaluated. The survey consisted of ten questions, which were assigned a score between 1 and 5, where 5 is the highest rating (refer to Table 6). The post-survey assessed the perception of faculty regarding the use of simulations in the classroom so that the students can better understand different topics (see Table 7).

Fig. 15 shows the results from the survey of faculty members (Earthquake Engineering and Matrix Analysis). The applications of the virtual lab are accepted as a teaching tool that greatly aids the instructor in the explanation of concepts in a graphical and interactive manner.

Table 7
Questions of the post-survey for faculty members

After trying the proposed computational tool in class, on a scale of 1-5, being 5 the highest rating, please answer the following questions:	
1.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of difficulty experienced when explaining theoretical concepts to the students? (1: very difficult; 5: very easy)
2.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of the students' comprehension of the course's related mathematical component? (1: poor; 5: high)
3.	After the computational tool has been used, how would you rate the performance of the students to visualize and physically understand dynamic response? (1: low performance; 5: high performance)
4.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of comprehension of course-related concepts by students? (1: poor; 5: high)
5.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of difficulty experienced when demonstrating relationships between concepts presented in the course and real-life problems? (1: very difficult; 5: very easy)
6.	After the computational tool has been used, what is your perception regarding the ability of students to solve class-related problems? (1. low; 5: high).
7.	How would you rate the level of adequacy of the computational tool as a complementary resource to the material used in this course? (1: insufficient; 5: adequate)
8.	After the computational tool has been used, how would you rate the level of difficulty when varying some of the structural parameters in a class problem to observe the impact on the results? (1: very difficult; 5: very easy)
9.	Regarding the computer tools used in the course to aid the understanding of concepts, would you say these are easy to use, intuitive and interactive? (1: not at all; 5: very easy)
10.	How would you rate the level of usefulness of the proposed computational tool as an aid to communicate new concepts and help students understand them? (1: not at all useful; very useful)

Source: The authors.

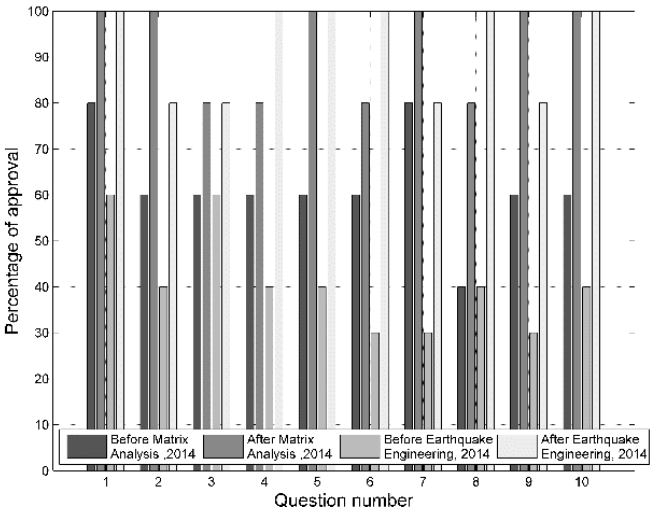


Figure 15. Results of the survey of faculty members
Source: The authors.

4. Conclusions

The Virtual Earthquake Engineering Lab (SISMILAB) is a useful teaching and learning tool for different fields of earthquake engineering: structural dynamics, geotechnics, and structural analysis. This is an open-source platform that enables user interaction with models that are representative of reality via animations and simulations, which contribute to the understanding of concepts and the interpretation of results. Each application of the virtual lab has its respective verification exercises, which show that the results obtained from analysis and simulations are consistent with the theoretical results expected in each topic. SISMILAB users are able to generate a report that contains input data, the mathematical formulation, procedure and the results achieved during virtual experimentation. Furthermore, students can become familiar with a step-by-step procedure of the application analysis, which improves and assists in the self-learning process. Another advantage of the virtual platform is the possibility of repeating experiment simulations as many times as desired by the user. This optimizes available resources without the constraints of space and time.

Acceptance and effectiveness assessment for students who used SISMILAB applications was performed using surveys as a measuring instrument and Cronbach's alpha as an indicator of the reliability of the results. An important result of the assessment is that the application was rated higher by students after they used it, which demonstrates the acceptance of the lab applications as tools for the assimilation of concepts in the subjects related to earthquake engineering. Furthermore, survey results also showed high effectiveness of the applications for aiding students in understanding concepts and for visualization and interpretation of results.

Currently, basic and middle-level education is undergoing a nationwide transition process to transform from a mechanical learning system to an interactive learning process [19, 20]. The results of the surveys indicate that the instructors and the students have a need to implement

complementary tools, such as virtual labs, to strengthen the teaching-learning process. Virtual labs are established as a support tool in the teaching-learning process, which facilitates meaningful participation of students both in the classroom and outside the classroom, and leads them towards interactive self-learning.

The virtual lab will continue to be employed at the Universidad del Valle as a resource for supporting teaching, and a regular assessment of its impact will be conducted. Due to the visibility of the website, the virtual lab is expected to be well received at other institutions as an educational alternative in the various fields of earthquake engineering. It should be noted that one of the applications was developed in HTML5, as a prototype to enable access by users without installing add-ons or performing additional downloads. Additionally, the extensive use of this application in mobile devices (smartphones and tablets) showed that students were more receptive to this technology, which encouraged its frequent use. The applications of the Virtual Earthquake Engineering Lab (SISMILAB) have been extensively accepted among the student community, as reflected in the favorable rating assigned by the different students who were surveyed and have employed these tools during the development of the different courses offered by the School of Civil Engineering and Geomatics of the Universidad del Valle. The use of these tools produces a positive impact on the teaching-learning process and promotes the development of new applications in other fields of civil engineering.

Acknowledgments

The authors acknowledge funding from Universidad del Valle, RENATA and the Ministry of National Education of Colombia via the project “Development and Implementation of a Virtual Laboratory for Earthquake Engineering” (IF-006-11).

References

[1] Gómez, D., Sandoval, E.A., Thomson, P. y Marulanda, J., Aplicación de un laboratorio virtual de ingeniería sísmica y su impacto en la educación, World Engineering Education Forum (WEEF), Cartagena de Indias, Colombia, 2013.

[2] Saldarriaga, D., Desarrollo de una aplicación para la implementación del módulo de análisis estructural en un laboratorio virtual de ingeniería sísmica. Undergraduate Thesis, Escuela de Ingeniería Civil y Geomática, Universidad del Valle, Cali, Colombia, 2014.

[3] Roth, W.M. and McGinn. Graphing: Cognitive ability or practice? Science Education, 81(1), pp. 91-106, 1997. DOI: 10.1002/(SICI)1098-237X(199701)81:1<91::AID-SCE5>3.0.CO;2-X

[4] Magana, A., Ortega, J., Lovan, R., Gómez, D., Marulanda, J. and Dyke, S., Virtual, local and remote laboratories for conceptual understanding of dynamic systems. International Journal of Engineering Education, 33(1(A)), pp. 91-105, 2017.

[5] Valencia, M., Las nuevas tecnologías de la información y la comunicación y el aprendizaje activo: Experiencia con el curso de metodologías de multimedia. Revista Ingeniería y Competitividad, 3, pp. 73-82, 2001. DOI: 10.25100/iyc.v3i1.2337

[6] De Jong, T., Linn, M.C. and Zacharia, Z.C., Physical and virtual laboratories in science and engineering education. Science, 340(6130), pp. 305-308, 2013. DOI: 10.1126/science.1230579

[7] Fontarnau, A., Baucells, A. y Romero, J., Laboratorio virtual, Universidad Internacional de Cataluña. [Online]. [Date of reference November 10 of 2014]. Available at: http://www.uic.es/es/laboratorio-virtual

[8] Mathworks., MATLAB. The Mathworks, Inc. [Online]. [Date of reference December 6 of 2014]. Available at: http://www.mathworks.com

[9] Solarte, A., Desarrollo de una aplicación computacional para la simulación de sistemas dinámicos de un grado de libertad en un laboratorio virtual de Ingeniería Sísmica. Tesis de Posgrado, Escuela de Ingeniería Civil y Geomática, Universidad del Valle, Cali, Colombia, 2014.

[10] Solarte, A., Guerrero, L., Gómez, D. and Thomson, P., Implementación de un módulo de dinámica estructural para un laboratorio virtual de ingeniería sísmica, Congreso Nacional de Ingeniería Sísmica, Bucaramanga, 2013.

[11] Chopra, A., Dynamics of structures: Theory and applications to earthquake engineering. Prentice Hall, 2012.

[12] Mantilla, J., Chalparizán, E., Sandoval, E. y Gómez, D., Desarrollo e implementación de un módulo de geotecnia en un laboratorio virtual de ingeniería sísmica, Congreso Nacional de Ingeniería Sísmica, Bucaramanga, 2013.

[13] Mantilla, J., Desarrollo de una aplicación computacional para el análisis de efectos de sitio, en un laboratorio virtual de ingeniería sísmica. Tesis de Posgrado, Escuela de Ingeniería Civil y Geomática, Universidad del Valle, Cali, Colombia, 2013.

[14] Saldarriaga, J., Tocoche, J., Gómez, D. and Marulanda, J., Desarrollo e implementación del módulo de análisis estructural en un laboratorio virtual de ingeniería sísmica, Congreso Nacional de Ingeniería Sísmica, Bucaramanga, 2013.

[15] Tocoche, J., Desarrollo de una aplicación para la docencia y la investigación en el análisis estructural matricial. Tesis de Posgrado, Escuela de Ingeniería Civil y Geomática, Universidad del Valle, Cali, Colombia, 2014.

[16] Cronbach, L.J., Coefficient alpha and the internal structure of tests. Psychometrika 16(3), pp. 297-334, 1951. DOI: 10.1007/BF02310555

[17] Bojórquez, J.A., López, L., Hernández, M.E. y Jiménez, E., Utilización del alfa de Cronbach para validar la confiabilidad de un instrumento de medición de satisfacción del estudiante en el uso del software Minitab. Eleventh LACCEI Latin American and Caribbean Conference for Engineering and Technology (LACCEI’2013), Cancun, Mexico, August 2013.

[18] Celina, H. and Campo, A., Aproximación al uso del coeficiente alfa de Cronbach. Revista Colombiana de Psiquiatría. [Online]. 34(4), pp. 572-580, 2005. [Date of reference December 8 of 2014]. Available at: http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0034-74502005000400009&lng=en

[19] Avella, E., La excelencia empieza por los docentes [Online]. Dic. 2014. [Date of reference December 8 of 2014]. Available at: http://www.elespectador.com/noticias/educacion/excelencia-empieza-los-docentes-articulo-531675.

[20] Ministry of National Education. Maestros del sector oficial cuentan con nuevo proceso de formación en TIC [Online]. January of 2014. [Date of reference December 8 of 2014]. http://www.mineducacion.gov.co/cvn/1665/w3-article-337205.html.

L.F. Guerrero-Mosquera, received the BSc. Eng in Civil Engineering in 2011, and the MSc. degree in Civil Engineering in 2016, all of them from the Universidad del Valle. Cali, Colombia. Currently, he is an adjunct faculty porfessor in the Departamento de Ingeniería Civil e Industrial, Pontificia Universidad Javeriana, Cali, Colombia. His research interests include dynamics and seismic engineering.
ORCID: 0000-0002-8473-0718

D. Gómez, received the BSc. Eng in Civil Engineering in 2002, the Sp. degree in Structural Engineering in 2006, MSc. degree in Civil Engineering in 2010, all of them from the Universidad del Valle, Cali, Colombia. He is currently an associate professor at the Escuela de Ingeniería Civil y Geomática, Universidad del Valle. The research lines of interest are: human-structure interaction, seismic engineering, dynamics and structural control.
ORCID: 0000-0001-5244-8876

P. Thomson, received a PhD. in Aerospace and Mechanical Engineering from the University of Minnesota, USA in 1995. He is currently a full professor at the Escuela de Ingeniería Civil y Geomática at Universidad del Valle. Director of the Research Group in Seismic, Wind, Geotechnical and Structural Engineering, G-7. The research lines of interest: dynamics and structural control and seismic engineering.
ORCID: 0000-0002-9404-0710

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Evaluation of different methods for efficient extraction of hemicelluloses leaves and tops of sugarcane

Luz Marina Flórez-Pardo [a] Andrea González-Córdoba [b] & Jorge Enrique López-Galán [c]

[a] *Departamento de Energética y Mecánica, Universidad Autónoma de Occidente, Cali, Colombia. lmflorez@uao.edu.co*
[b] *Escuela de Química, Universidad del Valle, Cali, Colombia. andrea.gonzalez.c@correounivalle.edu.co*
[c] *Escuela de Ingeniería Química, Universidad del Valle, Cali, Colombia. jorge.lopez@correounivalle.edu.co*

Received: July 27th, de 2017. Received in revised form: October 19th, 2017. Accepted: November 7th, 2017

Abstract
There are around 9 million tons of sugarcane crop residue per year in Colombia that are not recovered but they have potential to make value-added products. It is necessary to know the residue components, especially those from hemicellulose, to clarify the type of process to obtain the hemicellulose monosaccharides and isolate them efficiently. In order to separate pure hemicelluloses, five processes of extraction from tops and leaves of CC 8592, CC 8475, and V 7151 sugarcane varieties were studied. After evaluating exposure to dewaxing using ethanol and chloroform-methanol mixtures, residues were subjected to different concentrations of hydrogen peroxide and acidified sodium chlorite to achieve delignification. Additionally, procedures of extraction were developed with sodium hydroxide, potassium hydroxide, and precipitation. Chloroform-methanol dewaxing and sodium chlorite with sodium borohydride delignification allowed to achieve the highest extraction yield, with hemicellulose recovery ranging from 0.20-0.34 g hemicellulose/g dry residue in the varieties studied.

Keywords: polysaccharides; lignocellulosic residue; bioethanol.

Evaluación de diferentes métodos para la extracción eficiente de hemicelulosas de las hojas y cogollos de la caña de azúcar

Resumen
En Colombia se producen alrededor de 9 millones de toneladas de residuos de la cosecha de la caña de azúcar por hectárea cada año, que no han sido valorizados hacia ningún tipo de producto. Es necesario conocer su composición, en especial el contenido de hemicelulosas, para dilucidar el proceso para obtener los monosacáridos de éstas y aislarlos eficientemente. Para separar las hemicelulosas puras, se estudiaron cinco procesos de extracción a partir de las hojas y cogollos de las variedades de caña de azúcar CC 8592, CC 8475 y V 7151. Después de evaluar la eliminación de ceras con etanol y mezclas de cloroformo-metanol, los residuos se expusieron a diferentes concentraciones de peróxido de hidrógeno y clorito de sodio acidificado para lograr su deslignificación. Adicionalmente, se desarrollaron procedimientos de extracción con hidróxido de sodio e hidróxido de potasio, y de precipitación. El método que logró el mayor rendimiento fue el de desceración con metanol-cloroformo y deslignificación con clorito de sodio y borohidruro de sodio, con un rango de recuperación entre 0.20-0.34 g hemicelulosas /g residuo seco en las variedades estudiadas.

Palabras clave: polisacáridos; residuo lignocelulósico; bioetanol.

1. Introduction

Currently, there is a great interest on the lignocellulosic biofuels industry [1]. To achieve large-scale biotechnological production of ethanol at low costs that is environmentally safe, it is necessary to search abundant raw materials that do not compete against food security policies of populations and to not push the natural boundaries of primary and secondary forests. The raw materials should be easy to use, store, distribute, and transport and be attractive for use within the energy industry.

How to cite: Flórez-Pardo, L.M., González-Córdoba, A. and López-Galán, E., Evaluation of different methods for efficient extraction of hemicelluloses leaves and tops of sugarcane. DYNA, 85(204), pp. 18-27, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

Some lignocellulosic materials, such as sugarcane, corn, rice, beer, sweet sorghum, and wheat residue, fulfill these requirements [2]. Sugarcane is the most widely cultivated crop in subtropical countries, such as Colombia. Worldwide, the total area planted with sugarcane is 26 million hectares, producing 1.83 billion tons. The main product is sugar (92 %), followed by ethanol and animal feed [3].

Lignocellulosic residues contain 55–75 % dry matter basis (db) fermentable sugars. Besides, they are an emerging valuable resource for the generation of hemicellulose-based materials and products [4]. In biomass, the hemicellulose is joined to cellulose microfibrils through molecular interactions including hydrogen and van der Waals bonds. Also, hemicellulose has other functions, such as cell signaling and substance reserve. Hemicellulose molecules are branched polymers of low molecular weight with a degree of polymerization of 80–200. Hemicellulose isolation involves alkaline hydrolysis of the ester linkages to liberate them from the lignocellulose matrix [5]. Xylans and β-(1→3) and -(1→4) glucans are the principal components of hemicellulose in monocotyledonous plants like sugarcane. These components of hemicellulose comprise 15–20 % (db) of the cell wall [6]. A commercial process to hydrolyze these polysaccharides remains to be found. The likely cause is the strong ether and ester linkages that are between the lignin and the hemicellulose and the amount of hydrogen bonds within polysaccharides [7].

In Colombia, the highest percentage of agricultural residue (21.6 %) comes from sugarcane crops [8], where 54.9 % belongs to tops and leaves (around 9 million tons/year) with no specific use since it is burned or left in the field to decompose. Ethanol and different bioproducts can be obtained from this residue through the biorefinery concept. In order to use this residue in bioethanol manufacturing, before it is important to find an effective isolating method of the most abundant polysaccharides (cellulose and hemicellulose) that facilitates the enzymatic hydrolysis process to obtain fermentable sugars to biofuel because the direct hemicellulose combustion (heating value ≈13.6 MJ/kg) represents an inefficient use of the feedstock [9]. There are very few studies about hemicellulose characterization and extraction, specifically regarding top and leaf residue where molecular structures are not well known. However, there is some research that investigates hemicellulose characterization of sugarcane bagasse [4,10,11]. The goal of this study was to find an efficient method to extract hemicellulose selectively with the highest purity from residue of three sugarcane varieties (CC 8475, CC 8592, and V 7151), which are mainly harvested in the valley of the Cauca River. This research is important with respect to future investigations of ethanol production using this residue.

2. Materials and methods

2.1. Samples

Crop residue (tops and leaves) of the sugarcane varieties CC 8475, CC 8592 (CC: Cenicaña-Colombia) and V 7151 (V: Venezuela) was obtained from several dried agro-ecological zones (valley of Cauca River, Colombia). In this zone, the mean temperature is 23.6 °C and relative humidity is 73 % [8]. Residue was mechanically green-harvested and collected directly from each row (2 m distance between rows) from several commercial sugarcane fields (350 m × 100 m).

The residue of CC 8592 and V 7151 varieties was collected a few days after harvest, while the CC 8475 variety was collected after 30 days. All material of the same variety was first mechanically homogenized and then washed with distilled water (30 °C) to remove dirt and impurities. It was then dried to 45 °C to constant weight in an oven, milled, and sieved. In order to extract the hemicellulose, the residue was ground to a 0.8 mm size according to methods of Sluiter et al. [12].

2.2. Selection of methods for hemicellulose extraction

In this study, the hemicellulose was extracted and gravimetrically quantified from harvested sugarcane residue (CC 8592, CC 8475, and V 7151 varieties). Several sequential methods exist to obtain these materials in alkaline media (after removing soluble substances, pectin, and lignin) [13], but still it is not defined an efficient protocol for the isolation of pure hemicelluloses particularly from sugarcane residues; different yields and purities depend on each raw material [14]. For this reason, it was necessary to test different methodologies in relation to the most efficient methods found in the literature (Table 1) in order to select the best, starting with CC 8592 (the most cultivated in the Cauca River valley). Treatments were replicated twice.

To extract mostly pectin, all samples were first dewaxed with methanol-chloroform or ethanol, and then treated with dilute acid. For lignin removal, alkaline peroxide was used based on reports of Sun et al. [10], who observed that this substance was a strong, effective agent for both hemicellulose delignification and solubilization of straws and grasses. For this reason, the assays were made at two pH levels (13 and 11.5). Also, it is important to ensure an adequate concentration of (HO.) and (O2-.) radicals, which are responsible for the delignification process [15], thus, two different concentrations (AV1 and AV2 treatments) were tested.

Table 1.
Different treatments used to extract hemicellulose from residue of the CC 8592 variety.

Treatments					
No.	**Dewax**	**De-pectine**	**Delignificate**	**Isolate hemicellulose**	
AV1	CH_3OH–$CHCl_3$	0.05 % *HCl*	2 % H_2O_2, pH 13	10 % *KOH*	18 % *NaOH*
AV2	CH_3OH–$CHCl_3$	0.05 % *HCl*	3 % H_2O_2, pH 11.5	10 % *KOH*	18 % *NaOH*
AV3	CH_3OH–$CHCl_3$	0.05 % *HCl*	$NaClO_2$, pH 4	18 % *NaOH*	24 % *KOH*
AV4	CH_3OH–$CHCl_3$	0.15 % *HCl*	$NaClO_2$, pH 4	18 % *NaOH*–0.26 M $NaBH_4$	24 % *KOH*-0.26 M $NaBH_4$
AV5	96% C_2H_5OH	0.15 % *HCl* / 50 mM *NaOH*-5 mM EDTA	-	4 M *NaOH*–0.26 M $NaBH_4$	24 % *KOH*-0.26 M $NaBH_4$

Note: No.: sample.
Source: The authors.

The oxidation with NaClO2 was considered (assays AV3 and AV5) because it acts specifically on the phenolic ring and produces changes in the phenolic nucleus of the lignin subunits and does not remove polysaccharides until at least 60 % delignification is achieved [16]. It also produces chlorine gas as an oxidizing agent, which is more stable than H2O2. A solution of NaBH4 was used in the AV5 assay, as it protects the hemicelluloses from depolymerization [17]. According to the research of Xiao et al. [14], there was no delignification in the AV4 assay when observing that only NaOH treatment was necessary for lignin and hemicellulose solubilization in alkaline media. After selecting the best hemicellulose extraction method with the CC 8592 variety, the process was replicated using the other varieties (CC 8475 and V 7151).

2.2.1. Extraction of liposolubles

Two methods were used to clean or dewax materials. One employed chloroform-methanol (AV1, AV2, AV3, and AV4), and the other used 96 % ethanol (AV5). Pigments, waxes, and chlorophyll were analyzed by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) in the supernatant that was extracted from each treatment. The GC-MS analysis was performed on a Shimadzu (Model QP 2010, Kyoto, Japan) system with a Restek XTI-5 capillary column (dimension: 30 m, ID: 0.25 mm, film thickness: 0.25 mm) programmed with a temperature at 240 °C with a 10 °C rise/min. The carrier gas was helium (99.999 %) at a constant flow of 1 mL/min. Electron impact mass spectra were taken at 70 eV with a scan speed of 0.5 scan/s from m/z 2−1024 amu. An ATAGO ABBE refractometer (Model NAR-3T, Washington, U.S.A.) was used to analyze °Brix in the supernatant obtained after dewaxing with 96 % ethanol.

In chloroform-methanol dewaxing, an amount of 10 g of sugarcane residue (CC 8592 variety) was mixed with 60 mL/g of chloroform-methanol (2:1 v/v) in a Pyrex Soxhlet extraction apparatus (Corning Incorporated,New York, U.S.A.) at 65 °C [16] to obtain total removal of cell wall liposoluble compounds (waxes, pigments, and chlorophyll). This process lasted 2–6 h until the solution became colorless. The insoluble residue was collected by filtration, washed with distilled water, and dried at 40 °C. The supernatant was obtained as mentioned previously in section 2.2.1 and analyzed by GC-MS and for °Brix.

In ethanol dewaxing, sugarcane residue was mixed with 96 % ethanol (5 mL/g residue) at boiling temperature with constant agitation for different periods of time (5, 10, or 15 min). Each sample was then filtered and washed with 80 % ethanol until the solution became colorless [17]. The insoluble residue was dried at 40 °C. As previously explained, the supernatant was analyzed by GC-MS and for °Brix, but the ethanol was first evaporated on a rotary evaporator and the volume adjusted to 500 mL with distilled water.

2.2.2. Pectin extraction

After the liposolubles were extracted, two treatments were applied in order to dissolve the protein, soluble lignin, and pectin present in the dewaxed residue in acidic or alkaline media. In pectin extraction in acidic medium the soluble pectin was extracted in acidic media with a Soxhlet apparatus. Amounts of 0.05 % or 0.05 M hydrochloric acid (HCl) (250 mL/g of dewaxed sample) were used and recirculated with a peristaltic pump at room temperature for 2 h according to the modified protocol of Höije et al. [18].

In pectin extraction in alkaline media, an EDTA (Ethylenediaminetetraacetic acid) solution was used in diluted alkaline media to selectively extract the pectin according to the protocol of Flórez [17]. An amount (400 mL) of 50 mM NaOH with 5 mM EDTA was added to the dewaxed sample. The solution was then mixed with constant agitation for 1 h at 4 °C. The process was repeated by adding a new solution of 50 mM NaOH and 5 mM EDTA.

2.2.3. Delignification of sample

Dewaxed residue without liposolubles or pectins was delignified in order to ensure removal of most of the lignin. Two extraction methods were used for this purpose. The first used H2O2 in alkaline media, and the second used NaClO2 in acidic media.

In the first method, hydrogen peroxide was used as a mild agent to remove the lignin in the alkaline media. It is generally accepted that in this condition, it is an unstable molecule that produces hydroxyl and superoxide anion radicals. These radicals are thought to cause lignin structure oxidation, which leads to its dissolution. For this purpose, a modified method of Sun et al. [5] was used. The dried material was extracted with 3 % H2O2 to pH 11.5 or 2 % H2O2 to pH 13 (200 mL) in a Soxhlet apparatus, recirculating the extractant with a peristaltic pump. The pH was adjusted with 18 % NaOH. The treatment was made at 75 °C for 12 h to allow major disruption between lignin-hemicellulose bonds.

In the second method, a solution of NaClO2 at pH 4 (3.52 g/10 g dried material in 200 mL of solution) adjusted with glacial acetic acid was used at 75 °C for 2 h and constant agitation. The phases were separated by filtration and the solid dried to constant weight at 45 °C. The NaClO2 lignin was defined as the difference between the initial and final weights [18].

2.2.4. Alkaline extraction of hemicellulose

Solutions of NaOH and KOH were used for hemicellulose extraction [19]. The treatment in alkaline media causes cell wall swelling and hydrogen bond disruption between cellulose and hemicellulose. It also can disrupt ether bonds among lignin and hemicellulose, and to break ester linkages between hydroxycinnamic acid and hemicellulose [20]. The dried material was sequentially extracted with both alkaline substances, as shown in Table 1. The NaBH4 was added to AV4 and AV5 treatments with the goal of avoiding hemicellulose depolymerization in alkaline media by peeling reactions from the reducing end groups [21] and facilitating easy release from cell wall [17,18]. Therefore, 33 mL of 10 %- or 24 %-KOH solutions with or without 0.26 M NaBH4 were added to 1 g of dried material and mixed for 18 h. In

addition, an alkaline solution of 4 M NaOH (50 mL/g dried material) with 0.26 M NaBH4 for 8 h, or 18 % NaOH (45 mL/g dried material) with or without 0.26 M NaBH4 for 18 h at room temperature was used [18]. Two different concentrations were tested because an increase in the concentration of alkalis can result in a major release of hemicellulose compactly embedded in the cell wall due to its propensity to reduce the molecular size of hemicellulosic polymers and disrupt the bonds between carbohydrates and lignin [22].

2.3. Purification and precipitation of hemicellulose

The hemicellulose was first concentrated by vacuum evaporation and then precipitated with ethanol. Therefore, each alkaline extract that was obtained (described in section 2.2.4) was slowly acidified to 5.5–6.5 pH with 6 M HCl to stop any further hydrolysis [18]. Each extract was then concentrated by rotary evaporation at 45 °C to obtain a volume ranging from 100–300 mL. At this time, all hemicellulose parts were precipitated and filtrated. Pellets of hemicellulose were washed with 0.05 % HCl and dried to constant weight at 40 °C. Furthermore, the humidity was analyzed by the NREL/TP-510-42621.34 protocol [12]. The pellets of hemicellulose were macerated and stored in test tubes with a screw cap at 4 °C for further assays.

Supernatant solutions were further concentrated by rotary evaporation at 45 °C to obtain approximately 30 mL and were mixed with 3–4 volumes of 96 % ethanol to precipitate the remaining hemicellulose. The process was repeated to obtain colorless ethanol and avoid the presence of lignin in the precipitate. Subsequently, the precipitate was re-dissolved by heating in deionized water and dialyzed for three days (Spectra/Por 2 membrane, MWCO: 12-14,000, Spectrum Laboratories, Inc., Houston, U.S.A.) to remove dissolved salts [18]. The remaining solution was dried to a constant weight at 40 °C. Humidity was then analyzed via the NREL/TP-510-42621.34 protocol [12]. The hemicellulose pellets were macerated and stored in test tubes with a screw cap at 4 °C for further assays.

2.4. Fourier transform infrared spectra

Fourier transform infrared (FTIR) spectra were obtained with a Shimadzu FTIR spectrophotometer (IR Affinity) at 400–4000 cm-1 at a 2-nm resolution using a potassium bromide (KBr) disk containing 1 % of finely ground hemicellulose (precipitated with ethanol).

3. Results and discussion

3.1. Selection of hemicellulose extraction method

3.1.1. Extraction of liposolubles, pectin, and lignin in the CC 8592 variety

Hemicellulose extraction of CC 8592 sugarcane residue was made by five different treatments. The main objective was to solubilize liposolubles, pectin, and lignin compounds in order to find the treatment that selectively isolated the hemicellulose in alkaline media with the most purity and quantity with the introduction of a protector agent in two of the treatments, as shown in Table 2. Comparison between different treatments is necessary because the yield and composition of hemicellulose extracted depend on the separation method used due to the complex structure of different polysaccharides. Experimental error was <2 % in all assays.

Based on GC-MS analysis (Fig. 1), which was done using the soluble fraction of dewaxed material, chloroform-methanol was found to be the most selective method to preferentially extract the waxes and pigments from sugarcane residues (waxes are normally deposited over the cell wall and are produced by plants to protect themselves from the effects of high and low temperatures, insect attack, and water loss [23]). It was found the light components of this fraction was mainly fatty acids including from the octanoic acid, the same as other autors [24], while treatment with ethanol dissolved liposolubles as well as sugars, since °Brix values increased from 0.7 in 5 min to 3.6 in 15 min. It is also probable that ethanol could have extracted other different compounds since it removed 18.9 % (dry matter) of the residue in 5 min (AV5, Table 2), whereas chloroform-methanol only removed 6.4–8.4 % of this material (AV1, AV2, AV3, and AV4).

In each extraction treatment, approximately 2.6–4.2 % of material (AV1, AV2, and AV3, Table 2) with 0.05 % HCl at room temperature was solubilized. According to FTIR analysis (data not shown), 20.9–27.3 % of this material corresponded to pectic substances. Also, during the acid-treatment process, the fiber was more susceptible to the posterior treatments by cellulose swelling [19] and/or some acid-labile linkages like arabinofuranosyl residue could be hydrolyzed [25]. These hemicellulosic polysaccharides are neutral side chains that attach to the rhamnose units in a galacturonan backbone (homogalacturonan or so-called smooth region) [26]. These extractions in acidic media depend on the HCl concentration.

Table 2.
Percentages of dry material (w/w) and hemicellulose extracted per treatment (CC 8592 variety).

	Dewax (% met)	***De*-pectinate (% met)**	**Hemicellulose delignificate and isolate (% met)**			**Cel (%)**
No.	**CH_3OH + $CHCl_3$ or C_2H_5OH**	**HCl or NaOH + EDTA**	**H_2O_2 or $NaClO_2$**	**KOH or NaOH**	**NaOH or KOH**	
AV1	6.8	3.3 (20.9)*	34.5[c] (27.2)**	14.4 (64.1)**	9.4 (87.7)**	31.7
AV2	8.4	2.6 (23.9)*	26.9[c] (39.7)**	22.8 (80.6)**	3.4 (66.0)**	35.9
AV3	7.8	4.2 (27.3)*	11.3[d] (-)	42.8 (78.1)**	3.5 (83.2)**	30.5
AV4	6.4	9.4 (27.1)*	5.2[d] (-)	46.8 (78.0)**	5.8 (90.9)**	26.4
AV5	18.9[a]	2.7 (5.5)*/5.4[b]	-	40.4 (56.9)**	5.1 (90.1)**	27.6

Note: No.: sample; % met: (g material extracted/g residue) × 100; Cel: (g cellulose/g residue) × 100. * (g pectin/g material extracted) × 100. ** (g hemicellulose/g material extracted) × 100. a. Dewaxing with ethanol. b. De-pectination with NaOH + EDTA. c. Delignification with H_2O_2. d. Delignification with $NaClO_2$.
Source: The authors.

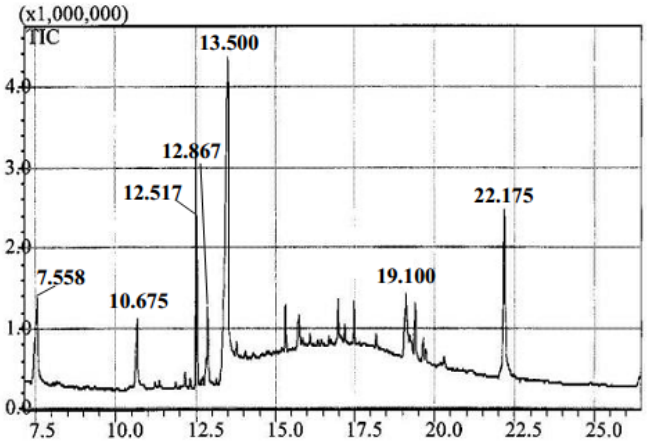


Figure 1. GC-MS chromatogram of extracted methanol-chloroform waxes. Source: The authors.

As a result, when the concentration increased to 0.15 % HCl, the extraction of these compounds incremented more than two-fold (AV4, Table 2). On the other hand, as shown in Table 2, the material extraction using 0.15 % HCl at room temperature in treatment AV5 was minor perhaps because the ethanol in the prior treatment of dewaxing solubilized a part of the soluble compounds in this acid. Also, in this treatment, the chelating agent (EDTA) probably enhanced the solubilization of non-esterified pectins by complexing calcium and magnesium ions from their free carboxylic acid groups, while esterified pectic compounds and phenolic acids were hydrolyzed by diluted alkalis (50 mM NaOH) [27]. In AV5 the delignification was achieved in the posterior treatment of alkalis in conjunction with hemicellulose extraction.

It was observed that treatment AV1 extracted 28.3 % more biomass than the AV2 treatment (Table 2). This difference in quantity of biomass is probably related to the lignin and hemicellulose extracted. A smaller quantity of hemicellulose was solubilized in the treatment at pH 13 and 2 % H2O2 (27.2 %) compared to the treatment at pH 11.5 and 3 % H2O2 (39.7 %). Two factors could influence these results: the peroxide concentration and the pH. If there is a large concentration of this oxidant in the solution, the reaction of the decomposition is more complete, and more hydroperoxy anions (HOO-) are produced, which react with more peroxide to produce hydroxyl radicals (HO.) and superoxide anions (O2-.) [28]. The hydroperoxyl and hydroxyl radicals are thought to cause the oxidation of lignin structures, which leads to the introduction of hydrophilic (carboxyl) groups, cleavage of some inter-unit bonds, and eventually, lignin and hemicelluloses dissolution [10]. Therefore, 3 % H2O2 could promote major breakage between lignin-hemicellulose linkages, favoring a major solubilization of the hemicellulose at this stage (Table 2). On the other hand, the extraction with the alkaline solution at a pH higher than 13 (AV1 treatment) could produce major breaks between ester linkages of the p-hydroxycinnamic acids and ether linkages between lignin and hemicellulose, which could promote a higher dissolution of the lignin [20]. Also, the cellulose could be solubilized due to the higher concentration of the peroxide radicals produced [10]. It was observed that increasing the temperature from 25 to 75 °C increased the delignification rate, which may be due to an elevated active radical production, resulting in increased breakage between lignin-hemicellulose linkages [28]. The yield of lignin dissolution did not increase beyond 12 h of treatment.

Assays of delignification with chlorite (AV3 and AV4 treatments, Table 2) extracted 11.3 and 5.16 % of the biomass, respectively. If this biomass is added to the one extracted by HCl in different concentrations, there is no significant difference between the total biomass extracted in the different treatments (around 15 %). As shown in Table 2, the material solubilized by chlorite was less than that extracted with peroxide. However, it was observed that this material corresponded to almost all lignin, since hemicellulose was not found. The lignin solubilized by chlorite in the treatments was low, but favored in the subsequent hemicellulose extraction treatment with 18 % NaOH and 24 % KOH, besides the quality of easily-removed hemicellulose was not affected. The effectiveness of chlorite to delignify was corroborated by Gómez [29], who found that NaClO2 removed 90 % of lignin of the same CC 8582 variety of sugarcane residue, whereas 57 % was removed with the peroxide. Similar results were found by Kumar et al. [30] using poplar and switchgrass, who reported removal of more than 90 % lignin in both species. However, the authors noted that selectivity for lignin and carbohydrate extraction with NaClO2-acetic acid and peracetic acid was substrate- and pretreatment-dependent. The ability to remove lignin from this extractant may be because in NaClO2 solution, the free functional groups in lignin are progressively oxidized to carboxylic acid or CO2, and the ester and ether bonds between lignin and cellulose and other polysaccharides are cleaved [31].

For the above reasons and perhaps because it is the established and most popular laboratory method for lignin removal from biomass [32], the delignification utilizing acid-NaClO2 was selected to delignify the other varieties of sugarcane residue (CC 8475 and V 7151).

3.2. Hemicellulose isolation in the CC 8592 variety

Fig. 2 shows the total material extracted from dewaxed and de-pectinated sugarcane residue for both delignification and alkaline media extraction methods (18 % or 4 M NaOH, 10 % or 24 % KOH) (light gray bar). The total material varied from 50.9–58.3 % and referred to lignin and hemicellulose mixtures, which depended on the method used. Specifically, as shown in the same figure of the total material extracted by the AV1 treatment, only 47.3 % corresponded to the hemicellulose fraction, while with the AV4 treatment the fraction was 72.4 %. This difference shows that NaClO2 was more selective in extracting lignin than hemicellulose, as shown in Table 3. Hemicellulose was completely solubilized in the last treatments by NaOH and KOH (AV3, AV4, and AV5). In these cases, NaOH extracted more hemicellulose than KOH. On the contrary, in addition to lignin, peroxide extracted around 34 % of hemicellulose (AV1 and AV2, Table 3).

When comparing the extracting power of aqueous alkalis, NaOH is slightly more effective than KOH for the removal of hemicellulose, corresponding to the increasing alkali strength from KOH to NaOH [33]. In general, these hemicellulose molecules were not extracted with total purity. Lignin and/or cellulose were detected in many fractions. For this reason, depending on the extraction method used, the quantity of hemicellulose obtained varied from 27.6–41.5 %.

With respect to the AV4 treatment, it was observed that 41.8 % of hemicellulose was recovered (Fig. 2). It is possible that NaBH4 in this treatment acted as a protective agent in the alkaline media to minimize degradation of the reducing end groups in hemicellulose, avoiding its depolymerization [21], obtaining more intact structures, and resulting in greater precipitation. Fig. 3 shows that following treatment with NaClO2, the hemicellulose obtained by concentration in the rotary evaporator (samples A-2, A-3, and A-4) and ethanol (samples B-2, B-3, and B-4) remained whiter in color than those extracted by peroxide and without delignification. In these samples, the pigmentation is probably due to the presence of lignin associated with hemicellulose through ether linkages [34, 35].

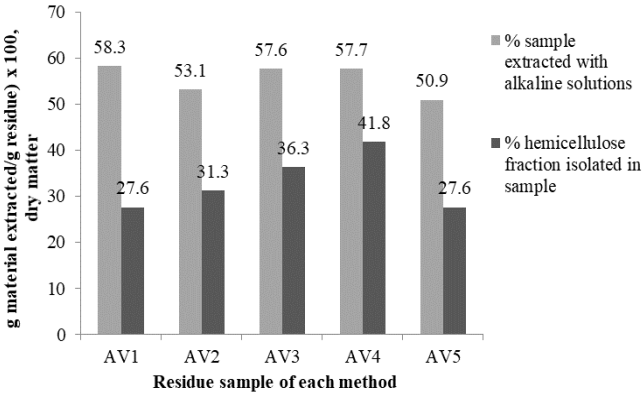


Figure 2. Total material and hemicellulose extracted through different treatments in the CC 8592 variety.
Source: The authors.

Table 3.
Percent of hemicellulose extracted in each treatment.

Treatment	(g hemicellulose extracted in each treatment/g total hemicellulose) × 100				
	AV1	AV2	AV3	AV4	AV5
Delignification	34.9	34.0	-	-	-
NaOH	30.8	7.2	92.0	87.4	83.4
KOH	34.3	58.8	8.0	12.6	16.6

Source: The authors.

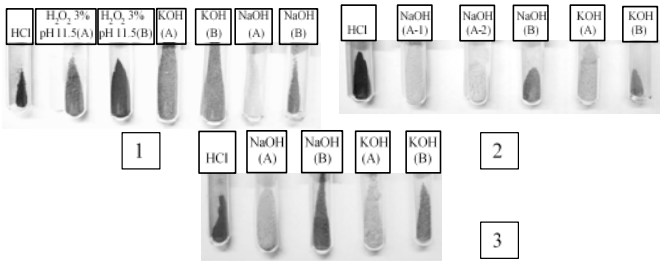


Figure 3. Hemicellulose from treatments of delignification with peroxide (1), chlorite (2), and NaOH in EDTA (3). The hemicelluloses in A were obtained by precipitation with a rotary evaporator concentration process. The hemicelluloses in B were obtained by precipitation with ethanol.
Source: The authors.

3.3. Fourier transform infrared spectra

The FTIR spectra of the hemicellulose solubilized during different treatments with peroxide, chlorite, and NaOH-EDTA are shown in Figs. 4 and 5. In general, these spectra show the characteristics of lignin and hemicellulose bands for all the fractions isolated. As seen in Fig. 4, the prominent band around 3400 cm-1 represents the hydroxyl stretching vibrations (OH-1) of the hemicellulose and water involved in hydrogen bonding [10]. The C–H stretching vibrations of the methyl and methylene groups give a signal between 2919–2920 cm-1, while bending bands were found up to 1377–1378 cm-1[36]. This signal was more intense in the hemicellulose precipitated with ethanol. The bands at 1639–1642 cm-1 are indicative of the bending mode of the absorbed water, since holocellulose usually has a strong affinity for this compound. Also, in the solid state, these macromolecules may have disordered structures that can be easily hydrated [33].

A small band from 1720–1745 cm-1 in the region of carbonyl stretching is due to the acetyl, uronic, and ferulic ester groups of the polysaccharides. The absence of this signal in all sprectra in this region demonstrated that alkali treatment under the conditions used completely cleaved the ester bonds from the hemicellulose and did not significantly attack or oxidize the glycosidic linkages and hydroxyl groups among them. An intensive band near at 1420 cm-1 corresponds to the C=O stretch of carboxylic anions (salt) for uronic acids in hemicellulose [28]. The occurrence of a rather weak band range in all spectra from 1500–1523 cm-1 suggests the presence of only small amounts of bound lignin in these hemicellulosic fractions. The fractions precipitated with ethanol showed a less intense band in this region, which also occurred with the fraction that was not delignified (AV5 treatment). The hemicellulose that was delignified with chlorite and concentrated by rotary evaporation did not show this band range. This means that the white color they exhibited signaled the absence of lignin.

In the anomeric region (700–950 cm-1), a small sharp band in all spectra at 894–896 cm-1 was observed, due to the C-1 group frequency or ring frequency, which is characteristic of β-glycosidic linkages within sugar units of hemicellulose [28], specifically the 1→4 glycosidic bond between xylopyranose (Xylp) units of the main xylan chains [37]. On the other hand, a small peak at 792 cm-1 is indicative

of α-anomers in side chains [10]. The broad band from 1000–1170 cm-1 was typical of arabinoxylans (AX) [36], since the presence of the arabinosyl side chains is shown by a high-intensity peak near 1030–1130 cm-1 in the spectrum of water-soluble hemicellulosic fractions and a relatively low intensity peak at 1161 cm-1 in the spectrum of holocellulose [33,37]. The AX has a linear backbone that is, in part, substituted by α-L-arabinofuranosa residues positioned either on O-3 or O-2 (mono-substitution) or on both O-2 and O-3 (di-substitution) of the Xylp monomer units; a characteristic of this compound is that the bulk of it can only be released by alkaline solutions [38].

3.4. Hemicellulose extracted from CC 8475 and V 7151 varieties

With respect to the previous results, the methods of using chloroform-methanol for dewaxing, HCl for de-pectination, and NaClO2 for delignification and NaOH and KOH were selected to isolate hemicellulose with NaBH4 as a protective agent in alkaline media. This procedure was replicated in CC 8475 and V 7151 varieties in order to extract hemicellulose, as shown in Table 4.

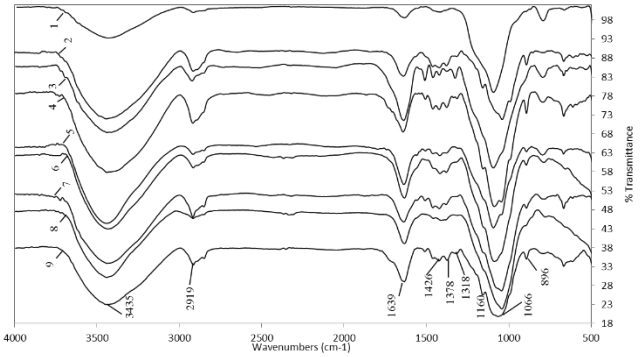


Figure 4. Hemicellulose extracted with NaOH. AV1, 2% NaOH, pH 13 (1); AV1, NaOH (2); AV2, 3% pH 11.5 (3); AV2, NaOH (4); AV3 (5); AV4 (6); AV5 (7); CC 8475 (8); and V 7151 (9).
Source: The authors.

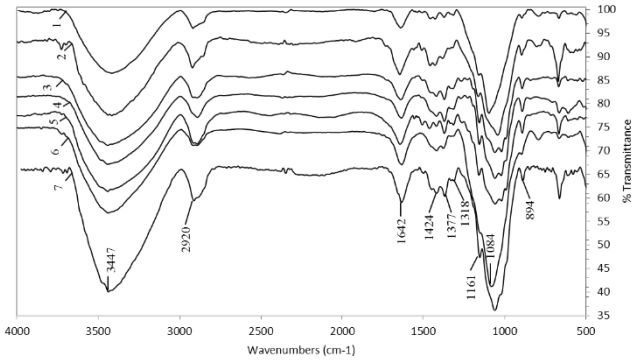


Figure 5. Hemicellulose extracted with KOH. AV1 (1), AV2 (2), AV3 (3), AV4 (4), AV5 (5), CC 8475 (6), and V 7151 (7).
Source: The authors.

Table 4.
Comparative results of hemicellulose extractions from CC 8475, V 7151, and CC 8592.

Variety	Dewaxing (% met)	De-pectination (% met)	Hemicellulose delignification and isolation (% met)			Cel (%)
	$CH_3OH + CHCl_3$	HCl	$NaClO_2$	NaOH	KOH	
CC 8475	6.4	8.2 (66.1)*	6.7 (-)	41.4 (30.2)**	7.1 (41.6)**	30.2
V 7151	7.5	6.5 (12.8)*	14.7 (-)	42.9 (92.6)**	3.6 (72.0)**	24.8
CC 8592	6.4	9.4 (27.1)*	5.2 (-)	46.8 (78.0)**	5.8 (90.9)**	26.4

Note: % met: (g material extracted/g residue) × 100; % Cel: (g cellulose/g residue) × 100. * (g pectin/g material extracted) × 100. ** (g hemicellulose/g material extracted) × 100.
Source: The authors.

The percentage of material extracted by different solvents is similar except for lignin that was solubilized with NaClO2 in the V 7151 variety, which was, on average, 145 % superior to the other two varieties. In the same residue, Gómez [29] did not find significant differences in the composition among the three varieties, whose residue was harvested at the same time with little time in the field. More representative change in the de-pectination process was observed in the CC 8475 variety due to all material being extracted in acidic media; 66.1 % corresponded to pectic substances. In the other two varieties, this material only represented 12.8 or 27.1 % of the total. It was found the NaClO2 did not extract hemicellulose in CC 8592. The total material extracted was similar in the three varieties, but the critical aspect in all the processes was the quantity of hemicellulose extracted in alkaline media with NaOH and KOH. The hemicellulose obtained was about half that of the other two varieties (Fig. 6).

More significant change occurred in the fraction precipitated with ethanol, which was only 4 % compared to 28 % isolated in the Venezuelan variety and CC 8592. In relation to the hemicellulose precipitated by the rotary evaporation process, the difference among the three varieties was only 3 %. The treatment with NaClO2 in CC 8475 likely could not delignify as effectively as the other two varieties mainly due to the strong interactions between hemicelluloses and lignins often hinders hemicellulose extraction [13], which were more recalcitrant due to their longer time in the field (> 30 days). It is well known abiotic and biotic stresses increase lignin content of grasses, [39] and lignification continues postharvest in plants [40]. Also, it is likely that ethanol was added for this reason, where a significant part of hemicellulose combined with large amount of lignin could not precipitate and remained in the solution without recovery. The FTIR analysis of the hemicellulose of CC 8475 and V 7151 showed similar spectra to CC 8592 (numbers 8 and 9, Fig. 4, and 6 and 7, Fig. 5) and, therefore, are the same type or structure. In this hemicellulose, no lignin was detected from 1507–1523 cm-1.

The amount of hemicellulose in the majority of plants ranges from 15–35 % (dry matter) [35], in sugarcane bagasse ranges between 25-28 % [41] and the CC8475, CC8592 y V7151 varieties of sugarcane residues showed hemicellulose concentrations between 20-34 %. In this research, it is possible to

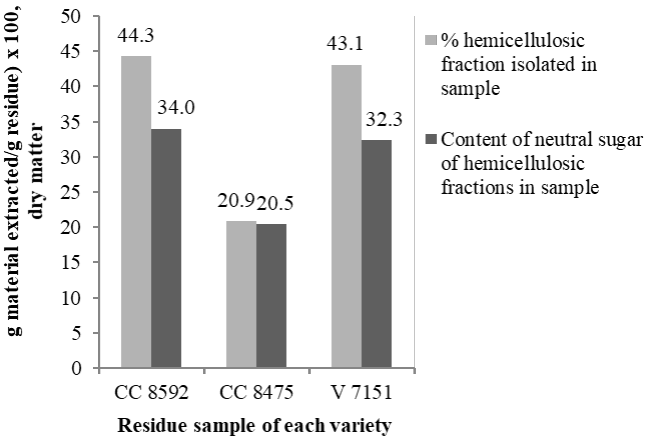


Figure 6. Yield and content of neutral sugar of hemicelluloses extracted in three varieties of sugarcane residue. Source: The authors.

find in many isolated hemicelluloses other polluting components, such as residual lignin, cellulose, and pectins (frequently linked to arabinans and galactans on their side chains [34]. In addition, some water can remain, which can be embedded among the branches of the hemicelluloses, making it difficult to release.

4. Conclusion

The dewaxing method with methanol-chloroform, de-pectination with 0.15% HCl, delignification with NaClO2, and extraction of hemicellulose with 18% NaOH and 24% KOH in 0.26 M NaBH4 resulted in the greatest yield of hemicellulose extraction among the five different methods tested in this study using the CC 8592 variety. This procedure was replicated using CC 8475 and V 5171 varieties. It was found that, on average, 41% of hemicellulose extraction was possible gravimetrically with exception of CC 8475. However, the extracted hemicellulose was not totally pure. Furthermore, arabinoxylans, small portions of lignin, cellulose, and pectin were extracted, as evidenced by FTIR analysis. Residue of the CC 8475 variety was collected 30 days after harvest, and, because of this, it was presumed that the lignin-hemicellulose complex was more recalcitrant and was therefore not recovered after precipitation with ethanol. It is believed that leaves and tops that remain in the field exposed to environmental factors for several weeks undergo cellular structure and composition alterations. Therefore, it would be interesting to perform studies to observe these variations on residue remaining in the field over time. It is also important to adjust hemicellulose extraction methods to use alkaline media to separate hemicellulose with greater purity.

Acknowledgements

Authors thank the funding sources for this project from the Universidad Autonoma de Occidente, Universidad del Valle, and the Ministry of Agriculture and Rural Development of Colombia, Project 3719-346 2007D-07.

References

[1] Farhat, W., Venditti, R., Quick, A., Taha, M., Mignard, N., Becquart, F., et al., Hemicellulose extraction and characterization for applications in paper coatings and adhesives. Ind Crops Prod [Online]. 107(January), 2017 [cited: July 24th of 2017]. Available at: DOI: 10.1016/j.indcrop.2017.05.055

[2] Sánchez, O.J. and Cardona, C., Trends in biotechnological production of fuel ethanol from different feedstocks. Bioresour Technol [Online]. 99(13), pp. 5270-5295, 2008 [cited: 2014 May 26]. Available at: https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/18158236. DOI: 10.1016/j.biortech.2007.11.013

[3] FAO. Food and agriculture organization of the United Nations statistics division [Online]. Trade/Crops Livest. Prod. 2016 [cited: 2017 Jul 24]. Available at: http://faostat3.fao.org/browse/T/TP/E

[4] Morais de Carvalho, D., Abad, A.M., Evtuguin, D.V., Colodette, J.L., Lindström, M.E., Vilaplana, F., et al., Isolation and characterization of acetylated glucuronoarabinoxylan from sugarcane bagasse and straw. Carbohydr Polym [Online]. 156, pp. 223-234, 2017 [cited 2017 Jul 24]. Available at: DOI: 10.1016/j.carbpol.2016.09.022

[5] Sun, R.C., Tomkinson J., Ma, P.L. and Liang, S.F., Comparative study of hemicelluloses from rice straw by alkali and hydrogen peroxide treatments. Carbohydr Polym [Online]. 42(2000), pp. 111-122, Jun, 2000. [cited: 2014 May 26]. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/ S0144861799001368

[6] Pérez, S. and Samain, D., Structure and engineering of celluloses. Adv Carbohydr Chem Biochem [Online]. 64, pp. 25-116, 2010 [cited 2014 Jun 3]. DOI: 10.1016/S0065-2318(10)64003-6

[7] Geng, Z.C., Sun, R.C., Sun, X.F. and Lu, Q., Comparative study of hemicelluloses released during two-stage treatments with acidic organosolv and alkaline peroxide from Caligonum monogoliacum and Tamarix spp. Polym Degrad Stab. [Online]. 80(2), pp. 315-325, 2003. [cited 2014 May 28]. Available at: DOI: 10.1016/S0141-3910(03)00015-6

[8] Escalante, H., Orduz, J., Zapata, H., Cardona, M.C. y Duarte, M., Atlas del potencial energético de la biomasa residual en Colombia. Bucaramanga, Universidad Industrial de Santander, UPME, Ideam, Colciencias, 2010, 163 P.

[9] Kang, L., Lee, Y.Y., Yoon, S.H., Smith, A.J. and Krishnagopalan, G.A., Ethanol production from the mixture of hemicellulose prehydrolysate and paper sludge. BioResources [Online]. 7(3), pp. 3607-3626, 2012. [cited 2014 May 28]. Available at: http://ojs.cnr.ncsu.edu/index.php/BioRes/article/view/BioRes_07_3_3607_Kang_LYSK_Ethanol_Hemicellulose_Paper_Sludge

[10] Sun, J.X., Sun, X.F., Sun, R.C. and Su, YQ., Fractional extraction and structural characterization of sugarcane bagasse hemicelluloses. Carbohydr Polym [Online]. 56(2), pp. 195-204, 2004. [cited 2014 May 23]. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/ S0144861704000384

[11] Brienzo, M., Siqueira, A.F. and Milagres, A.M., Search for optimum conditions of sugarcane bagasse hemicellulose extraction. Biochem Eng. J. [Online]. 46(2), pp. 199-204, 2009. [cited 2016 Mar 21]. Available at: DOI: 10.1016/j.bej.2009.05.012

[12] Sluiter, A., Hames, B., Hyman, D., Payne, C., Ruiz, R., Scarlata, C., et al., Determination of total solids in biomass and total dissolved solids in liquid process samples. Laboratory Analytical Procedure (LAP). Golden, CO; 2008.

[13] Nadia, H., Bchir, B., Blecker, C., Paquot, M. and Wathelet, B., Comparative study of alkaline extraction process of hemicelluloses from pear pomace. Biomass and Bioenergy [Online]. 61, 2014. [cited 2016 Mar 21]. Available at: DOI: 10.1016/j.biombioe.2013.12.022

[14] Xiao, B., Sun, X. and Sun, R., Chemical, structural, and thermal characterizations of alkali-soluble lignins and hemicelluloses, and cellulose from maize stems, rye straw, and rice straw. Polym Degrad Stab [Online]. 74(2), pp. 307-319, 2001. [cited 2014 May 23]. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/ S014139100100163X

[15] Doner, L.W. and Hicks, K.B., Isolation of hemicellulose from corn fiber by alkaline hydrogen peroxide extraction. Cereal Chem [Online]. 74(2), pp. 176-181, 1997. [cited 2014 Jun 3]. Available at: http://www.aaccnet.org/publications/cc/1997/March/Pages/74_2_176.aspx

[16] Collings, G.F., Yokoyama, M.T. and Bergen, W.G., Lignin as determined by oxidation with sodium chlorite and a comparison with permanganate lignin. J Dairy Sci Elsevier. [Online]. 61(8), pp. 1156-1160, 1978. [cited 2014 Jun 3]. Available at: http://www.journalofdairyscience.org/article/S0022-0302(78)83700-X/abstract

[17] Flórez L.M., Diseño de un complejo enzimático adaptado a la licuefacción de frutas tropicales. Aplicación a la pulpa de maracuyá. Tesis Dr., Universidad Politécnica de Valencia, España, 2002, pp. 113-114.

[18] Höije, A., Gröndahl, M., Tømmeraas, K. and Gatenholm, P., Isolation and characterization of physicochemical and material properties of arabinoxylans from barley husks. Carbohydr. Polym. [Online]. 61(3), pp. 266-275, 2005 [cited 2014 May 28]. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0144861705000706

[19] Casey, J.P., Ed.. Pulpa y papel. Química y tecnología química. México, D.F., Limusa, 1990. 32 P.

[20] Sun, R.C., Fang, J.M., Tomkinson, J., Geng, Z.C. and Liu, J.C., Fractional isolation, physico-chemical characterization and homogeneous esterification of hemicelluloses from fast-growing poplar wood. Carbohydr Polym. [Online]. 44(1), pp. 29-39, 2001 [cited 2014 May 29]. Available at: DOI: 10.1016/S0144-8617(00)00196-X

[21] Dumitriu, S., Polysaccharides. Structural diversity and functional versatility [Online]. 2nd ed. New York, Marcel Dekker, 2005 [cited 2014 Jun 3]. pp. 476, 484-485, 493, 1000-1001. Available at: http://books.google.com/books?id=kvUTPxPbkowC&pgis=1

[22] Sun, S.L., Wen, J.L., Ma, M.G., Sun, R.C., Successive alkali extraction and structural characterization of hemicelluloses from sweet sorghum stem. Carbohydr Polym [Online]. 92(2), pp. 2224-2231, 2013 [cited 2014 Jun 11]. Available at: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/23399281

[23] Methacanon, P., Chaikumpollert, O., Thavorniti, P. and Suchiva, K., Hemicellulosic polymer from Vetiver grass and its physicochemical properties. Carbohydr Polym [Online]. 54(3), pp. 335-342, 2003 [cited 2014 May 28]. Available at: DOI: 10.1016/S0144-8617(03)00182-6

[24] Attard, T.M., McElroy, C.R., Rezende, C., Polikarpov, I., Clark, J.H. and Hunt, A.J., Sugarcane waste as a valuable source of lipophilic molecules. Ind Crops Prod. [Online]. 76, pp. 95-103, 2015. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0926669015301618

[25] Voragen, A.C., Rolin, C., Marr, B.U., Challen, I., Riad, A., Lebbar, R., et al., Polysaccharides. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 6th ed. Weinheim, Germany, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2003, pp. 189-195.

[26] Guillotin, S.E., Loey, A., Boulenguer, P., Schols, H.A. and Voragen, A.G., Rapid HPLC method to screen pectins for heterogeneity in methyl-esterification and amidation. Food Hydrocoll. [Online]. 21, 2007. [cited 2014 Jun 3]. Available at: http://www.wageningenur.nl/fr/Publications.htm?publicationId=publication-way-333631363032. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2006.02.003

[27] Kurz, C., Carle, R. and Schieber, A., Characterisation of cell wall polysaccharide profiles of apricots (Prunus armeniaca L.), peaches (Prunus persica L.), and pumpkins (Cucurbita sp.) for the evaluation of fruit product authenticity. Food Chem. [Online]. 106(1), pp. 421-443, 2008. [cited 2014 May 28]. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0308814607005407

[28] Sun, R.C., Tomkinson, J., Wang, Y.X. and Xiao, B., Physico-chemical and structural characterization of hemicelluloses from wheat straw by alkaline peroxide extraction. Polymer [Online]. 41(7), pp. 2647-2656, 2000. [cited 2014 May 28]. Available at: DOI: 10.1016/S0032-3861(99)00436-X

[29] Gómez, C.H., Caracterización fisicoquímica de los polisacáridos presentes en los residuos de cosecha (hojas y cogollos) de tres variedades (CC 8475, CC 8592, V 7151) de caña de azúcar (Saccharum officinarum L.), Tesis MSc., Universidad del Valle, Cali, Colombia, 2010, pp. 32-52.

[30] Kumar, R., Hu, F., Hubbell, C., Ragauskas, A.J. and Wyman, C.E., Comparison of laboratory delignification methods, their selectivity, and impacts on physiochemical characteristics of cellulosic biomass. Bioresour Technol. [Online]. 130, pp. 372-381, 2013. [cited 2014 Jun 3]. Available at: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/23313683

[31] Zhou, Y., Stuart-Williams, H., Farquhar, G.D. and Hocart, C.H., The use of natural abundance stable isotopic ratios to indicate the presence of oxygen-containing chemical linkages between cellulose and lignin in plant cell walls. Phytochemistry. [Online]. 71(8–9), pp. 982-993, 2010. [cited 2014 May 28]. Available at: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/2036 982-932306. DOI: 10.1016/j.phytochem.2010.03.001

[32] Hubbell, C.A. and Ragauskas, A.J., Effect of acid-chlorite delignification on cellulose degree of polymerization. Bioresour Technol. [Online]. 101(19), pp. 7410-7415, 2010. [cited 2014 May 28]. Available at: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20471250. DOI: 10.1016/j.biortech.2010.04.029.

[33] Xu, F., Sun, J., Geng, Z., Liu, C., Ren, J., Sun, R., et al., Comparative study of water-soluble and alkali-soluble hemicelluloses from perennial ryegrass leaves (Lolium peree). Carbohydr Polym. [Online]. 67(1), pp. 56-65, 2007. [cited 2014 May 28]. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0144861706002141

[34] Carpita, N.C., Ralph, J. and McCann, M.C., Biochemistry and molecular biology of plants. [Online]. 2nd ed. Buchanan, B., Gruissem, W. and Jones, R., Eds. Rockville, John Wiley & Sons, 2015 [cited 2017 Jul 24]. pp. 51, 65, 73, 78. Available at: https://books.google.com.co/books?id=9YAZCgAAQBAJ&printsec=frontcover&hl=es#v=onepage&q&f=false

[35] Gírio, F.M., Fonseca, C., Carvalheiro, F., Duarte, L.C., Marques, S. and Bogel-Łukasik, R., Hemicelluloses for fuel ethanol. A review. Bioresour Technol. [Online]. 101(13), pp. 4775-4800. 2010. [cited 2014 May 24]. Available at: https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20171088. DOI: 10.1016/j.biortech.2010.01.

[36] Peng, Y. and Wu, S., The structural and thermal characteristics of wheat straw hemicellulose. J Anal Appl Pyrolysis, [Online]. 88(2), pp. 103-214, 2010. [cited 2014 May 28]. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0165237010000392

[37] Bian, J., Peng, F., Peng, X.P., Xu, F., Sun, R.C. and Kennedy, J.F., Isolation of hemicelluloses from sugarcane bagasse at different temperatures: Structure and properties. Carbohydr Polym. [Online]. 88(2), pp. 638-645, 2012 [cited 2014 May 23]. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0144861712000124. DOI: 10.1016/j.carbpol.2012.01.010

[38] Ebringerová, A. and Thomas, H., Hemicellulose. In: Heinze T, Ed.. Polysaccharides I Structure, Characterization and Use. Heidelberg, Springer Berlin Heidelberg, 2005, pp. 1–67.

[39] Frei, M., Lignin: Characterization of a multifaceted crop component. The Scientific World Journal. [Online]. 2013, ID 436517, 25 P. [cited 2014 May 23]. Available at: DOI: 10.1155/2013/436517

[40] Pesquet, E., Zhang, B., Gorzsás, A., Puhakainen, T., Serk, H., Escamez, S., et al., Non-Cell-autonomous postmortem lignification of tracheary elements in Zinnia elegans. Plant Cell [Online]. 25(4), pp. 1314-1328, 2013. Available at: https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/23572543. DOI: 10.1105/tpc.113.110593.

[41] Brienzo, M., Abud, Y., Ferreira, S., Corrales, R.C., Ferreira-leitão, V.S., Souza, W., et al., Characterization of anatomy, lignin distribution, and response to pretreatments of sugarcane culm node and internode. Ind Crop Prod. [Online]. 84, pp. 305-313, 2016. Available at: DOI: 10.1016/j.indcrop.2016.01.039.

L.M. Flórez-Pardo, is BSc. in Chemical Eng. from the Industrial University of Santander –UIS- (Colombia), Sp. in Food Science and Technology, Dr. in Chemical Sciences from the Polytechnic University of Valencia (Spain), PhD. in Harvest Residue re-use from the National Polytechnic Institute of Lorraine –INPL- in Nancy, France. Over twenty years of experience as professor and researcher in universities from Bogotá, Manizales and currently in the Universidad Autónoma de Occidente (Cali, Colombia). Winner of the First Prize of Food Science and Technology Research in 2003. Leader of numerous research projects with the Ministry of Agriculture and Rural Development, the Ecole Polytechnique fédérale de Lausanne -EPFL- (Switzerland) and the National Polytechnic Institute of Lorraine (France), in subjects related to second and third generation of biofuels. Vice-president of the Ibero-American Society for Bio refinery Development (SIADEB).
ORCID: 0000-0001-8779-8120

A. González-Córdoba, is PhD student from Universidad Nacional de Colombia, Bogota, Colombia (2017-07-31 to present), MSc. of Science in Chemistry from Universidad del Valle, Cali, Colombia (2011-02-01 to 2014-11-29), BSc. in Chemist from Universidad del Valle, Cali, Colombia (2004-08-01 to 2010-11-13). Teaching assistant from Universidad del Valle, Cali, Colombia (2011-08-01 to 2013-12-31), Researcher from Corporacion Colombiana de Investigación Agropecuaria: Palmira, Colombia (2013-10-08 to 2014-09-30).
ORCID: 0000-0001-9156-3594

J.E. López-Galán, is Dr. on Chemical Science from Colombia, PhD. in France, Sp in Spain, MSc. in France and BSc. in Chemical Eng. Currently professor at the School of Chemical Engineering at the Universidad del Valle, teaching subjects related to transport phenomena, unit operations and laboratories. Director of the Research Group on Biofuels and Biorefineries "GRUBIOC". Evaluator of research projects of the National Council of Science and Technology CONACYT in Mexico, the National Agency for Scientific and Technological Promotion of Argentina, the Ibero-American Science and Technology for Development (CYTED) of Spain and COLCIENCIAS Science, Technology and innovation from Colombia.
ORCID: 0000-0002-5829-1360



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Química e Ingeniería de Petróleos

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Química
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Petróleos
Doctorado en Ingeniería - Sistemas Energéticos

Mayor información:

E-mail: qcaypet_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5317

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

A new approach to multispectral image classification based on abstract complex cells

José Antonio Valero-Medina [a], Cristian David Dallos-Bustos [a] & Ivan Lizarazo [b]

[a] *Facultad de Ingeniería, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia. jvalero@udistrital.edu.co, cdallos@udistrital.edu.co*
[b] *Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia. ializarazos@unal.edu.co*

Received: July 6th, de 2017. Received in revised form: October 27th, 2017. Accepted: November 7th, 2017

Abstract
This article proposes a new approach to image classification using a space representation as a Cartesian complex free of ambiguity in the topological relationships of adjacency, connectivity, and boundary. The proposed model comprises six phases: (i) image conversion from the conventional space into the Cartesian complex space; (ii) greyscale transformation, (iii) super-pixel space production based on watershed transform, (iv) texture space production taking advantage of 1-dimensional interpixel elements, (v) classification using support vector machines and (vi) results quality assessment. Although global accuracy of the proposed classification improves accuracy of results obtained with a conventional representation of space, the confidence test shows that this improvement is not statistically significant. However, the new approach can be further strengthened by incorporating techniques to improve boundaries definition between watersheds based on probability values as well as using spaces of multiscale texture.

Keywords: classification; Cartesian complex; superpixel; topology; support vector machine.

Un nuevo enfoque para la clasificación de imágenes multiespectrales basado en complejos cartesianos

Resumen
El presente artículo propone un nuevo enfoque de clasificación de imágenes que utiliza como representación del espacio complejos cartesianos libre de ambigüedad en las relaciones topológicas. El enfoque propuesto comprende seis fases: (i) conversión de la imagen convencional al espacio de complejos cartesianos; (ii) transformación a niveles de grises; (iii) producción de super-píxeles basada en la transformada de cuenca; (iv) producción del espacio de textura aprovechando elementos inter-pixel 1-dimensionales; (v) clasificación mediante máquinas de soporte vectorial; y (vi) evaluación de los resultados. Aunque la exactitud temática de la clasificación a partir del nuevo enfoque mejora la exactitud obtenida con una representación convencional del espacio, la prueba de confianza indica que esa mejoría no es estadísticamente significativa. Sin embargo, el nuevo enfoque puede ser fortalecido en el futuro mediante la incorporación de técnicas para mejorar la definición de límites entre cuencas utilizando valores de probabilidad y espacios de textura multiescala.

Palabras clave: clasificación; complejo cartesiano; superpixel; topología; máquina de soporte vectorial.

1. Introducción

Las técnicas convencionales de clasificación de imágenes toman en cuenta únicamente la información espectral. En algunos casos, también se pueden incluir aspectos geométricos basados en fundamentos matemáticos estadísticos, probabilísticos y de grafos. Sin embargo, dichas técnicas no soportan de manera consistente las características topológicas que definen en dónde comienza y termina cada objeto. Algunos autores han propuesto soluciones a dicho problema usando la teoría de los grafos a partir de la definición de vecindarios 4-conectados y 8-conectados [1]. Desafortunadamente, estos grafos de vecindad presentan problemas o paradojas de conectividad entre sus elementos [2-5].

El propósito de este artículo es proponer un modelo de

How to cite: Valero-Medina, J.A., Dallos-Bustos, C.D. and Lizarazo, I., Un nuevo enfoque para la clasificación de imágenes multiespectrales basado en complejos cartesianos, DYNA, 85(204), pp. 28-37, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

clasificación de imágenes multiespectrales que toma en cuenta, además de los rasgos espectrales, los rasgos geométricos y de textura. Lo nuevo de este modelo es que usa una representación del espacio libre de las paradojas propias de la representación convencional basada únicamente en píxeles [5]. En contraste con esa representación convencional, Kovalevsky [6] propone el desarrollo de un espacio topológico localmente finito compuesto por complejos de células abstractas el cual permite definir las nociones de adyacencia, conectividad y frontera, proporcionando un espacio con la propiedad de separación T_0 [7] libre de paradojas. Así mismo, Khalimsky [8] propone un espacio conectado ordenado topológico (COTS por su sigla en inglés) demostrado por Kiselman [2]; sin embargo, la ausencia de dimensión en la representación de cada uno de los elementos del conjunto y su relación directa de este concepto en la definición de adyacencia no permite la definición de vecindarios entre elementos que tienen diferentes dimensiones.

Este artículo presenta un modelo para clasificación de imágenes usando complejos de células abstractas con base en complejos cartesianos y compara su desempeño con un método de clasificación de imagen que emplea la representación convencional del espacio basada en píxeles. El modelo propuesto se compone de seis fases. La primera fase corresponde al constructor del espacio complejo cartesiano (CC), en el cual se transforma la imagen de entrada al espacio de los complejos cartesianos (Fig. 1). En la segunda fase, el espacio CC multiespectral se convierte a uno monocromático a partir de la ponderación de cada una de las bandas de la imagen en función de su matriz de varianza-covarianza.

En la tercera fase, usando como base el espacio monocromático, se realiza la detección de los bordes de los objetos a partir del gradiente de Sobel [9], pero centrado en elementos interpíxel 1-dimensionales. El trazado de los límites de los super-píxeles se obtiene a partir del gradiente anterior, aplicando la transformada de cuenca en el espacio de los complejos cartesianos también sobre los elementos interpíxel 1-dimensionales (células-1D).

La cuarta fase, correspondiente a la generación del espacio de textura, busca obtener un espacio complejo cartesiano cuyas células-1D contengan información asociada a la textura del objeto que representa en la imagen, para lo cual se propone una serie de filtros orientados [10] ejecutados sobre las células-1D disponibles [11]. En la quinta fase se realiza la clasificación de los super-píxeles usando máquinas de soporte vectorial [12] (SVM por su sigla en inglés), tomando en cuenta además de la respuesta espectral también la textura. Finalmente, en la sexta fase, se realiza la evaluación de exactitud de la clasificación obtenida usando el nuevo enfoque.

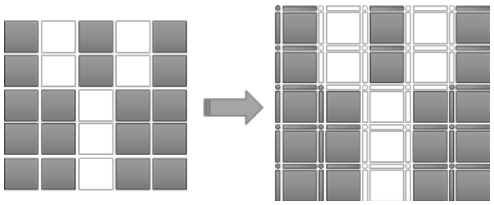


Figura 1. Espacio complejo cartesiano obtenido a partir de la imagen en blanco y negro. Los elementos interpíxel (derecha) 0-dimensionales son representados como puntos y los 1-dimensionales como segmentos de línea horizontal o vertical.
Fuente: Elaborado por los autores.

En [13] se presenta un trabajo similar en el cual se realiza una comparación de los resultados de la clasificación basada en píxeles con respecto a la basada en super-píxeles usando, en los dos casos, como representación del espacio a los complejos cartesianos. Sin embargo, en dicho trabajo, la estimación de la probabilidad de límite con base en el cálculo del gradiente multiespectral y de textura implementado no proporciona una mejora significativa en los resultados. Adicionalmente, para la obtención de la imagen de niveles de gris se realiza una suma promediada.

En contraste, en el presente artículo se realiza la comparación de los resultados entre una clasificación obtenida usando una representación convencional del espacio y otra clasificación basada en un espacio representado como un complejo cartesiano que toma como base el gradiente de Sobel [14-16]. Adicionalmente, para la obtención de la imagen de niveles de gris se introduce un procedimiento basado en la matriz de varianza/covarianza de la imagen multiespectral.

El resto del artículo está organizado de la siguiente manera. En la sección 2 se presenta la descripción de los datos experimentales, en la sección 3 se describe el método utilizado, en la sección 4 se presentan y discuten los resultados y en la sección 5 se presentan las conclusiones.

2. Datos

En este trabajo se usó como insumo principal una imagen proporcionada por la Sociedad Internacional de Fotogrametría y Percepción Remota (ISPRS por su sigla en inglés) [17] correspondiente a la localidad de Vaihingen (Alemania), que también se usó en [13]. La imagen es una ortofoto aérea, con resolución espacial de 8 cm y resolución radiométrica de 8 bits, tomada en el año 2008, que incluye las bandas correspondientes al infrarrojo cercano, rojo y verde. En los experimentos de este estudio, a partir de la hoja 11 del conjunto de datos, se seleccionaron dos sub ventanas de tamaño de 1000 x 1000 no sobrepuestas, correspondientes a las coordenadas de archivo (c=400, f=400) a (c=1400, f=1400) para la creación del modelo y (c=893, f=1400) a (c=1983, f=2400) para evaluación de exactitud (Fig. 2).



Figura 2. Imágenes usadas en la creación del modelo (izquierda) y validación (derecha). Las escenas corresponden a una composición en falso color infrarrojo. 1 cm en la imagen equivale a 20 m en el terreno.
Fuente: Elaborado por los autores.

La clasificación de referencia, realizada manualmente por ISPRS, comprende las siguientes categorías de cobertura del suelo urbano: Edificio, Vegetación Baja, Árbol, Carro y Superficie Impermeable.

3. Método

Teniendo en cuenta que el propósito principal de esta investigación es evaluar el aporte de rasgos geométricos extraídos a partir de relaciones topológicas no ambiguas proporcionadas por los complejos cartesianos, el modelo de clasificación propuesto toma como línea base un flujo de procesos (Fig. 3) que simplifica el trabajo expuesto en [10].

En la primera fase del modelo, la imagen convencional de entrada es convertida al espacio de representación de los complejos cartesianos empleando la implementación propuesta en [11]. En la segunda fase, se lleva a cabo la transformación de la imagen a niveles de gris involucrando todas las bandas espectrales del espacio original para obtener el valor único radiométrico que es empleado en las fases siguientes. La tercera fase de generación del espacio de cuencas tiene como propósito resaltar los bordes de los elementos inmersos en la imagen procesada y a partir de ellos obtener los límites de cuenca; para lograr este objetivo, en el modelo se plantea un bloque de procesamiento sobre el espacio complejo cartesiano de niveles de grises basado en el gradiente de Sobel [9] empleando el procedimiento descrito en [13]. Posteriormente, se procede a calcular el espacio de cuencas, cuyo objetivo final es la obtención de los polígonos que definen a los super-píxeles de la imagen. La implementación de la transformada de cuenca en el espacio de los complejos cartesianos se realiza a partir de las células-1D las cuales se someten a un proceso de expansión con base en un vecindario libre de paradojas de conexión y cuyo resultado final traza límites de cuenca no ambiguos aprovechando la topología T_0 disponible en los espacios localmente finitos proporcionados por los complejos cartesianos.

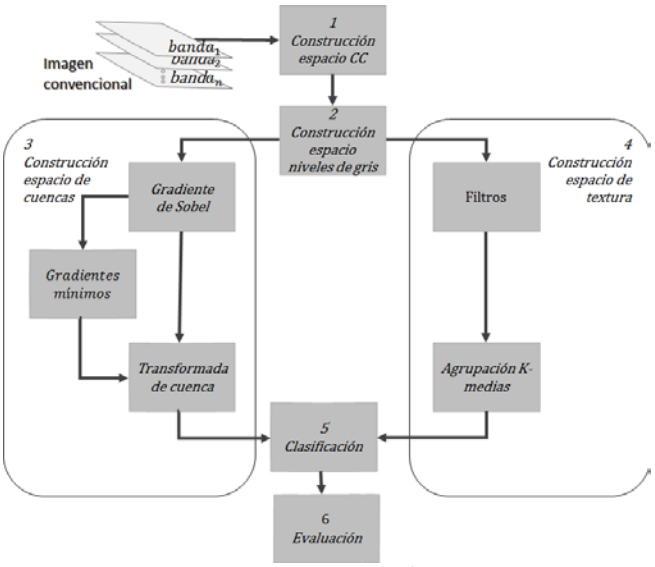


Figura 3. Flujo de procesos de la clasificación basada en complejos de células abstractas.
Fuente: Elaborado por los autores.

La cuarta fase se encarga de la generación del espacio de textura obteniendo como resultado un espacio complejo cartesiano cuyas células unidimensionales contienen la información asociada a la textura del objeto que representa en la imagen. Esto se realiza a partir de la aplicación inicial de una serie de filtros orientados sobre las células-1D del espacio complejo cartesiano de la manera propuesta en [10], pero sobre elementos inter-pixel unidimensionales como se propone en [11]. El propósito de esta fase es permitir que la máquina clasificadora incluya en sus criterios de clasificación no solo la respuesta espectral del espacio original, sino, además la posible pertenencia de ese elemento a una misma textura. En la fase 5 se lleva a cabo la clasificación de la imagen usando la técnica SVM y, en la fase 6, se realiza la evaluación de exactitud de la clasificación obtenida.

A continuación, en las secciones 3.1 a 3.4, se especifican los aportes realizados por la presente investigación sobre el espacio complejo cartesiano para las fases 1, 2, 3 y 4. En la sección 3.5 se incluye una descripción de la forma en que las capas de super-pixeles y de textura fueron generadas a partir de la representación convencional de la imagen. En la sección 3.6, se describe la fase de clasificación mientras que la fase de evaluación es descrita en la sección 3.7.

3.1. Construcción del espacio complejo cartesiano

La representación de la imagen se realizó mediante un complejo cartesiano bidimensional. Cada píxel de la representación convencional del espacio corresponde con una célula-2D. Para la definición de los elementos interpíxel, células-0D y células-1D, se adoptó lo establecido en [6] realizando una implementación propia de la regla de asignación *EquNaLi*. En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** se muestra la asignación de etiqueta para una imagen sintética en blanco y negro (255 y 0 respectivamente) de 5 X 5.

3.2. Construcción del espacio de niveles de grises

Para la obtención de la imagen de niveles de gris se realizó la combinación de las bandas espectrales originales cuantificando el nivel de información aportado por cada una con base en la *matriz de varianza / covarianza* [12]. El aporte o peso de cada banda l se determina por medio de la ec. (1).

$$W_l = \frac{\sum_{q=1}^{\kappa} C_{q,l}}{\sum_{q=1}^{\kappa}\sum_{l=1}^{\kappa} C_{q,l}} \text{ para todo } l = 1, \dots, \kappa \qquad \textbf{(1)}$$

en donde $C_{q,l}$ corresponde a cada elemento de la matriz de *varianza / covarianza* y κ al número de bandas de la imagen.

A partir del vector de pesos W_l se procede a calcular el valor de nivel de gris de cada célula-2D del espacio complejo cartesiano, para lo cual se aplica la ec. (2).

$$\psi^*_{i,j} = \left[\sum_{l=1}^{\kappa}\left(\psi_{l_{i,j}} W_l\right)\right] \qquad \textbf{(2)}$$

en donde ψ es el vector de valores asociado a la célula-2D con coordenada (i, j) en el espacio complejo cartesiano inicial.

3.3. Construcción del espacio de cuencas

Para obtener los polígonos que describen las formas de los objetos presentes en la imagen se implementó y aplicó la transformada de cuenca al espacio complejo cartesiano. La detección de bordes se realizó mediante la técnica de Sobel [14-16] aplicando a cada célula-1D del espacio de niveles de gris la función de filtro $filter_{Sobel}$ con base en la respectiva máscara de filtrado según la orientación de la célula-1D [13]. La imagen de gradiente [16] final fue calculada para cada célula-2D de acuerdo con la ec. (3) a partir del valor de *Sobel* de las dos células-1D disponibles (una vertical y la otra horizontal) en el espacio para una célula-2D, con base en la relación de dependencia de células propias interpíxel [6,18].

$$G = \sqrt{Sobel_{vertical}{}^2 + Sobel_{horizontal}{}^2} \qquad (3)$$

Para la ejecución del algoritmo de cuenca geográfica se utilizó como elemento central una célula-1D en la definición de un nuevo vecindario. La célula1D central se conecta con sus 6 células-1D vecinas más cercanas a través de las células-0D que la limitan, tal y como se muestra en la Fig. 4, en la cual, cada segmento de recta corresponde a una célula-1D y cada punto a una célula-0D que permite conectar a la célula-1D central con sus seis células-1D vecinas.

Debido a que la transformada de cuenca se basa en el fenómeno físico de inundación, es posible que se presente el inconveniente de meseta o planicie de la imagen [19] (Fig. 5). Para tratar con este problema se desarrolló un método simplificado aplicando el adelgazamiento en función de la distancia más corta del centro del borde hacia la cuenca más cercana. La Fig. 6 ilustra este proceso, en donde d_1 y d_2 representan las distancias desde el centro de borde hasta la cuenca A y B respectivamente.

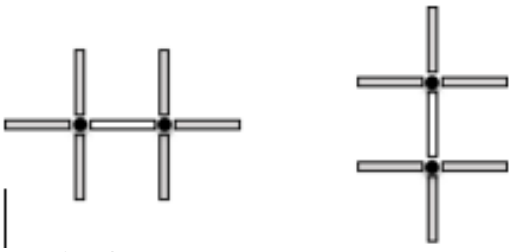


Figura 4. Definición del vecindario horizontal (izquierda) y vertical (derecha) centrado en una célula-1D.
Fuente: Elaborado por los autores.

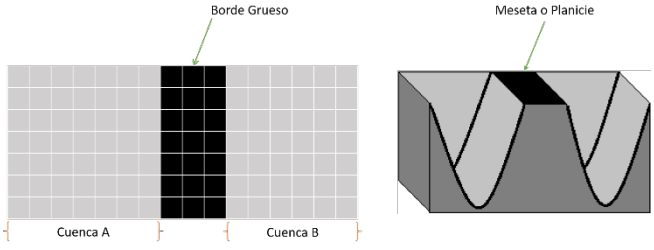


Figura 5. Meseta de cuenca en representación digital (izquierda) y en relieve (derecha).
Fuente: Elaborado por los autores.

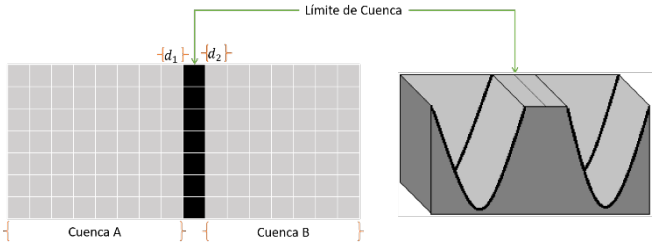


Figura 6. Planicie límite adelgazada en su representación digital (izquierda) y de relieve (derecha).
Fuente: Elaborado por los autores.

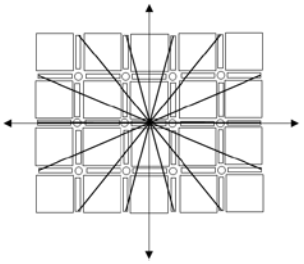


Figura 7. Sección digital con una célula-1D horizontal como elemento central del conjunto con las orientaciones para las máscaras de filtrado.
Fuente: Elaborado por los autores.

3.4. Construcción del espacio de textura

3.4.1. Filtrado

Tomando como base el espacio complejo cartesiano de niveles de gris, el espacio filtrado tiene como propósito resaltar los contornos o límites de los objetos presentes en la escena. Para ello, tomando en cuenta la definición de segmento de línea recta digital (DSS por su sigla en inglés) [18] y lo propuesto en [11], se definieron 7 orientaciones, cada una con dos direcciones sobre un semiplano digital, con lo cual se obtienen 14 máscaras de filtrado. Dado que la curva de contorno está definida sobre las células-1D, el elemento central de nuestra máscara digital será una célula-1D. Debido a que la escena digitalizada puede presentar ruido, se aplica al espacio de niveles de gris una máscara de supresión de ruido con el propósito de eliminar los pequeños elementos que puedan dar lugar a falsas texturas con base en la ec. (4).

$$\psi^{**}{}_{i,j} = \left[filter_{Gaussian}\left(\psi^{*}{}_{i,j}\right)\right] \qquad \mathbf{(4)}$$

en donde ψ^* es el valor de nivel de gris de la célula-2D con coordenada (i,j) en el espacio complejo cartesiano inicial.

La Fig. 7 muestra las 14 orientaciones desde la célula-1D central que se buscan resolver por medio de segmentos DSS dentro de la máscara.

Para obtener cada una de las orientaciones requeridas, la máscara es dividida en dos partes simétricas a la célula-1D central para cada una de las dos orientaciones a lo largo de la DSS que cruza la célula-1D central. La información radiométrica se encuentra en cada célula-2D del espacio complejo cartesiano,

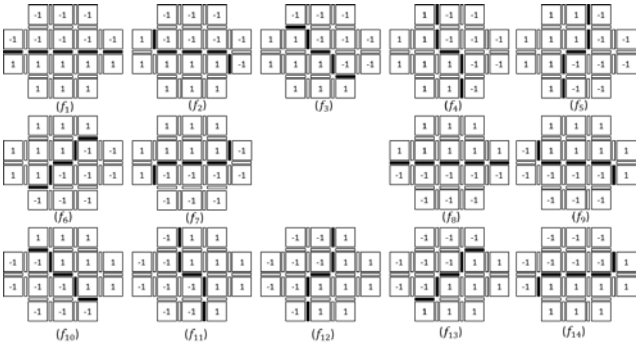


Figura 8. Definición de núcleos de filtrado balanceado incluyendo ambas orientaciones de cada DSS.
Fuente: Elaborado por los autores.

razón por la cual, la matriz de filtrado estará compuesta por cada célula-2D del vecindario más pequeño de la célula-1D sobre la cual se define cada DSS. La Fig. 8 muestra la asignación de los coeficientes de un núcleo balanceado en una matriz de filtrado direccional.

Una vez definidas las máscaras de filtrado, se construyó el espacio filtrado, formado por el conjunto de células-1D cuyo vector de valores corresponde al resultado de la máscara de filtrado aplicada al espacio de niveles de gris de acuerdo con la ec. (5).

$$\psi^{***}{}_{i,j} = \left[filter_{DSS_\phi}\left(\psi^{**}{}_{i,j}\right)\right], \quad \phi = (f_1, f_2, \ldots, f_{14}) \tag{5}$$

Donde $filter_{DSS_\phi}$ corresponde a la función de filtrado direccional en la dirección ϕ.

3.4.2. Espacio de Textura

Aplicando la estrategia propuesta en [20], la cual consiste en detectar, localizar y agrupar elementos que se repiten en una imagen, se aplicó al espacio filtrado la técnica de agrupamiento k-medias [21], cuyo algoritmo, destinado a situaciones en las cuales todas las variables son de tipo cuantitativo, utiliza el cálculo de la distancia cuadrática euclidiana entre cada una de las muestras del conjunto. El resultado final son los vectores de valores más característicos del espacio filtrado que representan las clases de textura en la imagen [20], lo cual da lugar a un nuevo espacio que tiene por nombre espacio de textura. Para la implementación del algoritmo de k-medias, los centros de clase inicial fueron distribuidos a lo largo de los valores máximos y mínimos de cada valor del vector de valores asociado a las células-1D. Se definieron tantos centros como el número de grupos dado.

El propósito de distribuir los centroides iniciales a lo largo de un vector entre los valores más distantes, fue propiciar una mayor convergencia a lo largo de las iteraciones del algoritmo de k-medias. Con el conjunto de centroides iniciales $\varsigma = (\varsigma_1, \ldots, \varsigma_\xi)$ definido, se procedió al proceso iterativo de cálculo de distancias y a la reasignación de centros de grupo y membresía a los mismos.

3.5. Modelo en el espacio convencional de píxeles

Con el propósito de permitir una evaluación comparable de los resultados, el flujo de procesos mostrado en la Fig. 3 se implementó también para la representación convencional de la imagen aplicando procedimientos equivalentes usando Matlab®. Para la construcción del espacio de textura se diseñaron máscaras de filtrado de 5×5 píxeles (Fig. 9) con un número de direcciones cercano a las definidas para el espacio de los complejos cartesianos aplicando el principio de filtro direccional derivativo [22]. La construcción del *espacio de textura convencional* se realizó también por agrupamiento *k*-medias pero tomando como elemento de procesamiento el píxel central.

Para la construcción del espacio de cuencas (super-píxeles) sobre la representación del espacio convencional se aplicaron las dos máscaras de Sobel seguida del cálculo del respectivo gradiente, finalizando con la ejecución de la transformada de cuenca en la herramienta Matlab®, la cual traza los límites de cuencas sobre píxeles que quedan sin valor de etiqueta de cuenca, por lo que se les asigna la moda sobre una máscara de 3×3.

3.6. Espacio de clasificación complejo cartesiano

Para la clasificación de la imagen se usó la técnica SVM [12] tomando las bandas espectrales y el canal de textura como variables predictoras y los super-píxeles obtenidos en la construcción del espacio de cuencas como unidad de clasificación. Para el cálculo del descriptor de super-píxel tanto a nivel radiométrico como de textura se tomó el vector de valores medios del grupo de píxeles (células-2D) respectivo (Fig. 10).

La fase de clasificación de imagen se desarrolló de acuerdo con las etapas expuestas en la Fig. 11, las cuales son empleadas en cada uno de los escenarios que se describen en la sección 3.7.

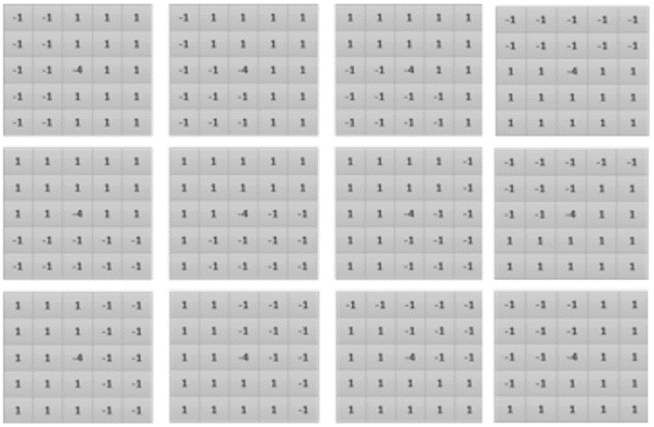


Figura 9. Máscaras de filtrado direccional sobre el espacio de representación convencional.
Fuente: Elaborado por los autores.

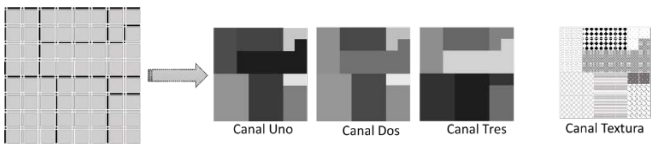


Figura 10. Mapeo de polígonos definidos por el espacio de cuencas a super-píxeles.
Fuente: Elaborado por los autores.

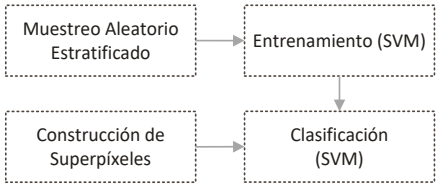


Figura 11. Etapas del proceso de clasificación.
Fuente: Elaborado por los autores.

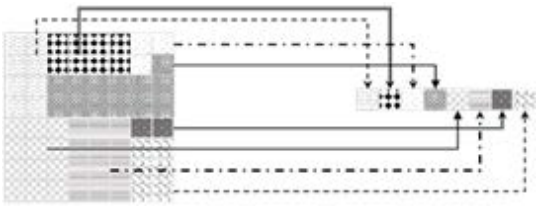


Figura 12. Transformación del espacio bidimensional (super-píxeles) al unidimensional.
Fuente: Elaborado por los autores.

El muestreo aleatorio estratificado se realizó sobre los píxeles de la sub-ventana de entrenamiento y no con base en super-píxeles ya que, por un lado, ésta corresponde a un área distinta de la sub-ventana empleada durante la fase de clasificación; y por otro, en el entrenamiento solo se considera el espacio de rasgos. El espacio bidimensional de super-píxeles se transforma a un espacio unidimensional (Fig. 12) de forma que cada uno de los grupos de píxeles correspondientes a un super-píxel es caracterizado por una única unidad de clasificación. El espacio unidimensional expuesto en la Fig. 12 se convierte en la entrada a la máquina SVM clasificadora. Una vez finaliza la clasificación, se realiza el proceso inverso, recuperando el espacio bidimensional original.

3.7. Evaluación

El flujo de procesos presentado en la Fig. 3 fue aplicado al conjunto de datos descrito en la sección 2 tanto para la imagen en su representación convencional de píxeles como para su representación como complejo cartesiano. Durante la fase de clasificación y con el propósito de facilitar la validación del modelo, se diseñaron 3 escenarios en cada uno de los cuales se usaron super-píxeles como unidades a clasificar. La principal razón para ello es la reducción en el número de elementos del espacio que se deben clasificar.

En el escenario No. 1 (Fig. 13) se realizó la clasificación tomando como variables explicativas únicamente las 3 bandas espectrales disponibles. Este escenario permite valorar el efecto que tienen los super-píxeles trazados en el espacio complejo cartesiano basado en las nociones topológicas para los espacios T_0, en comparación con los super-píxeles trazados a partir del espacio de representación convencional el cual no incluye estas nociones topológicas.

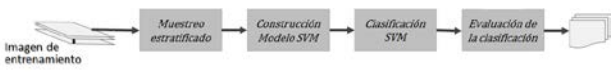


Figura 13. Escenario de clasificación No.1 tomando como variables explicativas únicamente los rasgos espectrales.
Fuente: Elaborado por los autores.



Figura 14. Escenario de clasificación No. 2 tomando como variable explicativa únicamente el rasgo de textura.
Fuente: Elaborado por los autores.



Figura 15. Escenario de clasificación No. 3 tomando como variables explicativas los rasgos espectrales y la banda de textura.
Fuente: Elaborado por los autores.

En el escenario No. 2 (Fig. 14) se realizó la clasificación tomando como variable explicativa únicamente la imagen de textura. Este escenario permite evaluar la calidad de la capa de textura obtenida en el espacio de los complejos cartesianos en comparación con la obtenida en el espacio de representación convencional.

Finalmente, en el escenario No. 3 (Fig. 15) se realizó la clasificación tomando como variables explicativas las 3 bandas espectrales disponibles y la imagen de textura. Este escenario permite evaluar el aporte que entrega la capa de textura a la clasificación al ser incluida como banda adicional.

En la evaluación de resultados se hizo uso de métricas que tradicionalmente se usan para medir la exactitud temática en estudios de clasificación basados en píxeles, tales como la matriz de confusión, el índice kappa [12] y los intervalos de confianza [23] asociados. Es importante mencionar que existen métricas de exactitud basadas en objetos que pueden ser apropiadas en aplicaciones específicas [24].

4. Resultados y discusión

La Fig. 16 muestra la clasificación de referencia que se utilizó tanto para entrenar la máquina SVM (a la izquierda) como para evaluar la exactitud temática de la clasificación realizada (a la derecha). En la Tabla 1 se expone la codificación de color usada por cada clase.

El número de cuencas trazadas en la representación convencional fue de 20134 mientras que en el espacio representado como complejo cartesiano fue de 16618, lo cual redujo el tiempo de ejecución de la clasificación que fue 93.69 segundos en el espacio convencional y 82,82 segundos en el complejo cartesiano para el caso del escenario No. 1.

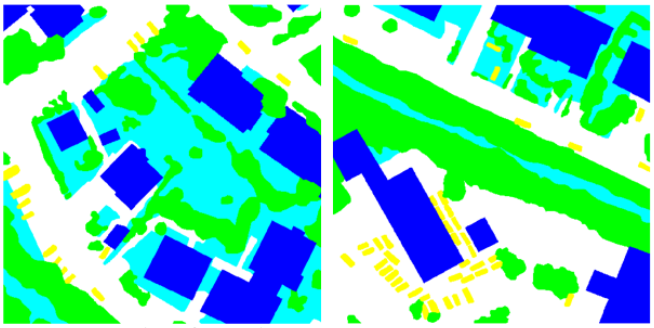


Figura 16. Clasificación de referencia para entrenamiento (izquierda) y para validación (derecha).
Fuente: Elaborado por los autores.

Tabla 1.
Clases y color asignado en la capa de verdad de terreno.

Clase	Color
Edificio	Azul Oscuro
Superficie impermeable	Blanco
Árbol	Verde
Vegetación Baja	Azul Claro
Carro	Amarillo

Fuente: Elaborado por los autores.

En la Fig. 17 se muestra el resultado de la clasificación para los super-píxeles tanto en el espacio de representación convencional (izquierda) como en el complejo cartesiano (derecha). El escenario No. 1, basado únicamente en los rasgos espectrales, se muestra en la primera fila. El escenario No. 2, basado únicamente en el rasgo de textura, está en la segunda fila. El escenario No. 3, basado en ambos tipos de rasgos, está en la tercera fila.

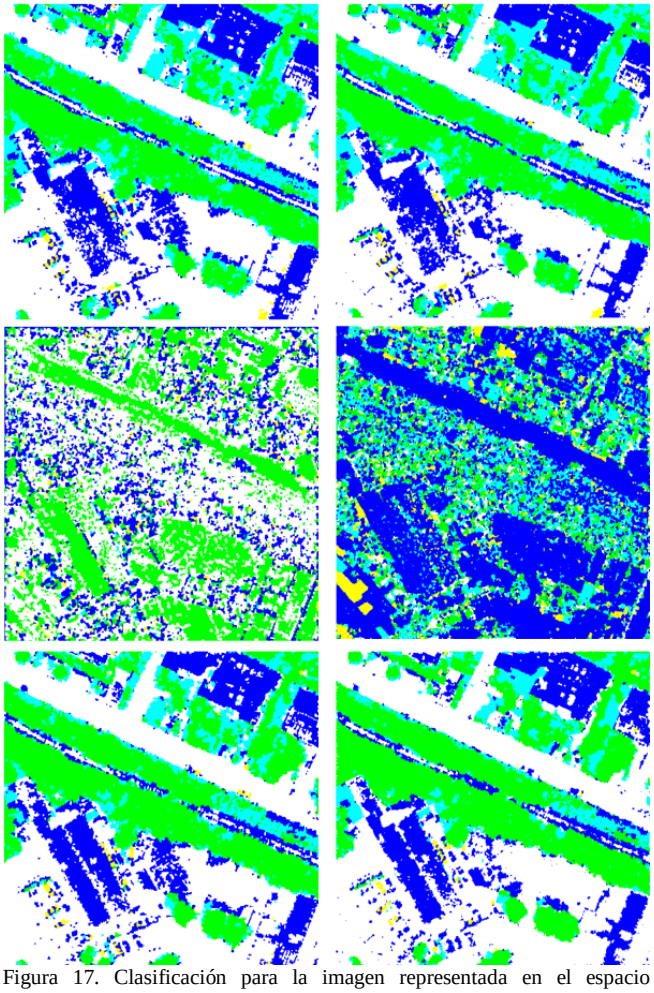


Figura 17. Clasificación para la imagen representada en el espacio convencional (izquierda) y en el espacio de complejo cartesiano (derecha). En la primera fila se presenta el resultado con base en los rasgos espectrales, en la segunda fila con base en el rasgo de textura y en la última fila con base en ambos rasgos.
Fuente: Elaborado por los autores.

La Fig. 18 presenta, para la representación de la imagen en el espacio convencional y para la representación de la imagen como complejo cartesiano, la proporción en la cual cada clase de referencia fue clasificada correctamente mediante la técnica SVM y la proporción en la cual fue incorrectamente clasificada en alguna otra clase. Esta figura

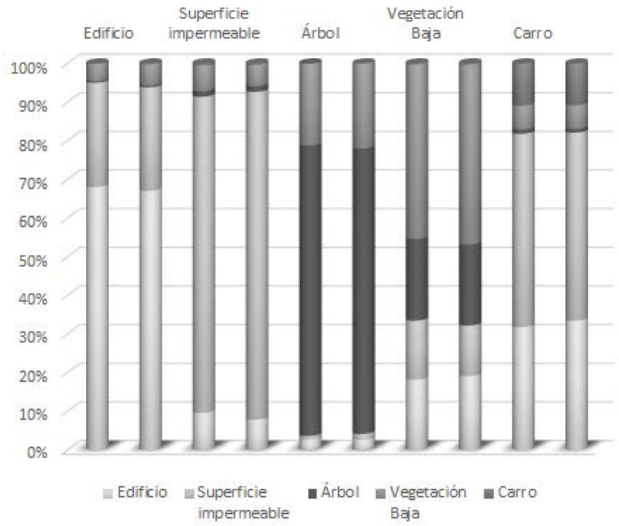


Figura 18. Confusión ponderada para la clasificación en el espacio convencional y como complejo cartesiano con base en rasgos espectrales (Escenario No. 1). Cada columna muestra de qué manera la clase respectiva (rotulo superior) fue clasificada por el clasificador SVM en cada una de las posibles clases. En cada par de columnas contiguas, la primera columna corresponde al espacio convencional mientras que la segunda representa el complejo cartesiano.
Fuente: Elaborado por los autores.

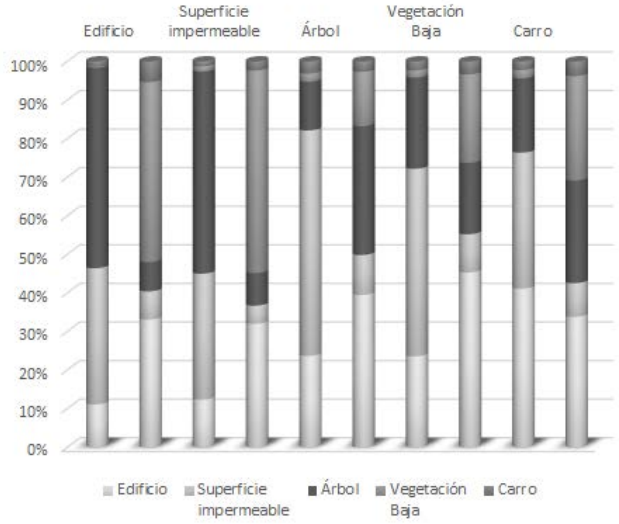


Figura 19. Confusión ponderada para la clasificación en el espacio convencional y como complejo cartesiano con base en rasgos de textura (Escenario No. 2). Cada columna muestra de qué manera la clase respectiva (rotulo superior) fue clasificada por el clasificador SVM. Para cada par de columnas, la primera corresponde al espacio convencional mientras la segunda al complejo cartesiano.
Fuente: Elaborado por los autores.

resume las respectivas matrices de confusión de los resultados del escenario de clasificación No. 1. En esta figura se puede ver, por ejemplo, que el porcentaje de clasificación correcta de las clases *Superficie impermeable* y *Vegetación Baja* obtenido usando el espacio de complejos cartesianos, fue mayor que el obtenido usando el espacio convencional.

La Fig. 19 presenta, para la representación del especio convencional y como complejo cartesiano, la proporción en la cual cada clase de referencia fue predicha por el clasificador SVM en las diferentes clases. Esta figura resume las respectivas matrices de confusión de los resultados del escenario de clasificación No. 2.

Los resultados obtenidos en este segundo escenario de clasificación, permitieron evidenciar que, si bien es cierto obtuvo una mejor exactitud general en el caso del espacio representado como complejo cartesiano, este rasgo es insuficiente como único criterio en el proceso de asignación de clase.

La Fig. 20 presenta, para la representación del especio convencional y como complejo cartesiano, la proporción en la cual cada clase de referencia fue predicha por el clasificador SVM en las diferentes clases. Esta figura es un resumen gráfico de las respectivas matrices de confusión de los resultados del escenario de clasificación No. 2 el cual considera conjuntamente los rasgos espectrales y de textura.

La inclusión del rasgo de textura como criterio adicional de asignación de clase permitió obtener el mejor resultado siendo en este escenario en el cual la exactitud general fue mayor.

Según lo observado en las gráficas de confusión mostradas en las Figs. 18-20, el resultado de la exactitud de la predicción para las clases "*Carro*", "*Vegetación Baja*" y "*Edificio*" fue menor que la de las clases "*Superficie impermeable*" y "*Árbol*", lo cual evidencia cómo la actual implementación del nuevo enfoque tiende a confundir los elementos de la escena con menor tamaño.

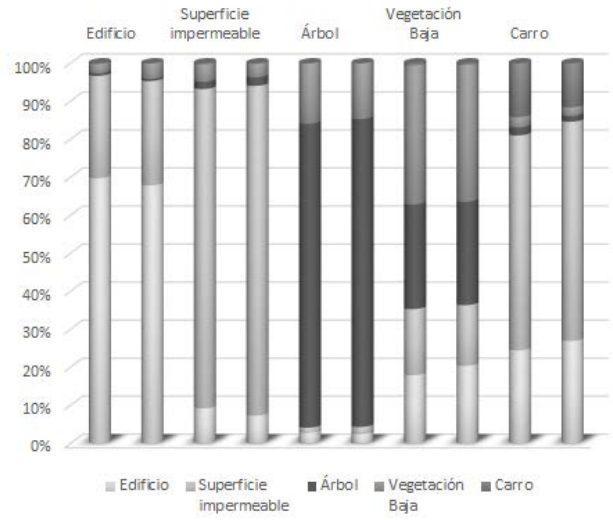


Figura 20. Confusión ponderada para la clasificación en el espacio convencional y como complejo cartesiano con base en rasgos espectrales y de textura (Escenario No. 3). Cada columna muestra de qué manera la clase respectiva (rotulo superior) fue clasificada por el clasificador SVM. Para cada par de columnas, la primera corresponde al espacio convencional mientras la segunda al complejo cartesiano.
Fuente: Elaborado por los autores.

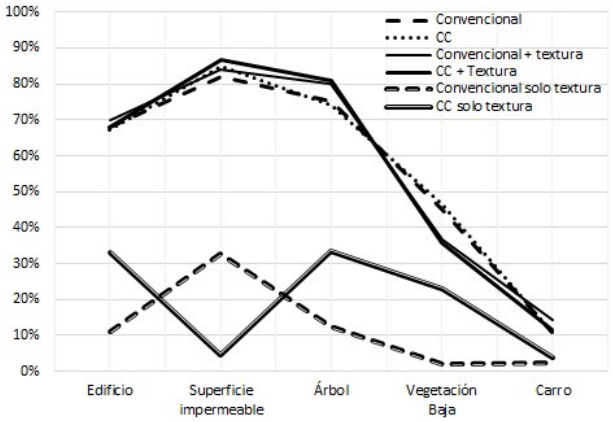


Figura 21. Porcentaje de elementos correctamente clasificados para cada una de las clases en cada uno de los tres escenarios.
Fuente: Elaborado por los autores.

Tabla 2.
Exactitud resultante de cada proceso de clasificación.

Rasgos	Espacio	Exactitud	Intervalo de confianza	
			Mínimo	Máximo
Espectrales	Convencional	71.41%	29.76%	80.27%
	Complejos Cartesianos	72.16%	30.26%	80.67%
De textura	Convencional	18.75%	0.81%	19.12%
	Complejos Cartesianos	20.09%	2.73%	32.06%
Espectrales y de textura	Convencional	73.20%	30.34%	80.74%
	Complejos Cartesianos	74.12%	30.10%	80.54%

Fuente: Elaborado por los autores.

De otro lado, si bien es cierto que la inclusión del rasgo de textura como criterio adicional mejoró la exactitud, en las dos representaciones del espacio, para los tipos de cobertura de mayor tamaño "*Superficie impermeable*" y "*Árbol*", no sucedió lo mismo con las clases restantes. Lo anterior refuerza la idea de que en la consideración del criterio de textura se debe tener en cuenta su dependencia de la escala [20].

A partir de las matrices de confusión se calculó la exactitud para cada clasificación y sus respectivos intervalos de confianza (ver Tabla 2). En la Fig. 21 se muestra para cada escenario de clasificación los porcentajes de elementos correctamente clasificados.

Como se puede apreciar en la Tabla 2 y en la Fig. 21, en los tres escenarios el nivel de exactitud global de la clasificación se mejora levemente cuando se usa el espacio de representación basado en los complejos cartesianos. El mayor valor de exactitud general de la clasificación se obtiene cuando se emplea el rasgo de textura como criterio adicional; sin embargo, este aumento es pequeño con respecto al resultado obtenido de la clasificación con base únicamente en los rasgos espectrales. Esto se explica por el hecho de que la textura es una característica dependiente de la escala [10,20] y por tanto, estos resultados confirman la importancia de evaluar el parámetro de textura a diversas escalas.

5. Conclusiones

Aunque los resultados obtenidos muestran que una representación del espacio basada en los complejos

cartesianos permite obtener resultados levemente mejores que una representación convencional, las pruebas de confianza (Tabla 2) muestran que esa mejoría no es estadísticamente significativa. El aumento de la exactitud general obtenida con la clasificación realizada con base en los super-píxeles trazados a partir de los complejos cartesianos con respecto de la obtenida con base en los super-píxeles trazados en el espacio de representación convencional se ve seriamente restringido en el caso de las cuencas de menor tamaño. Ello sugiere que, si se logra construir un espacio de cuencas con super-píxeles que representen con fidelidad el límite de objetos pequeños, debería aumentar la exactitud global de la clasificación.

En contraste con la representación convencional de una imagen, un complejo cartesiano permite desarrollar máscaras de convolución mediante las cuales el resultado es asignado a un elemento 1-dimensional, lo cual es congruente con el hecho de que el patrón que se pretende encontrar obedece a una forma lineal. Ello hace posible desarrollar procedimientos de detección de borde sobre elementos lineales (células-1D) que preservan, sin ambigüedad, las fronteras de los objetos. Las propiedades topológicas dispuestas para los espacios localmente finitos por los complejos cartesianos, pueden beneficiar a otras técnicas de procesamiento de imagen que requieran vecindarios de conexión sin ambigüedades.

De manera general se puede concluir que la clasificación de una imagen multiespectral a partir de un espacio localmente finito definido de manera consistente con los espacios T_0 permite mejorar el resultado gracias a que durante la creación del espacio de cuencas se incluye la información geométrica definida a partir de vecindarios de conexión correctos topológicamente. Adicionalmente, la inclusión del espacio de textura como un canal adicional de entrada a una clasificación, que se supone permite al algoritmo clasificador tener un nuevo criterio de discernimiento, no mejora significativamente el resultado final de la exactitud general de la clasificación. En una investigación futura, los autores intentarán resolver ese problema mediante la inclusión del aspecto de escala espacial en la definición de los rasgos de textura ya que lo que resulta un grupo de objetos a un nivel de escala específico podría corresponder a un solo objeto con un patrón de textura particular a un nivel de escala menor.

Referencias

[1] Rosenfeld, A., Connectivity in digital pictures. Journal of ACM, [online], 17(1), pp. 146-160, 1970. Available at: http://dl.acm.org/citation.cfm?id=321570

[2] Kiselman, C.O., Digital jordan curve theorems, Proceedings of 9th International Conference of Discrete Geometry for Computer Imagery (DGCI), 2000. pp. 46-56

[3] Kovalevsky, V.A., Axiomatic digital topology. Journal of Mathematical Imaging and Vision, [online], 26(1), pp. 41-58, 2006. Available at: https://link.springer.com/article/10.1007/s10851-006-7453-6

[4] Kopperman, R. and Pfaltz, J.L., Jordan surfaces in discrete antimatroid topologies, Proceedings of 10th International Workshop in Combinatorial Image Analysis (IWCIA 2004), Auckland, New Zealand, 2004, Springer Berlin Heidelberg, 2005. pp. 334-350. DOI: 10.1007/978-3-540-30503-3_25

[5] Kovalevsky, V., Geometry of locally finite spaces: Computer agreeable topology and algorithms for computer imagery Baerbel Kovalevsky, 2008.

[6] Kovalevsky, V.A., Finite topology as applied to image analysis. Journal Computer Vision, Graphics, and Image Processing, [online], 46(2), pp. 141-161, 1989. Available at: http://dl.acm.org/citation.cfm?id=65318

[7] Munkres, J.R., Elements of algebraic topology. Advanced book classics. The advanced book program. Avalon Publishing, 1984.

[8] Khalimsky, E., Kopperman, R. and Meyer, P.R., Computer graphics and connected topologies on finite ordered sets, Topology and its Applications, 36(1), pp. 1-17, 1990.

[9] Szeliski, R., Computer vision. London: Springer London, [online]. 2011. Available at: http://link.springer.com/10.1007/978-1-84882-935-0

[10] Arbelaéz, P., Maire, M., Fowlkes, C. and Malik, J., Contour detection and hierarchical image segmentation. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, [online]. 33(5), pp. 898-916, 2011. Available at: http://resolver.caltech.edu/CaltechAUTHORS:20110415-113118411

[11] Valero, J., Research´s Report: Development of an Alternative method for multispectral image segmentation based on cartesian complexes and its associated oriented matroids. Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Bogotá, 2015, 42 P.

[12] Tso, B. and Mather, P.M., Classification methods for remotely sensed data. CRC Press, 2009.

[13] Valero, J., Lizarazo, I., and Arbelaez, P., Multispectral image segmentation based on cartesian complexes and their associated oriented matroids, Proceedings of GEOBIA 2016: Solutions and Synergies., September 14 - 16 of 2016, University of Twente Faculty of Geo-Information and Earth Observation (ITC), [online]. 2016. Available at: http://proceedings.utwente.nl/442/

[14] Naqash, T. and Shafi, I., Edge sharpening in grayscale images using modified Sobel technique, Proceedings of Multitopic Conference (INMIC), IEEE 14th International, 2011. pp. 132-136 DOI: 10.1109/INMIC.2011.6151458

[15] Dou, Y., Hao, K. and Ding, Y., A short step affine transformation Sobel algorithm based image edge detection in low illumination, proceedings of Chinese Automation Congress (CAC), 2015. pp. 594-597. DOI: 10.1109/CAC.2015.7382569

[16] Deng, C., Ma, W. and Yin, Y., An edge detection approach of image fusion based on improved Sobel operator, Proceedings of 4th International Congress on Image and Signal Processing (CISP), 2011. 3. pp. 1189-1193. DOI: 10.1109/CISP.2011.6100499

[17] International Society for Photogrammetry and Remote Sensing. 2D Semantic labeling contest, [online]. 2016. Available at http://www2.isprs.org/commissions/comm3/wg4/semantic-labeling.html

[18] Kovalevsky, V., Algorithms in digital geometry based on cellular topology. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004. pp. 366-393.

[19] Nikodem, J., Plateau problem in the watershed transform. Computing and Informatics, 28(2), pp.195-207, 2012.

[20] Leung, T. and Malik, J., Detecting, localizing and grouping repeated scene elements from an image. In Buxton, B. and Cipolla, R., Eds., Computer Vision — ECCV '96, Springer Berlin Heidelberg. [online]. 1996, pp. 546-555. Available at https://link.springer.com/chapter/10.1007/BFb0015565

[21] Gimenez, Y., Clasificación no supervisada: El método de K-Medias. Tesis de licenciatura. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Departamento de Matemática. Universidad de Buenos Aires, Argentina. [online]. 2010. Available at: http://cms.dm.uba.ar/academico/carreras/licenciatura/tesis/2010/Gimenez_Yanina.pdf

[22] Gonzales, R. and Woods, R.E., Digital Image Processing (4th Edition). Pearson International, 2017.

[23] Tan, P.N., Steinbach, M. and Kumar, V., Introduction to data mining. Addison-Wesley, 2013.

[24] Lizarazo, I., Accuracy assessment of object-based image classification: Another Step. International Journal of Remote Sensing, 35(16), pp. 6135-6156, 2014. DOI: 10.1080/01431161.2014.943328

J.A. Valero-Medina, recibió su título de Ing. de Sistemas de la Universidad Piloto de Colombia en 1988, su Sp. en Software para redes de computadores

de la Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia en 1998, su grado de MSc. en Teleinformática en 1998 y su candidatura a Dr. en Ingeniería en 2015 ambos de la Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá Colombia. Desde 1989 hasta 1996, él trabajó para el Instituto Geográfico Agustín Coddazi; desde 1996 hasta 2003 para el Instituto de Telecomunicaciones de Telecom (ITEC); desde 2003 hasta 2005 como consultor del Banco Interamericano de Desarrollo (BID) y desde 2005 para la Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Colombia. Su interés de investigación incluye: los sistemas de cómputo distribuido y el procesamiento digital de imágenes satelitales de observación de la tierra.
ORCID: 0000-0003-1228-0241

C.D. Dallos-Bustos, recibió su título de Ing. en Control y Automatización en 2012, y su grado de MSc. en Ciencias de la Información y las comunicaciones en 2017, ambos de la Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia. Desde 2012 hasta 2015, él trabajó para el Banco de Bogotá y desde 2015 para BIZAGI en automatización de procesos. Su interés de investigación incluye: patrones de diseño y arquitectura orientada a servicios (SOA), sistemas de información y arquitectura empresarial.
ORCID: 0000-0002-3997-9899

I. Lizarazo, es Ing. Civil de la Universidad Industrial de Santander, Colombia (1982), Sp. en SIG de la Universidad Distrital, Colombia (1998), MSc. en Ciencias de Información Geográfica (2004) y PhD en Ciencias de Información Geográfica, ambos de la Universidad de Londres, Inglaterra (2011). Actualmente se desempeña como profesor asociado en la Facultad de Ciencias Agrarias de la Universidad Nacional de Colombia en la sede Bogotá. Sus intereses de investigación incluyen el desarrollo y la evaluación de conceptos, técnicas y métodos alternativos de procesamiento digital de imágenes.
ORCID: 0000-0002-9954-6921

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
de Sistemas e Informática

Oferta de Posgrados

Especialización en Sistemas
Especialización en Mercados de Energía
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Sistemas
Doctorado en Ingeniería- Sistemas e Informática

Mayor información:

E-mail: acsei_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5365

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Performance of drip emitters for different pressures and application of cashew nuts wastewater

Rafael Oliveira Batista [a], Ketson Bruno da Silva [a], Manoel Januário da Silva Júnior [a], Delfran Batista dos Santos [b] & Rutilene Rodrigues da Cunha [a]

[a] *Universidade Federal Rural do Semi-Árido, Mossoró, Brazil. rafaelbatista@ufersa.edu.br, ketsonbruno@hotmail.com, mjanuario@ufersa.edu.br, rutilene10@hotmail.com*
[b] *Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Baiano, Salvador, Brazil. delfran.batista@gmail.com*

Received: April 25th, de 2017. Received in revised form: October 27th, 2017. Accepted: Novmeber 8th, 2017

Abstract
The effect of different operating pressures is investigated with regard to the clogging of drip emitters and Christiansen uniformity coefficient (CUC) in drip irrigation systems operating with wastewater from cashew nut processing. The experiment was set on a split-split-plot scheme, with operating pressures (70, 140, 210 and 280 kPa) on plots, emitter models (G1, G2 and G3) on split-plots and assessment times (0, 20, 40, 60, 80, 100, 120, 140 and 160 h) on split-split-plots, in a completely randomized design, with three replicates. CUC of irrigation units was measured every 20 h up to operation time of 160 h. Results showed that drip emitters G2 and G3 were the most suitable for the application of cashew nut wastewater, and the operating pressure of 140 kPa minimized clogging in drip emitters G1, G2 and G3 when operated with cashew nut wastewater.

Keywords: reuse; emitters; clogging.

Desempeño de goteros para diferentes presiones y aplicación de agua residual de castaña de cajú

Resumen
Este estudio tuvo como objetivo analizar el efecto de diferentes presiones de operación en la obstrucción de goteros y en el coeficiente de uniformidad de Christiansen (CUC) en los sistemas de riego por goteo que operan con la agua residual de castanha de cajú. El experimento se estableció en el esquema de parcelas subsubdivididas, con presiones de operación en parcelas (70, 140, 210 y 280 kPa), tipo de goteros en parcelas subdivididas (G1, G2 y G3) y los tiempo de operación em parcelas subsubdivididas (0, 20, 40, 60, 80, 100, 120, 140 y 160 h), en el diseño completamente al azar con tres repeticiones. El CUC de unidades de riego se midió cada 20 h hasta que el tiempo de funcionamiento de 160 h. Los resultados mostraron que los goteros G2 y G3 son los más adecuados para la aplicación de la agua residual de castanha de cajú, y la presión de funcionamiento de 140 kPa minimiza la obstrucción en los goteros G1, G2 y G3 cuando se opera con la agua residual de castanha de cajú.

Palabras clave: reutilización; emisores; obstrucción.

1. Introduction

Cashew culture, with a cultivated area of 740,000 ha and a yearly production of approximately 250 tons of nuts and 2 million tons of stalk, employs some 280,000 people in Brazil. Further, 94% of Brazilian production comes from the Northeastern region, whose largest plantations lie along the coast and within the transition region between the states of Ceará, Piauí and Rio Grande do Norte [1].

Since the cashew nut undergoes several steps within the manufacturing process, large volumes of wastewater are produced. Effluents are generated from washing and humidification processes of nuts and from the cleansing of equipment used in the manufacturing process [2,3]

Drip irrigation systems are recommended for wastewaters due to their high efficiency and low contamination risk of the agricultural product and operators on the field [4]. However, drip irrigation systems feature emitters with significant

How to cite: Batista, R.O., da Silva, K.B., da Silva Júnior, M.J., dos Santos, D.B. and da Cunha, R.R., Performance of drip emitters for different pressures and application of cashew nuts wastewater. DYNA, 85(204), pp. 38-43, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

clogging susceptibility [5,6].

The formation of biofilms on drip emitters and on the side lines of drip irrigation systems has become a major issue to farmers and researchers working with the application of wastewater for irrigation [7,8].

The clogging of drip emitters changes the operating pressure rates, flow rate and application uniformity of the drip irrigation system. Agricultural production is consequently impaired [9].

The effects of elevated operating pressure in the hydraulic network of a drip irrigation system with clogged emitters are significant [10]. Results reveal that reduction in flow rate of drip emitters significantly increases at the water distribution pipeline pressure, particularly at 50% clogging.

Pressure increase becomes a low-cost, easy-operation and high-efficiency alternative to prevent biofilm formation and to minimize the clogging of drip emitters. Changes in the operating pressure rates affect the clogging process of drip emitters due to change in the flow regime, resulting in impacts on sediment deposition and biofilm formation [11].

Current assay analyzes the effect of different operating pressures on the clogging of emitters and on the Christiansen uniformity coefficient (CUC) in drip irrigation systems operating with wastewater from cashew nut processing.

2. Materials and methods

Current assay was conducted at the Water Reuse Experimental Unit (WREU) at the Zoo-Botanical Park of the Federal Rural University of the Brazilian Semi-Arid Region (UFERSA), Mossoró RN Brazil, at 5º12'27"S and 37º19'21"W.

An experimental setup for all tests, made of masonry, 2.0 m wide and 8.0 m long, and provided with waterproof floor with inclination of 1%, was assembled at WREU. It also comprised a channel with a 2% inclination for effluent recirculation to minimize losses by evaporation. A masonry reservoir with a capacity to store 5.0 m^3 was built downstream of the bench.

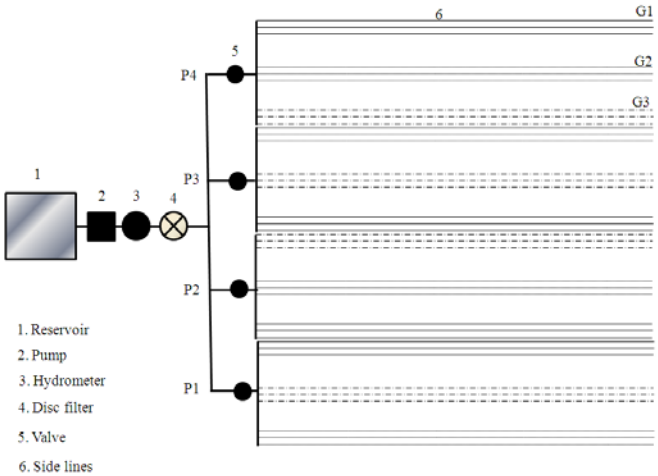


Figure 1. Experimental setup composed of four drip irrigation units operating at pressures 280 (P4), 210 (P3), 140 (P2) and 70 (P1) kPa and with emitter G3, G2 and G1.
Source: The authors

Table 1.
Characteristics of drip emitters (G) used in tests: nominal flow rate (Q), self-compensating device (AD), filtration area (A), labyrinth length (L), recommended pressure range (P) and spacing between emitters (EE).

G	AD	Q ($L\ h^{-1}$)	A (mm^2)	L (mm)	P (kPa)	EE (m)
G1	No	1.65	5.0	58	55 - 100	0.3
G2	Yes	2.0	2.0	35	70 - 400	1.0
G3	Yes	4. 0	2.0	35	70 - 400	1.0

Source: The authors

Four drip irrigation units were assembled within the experimental setup. They were composed of a 1.0 hp pump, a 1.5 $m^3\ h^{-1}$ hydrometer, a screen filter with 130 μm openings, 32 mm PVC branch line, and polyethylene side lines with nominal diameter of 16 mm, provided with three emitters (Fig. 1).

At the beginning of each branch line, gate valves were installed to control operating pressure in drip irrigation units (70, 140, 210 and 280 kPa) and nine connectors were inserted in the branch line of each fertigation unit.

Three side lines with 8 m in length were installed for each drip emitter model. The three emitters were selected due to their low susceptibility to clogging and to their great availability on the Brazilian market (Table 1).

The drip irrigation units worked, on average, four hours per day, up to 160 h. Flow of drip emitters, effluent application uniformity, volume of effluent applied daily, and physical, chemical and biological characteristics of effluent were determined during the period.

Flow rate was measured in seven emitters from the side lines of drip irrigation units by collecting the volume applied for three minutes. The operating pressure was measured daily with a glycerin pressure gauge, graduated from 0 to 400 kPa.

Performance of drip irrigation units was evaluated every 20 working hours during 160 h of effluent application. The effluent application uniformity was calculated by Eq. 1.

$$CUC = \left(1 - \frac{\sum_{1}^{n} |Q_i - Q_m|}{n_e \cdot Q_m}\right) \cdot 100 \quad (1)$$

where CUC - Christiansen uniformity coefficient, %; Q_i - flow of each drip emitter, $L\ h^{-1}$; Q_m - mean drip emitter flow, $L\ h^{-1}$; n_e - number of drip emitters.

Wastewater from the processing of cashew nuts used in this study came from the Wastewater Treatment Plant (WWTP) of company AFICEL, Mossoró RN Brazil. The industrial liquid effluent originated from the humidification process of fresh cashew nuts, washing of fresh cashew nuts and floor cleansing.

The physical, chemical and biological characteristics of cashew nuts wastewater were calculated every 20 working hours of drip irrigation units, following recommendations by Standard Methods [12].

In the Laboratory of Soil, Water and Plant Analysis (LSWPA), Department of Environmental and Technological Sciences of UFERSA, pH values were determined by benchtop pH-meter; total iron (Fe) and total manganese (Mn) concentrations were determined by atomic absorption

spectrometry; and calcium (Ca^{2+}) and magnesium (Mg^{2+}) concentrations were calculated by titration method. The concentrations of suspended solids (SS) and total solids (TS) were determined by the gravimetric method and the concentrations of dissolved solids (DS) were obtained by the difference between TS and SS.

Population levels of total coliforms (TC) were determined at the Laboratory of Inspection of Animal Products, Department of Animal Sciences - UFERSA, by the multiple tubes method.

The experiment was arranged in split-split-plot scheme, with pressures as plots (70, 140, 210 and 280 kPa), drip emitter models as split-plots (G1, G2 and G3) and assessment periods as split-split-plots (0, 20, 40, 60, 80, 100, 120, 140 and 160 h), within a completely randomized design, with three replications.

Data were submitted to analysis of variance (ANOVA) with F test at 5% probability. Means were compared by Tukey´s test at 5% probability. Regression models were chosen based on the significance of regression coefficients by applying the "t" test at 10% probability on regression parameters and the process under study.

3. Results and discussion

Table 2 shows the means and standard deviation of physicochemical and microbiological characteristics of wastewater from cashew nut processing.

Table 2 shows that pH, suspended solids (SS) and dissolved solids (DS) provide severe clogging risk of drip emitters, according to guidelines presented by [13]. [14] reported that clogging risk of drip emitters was rated severe for pH and SS in the case of tertiary domestic sewage, whilst clogging risk of drip emitters was rated low for DS. In the case of wastewater from the pulping of coffee fruits, [15] and [5] revealed that clogging risks of drip emitters were classified as low, moderate and severe, for pH, SS and DS.

Total manganese (Mn) and total iron (Fe) showed moderate risk of clogging of drip emitters, already established by [13]. The average content of Fe was less than 1.7 mg L^{-1} obtained by [14], for tertiary domestic sewage, which also represented moderate risk of clogging of drip emitters. Further, [14] demonstrated that Mn was not observed in tertiary domestic sewage and the risk of clogging of drip emitters was rated low.

Calcium (Ca^{2+}) and magnesium (Mg^{2+}) concentrations in the wastewater of this research showed moderate and low clogging risk of drip emitters, respectively, according to [16].

Table 2.
Mean and standard deviation of physical, chemical and microbiological characteristics of wastewater from the processing of cashew nuts.

pH	Ca^{2+}	Mg^{2+}	Mn	Fe	SS	DS	TC
7.61± 0.55	11.89± 2.32	4.32± 1.59	0.30± 0.04	0.48± 0.06	290± 101	2344± 110	152± 210

pH - Hydrogenionic potential; Ca^{2+} - Calcium in $mmol_c$ L^{-1}, Mg^{2+} - Magnesium in $mmol_c$ L^{-1}, Mn - total Manganese in mg L^{-1}; Fe - Total iron in mg L^{-1}, SS - suspended solids in mg L^{-1}, DS - dissolved solids in mg L^{-1}, TC - Total coliforms in MPN 100 mL^{-1} and MPN - most probable number
Source: The authors

Working with domestic sewage treated through activated sludge system, [6] ranked low and moderate the clogging risk of drip emitters caused by Ca^{2+} and Mg^{2+}, respectively, whilst [14], working with tertiary domestic sewage, showed that Ca^{2+} and Mg^{2+} proved to have low clogging risk of drip emitters.

The population level of total coliforms (TC) represented low risk of clogging of drip emitters, following [13]. This result was similar to that forwarded by [6] in which the risk of clogging due to TC was also low.

Fig. 2 shows the Christiansen uniformity coefficient (CUC) in drip irrigation units with G1, G2 and G3 operating with wastewater from the processing of cashew nuts under different operating pressures.

Drip irrigation units with emitter G1 submitted to operating pressures P1, P2, P3 and P4 at initial operation time and 160 hours showed CUC rates of 96 and 68%; 98 to 97%; 95 and 95% and 96 and 98%, respectively (Fig. 2A). According to [17], CUC rates at operation time 160 hours were rated excellent (> 90%) at operating pressures P2, P3 and P4, while this coefficient was

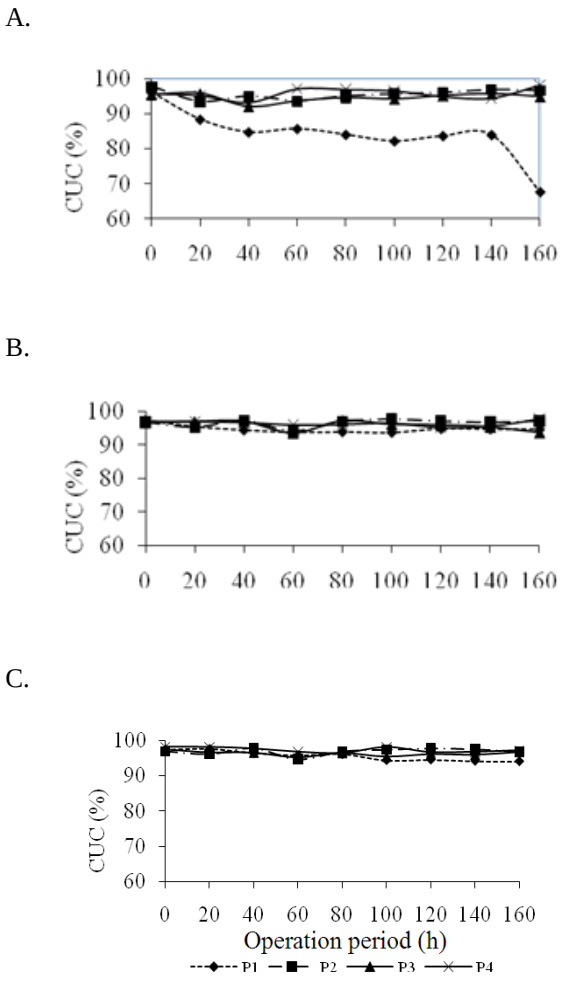


Figure 2. Mean rates of Christiansen uniformity coefficient (CUC) over the operation period of drip irrigation units with emitters G1 (A), G2 (B) and G3 (C) submitted to operating pressures P1 (70 kPa), P2 (140 kPa), P3 (210 kPa) and P4 (280 kPa).
Source: The authors

rated poor at operating pressure P1. Irrigation units with emitter G2, submitted to operating pressures P1, P2, P3 and P4 at initial operation time and 160 hours showed CUC rates of 97 and 95%, 97 and 97%, 97 and 94% and 97 and 98%, respectively (Fig. 2B). All CUC rates were rated excellent (>90%) by [17].

At initial operation times and 160 hours, the drip irrigation units with emitter G3 submitted to operating pressures P1, P2, P3 and P4 showed CUC rates of 97 and 94%; 97 and 97%; 98 and 97% and 98 and 97%, respectively (Figure 2C). All CUC values were rated excellent (> 90%) by [17].

When compared to G2 and G3 in operating pressure P1 (70 kPa), a greater clogging susceptibility of emitter G1 was associated with increased labyrinth length and lower flow, conditions in which effluent flow velocity inside the emitter is lower, favoring particle deposition as adhesion of bacteria-forming biofilms. Above results corroborate those by [6-8,14,18].

Table 3 summarizes the analysis of variance (ANOVA) of CUC of drip irrigation units with G1, G2 and G3 under different operating pressures in the split-split-plots scheme. In fact, the interaction between operating pressure (P), drip emitter model (G) and operation time (T) was significant at 1% probability by F test, and according to ANOVA results, the P x G x T interaction was performed.

Table 4 shows regression equations with the best fit to the CUC variable of irrigation units as a function of the operating pressure and operation time for different emitters.

Table 3.
Summary of the analysis of variance for CUC in the split-split-plot scheme.

Source of variation	Degree of freedom	Mean square CUC
Operating pressure (P)	3	450.59**
Wastewater (a)	6	4.06
Drip emitter model (G)	2	495.41**
P x G	6	219.88**
Wastewater (b)	16	1.89
Operation time (T)	8	27.10**
P x T	24	24.78**
G x T	16	11.15**
P x G x T	48	13.98**
Wastewater (c)	194	2.18
VC (%) plot		2.12
VC (%) split-plot		1.45
VC (%) split-split-plot		1.55

F ** significant at 0.01 probability, VC - variation coefficient
Source: The authors

Table 4.
Regression equations of CUC variable of irrigation units as a function of the operating pressures and operation times for different drip emitter models studied and their determination coefficients.

G	Regression equations	R^2
1	$CUC = 73.0229 - 0.02257*T + 0.2309**P - 0.0005201**P^2$	0.60
2	$CUC = 95.8845$	-
3	$CUC = 96.4973$	-

* and ** Significant at 0.01 and 0.05 probability, respectively, by t test, P – operating pressure, T - Operation time.
Source: The authors

Table 5.
Mean CUC rates (%) of irrigation units with different emitter models at different operation times and pressures.

Operation time (h)	Drip emitter	Operating pressure*			
		P1	P2	P3	P4
0	G1	96.12 a	97.78 a	95.41 a	95.75 a
	G2	97.30 a	96.77 a	96.62 a	96.99 a
	G3	97.22 a	96.93 a	97.50 a	97.96 a
20	G1	88.42 b	93.47 a	94.33 a	95.21 b
	G2	95.44 a	95.28 a	95.73 a	96.98 ab
	G3	97.51 a	96.14 a	94.91 a	98.10 a
40	G1	84.79 b	95.00 a	92.00 b	93.27 b
	G2	94.48 a	97.29 a	97.01 a	96.68 a
	G3	96.36 a	97.72 a	96.56 a	97.67 a
60	G1	85.77 b	93.64 a	93.60 a	97.15 a
	G2	93.85 a	94.12 a	93.44 a	95.97 a
	G3	95.75 a	93.64 a	95.24 a	96.77 a
80	G1	84.09 b	95.04 a	94.57 a	96.99 a
	G2	93.94 a	96.96 a	97.21 a	96.10 a
	G3	96.09 a	96.87 a	96.45 a	96.39 a
100	G1	82.25 b	95.61 a	94.17 a	96.54 a
	G2	93.76 a	97.66 a	96.09 a	96.48 a
	G3	94.38 a	97.31 a	95.45 a	98.08 a
120	G1	83.73 b	96.03 a	95.15 a	94.95 a
	G2	94.88 a	97.04 a	95.96 a	95.22 a
	G3	94.54 a	96.03 a	96.12 a	96.66 a
140	G1	84.02 b	96.83 a	95.66 a	94.49 a
	G2	94.75 a	96.72 a	95.28 a	95.58 a
	G3	94.17 a	97.44 a	95.98 a	96.78 a
160	G1	67.74 b	96.59 a	94.87 ab	98.20 a
	G2	94.67 a	97.14 a	93.62 b	97.65 a
	G3	94.05 a	96.81 a	96.73 a	97.17 a

* Means followed by the same letter in the columns for each operation time and operating pressure do not differ at 5% probability by Tukey´s test; P1 = 70 kPa; P2 = 140 kPa; P3 = 210 kPa; P4 = 280 kPa.
Source: The authors

A quadratic effect of the operating pressure and a linear effect of the operation time in the change of CUC rates were registered in irrigation units with emitter G1. In this case, the regression equation adjusted to the CUC rate showed a coefficient (R^2) of 0.60. Results corroborated those obtained by [5], who worked with non-self-compensating drip emitter of 1.7 L h^{-1}, operating with swine wastewater and showed that the quadratic model was the one that best fitted the relationship between CUC and operation time.

There was no effect of operating pressure and operation time on the change in CUC rates of drip irrigation units with emitters G2 and G3. Averages were used.

Table 5 shows mean rates of CUC variable of drip irrigation units for emitter factor within each operation time and operating pressure level using wastewater from the processing of cashew nuts.

In operating pressure P1, the CUC of drip irrigation unit with emitter G1 differed from the CUC of irrigation units with emitters G2 and G3 from 20-hour operation time.

In operating pressure P2, there was no significant variation in the CUC of irrigation units with emitters G1, G2 and G3 during the 160h-operation time. The above indicated lower levels of clogging due to the predominance of effluent flow rate in the emitter that impairs particle sedimentation and biofilm formation.

In operating pressure P3, the CUC of drip irrigation unit with G1 differed from CUC of irrigation units with G2 and G3 during the 40-hour operation time. In the 160h-operation time, the CUC of drip irrigation unit with G3 differed from CUC of drip irrigation unit with G2.

In operating pressure P4, the CUC of drip irrigation unit with G1 differed from CUC of drip irrigation unit with G3 in the 20hour-operation time. CUC of irrigation unit with emitter G1 differed from CUC of drip irrigation units with emitters G2 and G3 at 40h-operation time.

It should be underscored that, among the four operating pressures tested, P2 had the best indicators of hydraulic performance. In fact, it is highly recommended for drip irrigation system operating with wastewater generated from the processing of cashew nuts.

Complex biofilm in the three drip emitter models typically develops from the interaction between physical (pH, suspended solids), chemical (dissolved solids, calcium, magnesium and manganese) and biological agents (bacteria). More visible biofilm occurred in the labyrinths of the three drip emitter models. Fig. 3 shows illustrations of drip emitters with biofilm. Biofilm formation was probably due to the lack of opening of end sidelines for cleaning, leading to enhanced clogging effects. Similar process was observed in [7] and [11].

5. Conclusions

Drip emitters G2 and G3 were the most suitable for application of wastewater from the processing of cashew nuts.

Operating pressure of 140 kPa minimized clogging of emitters G1, G2 and G3 with wastewater from cashew nuts processing.

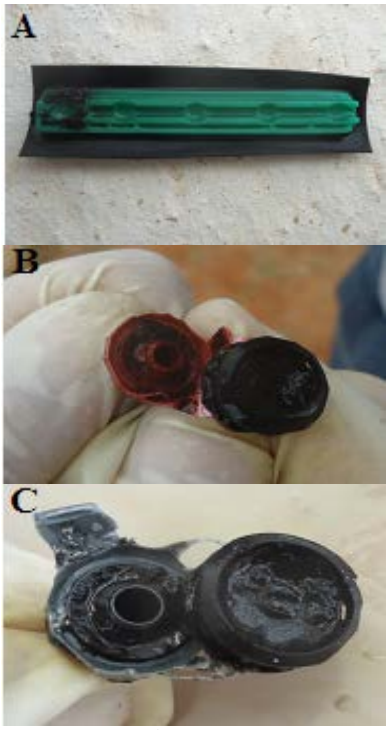


Figure 3. Drip emitters with biofilm: G1 (A), G2 (B) and G3 (C).
Source: The authors

References

[1] Oliveira, V.H., Cajucultura. Revista Brasileira de Fruticultura, 30(1), pp. 1-3, 2008. DOI: 10.1590/S0100-29452008000100001

[2] Chedeville, O., Debacq, M. and Porte, C., Removal of phenolic compounds present in olive mill wastewaters by ozonization. Desalination, 249(2), pp. 865-869, 2009. DOI: 10.1016/j.desal.2009.04.014

[3] Lopes, M.S.S., Oliveira, P.C.C., Andrade, M.V.F., Araújo, R.S., Marinho, G. and Rodrigues, K., Remoção de macronutrientes de efluente da indústria de castanha de caju por uso de reator aeróbio em batelada com inoculo fúngico. Revista Brasileira de Engenharia Sanitária e Ambiental, 16(1), pp. 17-26, 2011. DOI: 10.1590/S1413-41522011000100005

[4] Souza, J.A.A., Batista, R.O., Ramos, M.M. and Soares, A.A., Contaminação microbiológica do perfil do solo com esgoto sanitário. Acta Scientiarum. Technology, 33(1), pp. 5-8, 2011. DOI: 10.4025/actascitechnol.v33i1.5350

[5] Batista, R.O., Matos, A.T., Cunha, F.F. and Lo Monaco, P.A., Formação de biofilme em gotejadores aplicando água residuária da despolpa dos frutos do cafeeiro. Acta Scientiarum. Agronomy, 29(1), pp. 367-371, 2007. DOI: 10.4025/actasciagron.v29i3.289

[6] Liu, H. and Huang, G., Laboratory experiment on drip emitter clogging with fresh water and treated sewage effluent. Agricultural Water Management, 96(5), pp. 745-756, 2009. DOI: 10.1016/j.agwat.2008.10.014

[7] Dazhuang, Y., Zhihui, B., Rowan, M., Likun, G., Shumei, R. and Peiling, Y., Biofilm structure and its influence on clogging in drip irrigation emitters distributing reclaimed wastewater. Journal of Environmental Sciences, 21(6), pp. 834-841, 2009. DOI: 10.1016/S1001-0742(08)62349-9

[8] Duran-Ros, M., Puig-Bargues, J., Arbat, G., Barraga, N.J. and Ramirez-de Cartagena, F., Effect of filter, emitter and location on clogging when using effluents. Agricultural Water Management, 96(1), 67-79, 2009. DOI: 10.1016/j.agwat.2008.06.005.

[9] Souza, J.A.A., Cordeiro, E.A. and Costa, E.L., Aplicação de hipoclorito de sódio para recuperação de gotejadores entupidos em irrigação com água ferruginosa. Revista Brasileira de Engenharia

Agrícola e Ambiental, 10(1), pp. 5-9, 2006. DOI: 10.1590/S1415-43662006000100001
[10] Faria, L.F., Coelho, R.D., Flecha, P.A.N., Robles, W.G.R. and Vásquez, M.A.N., Entupimento de gotejadores e seu efeito na pressão da rede hidráulica de um sistema de microirrigação. Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental, 6(2), pp. 195-198, 2002. DOI: 10.1590/S1415-43662002000200002.
[11] Batista, R.O., Oliveira, R.A., Santos, D.B., Cunha, F.F. and Medeiros, S.S., Modelos empíricos da aplicação de água residuária de suinocultura por gotejadores sob pressões de serviço. Irriga, 21(4), pp. 648-661, 2016. DOI: 10.15809/irriga.2016v21n4p648-661.
[12] Rice, E.W., Baird, R.B. and Clesceri, A.D., Standard methods for the examination of water and wastewater. 22. Ed., Washington, APHA, AWWA, WPCR, 2012.
[13] Nakayama, F.S., Boman, B.J. and Pitts, D., Maintenance. Microirrigation for crop production: Design, operation, and management. Lamm, F.R., Ayars, J.E. and Nakayama, F.S., Eds., Amsterdam, 2007, pp. 389-430.
[14] Batista, R.O., Costa, F.G.B., Lopes, H.S.S., Coelho, D.C.L. and Costa-Paiva, M.R.F., Efeito das características do esgoto doméstico na uniformidade de aplicação de sistemas de irrigação por gotejamento. Revista Caatinga, 24(4), pp. 137-144, 2011.
[15] Cunha, F.F., Matos, A.T., Batista, R.O. and Lo-Monaco, P.A., Uniformidade de distribuição em sistemas de irrigação por gotejamento utilizando água residuária da despolpa dos frutos do cafeeiro. Acta Scientiarum. Agronomy, 28(1), pp. 143-147, 2006. DOI: 10.4025/actasciagron.v28i1.1706
[16] Capra, A. and Scicolone, B., Water quality and distribution uniformity in drip/trickle irrigation systems. Journal of Agricultural Engineering Research, 70(4), pp. 355-365, 1998. DOI: 10.1006/jaer.1998.0287
[17] Merriam, J.L. and Keller, J., Farm irrigation system evaluation: A guide for management. Logan, Utah State University, 1978.
[18] Dehghanisanij, H., Yamamoto, T., Ould Ahmad, B.V., Fujiyama, H. and Miyamoto, K., The effect of chlorine on emitter clogging induced by algae and protozoa and the performance of drip irrigation. Transactions of the ASAE, 48(2), 519-527, 2005. DOI: 10.13031/2013.18326

K.B. da Silva, received BSc. degree in Agronomy in 2009 and MSc. degree in Irrigation and Drainage in 2012, from the Universidade Federal Rural do Semi-Árido, Mossoró, Brazil.
ORCID: 0000-0002-2553-0513.

R.O. Batista, received BSc. degree in Agricultural Eng. in 2002; MSc. degree in Agricultural Engineering in 2004; PhD. degree in Agricultural Engineering in 2007, all of them from the Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, Brazil.
ORCID: 0000-0002-3083-6808.

M.J. da Silva Júnior, received BSc. degree in Agronomy in 2002 by Universidade Federal Rural do Semi-Árido, Mossoró, Brazil; MSc. degree in Agricultural Engineering in 2005 by Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, Brazil; PhD degree in Irrigation and Drainage in 2009 by Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, Piracicaba.
ORCID: 0000-0003-4419-7661.

D.B. dos Santos, received BSc. degree in Agronomy in 1999 by Universidade Federal da Bahia, Cruz das Almas, Bahia; MSc degree in Agricultural Engineering in 2002 by Universidade Federal da Paraíba, Campina Grande, Brazil; PhD degree in Agricultural Engineering in 2005 by Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, Brazil.
ORCID: 0000-0003-0670-9689.

R.R. da Cunha, received BSc. in Agricultural and Environmental Engineering in 2014 by Universidade Federal Rural do Semi-Árido, Mossoró, Brazil.
ORCID: 0000-0002-3175-7677.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Medio Ambiente

Oferta de Posgrados

Especialización en Aprovechamiento de Recursos Hidráulicos
Especialización en Gestión Ambiental
Maestría en Ingeniería Recursos Hidráulicos
Maestría en Medio Ambiente y Desarrollo
Doctorado en Ingeniería - Recursos Hidráulicos
Doctorado Interinstitucional en Ciencias del Mar

Mayor información:

E-mail: acma_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5105

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Analysis of pressure and pressure derivative interference tests under linear and spherical flow conditions

Freddy Humberto Escobar-Macualo, Esteban Rojas-Borrego & Neila Tatiana Alarcón-Olaya

Grupo de Investigación GIPE de la Facultad de Ingeniería, Universidad Surcolombiana, Neiva, Colombia. fescobar@usco.edu.co, rojasborrego@gmail.com, ntalarcon123@gmail.com

Received: September 8th, de 2017. Received in revised form: October 30th, 2017. Accepted: November 11th, 2017

Abstract
Often, interpretation of interference tests is performed for systems acting under radial flow regimen conditions by means of conventional straight-line method, type-curve matching and *TDS* technique. For linear and spherical flow cases, the interpretation of interference tests is performed by the conventional analysis and type-curve matching. These procedures do not allow verification of the estimated parameters; therefore, this paper presents the formulation of a more practical, useful and accurate methodology which is achieved based upon the determination of characteristic features found on the pressure and pressure derivative versus time log-log plot with the purpose of developing analytical expressions for the interpretation of interference tests under spherical and linear flow conditions. These equations were successfully verified by their application on synthetic tests.

Keywords: interference testing; linear flow; spherical flow; steady state; pseudosteady state.

Análisis de presión y derivada de presión en pruebas de interferencia en condiciones de flujos lineal y esférico

Resumen
Normalmente, la interpretación de las pruebas de interferencia se realiza en sistemas que actúan bajo condiciones de régimen flujo radial utilizando análisis convencional de la línea recta, curvas tipo y técnica *TDS*. Para los casos de flujos lineal y esférico, la interpretación de pruebas de interferencia se realiza mediante el método convencional y el ajuste con curvas tipo. Estos procedimientos no permiten verificación de los parámetros estimados, y por ello en este trabajo se presenta una formulación de una metodología más práctica, útil y práctica mediante el uso de rasgos características en el gráfico logarítmico de la presión y derivada de presión contra tiempo, que permitan desarrollar expresiones analíticas directas usadas para la caracterización del yacimiento en pruebas interferencia en condiciones de flujos esférico y lineal. Estas ecuaciones se verificaron satisfactoriamente mediante a su aplicación a pruebas sintéticas.

Palabras clave: pruebas de interferencia; flujo lineal; flujo esférico; estado estable; estado pseudoestable.

1. Introducción

Normally, the methods used for interference tests interpretation are type-curve matching and the conventional straight-line method. In the study by [11] on water flow in aquifers and its influence on water-producing wells, he took the first steps in developing a graphical analysis method that intermediate the field data and the theoretical data for radial regime, which is known as type-curve matching method. Later [2,12,15,18], among others, improved this form of analysis for interference tests by involving either conventional analysis or the pressure derivative function. Type-curve matching is not only tedious but highly inaccurate with a slight data point reading variation.

The first application of the pressure derivative in interference tests was done by [18]. This method did not have much impact at first because it made use of the arithmetic derivative and secondly the noise introduced to the pressure data by external sources increased with the derivative and before the 90s there was not many studies with the estimate

How to cite: Escobar-Macualo, F.H., Rojas-Borrego, E. and Alarcón-Olaya, N.T., Analysis of pressure and pressure derivative interference tests under linear and spherical flow conditions. DYNA, 85(204), pp. 44-52, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

of the pressure derivative function. A subsequent analysis was performed by [5], taking as reference the work done by [18] for two-rate testing.

[13] presented the analytical models for radial, linear and spherical flow regimes and used type-curve matching and regression analysis for the interpretation of interference tests. In addition to presenting the analytical interference solution for radial flow regime, [13] also presented the solutions for linear and spherical flow regimes. The first one occurs in elongated deposits caused by channeling or faulting and the second one in very thick formations. [17] followed the philosophy of the *TDS* Technique, [19], for interference testing using the intersection between pressure and pressure derivative. Later, these recently mentioned works were applied by [7] to determine heterogeneities from interference testing. *TDS* Technique has many applications, just to name a few of them, [6] and [8] extended this methodology for interpreting pressure tests in elongated systems, and [14] developed the *TDS* for heavy oil obeying power-law behavior. Much more applications of the *TDS* Technique were compiled by [9].

Formulating a more practical interpretation methodology for interpretation of interference tests under linear and spherical conditions is the purpose of this paper. For this, the starting points are the linear and spherical solutions presented by [13] so the behavior of pressure and the pressure derivative curves are generated, and, from observations at characteristic points analytical expressions are developed to allow interpreting interference tests in a simple, practical and accurate way. Additionally, based on the work of [3,10], the presence of either pseudosteady-state or steady-state periods was used to develop expressions for the determination of the well drainage area when the duration of the test allows it. The expressions developed were verified satisfactorily with their application to synthetic tests.

2. Mathematical model

For the development of the TDS Technique, [19], in interference tests where either linear or spherical conditions are presented, it is necessary to understand the pressure and pressure derivative behavior in each system with the purpose of finding special features or straight lines which allow obtaining mathematical expressions for reservoir characterization.

2.1. Lineal flow regime model

[16] presented the solution for the pressure distribution in linear systems. This solution was considered for the case of a well producing a constant flow and infinite system. In addition, for an interference test, it was assumed that only half of the active well flow rate is perceived in the observer well. The pressure drop for the described condition is:

$$\Delta P_L = 2\pi\alpha_L \frac{qB\mu}{kbh}\left\{\sqrt{\frac{4\beta\eta t_L}{\pi}}\exp\left(-\frac{x^2}{4\beta\eta t_L}\right) - x\ erfc\left(\sqrt{\frac{x^2}{4\beta\eta t_L}}\right)\right\} \quad (1)$$

And the pressure derivative is given by:

$$\left(t^*\Delta P'\right)_L = 2\pi\alpha_L \frac{qB\mu}{kbh}\sqrt{\frac{\beta\eta t_L}{\pi}}\exp\left(\frac{-x^2}{4\beta\eta t_L}\right) \quad (2)$$

The dimensionless parameters are given as:

$$t_D = \frac{0.0002637kt}{\phi\mu c_t r_w{}^2} \quad (3)$$

$$P_D = \frac{kh\Delta P}{141.2q\mu B} \quad (4)$$

$$t_D * P_D{}' = \frac{kh(t^*\Delta P')}{141.2q\mu B} \quad (5)$$

Eqs. (1) and (2) allowed generating several pressure and pressure curves as given in Fig. 1 using data from Table 1. As either the reservoir width, *b*, or the distance between the wells, *L*, or the reservoir thickness, *h*, varies so do the pressure and pressure derivative curves; therefore, a unique behavior was obtained after multiplying both dimensionless pressure and pressure derivative and dimensionless time values by certain parameters as shown in Fig. 2. Notice in Eq. (3) that the squared wellbore radius can be changed by drainage area obtained the dimensionless time based on area, t_{DA}.

From the unified behavior observed in Fig. 2, a unique intersection point with coordinates 270869.0956, 0.1006 is found:

Table 1.
Input data for generating data in Figure 1.

	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5
h, ft	30	45	68	101	152
b, ft	20	32	51	82	131
L, ft	300	450	675	1013	1519
x, ft	1000	1800	3240	5832	10498

Source: The authors

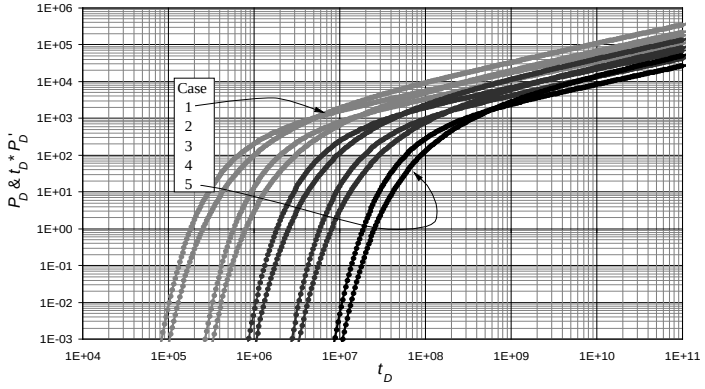


Figure 1. Dimensionless pressure and pressure derivative behavior for interference tests under linear flow conditions
Source: The authors

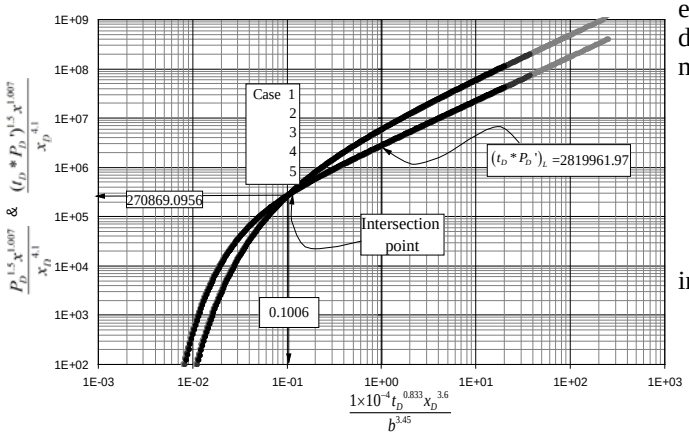


Figure 2. Unified pressure derivative behavior interference tests under linear flow conditions
Source: The authors

$$\frac{1\times10^{-4}\ t_{DL}^{0.833}x_D^{3.6}}{b^{3.45}} = 0.1006 \tag{6}$$

After replacing the dimensionless time and the definition of dimensionless length, $x_D = x/L$, in Eq. (6), an expression to find porosity was obtained:

$$\phi = \frac{kt_{Li}}{15239024\ \mu c_t r_w^2}\left(\frac{x}{L}\right)^{4.32}\frac{1}{b^{4.14}} \tag{7}$$

The abscise value was:

$$\frac{P_{DL}^{1.5}x^{1.007}}{x_D^{4.1}} = 270869.0956 \tag{8}$$

From which permeability is solved for once Eq. (4) and x_D, are replaced in the above expression:

$$k = \frac{591118.21\ q\mu Bx^{2.0620}}{h\Delta P_{Li}L^{2.7333}} \tag{9}$$

Since the pressure and pressure derivative values are the same, Eq. (9) can also use the pressure derivative value, instead.

The governing equation for the unique linear flow regime was obtained by regression analysis to be:

$$\frac{\left(t_D * P_D'\right)_L^{1.5}x^{1.007}}{x_D^{4.1}} = 2819961.97\left(\frac{1\times10^{-4}\ t_{DL}^{0.833}x_D^{3.6}}{b^{3.45}}\right)^{0.5} \tag{10}$$

Replacing the dimensionless parameters in Eq. (10) is possible to obtain an expression to find permeability using an arbitrary point during linear flow regime:

$$k = 510255\left(\frac{qB}{h(t*\Delta P')_L}\right)^{1.3844}\left(\frac{t_L}{\phi c_t r_w^2}\right)^{0.3844}\frac{x^{4.5159}\mu}{L^{5.4453}b^{1.5921}} \tag{11}$$

Because of the noise introduced to the pressure readings from external sources, it is recommended to read the pressure derivative value during linear flow at a time, t = 1 hr, to obtain a more representative reading value, then, Equation (11) becomes:

$$k = 510255\left(\frac{qB}{h\left(t*\Delta P'\right)_{L1}}\right)^{1.3844}\left(\frac{1}{\phi c_t r_w^2}\right)^{0.3844}\frac{x^{4.5159}\mu}{L^{5.4453}b^{1.5921}} \tag{12}$$

The dimensionless pressure governing was found by integration of Eq. (10); therefore:

$$P_{DL1} = \frac{3338.41\ x^{3.2608}}{b^{1.1498}\ L^{3.9321}}t_{DL}^{0.2776} + s_L \tag{13}$$

Dividing Eq. (13) by Eq. (10), and solving for the linear skin factor and replacing the dimensionless quantities, it yields:

$$s_L = \left(\frac{0.0002637kt_L}{\phi\mu c_t r_w^2}\right)^{0.2776}\left(\frac{\Delta P_L\delta}{\left(t_D\ *P_D'\right)_L} - \sigma\right) \tag{14}$$

2.2. Spherical flow regime model

The governing pressure drop equation for a well producing a constant flow was given by [4] when spherical flow is developed in a reservoir is given by:

$$\Delta P_{sph} = \alpha_{sph}\frac{qB\mu}{2kr}erfc\left(\sqrt{\frac{\phi\mu c_t r^2}{4\beta kt_{sph}}}\right) \tag{15}$$

Its pressure derivative is then:

$$(t*\Delta P')_{sph} = -\alpha_{sph}\frac{qB\mu}{2kr}\sqrt{\frac{\phi\mu c_t r^2}{4\beta kt_{sph}}}\exp\left(\frac{-\phi\mu c_t r^2}{4\beta kt_{sph}}\right) \tag{16}$$

As for the former case, pressure and pressure derivative curves were generated, for this case with data from Table 2, considering the variation of wellbore radius, r_w, reservoir thickness, h, and distance between wells, r. Such curves are reported in Fig. 3.

It was also necessary to unify the pressure derivative curves to obtain a universal behavior. It was performed by multiplying both dimensionless pressure, pressure derivative and time for certain factors as shown in Fig. 4.

From the unified behavior observed in Fig. 4 a unique intersection point with coordinates 0.029163, 0.17513 is found. Therefore,

Table 2.
Input data for generating data in Figure 3.

	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4
r_w, ft	0.3	0.45	0.5	0.54
h, ft	2000	5000	1000	700
r, ft	500	1000	300	250

Source: The authors

$$\frac{t_{Dsph}\ h_D^{0.5}}{r_D^{2.7}} = 0.17513 \tag{17}$$

From which porosity is obtained once the dimensionless quantities are used:

$$\phi = \frac{1.5\times10^{-3} k t_{sphi} h^{0.5} r_w^{0.2}}{\mu c_t r^{2.7}} \tag{18}$$

and;

$$\frac{P_{Dsph}}{r_D^{0.3}} = 2.9163\times10^{-2} \tag{19}$$

After replacing Eq. (4), the definition of dimensionless radius and solving for the formation permeability, it yields.

$$k = \frac{4.1178\ q\mu B}{h\ \Delta P_{sph\,i}} \left(\frac{r}{r_w}\right)^{0.3} \tag{20}$$

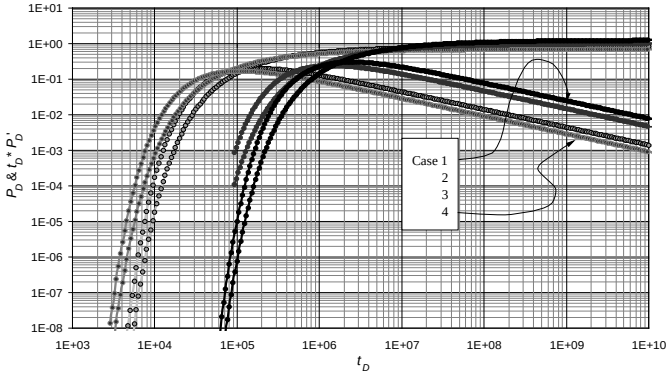


Figure 3. Dimensionless pressure and pressure derivative behavior for interference tests under spherical flow conditions
Source: The authors

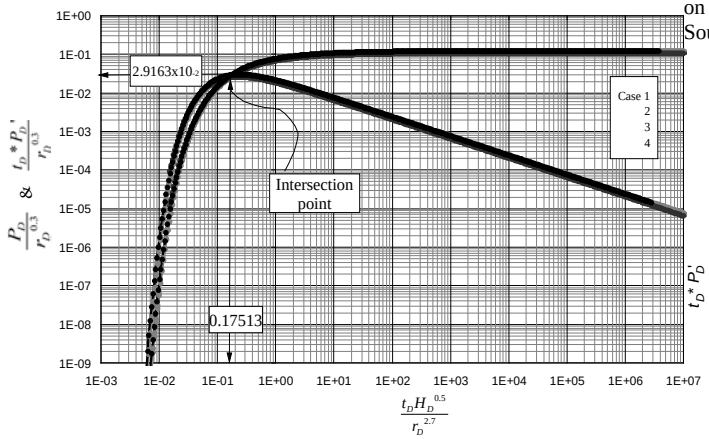


Figure 4. Unified pressure derivative behavior interference tests under spherical flow conditions
Source: The authors

Since the pressure and pressure derivative values are the same, Eq. (20) can use the pressure derivative value, instead.

The governing universal equation for spherical flow was obtained by linear regression to be:

$$\frac{(t_D * P_D')_{sph}}{r_D^{0.3}} = 2.17\times10^{-2}\left[\frac{t_{Dsph}\ h_D^{0.5}}{r_D^{2.7}}\right]^{-0.5} \tag{21}$$

Replacing the dimensionless parameters in Eq. (21), it is possible to obtain an expression to find permeability using an arbitrary point during linear flow regime:

$$k = \frac{32.8972\mu r^{1.1}}{r_w^{0.2667} h^{0.8334}} \left(\frac{\phi c_t}{t_{sph}}\right)^{0.3333} \left(\frac{qB}{(t*\Delta P')_{sph}}\right)^{0.6667} \tag{22}$$

As for the linear case, because of the noise, it is recommended to apply Eq. (22) at the time of 1 hr.

The dimensionless pressure governing equation was obtained by integration of Eq. (25), to be:

$$P_{Dsph1} = \frac{-4.34\times10^{-2} r^{3.3}}{r_w^{2.8} h^{0.5}} t_{Dsph}^{-0.5} + s_{sph} \tag{23}$$

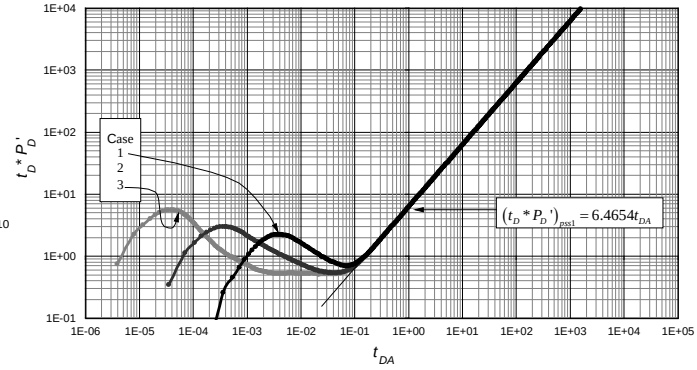


Figure 5. Dimensionless pressure behavior versus dimensionless time based on area for spherical flow interference in closed systems
Source: The authors

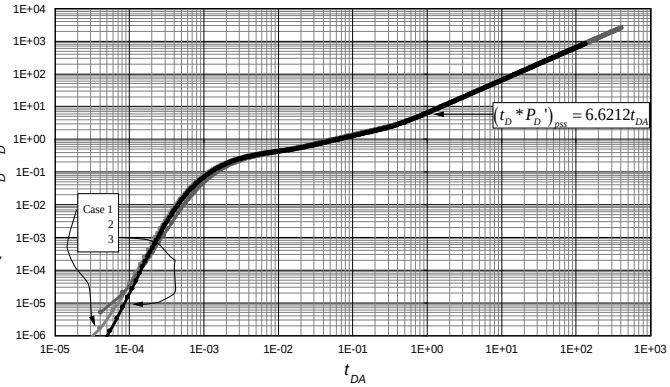


Figure 6. Dimensionless pressure behavior versus dimensionless time based on area for linear flow interference in closed systems
Source: The authors

Dividing Eq. (23) by Eq. (21), replacing the dimensionless quantities and solving for the spherical skin factor will result:

$$s_{sph} = \left(\frac{0.0002637 k t_{sph}}{\phi \mu c_t r_w^2} \right)^{-0.5} \left(\frac{\Delta P_{sph} \delta}{(t * P')_{sph}} - \sigma \right) \quad (24)$$

2.3. Late time behavior

The basis for interference in bounded systems were given by [3]. The application of the pressure derivative for limited reservoirs was presented by [10]. This means that it is feasible to develop either pseudosteady-state or steady-state periods during an interference test. As observed in Fig. 5, once spherical flow regime vanishes pseudosteady-state period obeys the following governing pressure derivative equation:

$$(t_D * P_D')_{pss} = 6.4654 t_{DA} \quad (25)$$

Replacing the dimensionless quantities and solving for the drainage area, it results:

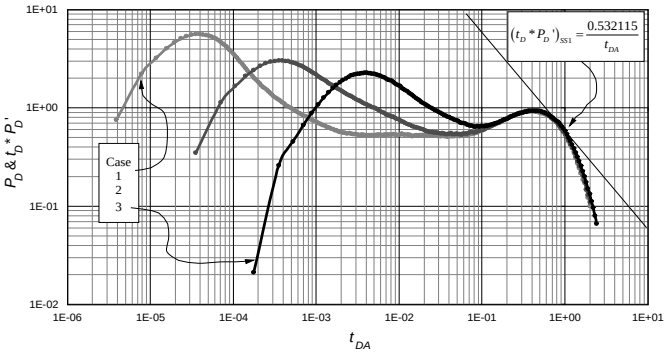


Figure 7. Dimensionless pressure behavior versus dimensionless time based on area for spherical flow interference in constant-pressure systems
Source: The authors

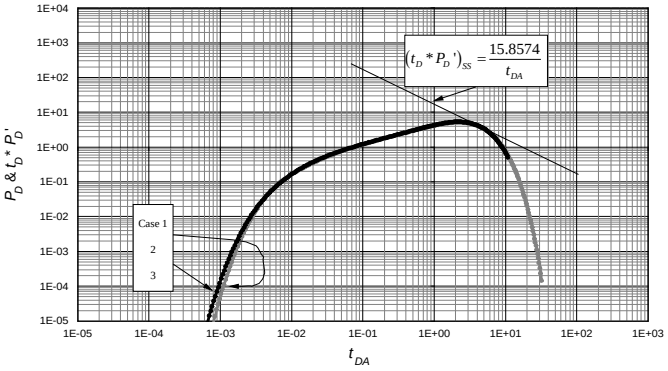


Figure 8. Dimensionless pressure behavior versus dimensionless time based on area for linear flow interference in constant-pressure systems
Source: The authors

$$A = \frac{0.2407 q B t_{pss}}{\phi c_t h (t * \Delta P')_{pss}} \quad (26)$$

As shown in Fig. 6 the pressure derivative governing equation is given by:

$$(t_D * P_D')_{pss} = 6.6212 t_{DA} \quad (27)$$

As for the spherical flow case, after replacing the dimensionless time based on area, the resulting area equation was:

$$A = \frac{0.2465 q B t_{pss}}{\phi c_t h (t * \Delta P')_{pss}} \quad (28)$$

On the other hand, for constant-pressure bounded systems, Figs. 7 and 8, the late-time governing pressure derivative equations for linear and spherical flow regimes, respectively are given by:

$$(t_D * P_D')_{SS} = \frac{0.532115}{t_{DA}} \quad (29)$$

Replacing the dimensionless quantities and solving for the drainage area results in:

$$A = \frac{3.5087 \times 10^{-6} k^2 h t_{SS} (t * \Delta P')_{SS}}{q \mu^2 \phi c_t B} \quad (30)$$

As shown in Fig. 8 the pressure derivative governing equation is given by:

$$(t_D * P_D')_{SS} = \frac{15.8574}{t_{DA}} \quad (31)$$

Replacing the dimensionless quantities and solving for the drainage area, it results:

$$A = \frac{0.011778 k^2 h t_{SS} (t * \Delta P')_{SS}}{q \mu^2 \phi c_t B} \quad (32)$$

Because of the noise, it is recommended to apply Eqs. (28), (30) and (32) at time of 1 hr.

The spherical system can be readily converted to hemispherical system. As seen in Eq. (15), the constant α_{sp} has the value of 70.6. For hemispherical flow conditions this constant is multiplied by two, taking the value of 141.2, so do the constants in the related equations. Apart from this, appendix A presents the gas flow equations for linear and spherical flow conditions.

3. Examples

Two synthetic examples were generated to validate the porosity and permeability equations and two other tests were synthetically created two verify the equations of area. Table 3 contains the input data for the examples.

Table 3.
Input data for the examples

Parameter	Example 1	Example 2	Example 3	Example 4
c_t,1/psi	$1.5x10^{-6}$	$1.1x10^{-6}$	$3x10^{-5}$	$3x10^{-6}$
k, md	240	330	400	250
ϕ	0.16	0.22	0.1	0.1
q, BPD	320	440	100	100
B, rb/STB	1.15	1.21	1.0	1.0
μ, cp	4	5.5	2	1
r_w, ft	0.4	0.5	3.54	3.6
h, ft	36	5500	6000	20
b, ft	26	1100		
L, ft	360			
x, ft	1440			
A, ft^2			$1x10^8$	$54x10^8$

Source: The authors

3.1. Example 1 (Linear)

The simulated data provided in Fig. 9 was generated with data from Table 3, from where the following information was read:

t_{Li} = 45.71 hr $\quad\quad$ ΔP_{Li} = 31399.66 psi

t_L = 3408 hr $\quad\quad$ $(t^*\Delta P')_L$ = 313006.65 psi

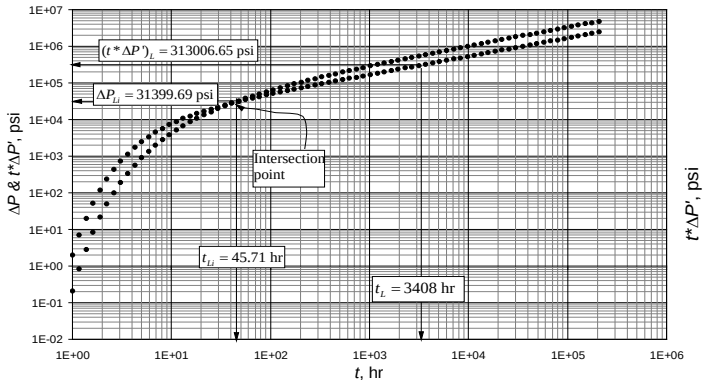


Figure 9. Log-log of pressure and pressure derivative versus time for example 1 (linear case)
Source: The authors

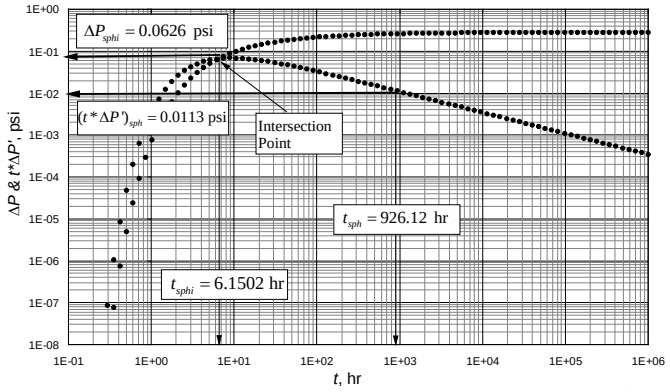


Figure 10. Log-log of pressure and pressure derivative versus time for example 2 (spherical case)
Source: The authors

Then, permeability was estimated with Eqs. (9) and (11) and porosity with Eq. (7). Results are reported in Table 4.

3.2. Example 2 (spherical)

Fig. 10 presents the pressure and pressure derivative data for a synthetic test under spherical flow interference conditions which used input data from Table 3. The following information was read from such plot:

Table 4.
Results for worked examples

Parameter	Equation	result	% Error
	Example 1		
k, md	9	258.03	6.99
k, md	11	255.49	6.06
ϕ	7	0.1720	6.99
	Example 2		
k, md	20	352.21	6.31
k, md	22	337.91	2.34
ϕ, %	18	0.2137	2.92
	Example 3		
A, ft^2	30	101050560	1.05
	Example 4		
A, ft^2	28	5477777778	1.42

Source: The authors

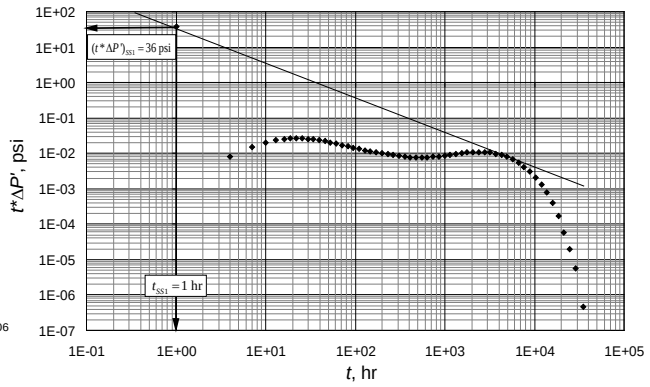


Figure 11. Log-log of pressure and pressure derivative versus time for example 3 (spherical case)
Source: The authors

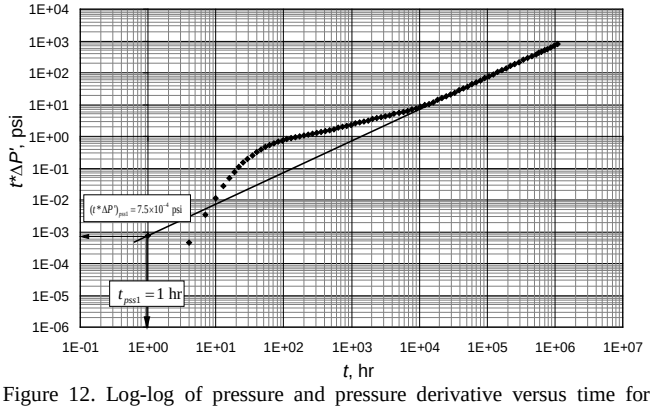


Figure 12. Log-log of pressure and pressure derivative versus time for example 4 (linear case)
Source: The authors

t_{sphi} = 6.1502 hr ΔP_{sphi} = 0.0626 psi

t_{sph} = 926.12 hr $(t^*\Delta P')_{sph}$ = 313006.65 psi

Permeability was estimated using Eqs. (20) and (22). Porosity was found with Eq. (18). Results are also reported in Table 4.

3.3. Example 3 (spherical case)

A long pressure test was also simulated with input data from Table 3. The pressure and pressure derivative for this example is reported in Fig. 11 from where the following characteristic point was read:

$(t^*\Delta P')_{ss1}$ = 36 psi

Drainage area was estimated with Eq. (30) -reading at t = 1 hr- and reported in Table 4.

3.4. Example 4 (linear case)

The pressure and pressure derivative versus time data reported in Fig. 12 was also obtained using data from Table 3. The following datum was read from this figure.

$(t^*\Delta P')_{pss1}$ = 0.00075 psi

Drainage area was estimated with Eq. (28) -reading at t = 1 hr- and also reported in Table 4.

4. Conclusions

1. The intersection point, a characteristic one-half slope (for linear flow) and negative one-half slope (for spherical) flow, a late time unit-slope line (pseudosteady state) and a late time negative unit-slope line (steady state) are identified and set as characteristic features on the pressure and pressure derivative versus time log-log plot which allow developing expressions for reservoir characterization.
2. *TDS* Technique is applied to interference testing under linear and spherical flow regime conditions. A unique point of intersection - found for each case – is used to find expressions to find reservoir permeability and porosity. Also, the permeability value is verified by another expression that uses an arbitrary point read on each flow regime (linear or spherical). There are also developed equations to estimate the drainage area in both dealt flow regimes for close or constant-pressure boundary systems. The Equations are successfully verified on synthetic cases.

References

[1] Agarwal, R.G., Real gas pseudo-time - A new function for pressure buildup analysis of MHF gas wells. Society of Petroleum Engineers. January 1. 1979, DOI: 10.2118/8279-MS.

[2] Al-Marhoun, M.A., Interference testing: A new analysis approach. Society of Petroleum Engineers, 1985. DOI: 10.2118/13732-MS.

[3] Brown, M.W. and Ambastha, A.K., Interference test analysis for rectangular reservoirs. Petroleum Society of Canada. January 1. 1991, DOI: 10.2118/91-45.

[4] Chatas, A.T. Unsteady spherical flow in petroleum reservoir. SPE J. 6(2), pp. 102-114; 1966. Trans., AIME, 237. SPE-1305-PA. DOI: 10.2118/1305-PA.

[5] El-Khatib, N.A.F., A new approach to interference test. SPE Formation Evaluation, 2(4): pp. 609-610. 1987. Society of Petroleum Engineers. DOI: 10.2118/13733-MS.

[6] Escobar, F.H., Hernández, Y.A. and Hernández, C.M., Pressure transient analysis for long homogeneous reservoirs using TDS technique. Journal of Petroleum Science and Engineering. 58(1-2), pp. 68-82, 2007. DOI: 10.1016/j.petrol.2006.11.010.

[7] Escobar, F.H., Cubillos, J., Montealegre-M., M., Estimation of horizontal reservoir anisotropy without type-curve matching. Journal of Petroleum Science and Engineering 60, pp. 31-38. 2008. DOI: 10.1016/j.petrol.2007.05.003.

[8] Escobar, F.H., Montealegre-M., M. and Carrillo-Moreno, D., Pressure and pressure derivative transient analysis without type-curve matching for elongated reservoirs with changes in permeability or width. CT&F – Ciencia, Tecnología y Futuro. 4(1), pp. 75-88, 2010.

[9] Escobar, F.H. Recent advances in practical applied well test analysis. Nova publishers, New York. Published by Nova Science Publishers, Inc. † New York, 2015.

[10] Foster, G.A., Wong, D.W., Asgarpour, S. and Cinco-Ley, H., Interference test analysis in limited reservoirs using the pressure derivative approach: Field example. Petroleum Society of Canada. January 1, 1994. DOI: 10.2118/94-30.

[11] Jacob, C.E., On the flow of water in an elastic artesian aquifer. American Geophysical Union 21, pp. 574-588. 1940. DOI: 10.1029/TR021i002p00574.

[12] Kamal, M.M., Interference and pulse testing-A review. Journal of Petroleum Technology, Society of Petroleum Engineers. 35(12), pp. 2257-2270, 1983. DOI: 10.2118/10042-PA.

[13] Martinez, N.R. and Samaniego, F.V., Advances in the analysis of pressure interference tests. Journal of Canadian Petroleum Technology Society of Petroleum Engineers, 49(12), pp. 65-70, 2010. DOI: 10.2118/141028-PA.

[14] Martinez, J.A., Escobar, F.H. and Cantillo, J.H., Application of the TDS technique to dilatant Non-Newtonian/Newtonian Fluid composite reservoirs. Ingeniería e Investigación Journal. 31(3), pp. 130-134, 2011. DOI: 10.15446/ing.investig

[15] Matthies, E.P., Practical application of interference tests. Journal of Petroleum Technology, Society of Petroleum Engineers, 16(03), pp. 1-4, 1964. DOI: 10.2118/627-PA.

[16] Miller, F.G., Theory of unsteady-State influx of water in linear reservoirs. Journal Institute of Petroleum 48(467), pp. 365-379, 1962.

[17] Ouandlous, A., Interpretation of interference test by Tiab's direct synthesis technique, MSc. Thesis. University of Oklahoma, United States, 1999.

[18] Tiab, D. and Kumar, A., Application of the P'D function to interference analysis. Society of Petroleum Engineers, 1980. DOI: 10.2118/6053-PA.

[19] Tiab, D., Analysis of pressure and pressure derivative without type-curve matching: 1- Skin and wellbore storage, Journal of Petroleum Science and Engineering, 12(3), pp. 171-181, 1995. DOI: 10.1016/0920-4105(94)00040-B.

F.H. Escobar-Macualo, received the BSc. in 1989 from Universidad de América, Bogotá, Colombia, the MSc. (1995) and PhD (2002) degrees in Petroleum Eng. from the University of Oklahoma. All his degrees are in Petroleum Eng. He is the director of the GIPE Group in Universidad Surcolombiana where has been a professor since 1996. He has also worked as a consultant for several oil and service companies. He has published more than 150 papers, four research books and three book chapters.
ORCID: 0000-0003-4901-6057

E. Rojas-Borrego, received the BSc. Petroleum Eng. in 2017. Member of the GIPE Group in Universidad Surcolombiana.
ORCID: 0000-0002-2681-2432.

N.T. Alarcón-Olaya, received the BSc. Petroleum Eng. in 2017. Member of the GIPE Group in Universidad Surcolombiana.
ORCID: 0000-0002-4000-3156.

Nomenclature

b	Reservoir width, ft
B	Oil volume factor, RB/STB
c_t	Total compressibility, 1/psi
h	Formation thickness, ft
h_D	Formation thickness and wellbore radius ratio (assuming isotropy), (h/r_w)
L	Linear distance between wells, ft
$m(P)$	Pseudopressure, psi^2/cp
P	Pressure, psi
P_D	Dimensionless pressure
q	Oil flow rate, BPD
q_g	Gas flow rate, Mscf/D
r	Radial distance, ft
r_D	Dimensionless radius, (r/ r_w)
r_w	Wellbore radius, ft
s	Skin factor
t	Time, hr
T	Temperature, °R
t_D	Dimensionless time based on wellbore radius
t_{DA}	Dimensionless time based on drainage area
$t_a(P)$	Pseudotime, hr-cp/psi
t_{Da}	Dimensionless pseudotime
$t^*\Delta P'$	Pressure derivative, psi
t_D*P_D'	Dimensionless pressure derivative
x	Linear distance from observation well to reservoir, ft
x_D	Ratio of linear distance and well distance, (x/L)

Suffixes

D	Dimensionless
i	Intercept, initial
L	Linear
*L*1	Linear at 1 hr
Li	Intercept of pressure and pressure derivative curves for linear case
pss	Pseudosteady state
*pss*1	Pseudosteady state at 1 hr
sph	Spherical
*Sph*1	Spherical at 1 hr
sphi	Intercept of pressure and pressure derivative curves for spherical case
SS	Steady state
*SS*1	Steady state at 1 hr
w	well

Greek

Δ	Change, drop
α_L	887.2
α_{sph}	70.6
β	0.0002637
η	Diffusivity constant
ϕ	Porosity
μ	Viscosity, cp

Appendix A. Gas flow Equations

[1] introduced the pseudotime function to account for the time dependence of both gas viscosity and total system compressibility:

$$t_a = \int_{to}^{t} \frac{dt}{\mu(t)c_t(t)} \tag{1}$$

This function is better defined as a pressure function given in hr psi/cp:

$$t_a(P) = \int_{Po}^{P} \frac{(dt/dP)}{\mu(p)c_t(P)} dP \tag{A.2}$$

Now, μ and c_t are pressure dependent properties. Rewriting Eq. (3) can be rewritten as:

$$t_D = \frac{0.0002637\bar{k}t}{\phi(\mu c_t)_i r_w^2} \tag{A.3}$$

Including the pseudotime function, $t_a(P)$, in Eq. (A.3), the dimensionless pseudotime is given by:

$$t_{Da} = \left(\frac{0.0002637k}{\phi r_w^2}\right) t_a(P) \tag{A.4}$$

Multiplying and, then, dividing by $(\mu c_t)_i$ a similar equation to the general dimensionless time expression;

$$t_{Da} = \left(\frac{0.0002637k}{\phi(\mu c_t)_i r_w^2}\right)\left[(\mu c_t)_i \times t_a(P)\right] \tag{A.5}$$

The dimensionless pseudopressure and pseudopressure derivative are defined by:

$$m(P)_D = \frac{kh[m(P_i) - m(P)]}{1422.52 q_g T} \tag{A.6}$$

$$t_D * m(P)'_D = \frac{kh[t * \Delta m(P)']}{1422.52 q_g T} \tag{A.7}$$

For gas linear flow regime interference, Eqs. (7), (9) and (12) become:

$$\phi = \frac{k(t_a(P))_{Li}}{15239024\ r_w^2}\left(\frac{x}{L}\right)^{4.32} \frac{1}{b^{4.14}} \tag{A.8}$$

$$k = \frac{5955223 x^{2.062} q_g T}{L^{2.7333} h\left[m(P_i) - m(P)\right]_L} \tag{A.9}$$

$$k = 12492596\left(\frac{(t_a(P))_L}{\phi r_w^2}\right)^{0.3844}\left(\frac{q_g T}{h\left[t * \Delta m(P)'\right]_L}\right)^{1.3844} \frac{x^{4.5159}}{L^{5.4453} b^{1.5921}} \tag{A.10}$$

For spherical gas flow regime interference, Eqs. (18), (20) and (22) become:

$$\phi = \frac{1.5\times10^{-3} k(t_a(P))_{sphi} h^{0.5} r_w^{0.2}}{r^{2.7}} \tag{A.11}$$

$$k = \frac{41.4850\ q_g T}{h\left[m(P_i) - m(P)\right]_{sph}} \left(\frac{r}{r_w}\right)^{0.3} \quad \text{(A.12)}$$

$$k = \frac{153.45 r^{1.1}}{h^{0.8334} r_w^{0.2667}} \left[\frac{\phi}{(t_a(P))_{sph}}\right]^{0.3333} \left[\frac{q_g T}{\left[t * \Delta m(P)'\right]_{sph}}\right]^{0.6667} \quad \text{(A.13)}$$

For late time behavior, Eqs. (26), (28), (30), and (32) become:

$$A = \frac{2.4253 q_g T (t_a(P))_{pss}}{\phi h [t * \Delta m(P)']_{pss}} \quad \text{(A.14)}$$

$$A = \frac{2.4837 q_g T (t_a(P))_{pss}}{\phi h [t * \Delta m(P)']_{pss}} \quad \text{(A.15)}$$

$$A = \frac{k^2 h (t_a(P))_{SS} [t * \Delta m(P)']_{SS}}{2870475 q_g \phi T} \quad \text{(A.16)}$$

$$A = \frac{k^2 h (t_a(P))_{SS} [t * \Delta m(P)']_{SS}}{85542164 q_g \phi T} \quad \text{(A.17)}$$



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Química e Ingeniería de Petróleos

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Química
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Petróleos
Doctorado en Ingeniería - Sistemas Energéticos

Mayor información:

E-mail: qcaypet_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5317

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Comparative study of fire resistance and acoustic performance of ceramic brick walls in concern to NBR 15575 in residential buildings in Brazil

Sérgio Klippel Filho [a], Gustavo Luis Prager [a], Paulo Eduardo Mezzomo da Silva [a], Fabrício Longhi Bolina [a] & Bernardo Fonseca-Tutikian [b]

[a] *Universidade do Vale do Rio dos Sinos, São Leopoldo, Brasil. sergioklip@unisinos.br, gprager@unisinos.br, pmezzomos@unisinos.br, fabriciolb@unisinos.br*
[b] *Universidade do Vale do Rio dos Sinos, São Leopoldo, Brasil and Universidad de la Costa, Barranquilla, Colombia. bftutikian@unisinos.br*

Received: June 11th, de 2017. Received in revised form: October 10th, 2017. Accepted: November 16th, 2017

Abstract
After the publication of NBR 15575 (ABNT, 2013) standard, it became necessary that the constructive systems used in residential buildings go through verification processes concerning the performance requirements. Considering the security requirements, it is necessary to evaluate the fire resistance of vertical sealing systems. Within the scope of habitability, the standard specifies that these systems must have an adequate acoustic performance. Regarding this scenario, this study has the purpose of evaluate the performance of two non-structural vertical sealing systems in ceramic bricks by comparing two different layouts of horizontal air gaps. Therefore, laboratory tests were performed, following the prescriptions of NBR 10636 (ABNT, 1989) and ISO 10140-2 (ISO, 2010). It was verified that the system with higher air gaps number had a better performance on fire resistance, and that the acoustic performance was very similar between the two systems.

Keywords: laboratory test; vertical sealing systems; acoustic performance; fire resistance; ABNT NBR 15575-4:2014.

Estudio comparativo de resistencia al fuego y desempeño acústico de paredes en bloques cerámicos en cuestión de NBR 15575 en edificios residenciales de Brasil

Resumen
Con la publicación de la norma NBR 15575 (ABNT, 2013), ha sido necesario que los sistemas constructivos utilizados en edificios residenciales se sometiesen a ensayos para el cumplimiento de los requisitos de desempeño. En el ámbito de los requisitos de seguridad solicitados por la norma, existe la necesidad de la evaluación de la resistencia al fuego de los sistemas de aislamiento vertical. Dentro de la habitabilidad, la norma recomienda que estos sistemas tienen un desempeño acústico adecuado. Dentro de este escenario, el objetivo de este trabajo es evaluar el desempeño acústico de dos sistemas de pared compuestos por diferentes tipos de bloques cerámicos con agujeros horizontales. Para este análisis, fueron realizados ensayos de laboratorio de acuerdo con las normas NBR 10636 (ABNT, 1989) y ISO 10140-2 (ISO, 2010). Se verificó que el sistema con mayor densidad presentó desempeño sensiblemente mejor acerca la resistencia al fuego, con desempeño prácticamente idéntico en el análisis del aislamiento acústico.

Palabras clave: ensayos de laboratorio; sistema de aislamiento vertical; desempeño acústico; resistencia al fuego; ABNT NBR 15575-4:2014.

1. Introduction

The national methodologies of evaluation and classification of the performance in residential buildings systems in Brazil are prescribed by NBR 15575 (ABNT, 2013), that is the first national standard that concern the performance as an obligatory requirement. The standard describes criteria to promote the classification of all systems that compose a residential building, attributing minimum performance to the systems during their normal use

How to cite: Filho, S.K., Prager, G.L., da Silva, P.L.M., Bolina, F.L. and Tutikian, B.F., Comparative study of fire resistance and acoustic performance of ceramic brick walls in concern to NBR 15575 in residential buildings in Brazil. DYNA, 85(204), pp. 53-58, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

conditions. Also, the standard classifies the performance of the buildings in three different classes, minimum, intermediate and superior, among the security, habitability and durability areas. In this way, the standard has increased the concern in the use of adequate systems, adding quality, security, sustainability and comfort for the users (MOURA; SANTOS; PINHEIRO, 2016).

In the country, since the standard reveals the necessity of fulfill requirements that were ignored and has, relatively, been published recently, the systems until then used had to be tested and, if necessary, remodeled to comply with, at least, the minimum performance classification. Demanding the material manufacturers and construction companies to adequate their systems to the standard requirements, causing a revolution in the way buildings were made until then (SILVA *et al.*, 2014).

As areas in the scope of the NBR 15575 (ABNT, 2013), concerning to the security and the habitability of a building, the fire resistance and sound insulation requirements of the wall systems are of interest on the design, material specification and use of a residential edification, justifying the significance of the research.

Into the fire resistance of the systems that compose a building, the main objective is to promote a secure way to the users to get out of the building in case of a sinister. For this, the wall sealing systems must limit and prevent the spreading of fire through the building. The walls promote an essential compartmentalization to the building, proportioning security in the evacuation route, depending directly on the performance of the bricks and the coating system. The coating system protects the bricks from the direct incidence of the fire, increasing the fire resistance of the system (BUCHANAN; MUNUKUTLA, 1991; BRETANO, 2004; ONO, 2007; NGUYEN; MEFTAH, 2012).

Some geometric characteristics of the system, like voids, spaces and internal dimensions, have a strong influence on the fire resistance of the wall, due to the interference on the predominant heat transfer between the vertical divisions inside the blocks (NGUYEN et al, 2009).

Considering mortar coatings, with high temperature exposure, there is a resistance of the mortar against the heat transfer when the temperatures reach 100°C. While there is intrinsic water, this temperature remains constant. When the liquid phase of the pores disappears, the heat transfer is indicated by an increase in the material temperature, becoming progressively linear. At these temperatures, the solid phases are responsible for the transmission of heat, and also for the hot air, or steam, that must be enclosed in then exists throughout the test (MACIÁ; ROLANDO, 2013).

Into the habitability, one of the concerns is the acoustic performance, because of the characteristics and the possible hazard caused by the sound. As it is omnipresent in our environments, bringing information about what is happening in the emission thus the transferring paths, being beneficent or malefic, as noise pollution. These noises can cause hearing loss or affect the comfort of the users, influencing in their physical and mental health, principally in residences, where the nuisance is amplified (HANSEN, 2005; FAHY, 2014; PARIS-NEWTON; PROKOFIEVA; HENRY, 2016).

Considering the acoustic comfort from the external and internal noises in a building, we have that it is promoted by the vertical sealing systems, which have their performance directly linked by their sound reduction capability, keeping comfortable sound pressure levels (GUILLEN et al., 2008; GÖSELE; SCHRÖDER, 2013).

The evaluation of the sound reduction capability is important to ceramic brick masonry walls because they have acoustic fragility related to their voids, who decrease their sound insulation capability by the internal resonances that occur when compared to solid bricks. The existing voids in the bricks affect their resonance frequency, modifying their comportment through the frequencies, causing dips in their sound reduction spectrum, generating fragilities and decreasing the punctual and overall sound insulation capability of the wall (FRINGUELLINO; SMITH, 1999).

In this way, this article has the aim to evaluate the fire resistance and acoustic sound insulation, among Brazilian standard NBR 15575 (ABNT, 2013), of two non-structural systems composed by different ceramic bricks composition, in weight and geometry, both with horizontal voids, commonly used in the country construction market.

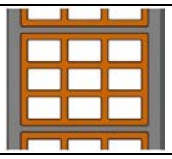
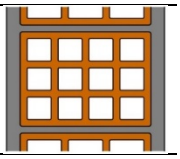
2. Methodology

The samples are composed by non-structural ceramic bricks with mortar coat in both sides with 2 cm thick and were tested in the itt Performance/Unisinos facility in São Leopoldo, Brazil. The Table 1 shows the information regarding the dimensions, configuration and mechanical resistance of the brick samples, as well as the superficial density and the thickness of the coat applied in the systems, denominated A1 and A2.

2.1. Sound insulation

The determination of the sound reduction index of the samples were made into a laboratorial environment, testing both the aforementioned systems, that were constructed inside a movable reinforced concrete portico and installed between two reverberant rooms (Fig. 1) that follows the requirements of ISO 10140-5 (ISO, 2010), with a sample area of 10.8 m².

Table 1.
Tested samples

System	A1	A2
Brick dimensions (cm)	14x19x29	14x19x24
Mechanical resistance (MPa)	1,5	1,5
Superficial density (kg/m²)	270	230
Brick configuration	9 voids	12 voids
$\frac{\text{Liquid area}}{\text{Gross area}}$	0,30	0,35
Graphic representation		
Coating	Mortar with 2 cm thick in both sides	

Source: The authors.

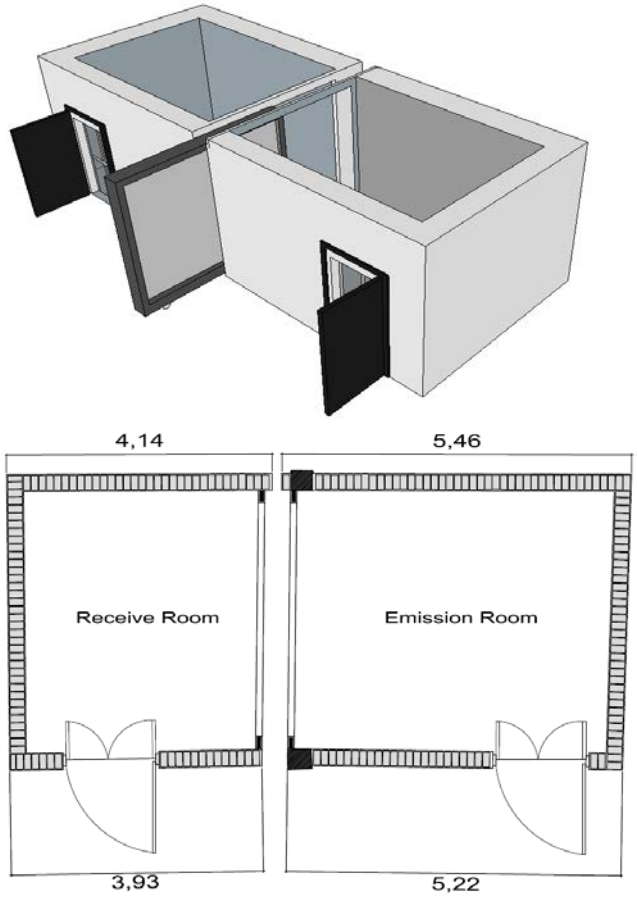


Figure 1. Test facility.
Source: The authors.

The test procedures used to the determination of the sound reduction index were described by ISO 10140-2 e ISO 10140-4 (ISO, 2010), making the measurements with the adequate and calibrated equipments, measuring the sound pressure levels in 10 distinct positions for each parameter, and in one-octave bands from 100 to 5000 Hz. The reverberation time was obtained by the interrupted method, with three decays per position, in twelve distinct positions. All the equipment's are from Brüel & Kjäer, being them: sound analyzer Type 2270, sound source Omnipower 4292-L, sound calibrator Type 4231 e power amplifier Type 2734.

The measurements were made and then the sound reduction index was obtained by eq. 1 for each of the frequency band measured, present in ISO 10140-2 (ISO, 2010). For this, the sound pressure level in the emission room is subtracted by the one in the reception room, plus the relation between the sample area and the equivalent sound absorption area of the reception room.

$$R = L1 - L2 + 10\log\left(\frac{S}{\frac{0{,}16V}{T}}\right) \quad (1)$$

Considering: L1 is the sound pressure level in the emission room [dB]; L2 is the sound pressure level in the reception room [dB]; S is the sample area [m²]; V is the volume of the reception room [m³]; T is the reverberation time of the emission room [s].

With the calculated sound reduction index for each frequency band, by the calculation processes present in ISO 717-1 (ISO, 2013), the sound reduction index was obtained for each sample. Then, their performance could be compared with the requirements and classification present in NBR 15575-4 (ABNT, 2013), that classifies the performance in minimum, intermediate and superior classes, with the requirements varying as a function of the boundary conditions of the system under use.

2.2. Fire resistance

In order to verify the compliment of the systems in their fire resistance requirements, real scale specimen were made by the same processes as the sound insulation tests but with a steel portico and a sample area of 9 m² that is fixed into a vertical furnace (Fig. 2). The tests were taken by the prescriptions of the NBR 10636 (ABNT, 1989), the Brazilian standard for evaluation of non-structural sealing systems. The samples were exposed to the fire by the standardized temperatures of ISO 834 (ISO, 1999). According to this standard, the samples were classified as fire blocking (FIB) by the period that they complied with the requirements of structural stability, airtightness and thermal insulation, and also classified as flame blocking (FLB) when they doesn't comply only with the thermal insulation requirements. In this two classifications the prefix FB or FLB are succeeded by the time, in minutes, that the sample resisted to each parameter. For both samples, the test time was 360 minutes and the exposure conditions were the same.



Figure 2. Vertical furnace used to determine the fire resistance of vertical sealing walls.
Source: The authors.

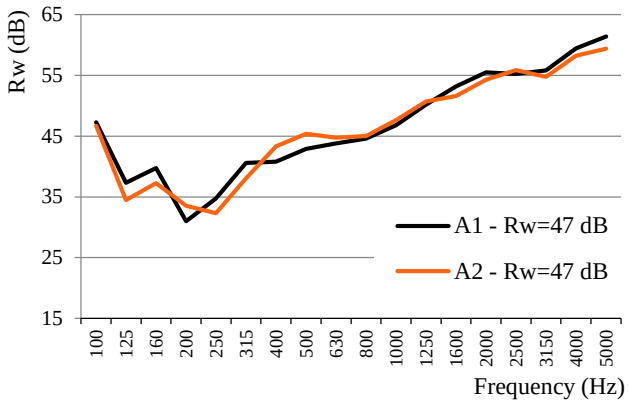


Figure 3. Sound reduction index of the samples.
Source: The authors.

During the test period and by the recommendations of NBR 10636 (ABNT, 1989), mechanical resistance, airtightness and thermal insulation were verified in both samples. On mechanical resistance, we have the structural stability, where an impact of three steel spheres with 25 kg were projected by a pendular movement with an energy of 20J applied three minutes before the end of the test, and the deformation was measured by a laser ruler. In order to verify the airtightness failure, a cotton wad, previously dried in a stove, was positioned near the fissures, detected with the support of a thermographic camera, for a period of 10 seconds. If the cotton ignites the system loses its airtightness. Thermal insulation was analyzed by the temperatures registered by nine thermocouples placed in the non-exposed side of the wall. The arithmetic average of the temperatures of the main thermocouples (6 to 10) cannot pass the limit of 140 °C and/or one of the nine thermocouples (6 to 14) must not overpass 180 °C. For these two cases, the ambient temperature at the start of the test must be added.

3. Results

3.1. Sound insulation

On acoustic performance, the sound reduction index of the samples are expressed in Fig. 3, where it's possible to verify that both had a similar comportment of the transmission loss over the frequency bands analyzed.

It is possible to verify that both samples had an accentuate sound reduction index in 100 Hz provided by their stiffness, decreasing and differing in the others low frequency bands, characteristic of the coincidence valley commented by Fringuellino and Smith (1999), in the first resonance controlled zone, varying as a function of the damping mechanisms of each brick composition. The two samples resemble each other again in the mid frequency bands, in the mass controlled zone, differing only in the 400 to 630 Hz bands. At these points, sample A2 had a greater sound reduction index, contradicting the expected result if only the superficial mass of the systems were considered. Still, it also shows that with a greater liquid to gross area, even with less superficial mass, the sound reduction index of the sample can be greater in these bands. In the high frequencies, the comportment of the systems is also similar, differing only in the frequency where the coincidence effect occurs, in 2500 Hz band for sample A1 and 3150Hz on sample A2, where the relatively small cavities can't handle frequency modes in the mid and high bands, causing the resonance effect as referred to Hopkins (2012).

With the measured sound reduction index of the samples, they can be classified by NBR 15575-4 (ABNT, 2013) requirements. As both had the same measured sound reduction index (47 dB), they have the same performance classification. The two systems, according to terms of application by the standard, presents minimum performance classification when used as vertical sealing systems between units in situations where one of the rooms isn't a bedroom or living room, partitions between bedrooms and common use areas with eventual transit. In addition, the systems have superior performance when used as partitions between kitchens or living rooms and common use areas with eventual transit.

3.2. Fire resistance

The normative limits of the ISO 834 standard curve were respected throughout the test. The temperatures of each sample during the fire resistance test are shown on Fig. 4-6.

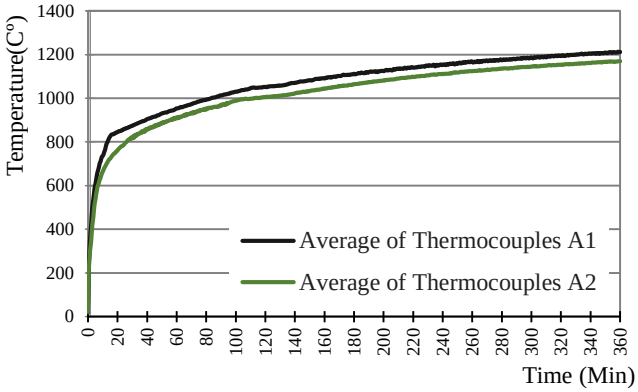


Figure 4. Average temperature of the exposed face of samples A1 and A2.
Source: The authors.

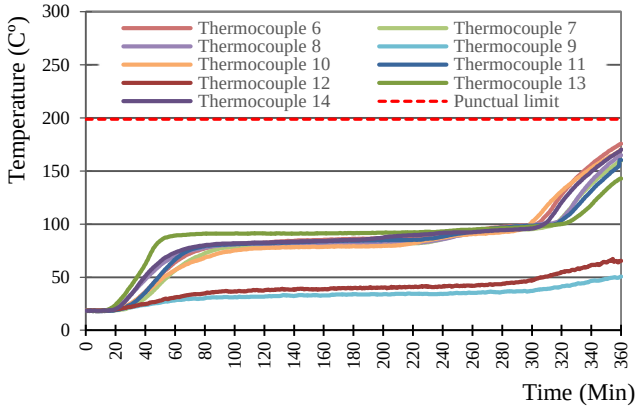


Figure 5. Average temperature of the non-exposed face of sample A1.
Source: The authors.

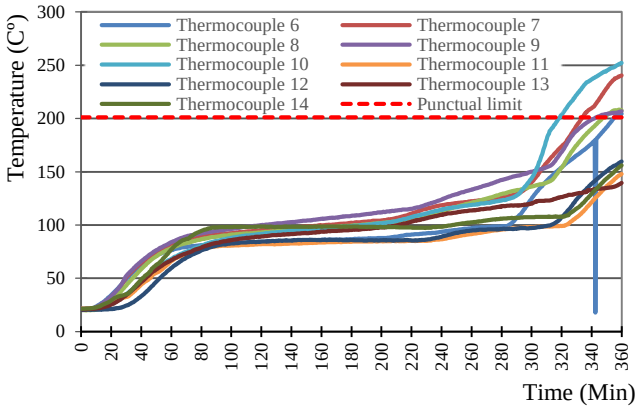


Figure 6. Average temperature of the non-exposed face of sample A2.
Source: The authors.

Sample A1 had a better performance when compared to A2, mainly in terms of the temperature elevation in the non-exposed side. At 319 minutes of the test of sample A2, the punctual temperature of the thermocouples 7 and 10, in the non-exposed side, overpassed 180 °C (added to the temperature in the beginning of the test, 21,1 °C), indicating the occurrence of a failure in the system, overpassing the limit according to NBR 10636 (ABNT, 1989).

After the exposure of the samples to high temperatures, sample A1 showed satisfactory structural stability, and the exposed side of the coating layer remained adhered to the substrate, showing only small fissures in this same side. On sample A2, there was spalling of the mortar coating approximately on 32 percent of the area of the face exposed to fire, in the mid-inferior partition. It is the most possible cause of the increase in the exterior temperature of the sample, as referenced by Nguyen and Meftah (2012). It is also observed that there was no stabilization of the temperature of the non-exposed face, referred to above and occurred in system A1, impairing the thermal insulation over

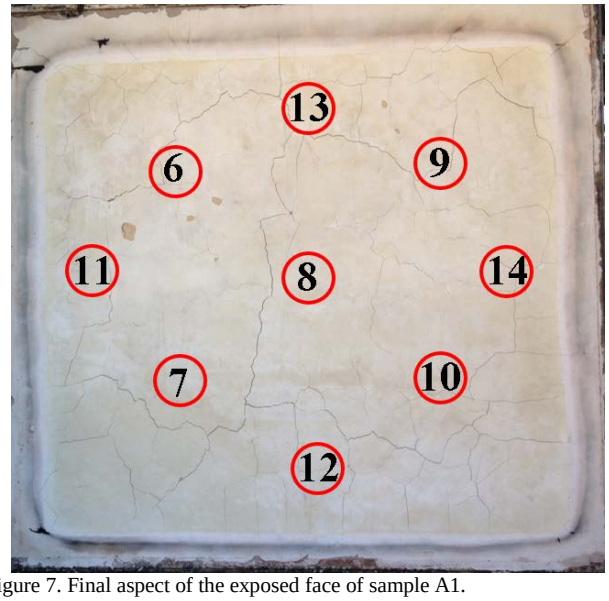


Figure 7. Final aspect of the exposed face of sample A1.
Source: The authors.



Figure 8. Final aspect of the exposed face of sample A2.
Source: The authors.

time by failure of adhesion of the coating to the substrate. The final aspect and the projection of the position of the thermocouples in the non-exposed face of the two samples are shown in Fig. 7-8.

4. Conclusion

From the tests and posterior analysis of the obtained results, it is possible to visualize the influence of the geometry of the two bricks that composed the samples A1 and A2 in their acoustic sound reduction capability and their fire resistance, as well as their specific classifications for each case.

Regarding the acoustic performance, both samples showed similar partial results, differing only in some frequency bands by the internal damping, geometry (with their different liquid to gross relation) and mass of the bricks, varying as a function of their geometry, as well as the same measured sound reduction index (47 dB). As they have the same measured result, they have the same performance classification on the standards.

On fire resistance, the difference in the geometries of the bricks that composed the two samples promoted a higher discrepancy on their performance. There was the loss of thermal insulation in sample A2, with the spalling of the mortar coating at 319 minutes, making the comparison impossible from then. However, it was possible to observe the importance of the mortar coating for the heat transfer resistance. Thus, sample A1 had the classification as FB360 and FLB360, and A2 had FB240 and FLB360. In this way, sample A1 had a sensitive superior performance when compared to A2.

With the tests and analysis of each sample, it is possible to verify a relevance and validation of the obtained data. It is possible as well to evidence the necessity of the verification of the performance of the usually used systems in the country

construction market with the relatively new standard requirements. This study allowed the visualization of the negative influence, at some points, of a ceramic brick wall with less density and more voids than the other analyzed system.

References

[1] Associação Brasileira de Normas Técnicas - ABNT 15575: Residential buildings – Performance – Part 4: Requirements for internal and external wall systems. Rio de Janeiro, 2013.

[2] Associação Brasileira de Normas Técnicas - ABNT 14432: Fire-resistance requirements for building construction elements - Procedure. Rio de Janeiro, 2001.

[3] Associação Brasileira de Normas Técnicas - ABNT 10636: Fire test - Wall and dividing wall without structural function - Fire resistance - Method of test. Rio de Janeiro,1989.

[4] International Organization for Standardization (ISO). ISO 10140: Acoustics – Laboratory measurement of sound insulation of building elements – Part 2: Measurement of airborne sound insulation. Geneva, 2010.

[5] International Organization for Standardization (ISO). ISO 10140: Acoustics – Laboratory measurement of sound insulation of building elements – Part 4: Measurement procedures and requirements. Geneva, 2010.

[6] International Organization for Standardization (ISO). ISO 10140: Acoustics – Laboratory measurement of sound insulation of building elements – Part 5: Requirements for test facilities and equipment. Geneva, 2010.

[7] Internacional Organization for Standardization (ISO). ISO 717-1 - Acoustics - Rating of sound insulation in buildings and of building elements - Part 1: Airborne sound insulation. Geneva, 2013.

[8] Brentano, T. Hydraulic installations to fight fire into buildings. 4. ed.Porto Alegre: EDIPUCRS, 2004. (in portuguese).

[9] Buchanan, A. and Munukutla, V.R., Fire resistance of load-bearing reinforced concrete walls. In: Proceedings of the Third International Symposium, Fire Safety Science, Borehamwood, 1991, pp. 771-780.

[10] Hopkins, C., Sound Insulation, Elsevier Ltd., Burlington, 2012.

[11] Fahy, F., Introduction. In: Fahy, F. and Thompson, D., Eds., Fundamentals of sound and vibration. 2. Ed. Boca Raton: CRC Press, 2014.

[12] Fringuellino, M. and Smith, S., Sound transmission through hollow brick walls. Building acoustics, 6(3), pp. 211-224, 1999. DOI: 10.1260/1351010991501419

[13] Gösele, K. and; Schröder, E., Sound insulation in buildings. In: Müller, G. and Möser, M., Handbook of engineering acoustics. 1rd. Ed. Berlim: Springer-Verlag, 2013.

[14] Guillen, I. et al., On the sound insulation of masonry wall façades. Building and Environment, 43(4), pp. 523-529, 2008. DOI: 10.1016/j.buildenv.2007.01.010

[15] Hansen, C., Noise control - from concept to application. 1rd. Ed. London: Taylor & Francis, 2005.

[16] Maciá, M. and Rolando, A., Experimental analysis of temperature profiles in ceramic brickwork elements subjected to high temperatures. Materiales de Construcción, 63(312), pp. 539-552, 2013. DOI: 10.3989/mc.2013.05312

[17] Moura, J., Santos, J. and Pinheiro, I., Perseption of the impact of NBR 15575 in the sustainability of the building. Revista de Gestão Social e Ambiental, 10, pp. 72-92, 2016. DOI: 10.5773/rgsa.v10i1.1107

[18] Nguyen, T. and Meftah, F., Behavior of clay hollow - brick masonry walls during fire. Part1: Experimental analysis, Fire Safety Journal. 52, pp. 55-64, 2012. DOI: 10.1016/j.firesaf.2012.06.001

[19] Nguyen, T. et al., The behaviour of masonry walls subjected to fire: Modelling and parametrical studies in the case of hollow burnt-clay bricks. Fire Safety Journal, 44(4), pp. 629-641, 2009. DOI: 10.1016/j.firesaf.2008.12.006

[20] Ono, R., Parameters to guarantee the quality of the fire security design in high buildings. Ambiente Construído. Porto Alegre, 7(1), pp. 97-113, 2007.

[21] Paris-Newton, J., Prokofieva, E. and Henry, N., Improvement of thermal insulation of residential buildings' facades via acoustic insulation. Building Acoustics, 23(2), pp. 120-128, 2016. DOI: 10.1016/j.egypro.2015.11.134

[22] Silva, A.T., Kern, A.P., Piccoli, R. and González, M.A.S., Novas exigências decorrentes de programas de certifi cação ambiental de prédios e de normas de desempenho na construção. Arquitetura Revista, 10(2), pp. 105-114, 2014. DOI: 10.4013/arq.2014.102.06

S. Klippel-Filho, received the BSc. Eng. in Civil Eng. in 2017 from the Universidade do Vale do Rio dos Sinos - Unisinos. São Leopoldo, Brazil. From 2014 to 2017, he worked for it Performance (Unisinos) into the Acoustic Performance field, having expertise and research interest in measurement techniques and materials prescription for sound insulation and room comfort.
ORCID: 0000-0001-5831-6719.

G.L. Prager, received the BSc. Eng in Civil Eng. in 2017 from the Universidade do Vale do Rio dos Sinos - Unisinos. São Leopoldo, Brazil. From 2013 to 2017, he worked in the Fire Resistance field in itt Performance (Unisinos), working and researching the fire resistance capability of vertical sealing systems.
ORCID: 0000-0001-9917-3144.

P.E. Mezzomo-S., currently is a student of Civil Eng. in Universidade do Vale do Rio dos Sinos - Unisinos. São Leopoldo, Brazil. From 2014 to 2017, worked as a laboratory technician into the quality field, being responsible for the maintenance of the quality procedures of the it Performance (Unisinos) areas. ORCID: orcid.org/0000-0002-9437-2141.

F.L. Bolina, received the BSc. Eng in Civil Eng. in 2011, from PUCRS, Porto Alegre, Brazil, with a sandwich period in École Nationale d'Ingénieurs de Saint-Etienne, Saint-Etienne, France. Had the MSc. degree by Universidade do Vale do Rio dos Sinos – Unisinos in 2016 and hás the Dr. Title in progress. Has Sp. in Pathology in Civil Constructions by Unisinos and CUJAE, Cuba, and also in Mettalic Structures by UNICID, São Paulo, Brazil. Currently works as a researcher of it Performance (Unisinos) and as a professor in the Graduation in Civil Engineering of Universidade do Vale do Rio dos Sinos, Brazil. His research interests include the durability, pathology, fire resistance and structural analysis.
ORCID: 0000-0002-0495-099X.

B.F. Tutikian, received the BSc. Eng in Civil Eng. in 2002, the MSc. and Dr. degree in 2004 and 2007, respectively, all of them from the Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil, and the PhD degree in 2013, from the CUJAE, Havana, Cuba. Currently works as coordinator of it Performance (Unisinos) and as a professor in the post-graduation program in Civil Engineering of Universidade do Vale do Rio dos Sinos and researcher of Universidad de la Costa, Colombia. His research interests include a vast knowledge in construction materials, specifically in the dosing of self-compaction concretes, area which he is the author of the book Concreto Autoadensável, published in 2008 and 2015.
ORCID: 0000-0003-1319-0547.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Multi-passes turning optimization for sustainable productions by using genetic algorithm and particle swarm heuristics

Iván La Fé-Perdomo, Ramón Quiza & Marcelino Rivas-Santana

Centro de Estudios de Fabricación Avanzada y Sostenible, Universidad de Matanzas, Cuba.
ivanlafeperdomo@gmail.com, ramón.quiza@umcc.cu, marcelino.rivas@umcc.cu

Received: October 31th, 2017. Received in revised form: February 21th, 2018. Accepted: February 23th, 2018.

Abstract
Selecting optimal cutting parameters is a very important task in any machining process planning, especially when sustainability is in the sight. This paper presents a multi-objective optimization focused on sustainable productions, for selecting optimal cutting parameters (cutting speed, feed, and depth of cut) in multi-pass cylindrical turning operations. Both, the economic and environmental pillars of sustainability are considered as optimization targets. Technical requirements, such as cutting power, forces and surface roughness, are also taken into account as constraints. Optimization was carried out through a posteriori approach, where a set of non-dominated solutions, also known as Pareto front, were obtained and, then, the most suitable combination of targets is selected for the specific workshop conditions. Two gradient-free optimization techniques were used for carrying out the optimization: the non-sorting genetic algorithm II and the multi-objective particle swarm optimization. A study case was carried out not only for evaluating the fitness of the proposed approach but also for comparing the performance of the considered techniques. The outcomes showed a better performance by the genetic algorithms, in both the computational efficiency and the quality of the obtained Pareto front. The proposed approach demonstrated its convenience for sustainability optimization of machining processes, giving a simpler way for analyzing simultaneously the economic and environmental aspects of sustainability.

Keywords: multi-pass cylindrical turning; multiobjective optimization; cutting parameters.

Optimización del torneado multipasada para producciones sostenibles utilizando algoritmos genéticos y enjambre de partículas

Resumen
La selección de parámetros óptimos de corte es un aspecto esencial en la planificación de cualquier proceso de maquinado, principalmente cuando la sostenibilidad es un objetivo primordial. En este trabajo se presenta una optimización multiobjetivo dirigida a producciones sostenibles, con el fin de seleccionar los parámetros de corte óptimos (velocidad, avance y la profundidad de corte) en operaciones de cilindrado multipasada. Como funciones objetivos del proceso fueron considerados: el aspecto económico y el medioambiental, los cuales son pilares representativos de la sostenibilidad. Requerimientos técnicos, tales como: la potencia de corte, las fuerzas y la rugosidad superficial fueron considerados como restricciones. La optimización se llevó a cabo mediante un enfoque *a posteriori*; donde se obtuvo un conjunto de soluciones no dominadas (también conocidas como frontera de Pareto) que permitió la selección de la combinación más viable de objetivos para las condiciones específicas del taller. Para la optimización se emplearon dos técnicas de gradiente libre: algoritmo genético sin ordenamiento y enjambre de partículas. Se desarrolló un estudio de caso para evaluar el ajuste y la eficiencia de las técnicas propuestas. Los resultados obtenidos mostraron un mejor rendimiento del algoritmo genético usado, en cuanto a: costo computacional y calidad de la frontera de Pareto obtenida. El método propuesto demostró ser muy conveniente para la optimización sostenible del proceso de torneado, a través de una evaluación simultánea de aspectos económicos y ambientales.

Palabras clave: cilindrado multipasada; optimización multiobjetivo; parámetros de corte.

1. Introducción

La determinación de los parámetros de corte óptimos, como: el número de pasadas, la profundidad corte en cada pasada, el avance y la velocidad, son una tarea primordial para cualquier proceso de maquinado. En la práctica real del

How to cite: La Fé-Perdomo, I., Quiza, R. and Rivas-Santana, M., Optimización del torneado multipasada para producciones sostenibles utilizando algoritmos genéticos y enjambre de partículas. DYNA, 85(204), pp. 59-64, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

taller estos parámetros de corte son seleccionados a partir de bases de datos o manuales especializados; sin embargo, los rangos que se ofrecen en esas fuentes son solo valores iniciales y no los valores óptimos [1].

La optimización de los parámetros de corte es una tarea difícil [2], donde se requieren conocimientos sobre: ecuaciones empíricas que relacionen la vida útil de la herramienta, la fuerza de corte, la potencia, la rugosidad superficial, que permitan desarrollar restricciones realísticas; especificaciones de la máquina herramienta; criterios de optimización empleados, así como la fundamentación matemática de los mismos [3].

En cualquier procedimiento de optimización, la identificación de las funciones de salida (conocidas como funciones objetivos), es un aspecto crucial. En el caso específico del proceso de torneado el criterio más usado es el de los costos específicos [4-10].

Otros criterios empleados son: los tiempos de maquinado [9-11], el consumo de energía [12, 13], la velocidad de remoción de material [13-15] y el desgaste de la herramienta [15], en estas investigaciones (más contemporáneas) se encuentran combinados varios de los criterios antes mencionados, debido a que esto permite una mejor caracterización y comprensión del proceso en estudio, no siendo así cuando se tratan como problemas enfocados en un solo objetivo, los cuales limitan la decisión que se puede tomar sobre determinada operación [16].

El enfoque a posteriori para la toma de decisiones es un recurso ventajoso en las tareas de optimización, debido a que las soluciones se muestran como un conjunto de valores no dominados, permitiendo la selección de cualquiera de esas soluciones a partir de los intereses y condiciones específicas de la producción. Estas soluciones se consideran óptimas ya que en el espacio de búsqueda no existe una solución mejor que ellas cuando son considerados todos los objetivos simultáneamente [17] y son conocidas también como soluciones óptimas de Pareto, las cuales se representan gráficamente en la frontera de Pareto.

En aplicaciones reales, la obtención del conjunto de Pareto puede resultar computacionalmente más costosa. Por esta razón se han desarrollado numerosas estrategias de búsqueda, las cuales no garantizan la obtención de soluciones óptimas pero si tratan de hallar buenas aproximaciones (near optimal solutions). Dentro de esas estrategias se destaca por su aplicación a los procesos de manufactura los algoritmos genéticos, [1, 6, 10, 11, 14, 18-20] capaces de encontrar soluciones óptimas a un costo computacional razonable. Otra heurística ampliamente aplicada a los procesos de maquinado es la de enjambre de partículas (particle swarm optimization, PSO). Hrelja y colaboradores [21] aplican esta técnica al proceso de torneado con el objetivo de mejorar la rugosidad superficial y la vida útil de la herramienta; por otra parte en el trabajo propuesto por [22] se consideran como criterios de optimización la presión específica de corte, las fuerzas y la potencia de corte en el torneado de PEEK CF30 (Poly Ether Ether Ketone) aplicando PSO. Este método fue empleado también por [23] para estudiar el efecto de la lubricación sobre las fuerzas de corte, la temperatura, el desgaste y la rugosidad superficial sobre el torneado de aleaciones de titanio.

Considerando lo planteado en el estado del arte, en este trabajo se propone la optimización multiobjetivo del cilindrado de varias pasadas con un enfoque sostenible, teniendo en cuenta como funciones objetivos, los costos de operación y el impacto ambiental (evaluado en el consumo de energía y el gasto de herramienta). Para llevar a cabo esta tarea fueron aplicadas y comparadas las heurísticas de: algoritmos genéticos (específicamente el algoritmo evolutivo no dominado, NSGA-II propuesto por [24]) y enjambre de partículas [25].

2. Definición del problema de optimización

2.1. Variables de decisión

Como variables de decisión, para la optimización del proceso de maquinado, se tomaron los parámetros del régimen de corte: velocidad, avance y profundidad de corte. En el caso considerado, correspondiente a un torneado cilíndrico de pasadas múltiples, hay que tener en cuenta que la última pasada es de acabado y las previas, de desbaste. En ese caso, asumiendo que todas las pasadas de desbaste se llevarán a cabo con el mismo régimen, se tienen seis variables de decisión: la profundidad de corte de acabado, a_F; el número total de pasadas, N; el avance para el desbaste, f_R, y el acabado, f_F; y la velocidad de corte para el desbaste, v_R, y el acabado, v_F.

Nótese que la profundidad de corte para el desbaste, a_R, puede calcularse mediante la expresión:

$$a_R = \frac{d_0 - d - 2a_F}{2(N-1)} \tag{1}$$

donde d_0 y d son los diámetros inicial y final, respectivamente, del escalón elaborado.

Teniendo en cuenta lo anterior, para cada una de las N pasadas, los parámetros de corte serán:

$$a_i = \begin{cases} a_R : i = 1, \ldots, N-1 \\ a_F : i = N \end{cases}; \tag{2a}$$

$$f_i = \begin{cases} f_R : i = 1, \ldots, N-1 \\ f_F : i = N \end{cases}; \tag{2b}$$

$$v_i = \begin{cases} v_R : i = 1, \ldots, N-1 \\ v_F : i = N \end{cases}. \tag{2c}$$

2.2. Funciones objetivos

Como funciones objetivo se toman los dos aspectos considerados de la sostenibilidad del proceso: económico y ambiental. Para el primero, se consideró el costo total de la operación, z_{TOT}:

$$z_{TOT} = (z_L + z_O)\tau + z_T\xi + z_E E \ . \tag{3}$$

donde z_L es el costo horario por mano de obra; z_O, el total

de costos horarios indirectos; z_T, el costo unitario de herramienta; z_E, el costo unitario de energía consumida; τ, el tiempo de producción; ξ, la vida útil consumida de la herramienta; y E, el consumo de energía. Por su parte, el tiempo de producción se calcula como:

$$\tau = \tau_S + \tau_C + \tau_T + \tau_{B0}\ ; \tag{4a}$$

donde, τ_S es el tiempo de instalación y desinstalación; τ_C, el tiempo total de corte; τ_T, el tiempo de cambio de herramienta; y τ_B, el tiempo de retroceso de la herramienta. La ecuación 4 puede ser, entonces, rescrita de la siguiente forma:

$$\tau = \tau_S + \sum_{i=1}^{N}\tau_{Ci} + \tau_{T0}\sum_{i=1}^{N}\frac{\tau_{Ci}}{T_i} + (N-1)\tau_{B0}\ . \tag{4b}$$

donde, τ_{Ci} es el tiempo de corte para la i-ésima pasada:

$$\tau_{Ci} = \frac{\pi d_{i-1} L}{1000 v_i f_i} \tag{5}$$

El consumo de herramienta por cada pasada se determina mediante la relación:

$$\xi_i = \frac{\tau_{Ci}}{T_i}\ . \tag{6}$$

y la vida útil de la herramienta para cada pasada, T_i, puede ser calculada usando la ley de Taylor extendida:

$$T_i = C_T v_i^{\alpha} f_i^{\beta} a_i^{\gamma}\ . \tag{7}$$

donde C_T, α, β y γ son coeficientes determinados empíricamente.

El segundo objetivo es el impacto ambiental. EI, que tiene en cuenta el consumo de energía y el gasto herramental; ambos parámetros fueron normalizados, mediante una interpolación lineal, para poder establecer una relación entre ellos:

$$EI = \frac{(E - E_{min})}{(E_{max} - E_{min})} + \frac{(\xi - \xi_{min})}{(\xi_{max} - \xi_{min})}\ . \tag{8}$$

En la ecuación anterior, E, es la energía total consumida en el proceso:

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_i = \sum_{i=1}^{N} P_i \tau_{Ci}\ ; \tag{9}$$

siendo E_i la energía consumida; y P_i, la potencia de corte en la i-ésima pasada:

$$P_i = \frac{F_i v_i}{6 \cdot 10^4}\ ; \tag{10}$$

que depende de la velocidad de corte, v_i, y de la fuerza, F_i, que a su vez se puede calcular por la ecuación:

$$F_i = C_F v_i^{\lambda} f_i^{\mu} a_i^{\nu}\ . \tag{11}$$

donde C_F, λ, μ y ν son coeficientes determinados empíricamente.

2.3. Restricciones

Para el proceso de corte es necesario que se cumplan determinadas restricciones. Primero que todo, los parámetros de corte se deben seleccionar en el rango permitido para la herramienta seleccionada:

$$a_R^{min} \le a_R \le a_R^{max}\ ; \tag{12a}$$

$$a_F^{min} \le a_F \le a_F^{max}\ ; \tag{12b}$$

$$f_R^{min} \le f_R \le f_R^{max}\ ; \tag{12c}$$

$$f_F^{min} \le f_F \le f_F^{max}\ ; \tag{12d}$$

$$v_R^{min} \le v_R \le v_R^{max}\ ; \tag{12e}$$

$$v_F^{min} \le v_F \le v_F^{max}\ . \tag{12f}$$

Además, la fuerza de corte para cada pasada, F_i, no debe sobrepasar un valor máximo, F^{max}, el cual está dado por la resistencia y rigidez del sistema máquina-herramienta-pieza:

$$F_i \le F^{max};\ \forall i \in [1,...,N] \tag{13}$$

También, la potencia de corte para cada pasada, P_i, no debe ser mayor que la potencia del motor de la máquina herramienta, P_{mot}, afectada por la eficiencia de la trasmisión, η:

$$P_i \le \eta P_{mot};\ \forall i \in [1,...,N] \tag{14}$$

Estas dos últimas restricciones deben ser especialmente analizadas en las pasadas de desbaste.

Finalmente, en la pasada de acabado la rugosidad superficial obtenida, R_i, debe ser menor o igual al valor especificado en los requerimientos tecnológicos de la superficie a elaborar, R^{max}:

$$R_i = \frac{125 f_i^2}{r_E} \le R^{max} : i = N \tag{15}$$

donde, r_E es el radio de la punta de la herramienta.

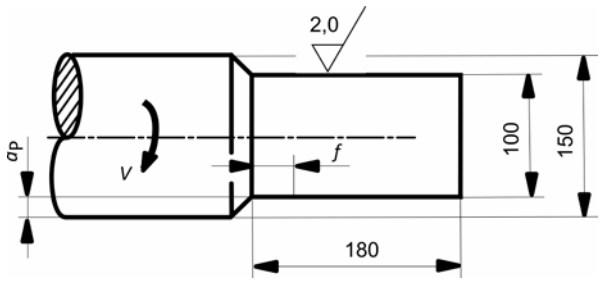


Figura 1. Croquis de la sección considerada en el caso de estudio.
Fuente: Elaborado por los autores.

2.4. Algoritmos empleados

La implementación de los algoritmos de optimización se realizó en el software MatLab R2013a.

Los parámetros empleados para el NSGA-II (*non-dominated sorting genetic algorithm*), son: tamaño de población de 1000 muestras, y un número máximo de iteraciones igual a 200. La población inicial fue creada siguiendo una distribución aleatoria y uniforme. El cruzamiento fue hecho mediante la técnica de punto simple. Para la mutación se aplicó una probabilidad de 0,01.

El algoritmo de Enjambre de Partículas se ejecutó con un tamaño de partículas de 1000 e igual número para el repositorio de la población, un factor de inercia de 0,5 y un coeficiente global de aprendizaje de 2 (estos valores se establecen a prueba y error).

Para comparar la eficiencia de ambos algoritmos (fueron ejecutadas 50 réplicas de los mismos) se seleccionó el tiempo de cómputo y el hiperárea [26], esta última evalúa la calidad de la frontera de Pareto obtenida.

3. Análisis de los resultados

3.1. Caso de studio

Con el objetivo de ilustrar el método de optimización propuesto, se llevará a cabo el siguiente estudio de caso. Se debe elaborar una sección de un árbol de AISI 1045, con longitud 180 mm, desde un diámetro inicial de 150 mm hasta un diámetro de 100 mm (ver Fig. 1). De acuerdo con los requisitos tecnológicos, la superficie obtenida debe tener una rugosidad no mayor de 2.0 μm (*Ra*).

El proceso de torneado se ejecutará en un torno CNC, el cual tiene un motor de 10 kW y una eficiencia en la transmisión del 75%. La fuerza máxima permisible por la máquina herramienta es de 5000 N. El radio de la punta tanto para la herramienta de desbaste como para la de acabado es de 2 mm. Los rangos permisibles de los parámetros de corte para la herramienta seleccionada se muestran a continuación. Cabe destacar que como la herramienta para el desbaste y el acabado es la misma, el avance y la velocidad se mantienen igual para ambas operaciones.

$$0.1\ \text{mm} \le a_{\text{R}} \le 6.0\ \text{mm};$$

$$0.1\ \text{mm} \le a_{\text{F}} \le 0.4\ \text{mm};$$

$$0.15\ \text{mm/rev} \le f_{\text{R}} \le 0.55\ \text{mm/rev};$$

$$0.15\ \text{mm/rev} \le f_{\text{F}} \le 0.55\ \text{mm/rev};$$

$$250\ \text{m/min} \le v_{\text{R}} \le 400\ \text{m/min};$$

$$250\ \text{m/min} \le v_{\text{F}} \le 400\ \text{m/min}.$$

Para la combinación pieza-herramienta empleada, se obtuvieron los siguientes modelos empíricos, para la vida útil de la herramienta y la fuerza de corte:

$$T_i = \frac{5,48 \cdot 10^9}{v_i^{3,46} f_i^{0,696} a_i^{0,460}} \tag{16}$$

$$F_i = \frac{6,56 \cdot 10^3 f_i^{0,917} a_i^{1,10}}{v_i^{0,286}} \tag{17}$$

Estos modelos solo son válidos en los intervalos antes mencionados, los cuales son suministrados por el fabricante de las herramientas usadas.

El tiempo de instalación, el tiempo de cambio y el tiempo de retroceso para una herramienta, se han asumido como: 1,5; 1,0 y 0,1 min, respectivamente. Por otra parte el costo específico por mano de obra, el costo por gastos indirectos, el costo por herramienta y el costo por energía consumida son de: 0,44 $; 0,18 $; 14,17 $ y 0,20 $ respectivamente.

3.2. Discusión

Después de ejecutar los algoritmos de optimización, los puntos no dominados o soluciones óptimas son representados gráficamente en la frontera de Pareto (ver Fig. 2 y 3), con el objetivo de facilitar el proceso de toma de decisión.

En un análisis preliminar, entre ambas fronteras, se puede observar que la dispersión de los resultados de las diferentes réplicas es mayor en los resultados de PSO. Esto hace que los mismos sean cualitativamente inferiores a los obtenidos por NSGA-II.

Lo anterior se corrobora a través del cálculo del hiperárea, como métrica de la calidad de las fronteras de Pareto obtenidas. Como se puede observar (Tabla 1), la hiperárea de las fronteras obtenidas por NSGA-II no sólo es mayor, sino que presenta una menor dispersión.

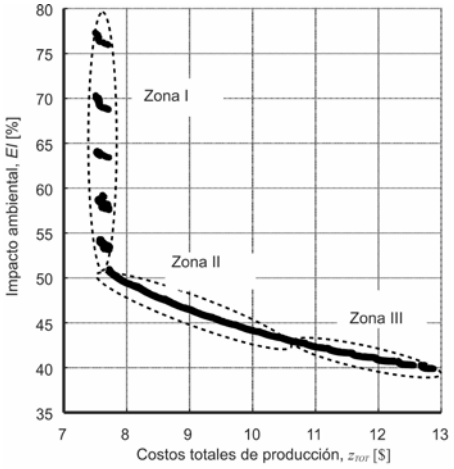


Figura 2. Resultados de la optimización con NSGA-II.
Fuente: Elaborado por los autores.

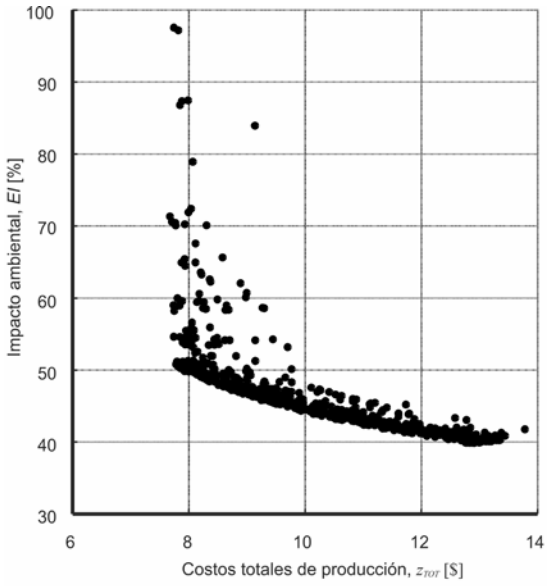


Figura 3. Resultados de la optimización con PSO.
Fuente: Elaborado por los autores.

Tabla 1.
Comparación entre ambos métodos.

Algoritmo	Tiempo de ejecución (s)	Hiperárea
NSGA-II	27,45 ± 0,69	272,0 ± 1,3
PSO	53,61 ± 0,17	246,0 ± 3,5

Fuente: Elaborada por los autores.

Por otro lado, el tiempo de cómputo del NSGA-II es marcadamente inferior al del PSO. Se puede concluir que el NSGA-II es superior al PSO no sólo por la calidad de la frontera obtenida, sino también por la eficiencia computacional.

La toma de decisiones se lleva a cabo, entonces, a partir de la frontera generada por el NSGA-II (Fig. 2). Como se puede apreciar en la misma, las soluciones pueden ser divididas en tres zonas:

- Zona I: En esta zona los costos alcanzan sus valores más bajos, y consecuentemente el impacto ambiental posee los mayores porcientos. Estas soluciones son las más convenientes cuando en el taller se presentan dificultades con los indicadores económicos.
- Zona II: Aquí se puede notar un equilibrio aceptable entre los costos y el impacto ambiental. Esta zona es la recomendada cuando se quieren estabilizar los indicadores de sostenibilidad analizados (funciones objetivos de la optimización).
- Zona III: En esta zona se sacrifican los costos de la operación en función de disminuir el consumo de corriente y de herramienta. Esta solución es la aconsejada cuando existan problemas con el suministro de energía o de herramental.

Evidentemente, la solución seleccionada finalmente dependerá de las condiciones específicas de la producción en cuestión.

4. Conclusiones

Como resultado del estudio realizado se formalizó una metodología para la optimización multiobjetivo del proceso de torneado enfocada a la sostenibilidad. La misma incluyó no sólo los objetivos enfocados a reflejar los aspectos económicos y ambientales del proceso, sino también las restricciones tecnológicas de éste.

Las dos técnicas de optimización libre de gradiente utilizadas (algoritmos genéticos y enjambre de partículas), mostraron ser efectivas en la solución del problema, aunque los resultados del algoritmo genéticos fueron superiores tanto en la calidad de la frontera de Pareto obtenida como en la eficiencia computacional de la optimización.

El enfoque *a posteriori* demostró ser una opción viable en la selección de los parámetros más convenientes en el proceso de cilindrado multipasada. Éste ofrece la ventaja de no tener que recurrir a evaluaciones subjetivas de la importancia relativa de los objetivos considerados, sino que, a través de la obtención de un grupo de soluciones no dominadas, permite la selección de la variante más conveniente en dependencia de las condiciones específicas del proceso en cuestión.

Como extensión futura del presente trabajo, se considerará la aplicación de la metodología propuesta a otros procesos de maquinado, tales como el fresado o el taladrado. También será conveniente, analizar la efectividad de otras técnicas de optimización libres de gradiente como son el recocido simulado y el método de entropía cruzada.

Referencias

[1] Dereli, T., Filiz, I.H., and Baykasoglu, A., Optimizing cutting parameters in process planning of prismatic parts by using genetic algorithms. International Journal of Production Research, 39(15), pp. 3303-3328, 2001. DOI: 10.1080/00207540110057891.

[2] Sreekumar, M., Zoppi, M., Nithiarasu, P., et al., International Conference on Design and Manufacturing (IConDM2013) Optimization of Machining Parameters for end Milling of Inconel 718 Super Alloy Using Taguchi based Grey Relational Analysis. Procedia Engineering, 64, pp. 1276-1282, 2013. DOI: 10.1016/j.proeng.2013.09.208.

[3] Quiza, R., Beruvides, G., and Davim, J.P., Modeling and optimization of mechanical systems and processes, in: Modern mechanical engineering, Davim, J.P., Ed. Springer Berlin Heidelberg, 2014, pp. 169-198.

[4] Taylor, F.W., On the art of cutting metals. Transactions of the ASME, 28, pp. 310-350, 1907.

[5] Saravanan, R., Asokan, P. and Vijayakumar, K., Machining parameters optimisation for turning cylindrical stock into a continuous finished profile using genetic algorithm (GA) and simulated annealing (SA). International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 21(1), pp. 1-9, 2003. DOI: 10.1007/s001700300000.

[6] Cus, F. and Balic, J., Optimization of cutting process by GA approach. Robotics and Computer Integrated Manufacturing, 19(1-2), pp. 113-121, 2003. DOI: 10.1016/s0736-5845(02)00068-6.

[7] Cus, F. and Zuperl, U., Approach to optimization of cutting conditions by using artificial neural networks. Journal of Materials Processing Technology, 173(3), pp. 281-290, 2006. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2005.04.123.

[8] Amiolemhen, E. and Ibhadode, A.O.A., Application of genetic algorithms-determination of the optimal machining parameters in the conversion of a cylindrical bar stock into a continuous finished profile. International Journal of Machine Tools and Manufacture, 44(12-13), pp. 1403-1412, 2004. DOI: 10.1016/j.ijmachtools.2004.02.001.

[9] Quiza, R., Albelo, J.E. and Davim, J.P., Multi-objective optimisation of multipass turning by using a genetic algorithm. International Journal of Materials and Product Technology, 35(1-2), pp. 134-144, 2009. DOI: 10.1504/ijmpt.2009.025223.
[10] Ganesan, H. and Mohankumar, G., Optimization of machining techniques in CNC turning centre using genetic algorithm. Arabian Journal for Science and Engineering, 38(6), pp. 1529-1538, 2013. DOI: 10.1007/s13369-013-0539-8.
[11] D'Addona, D.M. and Teti, R., Genetic algorithm-based optimization of cutting parameters in turning processes. Procedia CIRP, 7, pp. 323-328, 2013. DOI: 10.1016/j.procir.2013.05.055.
[12] Guo, Y., Loenders, J., Duflou, J., et al., Optimization of energy consumption and surface quality in finish turning. Procedia CIRP, 1, pp. 512-517, 2012. DOI: 10.1016/j.procir.2012.04.091.
[13] Kumar, R., Bilga, P.S., and Singh, S., Multi objective optimization using different methods of assigning weights to energy consumption responses, surface roughness and material removal rate during rough turning operation. Journal of Cleaner Production, 164(Supplement C), pp. 45-57, 2017. DOI: 10.1016/j.jclepro.2017.06.077.
[14] Umer, U., Qudeiri, J.A., Hussein, H.A.M., et al., Multi-objective optimization of oblique turning operations using finite element model and genetic algorithm. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 71(1-4), pp. 593-603, 2014. DOI: 10.1007/s00170-013-5503-y.
[15] Yang, S.H. and Natarajan, U., Multi-objective optimization of cutting parameters in turning process using differential evolution and non-dominated sorting genetic algorithm-II approaches. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 49(5-8), pp. 773-784, 2010. DOI: 10.1007/s00170-009-2404-1.
[16] Li, H. and Zhang, Q., Multiobjective optimization problems with complicated Pareto sets, MOEA/D and NSGA-II. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 13(2), pp. 284-302, 2009. DOI: 10.1109/TEVC.2008.925798.
[17] Abbass, H.A., Sarker, R. and Newton, C. PDE: A Pareto–frontier differential evolution approach for multi objective optimization problems. in Congress on Evolutionary Computation. 2001. Piscataway, NJ (U.S.A.).
[18] Batish, A., Bhattacharya, A., Kaur, M. et al., Hard turning: Parametric optimization using genetic algorithm for rough/finish machining and study of surface morphology. Journal of Mechanical Science and Technology, 28(5), pp. 1629-1640, 2014. DOI: 10.1007/s12206-014-0308-y.
[19] Durairaj, M. and Gowri, S., Parametric optimization for improved tool life and surface finish in micro turning using genetic algorithm. Procedia Engineering, 64, pp. 878-887, 2013. DOI: 10.1016/j.proeng.2013.09.164.
[20] Quiza, R., Rivas, M., and Alfonso, E., Genetic algorithm-based multi-objective optimization of cutting parameters in turning processes. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 19(2), pp. 127-133, 2006. DOI: 10.1016/j.engappai.2005.06.007.
[21] Hrelja, M., Klancnik, S., Irgolic, T., et al., Turning parameters optimization using particle swarm optimization. Procedia Engineering, 69(Supplement C), pp. 670-677, 2014. DOI: 10.1016/j.proeng.2014.03.041.
[22] Hanafi, I., Cabrera, F.M., Dimane, F., et al., Application of particle swarm optimization for optimizing the process parameters in turning of PEEK CF30 Composites. Procedia Technology, 22(Supplement C), pp. 195-202, 2016. DOI: 10.1016/j.protcy.2016.01.044.
[23] Gupta, M.K., Sood, P.K. and Sharma, V.S., Optimization of machining parameters and cutting fluids during nano-fluid based minimum quantity lubrication turning of titanium alloy by using evolutionary techniques. Journal of Cleaner Production, 135(Supplement C), pp. 1276-1288, 2016. DOI: 10.1016/j.jclepro.2016.06.184.
[24] Deb, K., Pratap, A., Agarwal, A. et al., A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. IEEE Transections on Evolutionary Computation, 6(2), pp. 182-197, 2002. DOI: 10.1109/4235.996017.
[25] Coello, C.A., Pulido, G.T. and Lechuga, M.S., Handling multiple objectives with particle swarm optimization. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 8(3), pp. 256-279, 2004. DOI: 10.1109/TEVC.2004.826067.
[26] Jiang, S., Ong, Y.S., Zhang, J. et al., Consistencies and contradictions of performance metrics in multiobjective optimization. IEEE Transactions on Cybernetics, 44(12), pp. 2391-2404 2014. DOI: 10.1109/TCYB.2014.2307319.

I. La Fé-Perdomo, received the BSc. Eng in Mechanical Engineering (cum laude) in 2014, the MSc, degree in Computer Aided Engineering in 2017, all of them from the Universidad de Matanzas, Cuba. His research interests include: modeling and optimization of manufacturing process using statistical and computational intelligence techniques; and optimization using metaheuristics.
ORCID: 0000-0002-4042-1534

R. Quiza-Sardiñas, received the BSc. Eng in Mechanical Engineering in 1999 and the PhD degree in Manufacturing Engineering in 2005, all of them from the Universidad de Matanzas, Cuba. He has published several papers and books contributions in the fields of applied artificial intelligence and modeling and optimization of manufacturing processes. He has participated in the development of several software products. He has made post-doc stays in several universities and research centres (in Germany, Spain, Suriname and Venezuela) carrying out research or academic tasks. He is member of editorial board of three scientific journals. He is currently director of the Study Centre on Advanced and Sustainable Manufacturing, at University of Matanzas, Cuba. His main research interests are optimization, Artificial neural networks, Artificial intelligence, and manufacturing processes.
ORCID: 0000-0003-1293-6044

M. Rivas-Santana, received the Bs. Eng in Mechanical Engineering in 1983 and the PhD degree in Manufacturing Process in 1990, all of them from the Universidad de Matanzas, Cuba. His research interests include: simulation, modeling and optimization of manufacturing process using statistical and computational intelligence techniques; and optimization using metaheuristics.
ORCID: 0000-0002-0305-515X



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Mecánica

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Mecánica

Mayor información:

E-mail: acmecanica_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 4259262

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Sway reduction in tower-cranes through discrete-time resonant active disturbance rejection control

Horacio Coral-Enriquez & Santiago Pulido-Guerrero

Facultad de Ingeniería, Universidad de San Buenaventura sede Bogotá. hcoral@usbbog.edu.co, sapulido@academia.usbbog.edu.co

Received: March 13th, 2017. Received in revised form: October 07th, 2017. Accepted: November 15th, 2017.

Abstract
In this paper, the problem of payload oscillations in tower-cranes subject to parametric uncertainties and external disturbances through a discrete-time Active Disturbance Rejection Control (ADRC) scheme is addressed. In the proposed control scheme, state and disturbance estimations are provided by an extended state observer which incorporates a resonant internal model designed to improve disturbance/state estimations specially those coming from the payload oscillation. Then, the control law is designed to reject the disturbances on-line and accommodate the closed-loop system dynamics. The control proposal is experimentally validated on a small-scale tower-crane, and compared to an observer-based PI controller and other ADRC scheme. The experimental results show that the proposed control scheme provides improved attenuation in the oscillations of the payload and exhibits substantial improvements in disturbance rejection properties.

Keywords: active disturbance rejection control; extended state observer; tower-cranes control; resonator; disturbance observer; discrete-time.

Atenuación de efectos pendulares en grúas-torre usando control por rechazo activo de perturbaciones en tiempo discreto con observador resonante

Resumen
En este artículo, se propone un esquema de control en tiempo discreto basado en el enfoque del rechazo activo de perturbaciones (ADR) para abordar el problema de control de oscilaciones en la carga de grúas-torre sujetas a incertidumbres paramétricas y perturbaciones externas. El esquema de control propuesto usa un observador extendido que incorpora un modelo interno resonante diseñado para mejorar la estimación de variables de estado y perturbaciones, en especial las provenientes de la oscilación de la carga. La ley de control se diseña para rechazar las perturbaciones en línea y acomodar la dinámica de lazo cerrado. La propuesta de control se valida experimentalmente en una grúa-torre a escala, y es comparado con un PI-vectorial y otro control basado en el enfoque ADR. Los resultados experimentales muestran que el esquema propuesto presenta mejor desempeño para reducir las oscilaciones en la carga y exhibe mejoras sustanciales en el rechazo de perturbaciones.

Palabras clave: control por rechazo activo de perturbaciones; observador de estado extendido; control de grúas-torre; resonador; observador de perturbaciones; tiempo discreto.

1. Introducción

Las grúas torre de pluma horizontal son sistemas mecánicos encargados del transporte y posicionamiento de carga pesada dentro de una área de trabajo determinada. Las técnicas modernas de construcción emplean mayores requerimientos tanto de velocidad de transporte y posicionamiento de la carga como de precisión. Sin embargo dados esos requerimientos y considerando la configuración mecánica que presenta este tipo de sistema, se generan oscilaciones indeseadas en la carga aumentando el tiempo de posicionamiento de la misma [1], arriesgando la integridad

How to cite: Coral-Enriquez, H. and Pulido-Guerrero, S., Atenuación de efectos pendulares en grúas-torre usando control por rechazo activo de perturbaciones en tiempo discreto con observador resonante. DYNA, 85(204), pp. 65-75, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

del sistema [2] y el personal en el área de construcción.

Las grúas torre de pluma horizontal se componen de tres grados de libertad (GDL): rotación, elevación y traslación. Estos GDL son posibles gracias al movimiento en conjunto de subsistemas como la torreta, guaya (cuerda) y carretilla (ver Figs. 1 y 4). Uno de los problemas más comunes en el control manual de una grúa torre son las oscilaciones de la carga producto de perturbaciones externas como (fuerzas eólicas, sismos, etc.) o internas dado cambios de velocidad de la carga debido al movimiento en la carretilla (inercia). Estas perturbaciones obligan al operario a inhabilitar el mecanismo para evitar el aumento en las amplitudes de las oscilaciones en la carga [3]. En este sentido, la aplicación de técnicas de control ha tomado gran importancia en el campo de las grúas-torre para alcanzar requerimientos deseados en términos de desplazamiento de la carga sin generar oscilaciones de alta magnitud.

Las técnicas de control han tomado dos principales direcciones. Por un lado, esquemas de control para generar trayectorias deseadas de la carretilla que a la vez reducen las oscilaciones en la carga [4,5]. Por otro lado, teoría de control enfocada en controlar directamente la oscilación y el posicionamiento de la carga. En esta segunda dirección, investigadores se han centrado en sistemas de control, con los que obtienen movimientos rápidos y precisos en el desplazamiento de la carretilla sin generar oscilaciones considerables en la carga [6,7], sin embargo demandan modelos matemáticos detallados y no utilizan el conocimiento de las perturbaciones a las que está sometido el sistema. Además, se han propuesto esquemas de control no lineal [8-10] cuyas leyes de control resultan ser complejas, son totalmente diseñadas en tiempo continuo y en el caso de [8], se emula la perturbación del viento como una señal que no refleja de forma adecuada las condiciones a las que estaría sometida la carga durante su desplazamiento.

Bajo un enfoque diferente, en [11] se propone un controlador por rechazo activo de perturbaciones (ADRC) para controlar la posición de la carretilla y reducir oscilaciones en la carga. ADRC es una metodología de control para sistemas lineales y no lineales que fue inicialmente propuesta por Prof. Han, y luego adoptada y extendida por Prof. Z. Gao [12,13] la cual plantea estimar las perturbaciones externas e internas del sistema, asumiendo un modelo interno aproximado de la perturbación, para luego rechazarlas en línea mediante la ley de control. Actualmente, ADRC es un campo de fuerte investigación cuyas aplicaciones van desde control de motores [14], control de sistemas de potencia [15], control de robots [16], hasta control de turbinas eólicas [17]; pero muy poco explorado en el control de grúas torre. La aplicación de ADRC en [11] ha mostrado las ventajas de esta técnica, sin embargo aún hay varias desventajas que pueden ser resaltadas, a saber: el esquema de control se propone en tiempo continuo, el modelo interno de la perturbación usado para extender el observador de estados usa un aniquilador que asume que la perturbación es una señal constante, y no se muestra validación experimental de la propuesta de control que verifique la robustez y el desempeño real.

En este artículo, se propone un esquema de control basado en la filosofía del rechazo activo de perturbaciones cuya ley de control es definida en tiempo discreto, donde el conocimiento de la perturbación es mejor explotada al incorporar un aniquilador resonante dentro del observador de estados extendido que sirva para atenuar la oscilación de la carga con mejor desempeño. Además, esta propuesta de control es validada experimentalmente en una grúa-torre a escala, donde se muestra su real desempeño y robustez.

Este artículo está organizado de la siguiente forma. El modelo matemático de una grúa-torre se describe en la sección 2. En la sección 3 se describe y formula la propuesta de control. La sección 4 muestra brevemente otras técnicas de control usadas para propósitos de comparación. El análisis de robustez del esquema de control propuesto se desarrolla y discute en la sección 5. En la sección 6 se presenta la validación experimental de la propuesta de control evaluada sobre una grúa-torre a escala, considerando pruebas de rechazo de perturbaciones y posicionamiento de la carga. Por último, en la sección 7 se presentan las conclusiones del trabajo.

2. Modelo matemático de una grúa-torre fija

En esta sección, se presenta el modelo matemático de una grúa-torre teniendo en cuenta su parte mecánica y mecatrónica. Inicialmente, la parte mecánica del sistema es abordada con un análisis de LaGrange, obteniendo un modelo no lineal que posteriormente es linealizado dado un punto de equilibrio. Luego, la parte mecatrónica del sistema es agregada al sistema linealizado, para luego discretizar el modelo completo del sistema.

El mecanismo estudiado de la grúa-torre se compone de tres principales subsistemas que son: motor, carga y carretilla, en donde la carga con masa *m*, está acoplada directamente a la carretilla que tiene masa *M* ambas en Kg, por medio de una cuerda (o guaya) con longitud *L* en metros, y a su vez la carretilla está acoplada por medio de un juego de poleas de radio r a un motor DC, el cual es el encargado de aplicar un par τ_m para generar movimientos lineales en la carretilla. El motor es controlado por medio de un driver de potencia, el cual es modelado como una ganancia k_{pwm} que convierte ciclo útil de una señal por modulación de ancho de pulso en la entrada del driver a voltaje promedio aplicado en los terminales del motor.

El modelo estudiado describe la posición angular de la carga $\theta_p(t)$ en radianes respecto al eje vertical que acompaña a la carretilla. La carretilla es halada por una tensión T_1 a lo largo de un soporte, generando un desplazamiento lineal $x(t)$

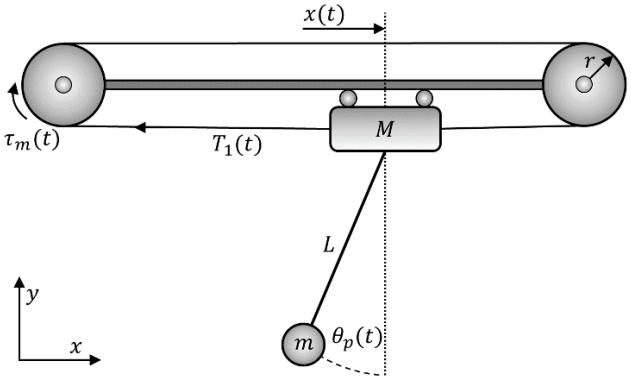


Figura 1. Diagrama simplificado de la parte mecánica de una grúa torre. Fuente: Los autores.

en metros; la Fig. 1 detalla el diagrama del sistema antes descrito. El modelo considera las siguientes suposiciones, a saber: la carga es modelada como una partícula, la fricción del sistema y la masa de la cuerda son despreciadas, los movimientos de la carga y carretilla están restringidos al plano (x-y) y la cuerda es considerada como un cuerpo rígido. Estos supuestos, se consideran para obtener un modelo simplificado del sistema mecánico, despreciando dinámicas pero tomadas como incertidumbres y que posteriormente son toleradas por el esquema de control propuesto.

El modelo mecánico de la grúa-torre, se obtiene a partir de la siguiente ecuación de LaGrange [18].

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L_a}{\partial \dot{q}_i}\right) - \left(\frac{\partial L_a}{\partial q_i}\right) = T_i, \tag{1}$$

$$L_a = K - P, \tag{2}$$

donde $i = 1{,}2$, K es la energía cinética del sistema, P es la energía potencial del sistema, q_i describe la coordenada generalizada que indica la posición lineal de la carretilla $x(t)$ y la posición angular del péndulo $\theta_p(t)$ respectivamente, y T_i describe la fuerza externa que se aplica al sistema con $T_1(t)$ la tensión aplicada a la carretilla y $T_2 = 0$ que define una fuerza aplicada a la masa de la carga. Entonces, de acuerdo con las suposiciones antes mencionadas, la energía cinética del sistema (ver Fig. 1), está dada por:

$$K = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 + \frac{1}{2}mv^2, \tag{3}$$

donde v es un vector que comprende la velocidad de la carga dadas sus componentes vectoriales v_x y v_y; dicho vector está definido como:

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2, \tag{4}$$

donde $v_x = \dot{x} + L\dot{\theta}_p\cos(\theta_p)$ y $v_y = -L\dot{\theta}_p\sin(\theta_p)$. La energía potencial total del sistema está dada por:

$$P = mgL(1 - \cos(\theta_p)), \tag{5}$$

donde g es la aceleración gravitacional. Luego, a partir de la combinación de ec. (2)-(5), y teniendo en cuenta la formulación de LaGrange ec. (1), se obtiene el siguiente sistema no lineal en espacio de estados de la grúa-torre:

$$\dot{x}_1(t) = x_2(t), \tag{6}$$

$$\dot{x}_2(t) = f_1\big(x_s(t)\big) + b_1\big(x_s(t)\big)u_f(t), \tag{7}$$

$$\dot{x}_3(t) = x_4(t), \tag{8}$$

$$\dot{x}_4(t) = f_2\big(x_s(t)\big) + b_2(x_s(t))u_f(t) \tag{9}$$

donde $x_s(t) = [x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t)]^T$, $x_1(t) = x(t)$, $x_2(t) = \dot{x}(t)$ es la velocidad de la carretilla, $x_3(t) = \theta_p(t)$, $x_4(t) = \dot{\theta}_p(t)$ es la velocidad angular de la carga, $u_f(t) = T_1(t)$ es la fuerza aplicada a la carretilla, y f_i y b_i son funciones no lineales descritas por:

$$f_1\big(x_s(t)\big) = \frac{mLx_4^2(t)\sin\big(x_3(t)\big) + mg\,sin(x_3(t))cos(x_3(t))}{M + msin^2(x_3(t))}, \tag{10}$$

$$b_1\big(x_s(t)\big) = \frac{1}{M + msin^2(x_3(t))}, \tag{11}$$

$$f_2\big(x_s(t)\big) = \frac{-\sin\big(x_3(t)\big)(g(M+m) + mLx_4{}^2(t)\cos(x_4(t)))}{L(M + m\,sin^2(x_3(t)))}, \tag{12}$$

$$b_2\big(x_s(t)\big) = \frac{-\cos(x_3(t))}{L(M + m\,sin^2(x_3(t)))}. \tag{13}$$

Tomando el punto de equilibrio $x_s = [0, 0{,}0{,}0]^T$, se linealiza el modelo de la grúa ec. (6)-(9), obteniendo la siguiente representación:

$$(m + M)\ddot{x} + mL\ddot{\theta}_p = T_1, \tag{14}$$

$$\ddot{x} + L\ddot{\theta}_p + g\theta_p = 0. \tag{15}$$

Por otra parte, considerando solo la parte mecánica de la dinámica de un motor de corriente continua, se obtiene la siguiente representación lineal:

$$\tau_m = J\ddot{\theta}_m + B\dot{\theta}_m, \tag{16}$$

$$V_{in} = \frac{R_a\tau_m}{k_b} + \dot{\theta}_m k_b, \tag{17}$$

donde J representa el momento inercia del eje del motor, B es el coeficiente de viscosidad del motor, k_b constante mecánica del motor, $\dot{\theta}_m$ representa la velocidad angular del motor, V_{in} es el voltaje aplicado en terminales del motor y τ_m el par del motor. Además, las ec. (14)-(15) están linealmente relacionadas con las ec. (16)-(17), mediante:

$$x = \theta_m r, \tag{18}$$

$$\tau_m = T_1 r. \tag{19}$$

Reemplazando ec. (18)-(19), en el modelo del motor DC ec. (16)-(17) y posteriormente reemplazando en el modelo mecánico de la grúa-torre ec. (14)-(15), se obtiene la siguiente representación en espacio de estados:

$$\dot{x}_{ms}(t) = A_{ms}x_{ms}(t) + B_{ms}u(t), \tag{20}$$

con,

$$x_{ms}(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \\ x_4(t) \end{bmatrix}, A_{ms} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & O_0 & O_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & O_2 & O_3 & 0 \end{bmatrix}, B_{ms} = \begin{bmatrix} 0 \\ O_4 \\ 0 \\ O_5 \end{bmatrix},$$

donde,

$$O_0 = -\frac{{k_b}^2}{R_a((r^2)M+J)} - \frac{B}{((r^2)M+J)}, \quad (21)$$

$$O_1 = \frac{mgr^2}{((r^2)M+J)}, \quad (22)$$

$$O_2 = \frac{(k_b^2+BR_a)}{LR_a(Mr^2+J)}, \quad (23)$$

$$O_3 = \frac{-g(m+M)}{LM} - \frac{mgJ}{LM((r^2)M+J)}, \quad (24)$$

$$O_4 = \frac{k_{pwm}k_b r}{R_a((r^2)M+J)}, \quad (25)$$

$$O_5 = \frac{-k_b k_{pwm}}{rLMR_a} + \frac{k_{pwm}k_b J}{rLMR_a((r^2)M+J))}, \quad (26)$$

k_{pwm} es la constante de conversión de ciclo útil a voltaje aplicado al motor, y $u(t)$ es la entrada de control que representa ciclo útil. La Tabla 1 muestra los parámetros del modelo de la grúa-torre.

Por último, el modelo matemático de la grúa-torre ec.(20) es discretizado por el método *ZOH (Zero Order Hold)* con un tiempo de muestreo de $T_s = 0.01s$. El modelo matemático en tiempo discreto se describe como:

$$x_d(k+1) = A_d x_d(k) + B_d u(k), \quad (27)$$

donde $x_d(k) = [x(k) \quad v(k) \quad \theta_p(k) \quad \omega_p(k)]^T$ es el vector de estados en tiempo discreto del sistema, $v(k)$ es la velocidad lineal de la carretilla, $\omega_p(k)$ es la velocidad angular del péndulo, y $A_d \in \mathbb{R}^{(4x4)}$, $B_d \in \mathbb{R}^{(4x1)}$.

Tabla 1.
Valores nominales del modelo de la grúa-torre.

Variable	Descripción	Valor
m	Masa de la carga	1.2Kg
M	Masa de la carretilla	0.45Kg
L	Longitud de la cuerda	0.65m
g	Aceleración gravitacional	9.806m/s^2
R_a	Resistencia de armadura	6Ω
B	Coeficiente de viscosidad	0.0031224Kg.m/s
L_a	Inductancia de armadura	0.0054H
J	Momento polar de inercia	0.00082543Kg.m^3
k_b	Constante eléctrica del motor	0.37 Vs/rad
k_a	Constante mecánica del motor	0.37 N.m/A
r	Radio de la polea	0.01 m
k_{pwm}	Constante de conversión	0.00475V/%

Fuente: Los autores.

3. Esquema de control propuesto

El esquema de control propuesto se enfoca principalmente en mejorar la estimación de las variables de estado y las perturbaciones a las que está sometido el sistema, en especial las provenientes de la oscilación de la carga que en general se componen principalmente por la frecuencia de oscilación pendular de la carga que puede ser ocasionada por perturbaciones externas o internas como la inercia del propio sistema cuando la carretilla se está posicionando. Para lograr esto, el observador de estado extendido usado convencionalmente en ADRC es modificado para incluir un modelo interno que describe una señal armónica con frecuencia ω_r (también llamado resonador). Luego, las estimaciones de la perturbación y las variables de estado, se usan en la ley de control para rechazar en línea la perturbación y acomodar la dinámica de lazo cerrado, respectivamente.

Entonces, como es típico en estrategias de control bajo la filosofía ADR, las perturbaciones que afectan al sistema se asumen de forma unificada a la entrada de la planta, en este caso como $\xi_r(k)$, y por lo tanto el sistema toma la siguiente descripción:

$$x_d(k+1) = A_d x_d(k) + B_d u(k) + B_d \xi_r(k). \quad (28)$$

donde $\xi_r(k)$ es la señal de perturbación unificada la cual se desea estimar y rechazar, y está compuesta por perturbaciones externas y dinámicas del sistema generadas por incertidumbres en el modelo.

3.1. Observador de estado extendido resonante

El propósito del observador es estimar la perturbación $\xi_r(k)$. Esta perturbación puede ser una señal compleja de estimar, dependiendo de qué componentes de la señal deberían estimarse de forma precisa. En este caso, una componente de la perturbación debería ser muy bien estimada, la frecuencia fundamental de oscilación de la grúa-torre. Entonces, con el fin de proporcionar una estimación precisa de este componente en la perturbación y los estados del sistema, el modelo interno del observador debe contener el aniquilador de ese componente de interés, i.e. el aniquilador de una señal sinusoidal con frecuencia ω_r. Por lo tanto, la aproximación del modelo interno de la señal $\xi_r(k)$, puede ser formulada como [19]:

$$\varphi(k) = \xi_r(k)(q^2 - 2\cos(\omega_r T_s)\, q + 1) \approx 0, \quad (29)$$

donde ω_r es la frecuencia de oscilación pendular de la carga en rad/s y se puede calcular usando:

$$\omega_r = \sqrt{\frac{g}{L}}, \quad (30)$$

con g la aceleración gravitacional. Note que ec. (29) corresponde al aniquilador de una señal sinusoidal con frecuencia ω_r, entonces el modelo interno ec. (29) provee

rechazo de perturbaciones cuando $\xi_r(k) = \sin(\omega_r T_s + \propto)$, con $\propto$ cualquier constante finita.

Basado en el modelo interno ec. (29) de la señal de perturbación $\xi_r(k)$, se encuentra una descripción en espacio de estados dada por:

$$r(k+1) = A_r r(k) + E_r \varphi(k) \tag{31}$$

$$\xi_r(k) = C_r(k) r(k) \tag{32}$$

donde $r(k) = \begin{bmatrix} r_1(k) \\ r_2(k) \end{bmatrix}$, $r_1(k) = \xi_r(k)$, $r_2(k) = \xi_r(k+1)$, $A_r = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2\cos(\theta) \end{bmatrix}$, $E_r = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ y $C_r = [1 \quad 0]$. Ahora, el modelo interno de la perturbación ec.(31)-(32) se usa para construir un modelo de estado extendido que incorpore también los estados de la planta ec. (27), así:

$$x_{ao}(k+1) = A_{ao} x_{ao}(k) + B_{ao} u(k) + E_{ao} \varphi(k), \tag{33}$$

$$y_o(k) = C_{ao} x_{ao}(k), \tag{34}$$

donde $x_{ao}(k) = \begin{bmatrix} x_d(k) \\ r(k) \end{bmatrix}$, $A_{ao} = \begin{bmatrix} A_d & B_d C_r \\ 0 & A_r \end{bmatrix}$, $B_{ao} = \begin{bmatrix} B_d \\ 0 \end{bmatrix}$, $C_{ao} = [C_{do} \quad 0]$, $C_{do} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$, $E_{ao} = [0 \quad E_r]^T$, $A_{ao} \in \mathbb{R}^{(6x6)}$, $B_{ao} \in \mathbb{R}^{(6x1)}$, $E_{ao} \in \mathbb{R}^{(6x1)}$, y $C_{ao} \in \mathbb{R}^{(2x6)}$. Note que la matriz C_{do} indica que las variables medidas son $x(k)$ y $\theta_p(k)$.

Con el fin de proponer el observador y la ley de control, considere la siguiente suposición respecto al modelo interno de la perturbación. Existe una constante finita K_ξ, tal que,

$$\sup_k |\varphi(k)| \leq K_\xi, \tag{35}$$

donde,

$$\varphi(k) = \xi_r(k)(q^2 - 2\cos(\omega_r T_s)\, q + 1). \tag{36}$$

Proposición 1 (Observador de estado extendido resonante): La estimación de la función de perturbación $\hat{\xi}_r(k)$, y las estimaciones de las variables de estado de la grúa-torre $\hat{x}_d(k)$, son obtenidas por el siguiente observador:

$$\hat{x}_{ao}(k+1) = A_{ao} \hat{x}_{ao}(k) + B_{ao} u(k) + L_{ao} \tilde{e}_o(k) \tag{37}$$

$$\hat{y}_o(k) = C_{ao} \hat{x}_{ao}(k) \tag{38}$$

donde $\tilde{e}_o(k) = y_o(k) - \hat{y}_o(k)$, $\hat{x}_{ao}(k) = [\hat{x}_d(k) \quad \hat{r}(k)]^T$ es el vector de estados estimados del observador y L_{ao} es la matriz de ganancias del observador. Entonces, las trayectorias del vector del error de estimación $\tilde{e}_{ao}(k) = x_{ao}(k) - \hat{x}_{ao}(k)$, convergen globalmente hacia una vecindad de cero donde permanecen últimamente acotadas, siempre que la matriz de ganancias del observador L_{ao}, se seleccione tal que los valores propios de la matriz $(A_{ao} - L_{ao} C_{ao})$ se ubiquen dentro del círculo unitario del plano complejo $\mathbb{C}$.

Demostración 1: La dinámica del error de estimación $\tilde{e}_{ao}(k)$ se puede obtener restando ec. (37) de ec. (33):

$$\tilde{e}_{ao}(k+1) = A_{eo} \tilde{e}_{ao}(k) + E_{ao} \varphi(k) \tag{39}$$

con $A_{eo} = (A_{ao} - L_{ao} C_{ao})$. Entonces, los valores propios de A_{eo} se pueden ubicar arbitrariamente por medio de la matriz L_{ao}, tal que se ubiquen dentro del círculo unitario del plano complejo $\mathbb{C}$. El error de estimación $\tilde{e}_{ao}(k)$ está restringido a una vecindad cercana al origen en el espacio de las variables de estado del error de estimación. El tamaño de la vecindad está relacionado con el tamaño del término

$$\sup_k |\varphi(k)| \leq K_\xi.$$

Para estudiar el acotamiento último, considere la función candidata de Lyapunov $V(\tilde{e}_{ao}(k)) = \frac{1}{2}[\tilde{e}_{ao}(k)]^T P [\tilde{e}_{ao}(k)]$, con P una matriz positiva definida. Entonces,

$$\Delta V\big(\tilde{e}_{ao}(k)\big) = V\big(\tilde{e}_{ao}(k+1)\big) - V\big(\tilde{e}_{ao}(k)\big), \tag{40}$$

luego de algunas manipulaciones, se concluye que:

$$\begin{aligned} \Delta V(\tilde{e}_{ao}(k)) = \frac{1}{2}[\tilde{e}_{ao}(k)]^T [A_{eo}^T P A_{eo} \\ - P] \tilde{e}_{ao}(k) \\ + [\tilde{e}_{ao}(k)]^T A_{eo}^T P E_{ao} \varphi(k) \\ + \frac{1}{2} \varphi^2(k) E_{ao}^T P E_{ao}. \end{aligned} \tag{41}$$

Considerando que A_{eo} es diseñada estable, y dada una matriz simétrica positiva definida Q, existe una matriz simétrica definida positiva P, tal que:

$$\begin{aligned} [\tilde{e}_{ao}(k)]^T [A_{eo}^T P A_{eo} - P] \tilde{e}_{ao}(k) \\ < [\tilde{e}_{ao}(k)]^T [-Q] \tilde{e}_{ao}(k) < 0. \end{aligned} \tag{42}$$

Por lo tanto, ec. (41) resulta en:

$$\begin{aligned} \Delta V(\tilde{e}_{ao}(k)) \leq -\frac{1}{2}[\tilde{e}_{ao}(k)]^T Q \tilde{e}_{ao}(k) \\ + [\tilde{e}_{ao}(k)]^T A_{eo}^T P E_{ao} \varphi(k) \\ + \frac{1}{2} \varphi^2(k) E_{ao}^T P E_{ao}. \end{aligned} \tag{43}$$

Dado que $\|E_{ao}\|_2 = 1$, asumiendo $Q = I$, y aplicando la suposición en ec. (35), la función $\Delta V(\tilde{e}_{ao}(k))$ satisface:

$$\Delta V(\tilde{e}_{ao}(k)) \leq -\frac{1}{2}\|\tilde{e}_{ao}(k)\|_2^2 + \|\tilde{e}_{ao}(k)\|_2\|A_{eo}^T\|_2\|P\|_2 K_\xi + \frac{1}{2}K_\xi^2\|P\|_2. \quad (44)$$

Resolviendo la ecuación cuadrática en $\|\tilde{e}_{ao}(k)\|_2$ del lado derecho de ec. (44), se encuentra que $\Delta V(\tilde{e}_{ao}(k))$ es estrictamente negativa por fuera de la esfera $S_{\tilde{e}}$, dada por:

$$S_{\tilde{e}} = \left\{\tilde{e}_{ao}(k) \in \mathbb{R}^6, \|\tilde{e}_{ao}(k)\|_2 \leq K_\xi\left(\|A_{eo}^T\|_2\|P\|_2 + \sqrt{\|\tilde{e}_{ao}(k)\|_2^2\|P\|_2^2 + \|P\|_2}\right)\right\}, \quad (45)$$

así, todas las trayectorias de $\tilde{e}_{ao}(k)$ que inicien por fuera de esta esfera convergen hacia su interior, y todas aquellas que inicien dentro de la esfera no la abandonan.

3.2. Ley de control

La Fig. 2 muestra la estructura de control propuesta observador/control. El esquema propuesto está compuesto por:

- Un término de estimación/rechazo de perturbaciones $\hat{\xi}_r(k)$, y otro de estimación de variables de estado, los cuales son suministrados por el observador extendido resonante (ver *Proposición 1*).
- Un término de acción integral para lograr rechazo de perturbaciones cuando $\xi_r(k)$ contenga componentes constantes.
- Ganancias de realimentación de variables de estado k_i y K_c para acomodar la dinámica de lazo cerrado del sistema de control.

De acuerdo a la estructura de control mostrada en la Fig. 2, se construye un sistema en espacio de estados que incluye las variables de estado de la grúa torre y la nueva variable de estado del controlador $w(k)$; este sistema está dado por:

$$x_{ac}(k+1) = A_{ac}x_{ac}(k) + B_{ac}u(k) + B_{ac}\xi_r(k), \quad (46)$$

$$y_c(k) = C_{ac}x_{ac}(k), \quad (47)$$

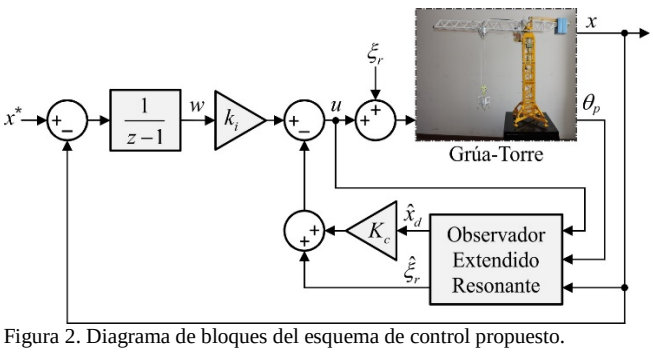


Figura 2. Diagrama de bloques del esquema de control propuesto.
Fuente: Los autores.

donde $x_{ac}(k) = \begin{bmatrix} x_d(k) \\ w(k) \end{bmatrix}$, $A_{ac} = \begin{bmatrix} A_d & 0 \\ -C_{dc} & 1 \end{bmatrix}$, $B_{ac} = \begin{bmatrix} B_d \\ 0 \end{bmatrix}$, $C_{ac} = [C_{dc} \quad 0]$, $C_{dc} = [1 \quad 0 \quad 0 \quad 0]$, $A_{ac} \in \mathbb{R}^{(5x5)}$, $B_{ac} \in \mathbb{R}^{(5x1)}$, y $C_{ac} \in \mathbb{R}^{(1x5)}$. Con base en el sistema aumentado anterior, se propone la siguiente ley de control bajo la filosofía ADR.

Proposición 2 (Ley de control): La ley de control dada por,

$$u(k) = -K_c\hat{x}_d(k) + k_i w(k) - \hat{\xi}_r(k), \quad (48)$$

$$w(k+1) = w(k) + x^*(k) - x(k), \quad (49)$$

donde $K_c = [k_1 \quad k_2 \quad k_3 \quad k_4]$ es el vector de ganancias de realimentación de estados, k_i es la ganancia de control integral, y $x^*(k)$ es la posición deseada de la carretilla; acomoda la dinámica del sistema de control para ser dominada por los valores propios de $(A_{ac} - B_{ac}K_{ac})$ con $K_{ac} = [K_c \quad -k_i]$. Con una selección apropiada de K_{ac} tal que los valores propios de $(A_{ac} - B_{ac}K_{ac})$ estén dentro del círculo unitario, la ley de control obliga el error $e_x(k) = x^*(k) - x(k)$ a permanecer en una vecindad de cero, rechazando perturbaciones con componentes armónicos de frecuencia ω_r.

Demostración 2: La dinámica de lazo cerrado del sistema de control se puede hallar substituyendo ec. (48) en ec. (46), resultando:

$$x_{ac}(k+1) = (A_{ac} - B_{ac}K_{ac})x_{ac}(k) + B_{ac}K_c\left(x_d(k) - \hat{x}_d(k)\right) + B_{ac}\left(\xi_r(k) - \hat{\xi}_r(k)\right). \quad (50)$$

Luego de algunas manipulaciones algebraicas, se obtiene

$$x_{ac}(k+1) = (A_{ac} - B_{ac}K_{ac})x_{ac}(k) + [B_{ac}K_c \quad B_{ac}]\begin{bmatrix} \tilde{e}_d(k) \\ \tilde{e}_\xi(k) \end{bmatrix}, \quad (51)$$

donde $\tilde{e}_d(k) = x_d(k) - \hat{x}_d(k)$ y $\tilde{e}_\xi(k) = \xi_r(k) - \hat{\xi}_r(k)$ son errores de estimación de las variables de estado de la grúa-torre y de la función de perturbación, respectivamente. La convergencia de $\hat{\xi}_r(k)$ hacia una vecindad de $\xi_r(k)$, y de $\hat{x}_d(k)$ hacia una vecindad de $x_d(k)$, bajo un diseño apropiado del observador (ver *Proposición 1* y *Demostración 1*), establece que los errores de estimación $\tilde{e}_d(k)$ y $\tilde{e}_\xi(k)$ evolucionan de forma últimamente acotada cerca de una vecindad de cero. Entonces, la dinámica de lazo cerrado del sistema de control es fuertemente dominada por los valores propios de la matriz $(A_{ac} - B_{ac}K_{ac})$.

4. Otros esquemas de control

La estrategia propuesta en la sección 3 se compara con dos esquemas de control que son: un PI vectorial con observador de estados etiquetado aquí como (PI-Vectorial); y un control con acción integral y observador de estado extendido basado en la

Tabla 2.
Valores propios asignados en cada esquema de control.

Esquema de control	Valores propios asignados
Observador Extendido Resonante (ADR+R)	[0.84 0.83 0.82 0.81 0.8 0.78]
Observador Extendido (ADR)	[0.79 0.78 0.77 0.75 0.73]
Observador clásico (PI-Vectorial)	[0.79 0.75 0.74 0.73]
Control	[0.97 0.96 0.95 0.94 0.92]

Fuente: Los autores.

Tabla 3.
Ganancias observador/control usadas en cada esquema de control.

Esquema de control	Valor de las Ganancias		
Observador Extendido Resonante (ADR+R)	$L_{11} = 0.412$ $L_{22} = -1.948$ $L_{41} = -2.268$ $L_{52} = -23679.6$	$L_{12} = -0.051$ $L_{31} = -0.065$ $L_{42} = 6.213$ $L_{61} = 47096.6$	$L_{21} = 4.874$ $L_{32} = 0.4469$ $L_{51} = 46479.3$ $L_{62} = -25230.4$
Observador Extendido (ADR)	$L_{11} = 0.474$ $L_{22} = 0.02307$ $L_{41} = 0.0735$ $L_{52} = 66.0314$	$L_{12} = -0.0003$ $L_{31} = 0.0024$ $L_{42} = 4.7781$	$L_{21} = 5.581$ $L_{32} = 0.4464$ $L_{51} = 49439.8$
Observador clásico (PI-Vec)	$L_{11} = 0.2598$ $L_{22} = 0.01395$ $L_{41} = 0.413$	$L_{12} = -0.0002$ $L_{31} = 0.0156$ $L_{42} = 5.2996$	$L_{21} = -0.0032$ $L_{32} = 0.4707$
Ganancias de control	$k_1 = 69530.5$ $k_4 = 10150.3$	$k_2 = 15210.3$ $k_i = 656.1$	$k_3 = -7123.1$

Fuente: Los autores.

filosofía ADR, etiquetado aquí como (PI-ADR). El diseño del observador de estado extendido usa un modelo interno convencional de la función de perturbación dado por $\frac{(q-1)}{T}\xi(k) \approx 0$, que asume que la función de perturbación $\xi(k)$ es constante, como es usado en la mayoría de los casos en ADRC.

La Tabla 2 muestra los valores propios seleccionados para cada esquema de control/observador, y la Tabla 3 muestra las ganancias obtenidas en cada caso. De aquí en adelante el esquema de control propuesto en la sección 3 es etiquetado como (PI-ADR+R).

5. Análisis de robustez

Las gráficas de Nyquist son utilizadas para analizar y evaluar la robustez de los sistemas de control. La distancia mínima entre la curva de Nyquist y el punto [-1,0j] define el margen de módulo ΔM, e identifica la robustez del sistema de control. Un sistema robusto debe tener un margen de módulo superior o igual a 0.5 [20]. La Fig. 3 detalla el margen de módulo de las curvas de Nyquist de lazo abierto de cada sistema de control: PI-Vectorial, PI-ADR y la propuesta de control etiquetada como PI-ADR+R.

Los sistemas de control presentan altos márgenes de módulo y en consecuencia son considerados robustos. El control PI-Vectorial tiene un margen de módulo de $\Delta M = 0.788$, PI-ADR de $\Delta M = 0.792$ y la propuesta de control PI-ADR+R de $\Delta M = 0.779$. Se puede apreciar que el esquema de control propuesto (PI-ADR+R) muestra un índice de robustez un poco menor que los demás: sólo 1.6% inferior que el margen del PI-ADR, y 1.1% inferior que el margen del PI-vectorial.

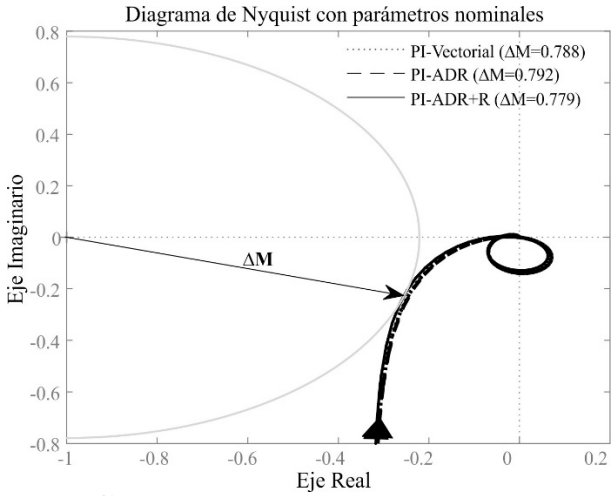


Figura 3. Gráficos de Nyquist de los sistemas de control en lazo abierto usando parámetros nominales.
Fuente: Los autores.

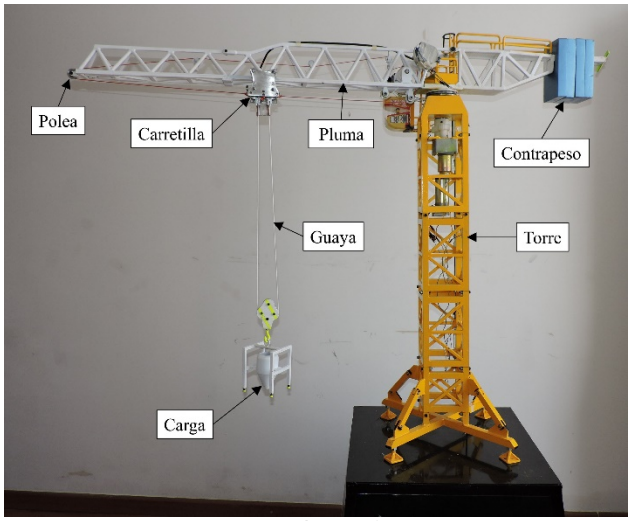


Figura 4. Modelo a escala de una grúa-torre fija de pluma horizontal.
Fuente: Los autores.

6. Resultados experimentales

Para evaluar las técnicas de control propuestas, se realizaron pruebas experimentales sobre una grúa-torre a escala (ver Fig. 4) con el fin de analizar y validar el desempeño y robustez presentado por cada sistema de control. La primera prueba consistió en observar las respuestas de los controladores ante una referencia tipo paso en x^* para analizar el comportamiento del desplazamiento de la carretilla y de la oscilación de la carga. La segunda prueba analiza las respuestas de los controladores ante rechazo de perturbaciones en la carga. Por último, en una tercera prueba se analizan los sistemas de control cuando se reduce la longitud de la guaya L en 25% respecto a su valor nominal. Esta longitud es considerada el parámetro más crítico del modelo de la grúa.

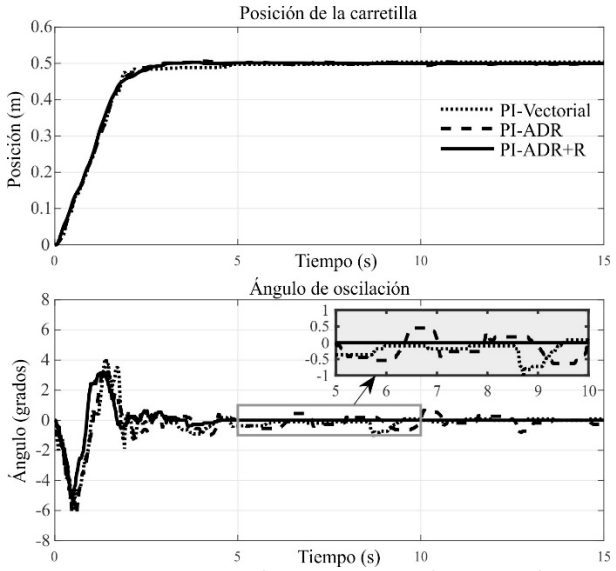


Figura 5. Respuesta de la posición de la carretilla y ángulo del péndulo ante referencia tipo paso $x^* = 0.5$ m.
Fuente: Los autores.

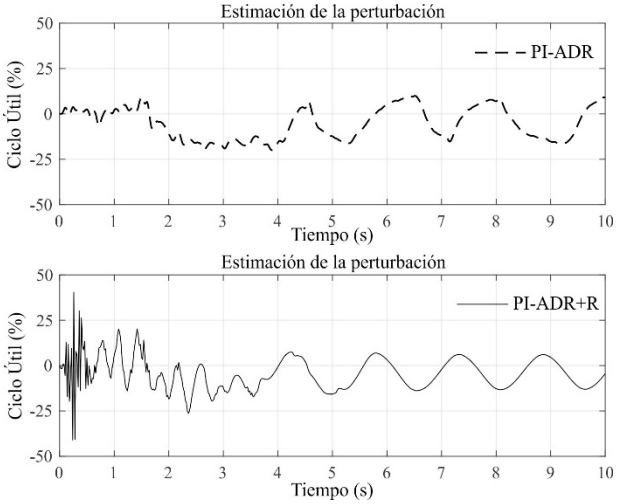


Figura 6. Estimación de la función de perturbación entregada por los esquemas de control PI-ADR y PI-ADR+R durante la prueba de referencia tipo paso en la posición de la carretilla.
Fuente: Los autores.

6.1. Caso 1: Referencia tipo paso

En esta prueba se analiza el desempeño y robustez presentados por los sistemas de control ante una entrada tipo paso, cuyo objetivo es posicionar la carretilla en una referencia de $x^* = 0.5m$ y estabilizar la carga en el punto $\theta_p = 0$. En la Fig. 5, se presenta la respuesta de cada sistema de control para el posicionamiento de la carretilla y de la carga. En esta figura, se puede evidenciar el buen desempeño que presenta la propuesta de control respecto a las otras técnicas. Observe que las oscilaciones de la carga que presentan los controladores PI-ADR y PI-Vectorial en el periodo de tiempo de (5s-10s) están dentro del rango de (±0.5°) y (±1°), respectivamente; mientras que el controlador

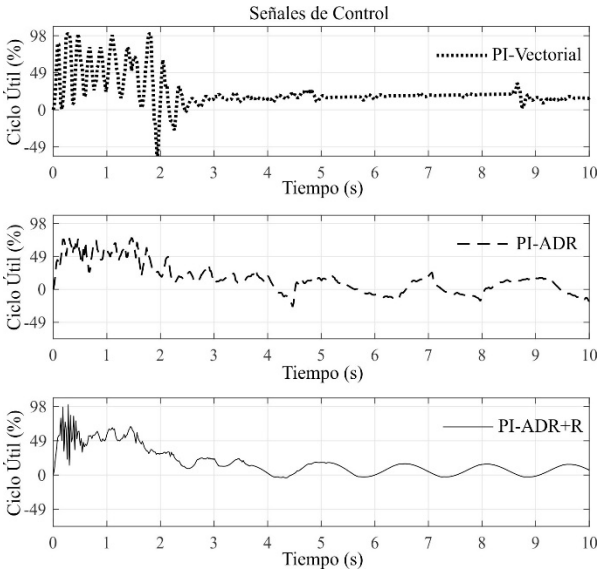


Figura 7. Señales de control de cada sistema de control durante la prueba de referencia tipo paso en la posición de la carretilla.
Fuente: Los autores.

PI-ADR+R atenuó por completo las oscilaciones durante este periodo de tiempo y en adelante. A su vez, en esta figura se puede observar que durante el transitorio (0s-3s) de la prueba, las amplitudes en la oscilación de la carga son mayores en los controladores PI-Vectorial (-5.67°) y PI-ADR (-6.3°), mientras que la propuesta de control PI-ADR+R presentó menores amplitudes de oscilación en la carga (-5.13°).

También observe que durante el periodo de tiempo (5s-10s), los sistemas de control PI-Vectorial y PI-ADR presentan oscilaciones considerables en el desplazamiento de la carretilla. Estas oscilaciones en la carretilla durante dicho periodo de tiempo, son producto de la acción de los sistemas de control para atenuar las oscilaciones en la carga, evidentemente sin beneficios visibles en la reducción de oscilaciones en la carga. En la Fig. 6, se muestra la estimación de la función de perturbación que tuvieron los controladores PI-ADR y PI-ADR+R durante la prueba. En esta figura, se puede apreciar que durante el periodo de tiempo (0s-3s) se presentan señales de alta frecuencia que son producto de las vibraciones y otras dinámicas no modelas presentes durante el transitorio del sistema. En la Fig. 7, se presentan las señales de control de cada esquema de control durante la prueba.

6.2. Caso 2: Perturbaciones en la carga

Esta prueba consistió en posicionar y sujetar la carga en el punto $\theta_p = 10°$. Posteriormente, al ser liberada la carga, esta desarrolla una trayectoria pendular no controlada, que la obliga a pasar por el punto $\theta_p = 0°$. En este punto, los esquemas de control son activados con el objetivo de rechazar las perturbaciones que afectan el sistema y a su vez atenuar las oscilaciones en la carga con $x^* = 0$. De esta forma, esta prueba busca evaluar y analizar el desempeño y robustez de los sistemas control ante el rechazo de perturbaciones, estabilizando la carga en el punto $\theta_p = 0°$. Esta prueba solo incluye información experimental desde el momento en que se activan los esquemas de control.

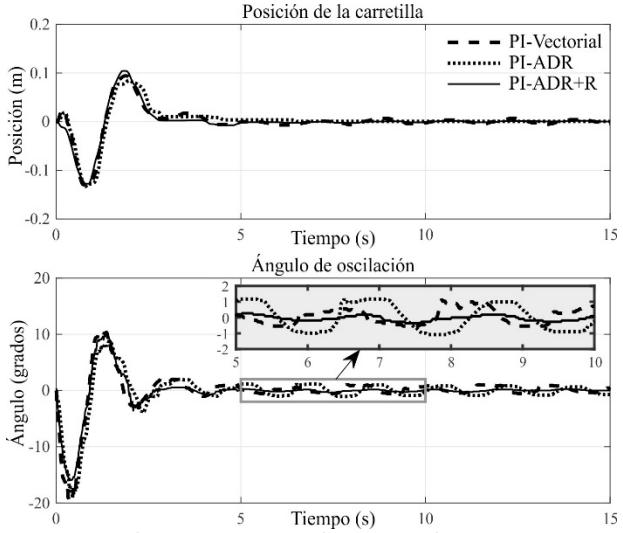


Figura 8. Posición de la carretilla y ángulo del péndulo en la prueba de estabilización/perturbaciones en la carga. Considerando $t = 0s$, el momento de activación de los esquemas de control.
Fuente: Los autores.

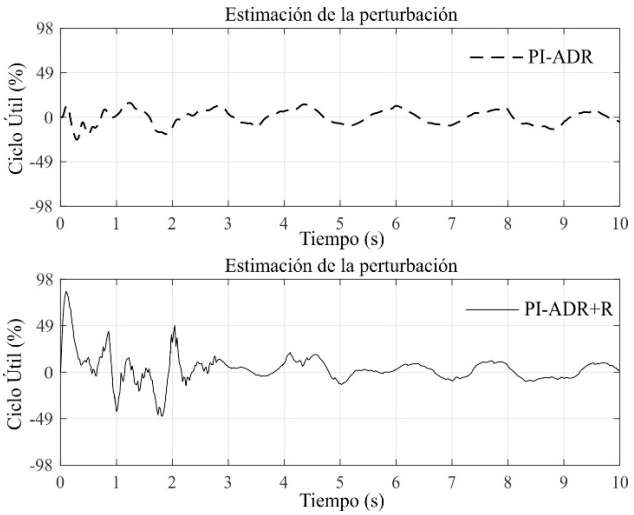


Figura 9. Estimación de la función de perturbación de los esquemas de control PI-ADR y PI-ADR+R durante el caso 2.
Fuente: Los autores.

En la Fig. 8, se presenta la respuesta de cada sistema de control durante la estabilización de la carga. En esta figura, se puede apreciar cómo el controlador PI-ADR+R atenúa de mejor forma las oscilaciones en la carga en comparación con los otros controladores. Observe que la carga en el periodo de tiempo (5s-10s) presenta menores amplitudes de oscilación en comparación a los otros sistemas de control, mostrando así un mejor desempeño para atenuar las oscilaciones en la carga. En la Fig. 9, se presenta la estimación de la perturbación obtenida por los sistemas de control PI-ADR y PI-ADR+R durante la prueba. En la Fig. 10, se presentan las señales de control de cada esquema de control. En esa figura, se puede apreciar que el controlador PI-ADR+R presenta menores valores pico en la señal de control aplicada al actuador.

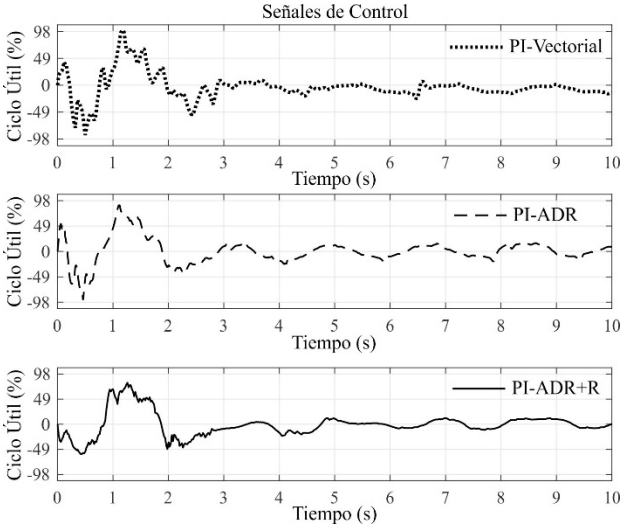


Figura 10. Señales de control de cada sistema de control durante la prueba de perturbaciones en la carga.
Fuente: Los autores.

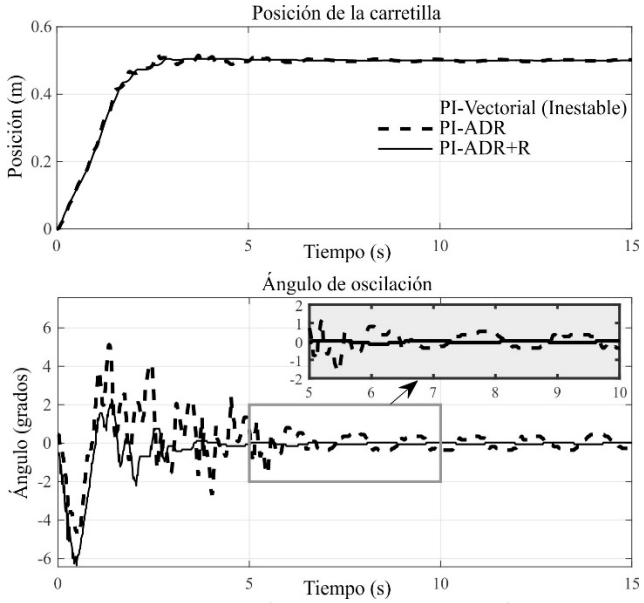


Figura 11. Respuesta de posición de la carretilla y oscilación de la carga en la prueba de posicionamiento de la carretilla $x^* = 0.5$m teniendo en cuenta una variación en la cuerda de -25%.
Fuente: Los autores.

6.3. Caso 3: Variación en la longitud de la cuerda

Considerando una variación de -25% en la longitud nominal de la guaya (ver Tabla 1), se realiza una prueba ante referencia tipo paso para posicionar la carga y la carretilla con una referencia de $x^* = 0.5m$. Esta prueba evalúa el desempeño y robustez del esquema de control propuesto ante variación de parámetros en el sistema.

La Fig. 11 muestra los resultados obtenidos en esta prueba indicando las propiedades de robustez y desempeño del esquema de control propuesto (PI-ADR+R). Observe que el esquema de control PI-Vectorial resulta inestable aun cuando

Tabla 4.
Índices de desempeño de los esquemas de control durante las pruebas.

Esquema	Caso 1	Caso 2	Caso 3
PI-ADR+R	$E_{\theta_p} = 100.0\ \%$	$E_{\theta_p} = 100.0\ \%$	$E_{\theta_p} = 100.0\ \%$
	$E_u = 100.0\ \%$	$E_u = 100.0\ \%$	$E_u = 100.0\ \%$
PI-ADR	$E_{\theta_p} = 162.5\ \%$	$E_{\theta_p} = 134.1\ \%$	$E_{\theta_p} = 535.7\ \%$
	$E_u = 112.4\ \%$	$E_u = 113.7\ \%$	$E_u = 238.2\ \%$
PI-Vectorial	$E_{\theta_p} = 146.5\ \%$	$E_{\theta_p} = 119.3\ \%$	$E_{\theta_p} = \infty$
	$E_u = 147.8\ \%$	$E_u = 106.8\ \%$	$E_u = \infty$

Fuente: Los autores.

su margen de módulo es 1.6% superior. Estos resultados experimentales dan la realidad de la robustez de los esquemas de control basados en la filosofía del rechazo activo de perturbaciones, donde se estiman y rechazan en línea las perturbaciones que afectan al sistema incluyendo términos no lineales como fricciones estáticas/coulomb.

Adicionalmente, la Fig. 11 muestra que el desempeño del esquema PI-ADR se ve afectado (dada la incertidumbre del sistema), mostrando gran cantidad de variaciones en el ángulo de oscilación de la carga y en el posicionamiento de la carretilla. Esto muestra que el aniquilador propuesto en ec. (29) proporciona mejores resultados que el modelo interno convencional usado en esquemas clásicos ADRC como el mostrado en la sección 4.

6.4. Análisis de desempeño

Para obtener una medida del desempeño de los esquemas de control, se calculó la energía de las señales más relevantes de cada sistema de control como un índice de desempeño en cada experimento. Consideramos la energía del ángulo de oscilación de la carga como $E_{\theta_p} = \int_{-\infty}^{\infty} |\theta_p(t)|^2 dt$ y la energía de la señal de control como $E_u = \int_{-\infty}^{\infty} |u(t)|^2 dt$.

La Tabla 4 muestra el resumen de los índices de desempeño encontrados. Para facilitar el análisis de la tabla, los índices de desempeño se ponderan en términos porcentuales relativos a los obtenidos por el esquema de control propuesto (PI-ADR+R). Así entonces, se puede notar que en los tres casos experimentales, la estrategia de control propuesta tiene mejor desempeño en términos de atenuación de oscilaciones en la carga y además se logra usando menor cantidad de energía de control.

7. Conclusiones

En este artículo, se propuso un esquema de control en tiempo discreto bajo el enfoque del rechazo activo de perturbaciones para abordar el problema de oscilaciones presentes en la carga de grúas-torre. La propuesta de control se diseñó con un observador de estado extendido que incluyó un elemento resonante que dio la habilidad de mejorar las estimaciones de las variables de estado y de la perturbación cuando se presentan oscilaciones en la carga.

El esquema de control propuesto evidenció experimentalmente mejor desempeño en comparación con otros controladores (PI-Vectorial y PI-ADR), mostrando menores amplitudes de oscilación en la carga durante la respuesta transitoria y estacionaria de cada prueba. Este desempeño se evidenció inclusive, cuando los esquemas de control estaban sometidos a incertidumbres paramétricas y perturbaciones externas.

Por otra parte, se encontró la robustez de cada sistema de control usando la gráfica de Nyquist obteniendo un margen de módulo superior a 0.77 en todos los esquemas de control evaluados. No obstante, en comparación con los otros esquemas de control, los resultados experimentales mostraron que la propuesta de control conserva un desempeño adecuado en la atenuación de las oscilaciones en la carga, pese a una variación de -25% en la longitud nominal de la cuerda L.

Agradecimientos

Este trabajo fue soportado por La Universidad de San Buenaventura sede Bogotá bajo la convocatoria de investigación 004-2016.

Referencias

[1] Hyla, P. and Szpytko, J., Crane payload position measurement, vision-based system dedicated for anti-sway solutions. International Conference on Transport Systems Telematics (TST), 2014, pp. 404-413. DOI: 10.1007/978-3-662-45317-9_43

[2] Ju, F., Choo, Y.S. and Cui, F.S., Dynamic response of tower crane induced by the pendulum motion of the payload, International Journal Solids Structure, 43(2), pp. 376-389, 2006. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2005.03.078

[3] Omar, H., Control of gantry and tower cranes, PhD dissertation. Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, Virginia, USA, 2003.

[4] Ma, B., Fang, Y. and Zhang., X., Adaptive tracking control for an overhead crane system, IFAC Proceedings, 41(2), pp. 12194-12199, 2008. DOI: 10.3182/20080706-5-KR-1001.02065

[5] Sun, N., Zhang, X., Fang., Y. and Yuan, Y., Transportation task-oriented trajectory planning for underactuated overhead cranes using geometric analysis, IET Control Theory & Applications, 6(10), pp. 1410-1423, 2012. DOI. 10.1049/iet-cta.2011.0587

[6] Sridokbuap, W., Nundrakwang, S., Benjanarasuth, T., Ngamwiwit, J. and Komine, N., I-PD and PD controllers designed by CRA for overhead crane system, in: Control, Automation and Systems, Proceedings of ICCAS'07. International Conference on, 2007, pp. 326-330. DOI:10.1109/ICCAS.2007.4406931

[7] Solihin, M., Wahyudi. and Legowo, A. Fuzzy-tuned PID anti-swing control of automatic gantry crane, Journal of Vibration and Control, 16(1), pp. 127-145, 2009. DOI: 10.1177/1077546309103421

[8] Zhang, M., Ma, X., Rong, X., Tian, X. and Li, Y., Adaptive tracking control for double-pendulum overhead cranes subject to tracking error limitation, parametric uncertainties and external disturbances, Mechanical Systems and Signal Processing, 76-77 pp. 15-32, 2016. DOI: 10.1016/j.ymssp.2016.02.013

[9] Sun, N., Fang, Y. and Chen, H., A continuous robust antiswing tracking control scheme for underactuated crane systems with experimental verification, Journal Dynamic Systems, Measurement and Control, 138(4), pp. 41002-41014, 2016. DOI: 10.1115/1.4032460

[10] Sorensen, K., Singhose, W. and Dickerson, S., A controller enabling precise positioning and sway reduction in bridge and gantry cranes, Control Engineering Practice., 15(7), pp. 825-837, 2007. DOI: 10.1016/j.conengprac.2006.03.005

[11] Cai, T., Zhang, H., Gu, L. and Gao, Z., On active disturbance rejection control of the payload position for gantry cranes, Proceedings of in American Control Conference (ACC), 2013, pp. 425-430. DOI: 10.1109/ACC.2013.6579874

[12] Han, J., From PID to active disturbance rejection control, IEEE Transactions on Industrial Electronics. 56(3), pp. 900-906, 2009. DOI: 10.1109/TIE.2008.2011621

[13] Gao, Z., Active disturbance rejection control: A paradigm shift in feedback control system design, Proceedings of in American Control Conference, 2006, pp. 2399-2405. DOI: 10.1109/ACC.2006.1656579
[14] Su. Y., Zheng, C. and Duan. B., Automatic disturbances rejection controller for precise motion control of permanent-magnet synchronous motors, IEEE Transactions on Industrial Electronics, 52(3), pp. 814-823, 2005. DOI: 10.1109/TIE.2005.847583
[15] Sun, B. and Gao, Z., A DSP-based active disturbance rejection control design for a 1-kW H-bridge DC–DC power converter, IEEE Transactions on Industrial Electronics, 52(5), pp. 1271-1277, 2005. DOI: 10.1109/TIE.2005.855679
[16] Long, Y., Du, Z., Cong, L., Wang, W., Zhang, Z. and Dong, W., Active disturbance rejection control based human gait tracking for lower extremity rehabilitation exoskeleton, ISA Transactions, 67, pp. 389-397, 2017. DOI: 10.1016/j.isatra.2017.01.006
[17] Coral-Enriquez, H., Cortés-Romero, J. and Ramos, G., Robust active disturbance rejection control approach to maximize energy capture in variable-speed wind turbines, Mathematical Problem Engineering, 2013(2013), Article ID 396740, pp. 1-12, 2013. DOI: 10.1155/2013/396740
[18] Qian, D. and Yi, J., Crane mathematic model en: Qian, D. and Yi, J., Hierarchical sliding mode control for under-actuated cranes, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016, pp. 51-66. DOI: 10.1007/978-3-662-48417-3_2
[19] Coral-Enriquez, H. and Cortés-Romero, J., Spatial-domain active disturbance rejection control for load mitigation in horizontal-axis wind turbines, in: 2016 IEEE Conference on Control Applications (CCA), 2016, pp. 575-580. DOI: 10.1109/CCA.2016.7587891
[20] Skogestad, S. and Postlethwaite, I., Multivariable feedback control : Analysis and design, Chichester: John Wiley & Sons, 2005.

H. Coral-Enriquez, recibió el título de Ing. en Automática Industrial de la Universidad del Cauca, Popayán, Colombia, en 2005, y el título de MSc. en Ingeniería con énfasis en Automática de la Universidad del Valle, Cali, Colombia, en 2010. En 2017 obtuvo el título de Dr. en Ingeniería Mecánica y Mecatrónica (tesis Laureada) de la Universidad Nacional de Colombia Bogotá, Colombia. Sus áreas de investigación incluyen control de turbinas eólicas, aplicación de teoría de control, control por rechazo activo de perturbaciones y control robusto.
ORCID: 0000-0002-1091-9112

S. Pulido-Guerrero, es Ing. Mecatrónico de la Universidad de San Buenaventura sede Bogotá, Colombia, en 2017. Su interés por la investigación está centrado en teoría de control, simulación e implementación de controladores en sistemas mecatrónicos.
ORCID: 0000-0003-1676-8076.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Eléctrica e Ingeniería de Control

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Eléctrica

Mayor información:

E-mail: ingelcontro_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 52 64

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Study of the plasma behavior produced by a vacuum arc discharge for different cathode materials

Sebastián Ramírez-Ramírez [a], Daniel Alejandro Sabogal-Suárez [a], Diego Fernando Devia-Narváez [b] & Elisabeth Restrepo-Parra [a]

[a] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Colombia, Manizales, Colombia. seramirezra@unal.edu.co*
[b] *Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia.*

Received: May 22th, de 2017. Received in revised form: October 15th, 2017. November: 25th, 2017

Abstract
Plasma-assisted techniques have been widely used for deposition of high quality thin films and metallurgical coatings. The glow plasma produced in the region between the electrodes and the chamber wall of a cathodic arc was modeled. The plasma behavior was characterized for different cathode materials that are commonly used in a cathodic arc deposition. The electron temperature, density, and electric potential were found to decrease as function of the distance from the spot region. However, the ion kinetic energy tends to increase due to the acceleration of the ions coming from the bulk region. Our results show that the cathodic arc is not directly affected by the plasma potential of the glow plasma and that the cathode material has an important influence on the plasma behavior, mainly because of the electrical and thermal conductivity of each material.

Keywords: modeling; arc discharge; plasma static behavior; cathode material.

Estudio del comportamiento del plasma producido en una descarga de arco en vacío para diferentes materiales del cátodo

Resumen
Las técnicas asistidas por plasma han sido ampliamente utilizadas para la deposición de películas delgadas y recubrimientos metalúrgicos de alta calidad. La descarga luminiscente producida en la región entre electrodos y cámara de un arco catódico fue modelada. El comportamiento del plasma fue caracterizado para diferentes materiales del cátodo comúnmente utilizados en descarga de arco catódico. Se encontró que la temperatura electrónica, densidad y potencial eléctrico decrecen como función de la distancia desde la región de puntos catódicos. Sin embargo, la energía cinética del ion tiende a incrementar debido a la aceleración de los iones provenientes de la región central del arco. Nuestros resultados muestran que el arco catódico no es directamente afectado por el potencial del plasma de la descarga luminiscente y que el material del cátodo tiene una influencia importante en el comportamiento del plasma, principalmente debido a la conductividad eléctrica y térmica de cada material.

Palabras clave: modelamiento; descarga de arco; comportamiento estacionario del plasma; material del cátodo.

1. Introduction

The cathodic arc deposition is one of the most used plasma assisted physical vapor deposition (PAPVD) techniques in which a thermal evaporation of the material is caused by electrical heating [1]. The evaporation process mainly occurs in the cathode because the current is localized in small and numerous discrete sites named cathodic spots, which are a fundamental characteristic of the arc discharges. In these spots, the electron emission is produced and the metal is evaporated, ionized, and emitted toward the interelectrode region as a plasma jet [2,3]. This metal emission exhibits sizes that ranges from 1 to 10 μm, and life times between 10 ns and several ms [4,5]; moreover, the current density has been estimated between 10^6 and 10^8 A/cm^3 [6]. Due to electrons ionizing the metallic vapor

How to cite: Ramírez-Ramírez, S., Sabogal-Suárez, D.A., Devia-Narváez, D.F. and Restrepo-Parra, E., Study of the plasma behavior produced by a vacuum arc discharge for different cathode materials. DYNA, 85(204), pp. 76-82, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

around the spot, metallic ions with different electric charges are produced and are accelerated at distances greater than the spot sizes, increasing its kinetic energy to values between 10 and 100 eV with a mean electric charge state that depends on the material [7].

To date, there is not an accepted theory that describes in a suitable way the ions acceleration, especially due to the lack of reliable data about the electric charge state and the time dependence of the ions velocity distribution; furthermore, there is a fundamental question that has not been solved regarding the contribution of the electric field developed by the ions acceleration.

In the electric arc discharge dynamics, the ion flux reaches its maximum when it is directed to the anode; nevertheless, a large fraction of this flux goes far from the interelectrode region toward the vacuum zone placed between the electrodes and the chamber wall due to the high amplitude of the emission angle [8]. Then, ions generate a potential in this zone and because of the plasma quasi-neutrality principle, this potential can drift electrons from the discharge region; therefore, a relatively weak plasma is produced in the space around the electrodes [9].

The study of the structure and state of the plasma around the cathodic arc discharge represents a relevant step to understand the complete phenomena of mechanisms involved in materials deposition. Specifically, in this vacuum region, the generation of an electrostatic potential produced by the glow plasma can alter the discharge parameters, slowing down the ions or changing its direction, and modifying the ions density in the interelectrode region. Also, instabilities in the electron temperature system and in the electric current can occur. Furthermore, the computational modeling could help to standardize the process (a priori) and extrapolate the synthesis parameters behavior in order to obtain functional coatings with better performance in a systematic way and suitable properties for technological applications. For these reasons, it is important to develop studies to understand the ion behavior during the cathodic arc-glow plasma coupling which take place during a cathodic arc deposition.

In the literature, few theoretical models describing the plasma in the spot surroundings can be found since most of the scientific community is focused on the electrodes regions because most of the chemical and physical plasma processes take place there. Nevertheless, some authors have studied the region around spots, for instance, Kelly *et al.* [10] developed a stationary, two-fluid model with spherical symmetry to describe the plasma state in the surroundings of a multi-cathode-spot vacuum arc. For typical values of arc parameters, they present an analytical approximation for the physical quantities of the plasma, which can be developed thanks to weak coupling between ions and electrons.

In the present work, we employed the model developed by Kelly *et al.* to characterize the plasma static behavior for several cathode materials usually employed in plasma arc discharge deposition processes. Besides, we have focused in the study of some plasma parameters and the possible influence of the glow plasma in the cathodic arc discharge. An outline of the paper is presented as follows: section II shows the formulation of the model describing the glow plasma system; section III describes the numerical simulation; finally, in section IV we summarize our conclusions of the results.

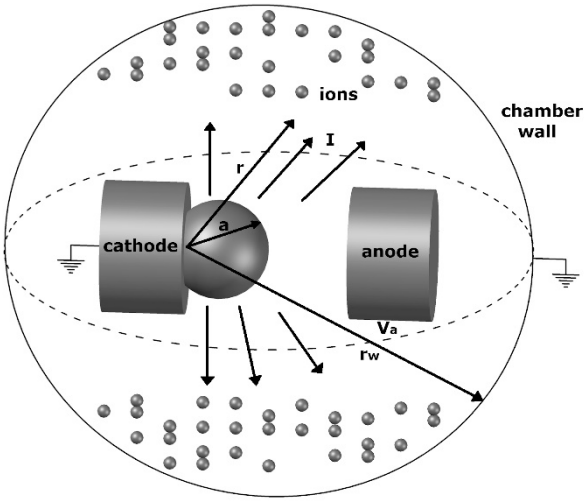


Figure 1. Schematic representation of the geometrical model.
Source: The authors.

2. Model description

The model developed by Kelly *et al*. is applied in systems where multiple spots are produced and influence the cathode erosion. In most cases, arcs that operate at low current have as a principal source a single cathode spot; this produces a plasma jet of high velocity that is directed toward regions far from the cathode [11]. As the current is increased, other cathode spots appear in a proportional way. If there are multiple spots randomly distributed on the cathode surface, a plasma jet emerges forming a region of plasma that fairly fills the whole interelectrode space [12].

The variables and constants considered in the model are listed in Table 1 and the geometric scheme and the main characteristics of the system are represented in Fig. 1. A spherical symmetry was considered for the chamber, this consideration is supported by experimental results, where a spherical distribution of the luminosity around the electrodes was observed [13].

Besides the model considerations employed by Kelly *et al*., we included the next considerations:

There are two types of cathode spots: type 1 that are characterized by presenting spots of high velocity with $\varepsilon_r < 10\,\mu g/C$ and $d \leq 1\,\mu m$ [14,15]; type 2 spots exhibit movement on the cathode surface and present craters with high dimensions of around $r_c \simeq 5 - 10\,\mu m$ and $\varepsilon_r \simeq 75 - 100\,\mu g/C$ (for Cu) [14-17]. Spots type 1 are mainly observed in surfaces that are covered by contaminants, as oxide layers, water, and powders. Moreover, there is not enough information in the literature about the analysis of the mass flux of plasmas generated by type 1 spots. For these reasons, the model used in this work is adapted to type 2 spots which are generated from clean surfaces [15].

Table 1.
Variables and constants considered in the model.

Description	Symbol
Electron temperature	T_e
Electron density	n_e
Erosion rate	ε_r
Spot radius	r_c
Spot crater diameter	d
Debye length	λ_D
Angle of the surface normal to the cathode	θ
Plasma percentage along the surface normal to the cathode	α
Electric potential	φ
Discharge radius	a
Potential difference respect to the cathode	V_p
Kinetic energy of ions	W_i
Ion temperature	T_i
Charge density	ρ
Ion current density	J
Ion density	n_i
Proton charge	q
Average ion charge	Z
Sphere area	A
Chamber radius	r_w
Radial spherical coordinate	r
Ion velocity	v_i
Ion mass	m_i
Discharge current	I_D
Electric field	E
Friction force of ions on electrons	$\vec{F}_{ie}$
Pressure	P
Boltzmann constant	$k_B = 8.617x10^{-5} eV.K^{-1}$
Magnetic field	B
Friction force of electrons on ions	$\vec{F}_{ei}$
Attractive coulombic potential	φ_c
Braginskii thermoelectric coefficient	β
Plasma electric conductivity	σ
Electron heat flux	q_e
Plasma thermal conductivity.	k_e

Source: The authors.

The quasi-neutrality principle of plasmas is applied according to the small values of λ_D, which can present parameters of T_e~1 eV and n_e~10^{14} cm^{-3} corresponding to λ_D~$1.9x10^{-6}$ cm. We considered that there is not any type of gas in the vacuum region between the chamber wall and electrodes; furthermore, the electron inertia is neglected in the electron moment equation. Since in cathode emission processes several ionic species that differs in kinetic energy are produced, an ionization degree or charge magnitude is generated, and it is necessary to define the ion average charge. It allows inferring the behavior of the plasma generated in the interelectrode region considering a unique ionic specie with average energy and charge.

This approximation is suitable because the plasma flux and energy expansion is relatively symmetric. This effect can be approximated by the cosine distribution n~$cos^{\propto}\theta$. In our case $\alpha \to 0$, then a spherical distribution is obtained, and it is in agreement with experimental results using a cylindrical anode with the cathode placed at the center of symmetry [18]; furthermore, the angular dependence on the ion flux is neglected [9].

Fig. 2 shows the electron emission process and the vacuum electric arc discharge. In Fig. 2(a), the electric heating of the cathode (Joule Heating) is presented, it gives rise to the electron emission and to the corresponding cathode spots production, generating a phase transition between solid to plasma. In Fig. 2(b), a general scheme of the arc discharge is presented.

The cathode loses mass because material emission such as ions, neutral atoms or macro-particles toward the discharge region, and the electric arc between the electrodes is generated. Moreover, the plasma is produced out of the interelectrode region because some material reaches the vacuum region between electrodes and the chamber wall [19].

Since $W_i(r)$ is much greater than the thermal energy, it is not necessary to consider the variable $T_i(r)$ (when electrons were decelerated at energies in the order of equilibrium temperature); then, the ions are considered cold $T_i(r) \approx 0$.

It is important to distinguish the macroscopic consequences of the ion movement that entails to an ion current that is represented by the ion continuity, given by:

$$\boldsymbol{J = \frac{I_D}{A} = \rho v_i} \tag{1}$$

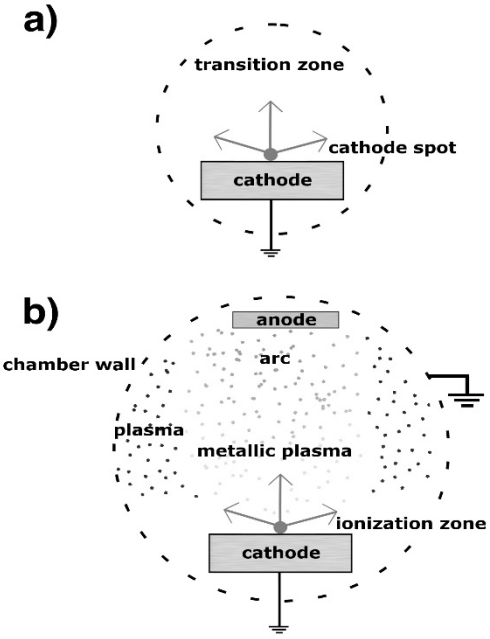


Figure 2. Schematic representation of process in (a) the interelectrode region and (b) the region between electrodes and chamber wall.
Source: The authors.

where $\rho = n_i q Z$. Since the system studied here exhibits a spherical symmetry, $A = 4\pi r^2$ and $v_i = (2W_i/m_i)^2$. Replacing these considerations in Eq. (1), the next expression is obtained:

$$n_i = \frac{I_D}{4\pi q Z^2 v_i}. \quad (2)$$

Now, we consider a quasi-neutrality state of the plasma, which is given by:

$$n_e = n_i Z. \quad (3)$$

To determine the forces acting on the ions, an equation including the ion flux is included; also, the force due to the electric field exerted on this ionic fluid and the friction force with the electrons can be described by:

$$m_i \left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}_i . \nabla\right) . \boldsymbol{v}_i = q\boldsymbol{E} + \boldsymbol{F}_{ie}. \quad (4)$$

Considering the stationary case where $\partial/\partial t = 0$, in the simple case where one dimension is considered and no spatial fluctuations in the angular dependence of the ions ejection from the cathode can be observed, the expression for describing the ion moment can be written as:

$$m_i v_i \frac{dv_i}{dr} = -Zq\frac{d\varphi}{dr} + F_{ie}. \quad (5)$$

The initial expansion of the plasma and the ionic acceleration are governed by pressure gradients and by the electron-ion coupling. It is important to take into account that if the interaction energy between particles is small enough in comparison with the average kinetic energy of the particles thermal movement, it is possible to consider that the plasma behaves as a perfect gas in the thermodynamic sense; it means that the pressure follows $P = n_e k_B T_e$. There exist additional effects that have not been considered, such as external magnetic fields that are usually present, for instance, in arc systems including magnetic filters; similarly, other aspects such as localization, size and anode distance, magnetic fields generated by the arc current, among others, will not be included. In spite of the considerations afore mentioned, the model presented in this work is valid as an initial point for understanding the basic phenomenology. In future works, other parameters can be considered, avoiding simplifications, in order to develop a more complex model.

Taking into account the last considerations, the next expression is given for the electron moment:

$$-\frac{1}{n_e}\nabla(n_e T_e) = -q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) + \boldsymbol{F}_{ei}. \quad (6)$$

Solving this equation without including $\boldsymbol{B}$ and using the same consideration exposed before, the next expression is obtained:

$$-\frac{1}{n_e}\frac{d}{d\boldsymbol{r}}(n_e T_e) = -q\frac{d\varphi}{d\boldsymbol{r}} + F_{ei}. \quad (7)$$

This set of equations includes an expression for the force that electrons exert on the ions and vice versa when an initial potential is applied:

$$F_{ei} = -ZF_{ei} = -\frac{q^2 Z^2 n_i \boldsymbol{v}_i}{\sigma} + \beta\frac{dT_e}{d\boldsymbol{r}}. \quad (8)$$

The energy and moment exchange between ions and electrons are given by [10]:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2 q_e) = \frac{q^2 Z^2 n_i v_i}{\sigma} \quad (9)$$

where:

$$q_e = -k_e\frac{dT_e}{d\boldsymbol{r}}. \quad (10)$$

3. Results and discussion

The set of equations were solved for $T_e(a)$, Z, n_i, m_i, I_D, a, $W_i(a)$, $\varphi(a)$ and $dT_e/dr\,(a)$ for several cathode materials, which include Al, Co, Cr, Cu, Mo, Ti, W and Zr, using the forth order Runge-Kutta method. In order to solve the equations, it is assumed that the chamber radius is much greater than the interelectrode region, where the discharge takes place, that is $r_w/a \to \infty$; then, it is suitable to assert that the condition $T_e(r_w) = 0$ is correct.

In Table 2, values for physical constants for the different materials used in this work are listed; these values were experimentally found by Anders [19]. The discharge current and radius were taken as $I_D = 10\,A$ and $a = 0.5\,cm$, respectively.

In Fig. 3, the electron density behavior is presented in logarithmic scale. In general, for each material, it is possible to appreciate that n_e exhibits a decreasing trend following a

Table 2.
Parameters for the materials employed in the model.

Elem.	m_i [g]	σ [Ωcm]	k_e [Wm^{-1}K^{-1}]	Z [adim.]	T_e [eV]	V_i (a) [ms^{-1}]	$\varphi(a)$ [V]
Cu	$1.05x10^{-22}$	1.1676×10^{-41}	401	2.06	3.5	13200	23.4
Ti	$7.95x10^{-23}$	8.84107×10^{-42}	22	2.03	3.2	15400	21.3
Co	$9.78x10^{-23}$	1.08754×10^{-41}	100	1.73	3	12100	22.8
Zr	$1.51x10^{-22}$	1.67912×10^{-41}	23	2.58	3.7	15400	23.4
Mo	$1.59x10^{-22}$	1.76808×10^{-41}	139	3.06	4.5	17300	29.53
W	$3.05x10^{-22}$	3.3916×10^{-41}	170	3.07	4.3	11100	31.9
Al	$4.48x10^{-23}$	4.98176×10^{-42}	237	1.73	3.1	15400	23.6

Source: The authors.

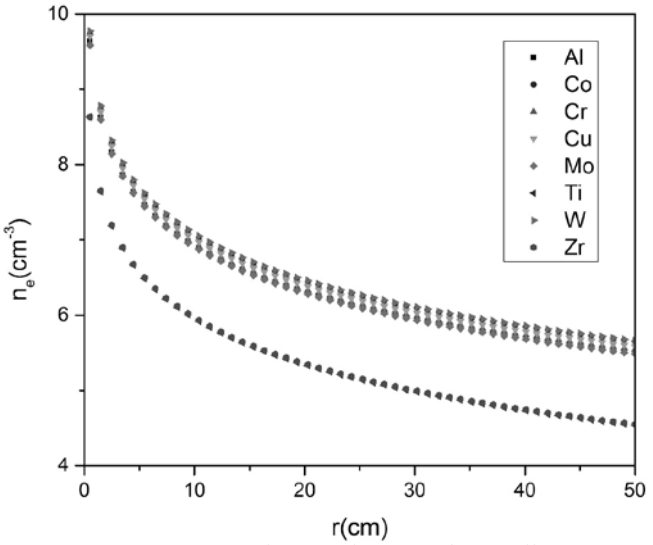


Figure 3. Electron density as a function of the radius for the different cathode materials.
Source: The authors.

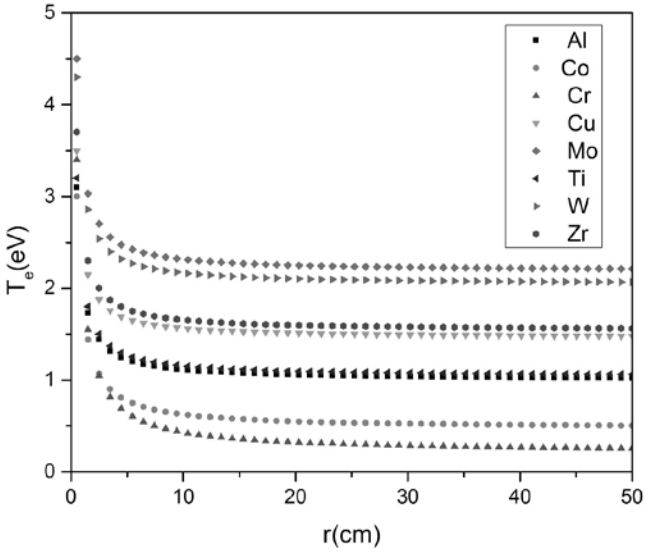


Figure 4. Electron temperature as a function of the radius for the different cathode materials.
Source: The authors.

Boltzmann relationship, approximately $n_e \propto e^{q\varphi/k_B T_e}$. This behavior is mainly due to a competition between two factors, v_i and r^2, that affect the electron density; according to Eqs. (2) and (3), n_e is proportional to $(v_i r^2)^{-1}$. The ion velocity v_i is a quantity that decreases as the electrons are emitted through the chamber; therefore, an increase in the density is observed. Regarding the geometrical factor r^2, it is possible to state that this factor dominates the n_e behavior when $r_w \gg a$. On the other hand, the geometrical influence on n_e is notorious for values of $r < 25\ cm$, and it is reduced in this interval in a factor approximately of 2. After this interval, the electron density tends to stabilize. The electric conductivity is one of the essential characteristics of plasmas for determining the heat dissipation in the environment. An electric potential gradient in the plasma causes an electric charge transport through the chamber; then, the electric conductivity, k_e, is directly affected by the electrons concentration. It was observed that Al, Co, Cr, Cu, Mo and W present a similar behavior and tend to the stability at similar values. On the contrary, although Zr and Ti exhibit a similar trend, the order of magnitude is different from that of the materials mentioned above; this behavior is presented because these materials have similar electric conductivities, $22\ Wm^{-1}K^{-1}$ for Zr and $23\ Wm^{-1}K^{-1}$ for Ti, which are lower than the conductivity values for the first group of materials.

In Fig. 4, the behavior of the electron temperature as a function of the radius is presented. The different trends are due to the different values of the electron temperature of each cathode material, which is taken as an initial condition for solving the differential equations. A typical characteristic of these curves is the trend to decrease as function of the radius in the interval $0 < r < 10\ cm$. For $r > 10\ cm$, the curve trends to remain constant; furthermore, the magnitude of electron temperature for each material is approximately of $2\ eV$.

The decrease in T_e profile is determined according to Eqs. (9) and (10), mainly due to the electron heat flux divergence that presents a low value close to zero $d/dr\,(r^2 q_e) \approx 0$ because the energy transference between electrons and ions is very small. It indicates that there is not an electron heat flux from the electric arc toward the studied region. This low electron heat flow is represented by the energy liberation in the region where the electric discharge occurs. In this region, part of the electron kinetic energy that is transformed into heat may be small. This takes us to the conclusion that the temperature was practically constant for $r > 10\ cm$.

In Fig. 5, profiles φ as a function of the radius are presented. There is an appreciable difference in the trends for the different material curves, especially regarding the stabilization values and the values taken at the first $20\ cm$ of

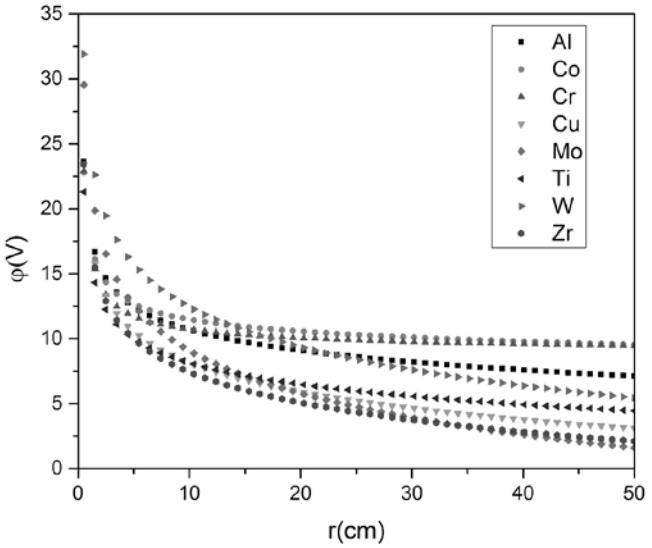


Figure 5. Electric potential as a function of the radius for the different cathode materials.
Source: The authors.

radius. φ tends to follow a behavior similar to that of n_e and T_e. These two variables exhibit a decreasing trend as the radius increases. Therefore, the results of φ are in agreement with those obtained for n_e and T_e, since it is reasonable that as the number of charges increases (decreases) in a certain region, there is also an increase (decrease) in the electrical potential developed in such region. From Eqs. (6) and (8), it is possible to notice that there are two terms that influence directly the potential behavior: the first refers to ion-electron drift $\left((1/\sigma)q^2 Z n_i v_i\right)$, which tends to be smaller as the radius increases, following the behavior of n_e; therefore, this term can be neglected with respect to the second term, which refers to the pressure gradient due to the electrons $\left((-1/n_e)(d/dr)n_e T_e\right)$ and the electrostatic force $(q\, d\varphi/dr)$. For this reason, it is concluded that these two last terms are in equilibrium.

In Fig. 6, the profile of W_i, as a function of the radius is presented. The behavior of W_i is mainly governed by the values of velocity and ionic mass, $W_i \propto v_i^2 m_i$, which are summarizing in Table 2. In this figure, a greater increase in the kinetic energy is observed between $0 < r < 25\ cm$, reaching a stable value for $r > 25\ cm$; nevertheless, it is important to note that for the heaviest metals, it is more difficult to find the stability. This is because the conditions of high energy do not allow to reach the equilibrium state in contrast to the case of materials with lower values of ion mass and initial velocity. For instance, taking as reference the materials with the greatest and the lowest kinetic energies, Mo and Al respectively, it is observed that there is a great difference between them, in the order of 4.6 eV; therefore, it is possible to conclude that materials with greater mass requires to travel greater distances for exchanging or transferring energy as the radius is increased. Other important aspect to consider is the electric potential; it is observed that for materials with greater average charge and electron density, there is an important increase in W_i, producing an extra acceleration of ions emitted from the cathode spots. In energetic considerations, this increase in the acceleration makes it difficult to find the equilibrium point at regions far from the emission sites.

In Fig. 7, the electric field as function of the radius is presented. Initially, for values of $r \leq a$, there is an electric field different from zero that is generated due to a transition of the plasma from non-equilibrium close to the emission sites toward the equilibrium state, at sites far from the cathode spots. These tendencies in the electric field are similar for all the materials, regardless the ion mass, the electric potential, the initial ionic velocity, the electron temperature and the electron density. The fact that $E = 0\ V/m$ ensures the consistency of the model considered, because when the value of the plasma conductivity is high, the electric field tends to very smaller values.

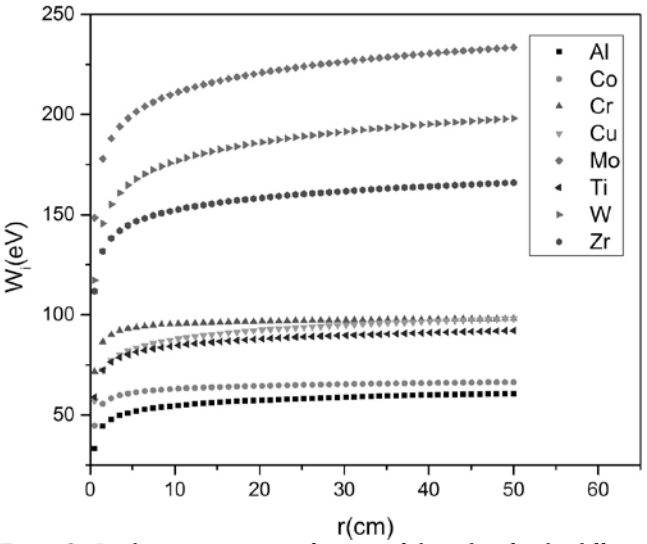


Figure 6. Ion kinetic energy as a function of the radius for the different cathode materials.
Source: The authors.

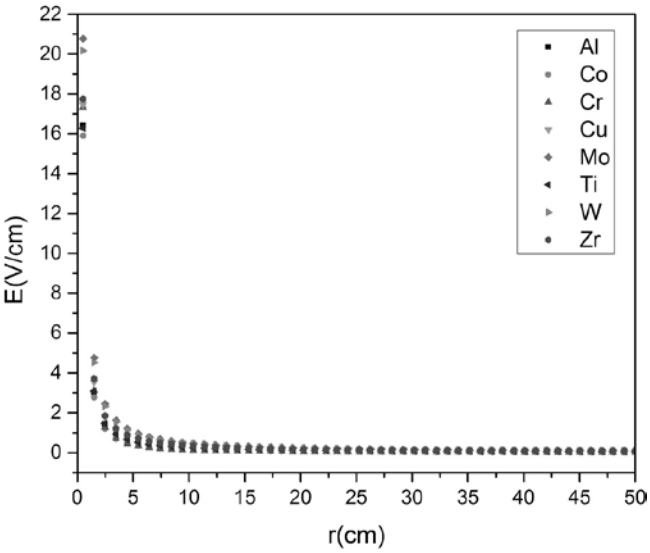


Figure 7. Electric field as a function of the radius for different cathode materials.
Source: The authors.

This result is due to the important concept presented in Eq. (3) and the initial supposition that refers to plasma quasi-neutrality from the macroscopic point of view.

4. Conclusions

The model developed by Kelly et al. to describe the plasma state in the surroundings of a multi-cathode-spot vacuum arc was employed. The set of equations of the model were solved for studying the behavior of typical plasma physical quantities as function of the distance from the interelectrode region where the discharge takes place (radius). We considered different cathode materials that are commonly employed in cathodic arc deposition. A decrease in the electron density was observed because of the competition between the ion velocity and the radius. The electric potential decrease is controlled by the electron pressure gradient because the friction force between electrons and ions is very small. On the other hand, the electric field is approximately zero because of the high electric conductivity of the plasma. Regarding the electron temperature, it was found that energy transference between electrons and ions is very low; which indicates that the electron heat flux coming from the regions of electric arc is zero. That shows that the electric arc is not directly affected by the electric potential generated by the plasma near the electric arc. The decreasing trend of the kinetic energy is due to the extra acceleration of ions caused by the electric potential and the values of material mass ions and initial ion velocity.

Although a similar plasma behavior was observed for the different cathode materials, the physical quantities are directly affected by the electrical and thermal conductivity of the cathode material.

The importance of studying the plasma generated around the electric discharge region constitutes a guide for future experimental studies, where the objective is to obtain data about the electric discharge variables behavior. These variables, which depend on the cathode material, influence directly the coatings quality and functionality.

Acknowledgments

This work was made possible by the support of COLCIENCIAS via the *Jóvenes Investigadores e Innovadores* 2016 program, under the project No.077 -2017 (206010014290) *Modelamiento teórico y desarrollo computacional de plasmas de laboratorio empleados en el procesamiento de materiales* and COLCIENCIAS Doctoral program *Convocatoria 727 de 2015.*

References

[1] Sree-Harsha, K.S., Principles of physical vapor deposition of thin films, 1st edition, Great Britain, Elsevier, 2006, 431 P.

[2] Randhawa, H., Cathodic arc plasma deposition technology. Thin Solid Films, 167(1-2), pp. 175-186, 1988. DOI: 10.1016/0040-6090(88)90494-4

[3] Boxman, R.L. and Goldsmith, S., Momentum interchange between cathode-spot plasma jets and background gases and vapors and its implications on vacuum-arc anode-spot development. IEEE Transactions on Plasma Science, 17(5), pp.705-712, 1989. DOI: 10.1109/27.131026

[4] Siemroth, P., Schultrich, B. and Schülke, T., Fundamental processes in vacuum arc deposition. Surface and Coatings Technology, 74-75(1), pp. 92-96, 1995. DOI: 10.1016/0257-8972(95)08346-4

[5] Anders, A., Anders, S., Juttner, B., Botticher, Luck, W.H. and Schroder, G., Pulsed dye laser diagnostics of vacuum arc cathode spots. IEEE Transactions on Plasma Science, 20(4), pp. 466-472, 1992. DOI: 10.1109/27.256775

[6] Brown, I.G., Cathodic arc deposition of films. Annual Review of Materials Science, 28(1), pp. 243-269, 1998. DOI: 10.1146/annurev.matsci.28.1.243

[7] Kutzner, J. and Miller, H.C., Integrated ion flux emitted from the cathode spot region of a diffuse vacuum arc. Journal of Physics D: Applied Physics, 25(4) pp. 686-693, 1992. DOI: 10.1088/0022-3727/25/4/015

[8] Tuma, D.T, Chen, C.L and Davies, D.K., Erosion products from the cathode spot region of a copper vacuum arc. Journal of Applied Physics, 49(1), pp. 3821-3831, 1978. DOI: 10.1063/1.325386

[9] Kutzner, J. and Miller, H., Ion flux from the cathode region of vacuum arc. IEEE Transactions on Plasma Science, 17(5), pp. 668-694, 1989. DOI: 10.1109/27.41183

[10] Kelly, H., Marquez, A., Minotti, F. and Fontan, C.F., The plasma state in the surroundings of a multi-cathode-spot vacuum arc. Journal of Physics D: Applied Physics, 31(1), pp. 1737-1741, 1998. DOI: 10.1088/0022-3727/31/14/018

[11] Miller, H.C., A review of anode phenomena in vacuum arcs. Contributions to Plasma Physics, 29(3), pp. 223-249, 1989. DOI: 10.1002/ctpp.2150290302

[12] Goldsmith, S., Boxman, R.L., Martin, P.J. and Sanders, D.M., Handbook of vacuum arc science and technology, 1st edition, New Jersey, Noyes Publications, 1995, pp. 274.

[13] Meunier, J.L., Pressure limits for the vacuum arc deposition technique. IEEE Transactions on Plasma Science, 18(6), pp. 904-910, 1990. DOI: 10.1109/27.61501

[14] Jüttner, B., Characterization of the cathode spot. IEEE Transactions on Plasma Science, 15(5), pp. 474-480, 1987. DOI: 10.1109/TPS.1987.4316740

[15] Lyubimov, G.A. and Rakhovskii, V.I., The cathode spot of a vacuum arc. Soviet Physics Uspekhi, 21(1), pp. 693-718, 1978. DOI: 10.1070/PU1978v021n08ABEH005674

[16] Daalder, J.E., Erosion structures on cathode arced in vacuum. Journal of Physics D: Applied Physics, 12(10), pp. 1769-1779, 1976. DOI: 10.1088/0022-3727/12/10/019

[17] Kimblinc, C.W., Erosion and ionization in the cathode spot regions of vacuum arcs. Journal of Applied Physics, 44(1), pp. 3074-3081, 1973. DOI: 10.1063/1.1662710

[18] Anders, A. and Yushkov, G.Y., Angular resolved measurements of ion energy of vacuum arc plasmas, Applied Physics letters, 80(1), pp. 2457-2459, 2002. DOI: 10.1063/1.1468271

[19] Anders, A., Cathodic arcs, from fractal spots to energetic condensation, 1st edition, New York, Springer, 2009, pp.156, 500-515.

S. Ramírez-Ramírez, received the BSc. Sci. in Engineering Physics in 2014 from the Universidad Nacional de Colombia, Manizales, Colombia. He is studying a MSc. degree program in Science-Physics at the same university and is member of the PCM Computational Applications research group. His research interests include: plasma physics.
ORCID: 0000-0002-3228-3004

D.A. Sabogal-Suárez, received the BSc. Sci in Engineering Physics in 2013 and MSc. degree in Science-Physics in 2016, both from the Universidad Nacional de Colombia, Manizales, Colombia. He is member of the PCM Computational Applications research group. His research interests include: atomistic simulations of magnetic materials and grain boundary engineering. ORCID: 0000-0003-0744-5638

D.F. Devia-Narváez, received the BSc. Eng in Electrical Engineering in 2007, the MSc. degree in Industrial Automation in 2011, both from the Universidad Nacional de Colombia, Manizales, Colombia. He is studying a PhD degree program in Automation Engineering at the same university. His research interests include: plasma physics.
ORCID: 0000-0002-6804-1672

E. Restrepo-Parra, received the BSc. Eng in Electrical Engineering in 1990 from the Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia, the MSc degree in Science-Physics in 2001, and the PhD degree in Automation Engineering in 2009, both from the Universidad Nacional de Colombia. Manizales, Colombia. She is a full professor in the Physics and Chemistry Department, in Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Colombia. His research interests include: atomistic simulations of magnetic materials and plasma physics.
ORCID: 0000-0002-1734-1173

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Evaluation of post-graduate programs using a network data envelopment analysis model

Lidia Angulo Meza [a], João Carlos Correia Baptista Soares de Mello [a], Silvio Figueiredo Gomes Júnior [b] & Plácido Moreno[c]

[a] *Departamento de Engenharia de Produção, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brazil. lidia_a_meza@pq.cnpq.br, jcsmello@producao.uff.br*
[b] *Departamento de Engenharia de Produção, Universidade Estadual da Zona Oeste, Rio de Janeiro, Brazil. silviogomes@uezo.rj.gov.br*
[c] *University of Seville, Department of Industrial Management, Seville, Spain.*

Received: September 19th, 2016. Received in revised form: November 13th, 2017. Accepted: November 25th, 2017.

Abstract
Despite standard Data Envelopment Analysis (DEA) models having been widely used in assessing efficiency in education, a few studies use Network DEA (NDEA) models in educational evaluation. In this paper, we proposed an alternative to the official evaluation performed every three years by CAPES (Brazilian agency for post-graduation programs regulation) using an NDEA model. The use of NDEA is justified because depending on the point of view, some variables can be considered either inputs or outputs. The use of NDEA avoids the need to decide whether a variable is an input or output of the entire process. This happens because a variable can be both an output for one stage and an input for another. Our relational NDEA model computes both productivity and quality assessments together with global efficiency using bibliometric data.

Keywords: education; data envelopment analysis; network DEA; educational efficiency; bibliometric evaluation.

Evaluación de los programas de post-grado usando un modelo de análisis envolvente de datos en red

Resumen
A pesar de que los modelos estándar del Análisis Envolvente de Datos (DEA) han sido ampliamente utilizados en la evaluación de la eficiencia en educación, existen pocos estudios que utilizan modelos DEA en red (Network DEA – NDEA) en la evaluación educativa. En el presente trabajo, se ha propuesto una alternativa a la evaluación oficial realizada a cada tres años por la CAPES (agencia brasileña para la regulación de los programas de post-graduación) mediante un modelo DEA en red. El uso de NDEA se justifica ya que dependiendo del punto de vista algunas variables pueden ser consideradas como entradas o como salidas. El uso de NDEA evita la necesidad de decidir si una variable es una entrada o una salida de todo el proceso. Esto ocurre porque una variable puede ser tanto una salida para una etapa y una entrada para otro. Nuestro modelo relacional NDEA evalúa tanto la productividad como la calidad junto con la eficiencia global, a partir de datos bibliométricos.

Palabras clave: educación; análisis envolvente de datos; DEA en redes; eficiencia educacional; evaluación bibliométrica.

1. Introduction

Network data envelopment analysis (NDEA) models [1] have an increasing use in service evaluation. Despite standard data envelopment analysis (DEA) models having been widely used in assessing efficiency in education, to the best of our knowledge, NDEA models have not been used in this area, with the exception of a study by Johnes [2]. In that paper, the author used an NDEA model to assess the efficiency of English universities taking into account qualitative variables. In this paper, we propose using a NDEA model to assess the efficiency taking into account

How to cite: Meza, L.A., de Mello, J.C.C.B.S., Gomes Júnior, S.F. and Moreno, P., Evaluation of post-graduate programs using a network data envelopment analysis model. DYNA, 85(204), pp. 83-90, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

quantitative variables (bibliometric information). We will apply this NDEA model to the evaluation of some Brazilian post-graduated programs.

Post-graduation programs in Brazil have been evaluated since 1976 by CAPES (from the Portuguese Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior). This evaluation includes, among other things, following these courses yearly and assessing the performance of all programs and courses that compose the National System of Post-Graduation every three years. The results of this procedure are expressed in marks of a scale going from 1 to 7 and justify the course recognition renewal for the next three years. Although this assessment considers several factors, such as duration of classes, number of students and infrastructure, it focuses mainly on bibliometric evaluation.

CAPES evaluation considers published papers and, with two different measurements, divides that figure by both the number of professors and total number of theses presented. CAPES also ranks articles, considering the journal in which they were published by means of a system of fixed weights. This ranking, known as QUALIS, can be found at the institution's site, www.capes.gov.br.

However, the fixed weight system is thought to be too rigid by some critics, and the two measures used do not reflect on their own the quality and productivity of the program [3]. It is also possible to use variable weights and one single measurement instead of fixed weights and two measurements. The variable weights should reflect the importance of the journal in which the article was published. One technique that allows us to do what is proposed is DEA. DEA usage has been widely spread over various areas of application, particularly in educational evaluation and as a bibliometric tool [4], whether to evaluate universities, as in Abramo et al. [5], or in post-graduation programs [3].

Weights allocated by traditional DEA models are calculated by a linear programming problem in such a way that each decision benefits the best combination of these weights with the purpose of maximizing their efficiency [6]. However, these weights may not be accepted as "fair" by all programs. However, as a certain "freedom" to determine these weights is given, an opportunity is created for each program to enhance its best features. As such, inefficient programs under these conditions do not perform well in any CAPES requirements.

A two-stage DEA model called NDEA [7, 8] is proposed in this work. It allows two indexes to be jointly calculated, whereas otherwise, they would be calculated independently as CAPES does in the evaluation of post-graduate programs. A set of engineering programs known within CAPES as "Engineering III" will be evaluated. The programs include mostly industrial and mechanical engineering courses. Subjective opinions that are consensual among the majority of the docent staff are also included in the models as weight restrictions [9].

As opposed to traditional DEA models, an NDEA model defines each DMU as a network of processes; in other words, it takes into account the internal system structure. In the NDEA model used in this work, the number of docent staff is taken as initial input, the number of dissertations and theses as intermediate products, and scientific production as final outputs. Thus, this model computes efficiency both under the productivity and quality of research aspects for post-graduation courses. In this article, both models of productivity and quality used in Soares de Mello et al. [3] are aggregated in one single DEA model. Data are those divulged by CAPES in its last evaluation triennium (2010-2012).

The proposed NDEA model is an alternative to the educational evaluation performed in Brazil. Nonetheless, its relevance goes beyond local use, as it takes into account variables inside the "black box" of standard DEA models in efficiency evaluation based on bibliometrics.

This article is organized as follows: Section 2 contains a literature revision both from the DEA education aspects and NDEA models. Section 3 describes the NDEA model and its formulation. Section 4 describes the modelling used in this work. Section 5 displays the results and discussions, and Section 6 presents the conclusions of this work.

2. Brief review of literature

2.1. Review of DEA in education

Charnes et al.[6] published the first ever article on DEA dealing with an educational evaluation. Initially, DEA was developed to evaluate organizations, with no financial considerations included, its focus being on educational aspects.

Since that publication, several articles and techniques have been developed in educational evaluation. Soares de Mello et al [3] evaluated the post-graduate programs of COPPE (Engineering Post-Graduate and Research Institute) of the Universidade Federal do Rio de Janeiro and revised DEA literature in education up to 2005. The aim of this study was to assess quality efficiency rather than strict educational efficiency. Thanassoulis et al. [10] have used DEA to evaluate the cost structure of UK universities.

Gomes Jr et al. [11] have shown the use of non-radial indexes in DEA and their application to identify non-radial targets for CEDERJ poles. This application included the calculation of the non-radial efficiency of these poles. Several other works have used this methodology to calculate either efficiency or benchmarks for professors, courses and teaching institutions. For example, Tyagi et al [12], França et al [13], Bougnol and Dulá [14] can be mentioned, among others.

2.2. Review of NDEA

The foundations of NDEA were established by Färe and Grosskopf [7], who proposed the opening of the so-called "black box". However, the first works that used NDEA implemented a traditional DEA model for each stage independently, paying no attention to the continuity of the relationship between stages. Among these works, Zhu [15], Sexton and Lewis [16] and Soares de Mello et al. [3] should be mentioned.

Chen and Zhu [17] proposed a DEA model with constant scale returns that would not treat the efficiency of each stage independently. More recently, Kao [8] took into account the continuity among stages with a multiplicative relation called

the relational NDEA approach. However, Chen et al. [18] proposed an additive relation among stages in the so-called additive NDEA model. Soon after, Tone and Tsutsui [19] adapted the SBM (Slack-Based Measure) model to the additive NDEA model. Moreno and Lozano [20] have successfully used it to evaluate the efficiency in the NBA (National Basketball Association). An application to evaluate Brazilian electricity distributors has been performed by Moreno et al. [21]. A comprehensive review of NDEA in both theoretical and application aspects can be found in Kao [1].

It should be mentioned that, until now, no use of relational NDEA models to measure efficiency of post-graduate programs, as has been done in this work, has been found. Nonetheless, to the best of our knowledge, an NDEA model in educational evaluation has been used by Johnes [2] and Toloo et al. [22] but not in a bibliometric context.

3. Multiplicative relational NDEA model

Traditional DEA models, such as CCR (Charnes et al. [6]), have been shown to be adequate for efficiency analysis of production units that use multiple inputs and outputs. These production units are usually called decision-making units (DMUs). Efficiency is computed by comparing each DMU's input and output level with all other DMUs.

As previously mentioned, one of the characteristics of traditional DEA models is the neglect of the internal stages of each DMU and its connections (intermediate products). The existence of connections between activities is indeed an indispensable characteristic of NDEA models. Although NDEA models can be found in various configurations, the serial multistage model is the most common. The production diagram of three hypothetical stages is shown in Fig. 1.

To be globally efficient, the structure of NDEA models makes it imperative for a DMU to be efficient in each sub-process or stage. It may even happen that not a single fully efficient (100%) DMU exists when the whole process is taken into account. This modelling implies that all intermediate products are produced and consumed within the DMU, whereas input and output are exogenous to the internal structure. Other than computing overall efficiency, NDEA models provide efficiency indexes for each stage as all possibilities of production are modelled for each stage. In other words, each sub-process has its own technology and thus defines its own set of weights and reference units.

Kao and Hwang [23] have proposed the multiplicative relational model to relate the stages to each other. This model is based on the constant return scale DEA model [6], in which E_0 is DMU 0 efficiency. Its fractionary mathematic formulation is presented in (1). Let *s* be the number of outputs and *m* the number of inputs, *0* being the DMU under assessment.

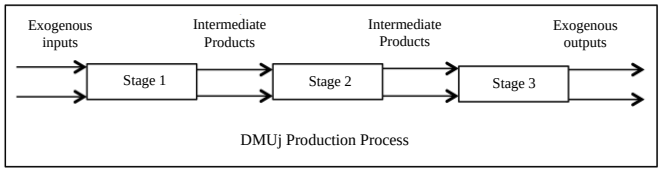


Figure 1. Serial system with three stages.
Source: The authors

$$E_0 = max \frac{\sum_{r=1}^{s} u_r . y_{r0}}{\sum_{i=1}^{m} v_i . x_{i0}}$$

s.t.

$$\frac{\sum_{r=1}^{s} u_r . y_{rj}}{\sum_{i=1}^{m} v_i . x_{ij}} \leq 1,\ j = 1,2,...,n. \qquad (1)$$

$$u_r, v_i \geq 0, i = 1,2,...,m; r = 1,2,...,s.$$

Where y_{rj} is the output r of DMU j and x_{ij} to the input $_i$ of DMU *j*, whereas u_r and v_i are the multipliers associated with output r and input i, respectively.

In a two-stage model, there will be D intermediate products that behave as outputs from the first stage and inputs to the second stage. Intermediate products are therefore both consumed and produced within the system. Efficiencies that are computed independently are obtained from models (2) and (3), where E_0^1 and E_0^2 correspond to stages 1 and 2.

$$E_0^1 = \max \frac{\sum_{d=1}^{D} w_d . z_{d0}}{\sum_{i=1}^{m} v_i . x_{i0}}$$

s.t.

$$\frac{\sum_{d=1}^{D} w_d . z_{dj}}{\sum_{i=1}^{m} v_i . x_{ij}} \leq 1,\ j = 1,2,...,n. \qquad (2)$$

$$w_d, v_i \geq 0, i = 1,2,...,m; d = 1,2,...,D.$$

$$E_0^2 = \max \frac{\sum_{r=1}^{s} u_r . y_{r0}}{\sum_{d=1}^{D} w_d . z_{d0}}$$

s.t.

$$\frac{\sum_{r=1}^{s} u_r . y_{rj}}{\sum_{d=1}^{D} w_d . z_{dj}} \leq 1,\ j = 1,2,...,n. \qquad (3)$$

$$u_r, w_d \geq 0, d = 1,2,...,D; r = 1,2,...,s.$$

Where z_{dj} corresponds to the intermediate product *d* of DMU j, w_d being its multiplier. According to the relational model proposed by Kao and Hwang [23], global efficiency E_0 of a two-stage series system is computed by model (4). They included restrictions of models (2) and (3), namely restrictions concerning stages 1 and 2, into model (1) to incorporate the interaction between the two stages.

$$E_0 = \max \frac{\sum_{r=1}^{s} u_r . y_{r0}}{\sum_{i=1}^{m} v_i . x_{i0}}$$

s.t.

$$\begin{aligned}
&\frac{\sum_{r=1}^{s} u_r . y_{rj}}{\sum_{i=1}^{m} v_i . x_{ij}} \le 1,\ j = 1,2,...,n. \\
&\frac{\sum_{d=1}^{D} w_d . z_{dj}}{\sum_{i=1}^{m} v_i . x_{ij}} \le 1,\ j = 1,2,...,n. \\
&\frac{\sum_{r=1}^{s} u_r . y_{rj}}{\sum_{d=1}^{D} w_d . z_{dj}} \le 1,\ j = 1,2,...,n. \\
&u_r, v_i, w_d \ge 0, i = 1,2,...,m; r = 1,2,...,s; d = 1,2,...,D
\end{aligned} \tag{4}$$

Please note that the additional constraints to model (1) (i.e., the second and third restrictions of model (4)), ensure that the efficiency of stages 1 and 2 are not greater than one. Once model (4) is computed, overall efficiency E_0 and the individual efficiencies E_0^1 and E_0^2 of stages 1 and 2 of DMU0 are obtained from equations (5), (6) and (7) respectively.

$$E_0 = \frac{\sum_{r=1}^{s} u_r^* . y_{r0}}{\sum_{i=1}^{m} v_i^* . x_{i0}} \le 1 \tag{5}$$

$$E_0^1 = \frac{\sum_{d=1}^{D} w_d^* . z_{d0}}{\sum_{i=1}^{m} v_i^* . x_{i0}} \le 1 \tag{6}$$

$$E_0^2 = \frac{\sum_{r=1}^{s} u_r^* . y_{r0}}{\sum_{d=1}^{D} w_d^* . z_{d0}} \le 1 \tag{7}$$

Where u_r^*, v_i^* and w_p^* are the optimal weights calculated by model (4). Overall efficiency (8) is the product of the individual efficiencies for each stage.

$$E_0 = E_0^1 x E_0^2 \tag{8}$$

This formulation assumes that the intermediate products have the same weight (i.e. the same multiplier) irrespective of being output in the first stage or input in the second stage. This assumption provides the link between the two stages and allows factionary model (4) to become the linear programming model (9).

$$\begin{aligned}
&E_0 = \max \sum_{r=1}^{s} u_r . y_{r0} \\
&\text{s.t.} \\
&\sum_{i=1}^{m} v_i . x_{i0} = 1 \\
&\sum_{r=1}^{s} u_r . y_{rj} - \sum_{i=1}^{m} v_i . x_{ij} \le 0,\ j = 1,2,...,n. \\
&\sum_{d=1}^{q} w_d . z_{dj} - \sum_{i=1}^{m} v_i . x_{ij} \le 0,\ j = 1,2,...,n. \\
&\sum_{r=1}^{s} u_r . y_{rj} - \sum_{d=1}^{q} w_d . z_{dj} \le 0,\ j = 1,2,...,n. \\
&u_r, v_i, w_d \ge \varepsilon,\ i = 1,2,...,m;\ r = 1,2,...,s;\ d = 1,2,...,D.
\end{aligned} \tag{9}$$

The optimal weights of model (9) may not be the only possible ones, and neither may the decomposition of overall efficiency E0 into stage efficiencies E_0^1 and E_0^2 be the only possible ones. Kao and Hwang [23] have proposed the maximization of one of the individual efficiencies, E_0^1, for instance, while overall efficiency E0 computed by model (9) is kept constant. Thus, the other individual efficiency E_0^2 is obtained from (10).

$$E_0 = E_0^1 x E_0^2 \Rightarrow E_0^2 = \frac{E_0}{E_0^1} \tag{10}$$

4. Modeling

When assessing the quality of post-graduate courses, the objective is to evaluate the ability of each program to publish the development of their research both at the master and doctoral degree levels. If a program has a low index of publications of its research, it is considered low quality. If it has a high ratio of published papers (or any other academic production), mostly in reputed international journals, this is taken as the program being of high quality.

The objective of this work is to evaluate the ability of the teaching staff in the CAPES Engineering III area programs to lead their students to obtain their master's or doctoral degrees and therefore to publish their research. As the research for the thesis or dissertation is an intermediate step for the final publication, a two-stage relational multiplicative NDEA model is applied, as described in Section 3. In this model, DMUs are the post-graduation courses in which the master's degree or doctoral thesis is finished during the 2010-2012 three-year period. The initial input variable (exogenous inputs) is the number of teaching staff in the post-graduate programs. The number of dissertations and doctoral theses are the intermediate products, and the final outputs (exogenous outputs) are the publication of scientific articles in scientific journals evaluated by CAPES. There are seven final outputs corresponding to the QUALIS ranking of such journals: (A1, A2, B1, B2, B3, B4, and B5). The NDEA model assesses the efficiency of the post-graduate programs both from productivity and quality perspectives, as it provides efficiencies in both stages: production of dissertations and theses during the

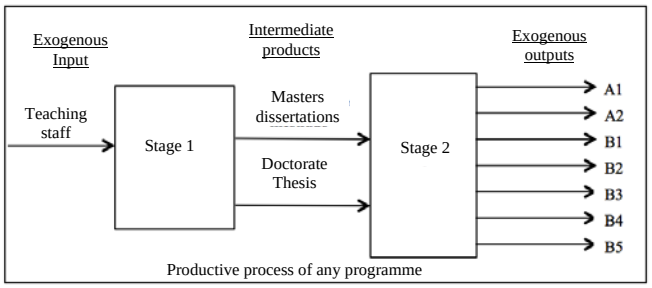


Figure 2. Schematic representation of the two-stage system.
Source: The authors

first stage and scientific articles in the second. It also provides the overall efficiency of the programs: productivity in the first stage and quality in the second. Fig. 2 displays a post-graduation program process scheme. We shall note that the term "exogenous" is used as in standard NDEA literature; that is, it refers to a variable that is not inside a production process, as done for instance by Kao [8] or Moreno et al. (2015).

It should be noted that the period of time for the model was selected to be coherent with that of CAPES, which considers publications and thesis for the same three-year period. The hypothesis accepted in this work is that there is a certain stability during time between dissertations, theses, and their publications. This is also accepted by CAPES evaluation, as there is no way to determine when a thesis will be published as an article. In truth, it can be either before or after being judged by an academic jury.

Moreover, for the final outputs (exogenous outputs), some considerations are made. To consider publication in different journals, we have introduced weight restrictions respecting the same ordinal preference stablished by CAPES with its fixed weights system. In short, the weight for one A1 publication is greater than or equal to the weight for one A2 publication; that is, a publication in an A1 journal is more important or least equal to a publication in an A2 journal. Similar restrictions are included to compare A2 and B1, B1 and B2, and so on. In addition, we use the same saturation criterion used by CAPES for publications in B2 or lower classified journals: the maximum number of publications in each of these classes cannot exceed three times the number of teaching staff. Finally, the weights of number of theses is greater than or equal to the weights of number of dissertations.

Concerning the choice of returns to scale, we shall note the following: if the program has well-defined criteria to hire professors, it is reasonable to believe that an increase in the number of professors will correspond to a proportional increase in the number of publications. For the same reason, the number of students can also be increased proportionally. Thus, the unbounded radius axiom [24], a condition to be able to assume constant returns to scale, is respected regardless of whether the size of institutions is similar. The use of constant returns to scale is coherent with the CAPES evaluation that uses plain ratios, which is equivalent to a simplified CCR model.

The model used in this work is presented in (11). It is an evolution of Kao and Hwang [23] shown in (9), from which the restriction $\sum_{r=1}^{s} u_r.y_{rj} - \sum_{i=1}^{m} v_i.x_{ij} \le 0, j = 1,2,...,n$ has been withdrawn. The restriction is redundant, as demonstrated by Kao [8] and Chen et al. [18].

$$\begin{aligned} & E_0 = \max \sum_{r=1}^{7} u_r.y_{r0} \\ & s.t. \\ & v_1.x_{10} = 1 \\ & \sum_{d=1}^{2} w_d.z_{dj} - v_1.x_{1j} \le 0, \forall j \\ & \sum_{r=1}^{7} u_r.y_{rj} - \sum_{d=1}^{2} w_d.z_{dj} \le 0, \forall j \\ & u_r, v_1, w_d \ge 0, \forall r; \forall d. \end{aligned} \tag{11}$$

where x_{1j} refers to the number of teaching staff in post-graduate programs, y_{rj} (r = 1...7) to the number of papers published in journals classified in the seven QUALIS grades and z_{1j}, z_{2j} the number of master's dissertations and doctoral theses, respectively, of DMU j. Moreover, weight restrictions were included as described previously, being related to dissertations and doctoral theses, which are more important or at least equal to dissertations, as well as related to publications. These set of restrictions are shown in (12):

$$\begin{aligned} & z_{1j} \le z_{2j} \\ & u_1 \ge u_2 \\ & u_2 \ge u_3 \\ & u_3 \ge u_4 \\ & u_4 \ge u_5 \\ & u_5 \ge u_6 \\ & u_6 \ge u_7 \end{aligned} \tag{12}$$

Different from standard DEA models, the objective function is not an efficiency. The efficiency of both stages 1 and 2 are given by equations (13) and (14), respectively, whereas overall efficiency is given by equation (15).

$$E_0^1 = \frac{\sum_{d=1}^{2} w_d^*.z_{d0}}{v_1^*.x_{10}} \tag{13}$$

$$E_0^2 = \frac{\sum_{r=1}^{7} u_r^*.y_{r0}}{\sum_{d=1}^{2} w_d^*.z_{d0}} \tag{14}$$

$$E_0 = E_0^1 x E_0^2 \tag{15}$$

Data from the last three-year period (2010-2012) from 42 programs divulged by CAPES are depicted in Table 1. Only PUC/PR - *Pontifícia Universidade Católica* do Paraná Production Engineering and Systems program was not analyzed, as it only began in 2011.

Table 1
Model Data

Institution Initials	Name	Permanent Docent Staff Number of Teaching Staff	Thesis and Dissertations		Complete Articles Published in Technical-Scientific Journals						
			Th	Di	A1	A2	B1	B2	B3	B4	B5
			THESIS	DISSERT	ARTA1	ARTA2	ARTB1	ARTB2	ARTB3	ARTB4	ARTB5
UNESP GUAR	Mechanical engineering	34	80	119	43	46	70	57	12	43	58
UNICAMP	Mechanical engineering	59	80	193	77	64	59	43	18	16	15
UFSC	Production engineering	27	77	48	6	21	43	67	81	81	81
ITA	Mechanical and aeronautical engineering	70	65	198	57	69	96	34	6	71	64
UFSCAR	Production engineering	21	64	100	11	16	12	63	30	25	45
UFSC	Mechanical engineering	46	59	143	75	29	51	20	12	15	19
UFRJ	Production engineering	21	57	127	17	27	44	19	36	29	16
USP	Mechanical engineering	46	57	80	69	52	44	30	8	24	7
USP/SC	Mechanical engineering	41	51	93	36	35	62	11	10	32	13
UFPB/J.P.	Mechanical engineering	25	43	43	12	8	15	11	4	0	11
USP/SC	Production engineering	17	40	63	9	11	32	23	20	29	43
UFRJ	Mechanical engineering	24	38	66	50	19	46	3	4	13	6
UFRGS	Production engineering	12	36	42	5	17	14	27	36	36	19
UFU	Mechanical engineering	22	34	69	23	13	33	30	10	7	27
UFRJ	Energy planning	12	33	59	39	16	4	4	11	2	3
UFRGS	Mechanical engineering	29	32	75	37	28	28	12	7	29	30
UNIP	Production engineering	11	29	43	4	12	22	3	10	12	31
USP	Production engineering	28	29	26	6	7	8	37	13	27	16
UFMG	Mechanical engineering	27	28	51	38	13	39	12	12	11	18
UFRJ	Ocean engineering	17	27	86	9	13	3	6	6	6	2
UNIMEP	Production engineering	11	25	25	5	1	1	8	3	6	27
PUC-RIO	Mechanical engineering	18	25	86	49	30	31	8	1	5	2
INPE	Space engineering and technology	45	23	53	46	36	56	26	1	23	13
UFPR	Mechanical engineering	19	22	28	36	22	25	17	12	6	6
UFRN	Oil science and engineering	16	22	68	36	28	47	9	14	40	15
UFPR	Numerical methods in engineering	25	22	52	10	14	24	7	17	32	33
UFPE	Mechanical engineering	19	20	57	3	8	10	15	1	6	9
UFRN	Mechanical engineering	23	20	93	21	14	29	12	10	35	25
UFPE	Production engineering	13	19	64	12	8	11	19	1	9	12
PUC-RIO	Production engineering	12	19	61	12	4	15	17	4	17	6
UFPA	Amazônia natural resources engineering	10	17	0	11	6	6	4	2	10	4
UFF	Mechanical engineering	17	13	40	51	34	19	14	7	6	2
USP	Ocean and naval engineering	12	13	35	5	15	13	4	1	5	2
UFF	Production engineering	21	12	71	5	4	8	27	11	37	50
PUC/MG	Mechanical engineering	12	11	45	22	6	6	3	4	4	1
UFBA	Industrial engineering	20	10	30	24	10	28	14	4	6	11
UNB	Mechanical sciences	17	10	34	16	29	10	13	6	4	11
UNIFEI	Mechanical engineering	17	10	27	16	5	26	7	5	4	7
UENF	Reservoir and exploitation engineering	15	8	28	5	6	13	13	1	2	4
PUC/PR	Mechanical engineering	12	5	14	17	16	12	2	0	1	10
UNICAMP	Oil science and engineering	15	4	59	4	10	15	5	1	4	5
UNB	Mechatronic systems	12	2	26	3	9	5	22	1	6	7

Source: The authors

5. Results and Discussion

Table 2 shows the efficiencies obtained by the two-stage relational multiplicative NDEA model used.

From the results, the Mechanical Engineering of *Universidade Federal do Rio de Janeiro* (UFRJ) was the only efficient one in the first stage. This is because the program produces a high number of dissertations and theses and has a low number of teaching staff registered in the program. Nonetheless, efficiency is not maintained in the second stage, as the number of publications is not as high as for other programs. Thus, the overall efficiency of the program is low despite the high number of theses that do not succeed in being published.

The sole efficient program in the second stage was that of mechanical engineering of the *Pontifícia Universidade Católica do Paraná* (PUC/PR), as it a high number of publications in relation to the number of dissertations and theses. However, this program has low first-stage efficiency with a low number of theses, resulting in low overall efficiency.

The highest overall efficiency program is that of production engineering at *Universidade Federal de Santa Catarina* (UFSC), as it produces a high number of dissertations, theses and publications. For instance, it was the only course that succeeded in reaching publication saturation in three different categories of journals (B3, B4 and B5).

Finally, *Universidade de São Paulo* (USP) the production engineering course displays the lowest index for overall efficiency, as it has the highest number of teaching staff and a low number of publications.

Table 2
Results

Institution Initials	Name	1st-Stage Efficiency	2nd-Stage Efficiency	Overall Efficiency
UNESP/ GUAR	Mechanical engineering	0,66800	0,54159	0,36178
UNICAMP	Mechanical engineering	0,52810	0,40155	0,21206
UFSC	Production engineering	0,52838	0,99586	0,52620
ITA	Mechanical and aeronautical engineering	0,42880	0,50118	0,21491
UFSCAR	Production engineering	0,89130	0,40349	0,35963
UFSC	Mechanical engineering	0,50118	0,40009	0,20052
UFRJ	Production engineering	1,00000	0,37000	0,37000
USP	Mechanical engineering	0,33991	0,65575	0,22290
USP/SC	Mechanical engineering	0,40085	0,51122	0,20492
UFPB/J.P.	Mechanical engineering	0,39261	0,23503	0,09227
USP/SC	Production engineering	0,69150	0,53113	0,36728
UFRJ	Mechanical engineering	0,49457	0,51904	0,25670
UFRGS	Production engineering	0,74185	0,68508	0,50823
UFU	Mechanical engineering	0,53434	0,45480	0,24302
UFRJ	Energy planning	0,87500	0,44051	0,38545
UFRGS	Mechanical engineering	0,42110	0,52353	0,22046
UNIP	Production engineering	0,74704	0,42768	0,31949
USP	Production engineering	0,22418	0,70528	0,15811
UFMG	Mechanical engineering	0,33394	0,62629	0,20914
UFRJ	Ocean engineering	0,75863	0,15062	0,11426
UNIMEP	Production engineering	0,51877	0,33414	0,17334
PUC-RIO	Mechanical engineering	0,70380	0,47045	0,33110
INPE	Space engineering and technology	0,19275	0,97903	0,18871
UFPR	Mechanical engineering	0,30034	0,93410	0,28055
UFRN	Science and petroleum engineering	0,64198	0,76524	0,49127
UFPR	Numerical methods in engineering	0,33783	0,60648	0,20488
UFPE	Mechanical engineering	0,46253	0,22123	0,10232
UFRN	Mechanical engineering	0,56073	0,42386	0,23767
UFPE	Production engineering	0,72868	0,28614	0,20851
PUC-RIO	Production engineering	0,76087	0,34140	0,25976
UFPA	Amazônia natural resources engineering	0,19402	0,90807	0,17618
UFF	Mechanical engineering	0,35582	1,00000	0,35582
USP	Ocean and naval engineering	0,45652	0,35459	0,16188
UFF	Production engineering	0,45109	0,56045	0,25281
PUC/MG	Mechanical engineering	0,53261	0,40824	0,21743
UFBA	Industrial Engineering	0,22826	0,85101	0,19425
UNB	Mechanical sciences	0,29540	0,70169	0,20728
UNIFEI	Mechanical engineering	0,24840	0,67396	0,16741
UENF	Reservoir and exploitation engineering	0,27391	0,43980	0,12047
PUC/PR	Mechanical engineering	0,18071	1,00000	0,18071
UNICAMP	Oil science and engineering	0,47935	0,24503	0,11746
UNB	Mechatronic systems	0,26630	0,65029	0,17317

Source: The authors

5. Conclusions

In this paper, we use an NDEA model as an alternative to evaluate some post-graduate programs in Brazil using bibliometrics. The use of NDEA rather than classic DEA has had the advantage of separating the post-graduate production process in two consecutive stages. Both the preparation and argumentation of master's degrees or doctorate theses were taken just as intermediate products for the creation of process outputs. These included publications in journals accepted by CAPES in its three-year review of post-graduate programs and the individual efficiency of those publications. In addition, splitting the production process has allowed detection of the sources of inefficiency in all of these programmes. We can say that if CAPES were to use a model such as this, it could take advantage of its comparative structure, as CAPES' performance measures are always comparative. However, we cannot compare the results obtained here to those obtained by CAPES because its entire performance evaluation takes into account factors other than those that are bibliometric.

It should be noted that no single program was assessed as wholly efficient.

It is also clear that every program needs to be improved upon, and targets can be provided for each program.

Although the NDEA model was used for a local educational efficiency problem, we have shown that, like standard DEA, NDEA can also be used as a bibliometric tool, along with other educational evaluations.

Moreover, NDEA models are more suitable to evaluate efficiency of post-graduate programs or research teams than evaluations based on the h-index or h-type indexes. In fact, for evaluation of research teams, the h-index presents serious inconsistencies [25,26].

Acknowledgements

Thanks to CNPq, FAPERJ and Fundación Carolina.

References

[1] Kao, C., Network data envelopment analysis: A review. European Journal of Operational Research, 239(1), pp. 1-16, 2014. DOI: 10.1016/j.ejor.2014.02.039.

[2] Johnes, G., Efficiency in English higher education institutions revisited: A network approach. Economics Bulletin, 33(4), pp. 2698-2706, 2013.

[3] Soares de Mello, J.C.C.B., Gomes, E.G., Angulo-Meza, L., Soares de Mello, M.H.C. and Soares de Mello, A.J.R., Engineering post-graduate programmes: A quality and productivity analysis. Studies in Educational Evaluation, 32(2), pp. 136-152, 2006. DOI 10.1016/j.stueduc.2006.04.005.

[4] Ruiz, C.F., Bonilla, R., Chavarro, D., Orozco, L.A., Zarama, R. and Polanco, X., Efficiency measurement of research groups using data envelopment analysis and Bayesian networks. Scientometrics, 83(3), pp. 711-721, 2010. DOI: 10.1007/s11192-009-0122-y.

[5] Abramo, G., D'Angelo, C.A. and Pugini, F., The measurement of italian universities' research productivity by a non parametric-bibliometric methodology. Scientometrics, 76(2), pp. 225-244, 2008. DOI: 10.1007/s11192-007-1942-2.

[6] Charnes, A., Cooper, W.W. and Rhodes, E., Measuring the efficiency of decision-making units. European Journal of Operational Research, 2(6), pp. 429-444, 1978. DOI: 10.1016/0377-2217(78)90138-8.

[7] Färe, R. and Grosskopf, S., Network DEA. Socio-Economic Planning Sciences, 34(1), pp. 35-49, 2000. DOI 10.1016/S0038-0121(99)00012-9.

[8] Kao, C., Efficiency decomposition in network data envelopment analysis: A relational model. European Journal of Operational Research, 192(3), pp. 949-962, 2009. DOI 10.1016/j.ejor.2007.10.008.

[9] Thanassoulis, E., Portela, M.C. and Allen, R., Incorporating value judgments in: Cooper, W.W., Seiford, L.M. and Zhu, J., Eds., DEA. Handbook on Data Envelopment Analysis, ed New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow: Kluwer Academic Publishers, 2004, pp 99-138. DOI 10.1007/1-4020-7798-X_4.

[10] Thanassoulis, E., Kortelainen, M., Johnes, G. and Johnes, J., Costs and efficiency of higher education institutions in England: A DEA analysis. Journal of the Operational Research Society, 62(7), pp. 1282-1297, 2011. DOI 10.1057/jors.2010.68.

[11] Gomes Junior, S.F., Soares de Mello, J.C.C.B. and Angulo-Meza, L., DEA nonradial efficiency based on vector properties. International Transactions in Operational Research, 20(3), pp. 341-364, 2013. DOI: 10.1111/itor.12000.

[12] Tyagi, P., Yadav, S.P. and Singh, S.P., Relative performance of academic departments using DEA with sensitivity analysis. Evaluation and Program Planning, 32(2), pp. 168-177, 2009. DOI: 10.1016/j.evalprogplan.2008.10.002.

[13] de França, J.M.F., de Figueiredo, J.N. and dos Santos Lapa, J., A DEA methodology to evaluate the impact of information asymmetry on the efficiency of not-for-profit organizations with an application to higher education in Brazil. Annals of Operations Research, 173, pp. 39-56, 2010. DOI 10.1007/s10479-009-0536-1.

[14] Bougnol, M.-L. and Dulá, J.H., Validating DEA as a ranking tool: An application of DEA to assess performance in higher education. Annals of Operations Research, 145(1), pp. 339-365, 2006. DOI: 10.1007/s10479-006-0039-2.

[15] Zhu, J., Multi-factor performance measure model with an application to Fortune 500 companies. European Journal of Operational Research, 123(1), pp. 105-124, 2000. DOI 10.1016/S0377-2217(99)00096-X.

[16] Sexton, T.R. and Lewis, H.F., Two-stage DEA: An application to major league baseball. Journal of Productivity Analysis, 19(2-3), pp. 227-249, 2003. DOI 10.1023/A:1022861618317.

[17] Chen, Y. and Zhu, J., Measuring information technology's indirect impact on firm performance. Information Technology and Management, 5, pp. 9-22, 2004. DOI 10.1023/B:ITEM.0000008075.43543.97.

[18] Chen, Y., Cook, W.D., Li, N. and Zhu, J., Additive efficiency decomposition in two-stage DEA. European Journal of Operational Research, 196(3), pp. 1170-1176, 2009. DOI 10.1016/j.ejor.2008.05.011.

[19] Tone, K. and Tsutsui, M., Network DEA: A slacks-based measure approach. European Journal of Operational Research, 197(1), pp. 243-252, 2009. DOI 10.1016/j.ejor.2008.05.027.

[20] Moreno, P. and Lozano, S., A network DEA assessment of team efficiency in the NBA. Annals of Operations Research, 214, pp. 99-124, 2014. DOI: 10.1007/s10479-012-1074-9.

[21] Moreno, P., Andrade, G.N., Angulo-Meza, L. and Soares de Mello, J.C.C.B., Evaluation of Brazilian electricity distributors using a network DEA model with shared inputs. IEEE Latin America Transactions, 13(7), pp. 2209-2216, 2015. DOI: 10.1109/TLA.2015.7273779.

[22] Toloo, M., Emrouznejad, A. and Moreno, P., A linear relational DEA model to evaluate two-stage processes with shared inputs. Computational and Applied Mathematics, 36(1), pp. 1-17, 2015. DOI: 10.1007/s40314-014-0211-2.

[23] Kao, C. and Hwang, S.N., Efficiency decomposition in two-stage data envelopment analysis: An application to non-life insurance companies in Taiwan. European Journal of Operational Research, 185(1), pp. 418-429, 2008. DOI 10.1016/j.ejor.2006.11.041.

[24] Cooper, W.W., Seiford, L.M. and Tone, K., Data envelopment analysis: A comprehensive text with models, applications, references and DEA-solver software, 2007. DOI 10.1007/978-0-387-45283-8.

[25] Waltman, L. and Van Eck, N.J., The inconsistency of the h-index. Journal of the American Society for Information Science and Technology, 63(2), pp. 406-415, 2012. DOI 10.1002/asi.21678.

[26] Rubem, A.P.d.S., Moura, A.L, and Soares de Mello, J.C.C.B., Comparative analysis of some individual bibliometric indices when applied to groups of researchers. Scientometrics, 102(1), pp. 1019-1035, 2015. DOI: 10.1007/s11192-014-1428-y.

L. Angulo-Meza, holds a BSc. degree in Operations Research from the Universidad Nacional Mayor de San Marcos (1996); a MSc. degree in production engineering from COPPE, Federal University of Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ (1998); and a PhD. in industrial engineering from COPPE Federal University of Rio de Janeiro COPPE/UFRJ (2002). She currently works as an associate professor at the Federal Fluminense University (UFF) Department of Production Engineering, Metallurgical Industrial School in Volta Redonda. She has a fellowship from the CNPqand FAPERJ's Young Scientist Program. She has conducted a post-doctoral internship at the Instituto Superior Técnico, Technical University of Lisbon. Concerning the administrative area, she has been chief head of the Production Engineering Department of Volta Redonda (VEP). She has experience in production engineering, with an emphasis on operations research, acting on the following topics: data envelopment analysis (DEA - Data Envelopment Analysis), multiobjective linear programming, neural networks, computational implementations and educational evaluation.
ORCID: 0000-0003-4557-0210

J.C.C.B. Soares de Mello, graduated in BSc. in Mechanical Engineering from Federal Fluminense University (1981), has an MSc. in mathematics from Federal Fluminense University (1987), and has a PhD. in production engineering from the Federal University of Rio de Janeiro (2002). He has conducted a post-doctoral internship at the Faculty of Economics, University of Coimbra in 2006 and a senior internship at the Instituto Superior Técnico, Technical University of Lisbon in 2012. He is currently an associate professor at the Universidade Federal Fluminense. In the administrative area, he has served as the department head of the applied mathematics department of UFF, coordinator of the basic cycle of courses in engineering, and operations coordinator of the vestibular commission department. Currently, he is deputy coordinator of the post-graduate program in production engineering. He has experience in production engineering, with an emphasis in data envelopment analysis. Mainly acting on the following topics: data envelopment analysis (DEA), multicriteria, educational assessment, air transport and sports evaluation.
ORCID: 0000-0002-6507-2721

S.F. Gomes Jr., holds a PhD. (2010) and MSc. degree (2006) in production engineering from Universidade Federal Fluminense, graduated in BSc. in Civil Engineering from Universidade Federal Fluminense (1995), and has a degree in mathematics from the Center for Distance Education of the State of Rio de Janeiro (2005). He is currently an associate professor at State University Center-West Zone UEZO and a professor at Redeemer College. He has experience in production engineering, with emphasis on operations research, acting on the following subjects: mathematics, multicriteria, data envelopment analysis and education.
ORCID: 0000-0002-8159-3965

P. Moreno, was born in Seville, Spain. He graduated the BSC. in Telecommunications Engineering from the University of Seville, Spain. He has master's and PhD. degrees in industrial organization from the University of Seville, Spain. He currently is a Senior Researcher at the Faculty of Computer Science and Electronics (FIE) of the Polytechnic School of Chimborazo (ESPOCH) in Ecuador. His main research is the development of models and applications for efficiency analysis of productive units.
ORCID: 0000-0002-7489-4938

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Position analysis of a mechanism Stephenson type I using natural coordinates

Neider Nadid Romero-Núñez [a] & Elkin Gregorio Flórez-Serrano [b]

[a] *Optimización de Procesos y Uso Racional de la Energía y Biomasa (OPUREB),Universidad Pontificia Bolivariana, Montería, Colombia. neider.nadid@gmail.com*
[b] *Grupo de Investigación en Ingeniería Mecánica (GIMUP), Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia. eflorez@unipamplona.edu.co*

Received: October 13th, 2016. Received in revised form: September 1rd, 2017. Accepted: November 25th, 2017.

Abstract
In this article the use of natural coordinates is proposed to determine the position of each element of a mechanism Stephenson type I, analytically. Where natural coordinates are mostly cartesian defined in the kinematic pairs and points of interest of the mechanism, achieving with these alternate equations to the derive from the method of vector loop in which angular coordinates are used. The use of natural coordinates in the kinematic modeling of mechanisms is advantageous because dispenses of the use of trigonometric functions, which facilitates modeling and interpretation of the mechanism, and the resulting equations are simpler than those obtained with the vector loop method. These equations were implemented in MATLAB®, to simulate the different configurations of a Stephenson mechanisms type I, with the dimensions given.

Keywords: position analysis; natural coordinates; Stephenson I mechanism.

Análisis de posición de un mecanismo de Stephenson tipo I utilizando coordenadas naturales

Resumen
En este artículo se propone la utilización de coordenadas naturales, para determinar la posición de cada elemento de un mecanismo de Stepheson tipo I, de forma analítica. Donde las coordenadas naturales son en su mayoría coordenadas cartesianas, que se definen en los pares cinemáticos y en puntos de interés del mecanismo, consiguiendo con esto ecuaciones alternas a las que se derivan del método de lazo vectorial, en el cual se utilizan coordenadas angulares. El uso de coordenadas naturales en el modelado cinemático de mecanismos es ventajoso, ya que se prescinde de la utilización de funciones trigonométricas, lo cual facilita el modelado e interpretación del mecanismo, y además las ecuaciones obtenidas son más simples que las obtenidas con el método de lazo vectorial. Estas ecuaciones fueron implementadas en MATLAB®, para simular las diferentes configuraciones de un mecanismo de Stepheson tipo I con las dimensiones dadas.

Palabras clave: análisis de posición; coordenadas naturales; mecanismo de Stephenson I.

1. Introducción

El mecanismo de Stephenson, conocido con en este nombre en honor a su inventor, es un mecanismo más complejo y complicado de analizar, si se le compara con un mecanismo de cuatro barras o uno de Watt [1]. Aunque este mecanismo ha sido menos estudiado que el mecanismo de cuatro barras, actualmente se encuentra un número considerable de trabajos sobre su modelaje matemático y computacional, así como de sus aplicaciones. Dentro de estas publicaciones, en las últimas dos décadas se puede destacar, el trabajo de Dewen Jin et al [2], donde se propone un método de diseño óptimo de un mecanismo de seis barras de Stephenson para una prótesis de miembro inferior, analizando sus ventajas, tanto del punto de vista cinemático, como dinámico. El trabajo de A. Hernández et al. [3], donde

How to cite: Romero-Núñez, N.N. and Flórez-Serrano, E.G., Análisis de posición de un mecanismo de Stephenson tipo I utilizando coordenadas naturales. DYNA, 85(204), pp. 91-97, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

se describe un método geométrico iterativo para la solución de la cinemática de posición de mecanismos planos con pares rotativos, en los que se incluye el mecanismo de Stephenson. Wen-Yeuan en [4], trata un mecanismo de Stephenson como un mecanismo de cuatro barras o como un mecanismo de cinco barras con único circuito, para identificar la condición de rama. El concepto de relación geométrica o el hecho del determinante de la matriz jacobiana ser cero, fue propuesto para discutir las condiciones límites de la barra de entrada. También, Ana de Juan et al [5], presentan la aplicación informática DISMEC, desarrollada en el entorno MATLAB®, para el diseño cinemático de mecanismos. Esta aplicación es un complemento docente en la asignatura de Cinemática y Dinámica de Máquinas impartida en el plan de estudios de Ingeniero Industrial de la Universidad de Cantabria. Aquí el alumno puede seleccionar un mecanismo de la librería predefinida y definir la geometría y los parámetros de entrada del mismo. Los resultados se muestran de una forma gráfica, y mediante animaciones se consigue simular el movimiento real que tendría el mecanismo. La importancia de este trabajo es que se puede analizar casi cualquier mecanismo, ya que las soluciones son conseguidas de forma numérica, lo que hace posible tratar el problema de síntesis de trayectoria de un mecanismo de Stephenson tipo I en un menor grado de dificultad, consiguiendo una trayectoria aproximadamente recta para cinco puntos de precisión. En Mark M et al. [6], proponen un método para la síntesis de trayectoria con once puntos de precisión, en un mecanismo de Stephenson, donde las ecuaciones que describen matemáticamente la cinemática del mecanismo, están basadas en la condición de cierre de lazo vectorial. Allí el mecanismo tiene como aplicación la generación de la trayectoria de un pie para la marcha de un cuadrúpedo, como se muestra en la Fig. 1. También Mark M. et al [7], proponen un procedimiento para el problema de la síntesis de generación de función para un mecanismo de Stephenson, convirtiendo dicho problema en la solución de un polinomio.

El modelaje de mecanismos utilizando coordenadas naturales fue introducido primeramente por Jalón y Bayo [8], las cuales son en su mayoría coordenadas cartesianas, ubicadas en los pares cinemáticos o en puntos de interés. La ventaja de las coordenadas naturales es que se prescinde del uso de parámetros angulares, evitando con ello la utilización de funciones trigonométricas. Neider Nadid en [9], utilizo coordenadas naturales para el problema de síntesis de posición de mecanismos de dirección de vehículos. En este trabajo se hizo uso del método de Newton-Raphson para solucionar las ecuaciones de forma iterativa. Además, Neider Nadid en [10], utilizó las coordenadas naturales para resolver, de forma analítica, el problema de síntesis de posición de un mecanismo de cuatro barras. Mauro et al, en [11], utilizaron las coordenadas naturales para generar un modelo de optimización de mecanismos, incluyendo entre estos el mecanismo de Stephenson.

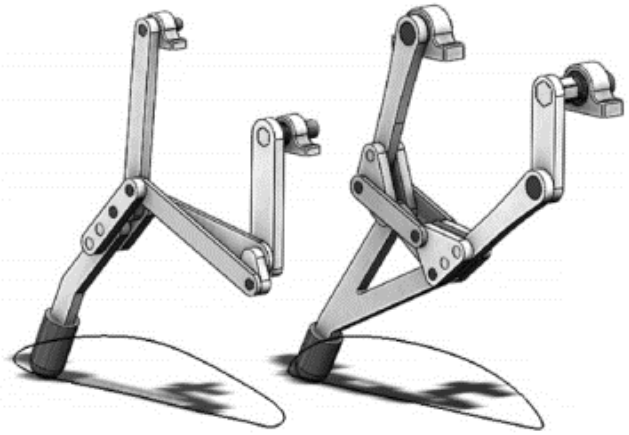


Figura 1. Mecanismos de Stepheson I y II de izquierda a derecha, generadores de trayectoria de marcha de cuadrúpedo.
Fuente: Tomado de [6].

En el presente trabajo se hace uso de las coordenadas naturales, para el análisis de posición de un mecanismo de Stephenson I. Las ecuaciones que definen la posición de cada elemento han sido obtenidas de forma analítica, por lo tanto, las soluciones de las mismas son cerradas. Finalmente, las ecuaciones obtenidas fueron implementadas en MATLAB®, con el fin de realizar las simulaciones de las diferentes configuraciones del mecanismo de Stephenson I.

Cabe destacar que el uso del método de las coordenadas naturales es relativamente nuevo, y por ende poco conocido en la comunidad académica dedicada a la teoría de mecanismos

2. Modelamiento usando coordenadas naturales

La Fig. 2 muestra un mecanismo de Stephenson I, modelado con coordenadas naturales, donde el vector de coordenadas naturales es,

$$q = \begin{bmatrix} C \\ D \\ E \\ F \\ G \\ P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_x \\ C_y \\ D_x \\ D_y \\ E_x \\ E_y \\ F_x \\ F_y \\ G_x \\ G_y \\ P_x \\ P_y \end{bmatrix} \quad (1)$$

y el vector de las variables dimensionales que define la geometría del mecanismo es dado por:

$x = [a \;\; b \;\; c \;\; d \;\; e \;\; f \;\; g \;\; h \;\; i \;\; j \;\; k \;\; A_x \;\; A_y \;\; B_x \;\; A_y]^T$

El punto C es dado por

$$C = \begin{bmatrix} A_x + a\cos\varphi \\ A_y + a\sin\varphi \end{bmatrix} \quad (2)$$

donde φ es el parámetro de entrada.

El método para determinar el resto de coordenadas naturales, se basado en la triangulación, que en este caso consiste en dado dos puntos y dos distancias diferentes a los de los puntos dados, hallar el tercer punto del triángulo. Un método similar llamado bilateración es propuesto por Nicolás

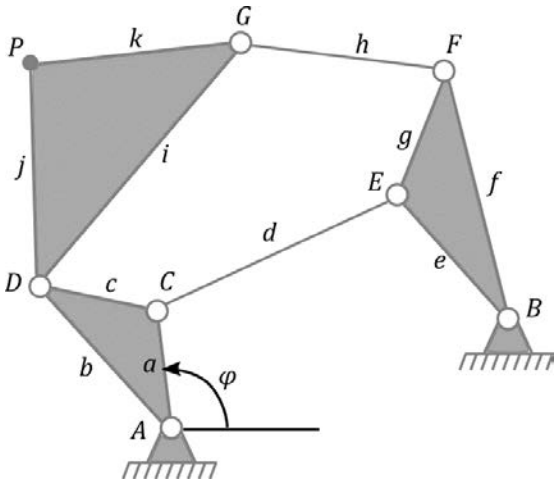


Figura 2. Modelado del mecanismo de Stephenson I usando coordenadas naturales.
Fuente: Los autores.

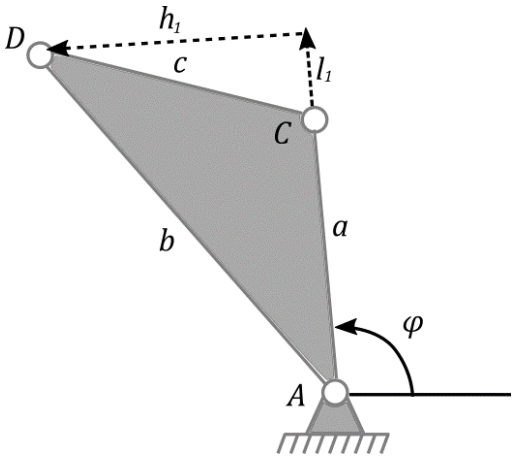


Figura 3. Eslabón de entrada ternario representado el triangulo $\measuredangle\, ACD$.
Fuente: Los autores.

Rojas [12], el cual es enfocado en la solución numérica del problema de posición. El método también es similar al utilizado en el sistema de posicionamiento global GPS, donde se necesita un mínimo de tres satélites para calcular la posición de un punto en la tierra.

Para el triángulo $\measuredangle\, ACD$ que se muestra en la Fig. 3,

se tiene que

$$s_1 = a$$

$$l_1 = \frac{c^2 + {s_1}^2 - b^2}{2s_1}$$

$$h_1 = t_1\sqrt{c^2 - {l_1}^2}$$

$$R = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

donde se obtiene

$$D = C + \frac{l_1}{s_1}(A - C) + \frac{h_1}{s_1}R(A - C) \qquad (3)$$

de forma similar para el triángulo $\measuredangle\, BCE$, se puede escribir

$$s_2 = \|B - C\|$$

$$l_2 = \frac{d^2 + {s_2}^2 - e^2}{2s_2}$$

$$h_2 = t_2\sqrt{d^2 - {l_2}^2}$$

obteniendo

$$E = C + \frac{l_2}{s_2}(B - C) + \frac{h_2}{s_2}R(B - C) \qquad (4)$$

luego para el triángulo $\measuredangle\, BEF$, se escribe que

$$s_3 = e$$

$$l_3 = \frac{g^2 + {s_3}^2 - f^2}{2s_3}$$

$$h_3 = t_3\sqrt{g^2 - {l_3}^2}$$

$$F = E + \frac{l_3}{s_3}(B - E) + \frac{h_3}{s_3}R(B - E) \qquad (5)$$

para el triángulo $\measuredangle\ DFG$, se tiene

$$s_4 = \|F - D\|$$

$$l_4 = \frac{i^2 + {s_4}^2 - h^2}{2s_4}$$

$$h_4 = t_4\sqrt{i^2 - {l_4}^2}$$

donde se obtiene

$$G = D + \frac{l_4}{s_2}(F - D) + \frac{h_4}{s_4}R(F - D) \qquad (6)$$

finalmente, para el triángulo $\measuredangle\ DGP$, se tiene que

$$s_5 = i$$

$$l_5 = \frac{j^2 + {s_5}^2 - k^2}{2s_5}$$

$$h_5 = t_5\sqrt{j^2 - {l_5}^2}$$

$$P = D + \frac{l_5}{s_5}(G - D) + \frac{h_5}{s_5}R(G - D) \tag{7}$$

El vector de coordenadas naturales q se puede escribir como:

$$q = \begin{bmatrix} C \\ D \\ E \\ F \\ G \\ P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} A_x + a\cos\varphi \\ A_y + a\sin\varphi \end{bmatrix} \\ C + \frac{l_1}{s_1}(A - C) + \frac{h_1}{s_1}R(A - C) \\ C + \frac{l_2}{s_2}(B - C) + \frac{h_2}{s_2}R(B - C) \\ E + \frac{l_3}{s_3}(B - E) + \frac{h_3}{s_3}R(B - E) \\ D + \frac{l_4}{s_2}(F - D) + \frac{h_4}{s_4}R(F - D) \\ \frac{l_5}{s_5}(G - D) + \frac{h_5}{s_5}R(G - D) \end{bmatrix} \tag{8}$$

Los valores de t_1, t_2, t_3, t_4, t_5 son 1 o -1, lo que significa que cada triángulo tiene dos configuraciones y, por lo tanto, el mecanismo tiene 32 configuraciones en total. Las configuraciones se pueden agrupar en una matriz de configuraciones T ec. (9), donde cada fila representa la configuración T_i y las columnas de T_i son los valores de t_j.

Por ejemplo, la configuración,

$T_{10} = [1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1]$, significa que:

$t_1 = 1$
$t_2 = -1$
$t_3 = 1$
$t_4 = 1$
$t_5 = -1$

3. Resultados

Las ecuaciones obtenidas fueron implementadas en el software numérico MATLAB®, para un mecanismo de Stephenson I con las siguientes dimensiones:

$a = 2\ cm$
$b = 5\ cm$
$c = 3\ cm$
$d = 8\ cm$
$e = 6\ cm$
$f = 8\ cm$
$g = 3\ cm$
$h = 9\ cm$
$i = 8\ cm$
$j = 7\ cm$
$k = 6\ cm$
$A_x = A_y = 0\ cm$
$B_x = 8\ cm$
$B_y = 2\ cm$

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \tag{9}$$

De la Fig. 4 a la Fig. 13 se muestran las 10 primeras configuraciones del mecanismo de Stephenson I. En las cuales se puede observar que cada configuración es sustancialmente diferente de las otras.

Las curvas trazadas por el mecanismo corresponden al punto G y al punto P, teniendo en cuenta que el punto P tiende al punto G cuando la distancia k se hace considerablemente pequeña. Estas curvas son más complejas que en el mecanismo de cuatro barras, ya que el número de variables que definen la geometría es mucho mayor.

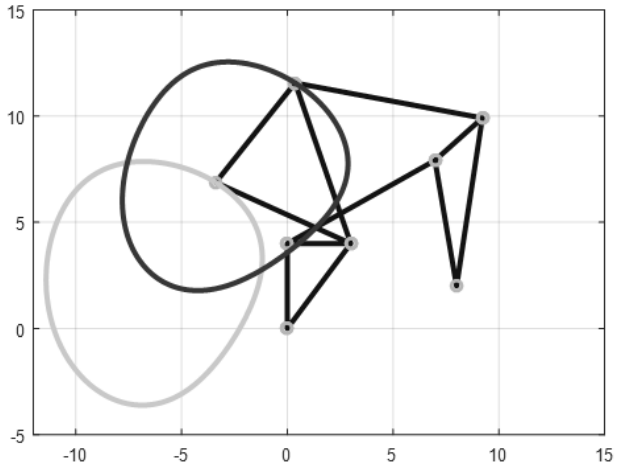


Figura 4. Configuración T_1
Fuente: Los autores.

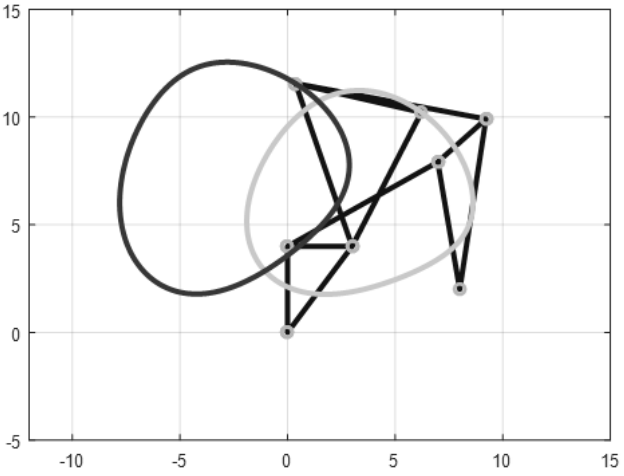


Figura 5. Configuración T_2
Fuente: Los autores.

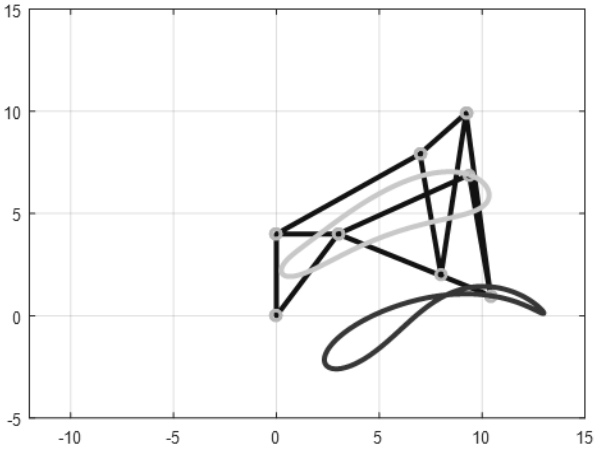


Figura 6. Configuración T_3
Fuente: Los autores.

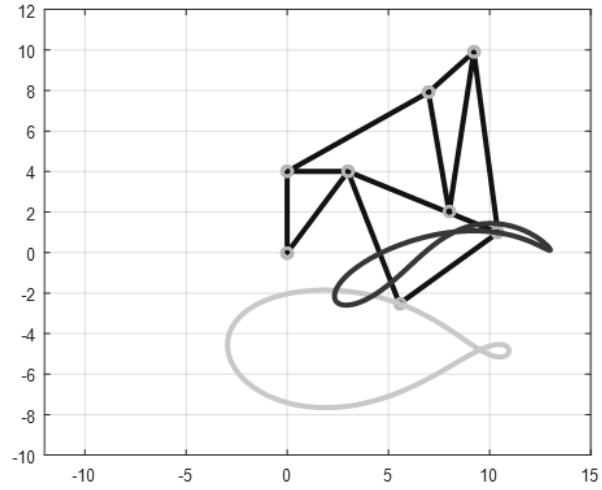


Figura 7. Configuración T_4
Fuente: Los autores.

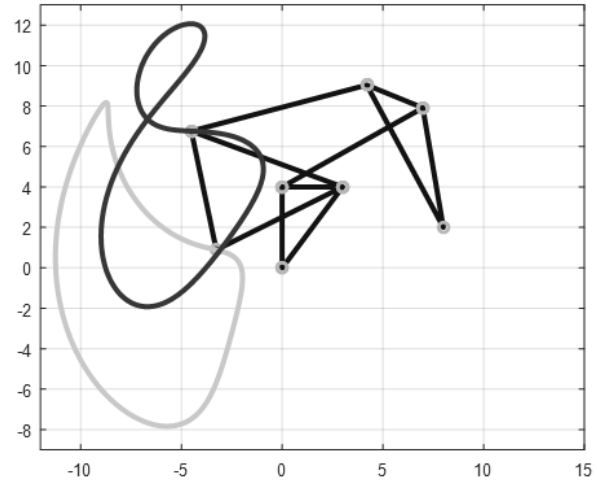


Figura 8. Configuración T_5
Fuente: Los autores.

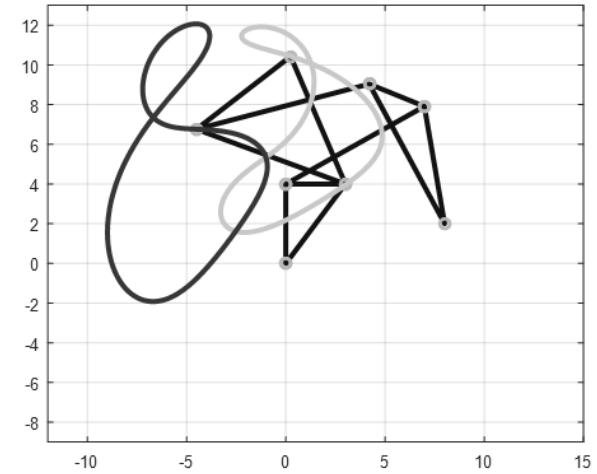


Figura 9. Configuración T_6
Fuente: Los autores.

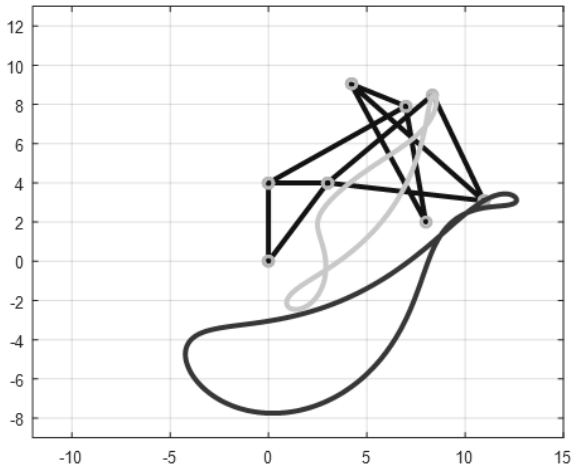


Figura 10. Configuración T_7
Fuente: Los autores.

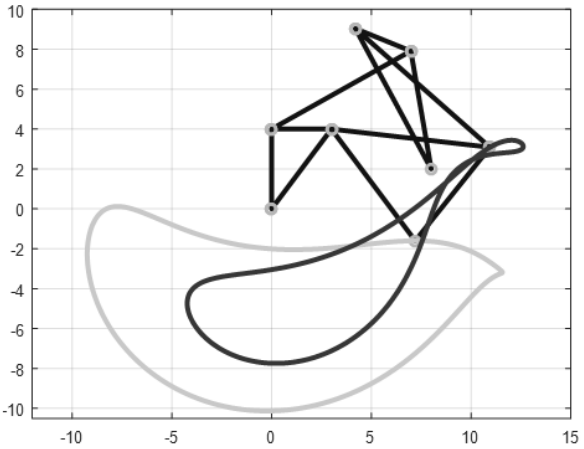


Figura 11. Configuración T_8
Fuente: Los autores.

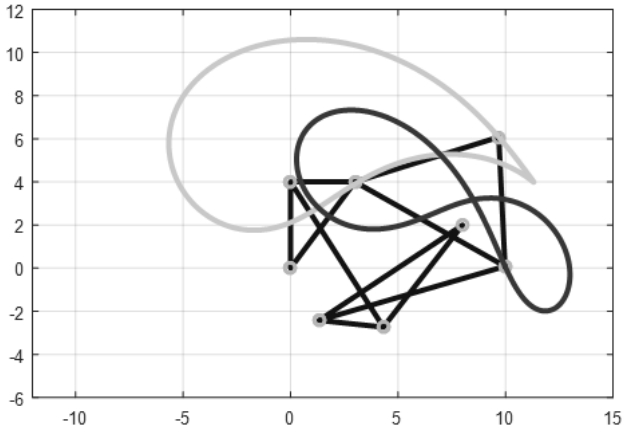


Figura 12. Configuración T_9
Fuente: Los autores.

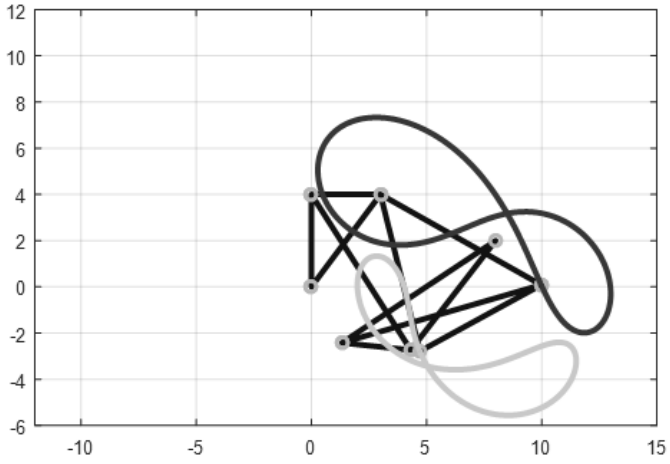


Figura 13. Configuración T_{10}
Fuente: Los autores.

4. Conclusiones

En este artículo se hizo uso de las coordenadas naturales para resolver el problema de posición de un mecanismo de Stephenson I de forma analítica, evidenciándose que las ecuaciones obtenidas son simples y de fácil implantación en una computadora. Además, se definió una matriz de configuraciones que contiene los 32 modos posibles de ensamble del mecanismo. También se evidencia el potencial que tienen las coordenadas naturales en el modelaje de mecanismos complejos, ya que la determinación de los puntos del mecanismo está basada en la triangulación y no en ecuaciones de cierre de lazo que implican el uso ángulos y de identidades trigonométricas para la deducción de las ecuaciones.

En las Figs. 4 a 13 se muestran las trayectorias de puntos del acoplador para las primeras diez configuraciones, evidenciando que las trayectorias son más complejas que las trazadas por un mecanismo de cuatro barras.

Por último, cabe destacar que solución analítica de problemas de posición usando coordenadas naturales abre una nueva línea de investigación en la teoría de mecanismos, y se puede decir que esto es un desarrollo de lo que puede llamarse escuela Iberoamérica de teoría de mecanismos.

Referencias

[1] Norton, R.L., Design of machinery: An Introduction to the synthesis and analysis of mechanisms and machines. McGraw-Hill Higher Education, 2003.

[2] Jin, D., Zhang, R., Dimo, H.O., Wang, R. and Zhang, J., Kinematic and dynamic performance of prosthetic knee joint using six-bar mechanism., J. Rehabil. Res. Dev., 40(1), pp. 39-48, 2003. DOI: 10.1682/JRRD.2003.01.0039

[3] Hernández, A. and Petuya, V., Position analysis of planar mechanisms with R-pairs using a geometrical–iterative method, Mech. Mach. Theory, 39(2), pp. 133-152, Feb. 2004. DOI: 10.1016/S0094-114X(03)00110-1

[4] Chung, W.Y., Double configurations of five-link Assur kinematic chain and stationary configurations of Stephenson six-bar, Mech. Mach. Theory, 42(12), pp. 1653-1662, 2007. DOI: 10.1016/j.mechmachtheory.2006.11.008

[5] De Juan, A., Sancibrián, R., Rodríguez, S. y García, P., Aplicación de MATLAB ® al diseño de mecanismos, XVIII Congr. Nac. Ing. mecánica, 2010.
[6] Plecnik, M.M. and McCarthy, J.M., Design of Stephenson linkages that guide a point along a specified trajectory, Mech. Mach. Theory, 96, pp. 38-51, 2016. DOI: 10.1016/j.mechmachtheory.2015.08.015
[7] Plecnik, M.M. and McCarthy, J.M., Kinematic synthesis of Stephenson III six-bar function generators, Mech. Mach. Theory, 97, pp. 112-126, 2016. DOI: 10.1016/j.mechmachtheory.2015.10.004
[8] Jazar, R.N., Vehicle Dynamics. New York, NY: Springer New York, 2014.
[9] Romero, N., Sítese Estrutural e Otimização Dimensional de Mecanismos de Direção, Universidade Federal de Santa Catarina, 2014.
[10] Neider, R., Análisis de posición de un mecanismo de cuatro barras utilizando coordenadas naturales, Rev. Iberoam. Ing. Mecánica, 20, pp. 83-90, 2016.
[11] Da Lio, M., Cossalter, V. and Lot, R., On the use of natural coordinates in optimal synthesis of mechanisms, Mech. Mach. Theory, 35(10), pp. 1367-1389, 2000. DOI: 10.1016/S0094-114X(00)00006-9
[12] Rojas, N. and Thomas, F., Distance-based position analysis of the three seven-link Assur kinematic chains, Mech. Mach. Theory, 46(2), pp. 112-126, Feb. 2011. DOI: 10.1016/j.mechmachtheory.2010.10.004

N.N. Romero-Nuñez, received the BSc. Eng. in Mechanical Engineering in 2011 from the Universidad de Pamplona, Pamplona-Colombia, and the MSc. degree in Mechanical Engineering in 2014 from the Universidade Federal de Santa Catarina, Florianopolis- Brasil. Currently, he is a full professor in the Mechanical Engineering Department, Facultad de Ingenierias y Arquitectura, Universidad de Pamplona, Colombia. His research interests include: analysis and design of mechanics, dynamic of mechanisms and machines, numerical method in optimization.
ORCID: 0000-0002-9076-2601

E.G. Flórez-Serrano, received the BSc. in Mechanical Eng. in 1997 from the Universidad Francisco de Paula Santander, Cúcuta-Colombia, the MSc. of Mechanical Engineering in 2000 from the Universidad de los Andes, Bogotá- Colombia, and the PhD. in Mechanical Engineering in 2009, from Polytechnic University of Catalunya. Currently, he is a titular professor in the Mechanical Engineering Program, Facultad de Ingenierías y Arquitectura, Universidad de Pamplona, Colombia. His research interests include analysis and design of mechanics, dynamic of mechanisms and machines, vibrations mechanics.
ORCID: 0000-0002-3431-146X



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Mecánica

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Mecánica

Mayor información:

E-mail: acmecanica_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 4259262

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Calculation method for the determination of stresses in right-wing flywheels

Abdel Mendoza-Fernández [a], Rafael Goytisolo-Espinosa [b], Juan José Cabello-Eras [c] & Reinier Jiménez-Borges [d]

[a] *Maestría en Ingeniería Mecatrónica, Instituto Tecnológico de Nuevo León (ITNL), Tolteca, México. amendozafdez@gmail.com*
[b] *Facultad de Ingeniería, Universidad de Cienfuegos, Cienfuegos, Cuba. ragoyti@ucf.edu.cu*
[c] *Facultad de Ingeniería, Departamento de Energía. Universidad de la Costa, Barranquilla. Colombia. jcabello2@cuc.edu.co*
[d] *Centro de Estudios de Energía y Medio Ambiente (CEEMA), Universidad de Cienfuegos, Cienfuegos, Cuba. rjborges@ucf.edu.cu*

Received: April 27th, de 2017. Received in revised form: October 15th, 2017. November: 25 th, 2017

Abstract
This research deepens on the methods to the solution of the hyper static systems applicable for the assessment resistance of flywheels which are applied to a flywheel of a hammer mill. The results of the analytical methods were validated through a Finite Element Analysis, the results show differences minors than 10%. The equivalent strength in the rim is almost zero in the middle plane of the beam and increases as it moves away from it, and remains constant throughout the rays. It was also observed that in all the studied cases the equivalent tension decreases when the number of rays increases because of the flywheels stiffness increases. Also, graphics tools are obtained to a fast determination of the equivalent tension in the rim according to the number of rays and the speed of operation.

Keywords: hyper static systems; equivalent stress; flywheel; rim; rays.

Método de cálculo para la determinación de las tensiones en volantes de rayos rectos

Resumen
En el trabajo se profundiza en dos métodos de cálculo de sistemas hiperestáticos aplicables para la evaluación de la resistencia de volantes de llantas y rayos los que se aplican al volante de un molino de martillos. Los resultados de los métodos analíticos se validaron mediante un Análisis de Elementos Finitos resultando diferencias inferiores al 10%. Las tensiones equivalentes en la llanta se aproximan a cero en el plano medio del rayo y aumentan a medida que se aleja del mismo, y a lo largo de los rayos se mantienen constante. Se apreció además que en todos los casos estudiados las tensiones equivalentes disminuyen a medida que el número de rayos aumenta ya que se incrementa la rigidez de los volantes. En el trabajo se obtienen nomogramas que permiten determinar la tensión equivalente en la llanta en función del número de rayos y la velocidad de operación.

Palabras clave: sistemas hiperestáticos; tensiones equivalentes; volantes; llanta; rayos.

1. Introducción

Los volantes han sido utilizados desde el siglo XIX con la función de estabilizar el ciclo de trabajo de máquinas rotatorias como lo son: máquinas de vapor, motores de combustión interna, prensas y otras. En sus inicios, su diseño se realizó siguiendo criterios empíricos hasta principios del siglo XX cuando se desarrollan las ecuaciones principales para su diseño partiendo de los criterios de funcionamiento [1-4] y de resistencia mecánica [4-7].

1.1 Volantes tradicionales

Un volante convencional es un dispositivo mecánico giratorio Fig. 1, que almacena energía cinética en forma de rotación [1,2,4], la misma es proporcional al cuadrado de su velocidad de rotación, de ahí que para acumular energía se aumenta su velocidad y al consumirse la energía acumulada su velocidad se reduce. Esta forma de energía también se conoce como momento de inercia debido a que su acumulación y/o

How to cite: Mendoza-Fernández, A., Goytisolo-Espinosa, R., Cabello-Eras, J.J. and Jiménez-Borges, R., Método de cálculo para la determinación de las tensiones en volantes de rayos rectos. DYNA, 85(204), pp. 98-107, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

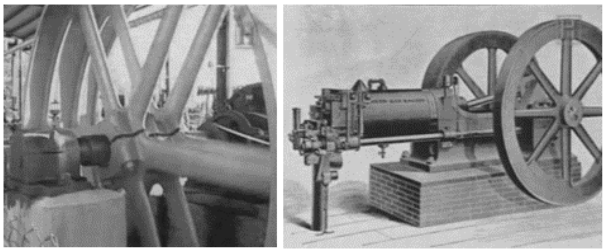


Figura.1. Volantes almacenadores de energía cinética.
Fuente: Tomado de [20]

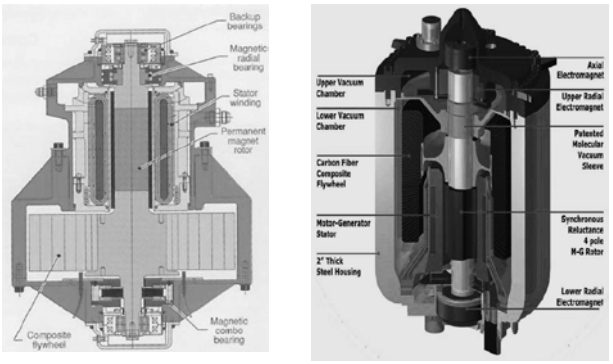


Figura.2. Volantes almacenadores cinéticos de energía eléctrica.
Fuente: Tomado de [4]

entrega se realiza mediante la aplicación de un momento torsional. Otra función de estos elementos es la de suavizar el flujo de energía entre una fuente de potencia y su carga, de ahí que se empleen en equipos con cargas irregulares de trabajo tales como motores de combustión interna, compresores reciprocantes, prensas punzonadoras y troqueladoras, martinetes, etc. [1-4].

En la segunda mitad del siglo XX su utilización disminuyó debido a la generalización de los motores eléctricos que son más estables en su funcionamiento que los motores de combustión, sin embargo, a finales de siglo con el desarrollo de nuevos materiales y de la electrónica, su aprovechamiento como acumulador de energía ha despertado gran interés incrementando notable su utilización. [7-15]

1.2. Actualidad de los volantes

En la actualidad la obtención de nuevos materiales compuestos [8-11] y el desarrollo de la microelectrónica han permitido la aplicación de los volantes en campos como el aeroespacial [12], el desarrollo de vehículos eléctricos [13] y en el almacenamiento de energía proveniente de fuentes renovables [14], lo que ha dado lugar a los denominados almacenadores cinéticos de energía eléctrica KERS (Kinetic Energy Restore System) y los SUPS (Secondary Unit Power Supply) [3] que se muestran en la Fig. 2. Los KERS y los SUPS se conectan al sistema exterior a través de cables eléctricos al igual que una batería eléctrica. En la industria aeroespacial donde los requerimientos son mayores se minimizan las pérdidas por fricción al emplear cojinetes magnéticos de alto desempeño y trabajan en vacío [3,10, 11,15], la energía acumulada se puede mantener durante horas e incluso días y presentan gran compacidad con un alto intercambio de potencia por unidad de masa y una elevada velocidad de giro, las velocidades periféricas alcanzadas superan la velocidad del sonido para compensar la baja densidad de los materiales compuestos [9,11].

Estos dispositivos superan, en algunos aspectos a los sistemas clásicos de almacenamiento de energía como las baterías químicas, que tienen un proceso de carga lento, también se distinguen por su versatilidad ya que se adaptan fácilmente a cualquier necesidad energética mediante una adecuada regulación electrónica. En su contra, tienen pérdidas en la entrada y salida de energía debido al rendimiento eléctrico del motor.

La aplicación más destacable y reciente ha sido su empleo como suministro de energía eléctrica a satélites en la industria aeroespacial donde la energía proveniente de las placas fotovoltaicas durante las horas solares se almacena de forma similar a las baterías eléctricas, pero con menos peso y mayor fiabilidad. [12].

También se aplican en vehículos híbridos y eléctricos, cuya velocidad es discontinua y la energía cinética se perdería en forma de calor durante el frenado, siendo capaces de almacenar gran parte de la energía de frenado en un tiempo mínimo y devolverla en la aceleración posterior, fenómeno que se hace llamar frenado regenerativo [11,13].

Aunque las fallas en los volantes no son frecuentes deben prevenirse adecuadamente pues por sus dimensiones y condiciones de trabajo suelen ocurrir en forma de explosiones y tener graves consecuencias [16], sin embargo, se reconoce la dificultad de los métodos para la evaluación de su resistencia [17], trabajo que se desarrolla a través de modelos de elementos finitos por la carencia de métodos analíticos

El presente trabajo tiene como objetivo la aplicación de distintos métodos de solución para la obtención de las tensiones de manera rápida y efectiva a través de nomogramas para un volante como el que se menciona a continuación.

2. Materiales y métodos

2.1. Método de las deformaciones

El método es válido para un sistema de barras sometidas a tracción o compresión, el cálculo de los desplazamientos elásticos de los diferentes puntos del sistema de barras articuladas se analiza a través de las ecuaciones de la elástica, determinándose las tensiones axiales en todos los elementos del sistema y por la ley de Hooke se hallan las magnitudes de los alargamientos absolutos de los elementos. Para la solución de estos sistemas tiene gran importancia las relaciones geométricas entre los desplazamientos de los elementos que lo conforman, resultando la base para resolver los distintos grados de hiperestaticidad a través de las ecuaciones de compatibilidad según sea el caso.

2.2. Método energético aplicando el teorema del trabajo mínimo

En el método energético aplicando el Trabajo Mínimo hay que considerar un sistema sobre el cual actúan un grupo

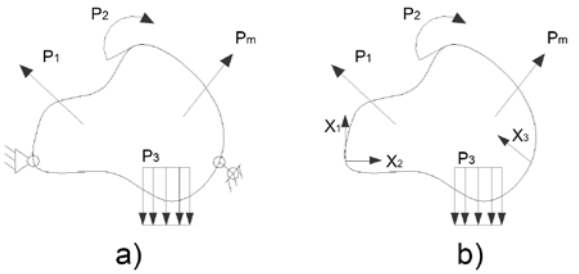


Figura. 3. Esquema de análisis del método del trabajo mínimo.
a) Sistema isostático b) Sistema equivalente.
Fuente: Los autores

de cargas exteriores P1, P2, P3, … , Pm y las reacciones de apoyo X1, X2, X3, … , Xn, tal y como se muestra en la Fig. 3. Si se cumple la Ley de Hooke y el Principio de Superposición de las Cargas se pueden hallar las reacciones de apoyo partiendo del Trabajo Mínimo (Teorema de Castigliano) que plantea que; la energía potencial de deformación que se acumula en el sólido elásticamente deformable será una función del sistema de cargas exteriores Pj y de las reacciones en los apoyos Xi, de manera que:

$$U = f_{(X_1, X_2, X_3, \cdots, X_n, P_1, P_2, P_3, \cdots, P_m)} \tag{1}$$

Como se conoce, los desplazamientos δi en las direcciones correspondientes a las reacciones de apoyo son iguales a cero, y se puede plantear como ∂U/∂Xi = 0. Por lo que planteando un sistema de ecuaciones se pueden determinar las reacciones en los apoyos X1, X2…Xn, y representa el desplazamiento en la dirección i, δi = ∂U/∂Xi = 0 que se puede expresar en función del desplazamiento provocado por una fuerza unitaria colocada en la posición de Xi, como δi = δii • Xi, si se deriva δi con respecto a la fuerza Xi, se obtendrá:

$$\frac{\partial \delta_i}{\partial x_i} = \frac{\partial^2 U}{\partial x_i^2} = \delta_{ii} \tag{2}$$

Se concluye que: En los sistemas isostáticos o hiperestáticos, las reacciones en los apoyos toman valores tales que la energía potencial de deformación del sistema alcanza un valor mínimo. Del mismo se desprende que al añadir a un sistema de ligaduras suplementarias, las reacciones en estas, se redistribuyen de manera que la energía potencial de deformación del sistema siempre disminuye.

2.3. Determinación de las tensiones en un volante de rayos rectos aplicando el método de las deformaciones.

En esta sección se desarrolla el método para la determinación las tensiones en un volante por el método de las deformaciones, mediante el análisis de la llanta y los rayos como un conjunto de barras con todas las fuerzas externas actuando en un punto de concurrencia; las cargas actuantes son; las fuerzas de inercia uniformemente distribuida provocada por la masa de la llanta q_i, y los rayos F_i, determinado por la velocidad de giro ω =cte. El diagrama de cuerpo libre de la Fig. 4, permitirá la determinación de las fuerzas interna, sin considerar los momentos que actúan en la llanta ya que el sistema se reduce a tres barras concurrentes en el punto imaginario A, dicho punto se obtiene de trazar un plano medio a través de uno de los rayos y trazar una línea tangente a la circunferencia primitiva indicada por R_p cortando perpendicularmente a los radios de las secciones A y B donde se están analizando. En la Fig. 4a se aprecia la sección a tratar y la distribución de la fuerza de inercia de la llanta y de los rayos provocada por la velocidad angular, y posteriormente se muestra una ampliación detallada de la sección analizada ver Fig. 4b.

Aislando estas tres barras imaginarias que forman la llanta y el rayo, Fig. 5a y concentrando toda la fuerza de inercia en el punto A, se determina las deformaciones del sistema que provoca que dicho punto se desplace, Fig. 5b, la representación de esta deformación se encuentra exagerada para facilitar su comprensión.

$$P = \left(2 \cdot q \cdot \omega^2 \cdot {R_p}^2 \cdot sen\varphi \Big|_0^{\alpha} + \frac{q_1 \cdot \omega^2}{2} \cdot \left({R_r}^2 - r^2 \right) \right) \cdot k_d \tag{3}$$

Donde

q, q_1 - valor de la fuerza de inercia distribuida de la llanta y del rayo respectivamente.

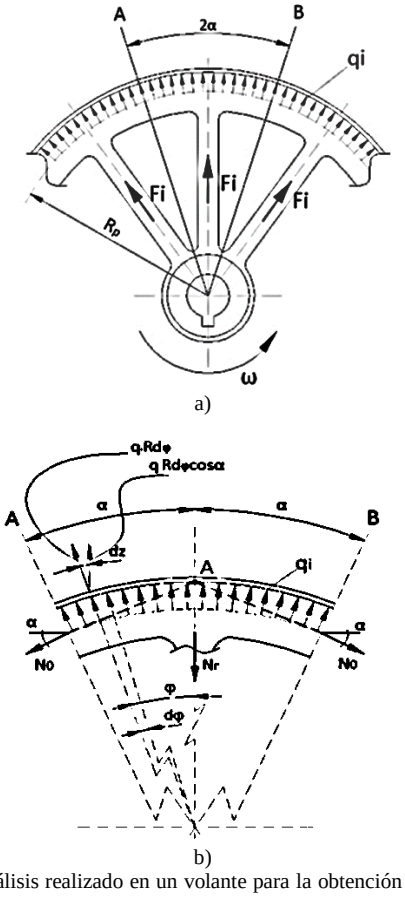


Figura. 4. Análisis realizado en un volante para la obtención de las fuerzas internas.
Fuente: Los autores

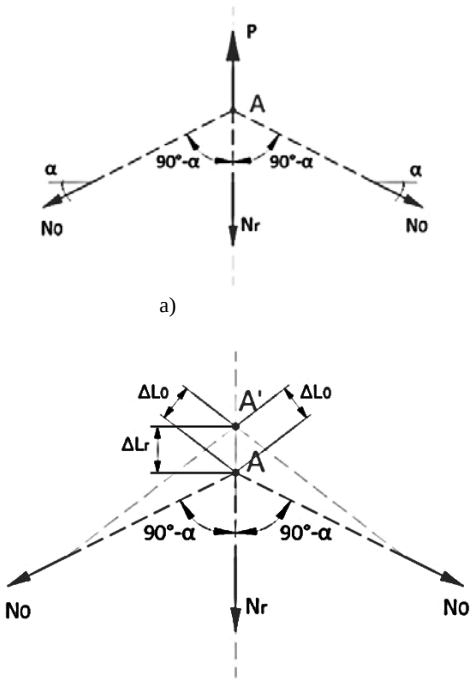


Figura. 5. Sistema de barras que forma en la llanta con el rayo.
Fuente: Los autores

ω - velocidad angular.
α - ángulo de control para el tramo analizado
R_p, R_r, r - Radio primitivo, interior de la llanta y exterior del cubo respectivamente.
k_d - coeficiente que tiene en cuenta las cargas dinámicas.
$k_d = (1{,}3 \ldots 1{,}6)$

Planteando las ecuaciones de la estática en el plano e igualando a cero la suma de las proyecciones sobre los ejes de todas las fuerzas que actúan sobre la parte analizada.

$$\begin{aligned} \sum X &= N_0 \cdot sen(90° - \alpha) - N_0 \cdot sen(90° - \alpha) = 0 \\ \sum Y &= N_r + N_0 \cdot \cos(90° - \alpha) - N_0 \cdot \cos(90° - \alpha) - P = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

Debido a la simetría del sistema las fuerzas internas N_0 de cada extremo son iguales. Trabajando con la otra ecuación la Ec. 4 se obtiene

$$N_r + 2 \cdot N_0 \cdot \cos(90° - \alpha) = P \quad (5)$$

Se plantea la ecuación de compatibilidad de las deformaciones como ecuación suplementaria para resolver el grado de hiperestaticidad del sistema, donde la deformación de las barras de los extremos ΔL_0 es la misma por simetría del sistema.

$$\Delta L_0 = \Delta L_r \cdot \cos(90° - \alpha) \quad (6)$$

Aplicando la ley de Hooke en la ecuación de compatibilidad de las deformaciones se obtiene

$$\Delta L_r = \frac{N_r \cdot L_r}{E_r \cdot A_r} \qquad \Delta L_0 = \frac{N_0 \cdot L_0}{E_0 \cdot A_0} \quad (7)$$

Sustituyendo en las ecuaciones anteriores en la Ec. 6.

$$\frac{N_0 \cdot L_0}{E_0 \cdot A_0} = \frac{N_r \cdot L_r}{E_r \cdot A_r} \cos(90° - \alpha) \quad (8)$$

Para el caso a resolver, las áreas de las secciones transversales de la llanta y los rayos son iguales, el Módulo de Elasticidad no varía puesto que es el mismo material para todo el volante, y las longitudes a analizar son iguales o se pueden calcular a través de una función trigonométrica. Entonces se puede decir que:

$$A_0 = A_r \quad E_0 = E_r \quad L_0 \cdot \cos(90° - \alpha) = L_r \quad (9)$$

Sustituyendo Ec. 9 en Ec. 8, despejando y sustituyendo en Ec. 5 se obtienen N_r y N_o

$$N_r = \frac{P}{1 + 2 \cdot \cos^2(90° - \alpha)} \; N_0 = \frac{P \cdot \cos(90° - \alpha)}{1 + 2 \cdot \cos^2(90° - \alpha)} \quad (10)$$

2.4. Determinación de las tensiones en un volante de rayos rectos aplicando el teorema del trabajo mínimo.

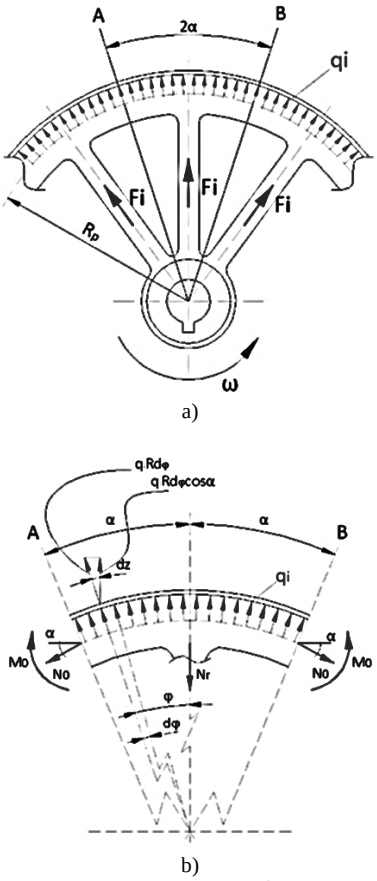


Figura. 6. Diagrama de cuerpo libre para el cálculo de las fuerzas internas Aplicando del Teorema del Trabajo Mínimo.
Fuente: Los autores

En esta sección se calculan las tensiones en el volante por el método energético anteriormente referido. Se conoce el valor de masa por unidad de longitud q (kg/m) de la llanta y la caracterización de la sección transversal; área y momento de inercia de la llanta A_0, I_0 respectivamente, n es el número de rayos cuya masa por unidad de longitud se define como q_1 (kg/m) y área de la sección transversal del rayo A_1, la velocidad de giro se define como ω y se considera constante para facilitar el estudio ver Fig. 6a.

Por simetría en las secciones A y B no existen tensiones tangenciales, o sea, fuerzas internas de cortante. Solo existen fuerzas normales (N_o) y los momentos flectores (M_0) por lo que en el tramo de llanta analizado solo actúan las fuerzas de inercia q_i, N_0, M_0 y la fuerza que ejerce el rayo sobre la llanta N_r como se muestra en la Fig. 6b.

La fuerza de inercia q_i se determina como:

$$q_i = q \cdot \omega^2 \cdot R_p \tag{11}$$

Donde
q-valor de la carga distribuida.
ω-velocidad angular.
R_p-radio primitivo o medio de la llanta.

Para determinar las fuerzas que actúan en el volante se plantea el equilibrio de las fuerzas en la dirección del eje *y-y* obteniéndose fuerzas actuantes en el tramo analizado

$$\sum F_y = 2 \cdot N_0 \cdot sen\alpha + N_r - 2 \cdot \int_0^{\alpha} q \cdot \omega^2 \cdot R_p \cdot R_p \cdot d\varphi \cdot \cos\varphi = 0 \tag{12}$$

$$N_0 = q \cdot \omega^2 \cdot {R_p}^2 - \frac{N_r}{2 \cdot sen\alpha} \tag{13}$$

Donde
N_r - fuerza interna del rayo.
α - ángulo de control (variable que define el punto en el que se está calculando).

Existen dos incógnitas en la ecuación resultante por lo que se necesitan ecuaciones complementarias para determinar las fuerzas N_o, M_o y N_r estas se pueden obtener al aplicar el Teorema del Trabajo Mínimo.

$$\frac{\partial U}{\partial N_0} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial U}{\partial M_0} = 0 \tag{14}$$

Partiendo de que los desplazamientos en estas direcciones son cero, hallando la energía potencial de deformación del sistema, y determinando las fuerzas internas que surgen en una sección cualquiera de la llanta y del rayo en función de q, N_o, M_o, N_r y φ. La Fig. 7 se muestran las fuerzas internas N y M_f que actúan en una sección S.

Plateando las ecuaciones de equilibrio $\Sigma F_n = 0$ y $\Sigma M_0 = 0$ se obtienen N y M_f.

$$\sum F_n = N - N_0 \cdot \cos\varphi - q \cdot \omega^2 \cdot R_p \cdot \int_0^{\varphi} R_p \cdot d\varphi' \cdot sen(\varphi - \varphi') = 0 \tag{15}$$

$$N = N_0 \cdot \cos\varphi + 2 \cdot q \cdot \omega^2 \cdot {R_p}^2 \cdot sen^2\left(\frac{\varphi}{2}\right) \tag{16}$$

$$\sum M_0 = M - M_0 - N \cdot R_p \cdot (1 - \cos\varphi) + q \cdot \omega^2 \cdot R_p \cdot R_p \cdot \varphi \cdot \frac{R_p \cdot \varphi}{2} = 0 \tag{17}$$

$$M = M_0 + 2 \cdot N \cdot R_p \cdot sen^2\left(\frac{\varphi}{2}\right) - q \cdot \omega^2 \cdot {R_p}^3 \cdot \frac{\varphi^2}{2} \tag{18}$$

La fuerza interna N_1 en una sección cualquiera del rayo se obtiene del equilibrio del rayo Fig. 8.

$$\sum F_y = N_r - N_1 + \int_r^R q_1 \cdot \omega^2 \left(\frac{R_r + r}{2}\right) \cdot dr = 0 \tag{19}$$

$$N_1 = N_r + \frac{q_1 \cdot \omega^2 \cdot \left({R_r}^2 - r^2\right)}{2} \tag{20}$$

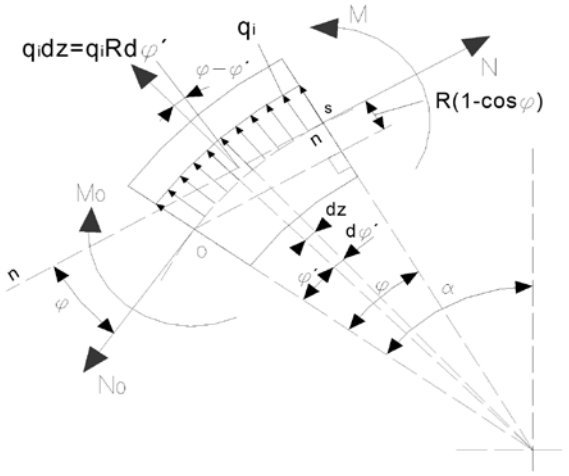


Figura. 7. Fuerzas internas N y M para una sección S cualquiera de la llanta.
Fuente: Los autores

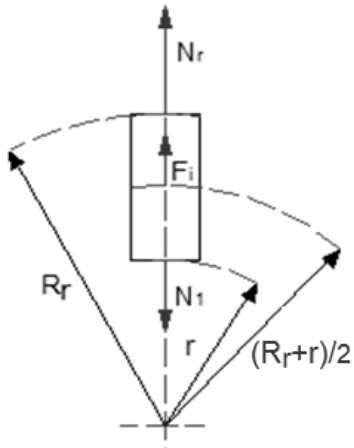


Figura. 8. Diagrama de cuerpo libre para la fuerza interna en la sección cualquiera del rayo.
Fuente: Los autores

Donde

R_r - radio exterior del rayo (medido desde el centro hasta el radio interior de la llanta).

r - radio interior del rayo (medido desde el centro hasta el radio exterior del cubo).

La energía potencial de deformación del tramo analizado se determina como:

$$U = 2 \cdot U_0 + U_1 \tag{21}$$

Donde

U - energía total de deformación.

U_0 - energía de deformación de la llanta.

U_1 - energía de deformación del rayo.

$$U_0 = \int_0^{\alpha} \frac{M^2 \cdot R_p \cdot d\varphi}{2 \cdot E \cdot I_0} + \int_0^{\alpha} \frac{N^2 \cdot R_p \cdot d\varphi}{2 \cdot E \cdot A_0} \tag{22}$$

Donde

E - módulo de elasticidad de primer orden del material.

I_0 - momento de inercia de la sección de la llanta.

A_0 - área de la sección de la llanta.

φ - ángulo que representa la magnitud de la sección que se está analizando

$$U_1 = \int_0^{R} \frac{N_1^2 \cdot dr}{2 \cdot E \cdot A_1} \tag{23}$$

Donde

N_1 - fuerza interna del rayo.

A_1 - área de la sección transversal del rayo.

r - radio interior del rayo.

Obteniéndose la expresión general para la energía potencial de deformación.

$$U = 2 \cdot \int_0^{\alpha} \frac{\left(M_0 + 2 \cdot N \cdot R_p \cdot sen^2\left(\frac{\varphi}{2}\right) - q \cdot \omega^2 \cdot {R_p}^3 \cdot \left(\frac{\varphi^2}{2}\right)\right)^2 \cdot R_p \cdot d\varphi}{2 \cdot E \cdot I_0} + 2 \cdot \int_0^{\alpha} \frac{\left(N_0 \cdot \cos\varphi + 2 \cdot q \cdot \omega^2 \cdot {R_p}^2 \cdot sen^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)\right)^2 \cdot R_p \cdot d\varphi}{2 \cdot E \cdot A_0} + \int_0^{R} \frac{\left(N_r + \frac{q_1 \cdot \omega^2}{2} \cdot \left({R_r}^2 - r^2\right)\right)^2 \cdot dr}{2 \cdot E \cdot A_1} \tag{24}$$

Derivando parcialmente esta función con respecto a N_0 y M_0 como se describe en la Ec. 14 y simultaneando las ecuaciones obtenidas con la Ec. 20 se obtiene

$$M_0 = -\frac{N_r \cdot R_p}{2} \cdot \left(\frac{1}{sen\alpha} - \frac{1}{\alpha}\right) \tag{25}$$

El signo negativo (-) indica que el momento M_0 es contrario.

$$N_0 = q \cdot \omega^2 \cdot {R_p}^2 - \frac{N_r}{2 \cdot sen\alpha} \tag{26}$$

Para el caso del rayo la fuerza se determina como

$$N_r = \frac{2}{3} \cdot q \cdot \omega^2 \cdot {R_r}^2 \cdot \frac{1}{\frac{A_0}{A_1} \cdot f_{1(\alpha)} + \frac{A_0 \cdot {R_r}^2}{I_0} \cdot f_{2(\alpha)}} \tag{27}$$

Donde

b, h - ancho y el espesor de la llanta respectivamente en (m).

El momento de inercia de la llanta I_0 se determina como el de una barra $I_0 = \frac{1}{12} b \cdot h^3$

Las variables $f_{1(\alpha)}$ y $f_{2(\alpha)}$ son funciones que caracterizan la cantidad de rayos del volante

$$f_{1(\alpha)} = \frac{1}{2 \cdot sen^2\alpha} \cdot \left(\frac{sen(2\alpha)}{4} + \frac{\alpha}{2}\right) \tag{28}$$

$$f_{2(\alpha)} = \frac{1}{2 \cdot sen^2\alpha} \cdot \left(\frac{sen(2\alpha)}{4} + \frac{\alpha}{2}\right) - \frac{1}{2\alpha} \tag{29}$$

$\alpha^o = \frac{360}{n}$ Ángulo entre rayos.

$2\alpha = \frac{2\pi}{n}$ Valor en radianes. $\alpha = \frac{\pi}{n}$

Con la fuerza del rayo N_r determinada por la Ec. 27, se puede calcular el momento flector en la sección transversal de la llanta M_0, por la Ec. 25, y del mismo modo la fuerza normal en la sección transversal de la llanta N_0, por la Ec. 26, la fuerza interna N y momento flector M que actúan en una sección cualquiera de la llanta n-n ver Fig. 7, se determinan por las expresiones 16 y 18 respectivamente, teniendo en cuenta que φ es la variable de control.

La tensión de tracción en una sección cualquiera φ de la llanta se halla por la expresión de la tensión en barras curvas (Ecuación de Winkler - Bach).

$$\sigma = \frac{N}{A_0} + \frac{M}{R_p \cdot A_0} \cdot \left[1 + \frac{y_{max}}{z \cdot \left(R_p + y_{max}\right)}\right] \tag{30}$$

Para un volante de sección rectangular Fig. 9,

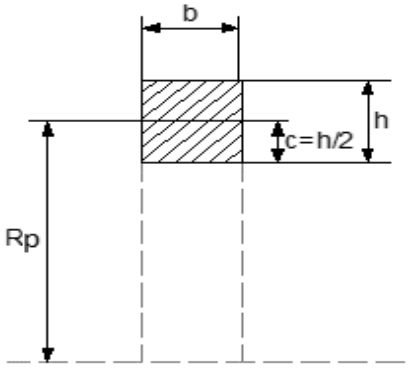


Figura. 9. Representación de la sección rectangular de un volante.
Fuente: Los autores

Distancia del plano centroidal al borde más alejado de la llanta Ymáx (m).

$$y_{\max} = c = \frac{h}{2} \tag{31}$$

Parámetro geométrico de la sección según el grado de exactitud se aumenta el número de términos de la función.

$$z = \frac{1}{3}\left(\frac{c}{R_p}\right)^2 + \frac{1}{5}\left(\frac{c}{R_p}\right)^4 + \frac{1}{7}\left(\frac{c}{R_p}\right)^6 + \cdots \tag{32}$$

Con estos parámetros se pueden determinar las tensiones σ a medida que se varía el ángulo φ en una sección cualquiera S de la llanta, bajo la acción de una fuerza normal N y el momento flector M que también es función del ángulo φ.

La tensión en el rayo σ_1 está dada por la fuerza interna de tracción producto a la inercia provocada por la acción de la llanta y del mismo rayo.

$$\sigma_1 = \frac{N_1}{A_1} \tag{33}$$

La fuerza interna en cualquier parte del rayo N_1 es determinada como sigue

$$N_1 = N_r + \frac{q_1 \cdot \omega^2}{2} \cdot \left(R_r{}^2 - r^2\right) \tag{34}$$

3. Resultados y discusión

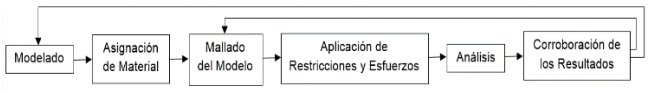
3.1. Determinación de las tensiones aplicando el método de los elementos finitos

Para realizar los cálculos de las tensiones en el volante a través del Método de los Elementos Finitos se dibuja un modelo en 3D con un software CAD, analizándose un caso real. Para este estudio se ha seleccionado el volante de seis rayos de un molino de martillo perteneciente al área de recepción de materias primas de una fábrica de cemento, el cual es un elemento de gran porte y con características geométricas y de trabajos bien definidas lo que facilita su estudio, y luego se modela y simula por el método antes mencionado empleando el ANSYS 14.5. En el trabajo fueron analizadas diferentes variantes constructivas variando el número de rayos con el objetivo de poder llegar a conclusiones de las diferentes metodologías empleadas. A continuación, se muestran las propiedades del material empleado y el flujo de trabajo seguido ver Tabla1 y los resultados obtenidos se muestran a continuación.

Tabla 1.
Propiedades del material empleado.

Modelo	Densidad del acero (kg/m^3)	Relación de Poisson	Módulo de elasticidad	Tensión de fluencia (MPa)	Tensión de rotura (MPa)
sólido	7850	0,3	220	250	460

Fuente: Los autores



Caso de estudio analizando la influencia del número de rayos en las tensiones de la llanta:

n_r=243 rpm (ω=25,4rad/s)	- Velocidad de giro del volante
R_p=0,755 m	- Radio primitivo o medio de la llanta
R_r=0,705 m	- Radio exterior del rayo
r=0,213 m	- Radio interior del rayo
h=l=0,100 m	- Espesor de la llanta y del rayo respectivamente
b=0.615 m	- Ancho del volante
ρ_{ac}=7800 kg/m^3	- Densidad del acero
n=4,6,8	- Número de rayos del volante

En la Fig. 10 se muestra campo de tensiones obtenido de los volantes luego del análisis realizado por ANSYS.

En la Fig.11 se muestra la zona de interés de la Fig. 10 en escala aumentada con el objetivo de facilitar la explicación de los resultados, comenzado por el volante de cuatro rayos, seis y ocho respectivamente.

La tensión de Von Mises obtenidas presentan valores extremos mínimos en la zona de transición rayos–llanta y se presentan los mayores en la zona intermedia entre dos rayos. Los valores de tensiones son menores a medidas que aumenta el número de rayos ya que la rigidez del sistema aumenta, un fenómeno similar se aprecia en la distribución prácticamente contante en las tensiones de los rayos por estar sometidos únicamente a tracción.

Para la obtención de las tensiones en las llantas se ha colocado probetas de control en puntos donde se habían calculado el ángulo φ en los métodos anteriores, para cada valor de ángulo se obtuvieron tres valores y se promediaron para graficar esta referencia con el fin de comparar con los demás métodos analizado y de esta forma validarlos.

En la gráfica comparativa de la Fig. 12 se muestran las tensiones en el tramo analizado de la llanta con cuatro, seis y ocho rayos, también se muestran los resultados obtenidos por el Método Energético con el color gris claro, el gris oscuro representa los resultados por el Método de Elementos Finitos y el gris oscuro interrumpido los resultados del Método Lineal, estos resultados son obtenidos a 24.5 rad/s la velocidad de trabajo del volante bajo condiciones estables de trabajo. Se puede apreciar la clara influencia que tiene el número de rayos en el volante los que determina la rigidez del sistema, esto es corroborado por los tres métodos empleados para dicho cálculo.

Como se puede apreciar existen diferencias en cuanto al grado de exactitud de los diferentes métodos empleados, si se toma como base comparativa el Método de los Elementos Finitos por considerarlo como el de mayor exactitud. Se puede comprobar que al aplicar el Método Energético se sobre calculan las tensiones casi un 10%, lo mismo sucede al aplicar el Método Lineal donde los valores obtenidos también se encuentran por debajo de los resultados del patrón de comparación. Este error relativo de 10 % de las tensiones pueden fluctuar en dependencia del ángulo que se esté analizando debido al comportamiento del gráfico de tensiones por el Método de Elementos Finitos que es la referencia para

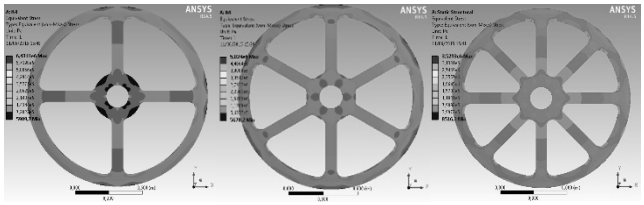


Figura.10. Tensiones equivalentes del Volante para 4,6 y 8 rayos, vista frontal.
Fuente: Los autores

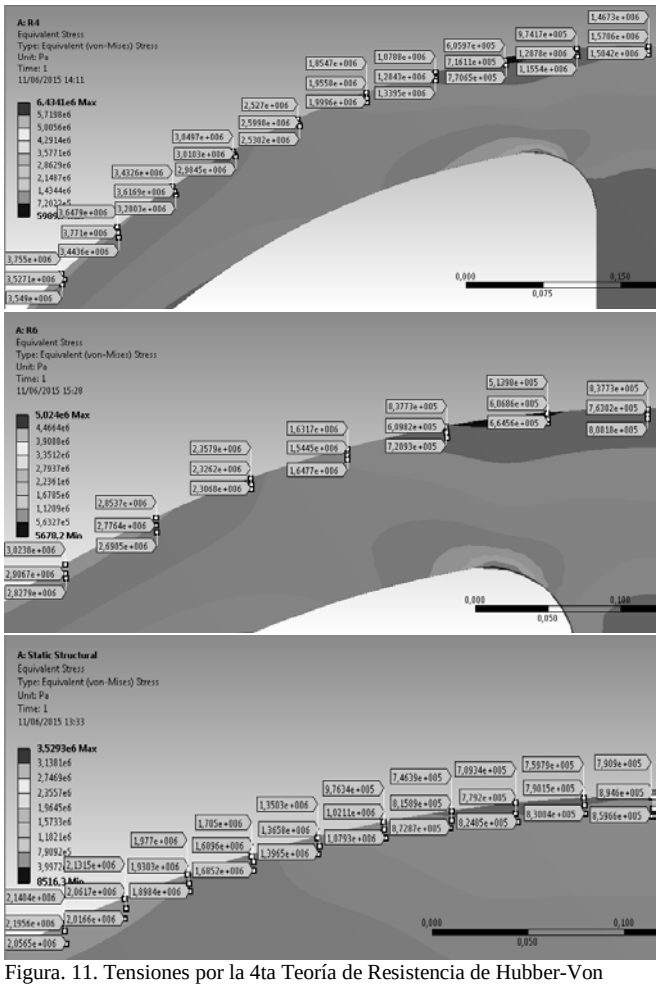


Figura. 11. Tensiones por la 4ta Teoría de Resistencia de Hubber-Von Mises-Hencky en la llanta.
Fuente: Los autores

cada caso ver Fig. 12. Estos errores relativos son en muchos casos manejable en la ingeniería debido a la complejidad del problema [17,18].

En los tres métodos de cálculo aplicados el comportamiento de la tensión equivalente es similar, se incrementa a medida que el ángulo de control crece, en el caso del Método Energético la tensión equivalente siempre es mayor a la calculada por el MEF lo que indica que siempre se estará del lado seguro al usarlo (se tiene una reserva de resistencia en los cálculos) por lo que es el método que se recomienda. Por otra parte, el Método lineal se encuentra siempre por debajo del MEF por lo que no es recomendado usarlo como método definitivo o decisorio.

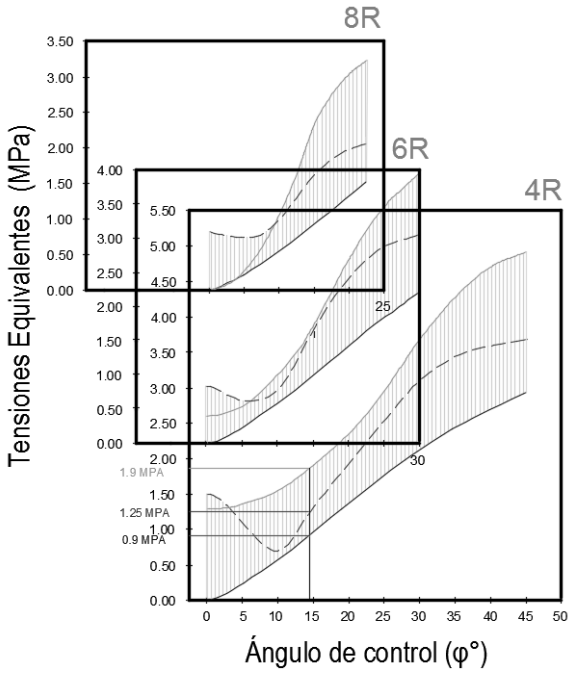


Figura. 12. Comparación de las Tensiones en la llanta.
Fuente: Los autores

En esta sección se calculan las tensiones equivalentes en la llanta aplicando los tres métodos de cálculos tratados en el trabajo y se evalúan para las distintas variantes; volante con cuatro, seis y ocho rayos a velocidades de entre 10 y 35 rad/s para toda la amplitud del ángulo de control. Con los resultados se construyen los nomogramas mostrados en las Fig. 13, 14 y 15 que permiten determinar de forma rápida el comportamiento de la tensión equivalente en la llanta y sirven como herramienta para evaluar la resistencia de diseños preliminares de volantes si se conoce la velocidad de operación sin necesidad de desarrollar modelos complejos por elementos finitos.

Un ejemplo se obtiene en el gráfico comparativo de la Fig.12 donde para un volante de cuatro rayos que se desea conocer las tensiones equivalentes a una velocidad de 24.5 rad/s se obtiene que para el Método Energético el valor es 1.9 MPa, por el Método de los Elementos Finitos este valor sería de 1.25 MPa y empleando el Método Lineal 0.9 MPa.

4. Conclusiones

Los métodos analizados en este estudio permitieron comprobar que las tensiones equivalentes para los tres casos tratado: llanta de cuatro, seis y ocho rayos respectivamente, tienen una tendencia creciente a medida que el ángulo de control aumenta, y este comportamiento es similar en cada uno de los métodos analizados; Método Lineal, Método de Elementos Finitos, Método Energético y concordantes con los resultados de trabajos anteriores [17].

Los nomogramas desarrollados permiten al cálculo rápidos de las tensiones en volantes de 4,6 y 8 rayos rectos durante el diseño inicial de estos dispositivos, se recomienda la aplicación de los obtenidos por el método energético por tener un mayor margen de seguridad.

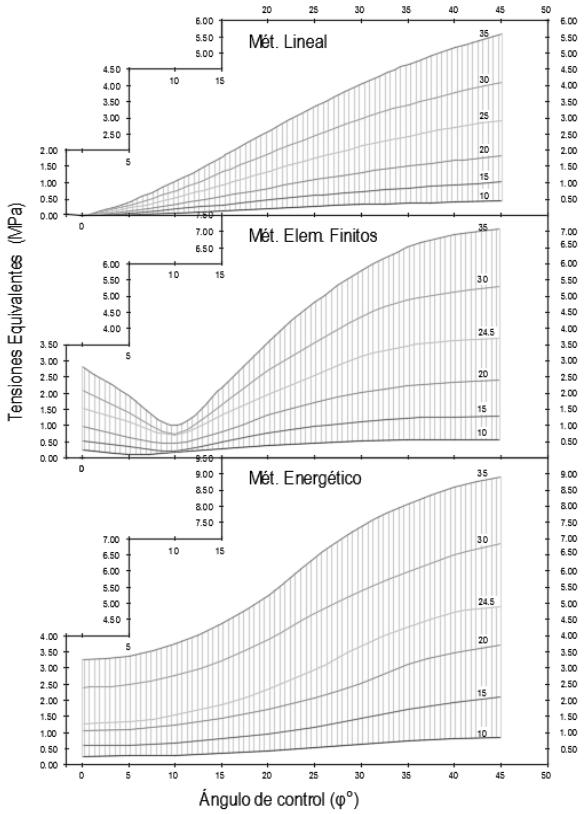


Figura. 13. Tensiones en una llanta de 4 rayos.
Fuente: Los autores

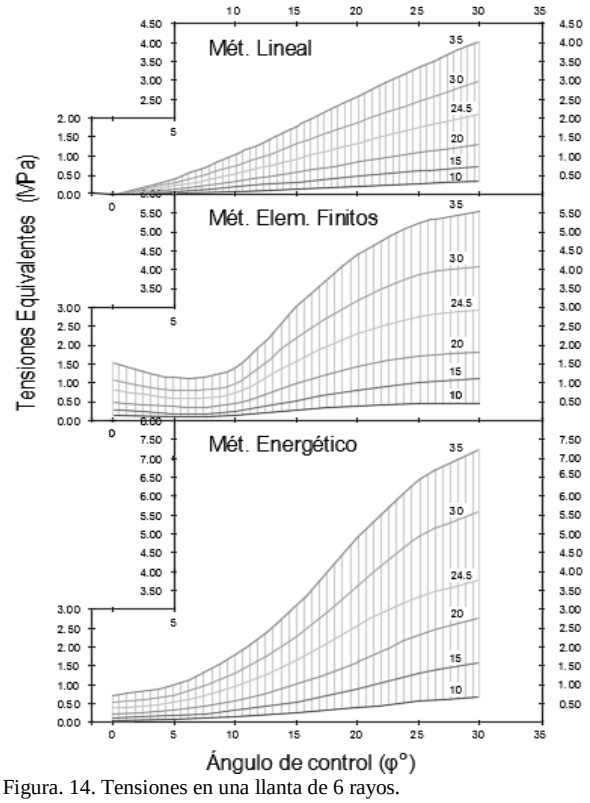


Figura. 14. Tensiones en una llanta de 6 rayos.
Fuente: Los autores

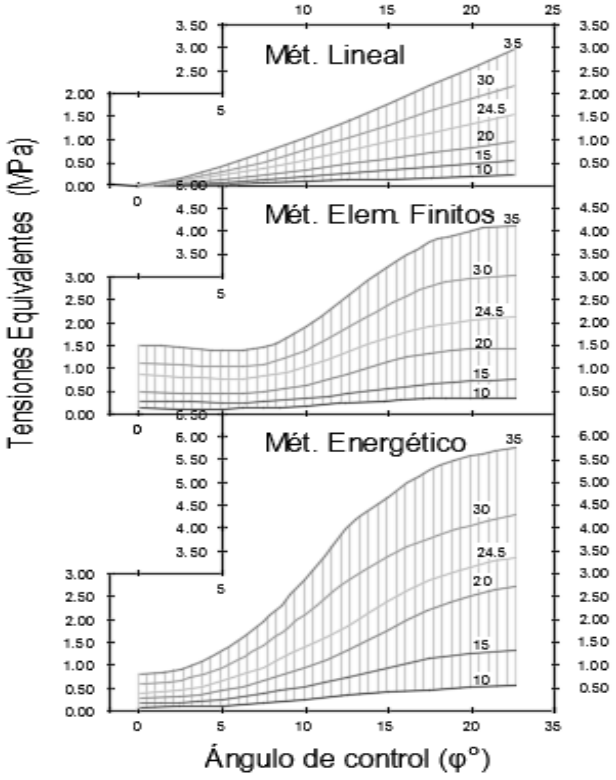


Figura. 15. Tensiones en una llanta de 8 rayos.
Fuente: Los autores

Bibliografía

[1] Norton, R. L. Diseño de máquinas: un enfoque integrado, 4a ed., México, Prentice Hall, 2011. pp. 34-50.

[2] Norton, R. L. Diseño de maquinaria: síntesis y análisis de máquinas y mecanismos. 4a ed., México, McGraw-Hill, 2009. pp. 60-122.

[3] Krack, M., Secanell, M., Mertiny, P. Rotor Design for High-Speed Flywheel Energy Storage Systems, 2ed., China, Intech, 2011. pp. 1-29. http://www.intechopen.com/books/energy-storage-in-the-emerging-era-ofsmart-grids/rotor-design-for-high-speed-flywheel-energy-storage-systems/

[4] Bhandari V. B. Design of Machine Elements in Mechanical, 3a ed., New Delhi, Tata McGraw-Hill, 2010. pp. 77-112.

[5] Mouleeswaran-Senthil, K. and Yogesh, K. Optimization of flywheel materials using geneticalgorithm. ACTA TECHNICA CORVINIENSIS – Bulletin of Engineering, Vol. 4, 2012. [15 de Abril 2014]. Disponible en: http://acta.fih.upt.ro/pdf/2012-4/ACTA-2012-4-04.pdf

[6] Thirugnanam, A., Rakesh, L. and Rakesh, R. Computer Aided Design of Flywheel Using 'C' Program. Middle-East Journal of Scientific Research, 20(5), pp. 577-579, 2014. DOI: 10.5829/idosi.mejsr.2014.20.05.11337

[7] Rathod-Balasaheb S. and Rajmane, M. A Case Study on Design of a Flywheel for Punching Press Operation. International Journal of Engineering and Advanced Technology (IJEAT), 3(4), 2014. [2 Julio 2014]. Disponible en: http://www.me.metu.edu.tr/courses/me418/index%20_files/flywheel designfor%20a%20punchpress.pdf

[8] Krishnan. K. Chawla. Composite Materials Science and Engineering. 2a ed., New York, Springer-verlag, 2001. pp.320-362.

[9] Herbst, J., Manifold, S., Murphy, B., Price, J. et al., Design, Fabrication and Testing of 10 MJ Composite Flywheel Energy Storage Rotors. SAE Technical Paper 981282, 1998. DOI: https://doi.org/10.4271/981282.

[10] DAI – Xingjian, ZHANG – Kai and ZHANG – Xiao. Design and test of a 300Wh composites flywheel energy storage prototype with active magnetic bearings, in International Conference on Renewable Energies and Power Quality (ICREPQ'11) (2011, Las Palmas de Gran Canaria, Spain). European Association for the Development of Renewable Energies, Environment and Power Quality (EA4EPQ) , Las Palmas de Gran Canaria, Spain, 2011, p. 6. DOI: https://doi.org/10.24084/repqj09.341

[11] Ripoll-Masferrer Ll. Análisis y diseño de volantes de inercia de materiales compuestos, tesis (Doctorado en Ingeniería), España, Universidad Politécnica de Cataluña, 2005, 233 pp.

[12] Christopher D. A., Beach R. Flysheel Technology Development Program for Aerospace Aplication. IEEE AES System Magazine, 13(6), pp. 9 – 14, 1998. DOI: 10.1109/62.683723

[13] Álvarez J., Callejón I., Forns S., Bosch R., Salomón G., Küik J. Acumuladores cinéticos. Aplicación a vehículos de tracción urbana. Anales de ingeniería mecánica, 14(1), 2002. [16 Enero 2015]. Disponible en: http://www.asoc-aeim.es/anales.html

[14] Jefferson C. M., Ackerman M. A. Flywheel Variator Energy Storage System. Energy Conversion and Management-Elsevier, 37(10), 1996. DOI: https://doi.org/10.1016/0196-8904(96)00007-6

[15] Sudipta S., Abhik B., Sai-Tejesh G., Srikanth S.P. Computer aided design & analysis on flywheel for greater efficiency. International Journal of Advanced Engineering Research and Studies, (IJAERS). 1 (2), 2012. [fecha de consulta Nov 10 de 2017]. Disponible en: https://pdfs.semanticscholar.org/c38e/b66c612813ee4166181e56c8c3da0b9d2c17.pdf

[16] Gallagher, Patrick, and Jonathan W. Gabrys. "Containment ring for flywheel failure." U.S. Patent No. 6,182,531. 6 Feb. 2001.

[17] Dhengle, S. M., Bhope, D. D., & Khamankar, S. D. (2012). Investigation of stresses in arm type rotating flywheel. International Journal of Engineering Science and Technology (IJEST), 4 (2), 2012 [fecha de consulta Nov 20 de 2017]. Disponible en: https://www.idc-online.com/technical_references/pdfs/mechanical_engineering/Investigation%20Of%20Stresses%20In%20%20Arm%20Type%20Rotating%20Flywheel.pdf

[18] Wilmer V., Mendoza R. and Triana G. Análisis estructural mediante simulación IAO en una estructura de carga y su validación, Revista INGE CUC. 8 (1), 2012. [fecha de consulta]. Disponible en: https://www.researchgate.net/publication/314211709_Analisis_estructural_mediante_simulacion_IAO_en_una_estructura_de_carga_y_su_validacion

[19] López A. G., et al. Análisis de esfuerzos en un apero de tracción animal, empleando métodos experimentales y numéricos, Ingenierías. 9(33), 2006. [fecha de consulta]. Disponible en: http://ingenierias.uanl.mx/33/33_analisis.pdf

A. Mendoza-Fernández, received the BSc. Eng. in Mechanical Engineering in 2005, the MSc. degree in Mechanical Design in 2010 all of them from the Cienfuegos University (UCf). Cienfuegos, Cuba. From 2000 to 2015, he worked for R&D Oleohydraulics and Pneumatic in UCf. Currently, he is MSc. student in Mecatronic Engineering at Nuevo Leon Technological Institute, México. His research interests include: mechanical simulation, failures analysis, and mechanical design.
ORCID: 0000-0001-9098-4127

R.A. Goytizolo-Espinosa, received the BSc. Eng. in Mechanical Engineering in 1964 and PhD. in Thermal Sciences both from Las Villas Central University (UCLV). Santa Clara, Cuba. From 1964 to 1981 worked as titular professor in UCLV and from 1981 to 2016 in Cienfuegos University, Cuba. In his career, he has developed and directed numerous projects related to the evaluation of the resistance of elements of machines and the analysis of failures and published many papers. He is Dr. Honoris Causa from Universidad de Cienfuegos (UCf) and actually is retired.
ORCID: 0000-0002-1094-1731

J.J. Cabello Eras, received the BSc. Eng. in Mechanical Engineering in 1987 from Universidad de Cienfuegos (UCf) and MSc. in Mechanical Design and PhD. in Mechanical Engineering, both from Universidad Central de Las Villas. Santa Clara, Cuba. From 1982 to 2015 worked as titular professor in UCf and from 2015 to date in La Costa University in Barranquilla, Colombia, as titular professor in the Energy Department. His research interests are mechanical failure analysis and cleaner productions applications.
ORCID: 0000-0003-0949-0862

R. Jiménez-Borges, received the BSc. Eng. in Mechanical Engineering in 2004 from Universidad de Cienfuegos (UCf). His current position is a MSc. student at Universidad de Cienfuegos (UCf).
ORCID: 0000-0001-6451-8499



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Mecánica

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Mecánica

Mayor información:

E-mail: acmecanica_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 4259262

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

DNA fragment assembling using a novel GPU firefly algorithm

Pablo Javier Vidal & Ana Carolina Olivera

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Centro de Investigaciones y Transferencia Golfo San Jorge & Universidad Nacional de la Patagonia Austral, Caleta Olivia, Argentina. pjvidal@conicet.gov.ar, acolivera@conicet.gov.ar

Received: September 15th, de 2016. Received in revised form: August 15th, 2017. Accepted: October 5th, 2017

Abstract
The Deoxyribonucleic Acid Fragment Assembly Problem (DNA-FAP) consists in reconstruct a DNA chain from a set of fragments taken randomly. Several authors solved the DNA-FAP using different approaches. In general, although it was obtaining good results; the computational time associated is high. The Firefly Algorithm (FA) is a bioinspired model based on the behaviour of fireflies. Considering that FA is a population bioinspired algorithm is possible design a parallel model of itself on Graphics Processing. In this work, a FA especially development for its execution on GPU is presented in order to accelerate the computational process to solve the DNA-FAP. Through several experiments the efficiency of the algorithm and the quality of the results were demonstrated.

Keywords: fragment assembly problem; firefly algorithm; graphics processing units; optimization; parallelism.

Ensamblado de fragmentos de ADN utilizando un novedoso algoritmo de luciérnaga en GPU

Resumen
El problema de ensamblado de fragmentos de cadenas de ácido desoxirribonucleico (Deoxyribonucleic Acid Fragment Assembly Problem, DNA-FAP) consiste en la reconstrucción de cadenas de ADN desde un conjunto de fragmentos tomados aleatoriamente. El DNA-FAP ha sido resuelto por diferentes autores utilizando distintos enfoques. Aunque se obtienen buenos resultados, el tiempo computacional asociado es alto. El algoritmo de luciérnaga (Firefly Algorithm, FA) es un modelo bioinspirado basado en el comportamiento de las luciérnagas. Al ser un algoritmo bioinspirado poblacional es posible generar un modelo paralelo del mismo sobre Unidades de Procesamiento Gráfico (Graphics Processing Units, GPU). En este trabajo un algoritmo de luciérnaga es diseñado especialmente para ser ejecutado sobre una arquitectura GPU de manera tal de acelerar el proceso computacional buscando resolver el DNA-FAP. A través de diferentes experimentos se demuestra la eficiencia computacional y la calidad de los resultados obtenidos.

Palabras clave: ensamblado de fragmentos de ADN; algoritmo de luciérnaga; unidades de procesamiento gráfico; optimización; paralelismo.

1. Introducción

La necesidad de conocer y predecir mutaciones somáticas y realizar distintos estudios relacionados con el desarrollo de los seres vivos es un tópico de relevancia por su impacto en la medicina para detección y tratamiento de patologías, la investigación forense y el desarrollo de medicamentos. Entre los problemas relacionados con el genoma podemos encontrar el estudio del ensamblado de cadenas de ADN (Deoxyribonucleic Acid Fragment Assembly Problem, DNA-FAP), donde dado un conjunto de cientos o miles de fragmentos de ADN, que pueden contener errores, debemos encontrar la secuencia de ADN original a partir de las permutaciones de los fragmentos que mejor representen a dicha secuencia [17].

Existen herramientas que automatizan el secuenciamiento de ADN, entre ellas podemos nombrar PHRAP [13], TIGR assembler [38] y EULER [32] entre muchas otras. Todas estas herramientas están enfocadas a diferentes problemas encontrados durante el ensamblado de fragmentos.

En los últimos años, varios autores han abordado el DNA-FAP con metaheurísticas y algoritmos bioinspirados [26,33].

How to cite: Vidal, P.J. and Olivera, A.C., Ensamblado de fragmentos de ADN utilizando un novedoso algoritmo de luciérnaga en GPU. DYNA, 85(204), pp. 108-116, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

Las metaheurísticas son procedimientos robustos que encuentran buenos resultados sin tener un conocimiento específico del espacio de búsqueda. Sin embargo, obtener resultados más precisos y en tiempos razonables es aún un tema abierto de investigación. Una de las limitaciones de las técnicas actuales está relacionada con el problema de evaluar grandes secuencias de organismos. De esta manera, si consideramos instancias grandes del DNA-FAP, la evaluación de las soluciones puede requerir varias centenas de minutos. Teniendo en cuenta que además se deben realizar varios cientos de miles de evaluaciones, el tiempo computacional se puede acercar a varios cientos de días. En este contexto, las Unidades de Procesamiento Gráfico (GPU, Graphics Processing Unit) aparecen como una plataforma que provee el poder computacional de cientos de computadoras, lo que permite ejecutar en un tiempo razonable algoritmos que de otra manera serían considerados inviables.

El Algoritmo de Luciérnaga (FA, Firefly Algorithm) fue desarrollado recientemente por Yang [41-45] y desde su aparición se ha utilizado en una variedad de problemas de optimización [3,8,25,40,44]. El FA está basado en el comportamiento de las luciérnagas las cuales están caracterizadas por su capacidad de emitir luz (bioluminiscencia). El FA tiene múltiples ventajas sobre otros algoritmos como los Algoritmos Genéticos (GA, Genetic Algorithms) [10] y los basados en Cúmulos de Partículas (PSO, Particle Swarm Optimizer). Entre ellas podemos mencionar la capacidad de resolver problemas multimodales [43]. Las luciérnagas pueden aleatoriamente subdividirse en sub-grupos y cada grupo puede potencialmente acumularse alrededor de un óptimo local. Todos los óptimos locales, incluido el global pueden ser obtenidos simultáneamente [41-45]. Debido a la reciente aparición de este algoritmo existen pocos trabajos publicados sobre su implementación en GPU [6,15,40].

En particular, en este trabajo extendemos la investigación desarrollada por Vidal y Olivera (2014) [40] y proponemos un Algoritmo de Luciérnaga íntegramente diseñado para GPU con el objetivo de resolver el problema DNA-FAP considerando instancias de distinta complejidad. Para el análisis utilizamos casos de prueba existentes en la literatura [23] con longitudes de hasta 156305 (tamaño de la secuencia de pares base) (1049 fragmentos a recombinar) y comparamos nuestra propuesta con los mejores métodos existentes en la literatura.

En la Sección 2 describimos el Problema del Ensamblado de Fragmentos de ADN. La Sección 3 introduce el Algoritmo de Luciérnaga, una breve explicación sobre la GPU y los detalles de nuestra propuesta. Luego, se describen los parámetros experimentales y una explicación de las instancias a abordar en la Sección 4. La Sección 5 muestra un análisis completo de los resultados obtenidos. Finalmente, en la Sección 6 las conclusiones del trabajo son presentadas.

2. Ensamblado de fragmentos de AND

El ADN está compuesto por larguísimas sucesiones de moléculas: Adenine (A), Thynine(T), Guanine (G) y Cytosine (C) llamadas comúnmente bases. Dado lo inmenso

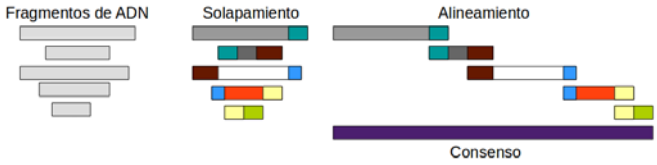


Figura 1. Pasos en el ensamblado de fragmentos de ADN.
Fuente: Los autores.

de estas cadenas estudiarlas de forma global es casi imposible. Por lo general, las cadenas son copiadas y fragmentadas para ser analizadas, lo que se conoce comúnmente como *shotgun.* Ésta técnica no mantiene el orden en que fueron fragmentadas ni ninguna otra información. Una vez que estos fragmentos fueron estudiados es necesario volver a la cadena original rearmando de manera inteligente todas las subcadenas. Debido al proceso de copia y corte de las cadenas de ADN los fragmentos pueden contener errores o faltar piezas. Al proceso de rearmado se lo conoce como ensamblado de fragmentos de ADN [17]. Pequeñas secuencias deben ser nuevamente ensambladas en orden solapando porciones de las mismas. La mayoría de los algoritmos de ensamblado realizan los siguientes tres pasos:

Solapamiento (*Overlap*). Consiste en encontrar el mejor solapado entre los sufijos y los prefijos de todos los fragmentos. La práctica común consiste en filtrar pares de fragmentos que no compartan subcadenas significativas.

Alineamiento (*Layout*). Es encontrar el orden en que estaban los fragmentos en la secuencia original. Constituye la parte más costosa del proceso de ensamblado dada la dificultad de decidir si dos fragmentos están solapados (sus diferencias están causadas por errores de copia) o en realidad son dos copias distintas de una repetición. Las subcadenas repetidas son el mayor desafío para ensamblar cadenas de genoma.

Consenso (*Consensus*). Se refiere a derivar la secuencia de ADN a partir de la disposición establecida en el paso anterior.

Para medir la calidad del consenso se observa el llamado **cubrimiento** (***Coverage***). El cubrimiento de una posición base está definido como el número de fragmentos que comparten esa posición. Esta es una medida de redundancia de un fragmento de dato y denota el número de fragmentos, en promedio, donde un nucleótido se espera que aparezca en el ADN. Esto se calcula como el número de bases leídas por fragmento sobre el tamaño del ADN obtenido. En la Fig. 1 se pueden observar los pasos usuales de las técnicas de ensamblado.

3. Algoritmo de luciérnaga

El Algoritmo de Luciérnaga es una metaheurística desarrollada por Yang [41]. Está inspirada en la imitación de las emisiones de luz utilizada por las luciérnagas para atraerse. Aunque el algoritmo está basado en este fenómeno, en el esquema general propuesto por Yang [41-45] las luciérnagas tienen características particulares:

- Todas las luciérnagas son del mismo sexo, por esto una luciérnaga puede ser atraída por cualquier otra.

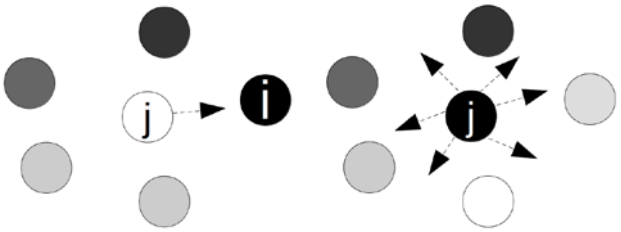


Figura 2. Movimiento de las luciérnagas según su atracción: (a) j se mueve hacia i, la luciérnaga más cercana a ella; (b) j tiene más brillo que cualquiera de las otras luciérnagas por lo que se mueve aleatoriamente. Fuente: Los autores.

- La atracción es proporcional a su brillo. Por ello para cualquier par de luciérnagas emitiendo luz, la menos brillante se moverá hacía la más brillante (ver Fig. 2.a). A medida que las luciérnagas se alejan la percepción de su luz disminuye. Si ninguna luciérnaga es particularmente más brillante que otra, las mismas se mueven aleatoriamente (ver Fig. 2.b).
- La intensidad de la luz emitida por la luciérnaga es afectada o determinada por el valor de la función de aptitud a optimizar.

El FA canónico trabaja con dos principios básicos: la variación de la intensidad de la luz *I* (brillo) y el atractivo β entre dos luciérnagas *i* y *j*. En el caso más sencillo para problemas de optimización el brillo *I* de una luciérnaga localizada en un lugar en particular coincide con su función de aptitud o *fitness*. La intensidad de la luz se reduce con la distancia a su fuente y la luz es también absorbida por el medio, por esto, el atractivo varia con respecto al grado de absorción de la luz. Para un ambiente en particular con un coeficiente de absorción γ, la intensidad de la luz *I* varia con la distancia *r* (ver eq. (1)). Como el atractivo β de una luciérnaga es proporcional a la intensidad de la luz desde el punto de vista de las demás, definimos el β de una luciérnaga a través de la eq. (2).

$$I_j(r_{ij}) = I_0 e^{-\gamma r_{ij}^2} \quad (1)$$

$$\beta_j(r_{ij}) = \beta_0 e^{-\gamma r_{ij}^2} \quad (2)$$

Donde I_0 es la intensidad de la luz y β_0 es el atractivo original de la luciérnaga cuando $r = 0$. Con respecto al coeficiente de absorción γ, si $\gamma \to 0$ el atractivo de una luciérnaga *i* coincide con su brillo (aptitud), es decir, el brillo de una luciérnaga no se ve reducido cuando es vista por otra luciérnaga. En el caso de que $\gamma \to \infty$ significa que el valor del atractivo es cercano a cero cuando es vista por otra luciérnaga por lo cual las luciérnagas no se sentirán atraídas por esta y se moverán de manera aleatoria. De esta manera, γ determina la velocidad de convergencia y el comportamiento del algoritmo y β controla el atractivo. Estudios previos indican que valores de $\beta_0 = 1$ puede ser utilizado en la mayoría de las aplicaciones [44].

La distancia entre dos luciérnagas *i* y *j* ubicadas en diferentes locaciones puede ser expresada por la distancia Euclideana. Teniendo en cuenta *r*, β e *I*, el algoritmo es capaz de definir el movimiento de una luciérnaga *i* con respecto a otra luciérnaga *j*. El pseudo-código del FA canónico puede observarse en el Algoritmo 1. Primero, la población *P* de luciérnagas es inicializada (línea 1). Se inicializa la intensidad de la luz para cada luciérnaga *i* con el valor de aptitud (línea 2). Luego, se define el valor del parámetro γ (línea 3). Mientras la condición de parada no se alcance (línea 4), para cada luciérnaga *i*, el algoritmo tratará de encontrar una luciérnaga *j* más brillante, cercana a *i* (líneas 5 a 13). El algoritmo compara entonces I_j e I_i, si $I_j > I_i$ entonces la luciérnaga *j* se moverá hacía *i* (línea 8). El movimiento de una luciérnaga *i* atraída por otra más atractiva *j* se calcula siguiendo la eq. (3).

$$i = i + \beta_0 e^{\left(-\gamma r_{ij}^2\right)}(j - i) + \alpha\epsilon_i \quad (3)$$

Donde el segundo término tiene en cuenta la atracción mientras que el tercero se calcula de forma aleatoria a partir de ϵ_i tomando una distribución Gaussiana y $\alpha \in [0,1]$ luego la atracción es actualizada (línea 10). Posteriormente, las nuevas soluciones son evaluadas y la intensidad de la luz se actualiza en la línea 11. Las luciérnagas son clasificadas y se encuentra la mejor de ellas (línea 14). Cuando el proceso termina, el Algoritmo 1 retorna los resultados de la ejecución (línea 16).

Como se puede apreciar en el Algoritmo 1 el tiempo de ejecución es $O(n^2 * t)$ donde *t* es el número de iteraciones del ciclo **while**. Además, cada luciérnaga debe ser evaluada según la eq. 2, *n* veces, para cada luciérnaga *j*. Esta complejidad computacional no es fácilmente posible de reducir.

3.1. Algoritmo de luciérnaga discreto sobre GPU

El Algoritmo de Luciérnaga Discreto (DFA) es una variación del FA canónico utilizado para problemas combinatoriales el cual ha sido exitoso en diversos campos de aplicación [16,22]. El DFA es el modelo base utilizado en el presente trabajo para la implementación sobre GPU. Esta sección presenta nuestra propuesta algorítmica la cual llamaremos GPU-DFA.

3.1.1. Unidades de procesamiento gráfico

Las GPUs se consideran como un coprocesador gráfico de la Unidad Central de Procesamiento (CPU, por sus siglas en inglés). Con este tipo de modelo se busca aliviar la carga computacional de la CPU. Los modelos actuales de GPU suelen

Algoritmo 1 FA canónico

```
1:  Inicializar la población P de luciérnagas (i = 1, 2, 3, ..., n)
2:  Inicializar la intensidad de la luz de cada i, I_i = f(i)
3:  Definir el coeficiente de absorción, γ
4:  while no se alcance la condición de parada do
5:    for i = 1 : n do
6:      for j = 1 : n, con j ≠ i do
7:        if I_j > I_i then
8:          Muevo i hacia j
9:        end if
10:       El atractivo varia con la distancia r, vía e^{-γr^2}
11:       Evaluar las nuevas soluciones y actualizar la intensidad de la luz.
12:     end for
13:   end for
14:   Ranquear las luciérnagas y encontrar la mejor de todas
15: end while
16: return Informar los resultados
```

tener una gran cantidad de procesadores, los cuales están optimizados para ejecutar una instrucción simple sobre cada elemento de un extenso conjunto de ellos.

Para poder utilizar adecuadamente la capacidad de cómputo de la GPU, NVIDIA ha desarrollado un modelo de programación llamado CUDA (Compute Unified Device Architecture) [30]. CUDA permite a los programadores implementar funciones llamadas *kernels*. Un kernel contiene la porción de código que será ejecutada en la GPU. Esta función es invocada desde el anfitrión y se despliega en la GPU. CUDA nos da la posibilidad de implementar los kernels usando lenguaje C estándar más algunas extensiones de NVIDIA. Además, nos permite organizar el paralelismo en tres niveles: rejilla, bloque e hilo. Cada vez que se invoca un kernel, se crea una rejilla de bloques, los cuales a su vez agrupan múltiples hilos. Durante la ejecución del kernel, cada hilo tiene acceso a diferentes tipos de memoria dentro de la GPU. Esta jerarquía abarca: registros, memoria local y compartida, memoria global, constante y de texturas. El lector puede consultar en el Manual del Usuario [30] para obtener información más detallada de CUDA.

Existen pocas aproximaciones que utilicen algoritmo de luciérnaga sobre GPU [6,15]. Estos modelos han sido testeados sobre dominios continuos obteniendo buenos resultados con respecto a la ganancia de tiempo.

Nuestra principal motivación al diseñar el DFA acelerado por la GPU es establecer un modelo eficiente que ejecute el procedimiento principal del DFA enteramente en GPU. Los objetivos son: (1) minimizar la transferencia entre CPU y GPU evitando cuellos de botella en la comunicación; (2) abordar problemas de optimización combinatoriales utilizando el modelo de interacción de las luciérnagas sobre una plataforma GPU. La arquitectura CUDA es empleada a fin de explotar al máximo la ejecución en paralelo y el procesamiento intensivo de operaciones aritméticas en las GPUs [30].

3.2. Esquema general de la propuesta

3.2.1. Aproximación del DFA sobre GPUs

En la Fig. 3 podemos observar un diagrama del GPU-DFA. Al inicio del GPU-DFA todos los parámetros son transferidos a la memoria principal de la GPU. Adaptar este tipo de algoritmo bioinspirado no es una tarea sencilla puesto que la gestión de la memoria en la GPU debe ser cuidadosamente manejada. La transferencia de datos entre CPU y GPU puede producir cuellos de botella y se busca minimizarla en nuestra propuesta. Utilizamos un grupo de *kernels* donde realizamos las siguientes tareas: primero, el GPU-DFA crea y evalúa cada luciérnaga de la población *P* usando un hilo (*thread*) de la GPU para generar cada solución. A continuación, hasta que no se alcance la condición de terminación, el GPU-DFA ejecuta una serie de kernels para evaluar en paralelo si cada luciérnaga *i* se moverá a otra luciérnaga *j* y posteriormente generar una población de *n* mejores luciérnagas. La división en múltiples kernels se debe a la heterogeneidad y complejidad de las tareas. Así, las operaciones costosas son ejecutadas principalmente en la GPU.

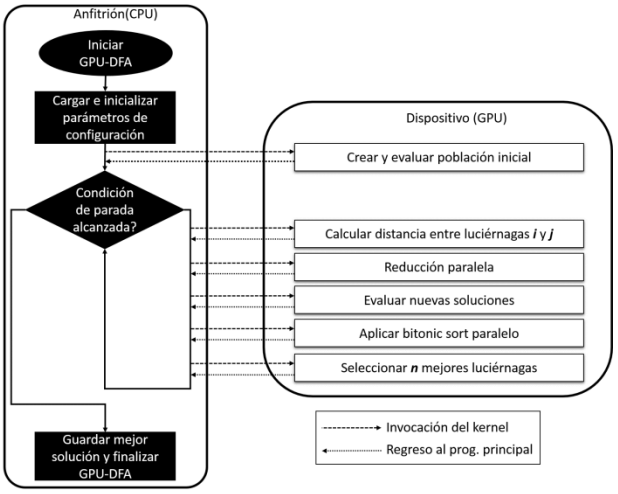


Figura 3. Modelo del GPU-DFA propuesto.
Fuente: Los autores.

El Algoritmo 2 muestra en detalle las operaciones anteriormente mencionadas dentro del esquema del GPU-DFA. Todos los métodos presentados en el Algoritmo 2 intentan explotar al máximo el rápido acceso a los diferentes niveles de memoria de la GPU. Debido a la complejidad de algunas operaciones que son completamente diferentes unas con otras, hemos tratado de escribir kernels simples y pequeños ya que el costo de lanzarlos es insignificante con respecto a las operaciones a realizar y se utilizan menos registros de memoria.

Algoritmo 2 GPU-DFA

```
1: Definir el coeficiente de absorción γ
2: Alocar las entradas del problema en la memoria de la GPU
3: Copiar las entradas del problema a la memoria de la GPU
4: Alocar la estructura de la población de soluciones en la memoria de la GPU
5: Inicializar la población P de n luciérnagas
6: for cada luciérnaga (i) de P en parallel do
7:    InicialSolución(i);
8:    EvaluarSolución(i);
9: end for
10: while no alcanzar la condición de terminación do
11:    temp=∅
12:    for cada par i y j de P en paralelo do
13:       A =computeDistance(i, j);
14:       computeAttractiveness(A,i,j);
15:    end for
16:    Aplicar la Función de Reducción
17:    for cada par i y j de P en paralelo do
18:       if i ≠ null then
19:          k = random(2, A)
20:          temp.agregar(move_{2-opt}(j, k))
21:       else
22:          temp.agregar(move_{Random}(j))
23:       end if
24:    end for
25:    P = Tomar las mejores n luciérnagas en temp
26: end while
27: return La mejor de las n luciérnagas
```

En las siguientes secciones se explica en detalle uno a uno los procedimientos del GPU-DFA.

3.2.2. Inicialización

Durante la inicialización, se asigna un espacio de memoria en la GPU, el cual corresponde a los datos de

entrada y las soluciones candidatas. Luego, los datos de entrada iniciales y las estructuras adicionales son copiados a la GPU. Es importante observar que los datos de entrada son solamente de lectura y nunca cambian durante la ejecución. Por esta razón sus valores son copiados por una única vez y al principio durante toda la ejecución. En el GPU-DFA, la inicialización de la población y la evaluación de la aptitud de cada solución son asignadas a cada hilo de la GPU. De esta manera, se busca que cada hilo pueda acceder consecutivamente a la información de la solución buscando lograr un patrón de acceso a memoria coalescente y optimizar el tiempo de acceso a dicha memoria [18].

3.2.3. Cálculo de distancias y operación de reducción

El primer paso evolutivo para el GPU-DFA es calcula *r*, β e *I* en paralelo para cada par de luciérnagas *i* y *j*. Al evaluar cada combinación es necesario aplicar un método paralelo de reducción para conocer si la solución *j* necesita moverse de forma aleatoria o debe acercarse a una solución más brillante.

El método de reducción es utilizado para identificar posibles movimientos de cada luciérnaga con respecto a las otras. Al lanzar el kernel, se despliega una serie de bloques, cada uno de ellos asignado al conjunto de datos de una luciérnaga obtenidos en el paso anterior. El GPU-DFA utiliza una estructura auxiliar en la memoria compartida de la GPU. El resultado será la decisión sobre qué movimiento realizará la luciérnaga.

3.2.4. Modificaciones en paralelo

Definido para cada luciérnaga *j* el movimiento que va a realizar, el GPU-DFA crea y evalúa *n*m* nuevas soluciones alterando cada una con un operador específico o de forma aleatoria según sea el caso y se almacenan en *temp*.

3.2.5. Ordenamiento bitonic

El esquema del algoritmo hace necesario ordenar el conjunto *temp* según su aptitud. Para ello utilizamos el ordenamiento Bitonic paralelo [33] para luego seleccionar las *n* mejores luciérnagas y actualizar con ellas *P*. El ordenamiento Bitonic tiene una complejidad de $O(n (\log n)^2)$. Este método necesita únicamente un número de comparaciones e intercambios de $O(n \log n)$. La constante oculta en la notación asintótica es más pequeña que para otros métodos de ordenamiento en paralelo. Este ordenamiento puede ser implementado en paralelo en modernas arquitecturas como las GPUs, sin utilizar ningún acceso de escritura que pueda involucrar a la CPU.

3.2.6. Generación de números aleatorios

El desempeño de un algoritmo bioinspirado depende en gran medida de la calidad del generador de números aleatorios utilizado. Para nuestro trabajo hemos usado un generador aleatorio Mersenne Twister [36]. Al comienzo de la ejecución el GPU-DFA define una semilla global con la cual se inicializa una semilla local en cada hilo. Posteriormente, cada semilla local es invocada continuamente por cada hilo para subsecuentes generaciones de números aleatorios.

3.2.7 Codificación de la solución

La representación juega un rol importante en la eficiencia y eficacia de cualquier algoritmo. Con el objetivo de hacer más eficiente el mapeo entre cada hilo *id* y solución de *P* en la GPU se utilizó una representación vectorial. Esta codificación utiliza un alfabeto $\Sigma=\{1,\ldots,l\}$ donde *l* es el número total de fragmentos de ADN a ordenar. Entonces, una solución es una permutación de fragmentos de ADN. En su representación cada variable toma su valor del alfabeto Σ.

La disposición de la población en la memoria de la GPU fue cuidadosamente diseñada. La forma de las soluciones basada en cromosoma [20] simplifica el movimiento individual de las mismas en la selección, la comparación y las fases de perturbación como así también en la comunicación anfitrión-dispositivo necesaria para la operación de reemplazo y actualización de las mejores soluciones durante el proceso evolutivo.

4. Configuración de la experimentación

En esta sección se presentan las especificaciones sobre la configuración y parámetros definidos. Primero, se introducen detalles de las instancias seleccionadas del DNA-FAP. Luego, se muestra la metodología y parametrización para la experimentación.

4.1. Instancias

Para nuestro estudio se llevaron a cabo experimentos con diferentes instancias del DNA-FAP [23]. Las mismas se pueden diferenciar en dos grupos, el primero de ellos ha sido generado mediante el uso de *GenFrag* [7] y para el segundo se ha utilizado el programa *DNAgen*. La Tabla 1 resume las instancias estudiadas, sus nombres, cubrimiento, tamaño (número de fragmentos por instancia), tamaño de la secuencia original y el óptimo para cada una de ellas. Las instancias están ordenadas por grupo y número de fragmentos.

4.2. Valores de los parámetros de experimentación

La distancia entre dos luciérnagas es definida a través de la eq. (4). El parámetro *A* es el número de arcos diferentes entre *i* y *j*. El parámetro *l* indica el tamaño del problema (número de fragmentos). El valor de *r* varía dentro del intervalo [0,10] según la eq. (4) (ver [16]).

$$r_{ij} = \frac{A}{l} * 10 \tag{4}$$

En este trabajo, el algoritmo utiliza un operador *2-opt* que consiste en remover 2 arcos y reemplazarlos con otros 2 arcos para reconectar los fragmentos resultantes de la remoción, y así obtener un secuenciamiento. El operador es aplicado *k* veces, donde *k* es un número seleccionado aleatoriamente entre 2 y el parámetro *A*. Si el movimiento de la luciérnaga es aleatorio, el operador *2-opt* es aplicado tomando *k* un valor cualquiera mayor a 0.

Tabla 1.
Información de los conjuntos de datos utilizados para realizar los experimentos.

Instancias (abrev.)	Coverage	Tamaño medio Frag.	N° de Frag.	Tamaño de la Secuencia Original	Óptimo
Instancias GenFrag					
x60189 4 (x_4)	4	395	39	3835	11478
x60189 5 (x_5)	5	386	48		14161
x60189 6 (x_6)	6	343	66		18301
x60189 7 (x_7)	7	387	68		21271
m154216 5 (m_5)	5	398	127	10089	38746
m154216 6 (m_6)	6	350	173		48052
m154216 7 (m_7)	7	383	177		48052
j02459 7 (j_7)	7	405	352	20000	116700
bx842596 4 (b_4)	4	708	442	77292	227920
bx842596 7 (b_7)	7	703	773		445422
Instancias DNAgen					
acin1 (a_1)	26	182	307	2170	47618
acin2 (a_2)	3	1002	451	147200	151553
acin3 (a_3)	3	1001	601	200741	167877
acin4 (a_5)	2	1003	751	329958	163906
acin5 (a_7)	2	1003	901	426840	180966
acin6 (a_9)	7	1003	1049	156305	344107

Fuente: [23].

Para la mayoría de los problemas se suele utilizar una población *n* entre 15 y 100. En particular para el FA el rango ideal es entre 25 a 40 [41,42]. Considerando que los hilos de la GPU están planificados en bloques de 32 es una buena práctica tomar como tamaño de población 32 o múltiplos de 32 [30]. Con el objetivo de testear el GPU-DFA se utilizaron como parámetros del algoritmo n=32 y m=16. Estos valores fueron obtenidos en un estudio previo realizado por los autores y puede ser consultado en [40].

Con la finalidad de hacer una comparación entre las dos implementaciones del DFA (CPU y GPU) se eligió como criterio de terminación alcanzar 1 millón de evaluaciones. Se realizaron 30 ejecuciones independientes para cada instancia. En la Tabla 3 hemos marcado los mejores valores obtenidos con gris oscuro y con gris claro aquellos que son los segundos mejores resultados.

Los experimentos fueron realizados sobre una CPU AMD FX(tm)-8320 Eight-Core Processor con 16GB de RAM. El sistema operativo utilizado fue Ubuntu Precise 12.04. En el caso de la GPU se utilizó una NVIDIA GeForce GTX 780 Ti con 3GB of DRAM y la versión 6.0 de CUDA.

5. Resultados

En esta sección se muestran los resultados de los experimentos realizados. Se ha cuantificado la calidad de las soluciones considerando su valor de aptitud como así también el número de contigs obtenidos para cada instancia. Además, se compararon los tiempos de ejecución para las versiones en CPU y GPU del DFA.

5.1. Análisis numérico

La Tabla 2 indica los resultados del GPU-DFA para todas las instancias mencionadas en la Sección 4. La primera columna corresponde con el nombre abreviado para cada instancia.

Tabla 2.
Resultados del GPU-DFA para las instancias del DNA-FAP.

Instancias	Mejor	Taza de Aciertos	Avg.	Std.
Instancias GenFrag				
x_4	11478	27	11477.67	±1.15
x_5	14027	24	13783.33	±63.09
x_6	18301	29	18291.40	±15.27
x_7	21271	28	21257.83	±14.41
m_5	38592	18	38555.80	±73.37
m_6	48048	13	47969.29	±91.79
m_7	55067	9	53748.50	±58.50
j_7	114358	3	114343.60	±59.45
b4	225858	2	225173.60	±678.54
b7	441992	0	433958.00	±7053.02
Instancias DNAgen				
a_1	46876	1	45976.60	±68.62
a_2	144634	2	144513.00	±133.93
a_3	156776	1	155751.30	±147.10
a_5	145880	0	159304.50	±1535.86
a_7	157032	0	176439.90	±1217.15
a_9	329015	0	338201.70	±5036.775

Fuente: Los autores.

La columna dos muestra el mejor valor de aptitud obtenido y la tercera columna la taza de acierto, definida como el porcentaje de ejecuciones en las que se alcanzó el óptimo conocido, en las 30 ejecuciones. Las columnas cuatro y cinco indican el valor de aptitud promedio (Avg.) con su correspondiente desviación estándar (Std.) para las 30 ejecuciones. El GPU-DFA obtiene valores de aptitud iguales al óptimo o muy cercanos a éste. En particular, el algoritmo obtiene el óptimo para 11 de las 16 instancias al menos una vez. Para el grupo de las instancias b_7, a_5, a_7 y a_9 el GPU-DFA no alcanza la solución óptima, sin embargo, las soluciones obtenidas son competitivas y cercanas al óptimo en general. Estos resultados indican que el GPU-DFA es capaz de explorar el espacio de búsqueda de manera efectiva mostrando un comportamiento promisorio.

La Tabla 3 compara los resultados del GPU-DFA en contraposición con otros algoritmos. Estos algoritmos son Optimización por Cúmulo de Partículas (Particle Swarm Optimization) y Evolución Diferencial (Differential Evolution) (PPSO+DE) [24], Algoritmo Evolutivo Reina de Abejas basado en un Algoritmo Genético (Queen Bee Evolution Based on Genetic Algorithm, QEGA) [19], Recocido Simulado (Simulated Annealing, SA) [9], Búsqueda local Consciente (Problem Aware Local Search, PALS), SAX [26] y la Optimización de Prototipos con Mejora de Pasos Evolutivos (Prototype Optimization with Evolved Improvement Steps, POEMS) [21]. Se puede observar que la inicialización de forma inteligente en las soluciones candidatas resulta en un beneficio en el proceso de búsqueda, obteniendo estos algoritmos resultados competitivos para todas las instancias.

En general, el GPU-DFA obtiene soluciones competitivas para todas las instancias. Si bien, en algunas de ellas no se llega a alcanzar el óptimo, se logra encontrar el segundo mejor valor superando a las otras metaheurísticas presentadas. Los resultados demuestran que el DFA propuesto optimiza la función de aptitud en las 16 instancias. En particular, se puede observar que en las instancias *DNAAgen* los algoritmos PPSO+DE y SA superan al GPU-

Tabla 3.
Resultados del GPU-DFA para las instancias del DNA-FAP.

	GPU-DFA	*PPSO +DE* [24]	*QEGA* [19]	*SA* [9]	*PALS* [26]	*SAX* [26]	*POEMS* [21]
Instancias GenFrag							
x_4	**11478**	**11478**	*11476*	**11478**	**11478**	**11478**	**11478**
x_5	**14131**	13642	*14027*	*14027*	14021	*14027*	–
x_6	**18301**	**18301**	18266	**18301**	**18301**	**18301**	–
x_7	**21271**	20921	21208	**21271**	21210	**21268**	21261
m_5	**38726**	*38686*	38578	38583	38526	**38726**	38610
m_6	**48048**	*47669*	47882	**48048**	**48048**	**48048**	–
m_7	54258	54891	55020	55048	55067	*55072*	**55092**
j_7	16358	114381	116222	16257	115320	115301	**116542**
b_4	223858	224797	**227252**	226538	225783	223029	*227233*
b_7	436992	429338	*443600*	436739	438215	417680	**444634**
Instancias DNAgen							
a_1	**47618**	47264	47115	46955	46876	46865	–
a_2	144634	**147429**	144133	*144705*	144634	144567	–
a_3	*161776*	**163965**	156138	156630	156776	155789	–
a_5	*151082*	**161511**	144541	146607	146594	145880	–
a_7	*163155*	**180052**	155322	157984	158004	157032	–
a_9	324525	**335522**	322768	324559	*325930*	314354	–

Fuente: Los autores, [23].

DFA. En el caso de las instancias de pocos fragmentos la mayoría de los algoritmos obtienen resultados similares.

5.2. Comparación de contigs

En esta sección se presenta una comparación entre nuestra propuesta y otros algoritmos ensambladores enfocada en la calidad de las soluciones devueltas. Este análisis se enfoca en la calidad de contigs obtenidos. El cálculo del contig asegura que la mejor solución obtenida representa una secuencia continua.

La Tabla 4 presenta los valores contigs de todas las instancias para cada algoritmo. La columna uno muestra el nombre abreviado de la instancia. Desde la columna dos a la columna siete se muestran los valores contigs de los siguientes algoritmos: GPU-DFA, Colonia de Abejas Artificiales (Artificial Bee Colony, [9]), QEGA, SA, PALS y GA [9].

De la Tabla 4 podemos concluir que los algoritmos que poseen algún método inteligente o de búsqueda local obtienen un mejor valor (un número de contigs pequeño). Para GPU-DFA y, en particular, para las instancias m_7, a_7 y a_9 las secuencias reportadas por el GPU-DFA no mejoran los resultados obtenidos por PALS y SA. A diferencia de las técnicas con las que comparamos nuestra propuesta al GPU-DFA no se le ha dotado de ningún operador específico sobre el problema y, aun así, el algoritmo logra resultados equiparables a los existentes en la literatura.

Tabla 4.
Resultados del GPU-DFA para las instancias del DNA-FAP.

Inst.	*GPU-DFA*	*ABC* [9]	*QEGA* [19]	*SA* [9]	*PALS* [26]	*GA* [9]
Instancias GenFrag						
x_4	1	1	1	1	1	1
x_5	1	1	1	1	1	1
x_6	1	1	1	1	1	1
x_7	1	1	1	1	1	1
m_5	1	3	1	1	1	1
m_6	1	2	1	1	1	2
m_7	2	2	1	1	1	2
j_7	1	3	1	1	1	1
b_4	1	12	8	1	1	6
b_7	1	12	3	1	1	3
Instancias DNAgen						
a_1	2	8	4	1	1	5
a_2	1	237	233	1	1	236
a_3	1	362	358	1	1	358
a_5	1	556	552	1	1	522
a_7	722	726	722	1	1	722
a_9	552	552	552	1	1	552

Fuente: Los autores.

Podemos establecer que el rendimiento observado del GPU-DFA indica que éste es capaz de generar soluciones que alcanzan el óptimo o quedan muy cercanas al óptimo. De la misma forma se observa que el GPU-DFA puede explorar el espacio de búsqueda de forma efectiva, por lo cual es capaz de identificar la región donde se encuentra localizado el óptimo.

5.3. Análisis de tiempo de ejecución

En la Tabla 5 se muestra el tiempo promedio consumido en segundos para las versiones en CPU y en GPU del DFA. En la primera columna se informa el nombre abreviado de cada instancia. La columna dos y tres indican los tiempos de ejecución promedio consumidos por el CPU-DFA y el GPU-DFA respectivamente. Finalmente, la columna cuatro muestra la ganancia de tiempo obtenida.

Con respecto a la ganancia obtenida, ésta métrica se calculó dividiendo el tiempo promedio consumido por el CPU-DFA sobre el tiempo promedio consumido por el GPU-DFA. Los valores obtenidos que se encuentran por arriba del 1.00 indican que la CPU consume más tiempo que la GPU.

De la Tabla 5 podemos concluir que aun cuando el tamaño de las instancias crezca, el tiempo del GPU-DFA no lo hace significativamente en contraste con el tiempo del CPU-DFA. Esto puede deberse a las características intrínsecas del DFA el cual posee un alto grado de paralelización que maximiza la eficiencia de cada hilo de ejecución manteniendo la simplicidad en cada kernel. La ganancia de tiempo se encuentra entre los valores 1.73 a 10.14, lo que demuestra la capacidad del GPU-DFA para acelerar procesos de ensamblado de ADN.

Tabla 5.
Tiempo medio en segundos para encontrar la solución óptima para cada implementación y cada instancia.

Inst.	***CPU-DFA***	***GPU-DFA***	***Ganancia***
Instancias GenFrag			
x_4	4.13	2.38	1.73
x_5	5.58	2.33	2.39
x_6	18.58	2.33	7.97
x_7	21.59	3.82	5.65
m_5	39.12	7.20	5.43
m_6	52.37	5.16	10.14
m_7	55.21	6.71	8.23
j_7	186.31	34.37	5.42
b_4	393.18	139.73	2.81
b_7	502.66	140.41	3.58
Instancias DNAgen			
a_1	171.98	29.54	5.82
a_2	382.93	134.58	2.84
a_3	486.36	136.95	3.55
a_5	719.58	157.91	4.55
a_7	1156.12	138.18	8.36
a_9	1418.25	143.57	9.88

Fuente: Los autores.

6. Conclusiones y trabajo futuro

En este trabajo proponemos un Algoritmo de Luciérnaga Discreto implementado sobre Unidades de Procesamiento Gráfico (GPU-DFA) para el Problema del Secuenciamiento de Cadenas de ADN (DNA-FAP). La principal ventaja del Algoritmo de la Luciérnaga frente a otros algoritmos bioinspirados es su capacidad de dividir la población de soluciones en forma automática y de enfrentarse a problemas multimodales.

Se realizaron experimentos sobre el GPU-DFA para analizar su comportamiento. Se ha evaluado la calidad de las soluciones obtenidas y el tiempo de ejecución del algoritmo. Por otro lado, se evaluó la capacidad del GPU-DFA para reensamblar de manera satisfactoria los fragmentos de distintos conjuntos de instancias.

Primero se compararon los valores de aptitud del GPU-DFA en contraposición con otros algoritmos populares en la literatura. Se observó que el GPU-DFA solo era superado por aquellos que poseen una inicialización inteligente de la población inicial para las instancias de mayor cantidad de fragmentos. Luego se analizó la forma de las soluciones obtenidas con respecto a la cantidad de contigs que generaban los algoritmos. El GPU-DFA obtuvo nuevamente resultados promisorios para todas las instancias.

Por último, se realizó una comparación entre la versión en CPU del DFA y nuestro GPU-DFA. La ganancia de tiempo reporta valores entre 1.73 a 10.14 lo que demuestra la capacidad de aceleración de nuestra aproximación al no tener un crecimiento del tiempo de forma lineal para instancias grandes del DNA-FAP en contraposición con la versión en CPU. El método propuesto logró disminuir en hasta 10 veces el tiempo de ejecución del modelo secuencial, lo que permitirá trabajar grupos de fragmentos de mayor magnitud en un tiempo razonable. Por todo esto el GPU-DFA constituye una alternativa atractiva para la resolución de instancias grandes del DNA-FAP.

Como trabajo futuro se espera realizar una hibridación del FA que permita abordar de forma inteligente el DNA-FAP y mejorar así la búsqueda de soluciones.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) por el Proyecto de Investigación Plurianual PIP 2015-2017, a la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica por el proyecto PICT 2014-0430. Los autores también agradecen a la Universidad Nacional de la Patagonia Austral por su proyecto PI 29/B209.

References

[1] Baykasoglu, A. and Ozsoydan, F.B., An improved firefly algorithm for solving dynamic multidimensional knapsack problems. Expert Syst. Appl., 41(8), pp. 3712-3725, 2014. DOI: 10.1016/j.eswa.2013.11.040

[2] Bojic, I., Podobnik, V., Ljubi, I., Jezic, G. and Kusek, M., A self-optimizing mobile network: Auto-tuning the network with firefly-synchronized agents. Information Sciences, 182(1), pp. 77-92, 2012. DOI: 10.1016/j.ins.2010.11.017

[3] Chandrasekaran, K. and Sishaj, P.S., Network and reliability constrained unit commitment problem using binary real coded firefly algorithm. International Journal of Electrical Power & Energy Systems, 43(1), pp. 921-932, 2012. DOI: 10.1016/j.ijepes.2012.06.004

[4] Chen, T. and Skiena, S.S., A case study in genome-level fragment assembly. BIOINF: Bioinformatics, 16, 2000.

[5] Coull, S.E. and Szymanski, B.K., Sequence alignment for masquerade detection. Computational Statistics & Data Analysis, 52(8), pp. 4116-4131, 2008. DOI: doi.org/10.1016/j.csda.2008.01.022

[6] de Paula, L. et al., Parallelization of a modified firefly algorithm using GPU for variable selection in a multivariate calibration problem. International Journal of Natural Computing Research (IJNCR), 4(1), pp. 31-42, 2014. DOI: /10.4018/ijncr.2014010103

[7] Engle, M.L. and Burks, C., Artificially generated data sets for testing DNA sequence assembly algorithms, Genomics, Volume 16(1), pp. 286-288, 1993. DOI: 0.1006/geno.1993.1180

[8] Farhoodnea, M., Mohamed, A., Shareef, H. and Zayandehroodi, H., Optimum placement of active power conditioners by a dynamic discrete firefly algorithm to mitigate the negative power quality effects of renewable energy-based generators. International Journal of Electrical Power & Energy Systems, 61(0), pp. 305-317, 2014. DOI: 10.1016/j.ijepes.2014.03.062

[9] Firoz, J.S., Rahman, M.S. and Saha, T.K., Bee algorithms for solving dna fragment assembly problem with noisy and noiseless data. In Proceedings of the 14th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation, GECCO'12, pp. 201-208, 2012. DOI: 10.1145/2330163.2330192

[10] Fister, I., Fister, I. Jr., Yang, X.-S. and Brest, J., A comprehensive review of firefly algorithms. CoRR, abs/1312.6609, 2013.

[11] Gandomi, A.H., Yang, X.-S., Talatahari, S. and Alavi, A.H., Firefly algorithm with chaos. Comm Nonlinear Sci Numer Simulat, 18(1), pp. 89- 98, 2013. DOI: 10.1016/j.cnsns.2012.06.009

[12] García-Nieto, J.M., Olivera, A.C. and Alba, E., Optimal cycle program of traffic lights with particle swarm optimization. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 17(6), pp. 823-839, 2013. DOI: 10.1109/TEVC.2013.2260755

[13] Green, P., Phrap, version 1.090518, [online], 2009, Available at: http://phrap.org.

[14] Huang, X. and Madan, A., Cap3: A DNA sequence assembly program. Genome research, 9(9), pp. 868-877, 1999. DOI: 10.1101/gr.9.9.868

[15] Husselmann, A.V. and Hawick, K.A., Parallel parametric optimisation with firefly algorithms on graphical processing units. World Congress in Computer Science, Computer Engineering, and Applied Computing, 2012.

[16] Jati, G.K., Manurung, R. and Suyanto., Discrete firefly algorithm for traveling salesman problem: A new movement scheme. In Xin-She Y., Zhihua, C., Renbin, X., Amir, H.G. and Mehmet, K., eds., Swarm Intelligence and Bio-Inspired Computation, Elsevier, Oxford, pp. 295-312, 2013.

[17] Jones, N.C. and Pevzner, P.A., Preface. An Introduction to bioinformatics algorithms. Massachusetts Institute of Technology, 2004.

[18] Kirk, D.B. and Hwu, W.W., Programming massively parallel processors: A hands-on approach. Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, 1st edition, 2010.

[19] Knuth, D.E., The art of computer programming, Volume 3: (2Nd Ed.) Sorting and Searching. Addison Wesley Longman Publishing Co., Inc., Redwood City, CA, USA, 1998.

[20] Kothapalli, K., Shah, R. and Narayanan, P.J., GPU-accelerated genetic algorithms. Workshop on Parallel Architectures for Bio-ispired Algorithms in conjunction with Parallel Architectures and Compilation Techniques (PACT Workshop), pp. 27-34, 2010.

[21] Kubalik, J., Buryan, P. and Wagner, L., Solving the DNA fragment assembly problem efficiently using iterative optimization with evolved hypermutations. Proceedings of the 12th annual conference on Genetic and evolutionary computation, 2010, pp. 213-214. DOI: 10.1145/1830483.1830522

[22] Maher, B. et al., A firefly-inspired method for protein structure prediction in lattice models. Biomhc, 4(1), pp. 56-75, 2014. DOI: 10.3390/biom4010056

[23] Mallén-Fullerton, G.M., Hughes, J.A., Houghten, S. and Fernández-Anaya, G., Benchmark datasets for the DNA fragment assembly problem. International Journal of Bio-Inspired Computation, 5(6), pp. 384-394, 2013. DOI: 10.1504/IJBIC.2013.058912
[24] Mallén-Fullerton, G.M. and Fernández-Anaya, G., DNA fragment assembly using optimization. IEEE Congress on Evolutionary Computation, Cancun, 2013, pp. 1570-1577. DOI: 10.1109/CEC.2013.6557749
[25] Meybodi, M.R., Farahani, S.M. and Nasiri, B., A multiswarm based firefly algorithm in dynamic environments. In Third international conference on signal processing systems (ICSPS 2011), pp. 68-72, Yantai, China, 2011.
[26] Minetti, G. and Alba, E., Metaheuristic assemblers of DNA strands: Noiseless and noisy cases. Proceedings of the IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC2010), 2010, pp. 1-8. DOI: 10.1109/CEC.2010.5586524
[27] Minetti, G., Leguizamón, G. and Alba, E., SAX: A new and efficient assembler for solving DNA fragment assembly problem. 2012 Argentine Symposium on Artificial Intelligence, 2012.
[28] Mussi, L., Daolio, F. and Cagnoni, S., Evaluation of parallel particle swarm optimization algorithms within the CUDA architecture. Inf. Sci., 181(20), pp. 4642-4657, 2011. DOI: 10.1016/j.ins.2010.08.045
[29] Myers, E.W., Sutton, G.G., Delcher, A.L., Dew, I.M., Fasulo, D.P., Flanigan, M.J., Kravitz, S.A., Mobarry, C.M., Reinert, K.H.J, Remington, K.A., et al., A whole-genome assembly of drosophila. Science, 287(5461), pp. 2196-2204, 2000. DOI: 10.1126/science.287.5461.2196
[30] NVIDIA Corporation. NVIDIA CUDA C Programming Guide, 2011.
[31] Osaba, E., Yang, X.-S., Díaz, F., Onieva, E., Masegosa, A.D. and Perallos, A., A discrete firefly algorithm to solve a rich vehicle routing problem modelling a newspaper distribution system with recycling policy. Soft Computing, pp. 1-14, 2016.
[32] Pevzner, P., Computational molecular biology: An Algorithmic approach. MIT Press, 2000.
[33] Parsons, R.J., Forrest, S. and Burks, C., Genetic algorithms, operators, and DNA fragment assembly. Machine Learning, 21(1-2), pp. 11-33, 1995. DOI: 10.1007/BF00993377, 10.1023/A:1022613513712
[34] Peters, H., Schulz-Hildebrandt, O. and Luttenberger, N., Fast in-place sorting with CUDA based on bitonic sort. LNCS, 6067, pp. 403-410, 2009.
[35] Pop, M., Shotgun sequence assembly. Advances in Computers, 60, pp. 193-248, 2004. DOI: 10.1016/S0065-2458(03)60006-9
[36] Saito, M. and Matsumoto, M., Variants of Mersenne twister suitable for graphic processors. ACM Trans. Math. Softw., 39(2), pp. 1-12, 2013. DOI: 10.1145/2427023.2427029
[37] Sayadi, M.K., Hafezalkotob, A. and Naini, S.G.J., Firefly-inspired algorithm for discrete optimization problems: An application to manufacturing cell formation. Journal of Manufacturing Systems, 32(1), pp. 78-84, 2013. DOI: 0.1016/j.jmsy.2012.06.004
[38] Sutton, G.G., White, O., Adams, M.D. and Kerlavage, A.R., Tigrassembler: A new tool for assembling large shotgun sequencing projects. Genome Science and Technology, 1(1), pp. 9-19, 1995. DOI: 10.1089/gst.1995.1.9
[39] Vidal, P., Luna, F. and Alba, E., Systolic neighborhood search on graphics processing units. Soft Computing, 18(1), pp. 125-142, 2014. DOI: 10.1007/s00500-013-1041-7
[40] Vidal, P. and Olivera, A.C., A parallel discrete firefly algorithm on GPU for permutation combinatorial optimization problems. High Performance Computing, Communications in Computer and Information Science, 485, pp. 191-205. Springer, 2014.
[41] Yang, X.-S., Nature-inspired metaheuristic algorithms. Luniver Press, 2008.
[42] Yang, X-S., Firefly algorithms for multimodal optimization. In: Watanabe, O. and Zeugmann, T., eds., Stochastic algorithms: Foundations and applications, Lecture Notes in Computer Science, 5792, pp. 169-178, 2009. DOI: 10.1007/978-3-642-04944-6_14
[43] Yang, X-S., Firefly algorithm, stochastic test functions and design optimisation. Int. J. Bio-Inspired Comput., 2(2), pp. 78-84, 2010. DOI: 10.1504/IJBIC.2010.032124
[44] Yang, X-S. and He, X., Firefly algorithm: Recent advances and applications. Int. J. Swarm Intelligence, 1, pp. 36-50, 2013. DOI: 10.1504/IJSI.2013.055801
[45] Yang, X-S., Hosseini, S.S.S. and Gandomi, A.H., Firefly algorithm for solving non-convex economic dispatch problems with valve loading effect. Appl. Soft Comput., 12(3), pp. 1180-1186, 2012. DOI: 10.1016/j.asoc.2011.09.017

P.J. Vidal, received his BSc. degree in Computing Engineering, in 2008 from Universidad Nacional de la Patagonia Austral, Argentine; the degree of Dr. in Software Engineering and Artificial Intelligence, in 2106, from Universidad de Málaga, Spain. He is currently an adjunct professor at the Universidad de la Patagonia Austral, Unidad Académica Caleta Olivia, Argentine. Currently has a postdoctoral scholarship from National Council of Scientifics and Technological Researches from the Ministerio de Ciencia y Tecnología de la Nación, Argentine. He has experience in software engineering with emphasis on automation and graphic processing units research. His main research topics are: parallel and distributed computing, evolutionary algorithms and metaheuristics and numerical modeling.
ORCID: 0000-0001-6502-8010

A.C. Olivera, is an Adjunct Researcher at National Council of Scientifics and Technological Researches from the Ministerio de Ciencia y Tecnología de la Nación, Argentine. Dr. in Computer Science from Universidad Nacional del Sur, in Bahía Blanca, Argentine. She is adjunct professor at the Department of Exact and Natural Sciences of Universidad Nacional de la Patagonia Austral. She directs in several national and international projects. Her research focuses on bio-inspired algorithms and optimization. She has published several book chapters, articles in indexed journals and proceedings of refereed international conferences.
ORCID: 0000-0001-7825-1959



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
de Sistemas e Informática

Oferta de Posgrados

Especialización en Sistemas
Especialización en Mercados de Energía
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Sistemas
Doctorado en Ingeniería- Sistemas e Informática

Mayor información:

E-mail: acsei_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5365

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Evaluation of spectral similarity indices in unsupervised change detection approaches

Jeisson Fabián Ramos [a], Diego Renza [a] & Dora M. Ballesteros L. [a]

[a] *Ingeniería en Telecomunicaciones, Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia. u1400856@unimilitar.edu.co, diego.renza@unimilitar.edu.co, dora.ballesteros@unimilitar.edu.co*

Received: October 17th, 2017. Received in revised form: November 15th, 2017.Accepted: December 6th, 2017

Abstract
Unsupervised change detection (UCD) is a subject of Remote Sensing whose objective is to detect the differences between two multi-temporal images. In some cases, spectral similarity indices have been used as the comparison block in algorithms of UCD. The aim of this paper is to show in a quantitative way the performance of four spectral similarity indices in the correct identification of changes. Comparison is performed in terms of precision (overall accuracy and kappa index) over medium and high-resolution images (SPOT-5: Satellite Pour l'Observation de la Terre and Quickbird), with a reference obtained through a post-classification method (based on Support Vector Machines, SVM). The results show dependence on the automatic thresholding technique, as well as on the classes associated with the change.

Keywords: change detection; spectral indices; remote sensing; accuracy assessment.

Evaluación de índices de similitud espectral en esquemas de detección de cambios no supervisados

Resumen
La detección de cambios de forma no-supervisada (UCD) es un área de teledetección, cuyo objetivo consiste en encontrar las diferencias entre dos imágenes multi-temporales. En algunos casos, los índices de similitud espectral son utilizados como bloque de comparación de UCD. El objetivo de este documento consiste en analizar de forma cuantitativa el desempeño de cuatro índices de similitud espectral en la correcta identificación de cambios. La evaluación se realiza en términos de la precisión (mediante la precisión global e índice kappa) utilizando imágenes de media y alta resolución (SPOT-5: Satélite Para la Observación de la Tierra y Quickbird), así como una imagen de cambio de referencia obtenida a través de un método de post-clasificación (basado en Máquinas de Soporte Vectorial, SVM). Los resultados obtenidos presentan dependencia con la técnica automática de umbralización, así como con las clases asociadas con el cambio.

Palabras clave: detección de cambios; índices espectrales; teledetección; evaluación de precisión.

1. Introduction

Recently, monitoring change of land surface characteristics is a topic of great importance whose objective is to detect the differences between two multi-temporal images. Research on change detection techniques have looked for new procedures to optimize some of the following characteristics related to the change analysis and its types: area and rate, spatial distribution, trajectories of land cover types, and accuracy evaluation of the results [1,2].

In a broad sense, a change detection project for remote sensing includes three main phases: pre-processing of the data, application of change detection approach, and accuracy assessment of the results [3,4]. The pre-processing phase can involve the following steps: (a) accurate register of multi-temporal images, (b) precise radiometric and atmospheric calibration or normalization between multi-temporal images, (c) having similar phenological stages between multi-temporal images, and (d) selecting the same spatial and spectral resolution [3].

Generally, change detection techniques can be classified into two groups, those that provide binary information (change/non-change) and those that provide information

How to cite: Ramos, J.F., Renza, D. & Ballesteros L., D.M., Evaluation of spectral similarity indices in unsupervised change detection approaches. DYNA, 85(204), pp. 117-126, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

transition between land cover changes [3,5]. The goal in the first group is to produce a binary change detection map in which the change areas are distinguished from unchanged areas. This is achieved by a direct comparison of the images; it is assumed that pixel values in change areas differ substantially between compared images, whereas this is not the case in unchanged areas. For this reason, the comparison can be performed directly on the spectral data. The result of the process is a difference image which can be analyzed to extract areas with significant changes. The most representative change/non-change methods are Image math (e.g. differencing, rationing or normalized indices differencing) and Transformations (e.g. Principal Components Analysis) [6]. Conversely, the second category relates to "from-to" detection. The aim of these methods is to generate a change detection map, where modified and transition classes in land use can be identified. In this case, the changes are detected and labeled through supervised classification schemes; therefore, post-classification comparison is a suitable kind of method to implement when sufficient training sample data are available [2,5].

In any case, there are four main components that allow to describe consistently a change detection technique. The first one relates to the input images, that usually involves the use of multi-temporal data sets, previously pre-processed [3]. The second one implies the definition of a unit of analysis, i.e. a kind of framework for the comparison over time; examples of analysis units can be image pixels, pixel kernel filter (moving window), systematic groups of pixels, image-objects, vector polygons, etc. [1,3]. As a third component, the comparison method allows to determine the presence of the change; some examples include image math, statistical approaches or post-classification schemes. Finally, a change map is obtained, which can be interpreted to obtain parameters such as the magnitude of the change (area, regions, etc.), or the transitions between land covers.

Regarding the analysis unit, the pixel is the simplest one, being an effective solution when its intensity is highly related to the land cover transitions of the multitemporal images under study [3]. This is an advantage of the image pixel as the unit of analysis, with regard to techniques such as kernel-based methods, where the computational cost can be an inconvenient in some cases [7]. On the other hand, an object is a group of pixels which includes context information and that typically involves the following steps: image segmentation; object extraction and comparison; and classification [1]. However, in methods that use image-object as the analysis unit, some external variations (e.g. illumination, viewing angle, phenology and atmospheric conditions) make the obtained object or segment highly variable, even with good pre-processing procedures [3].

Regarding the comparison method, in layer arithmetic operations, the level of change is obtained through the differences in image radiance of the input data; in addition, the input radiances can be previously converted to a most significant content using some indices, such as image ratios [3] or normalized differences (e.g. NDVI [8], NDWI [9], NDDI [9], etc.). In another context, the comparison is made by means of data reduction techniques that emphasize on the data with the highest variance, such as in the case of PCA-based (Principal Component Analysis) methods; in this case, the comparison method needs to be complemented with a framework to obtain change labels [1,2,3]. Finally, change detection magnitude and direction can be approached by analyzing feature vectors in the method known as Change Vector Analysis (CVA), which gives an intensity image and a direction image of change from the length and direction of the difference vector [10].

In some cases, the change detection approach is made in an unsupervised form. For instance, a clustering algorithm based on fuzzy c-means local information is proposed to CD in Synthetic aperture radar (SAR) images [11]. A recent approach proposes the use of PCA and k-means clustering to differentiate constructions in multitemporal images [2].

In order to make the comparison process and to obtain an intensity image of the change between two multitemporal images, some similarity metrics have been used, too. For instance, in [10], the ERGAS index (in French ‘‘Erreur Relative Globale Adimensionnelle de Synthèse”), a metric to evaluate the spectral similarity in a fusion process, was proposed as the comparison method in an unsupervised change detection approach. The Spectral Angle Mapper (SAM) and the Spectral Correlation Mapper (SCM) were proposed in [12] to measure the similarity between two spectral feature vectors applied to change detection. Additionally, in [7], the angle between each multitemporal image and a reference vector measured by means of SAM metric was proposed as a solution for change detection in specific land covers.

The advantage of the application of similarity metrics lies in the reduction of the change detection problem to a 1-D problem [13]. Although kernel-based methods try to reduce the problem by running a linear algorithm in a higher dimensional feature space, its computational cost is higher than the direct comparison by means of a similarity metric. The simplicity of methods based on similarity metrics leads to ease the application and interpretation of the difference image, as with a simple threshold is sufficient to obtain the change map [1,13].

In the post-classification case, changes are identified through the comparison of the corresponding multitemporal thematic maps, and in consequence, it is a thematically rich technique [2], that can obtain changes in specific land covers; as an advantage, a radiometric normalization is not necessary, whereas the requirement of producing the whole thematic maps can be an inconvenient [5]. In complex scenarios for comparison purposes, the direct classification of multitemporal images is an alternative to get change information. Recently, Deep Learning techniques have been adopted in remote sensing to learn abstract representations of the input data [1], and applied to solving problems related to classification and change detection. Some examples include the use of Convolutional Neural Networks (CNN) trained with an unsupervised learning method seeking sparse feature representations [14], using fine-tuned CNN with linear SVM [15], superpixel-based feature extraction and difference representation learned by neural networks [1], Image classification by means of CNN [16], and building detection [17]. In any case, these methods require a considerable amount of labeled data [3,15,16].

In this sense, the objective of this paper is to make a comparison of four similarity indices applied to change detection. The selection of the indices has been conducted considering its aim, mainly oriented to detect spectral differences. According to

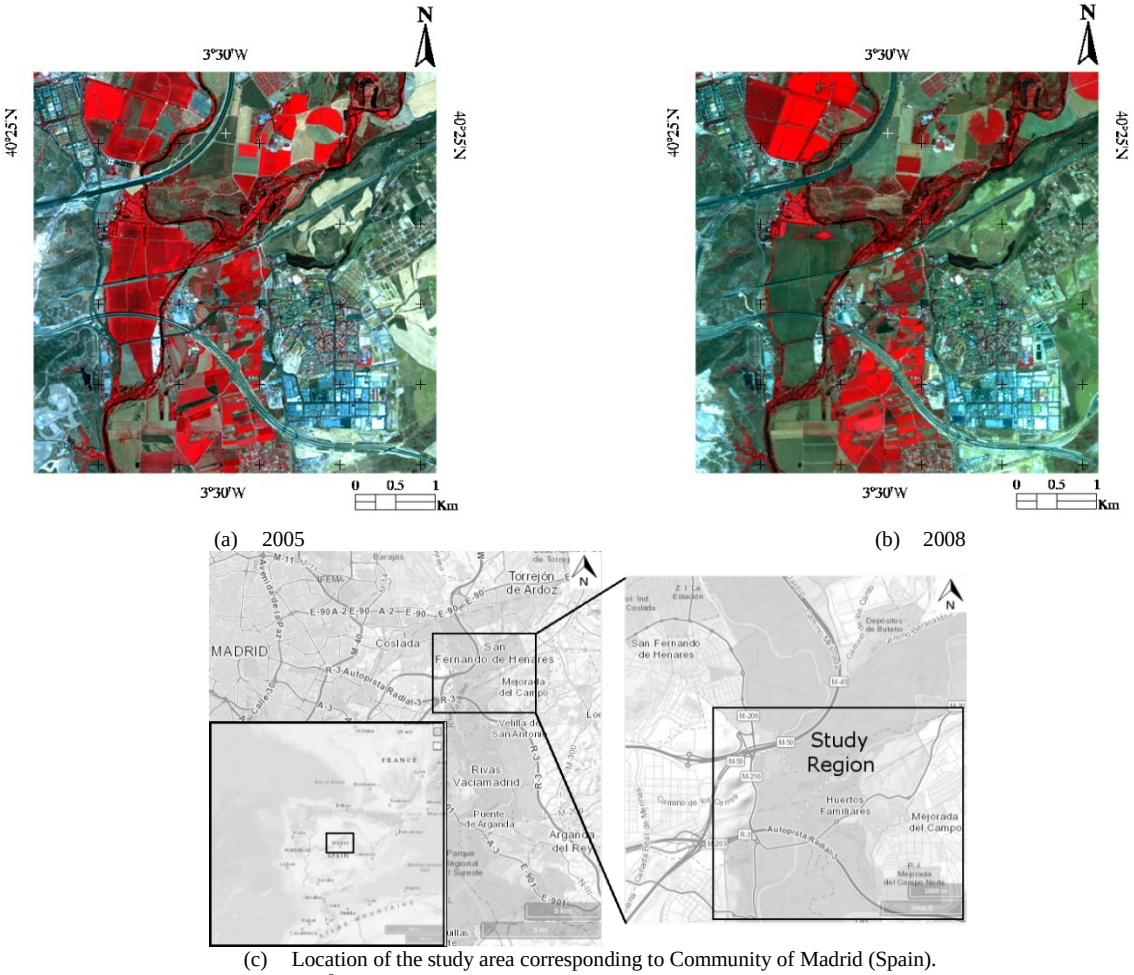
the above, the selected metrics are NDVI (Normalized Difference Vegetation Index), SAM (Spectral Angle Mapper), SCM (Spectral Correlation Mapper), and ERGAS indices, which are applied in an unsupervised form. Each method was applied between two multitemporal images, giving as result a difference image, and a change map after an automatic threshold is applied. For comparison purposes, a supervised post-classification method was implemented and its result was used to evaluate the overall accuracy and the kappa index of the results for the four unsupervised methods.

2. Material and methodology

2.1. Study area and datasets

Data for the study were obtained from both Community of Madrid, in Spain, and Indonesia. The zone in Spain includes a region between "San Fernando de Henares" and "Mejorada del Campo" at the Community of Madrid (Spain). The locator map is shown in Fig. 1(c). We used both SPOT-5 multispectral (MS) (2005) with SPOT-5 MS (2008) datasets related to urban, semi-urban and rural zones. For pre-processing, these Multi-temporal SPOT images were selected in anniversary dates to minimize sun angles and seasonal differences and they were registered using ENVI software. The images cover an area of 25 km^2 (500 × 500 pixels), and have a spatial resolution of 10 m. In this paper, the Green, Red and the Near-Infrared (NIR) bands of the SPOT-5 MS images were used for the change detection algorithms. The false color composition of the two multitemporal images is shown in Fig. 1. The upper left corner of the subset is placed at 40°25'24.7"N, 3°31'41.0"W.

The zone in Sumatra (Indonesia) is located on the northwestern tip of Sumatra Island, in the province of Aceh, Indonesia. The locator map is shown in Fig. 2(c). We used both Quickbird MS (April 2004) with Quickbird MS (January 2005) datasets relating to an area that was impacted by the December 26, 2004 tsunami, where many vegetation areas were washed out by it. For pre-processing, the Quickbird images were registered using ENVI software.



(a) 2005 (b) 2008

(c) Location of the study area corresponding to Community of Madrid (Spain).

Figure 1. Multitemporal SPOT-5 Dataset. 25 km^2 (500 x 500 pixels), false color NIR, Red and Green composition. Community of Madrid (Spain). The upper left corner is placed at 5°18'14.7"N 95°12'04.4"E.
Source: The authors.

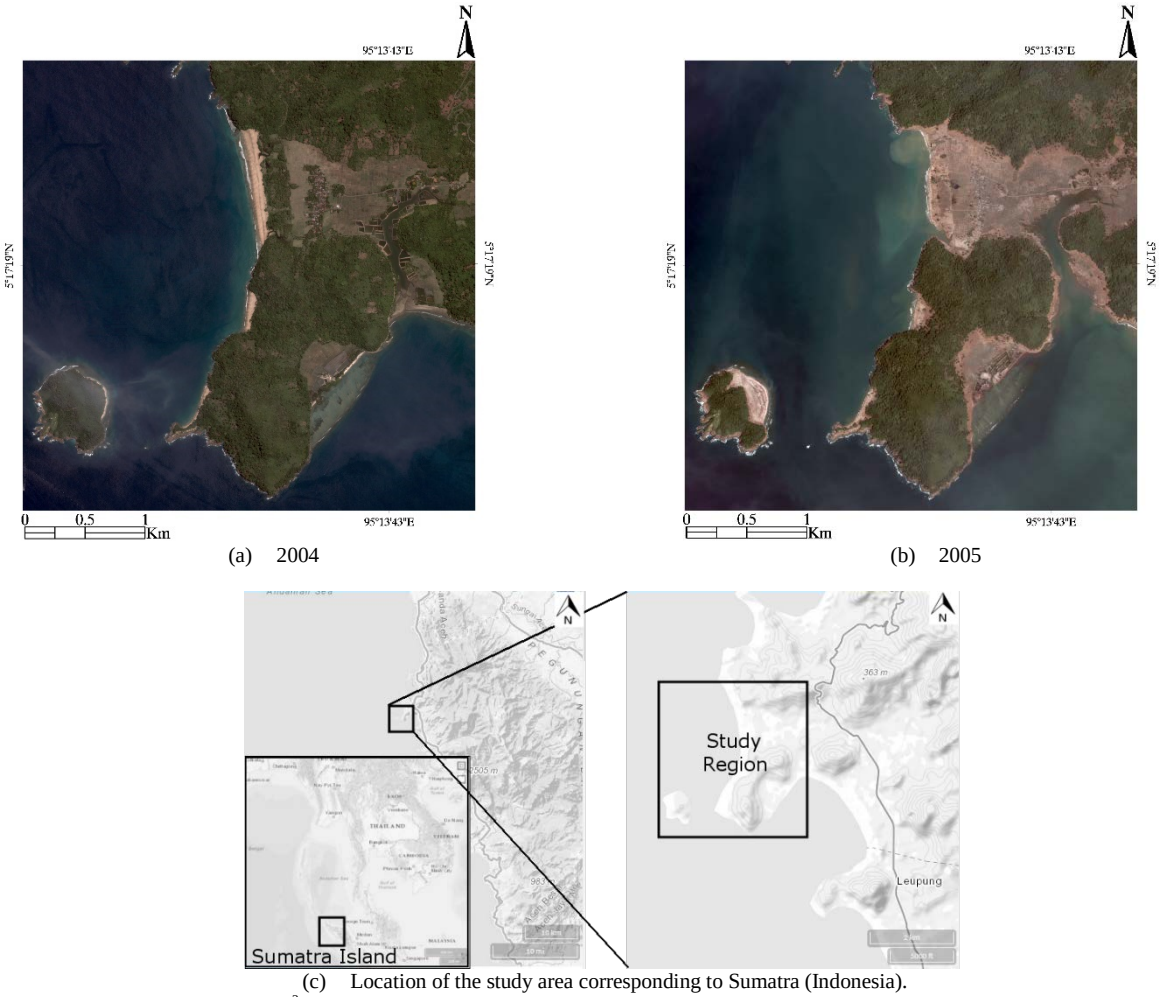


Figure 2. Multitemporal Quickbird. ~14 km^2 (1500 x 1500 pixels), true color Red, Green and Blue composition. Sumatra (Indonesia). The upper left corner is placed at 40°25'24.7"N 3°31'41.0"W.
Source: The authors.

Also, the images cover an area of ~14 km^2 (1500 × 1500 pixels), and have a spatial resolution of 2.5 m. In the change detection algorithms, the four bands of the MS Quickbird images were used. The true color composite of the two multitemporal images is shown in Fig. 2. The upper left corner of the subset is placed at 5°18'14.7"N 95°12'04.4"E.

2.2. Spectral similarity indices

In order to compare the two multitemporal images, similarity metrics were selected. The aim is to evaluate the spectral differences between images, and obtain a simple difference image that reflects changes over time. The selected metrics include a conventionally used index to evaluate changes in vegetation: NDVI; this metric is a normalized difference of the reflectance in two spectral bands (red and NIR), so its application and computational cost is simple.

The following two proposed metrics correspond to indices used to evaluate the spectral quality of a fused image. The first is the ERGAS index [19], which was proposed to estimate the overall spectral error of a pan-sharpened image. This index was modified as a spatial filter to evaluate changes [10]. In addition, the SAM index, originally proposed to evaluate the quality of a fused product, was recently used as a comparison index in a change detection approach [7].

The last selected metric is SCM. SCM is a spectral angular distance, just like SAM. These distances calculate the angle between each pixel of the images, considering each pixel as a vector in a space whose dimension is the number of bands of the image. Both metrics have been used for classification and clustering [12,19], as well as for change detection [7,12]. Their difference lies in the fact that SCM standardizes the data, centralizing it in the mean of the spectra of the two images. The mathematical functions behind the four spectral similarity indices are listed in Table 1.

2.3. Change detection methodology

The proposed change detection methodology includes an image registration phase, one supervised change detection approach, four unsupervised change detection approaches and an accuracy assessment stage (Fig. 3). The image

registration stage aligns the two MS images geometrically, to combine the pixels that represent the same objects.

The supervised stage includes a post-classification scheme, whose outcome will be used as the reference for evaluating the results of the unsupervised methods. The supervised method consists in classifying separately each MS image, defining some training areas for each class by an expert. The training areas are the inputs for the SVM (Support Vector Machine) classifier and its result is a new image including only the thematic classes. Finally, a logic comparison of the thematic classes of both images is applied and a reference binary image of change is obtained. The classification and post-classification change detection analysis were done in ENVI Software.

In the unsupervised change detection cases, each similarity metric of Table 1 is applied. This results in a gray scale image whose intensity reflects the intensity of change, whereby a thresholding algorithm is applied (Otsu's Algorithm). Finally, a binary image of change is obtained per each similarity metric. The NDVI method was done in ENVI software, whereas the remaining comparison metrics were implemented in MATLAB Software.

For accuracy assessment purposes, each binary image of change (the result of each similarity metric) is compared to the reference image (the result of the post-classification scheme) and an error matrix is obtained. The error matrix allows to calculate the overall accuracy and kappa index. These metrics were implemented in MATLAB software.

The flowchart of the study methodology is summarized in Fig. 3.

Table 1.
Mathematical functions of the used spectral similarity indices.

Spectral similarity index	Mathematical function
NDVI	$NDVI = \frac{(NIR - Red)}{(NIR + Red)}$ (1) $NDVI_{DIFF} = \lvert NDVI_{I^1} - NDVI_{I^2} \rvert$ (2) *NIR: Spectral reflectance in near-infrared band,* *Red: Spectral reflectance in red band,* *I^i denotes Multitemporal image in time i*
Local Ergas	$ERGAS(x,y) = 100\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{f_k(x,y)}{g_k(x,y)}\right)^2}$ Where, $f_k(x,y) = \sqrt{\frac{1}{M}\sum_{m}\left(I_k^1(m) - I_k^2(m)\right)^2}$ (3) $g(x,y) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\mu_k$ *x, y: denote spatial position (pixel position)* *N denotes the number of spectral bands,* *k denotes the index for each band* *M, m denote window size and index in the spatial filter* *I^i_k denote Multitemporal band k in time i*
SAM	$SAM_{CD} = COS^{-1}\left(\frac{\sum_{k=1}^{N} I_k^1 I_k^2}{\sqrt{\sum_{k=1}^{N}(I_k^1)^2 \sum_{k=1}^{N}(I_k^2)^2}}\right)$ (4) *N denotes the number of spectral bands,* *k denotes the index for each band* *I^i_k denote Multitemporal band k in time i*
SCM	$SCM_{CD} = COS^{-1}\left(\frac{\sum_{k=1}^{N}\left(I_k^1 - \bar{I}^1\right)\left(I_k^2 - \bar{I}^2\right)}{\sqrt{\sum_{k=1}^{N}\left(I_k^1 - \bar{I}^1\right)^2 \sum_{k=1}^{N}\left(I_k^2 - \bar{I}^2\right)^2}}\right)$ (5) *N denotes the number of spectral bands,* *k denotes the index for each band* *I^i_k denote Multitemporal band k in time i*

Source: The authors.

For accuracy assessment purposes, each binary image of change (the result of each similarity metric) is compared to the reference image (the result of the post-classification scheme) and an error matrix is obtained. The error matrix allows to calculate the overall accuracy and kappa index. These metrics were implemented in MATLAB software.

The flowchart of the study methodology is summarized in Fig. 3.

2.4. Accuracy assessment

The error matrix evaluation method is a valuable tool for assessing change detection results, therefore this will be the method used here. The error matrices are obtained by means of the comparison between the change map resulting from each one of the unsupervised methods and a reference, given by the change map obtained with the supervised method. The accuracy of the change detection methods is measured through Overall Accuracy (*OA*) and Kappa (κ) indices, where *OA* is the ratio between pixels correctly classified and the total number of pixels, while κ index measures statistically the concordance between the maps cited above [7].

According to the number of pixels correctly classified (CCp) (i.e. TP: true positives, and TN: true negatives), and to the number of pixels categorized erroneously (ICp) (i.e. FP: false positives, and FN: false negatives), the OA and the κ indices are calculated as indicated in eq. (6)-(8).

$$OA = \frac{CC_p}{CC_p + IC_p} \quad (6)$$

$$\kappa = 1 - \frac{1 - OA}{1 - P_e} \quad (7)$$

Where,

$$P_e = \{P_1 P_2\} + \{(1 - P_1)(1 - P_2)\} \quad (8)$$

Table 2.
Land cover classification scheme and training sample size.

Image	Class Name	Description	Training samples
SPOT	Vegetation	Fields where trees or crops grow	2754
	Water	Reservoirs, ponds, river, sea	76
	Buildings	Residential areas, urban service buildings, state highways.	628
	Bare soil 1	Lands where vegetation is denuded or where the construction is underway	586
	Bare soil 2	Lands where no vigorous vegetation grows	1729
Quickbird	Vegetation	Fields where trees or crops grow	28186
	Water	Reservoirs, ponds, river, sea	105910
	Bare soil 2	Lands where no vigorous vegetation grows	12718

Source: The authors.

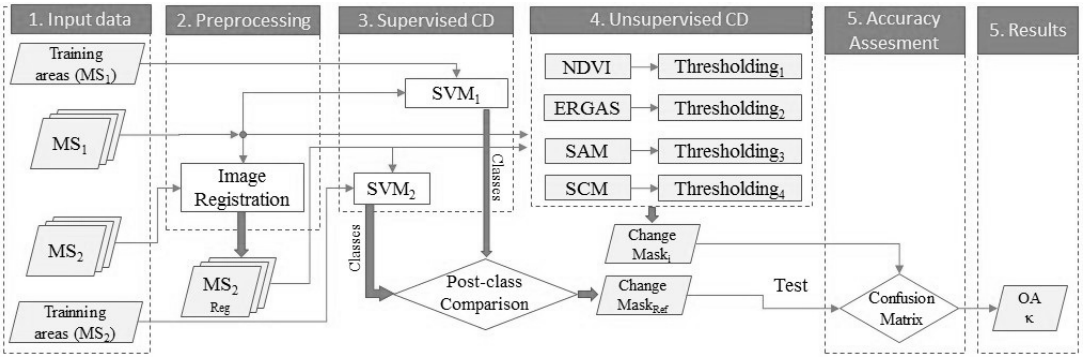
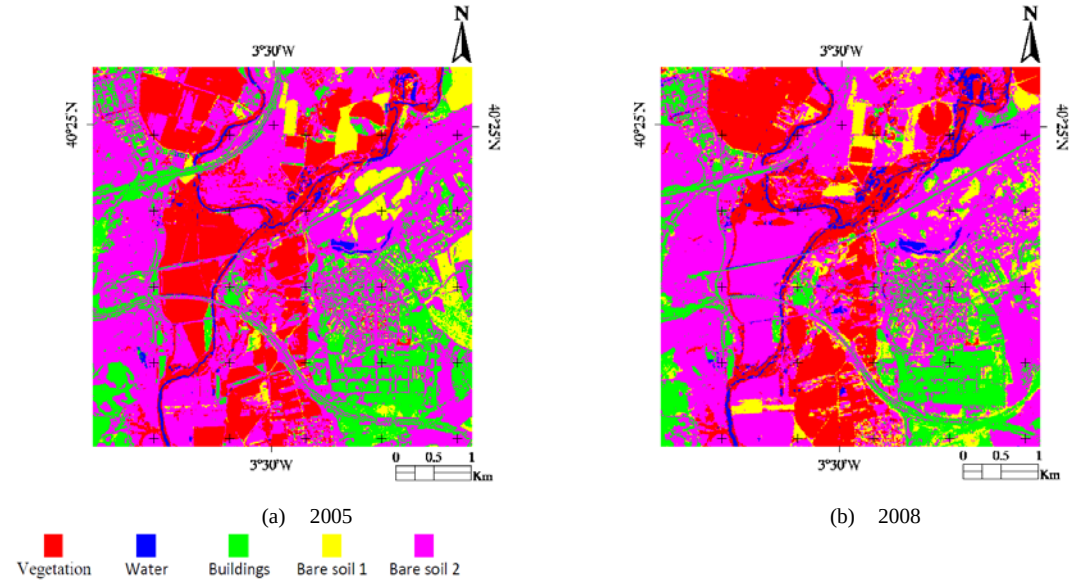
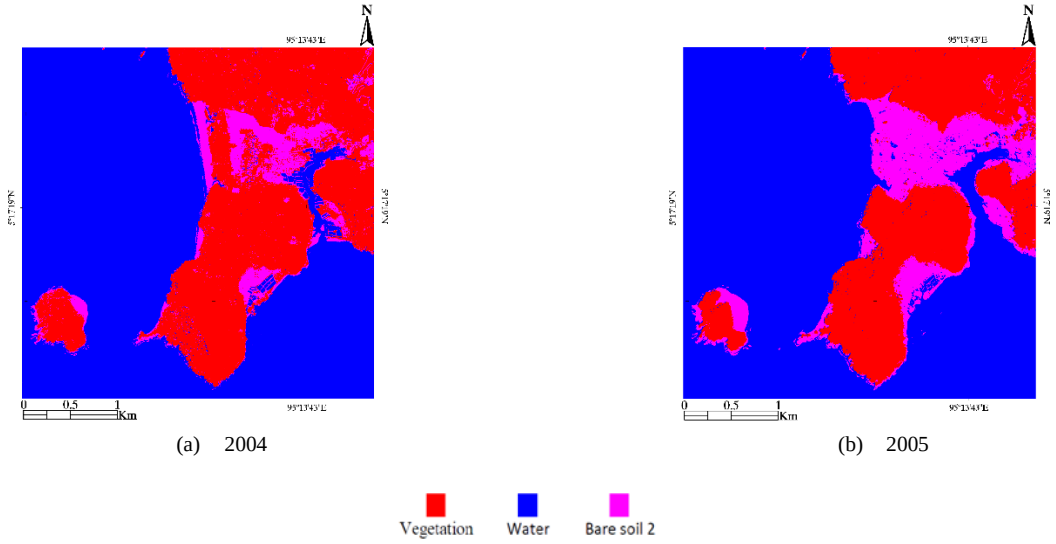


Figure 3. Flowchart of the study methodology.
Source: The authors.



(a) 2005 (b) 2008

Figure 4. SPOT-5 classified images with the SVM supervised method.
Source: The authors.



(a) 2004 (b) 2005

Figure 5. Quickbird classified images with the SVM supervised method.
Source: The authors.

Here P_1 represents the ratio between the number of samples identified as changed, and the total number of samples. P_2 represents the ratio between changed samples correctly identified, and the total number of samples.

3. Results

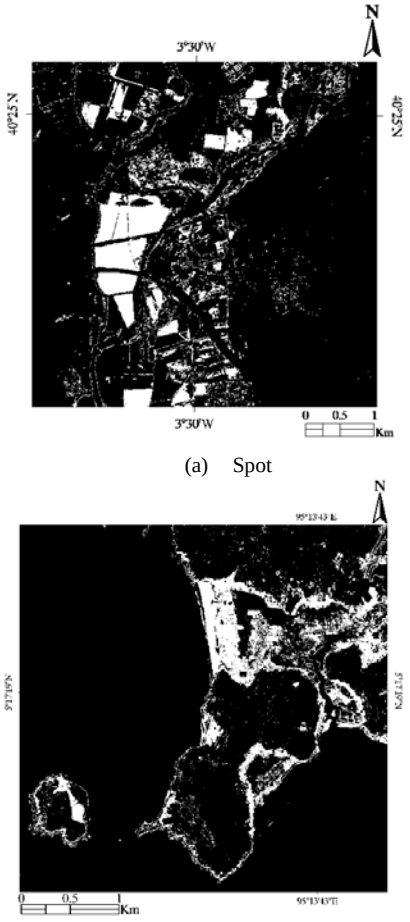
In this section, the results are shown in two parts: supervised method and unsupervised methods.

3.1. Supervised Method

For the supervised classification of the SPOT-5 images shown in Fig. 1, five thematic classes were defined in the training stage: vegetation, water, buildings, bare soil 1, and bare soil 2. See Table 2.

The SPOT-5 classified images are shown in Fig. 4. Then, the difference in each thematic class was evaluated and a unique binary image of change was obtained (Fig 6(a)). This image shows in white the areas where the supervised scheme has identified changes in all thematic classes, and it will be used as the reference image to evaluate unsupervised methods.

On the other hand, three thematic classes were defined to classify Quickbird images: vegetation, water, and bare soil 2 (Table 2). The classification results in the images shown in Fig. 5, and the respective comparison of their classes allows obtaining the change mask shown in Fig. 6(b). This binary image will be the reference to evaluate the unsupervised methods (Quickbird case).



(a) Spot

(b) Quickbird

Figure 6. Change Maps obtained using the post-classification approach (SVM, supervised case). Change areas in white.
Source: The Authors.

3.2. Unsupervised Methods

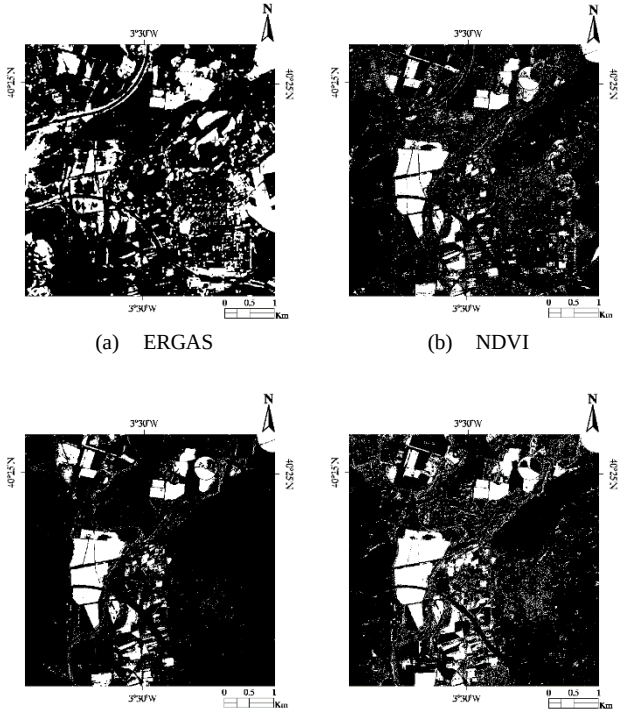
In the unsupervised methods, each metric defined in Table 1 was applied both for SPOT-5 and Quickbird MT images. The application of these metrics results in a difference image (grayscale) that was binarized using an automatic threshold given by the Otsu's method [1]. Figure 7 shows the SPOT-5 change maps obtained from each similarity metric. The images corresponding to NDVI, SAM, and SCM (Fig. 7(b-d)) show high correlation with Fig. 6(a); however, some differences are identified.

Figure 8 shows the change detection masks for the unsupervised case in Quickbird images. Here, the images corresponding to ERGAS, NDVI, and SAM (Fig. 8(a-c)) show some degree of similarity with Fig. 6(b).

For the evaluation of accuracy, it is important to bear in mind that it is possible to obtain the change mask for each class in the supervised method, while the unsupervised methods give a single image of change (integrating all the classes). For this reason, the results of the supervised method are integrated into a single image that is compared with the results of each unsupervised method.

3.3. Accuracy assessment

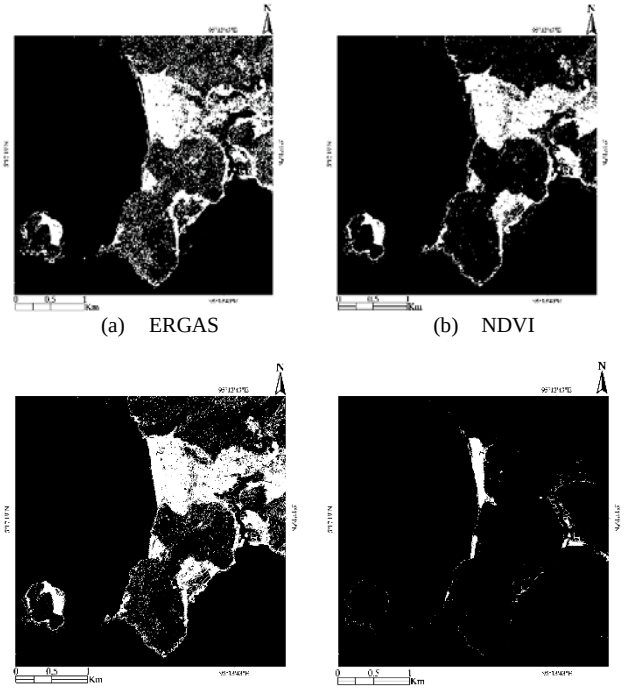
According to the comparison between the results of Fig. 6(a) and Fig. 7, and the comparison between the results of Fig. 6(b) and Fig. 8, error matrices were constructed. The coincidence in the identification of changed and unchanged zones in the reference image (supervised method) and in the



(a) ERGAS (b) NDVI

(c) SAM (d) SCM

Figure 7. SPOT-5 change detection masks obtained through four similarity metrics and Otsu's thresholding algorithm (unsupervised case). Change areas in white.
Source: The authors.



(a) ERGAS (b) NDVI

(c) SAM (d) SCM

Figure 8. Quickbird change detection masks obtained through four similarity metrics and Otsu's thresholding algorithm (unsupervised case). Change areas in white.
Source: The authors.

test images (unsupervised method) gives as a result changed pixels (C) and non-changed pixels (NC). TP is the pixels identified as C in both reference and test image. FP is the pixels identified as NC in the reference image and as C in the test image. FN is the pixels identified as C in reference image and as NC in the test image. Finally, TN is the pixels identified as NC, both in the reference and in the test image.

The error matrices for SPOT-5 results are shown in Table 3. For each similarity metric, Table 3 shows the number of pixels categorized as TP, FP, FN and TN. In any case, the sum of these values gives the total number of pixels in the SPOT-5 image, i.e. 250000 pixels (500 x 500). From these values, the OA and κ index are calculated and given.

In Quickbird case, Table 4 shows the error matrices for each similarity metric. Here, the sum of TP, FP, FN and TN is equal to 2250000 pixels, i.e. 1500 x 1500. Again, the OA and κ values are calculated and given as percentage values.

Table 3.
SPOT-5 - Accuracy assessment for ERGAS, NDVI, SAM and SCM, using Otsu's thresholding algorithm. Result: OA and κ. (C) Change (in Pixels) and (NC) Non-Change (in Pixels).

Similarity index		C	NC	Total	OA (%)	κ (%)
ERGAS	C	11407	49101	60508	72,30	9,82
	NC	20140	169352	189492		
NDVI	C	20688	15715	36403	89,37	54,78
	NC	10859	202738	213597		
SAM	C	19853	10646	30499	91,06	58,90
	NC	11694	207807	219501		
SCM	C	24544	18985	43529	89,60	59,45
	NC	7003	199468	206471		
Total		31547	218453	250000		

Source: The authors.

Table 4.
Quickbird - Accuracy Assessment for ERGAS, NDVI, SAM and SCM, using Otsu's thresholding algorithm. Result: OA and κ. (C) Change (in Pixels) and (NC) Non-Change (in Pixels).

Similarity index		C	NC	Total	OA (%)	κ (%)
ERGAS	C	195042	158237	353279	91,72	63,22
	NC	27977	1868744	1896721		
NDVI	C	180659	113058	293717	93,09	66,10
	NC	42360	1913923	1956283		
SAM	C	189844	130458	320302	92,73	65,09
	NC	33175	1896523	1929698		
SCM	C	31274	5940	37214	91,21	21,82
	NC	191745	2021041	2212786		
Total		223019	2026981	2250000		

Source: The authors.

The discussion about the above results will be performed in the next section.

4. Discussion

4.1. Spot images

The SPOT-5 images shown in Fig. 1 have a spatial resolution of 10 m (pixel size). Also, these images have a mixture of classes in the full scene, whereby five classes were defined in the post-classification method (supervised). According to the above, the unsupervised results for SPOT-5 images are lower than the Quickbird results.

The OA index shows a similar value (around 90%) for three approaches (NDVI, SAM and SCM), and the lowest value corresponds to ERGAS index. For kappa index, the highest value is obtained with SCM; however, the value for SAM is close to it. Again, the lowest value corresponds to ERGAS metric. The poorest results for ERGAS metric can be given for the high variability of classes in the studied SPOT-5 images and the behavior as a spatial filter (low pass) of this approach.

Visually, the change images shown in Fig. 7., highlight the main changes between the MT images, particularly for NDVI, SAM and SCM approaches. The main areas of change in these images are detected, whereas their differences are in small zones, whereby their differences can be given by the threshold level. The change image for ERGAS index does not show the trend in Fig. 6(a) and Fig. 7(b-d). This qualitative evaluation (visual inspection) corresponds with the results of quantitative evaluation (OA and κ index).

It is worth noting that the automatic thresholding technique can be an important player in the results of these approaches. However, these approaches were tested with maximum entropy thresholding scheme giving similar results.

4.2. Quickbird images

The Quickbird images shown in Fig. 2. have a spatial resolution of 2.5 m, and there are three classes that are easily identified. These features can lead to better results in Quickbird case than in SPOT-5 case. This is reflected in higher OA and κ values for Quickbird images as shown in

Table 4. It is worth noting that most of the changes are related to vegetation class.

Regarding the number of classes, we must consider that having a smaller number of classes, their separability can be more precise in the post-classification method. This makes it possible to minimize the uncertainty in the results of the post-classification change detection method, which can finally affect the evaluation of unsupervised methods.

The Table 4 shows OA values higher than 90% for the four similarity metrics, and a κ index higher than 60% for three cases. Here the best results are obtained with ERGAS, NDVI and SAM approaches, being NDVI the best. The good performance in NDVI is based on the kind of changes shown in the Quickbird images, where some vegetation zones are changed to bare soil zones. Although SCM approach has a high OA value, its kappa index is very low, so the worst case is obtained with SCM. The main difference between SCM results and the other results is the number of true positive pixels, while the number of false negatives in SCM is high.

In the visual inspection, the ERGAS, NDVI and SAM image of change is similar to the reference image. In these three images, the main zone washed out by the tsunami (central zone) is bigger than the identified for the supervised approach. This leads to a high value of false negatives. Also, the ERGAS and SAM images show false positive pixels around all the peninsula. In SCM case, the zone identified as changed is very small, therefore its TP is lower ad its FN is higher than in other schemes. This behavior can be a consequence of a low threshold value given by the Otsu's method.

4.3. Recommendations

According to the above, for the application of similarity indexes in the detection of changes in remote sensing, the following recommendations and future work can be followed:

I. The selection of the similarity metric depends on the spatial resolution of the images. In low spatial resolution images, avoid the use of metrics that use spatial filtering (e.g. ERGAS).

II. The selection of similarity metrics depends on the type of classes present in the image. Some similarity indices are specifically geared to specific classes (e.g. NDVI). As future work it is possible to evaluate the performance of this type of metrics only in the class to which they are oriented.

III. When the area to be evaluated has a great variability of classes, together with a low spatial resolution (e.g. SPOT), the recommended methods are those based on spectral distances (e.g. SAM and SCM). On the contrary, in images with high spectral resolution and with low class variability, the use of spatial filtering-based metrics provided good results (e.g. ERGAS).

IV. Evaluate the impact of the thresholding method for each metric. Some thresholding methods may work better than others. As future work, it can be considered here to replace the thresholding by clustering (for example with the k-means algorithm).

5. Conclusion

This paper shows a comparison of four spectral similarity metrics applied to unsupervised change detection. The evaluation is done in terms of accuracy (OA and κ indices) and the results are obtained through the comparison against the results of a post-classification scheme based on SVM. The results have shown good performance for spectral angular distances, especially for SAM metric, whereas the SCM results can be dependent on the thresholding technique. The ERGAS index shows better results for high spatial resolution images (compared to medium resolution), since its behavior is like a spatial filter. Regarding NDVI, its results depend strongly on the percentage of vegetation changes in the multitemporal images evaluated. Another aspect to consider here is the variability of the classes in the image, where the precision in the image registration is a key factor, whereby the results in Quickbird image are better with regard to the results in SPOT-5 image.

According to the evaluation presented here, for images of low spectral resolution, the use of spectral distance based metrics is recommended, and the use of spatial filtering based metrics is recommended to avoid. For high-resolution images, both the distance-based and spectrum-based metrics showed good results. However, when the variability of classes is high, the spectral distance-based methods can have better results. As future work, it is recommended to consider clustering algorithms as an alternative to the thresholding phase and perform evaluation by classes in some similarity indexes.

References

[1] Gong, M., Zhan, T., Zhang, P. and Miao, Q., Superpixel-based difference representation learning for change detection in multispectral remote sensing images. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 55(5), pp. 2658-2673, 2017. DOI: 10.1109/TGRS.2017.2650198

[2] Leichtle, T., Geiß, C., Wurm, M., Lakes, T. and Taubenböck, H., Unsupervised change detection in VHR remote sensing imagery–an object-based clustering approach in a dynamic urban environment. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 54, pp. 15-27, 2017. DOI: 10.1016/j.jag.2016.08.010

[3] Tewkesbury, A.P., Comber, A.J., Tate, N.J., Lamb, A. and Fisher, P.F., A critical synthesis of remotely sensed optical image change detection techniques. Remote Sensing of Environment, 160, pp. 1-14, 2015. DOI: 10.1016/j.rse.2015.01.006

[4] Hussain, M., Chen, D., Cheng, A., Wei, H. and Stanley, D., Change detection from remotely sensed images: From pixel-based to object-based approaches. ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, 80, pp. 91-106, 2013. DOI: 10.1016/j.isprsjprs.2013.03.006

[5] Wu, C., Du, B., Cui, X. and Zhang, L., A post-classification change detection method based on iterative slow feature analysis and Bayesian soft fusion. Remote Sensing of Environment, 199, pp. 241-255, 2017. DOI: 10.1016/j.rse.2017.07.009

[6] Melgani, F., Moser, G. and Serpico, S.B., Unsupervised change-detection methods for remote-sensing images. Optical Engineering, 41(12), pp. 3288-3297, 2002. DOI: 10.1117/1.1518995

[7] Renza, D., Martinez, E., Molina, I. and Ballesteros-L., D.M., Unsupervised change detection in a particular vegetation land cover type using spectral angle mapper. Advances in Space Research, 59(8), pp. 2019-2031, 2017. DOI: 10.1016/j.asr.2017.01.027

[8] Coulter, L.L., Hope, A.S., Stow, D.A., Lippitt, C.D. and Lathrop, S.J., Time–space radiometric normalization of TM/ETM+ images for land

cover change detection. International Journal of Remote Sensing, 32(22), pp. 7539-7556, 2011. DOI: 10.1080/01431161.2010.524676
[9] Martínez, M., Martínez, M.E., Martínez, E. and Renza, D., Detection of changes in natural aquifer reservoirs based on the index of drought. IEEE Latin America Transactions, 15(11), pp. 2059-2053, 2017. DOI: 10.1109/TLA.2017.8070408
[10] Renza, D., Martinez, E. and Arquero, A., A new approach to change detection in multispectral images by means of ERGAS index. IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters, 10(1), pp. 76-80, 2013.DOI: 10.1109/LGRS.2012.2193372
[11] Gong, M., Zhou, Z. and Ma, J., Change detection in synthetic aperture radar images based on image fusion and fuzzy clustering. IEEE Transactions on Image Processing, 21(4), pp. 2141-2151, 2012. DOI: 10.1109/TIP.2011.2170702
[12] Carvalho-Júnior, O.A., Guimarães, R.F., Gillespie, A.R., Silva, N.C., and Gomes, R.A., A new approach to change vector analysis using distance and similarity measures. Remote Sensing, 3(11), pp. 2473-2493, 2011. DOI: 10.3390/rs3112473
[13] Bovolo, F., Marchesi, S. and Bruzzone, L., A framework for automatic and unsupervised detection of multiple changes in multitemporal images. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 50(6), pp. 2196-2212, 2012. DOI: 10.1109/TGRS.2011.2171493
[14] Romero, A., Gatta, C. and Camps-Valls, G., Unsupervised deep feature extraction for remote sensing image classification. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 54(3), pp. 1349-1362, 2016. DOI: 10.1109/TGRS.2015.2478379
[15] Nogueira, K., Penatti, O.A. and dos Santos, J.A., Towards better exploiting convolutional neural networks for remote sensing scene classification. Pattern Recognition, 61, pp. 539-556, 2017. DOI: 10.1016/j.patcog.2016.07.001
[16] Sharma, A., Liu, X., Yang, X. and Shi, D., A patch-based convolutional neural network for remote sensing image classification. Neural Networks, 95, pp. 19-28, 2017. DOI: 10.1016/j.neunet.2017.07.017
[17] Vakalopoulou, M., Karantzalos, K., Komodakis, N. and Paragios, N., Building detection in very high resolution multispectral data with deep learning features. IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS), 2015. pp. 1873-1876.
[18] Renza, D., Martinez, E. and Arquero, A., Quality assessment by region in spot images fused by means dual-tree complex wavelet transform. Advances in space research, 48(8), pp. 1377-1391, 2011.
[19] Hecker, C., Van der Meijde, M., van der Werff, H. and van der Meer, F.D., Assessing the influence of reference spectra on synthetic SAM classification results. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 46(12), pp. 4162-4172, 2008. DOI: 10.1109/TGRS.2008.2001035

J.F. Ramos, received the BSc. Eng in Telecommunication Engineering in 2017, from the Universidad Militar Nueva Granada (UMNG). Bogotá, Colombia. He is assistant researcher at the UMNG. His research interests include image and signal processing.
ORCID:0000-0002-1985-4335

D. Renza, received the MSc. degree in Telecommunications Engineering from the Universidad Nacional de Colombia in 2010, and the PhD. in Advanced Computing from the Universidad Politécnica de Madrid, Spain in 2015. He is currently working at Universidad Militar Nueva Granada, Colombia. His research interests include signal processing and remote sensing.
ORCID: 0000-0001-8073-3594

D.M. Ballesteros L., received the MSc. degree in Electronic Engineering from University of Los Andes, Colombia, in 2004, and the PhD. in Electronic Engineering from the Universitat Politécnica de Cataluña, Spain, in 2013. She is currently working at Universidad Militar Nueva Granada, Colombia. Her research interests include signal processing and data hiding.
ORCID: 0000-0003-3864-818X

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Eléctrica e Ingeniería de Control

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Eléctrica

Mayor información:

E-mail: ingelcontro_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 52 64

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Glulam beams reinforced with punched metal plates

Hernán Darío Cañola [a], César Echavarría [b] & Beatriz Echavarría [c]

[a] *Institución Universitaria Colegio Mayor de Antioquia, Medellín, Colombia. Hernan.canola@colmayor.edu.co*
[b] *Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia. Caechavarrial@unal.edu.co*
[c] *Universidad Nacional de Colombia, Integral S.A, Medellín, Colombia. Baechava@unal.edu.co*

Received: September 19th, 2017. Received in revised form: November 23th, 2017. Accepted: December 1rd, 2017.

Abstract
This article presents an analysis of the mechanical properties of Glulam beams reinforced with punched metal plates. In this study, two groups of Glulam beams were fabricated and experimentally analyzed: 30 non reinforced Glulam beams and 30 Glulam beams reinforced with punched metal plates. All Glulam beams were made of Carbonero (*Licania campestre*) and an epoxy adhesive with high strength and durability. Four-point bending tests in the 60 full-scale beams were carried out. Then, a model based on linear elasticity theory was used to calculate the strength and verify the experimental results. It was determined that Glulam beams reinforced with punched metal plates show a better mechanical behavior than non reinforced Glulam beams. It was further established that the use of punched metal plates increases the homogeneity and the mechanical capacity of Glulam beams.

Keywords: wood; Glulam; punched metal plates; bending test.

Vigas de madera laminada Glulam reforzadas con pletinas metálicas dentadas

Resumen
En este artículo se estudian las propiedades mecánicas de vigas de madera laminada Glulam reforzadas con pletinas metálicas dentadas. Se fabricaron y analizaron experimentalmente 2 grupos de vigas: 30 vigas de madera laminada no reforzadas y 30 vigas de madera laminada reforzadas con pletinas metálicas dentadas. Todas las vigas de madera laminada se fabricaron con planchas de Carbonero (*Licania campestre*) y un adhesivo epóxico de alta resistencia y durabilidad. Se ejecutaron ensayos de flexión de cuatro puntos en las 60 vigas a escala natural. Para determinar las tensiones, se usó un modelo teórico linealmente elástico y se verificaron los resultados experimentales. Se determinó que las vigas de madera laminada reforzadas presentan un mejor comportamiento mecánico que las vigas de madera laminada no reforzadas. Se estableció además que el uso de las pletinas metálicas dentadas aumenta la homogeneidad y la capacidad resistente de las vigas de madera laminada.

Palabras clave: madera; Glulam; pletinas metálicas dentadas; ensayo de flexión.

1. Introducción

La madera es un material compuesto fibroso de origen natural formado por la combinación de fibras largas de celulosa unidas entre sí por la lignina. Las fibras de celulosa garantizan la resistencia de la madera y la lignina estabiliza las fibras en la estructura del material [8,13,15]. Es además un material compuesto homogéneo a nivel macroscópico y heterogéneo a nivel microscópico. Actualmente, este recurso natural es considerado como uno de los materiales renovables de mayor uso en el sector de la construcción porque su utilización intensiva en estructuras trae beneficios en la reducción del CO_2. Infortunadamente, a pesar de tener tantas ventajas, la madera es a menudo inapropiada para aplicaciones de cargas pesadas por su baja durabilidad y alta variabilidad como consecuencia de la presencia de nudos y otros defectos que reducen su resistencia. Estas alteraciones físicas se generan durante los procesos de crecimiento de las ramas del árbol y en las estructuras de madera originan puntos frágiles que modifican el direccionamiento de las

How to cite: Cañola, H.D., Echavarría, C. and Echavarría, B., Vigas de madera laminada Glulam reforzadas con pletinas metálicas dentadas. DYNA, 85(204), pp. 127-133, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

fibras. Entre mayor es el tamaño del nudo, mayor será la pérdida de capacidad resistente de las vigas de madera maciza. Para aumentar la capacidad resistente de las vigas de madera y al mismo tiempo reducir el efecto de las alteraciones físicas tenemos la madera laminada Glulam y los refuerzos naturales y sintéticos [1,5,6-15]. La madera laminada Glulam es una técnica que permite minimizar los efectos de los nudos, del ángulo de microfibrillas y de la heterogeneidad natural existente en las vigas de madera maciza. A su vez, permite un comportamiento de la viga de madera mucho más homogéneo. La madera laminada es un material renovable, poco necesitado de energía de trasformación, productor de pocos agentes contaminantes y completamente reciclable. A nivel estético, la calidez de la madera se hace presente en las estructuras de madera laminada. Es por ello que la madera laminada se ha convertido en uno de los principales elementos de uso estructural y arquitectónico en edificaciones de mediana altura. Cabe destacar que a nivel internacional existe una gran cantidad de empresas dedicadas al diseño, instalación y estudio de este material, normas que rigen su uso y diversas investigaciones tendientes a mejorar su calidad. Desgraciadamente, el Reglamento Colombiano de Construcción Sismo Resistente NSR-10 [18] no considera, como consecuencia de la ausencia de referentes experimentales locales, este tipo de elementos estructurales. La elaboración de un reglamento específico colombiano para el diseño de vigas de madera laminada es entonces una tarea pendiente. Sin embargo, el NSR-10 en su capítulo G permite la utilización de otras normas, las que adaptadas de alguna manera a nuestro medio, proveen de una guía para diseñar adecuadamente las vigas.

A continuación, se presenta un breve resumen del estado actual del conocimiento en el área de las estructuras de madera maciza y de las estructuras de madera laminada reforzadas.

Humphrey [16] reforzó los durmientes de un puente vehicular deteriorado mediante el uso de láminas de fibra de carbono CFRP adheridas con un pegante epóxico logrando con esto una mayor capacidad de carga de los elementos. Sin embargo, el modo de falla predominante fue frágil debido a la deslaminación del refuerzo de fibra de carbono CFRP. Reza [20] utilizó fibra de vidrio GFRP para rehabilitar las pilas de un puente ferroviario realizando pruebas estáticas y dinámicas con pruebas a flexión en una configuración de cuatro puntos. A partir de los ensayos efectuados logró mejores propiedades mecánicas de los elementos analizados. Fiorelli y Días [12] realizaron un análisis experimental de vigas de madera reforzadas con fibras de vidrio GFRP y carbono CFRP. El modelo teórico empleado para calcular la resistencia a flexión de las vigas tuvo en cuenta la resistencia a tracción y la falla por compresión de los elementos reforzados. Además, consideró un modelo de tracción elástico y de compresión elasto-plástico. La validez del modelo se comprobó mediante la comparación con resultados experimentales. Raftery y Whelan [19] efectuaron análisis comparativos experimentales para determinar el comportamiento mecánico de las vigas de madera laminada no reforzadas y reforzadas con fibras recicladas. Los resultados obtenidos indicaron que la adición de porcentajes razonables de refuerzo, ubicados estratégicamente en la zona de tracción, dio lugar a aumentos en la rigidez y en la capacidad portante del elemento. Echavarría et al. [9] hicieron un análisis de las conexiones de madera pernadas con el uso de pletinas metálicas dentadas. En esta investigación, el refuerzo funcionó como mecanismo para atender el exceso de tracción perpendicular y mejorar el comportamiento de la conexión. En este estudio se concluyó que una de las ventajas de esta técnica de refuerzo es que no se requiere el uso de pegantes y el elemento estará listo para usarse inmediatamente después de que hayan sido instaladas las pletinas sobre la superficie de madera. El refuerzo con las pletinas dentadas aumenta la resistencia de la conexión. Las pletinas dentadas de acero representan una solución efectiva porque son elementos de bajo costo y de fácil instalación. Fueyo et al. [14] realizaron un análisis del comportamiento mecánico de las tensiones de adherencia en las piezas de madera y de las tensiones normales y tangenciales en las placas metálicas que constituían los nudos de una cercha. Se ha demostrado también que cuantías de refuerzo de fibra de vidrio GFRP del orden del 3% pueden incrementar la resistencia a flexión de vigas de madera laminada en más del 100% y su rigidez entre un 10% y un 15% [7]. Borri et al. [6] desarrollaron un estudio experimental de reforzamiento de vigas de madera en su zona traccionada mediante el uso de fibras de bambú y fique. El uso de estas fibras logró incrementos en las propiedades mecánicas, pero estos dependen directamente del espesor del refuerzo. Asimismo, Echavarría et al. [10] estudiaron experimentalmente el comportamiento mecánico de vigas de madera laminada reforzadas con fibra de vidrio GFRP y bambú. El refuerzo se propone con el fin de aumentar la resistencia a flexión y la ductilidad de las vigas de madera laminada. La viga se refuerza en la zona traccionada y en las caras laterales con los refuerzos de fibra de vidrio GFRP o de bambú. Estos refuerzos generan un aumento considerable de resistencia. Mascia y Mayer [17] hicieron análisis experimentales en vigas de madera laminada reforzadas con fibras naturales dispuestas en su zona traccionada. El estudio demostró que mediante el uso de estas fibras se pueden generar mejoras en el comportamiento mecánico de las vigas y que el uso de este tipo de refuerzos naturales contribuye al cuidado del medio ambiente. El uso de refuerzos en las vigas de madera laminada Glulam tiene como propósito incrementar la resistencia a flexión y el módulo de elasticidad de la viga. Se busca adicionalmente disminuir el tamaño de las vigas y así reducir el peso propio de la estructura.

Es claro entonces que el reforzamiento de las vigas de madera laminada Glulam con fibras sintéticas (fibra de vidrio GFRP, fibra de carbono CFRP) y con fibras naturales (bambú, fique) puede presentar ciertas ventajas: económicas, mecánicas y ecológicas. No se ha estudiado, sin embargo, hasta el día de hoy el reforzamiento de las vigas de madera laminada Glulam con pletinas metálicas dentadas. Teniendo también en cuenta investigaciones previas en conexiones (Echavarría et al. [9]), es probable que el reforzamiento con pletinas metálicas dentadas mejore el comportamiento mecánico de las vigas de madera y de madera laminada. El objetivo principal de este artículo es demostrar que el uso de pletinas metálicas dentadas es una alternativa viable y podría convertirse en una nueva técnica de reforzamiento en el campo de los elementos estructurales de madera a flexión.

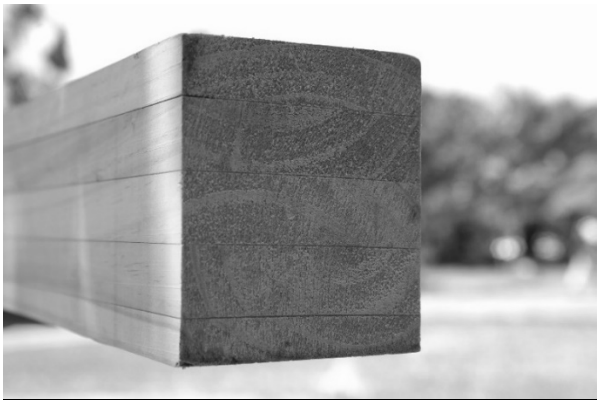


Figura 1. Viga de madera laminada Glulam.
Fuente: Los autores

Tabla 1.
Propiedades mecánicas de la *Licania campestre*

Número de ensayos	30
Resistencia a tracción paralela a las fibras promedio (MPa)	107
Resistencia a cortante promedio (MPa)	9
Módulo de elasticidad paralelo a las fibras promedio (MPa)	14300
Módulo de elasticidad perpendicular a las fibras promedio (MPa)	930
Densidad promedio con un contenido de humedad del 12% (Kg/m^3)	500

Fuente: Los autores

Tabla 2.
Propiedades mecánicas del pegante epóxico

Resistencia a tracción promedio (MPa)	52
Módulo de elasticidad promedio (MPa)	2000
Deformación de ruptura (%)	3,5

Fuente: Los autores

2. Materiales y métodos

2.1. Fabricación de las vigas de madera laminada Glulam

Para la fabricación de las vigas de madera laminada (ver Fig. 1) se usaron planchas de Carbonero (*Licania campestre*) y un pegante epóxico termo-endurecido de alta resistencia mecánica, alto módulo de elasticidad y alta resistencia a la humedad. En cada viga se pegaron 5 planchas de 30 mm de espesor, 2400 mm de longitud y 50 mm de anchura. No se efectuaron uniones dentadas en el sentido longitudinal. De esta forma, se elimina un factor de incertidumbre (ruptura en la unión dentada) durante la etapa experimental. El tamaño de la muestra experimental se determinó según la norma ASTM D2915-10 [4]. En esta investigación, se asume un coeficiente de variación de 20 %, una precisión estimada de 5 % y un valor crítico estadístico de 1,173 para un intervalo de confianza de 75 %. Se requiere entonces realizar al menos 22 ensayos por grupo estudiado. Se realizaron 30 ensayos por cada uno de los grupos (30 vigas sin reforzar y 30 vigas reforzadas con pletinas metálicas dentadas).

Para la fabricación de las vigas de madera laminada, se realizó previamente:

- Un secado al horno de las planchas de madera para llevarlas a la humedad de equilibrio.
- Una selección de planchas de madera con el fin de escoger las de mejor calidad y descartar las que presentaban una gran cantidad de alteraciones físicas.
- Un control dimensional de las planchas de madera.
- Un lijado, pulido y limpieza de las superficies de las planchas de madera inmediatamente antes de proceder al proceso de pegado.
- Un control de humedad de las planchas. La madera presentó un contenido de humedad de equilibrio de 12% (cinco mediciones superficiales por plancha). Este contenido de humedad permaneció constante durante la fabricación y los ensayos en el ambiente controlado del laboratorio.

Las propiedades mecánicas de las planchas de madera fueron verificadas bajo parámetros de las normas ASTM D143-94 [1] y ASTM D2395-02 [2]. Las propiedades mecánicas de la *Licania campestre* y del pegante epóxico se encuentran en las Tablas 1 y 2.

El control del contenido de humedad de las planchas de madera permite minimizar las variaciones dimensionales y mecánicas que podrían presentarse en las vigas de madera laminada fabricadas. La superficie de la madera debe estar limpia, seca, libre de grasa, aceite y productos corrosivos para garantizar una alta adherencia. El pegante usado se produce mezclando un catalizador incoloro y una resina epóxica de color gris. Este pegante tiene como función principal servir de puente de adherencia entre las planchas de madera que constituyen las vigas de madera laminada (ver Fig. 2). Se aplicó una presión uniforme de 1 MPa durante el proceso de pegado. Adicionalmente, la cantidad de pegante usada en cada una de las superficies pegadas de las vigas no varió significativamente. De esta forma se obtuvo un espesor constante del adhesivo. El tiempo de curado del adhesivo es de 24 horas en el ambiente controlado del laboratorio. Este adhesivo presenta: alta resistencia a los agentes físicos y químicos, alta resistencia a la temperatura y buena resistencia a la humedad antes, durante y después del curado.

Durante el proceso de fabricación de las vigas de madera laminada, las planchas constitutivas de las secciones pueden ser organizadas según su resistencia y rigidez para obtener componentes más eficientes. Se debe garantizar que las planchas de menor calidad estructural se encuentren ubicadas en el centro (de la altura) de la viga donde las tensiones por flexión son menores.



Figura 2. Aplicación del pegante epóxico.
Fuente: Los autores

2.2. Fabricación de las vigas de madera laminada Glulam reforzadas con pletinas metálicas dentadas

Las pletinas metálicas dentadas son conectores superficiales de alta rigidez. Estos elementos son usados en Norteamérica y en Europa en la fabricación de cerchas. El mecanismo resistente entre las pletinas metálicas dentadas y la madera se produce en dos etapas: inicialmente hay una transferencia de esfuerzos entre la madera y la pletina a través de los dientes (capacidad de anclaje) y posteriormente una transmisión de esfuerzos por tracción en la misma pletina metálica. El diseño de las conexiones con pletinas metálicas dentadas se hace según la sección 8.8 del Eurocódigo 5 [11]. Las vigas de madera laminada analizadas en esta investigación son reforzadas en las caras laterales de su tercio medio (de la longitud) con pletinas metálicas dentadas (ver Fig. 3).

Las pletinas metálicas dentadas usadas son placas perforadas de acero galvanizado con dimensiones: 50 mm de anchura, 150 mm de altura, 1 mm de espesor y dientes de 5mm de profundidad. Estas pletinas metálicas dentadas garantizan un aumento de la resistencia a tracción perpendicular a las fibras de la madera de 3 MPa a 11 MPa. Esta evaluación se hace al considerar las propiedades experimentales de la madera y de las pletinas, la sección homogénea madera-pletina y la ley de las mezclas de los materiales compuestos. Las propiedades mecánicas de las pletinas metálicas dentadas se encuentran en la Tabla 3. Las pletinas fueron escogidas para que no produjeran desgarramientos en la superficie de la madera.

Para la instalación de las pletinas metálicas dentadas en las vigas de madera laminada, se ubican los refuerzos metálicos mediante el uso de cintas adhesivas. Posteriormente, se ejerce presión sobre las pletinas hasta que quedan completamente adheridas en las vigas de madera laminada.

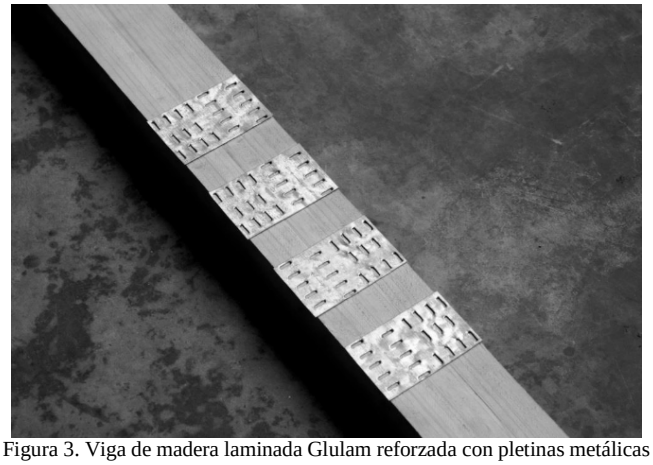


Figura 3. Viga de madera laminada Glulam reforzada con pletinas metálicas dentadas.
Fuente: Los autores

Tabla 3.
Propiedades mecánicas de las pletinas metálicas dentadas

Espesor de la pletina (mm)	1
Resistencia a tracción (MPa)	190
Módulo de elasticidad (MPa)	210000

Fuente: Los autores



Figura 4. Análisis de ultrasonido.
Fuente: Los autores

Tabla 4.
Módulos de elasticidad de las vigas de madera laminada Glulam con ultrasonido

Módulo de elasticidad paralelo a las fibras promedio (MPa)	13100
Módulo de elasticidad perpendicular a las fibras promedio (MPa)	850
Número de ensayos	120

Fuente: Los autores

Las pletinas metálicas dentadas buscan mejorar localmente el comportamiento mecánico de la viga de madera laminada al disminuir la influencia de los defectos presentes en las planchas de madera.

3. Resultados y discusión

3.1. Estudio experimental y análisis comparativo

Una vez fabricadas todas las vigas, se ensayaron en laboratorio un total de 60 vigas: 30 vigas de madera laminada no reforzadas y 30 vigas de madera laminada reforzadas con pletinas metálicas dentadas. Las dimensiones de las vigas fueron 2400 mm de longitud, 150 mm de altura y 50 mm de anchura. Además de los ensayos de propiedades mecánicas realizados en las planchas de *Licania campestre* (ver Tabla 1), se determinaron los módulos de elasticidad longitudinal y transversal para cada viga analizada con el uso de ensayos no destructivos de ultrasonido (ver Fig. 4).

Los módulos de elasticidad estimados se muestran en la Tabla 4.

Se realizaron además análisis de adherencia del pegante epóxico bajo parámetros de la norma ASTM D905 [5]. Los resultados de dicho ensayo se encuentran en la Tabla 5.

Tabla 5.
Adherencia en vigas de madera laminada Glulam

Número de ensayos	6
Resistencia a cortante promedio (MPa)	8
Coeficiente de variación (%)	28

Fuente: Los autores

La resistencia a cortante de las planchas (9 MPa, ver Tabla 1) es idéntica a la resistencia a cortante entre las planchas (8 MPa, ver Tabla 5). Se descartan, verificándose también experimentalmente, rupturas por cortante y adherencia entre las planchas. Posteriormente, las 30 vigas de madera laminada sin reforzar y las 30 vigas de madera laminada reforzadas con pletinas metálicas dentadas fueron falladas, a través del ensayo a flexión de cuatro puntos según la norma ASTM D198-08 [3]. Se evalúa el comportamiento carga-desplazamiento y la resistencia a flexión de las vigas. Para el ensayo, se usa un marco rígido que permite apoyar la viga adecuadamente y que soporta un equipo mecánico capaz de aplicar fuerzas transversales sobre la viga para producir momentos de flexión (ver Fig. 5).

Durante el ensayo a flexión de cuatro puntos, se aplicó una carga con una tasa de control de desplazamiento con el fin de lograr la ruptura de las vigas entre 5 y 15 minutos. Los ensayos se detuvieron cuando una de las siguientes condiciones se alcanzó: la carga llegó al máximo y se redujo sin recuperación o cuando el desplazamiento excedió 50 mm. Los resultados experimentales fueron analizados y comparados con un modelo teórico (ver Fig. 6).

Se usa el modelo de Euler-Bernoulli. Este modelo se acepta y se utiliza, por los entes normativos y por las empresas productoras, en el estudio de las vigas de madera sometidas a flexión. Para determinar las propiedades mecánicas de las vigas, se utilizaron las siguientes ecuaciones del modelo teórico:

$$\sigma_{máx} = M_{máx}\,\frac{c}{I} \tag{1}$$



Figura 5. Ensayos de flexión de cuatro puntos.
Fuente: Los autores

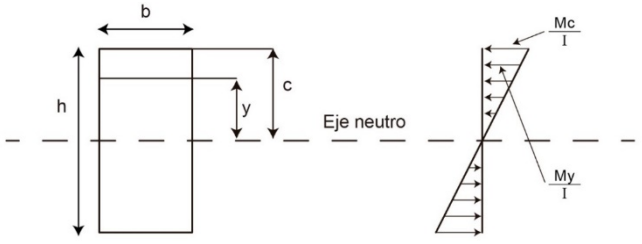


Figura 6. Tensiones de flexión en la viga.
Fuente: Los autores

$$c = \frac{h}{2} \tag{2}$$

$$I = \frac{bh^3}{12} \tag{3}$$

$$M_{máx} = \frac{PL}{3} \tag{4}$$

$$E = \frac{PL^3}{24I}\left(\frac{23}{27}\right)\frac{1}{\delta_{máx}} \tag{5}$$

$\sigma_{máx}$: Resistencia a flexión de la viga en MPa
$M_{máx}$: Momento máximo en N-mm
c : Mitad de la altura en mm
h : Altura de la viga en mm
I : Inercia de una viga con sección rectangular en mm^4
b : Anchura de la viga en mm
2P : Carga máxima en N
L : Longitud de la viga en mm
E : Módulo de elasticidad en MPa
$\delta_{máx}$: Desplazamiento máximo de la viga en el centro de la luz en mm

Es necesario mencionar que se desprecia el desplazamiento producido por el esfuerzo cortante. Con la geometría propuesta y con las propiedades mecánicas verificadas en las planchas de madera con ensayos y en las vigas con el ultrasonido, se determinó que el desplazamiento por cortante es menor que el 2% del desplazamiento total en el centro de la luz. Con los datos experimentales y las ecuaciones 1 a 5 se determinan el módulo de elasticidad y la resistencia a flexión de las vigas estudiadas. Se ensayaron 30 vigas de madera laminada no reforzadas y se registraron las curvas de carga versus desplazamiento máximo en el centro de la luz (ver Fig. 7).

Se ensayaron igualmente 30 vigas de madera laminada reforzadas con pletinas metálicas dentadas y se registraron las curvas de carga versus desplazamiento máximo en el centro de la luz (ver Fig. 8). El comportamiento de todas las vigas de madera laminada sin reforzar y reforzadas con pletinas metálicas dentadas fue perfectamente elástico. La ruptura siempre se produjo en planchas sometidas a tracción en la vecindad a las anomalías o defectos.

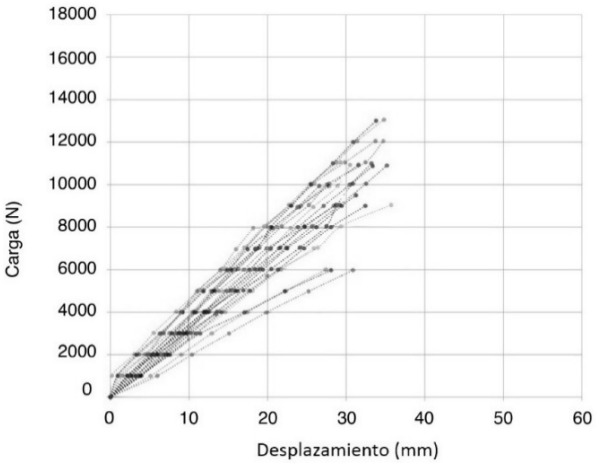


Figura 7. Curva carga-desplazamiento vigas de madera laminada Glulam no reforzadas, ensayos 1 a 30.
Fuente: Los autores

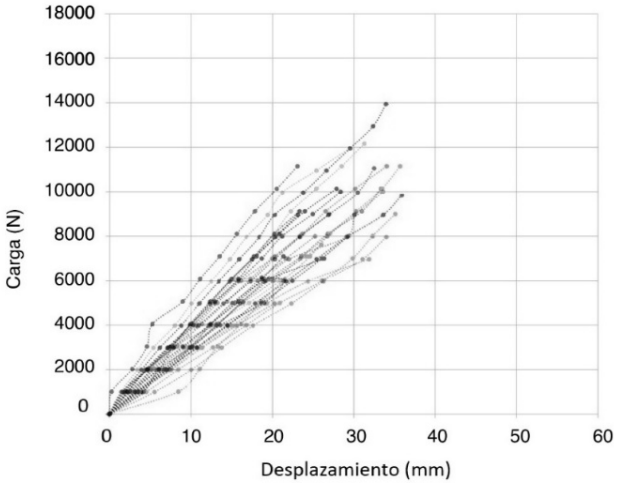


Figura 8. Curva carga-desplazamiento vigas de madera laminada Glulam reforzadas con pletinas metálicas dentadas, ensayos 1 a 30.
Fuente: Los autores

Tabla 6.
Resumen de propiedades de vigas de madera laminada Glulam no reforzadas y vigas de madera laminada Glulam reforzadas con pletinas metálicas

	Vigas de madera laminada Glulam no reforzadas	**Vigas de madera laminada Glulam reforzadas con pletinas metálicas dentadas**
Número de ensayos	30	30
Resistencia promedio a flexión (MPa)	44	44
Coeficiente de variación (%)	26	24
Valor característico de la resistencia a flexión (MPa)	26	30
Módulo de elasticidad promedio (MPa)	13114	13150
Coeficiente de variación (%)	27	27
Valor característico de módulo de elasticidad (MPa)	8489	8729

Fuente: Los autores

Se estiman también los valores característicos del módulo de elasticidad y de la resistencia a flexión de cada grupo de vigas estudiado. Los valores característicos definidos en el Eurocódigo 5 [11] corresponden al quinto percentil. Se espera entonces que en todas las muestras de la población ensayada solamente el 5% tenga un valor más bajo que el característico. Los valores de resistencia a flexión característicos pueden usarse en el diseño estructural de la viga por resistencia última. Otro parámetro importante en el diseño estructural es el módulo de elasticidad.

Para el análisis y diseño de los elementos, se recomienda considerar el valor del módulo de elasticidad característico, con el fin de garantizar mayor seguridad a la estructura. Utilizar el módulo de elasticidad promedio equivale a aceptar una probabilidad alta de que el módulo de elasticidad real esté por debajo del considerado. Por ello, el módulo de elasticidad promedio solo se considera adecuado para la estimación de las deformaciones. Se muestra entonces el módulo de elasticidad característico y el módulo de elasticidad promedio para cada grupo de vigas estudiado. Se estimó además el incremento en la resistencia aportado por el refuerzo. En la Tabla 6 se muestran las propiedades de las vigas de madera laminada no reforzadas y de las vigas de madera laminada reforzadas con pletinas metálicas dentadas.

El valor característico de la resistencia a flexión de las vigas de madera laminada reforzadas con pletinas metálicas dentadas aumenta 16 % respecto a las vigas de madera laminada no reforzadas. El valor característico del módulo de elasticidad de las vigas de madera laminada reforzadas con pletinas metálicas dentadas aumenta 3 % respecto a las vigas de madera laminada no reforzadas.

La Tabla 7 muestra adicionalmente las propiedades mecánicas de las vigas de madera laminada sugeridas por el Eurocódigo 5 [11].

Aunque los valores de resistencia promedio en los diferentes tipos de vigas estudiados son prácticamente iguales, se presenta un aumento en los valores característicos de las vigas reforzadas con pletinas metálicas dentadas al considerar el quinto percentil. De ahí su clasificación con relación al Eurocódigo 5 [11]. Las vigas de madera laminada no reforzadas estarían clasificadas entre las clases GL 24 y GL 28 según su valor característico de resistencia a flexión (26 MPa) y las vigas de madera laminada reforzadas con pletinas metálicas dentadas estarían clasificadas entre las categorías GL 28 y GL 32 según su valor característico de resistencia a flexión (30 MPa). Se evidencia, como consecuencia de la homogeneización del comportamiento mecánico de la viga, que la utilización de las pletinas metálicas dentadas aporta incrementos importantes en las propiedades mecánicas de las vigas y una mejor clasificación estructural. Es necesario resaltar que los fabricantes de vigas de madera laminada deben entregar un certificado de prestaciones válido para una especie de madera en particular basados en un estudio experimental como el mostrado en esta investigación.

Tabla 7.
Propiedades mecánicas de las vigas de madera laminada Glulam sugeridas por el Eurocódigo 5

Clase	**GL 24**	**GL 28**	**GL 32**
Valor característico de la resistencia promedio a flexión (MPa)	24	28	32
Valor característico de módulo de elasticidad (MPa)	9400	10200	11100
Módulo de elasticidad promedio (MPa)	11600	12600	13700
Densidad característica (kg/m^3)	380	410	430

Fuente: Los autores

4. Conclusiones

Con esta investigación, se determinó el comportamiento de vigas de madera laminada Glulam por medio de un análisis teórico y una validación experimental. Se estimó el incremento en la resistencia y el aumento de la rigidez de las secciones de madera laminada reforzadas con pletinas metálicas dentadas. La variabilidad de los resultados experimentales se debe a la presencia de defectos (nudos y otros) presentes en las planchas de madera de *Licania campestre*. Todas las vigas presentan un comportamiento perfectamente elástico, al verificarse la linealidad de las curvas carga-desplazamiento, y pueden ser analizadas con un modelo teórico basado en las hipótesis de Euler-Bernoulli. No se requiere el uso de modelos teóricos no lineales, ni de modelos elasto-plásticos. Dadas las características de la unión entre la madera y el refuerzo, se puede decir que la sección de madera laminada reforzada con pletinas metálicas dentadas es una sección perfectamente solidaria con un incremento considerable en la resistencia característica del elemento tratado. La mejora de las propiedades mecánicas de las vigas de madera laminada reforzada con pletinas metálicas dentadas se puede reflejar en una disminución de la sección de los elementos y, como consecuencia de esto, en un menor peso de la estructura. Además, se presenta un aumento en la homogeneidad del elemento disminuyendo así la posibilidad de que se presenten fallas inesperadas. Igualmente, se incrementan los valores característicos de resistencia y de rigidez. La técnica de reforzamiento con pletinas metálicas dentadas propuesta en este artículo presenta evidentes ventajas desde el punto de vista del comportamiento mecánico de las vigas. El uso de las pletinas metálicas dentadas es entonces una alternativa técnica de reforzamiento viable en el campo de los elementos estructurales de madera a flexión.

Este y otros estudios de este tipo podrían ayudar a la inclusión de normas para elementos de madera laminada Glulam en el Reglamento Colombiano de Construcción Sismo Resistente.

Referencias

[1] American society for testing and materials (ASTM). Standard methods of testing on small clear specimens of timber. D143-94. ASTM Annual Book of Standards. West Conshohocken, Pa, 2006.

[2] American society for testing and materials (ASTM). Standard test methods for specific gravity of wood and wood-based materials. D2395-02. ASTM Annual Book of Standards. West Conshohocken, Pa, 2006.

[3] American society for testing and materials (ASTM). Standard test methods of static tests of lumber in structural sizes. D198-08. ASTM Annual Book of Standards. West Conshohocken, Pa, 2009.

[4] American society for testing and materials (ASTM). Standard practice for sampling and data-analysis for structural wood and wood-based products. D2915-10. ASTM Annual Book of Standards. West Conshohocken, Pa, 2003.

[5] American society for testing and materials (ASTM). Standard test method for strength properties of adhesive bonds in shear by compression loading. D905. ASTM Annual Book of Standards. West Conshohocken, Pa, 2008.

[6] Borri, A., Corradi, M. and Speranzini, E., Reinforcement of wood with natural fibers, Compos. Part B Eng, 53, pp. 1-8, Oct. 2013. DOI: 10.1016/j.compositesb.2013.04.039

[7] Bragdon, M.M., Behavior and design of FRP reinforced longitudinal glulam deck bridges. BS Univ. Maine, 2002.

[8] Daud, N. and Shanks, R., Epoxy–silica composites replicating wood cell structure, Compos. Part Appl. Sci. Manuf, 62, pp. 11-15. Jul. 2014.

[9] Echavarría, C., Correa, C. and Echeverri, C., Conexiones pernadas de madera reforzadas con placas dentadas de acero, DYNA, 77(164), pp. 98-108, Dec. 2010.

[10] Echavarría, C., Jiménez, L. and Ochoa, J.C., Bamboo-reinforced glulam beams: an alternative to fiberglass-reinforced glulam beams, DYNA, 79(174), pp. 24-30, Aug. 2012.

[11] Eurocode 5, Design of timber structures EN 1995-1-1:2004 (E) European Committee for Standardization, Brussels, Belgium, 2004.

[12] Fiorelli, J. and Dias, A.A., Analysis of the strength and stiffness of timber beams reinforced with carbon fiber and glass fiber, Mater. Res, 6(2), pp. 193-202, Jun. 2003. DOI: 10.1590/S1516-14392003000200014

[13] Fournier, Z.R., Construcción sostenible y madera: realidades, mitos y oportunidades, Tecnol. en Marcha, 21(4), pp. 92-101, Oct. 2008.

[14] Fueyo, J.G., Cabezas, J.A., Domínguez, M. and Rubio, M.P., Análisis de tensiones en uniones de tres barras de cerchas ligeras de madera realizadas con placas-clavo, Inf. Tech, 20(6), pp. 45-56, Jan. 2009. DOI: 10.4067/S0718-07642009000600007

[15] Ghaffar, S.H. and Fan, M., Structural analysis for lignin characteristics in biomass straw, Biomass Bioenergy, 57, pp. 264-279, Oct. 2013. DOI: 10.1016/j.biombioe.2013.07.015

[16] Humphrey, M.F., An investigation into the rehabilitation of timber structures with fiber composite materials; Queensland University of Technology, Brisbane, 2004.

[17] Mascia, N.T. and Mayer, R.M., Analysis of wood laminated beams reinforced by natural fibers, in Structural Health Assessment of Timber Structures; Trento, Italy: Trans Tech Publications, 778, pp. 553-560, 2013.

[18] NSR-10, Reglamento colombiano de construcción sismo resistente 2010. Colombia: Diario Oficial. Decreto 926 del 19 de marzo de 2010

[19] Raftery, G.M. and Whelan, C., Low-grade glued laminated timber beams reinforced using improved arrangements of bonded-in GFRP rods, Constr. Build. Mater, 52, pp. 209-220, Feb. 2014.

[20] Reza, S.A., Rehabilitation of timber railroad bridges using glass fiber reinforced polymer composite, West Virginia University, Virginia, 2007.

H.D. Cañola, received both the BSc. degree in Architecture in 2010 and the MSc. degree in Building Construction in 2016 from the Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia. Since 2010 he has been working for consulting companies within the civil engineering sector. Currently, he is professor in the Faculty of Architecture, Institución Universitaria Colegio Mayor de Antioquia. His research interests include: composite materials, timber structures and retrofit of structures.
ORCID: 0000-0002-0488-5817

C. Echavarría, received the BSc. degree in Civil Engineering in 1995 from the Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia, both the MSc. degree in Timber Structures in 2001 and the PhD degree in Sciences in 2004 from the École Polytechnique Fédérale de Lausanne Switzerland. From 1995 to 1999, he worked for consulting companies within the civil engineering sector and since 2007 has been working for the Universidad Nacional de Colombia. Currently, he is associate professor in the Faculty of Architecture, Universidad Nacional de Colombia. His research interests include: composite materials, analytical modeling of joints, timber structures and retrofit of structures.
ORCID: 0000-0002-2885-1945

B. Echavarría, received both the BSc. degree in Civil Engineering in 2005 and the MSc. degree in Building Construction in 2016 from the Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia. Since 2005 she has been working for consulting companies within the civil engineering sector. Her research interests include: composite materials, analytical modeling of joints, timber structures and retrofit of structures.
ORCID: 0000-0002-4707-9006

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Efficiency of cement-admixture systems in mortars with binary and ternary Portland cements

María Eva Sosa [a], Yury Andrés Villagrán Zaccardi [a,b], Juan Pablo Peralta [a] & Claudio Javier Zega [a,b]

[a] *Laboratorio de Entrenamiento Multidisciplinario para la Investigación Tecnológica (LEMIT). La Plata, Argentina. ingmesosa@gmail.com*
[b] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina. cj.zega@conicet.gov.ar*

Received: July 19th, de 2017. Received in revised form: October 30th, 2017. Accepted: December 11th, 2017

Abstract
Compared to conventional concrete, high-performance concrete production offers such benefits as greater ease of placement, smaller sections, improved finishing and higher strength and durability. For the design of these types of concretes, it is advisable to carry out studies on pastes or mortars in order to evaluate admixture - cementitious material compatibility. This evaluation entails verifying fresh state properties and evolution over time. The aim of this work is to evaluate the behavior of mortars made with different water reducers as well as binary and ternary cements, and their connection to the properties they acquire in hardened state. Fluidity in the fresh state and absorption, density and compressive strength in the hardened state were evaluated. The results show that the impact of superplasticizers is not restricted to the fresh state, as influence on the development of the degree of hydration and compacity can also be noticed.

Keywords: cement; binary; ternary; superplasticizer; mortar; fluidity; compressive strength.

Eficiencia de sistemas cemento-aditivo en morteros con cementos Portland binarios y ternarios

Resumen
La elaboración de hormigones de alta performance ofrece beneficios tales como mayor facilidad de colocación, secciones reducidas, mejoras en la terminación, mayor durabilidad y resistencia comparativamente con hormigones convencionales. Para el diseño de dichos hormigones, es aconsejable realizar estudios en pastas o morteros para evaluar la compatibilidad aditivo reductor de agua-material cementiceo. Dicha evaluación implica la verificación de propiedades del estado fresco y su evolución en el tiempo. El objetivo de este estudio consiste en evaluar el comportamiento de diferentes sistemas aditivo reductor de agua-cemento en morteros elaborados con diferentes cementos binarios y ternarios y su conexión con las propiedades del estado endurecido. La fluidez en estado fresco, densidad, absorción y resistencia a compresión en estado endurecido fueron evaluadas. De los resultados obtenidos surge que la influencia de los superplastificantes no es restringida al estado fresco, observándose también influencia en el desarrollo del grado de hidratación y en la compacidad.

Palabras clave: cemento; binario; ternario; superplastificante; mortero; fluidez; resistencia a compresión.

1. Introduction

The use of high range water reducer admixtures has become a common practice since the 1970s. These types of admixtures allow for the reduction of water- to-cementitious material ratio (w/cm) of the mixes, which results in stronger concretes without affecting workability. But water reducers can also be applied to increase the fluidity of mixtures, scarcely affecting strength (maintaining the w/cm ratio). This has enabled the emergence and application of self-compacting mixes.

Water-reducing admixtures are polymers with very high molecular weight, which act when they are adsorbed into the surface of cement particles, producing particle dispersion and reducing the amount of water required for a given consistency level. There are different types of

How to cite: Sosa, M.E., Villagrán-Zaccardi, Y.A., Peralta, J.P. and Zega, C.J., Efficiency of cement-admixture systems in mortars with binary and ternary Portland cements. DYNA, 85(204), pp. 134-142, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

superplasticizers (SPs), with varying fluidizing power and action mechanisms in the cementitious system. According to their composition, they can be based on sulfonated melamine-formaldehyde condensates, sulfonated naphthalene formaldehyde condensates, modified lignosulfonates (MLS) or acrylic polymers [1]. The first three types of superplasticizers disperse by electrostatic action, while the last kind disperses predominantly by steric action, generally with increased fluidizing power [2].

In contact with water, cement particles release a high number of ions that dilute from their surface. Due to the great affinity between water and cement, cement particles tend to form flocs that prevent particle dispersion and retain water in their structure. Retained water contributes inefficiently to cement hydration and strength development. In this sense, SPs create repulsive forces among cement particles that prevent flocculation and promote mobility. Recent studies have confirmed the influence of different types of SPs on cement hydration and the corresponding affectation of the microstructure of the hardened material [3].

SP efficiency is defined as the capacity to increase the flow of a mix and its persistence over time. It not only depends on the superplasticizer and cement compositions but also on the manner in which they are mixed (mixing capacity, mode of incorporation, mixing time) [4].

Cement characteristics, such as fineness, composition (contents of C_3A, calcium sulphate, and alkalis), and types of mineral additions contained, are key factors for the interaction with SP [5,6]. Moreover, important characteristics of SP include molecular weight and distribution, length of the polymeric chain and, in the case of naphthalene-based admixtures, the nature of the counter-ion included in them [2,6].

The anhydrous phases and hydration products of cement do not adsorb the same amount of SP [5]. The C_3A phase displays higher adsorption capacity of admixtures, due to its more positive zeta potential values, than C_3S and C_2S phases. In the presence of gypsum, admixtures and sulphates compete for adsorption on C_3A, with a more favourable reaction with sulphates [5]. Therefore, more quantity of admixture remains available in the aqueous phase to exert a flowing effect on the paste. In this sense, the amount of sulphate in solution depends on both the w/cm ratio and temperature [7]. Thus, indirect influence by the amount of water on the efficiency of the admixture would be revealed. This is also helpful to explain the differences in the efficiency of admixtures with different cement types.

Nowadays, the cement market is dominated by cement types other than Ordinary Portland Cement (O). Even O itself can contain minor constituents different from clinker or setting regulator (up to 5 % of blast furnace slag according to IRAM 50000). Some of the most common blended cements are Blended Portland Cement (B), e.g. with up to 35 % admixtures (including a combination of limestone powder, blast furnace slag and natural pozzolans or at least two of them), and Pozzolanic Portland Cement (P), e.g. with up to 50 % of natural pozzolan.

Adding natural pozzolan to cement does not necessarily modify water demand for a given consistency level [8]. The effectiveness of the different types of water reducers has been previously addressed for the particular case of pozzolan-admixed cement type [9]. However, in the particular case of polycarboxylic-based SP, this efficiency has been reported to be lower for pozzolanic cements than for limestone or slag blended cements [10]. As regards SPs efficiency to increase strength by reducing w/cm ratio, similar results for O, B and P have been obtained by Erdogdu [11]. In terms of the influence of slag, it has been determined that its interparticle forces are stronger than those of Portland clinker particles [12]. However, the efficiency of SP on cement is increased with slag content, mainly due to the greater dispersing effect that slag particles have [2,13]. This higher efficiency of SP has also been confirmed by concrete workability with replacement ratios by slag of 15-20 % [14].

On the other hand, mineral admixtures do not contain C_3A, and therefore they act as diluting agents of the C_3A content of clinker, causing lower net adsorption by this phase and a corresponding lower admixture demand for a given consistency in comparison with non-blended cement. However, significant adsorption of naphthalene and melamine based admixtures, and vinyl copolymer on slag has been reported [15], which implies that a reduction in the demand of these admixtures is not directly related to clinker replacement ratio. Moreover, recent studies have shown that the type of SP plays a significant role in the stability of ettringite formed during hydration [16]. This affinity is affected by cement aging, depending on the C_3A content of cement [17]. Then, the efficiency of SPs with aged cements would be more stable for blended cements than for OPC.

Concerning flowability loss over time, there are no reasons for which incorporation of admixtures, such as slag or natural pozzolans, should modify the efficiency of an SP. However, in order to recover flow level after a certain mixing time, while slag-containing concretes need admixture re-doses similar to those of concrete without admixtures, it has been informed that natural pozzolans may require slightly higher re-dosing [18]. On its own, limestone powder accelerates cement hydration [19] and could, as a result, accelerate flowability loss rate. On the other hand, limestone reacts partially with C_3A to form new carboaluminates [20]. This in turns also contributes to a reduction in the degree of adsorption of the admixture and an increase in its efficiency. The net impact will be the result of which of the two effects is more predominant.

For optimizing SP/cement, the maximum percentage of SP to be used should be determined (once the w/cm ratio has been decided) based on the saturation point for the water-cement-admixture system. This is evaluated using the flow level in pastes or mortars. If SP dosage exceeds the saturation point, some issues such as setting time delay, segregation or increase in the viscosity of the mix, may occur, causing few significant changes in flow value but subsequently higher costs [5]. However, it is common to study system compatibility only in the fresh state and not to link it with properties in the hardened state, disregarding the fact that SP could affect strength development when used at dosages lower than the saturation point.

The aim of the present study is to evaluate the efficiency of water reducer admixture-cement systems in mortars made with different binary and ternary Portland cements. Different

properties in the fresh state and their link with some properties in the hardened state are also assessed. The analysis is carried out from an engineering point of view, considering parameters which may affect the SP dosage for a target consistency.

2. Experimental

2.1. Materials and mixtures

Four Portland cement types were evaluated in this study: Ordinary (from two origins: O_1 and O_2), Blended (B) (containing approximately 17 % of limestone powder and 12 % of slag) and Pozzolanic (P) (containing approximately 40 % of natural pozzolan). Table 1 presents the physical and mechanical properties and chemical compositions of the studied cements. Table 2 shows the potential Bogue mineralogical compositions of O_1 and O_2.

The properties of the chemical admixtures under evaluation, a plasticizer (M), and three superplasticizer (S, P, and V) are presented in Table 3. Two river siliceous sands (fine and coarse) with different fineness modulus were selected (Table 4).

Table 1.
Physical and mechanical properties of cements. Source: The authors.

Physical and mechanical properties	**O_1**	**O_2**	**P**	**B**
Blaine specific surface area (m^2/kg)	320	311	312	326
Material retained on sieve 75µm (%)	1.3	2.4	2.1	3.0
Density (g/cm^3)	3.11	3.13	2.95	3.08
Compressive strength 2d (MPa)(*)	25.6	20.4	18.9	12.1
Compressive strength 28d (MPa) (*)	45.2	44.4	41.8	40.0
Chemical composition	**O_1**	**O_2**	**P**	**B**
Loss on ignition (%)	2.14	0.87	1.20	7.96
Insoluble residue (%)	2.50	2.65	21.65	2.97
SO_3 (%)	2.41	1.73	1.40	2.12
MgO (%)	2.76	1.60	1.01	2.68
SiO_2 (%)	19.9	19.86	14.79	19.00
Fe_2O_3 (%)	4.00	4.19	3.09	3.49
Al_2O_3 (%)	4.30	4.11	4.77	4.38
CaO (%)	60.3	63.82	50.32	57.44
Na_2O (%)	0.14	0.01	0.16	0.33
K_2O (%)	0.85	0.93	1.24	0.80
Cl^- (%)	0.01	0.03	0.03	0.010

(*) Determined in accordance with ASTM C305 (w/c=0.50)
Source: The authors.

Table 2.
Bogue's potential compositions of Ordinary Portland cements.

Cement	**Mineralogical phase**	**Content (%)**
O_1	C_3S	52.8
	C_2S	17.4
	C_3A	4.6
	FAC_4	12.2
	Total	87.0
O_2	C_3S	68.8
	C_2S	5.6
	C_3A	3.8
	FAC_4	12.7
	Total	91.0

Source: The authors.

Table 3.
Properties of the admixtures.

Admixture	**Density**	**Color**	**Base composition**	**Solid residue* (%)**
M	1.14	Dark brown	Modified lignosulfonate	52.7
D	1.16	Dark brown	Sulfonated naphthalene	49.3
V	1.08	Amber	Polycarboxylate	42.7
S	1.12	Dark brown	Modified lignosulfonate	45.7

* Determined by drying at 60ºC, according to ASTM C 1017
Source: The authors.

Table 4.
Size distribution of used sands.

Sieve (µm)	**Accumulated Passing (%)**	
	Fine Sand	**Coarse Sand**
4750	100	100
2360	100	98
1180	100	88
600	99	45
300	77	6
150	16	1
F.M.	1.08	2.61

Source: The authors.

For comparative purposes, reference non-admixed mortars were produced for the four cement types so as to evaluate the properties in their hardened state. Then, efficiencies of superplasticizers in varying dosages and with constant proportions of reference mixes were evaluated.

Among these, the mortars that showed the best performance in the fresh state were replicated, including a combination of superplasticizer and the plasticizer (M).

Table 5 shows mix proportions for mortars. Nomenclature corresponds to the cement and type of admixture used (only a letter is indicated for reference mortars, i.e. non-admixed mortars). The mortar mixes were prepared in accordance with ASTM C305. The dose of admixtures is expressed in % w/w of cement.

2.2. Testing methods

Flow and consistency of fresh mixes were determined by the flow test (Fig. 1) and the slump test (Fig. 2), respectively. To evaluate the active period of SPs, these tests were performed immediately after mixing and 30 minutes after the cement got in contact with water.

The flow test is commonly applied to select materials, and to proportion pastes and mortars for self-compacting concretes [2, 21-24], but it has not been standardized yet. This method is applied with the aid of a frustum cone. The cone is placed on a plane, smooth, levelled and non-absorbent surface, and filled with the mortar to be tested. The mould is then lifted, and the mortar flows freely. The value of the flow is the average of the two perpendicular measurements of the diameter (Fig. 1).

Table 5
Proportioning of mortars (kg/m^3).

Materials	B	O_1	O_2	P	B-S	O_1-S	O_2-S	P-S	P-D	P-V	P-MD	O_2-MD	P-MV
Water	150	150	150	150	150	150	150	150	150	150	150	150	150
Cement	379	381	379	381	379	379	381	381	381	381	381	381	381
Fine sand	182	185	185	177	182	185	185	177	177	177	177	188	188
Coarse sand	721	723	723	710	721	723	723	710	710	710	710	726	726
Plasticizer	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.4	0.4	0.4
Superplasticizer	-	-	-	-	0.6; 1.5	0.6; 1.5	0.6; 1.5	0.6; 1.0; 1.2; 1.5	0.5; 1.0; 1.2; 1.5	0.5; 1.0; 1.2; 1.5	0.5; 1.0; 1.2; 1.5	0.5; 1.0; 1.2; 1.5	0.5; 1.0; 1.2; 1.5

Source: The authors.

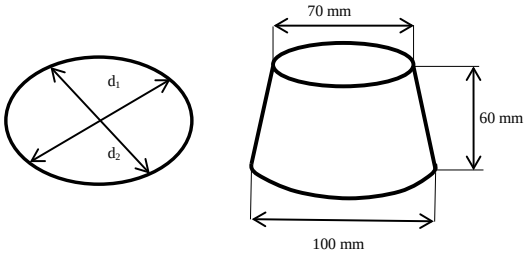


Figure 1. Flow Mold.
Source: The authors.

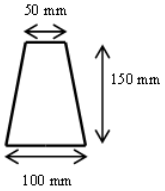


Figure 2. Abrams' mini cone.
Source: The authors.

The slump evaluation was carried out using an "Abrams mini cone" (Fig. 2). This is a scaled version of the standard Abrams cone, corresponding to 1/8 of its volume. The methodology used followed regulation NCh 2257/3 [25].

For assessments in the hardened state, prismatic specimens (4 cm x 4 cm x 16 cm) were moulded for each one of the studied mortar mixes. They were then cured under water saturated with lime at 23 ± 2 °C until tested.

Compressive strength at 7, 28 and 90 days as well as density and water absorption at 28 days were evaluated. The determination of density and absorption was carried out according to ASTM C642 and compressive strength was determined following ASTM C349.

3. Results and analysis

For the sake of clarity, the results are presented in two graphs: in a) mortars with SPs (S, V and D) and b) mortars with plasticizer and SPs (MV-MD).

3.1. Fresh State

Fig. 3 shows flow in relation to the admixture dose. From the comparison of the two mortars with ordinary Portland cement (O_1 and O_2), it can be observed that O_1 shows higher fluidity than O_2, in correspondence with a lower C_3A/calcium sulphate (1.91 versus 2.20 for O_1 and O_2, respectively computed from contents of SO_3 and C_3A, Tables 1 and 2). Therefore, the higher flow value for O_1 may be explained as the result of a higher amount of admixture available to disperse C_2S and C_3S phases.

Also in Fig. 3, admixture S shows better performance with cement O_1 and B, while compatibility with the other cement types is limited. This is also in agreement with the

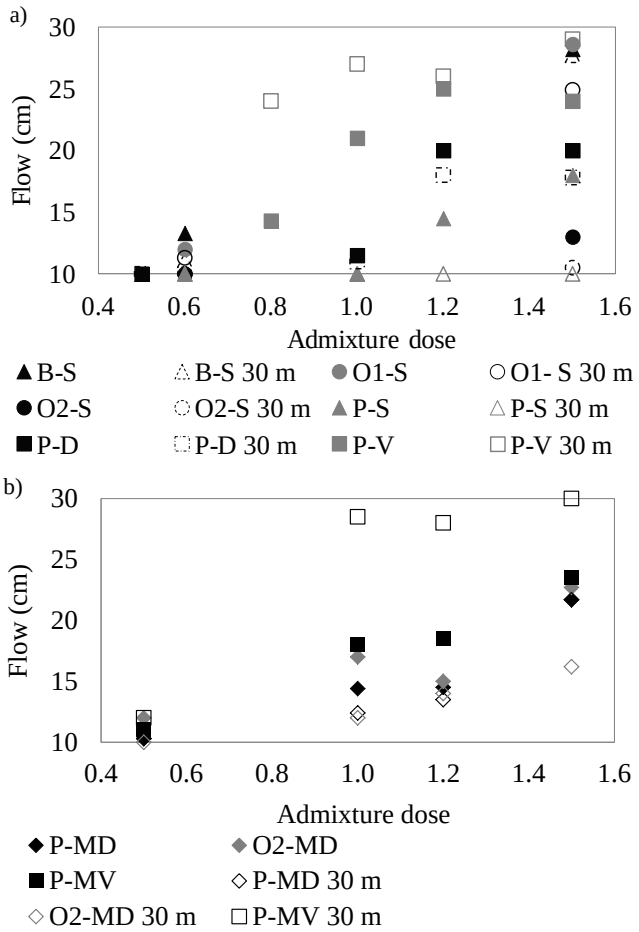


Figure 3. Initial and 30 min flows of a) mortars with SP and b) mortars with plasticizer and SP as a function of the admixture dose.
Source: The authors.

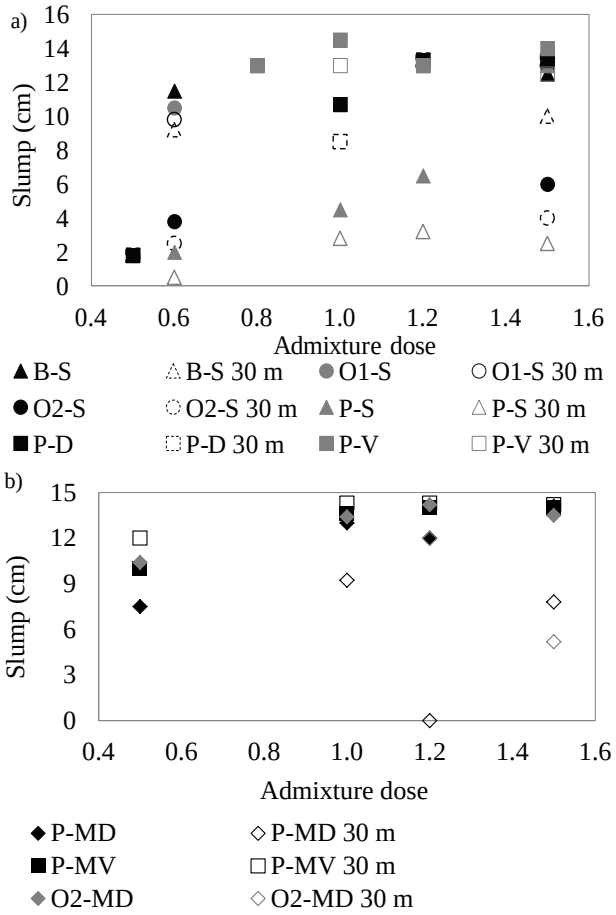


Figure 4. Initial and 30 min flow of a) Mortars with SP and b) mortars with plasticizer and SP as a function of the admixture dose.
Source: The authors.

fact that the other cement types showed a higher $[Al_2O_3]/[SO_3]$ (however, although for blended cement an estimation of C_3A content from Bogue equation is not possible, a qualitative analysis is still viable).

Therefore, the most probable reason for such compatibility is chemical composition. Moreover, some cement grinding aid admixtures are known to have an important effect on the compatibility with SPs, but this hypothesis could not be corroborated in this study as only commercial cements were analyzed and this information is not provided by manufacturers.

On the other hand, the admixture V with cement P shows increased flow values for 30-minute periods in comparison with those determined immediately after mixing, which shows excellent compatibility with cement P.

When mortars made with plasticizer and SP are compared with those made with SP only, an improvement can be appreciated in the flow parameters for the combinations P-MD (with respect to P-D) (Fig. 3). Regarding the combination P-MV, an incompatibility between admixtures is observed, as the combined action shows less efficiency than that obtained for the P-V series; this is attributed to the different origins of their compositions (Table 3).

Fig. 4 presents the results of the slump as a function of the admixture dose. It can be observed that, for mortars with plastic consistency, such as P-D, P-S, O1-S, O2-MD, and P-MV, flow values rise with increasing admixture dose. This greater fluidity of the mortars with 1 % of admixture, in comparison with those that have a lower admixture dose, was not revealed by the results from the flow test (Fig. 3). This is due to the different range of sensitivity of both methods. For the P-S series, a noticeable decline in the values of the slump is observed at 30min, which also rises with increasing admixture dose.

Fig. 5 shows relative slump loss 30 minutes after mixing in relation to the admixture dose. In almost all cases, it may be observed that the smallest slump loss is obtained for a dose of admixture between 1 and 1.2 %, which indicates the saturation point for the cement-admixture systems. Negative values in Fig. 5 show that slump after 30 minutes was higher than the initial value. As observed from the fluidity tests, this is the case of P-MV mortars and, to a lesser extent, P-V mortars.

Fig. 6 shows the relationship between the values of slump and flow. It may be observed that for most of the stiff mixes, slump reveals great differences in consistency among mortars, while lower differences for slump values are obtained for increasing values of flow.

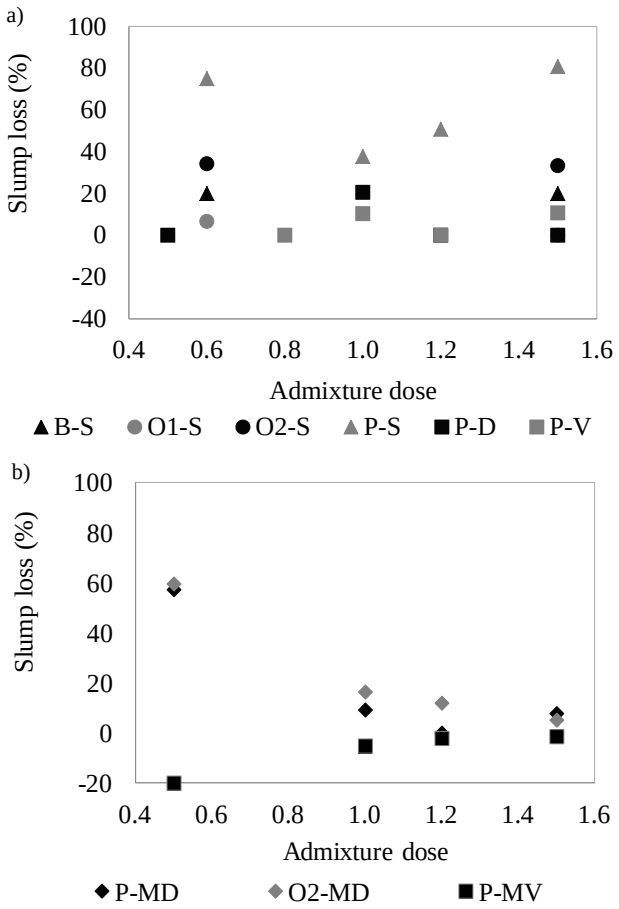


Figure 5. Relationship between of slump losses and admixture dose for a) Mortars with SP and b) mortars with plasticizer and SP.
Source: The authors.

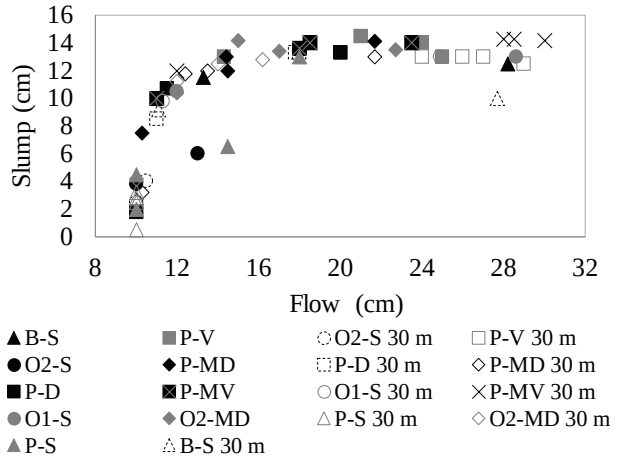


Figure 6. Relationship between slump and flow. Source: The authors.

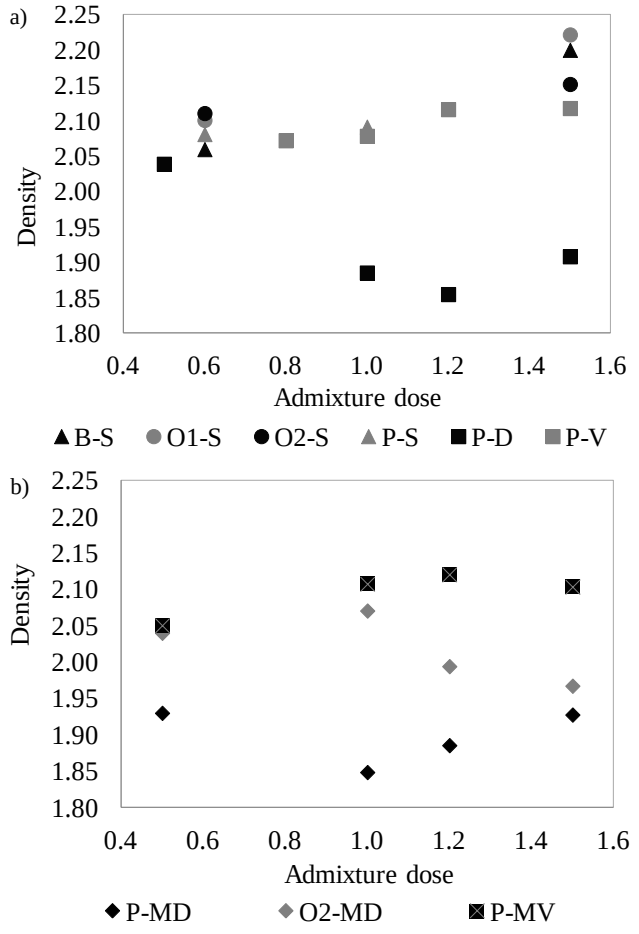


Figure 7. Density saturated surface dry condition for a) mortars with SP and b) mortars with plasticizer and SP.
Source: The authors.

In the case of concrete, the slump method is considered representative of the level of consistency for values up to 60 % of the cone height (18 cm). The same criterion applied to mortars leads to a maximum slump of 9 cm. As it can be noted even for the outlier points (P-S, O_2-S, and B-S 30m), the results obtained can be consistently divided based on this limit. The use of Abrams mini cone is adequate for mortars with plastic consistency, as it shows higher sensitivity for differences within this range of values, and the flow test method is more appropriate for evaluating the consistency of fluid mortars.

3.1. Hardened state

Fig. 7 shows density values for hardened mortars determined at saturated surface dry condition. It is clear that the use of admixtures may cause air occlusion and originate variations in the density of mortars. It can also be noticed that, except for mortars with admixture D, in all cases the reduction in density, compared to the reference mortar (P= 2.16; B= 2.16; O_1= 2.15; O_2= 2.16 g/cm^3), is less noticeable with increasing admixture dose. This fact can be explained by the net effect of the competing factors of improved compactability and increased air content, caused by the admixture.

Fig. 8 shows values for 24 hours water absorption. In the case of admixed mortars with cement P, water absorption increases for all mixes between 35 % and 70 % more than for the reference mortar (P= 4.94 %). Admixed mortar mixes

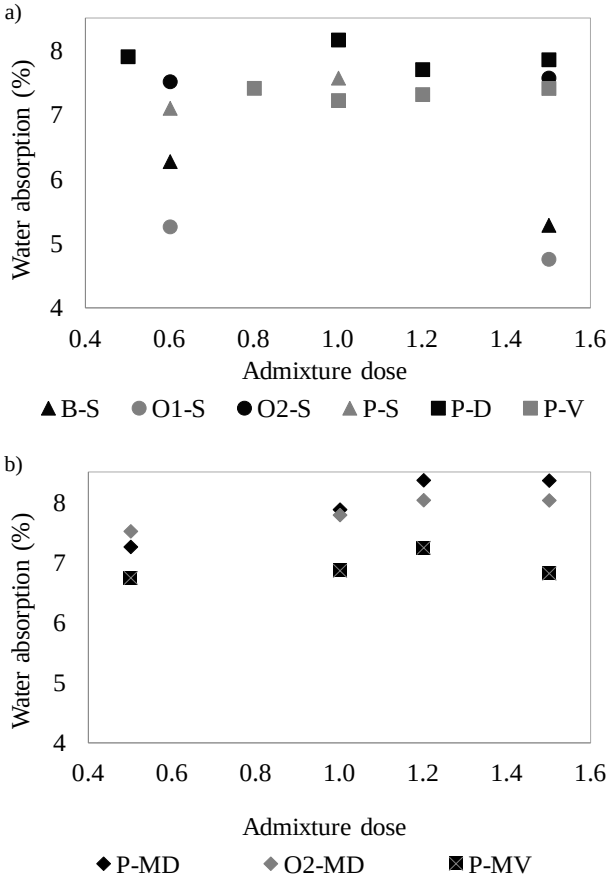


Figure 8. Water adsorption for a) mortars with SP and b) mortars with plasticizer and SP.
Source: The authors.

Table 6.
Compressive strength (MPa).

Age (days)	O_1	O_2	P	B	O_2-S-6	O_2-S-15	P-S-6	P-S-10	P-S-12	P-S-15
7	30.7 (1.3)	38.3 (3.2)	40.3 (2.0)	29.4 (0.5)	31.3 (7.1)	41.1 (3.1)	38.1 (1.0)	40.0 (1.8)	40.8 (1.3)	42.5 (3.2)
28	49.1 (1.0)	51.2 (0.5)	51.2 (0.9)	41.0 (3.3)	58.4 (10.7)	56.5 (1.4)	50.0 (0.9)	49.0 (0.5)	41.6 (3.0)	51.8 (1.1)
90	60.7 (2.6)	64.5 (2.7)	59.8 (1.8)	49.8 (2.5)	63.8 (12.8)	65.4 (1.7)	56.4 (1.9)	56.1 (3.8)	52.5 (2.1)	57.7 (6.2)
	O_1-S-6		**O_1-S-15**		**B-S-6**	**B-S-15**	**P-D-5**	**P-D-10**	**P-D-12**	**P-D-15**
7	43.4 (2.1)		43.8 (0.8)		31.2 (3.5)	30.7 (0.9)	38.9 (0.4)	37.7 (0.4)	33.8 (1.8)	35.9 (1.8)
28	59.2 (3.1)		61.6 (4.3)		37.8 (2.7)	41.4 (0.2)	46.4 (0.5)	42.4 (2.0)	37.4 (1.3)	44.8 (1.2)
90	67.4 (3.3)		67.4 (1.3)		48.3 (1.9)	52.5 (3.0)	51.4 (2.3)	53.3 (1.2)	42.2 (5.7)	49.9 (7.6)
	P-MD-5		**P-MD-10**		**P-MD-12**	**P-MD-15**	**P-V-8**	**P-V-10**	**P-V-12**	**P-V-15**
7	43.6 (4.3)		44.8 (0.4)		42.9 (2.0)	43.0 (1.4)	47.3 (2.3)	52.3 (1.0)	51.9 (3.1)	54.3 (1.1)
28	43.0 (10.6)		51.7 (2.5)		50.8 (2.0)	49.6 (0.3)	56.8 (4.7)	63.8 (2.0)	61.9 (1.3)	67.9 (2.3)
90	61.4 (2.2)		58.0 (1.2)		52.4 (3.8)	54.4 (0.8)	71.9 (2.5)	71.0 (2.2)	71.9 (1.7)	78.4 (6.8)
	P-MV-5		**P-MV-8**		**P-MV-12**	**P-MV-15**	**O_2-MD-5**	**O_2-MD-10**	**O_2-MD-12**	**O_2-MD-15**
7	30.1 (0.6)		41.6 (2.3)		40.6 (1.7)	40.6 (1.9)	44.3 (0.9)	43.3 (1.2)	45.5 (1.5)	43.8 (1.6)
28	37.7 (1.4)		47.5 (2.6)		45.8 (1.4)	46.6 (4.8)	49.0 (1.4)	46.0 (1.9)	49.9 (1.4)	49.8 (4.2)
90	51.4 (0.5)		61.1 (6.0)		59.3 (5.7)	58.8 (7.0)	55.5 (4.0)	59.9 (1.3)	58.9 (4.3)	56.4 (4.9)

Source: The authors.

with cement O_2 increase their absorption up to 83 %, compared with the reference mortar (O_2= 4.30 %), independently of the type of admixture used. As in the case of density, this is attributed to the air occlusion caused by the admixtures, which creates macropores and increases water absorption. On the other hand, for mortars with cement types O_1 and B, the adsorptions values of the mortars containing admixtures were similar to or lower than those from the reference mortars (O_1= 5.27 %; B= 6.12 %).

Table 6 shows compressive strength and corresponding standard deviations of mortars determined at 7, 28 and 90 days. Nomenclature includes the admixture dose in ‰ with respect to cement weight. Here it may be observed that series O_2-S-6 shows high standard deviation for the three ages (7, 28 and 90 days), whereas mortars P-S-15, P-D-12, P-D-15, P-V-15 and P-MV-8, P-MV-12 and P-MV-15 show high standard deviation at 90 days, and P-MD-5, at 28 days.

Series O_2-S-6 shows high standard deviations at the three ages. This suggests inadequate compaction of
specimens. A reliable comparative analysis is therefore not possible in this case. What may be observed is that the strength of mortars O_1-S is substantially higher than that of the reference mortar, with decreasing difference for increasing age. This outcome is also presented, to a lesser degree, for P-V mortars in spite of the great compatibility shown in the fresh state. Likewise, the relative strength of P-MD series decreases with test age.

For a more reliable analysis of the influence of admixtures on compressive strength, a statistical analysis through paired values (mortar with admixture – reference mortar) was done for the three ages. The p-values were determined for the null hypothesis of equal mean values for each mortar containing admixture and the corresponding reference mortar. Table 7 shows the results obtained for this analysis. It can thus be observed that mortars O_1-S and P-V show a p-value <0.05 for the three ages assessed, with the same condition for P-MD at 7 and 90 days.

From the statistical analysis (Table 7), it can be seen that mortars O_1-S and P-V show substantially higher compressive strengths than those of reference mortars at the three ages. This may be attributed to improvements in the compaction degree produced by the used admixture and also due to the possible strength accelerator effect of SPs in the cement-admixture system. Conversely, P-D mortars show

significantly lower strengths with respect to the reference mortar at the three ages. This must be attributed to air occlusion in the cement-admixture system, which is consistent with the low density and high water absorption of these mortars in the hardened state. Regarding mortars O_2-

S, inconsistent p-values were obtained for the different ages; therefore, analysis of these results is not possible.

Finally, for the rest of the mortars, p-values do not allow one to discard the null hypothesis, i.e., no statistically significant differences in compressive strength due to the incorporation of these admixtures could actually be identified.

On the other hand, it is noticeable that in mortars where absorption increases with respect to the reference mortar, no effects on the compressive strength were found. This fact suggests the need to carry out studies that evaluate durability behavior in connection with SP doses.

Table 7.
p-values for hypothetical same compressive strengths for admixed and reference mortars.

Mortar	P-value		
	7 days	28 days	90 days
B-S	0.13	0.50	0.70
O_1-S	<0.01	<0.01	<0.01
O_2-S	0.42	0.01	0.72
O_2-MD	<0.01	0.01	<0.01
P-S	0.98	0.72	0.14
P-D	<0.01	<0.01	<0.01
P-MD	0.01	0.20	0.03
P-V	<0.01	<0.01	<0.01
P-MV	0.21	<0.01	0.25

Source: The authors.

4. Conclusions

The following conclusions may be drawn from the results in the fresh and hardened states of mortars elaborated with binary and ternary Portland cements (Ordinary, Blended and Pozzolanic), and using different types of superplasticizer (SPs).

First, maximum fluidity of almost all SPs was found for dosages between 1-1.2 %, independently of the SP composition and type of cement evaluated.

Furthermore, the flow method proved to be appropriate for evaluating the fluidity of mortars with fluid consistency, whereas the Abrams mini cone showed more sensitivity in the case of mortars with plastic consistency, being suitable whenever slump was lower than 9 cm.

In addition to this, an increase in water absorption of admixture mortar, with respect to reference mortars, was noticed in some cement-admixture systems. This fact needs to be considered when the cement-water reducer admixture system is set, due to the implications that increased absorption has in terms of the durability behavior of mixes.

Moreover, the compressive strength of mortars shows that the water reducer can cause increase or decrease, even when the compatibility evaluated in the fresh state is good.

Finally, although the efficiency of cement-admixture systems is commonly adjusted upon the evaluation of fresh properties, the impact of SPs on the properties in their hardened state is derived from the combined effect of air occlusion in the fresh state and the affectation of the degree of hydration of cement in its hardened state. Therefore, these properties in the hardened state provide valuable information for selecting the most convenient constituents and their proportions. This proves to be a better evaluation method in comparison with the common testing technique carried out exclusively in the fresh state.

References

[1] Donza, H. y Trezza, M., Estudio comparativo del comportamiento de aditivos superfluidificantes. Proceedings of Congreso de Ingeniería, Estructuras, Materiales y Técnicas Constructivas hacia el Siglo XXI. Argentina [en línea]. 2000. Disponible en: http://www.efn.uncor.edu/departamentos/estruct/ciath/superflu.pdf

[2] Alonso, M.M., Palacios, M., Puertas, F., De la Torre, A.G. and Aranda, M.A.G. Effect of polycarboxylate admixture structure on cement paste rheology. Materiales de Construcción, 57(286), pp.65-81, 2007. DOI: 10.3989/mc.2007.v57.i286.48

[3] Huang, H., Qian, C., Zhao, F., Qub, J., Guo, J. and Danzinger, M., Improvement on microstructure of concrete by polycarboxylate superplasticizer (PCE) and its influence on durability of concrete. Construction and Building Materials, 110(1), pp. 293-299, 2016.

[4] Aïtcin, P.C., Jolicoeur, C. and MacGregor, G.J., Superplasticizers; How they work and why they occasionally don´t. International Concrete Research, 16(5), pp. 45-52, 1994.

[5] Rixom, R. and Mailvaganam, N., Chemical admixtures for concrete. (Third edition). London, England: E&FN Spon. 1999.

[6] Nkinamubanzi, P.C., Mantellato, S. and Flatt, R.J., Superplasticizers in practice. Science and Technology of Concrete Admixtures, 2016, pp. 353-377.

[7] Griesser, A., Cement-Superplasticizer interactions at ambient temperatures. Rheology, phase composition, pore water, and heat of hydration of cementitious systems. PhD. Thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, Switzerland. [online]. 2002. Available at: http://biblioteca.universia.net.

[8] Menéndez, G., Bonavetti, V.L., Donza, H., Rahhal, V. y Irassar, E.F., Cementos a medida con filler calcáreo y puzolana. Proceedings of 15ª Reunión Técnica de la Asociación Argentina de Tecnología del Hormigón, Argentina, 2003.

[9] Sosa, M.E., Villagrán-Zaccardi, Y.A., Zega, C.J. and Peralta, J.P., Fresh properties of mortar made whit pozzolanic cement and water reducer. MRS Proceedings. [online].1488. 2012. Available at: http: www. http://journals.cambridge.org

[10] Adjoudj, M., Ezziane, K., Kadri, E.H., Ngo, T.T. and Kaci, A., Evaluation of rheological parameters of mortar containing various amounts of mineral addition with polycarboxylate superplasticizer. Construction and Building Materials, 70(15), pp. 549-559, 2014. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2014.07.111

[11] Erdogdu, S., Compatibility of superplasticizers with cements different in composition. Cement and Concrete Research, 30(5), pp. 767-773, 2000. DOI: 10.1016/S0008-8846(00)00229-5.

[12] Palacios, M., Puertas, F., Bowen, P. and Houst, F., Effect of PCs superplasticizers on the rheological properties and hydration process of slag-blended cement pastes. Journal of Materials Science, 44, pp. 2714-2723, 2009. DOI: 10.1007/s10853-009-3356-4.

[13] Puertas, F., Alonso, M.M. y Vázquez, T., Influencia de aditivos basados en policarboxilatos sobre el fraguado y el comportamiento reológico de pastas de cemento portland. Materiales de Construcción, 55(277), pp. 61-73, 2005.

[14] Boukendakdji, O., Kadri, El-H. and Kenai, S., Effects of granulated blast furnace slag and superplasticizer type on the fresh properties and compressive strength of self-compacting concrete. Cement & Concrete Composites, 34, pp. 583-590, 2012. DOI: 10.1016/j.cemconcomp.2011.08.013

[15] Palacios, M., Houst, Y.F., Bowen, P. and Puertas, F., Adsorption of superplasticizer admixtures on alkali-activated slag pastes. Cement and Concrete Research, 39, pp. 670-677, 2009b. DOI: 10.1016/j.cemconres.2009.05.005

[16] Shi, C., Zhang, G., He, T. and Li, Y., Effects of superplasticizers on the stability and morphology of ettringite. Construction and Building Materials, 112(1), pp. 261-266, 2016. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2016.02.198

[17] Meier, M.R., Napharatsamee, T. and Plank, J., Dispersing performance of superplasticizers admixed to aged cement. Construction and Building Materials, 139(15), pp. 232-240, 2017. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2016.12.126

[18] Yazan, K., Effects of retempering with superplasticizer on properties of prolonged mixed mineral admixture containing concrete at hot weather conditions. MSc, Thesis, Middle East Technical University, Ankara, Turkey, [online]. 2005. Available at: https://etd.lib.metu.edu.tr

[19] Aïtcin, P.C., Binders for durable and sustainable concrete. Taylor & Francis, New York, 2008.

[20] Lothenbach, B., Le Saout, G., Gallucci, E. and Scrivener, K., Influence of limestone on the hydration of portland cements. Cement and Concrete Research 38(6), pp. 848-860, 2008. DOI: 10.1016/j.cemconres.2008.01.002

[21] EFNARC. Especificaciones y directrices para el hormigón autocompactable. [en línea]. 2002. Disponible en: http:// www.efnarc.org.

[22] Okamura, H. and Ouchi, M., Self-compacting concrete. Journal of Advanced concrete Technology, 1(1), pp. 5-15, 2003.

[23] Felekoglu, B., Tosun, K., Baradan, B., Altun, A. and Uyulgan, B., The effect of fly ash and limestone filler on the viscosity and compressive strength of self-compacting repair mortars. Cement and Concrete Research. 36(9), pp. 1719-1726, 2006. DOI: 10.1016/j.cemconres.2006.04.002

[24] Liu, M., Wider application of additions in self-compacting concrete. PhD. Thesis University College London, [online]. 2009. Available at: http:// discovery.ucl.ac.uk

[25] NCh 2257/3. Morteros. Determinación de la consistencia- Parte 3: Método del asentamiento del cono. Instituto Nacional de Normalización. Chile, 1996.

M.E. Sosa, obtained the BSc. degree in Civil Engineer in 2010 from the National Technological University (Argentina). Currently, she is a research

fellow. She is PhD student at the National University of La Plata, La Plata, Argentina, and a teaching assistant at the Department of Civil Engineering of the Regional Faculty of La Plata, National Technological University. Her research interests include studies on concrete sustainability through the use of different wastes.
ORCID: 0000-0003-2190-0481.

Y.A. Villagrán-Zaccardi, obtained the BSc. degree of Civil Engineer in 2003, from the National Technological University (Argentina), an MSc degree in Concrete Technology and Construction in 2009 from the National University of the Center of the Province of Buenos Aires, and a PhD in Engineering in 2012 from the National University of La Plata. Currently, he is an associate researcher at LEMIT-CONICET and an associate professor at the Department of Civil Engineering of the Regional Faculty of La Plata, National Technological University (Argentina). His research interests include studies on supplementary cementitious materials, transport properties of concrete and corrosion of steel in concrete.
ORCID: 0000-0002-0259-7213.

J.P. Peralta, obtained the BSc. degree of Civil Engineering in 2011 from the National University of La Plata. He was a research fellow at LEMIT-CIC.
ORCID: 0000-0002-5604-0621.

C.J. Zega, obtained the BSc. degree of Civil Engineer in 2000 from the National University of La Plata, an MSc. degree in Concrete Technology and Construction in 2008 from the National University of the Center of the Province of Buenos Aires, and a PhD. in Engineering in 2010 from the National University of La Plata, Argentina. Currently, he is an associate researcher at LEMIT-CONICET and a professor in the Department of Construction, Faculty of Engineering, National University of La Plata. His research interests are fresh and hardened properties of mortars and concretes, especially the durable properties of concretes against aggressive environments, as well as the use of recycled concrete.
ORCID: 0000-0002-9199-9176.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Civil

Oferta de Posgrados

Especialización en Vías y Transportes
Especialización en Estructuras
Maestría en Ingeniería - Infraestructura y Sistemas de Transporte
Maestría en Ingeniería – Geotecnia
Doctorado en Ingeniería - Ingeniería Civil

Mayor información:

E-mail: asisacic_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5172

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Thermal analysis and mass spectrometry in protonic conductors ($PVDF/H_3PO_2$) for implementation in fuel cells

Jolman Stiven Diaz-Ortiz [a], Miguel Iban Delgado-Rosero [a], Nori Magali Jurado-Meneses [a] & Gladis Miriam Aparicio-Rojas [b]

[a] *GIMSS Group, Departamento de Física, Universidad del Tolima, Ibagué, Colombia. jolmandiaz@gmail.com, mirosero@ut.edu.co, nmjuradom@ut.edu.co*
[b] *GINSAI Group, Departamento de Física, Universidad Autónoma de Occidente, Cali, Colombia. gmaparicio@gmail.com*

Received: August 10th, 2017. Received in revised form: November 21th, 2017.Accepted: December 11th, 2017

Abstract
Polyvinyl Difluoride and Hypophosphorous Acid ($PVDF/H_3PO_2$) membranes were prepared with different concentrations of acid. The differential scanning calorimetry (DSC) results showed a typical step of the glass transition around 250 K. Two endothermic anomalies were observed: one closed to 357.6 K due to the evaporation of water, and another closed to 422 K attributed to the melting of the crystalline phase of PVDF. The mass spectrometry (MS) coupled with thermogravimetry analysis (TGA) reveal the possible presence of (C_2H_2O) and hydrofluoric acid (HF) molecules, thereby raises the possibility that H_3PO_2 lost a hydrogen atom and bonded to the polymer chain of the PVDF by displacing an atom of fluorine. The presence of water molecules at different temperatures suggests the formation of superficial, internal and structural water in the polymer-acid system. This feature makes the $PVDF/H_3PO_2$ system to be proposed as solid electrolyte in fuel cells.

Keywords: fuel cell; solid electrolyte; polymer; calorimetry DSC; thermogravimetry; spectrometry MS.

Análisis térmico y espectrometría de masas en conductores protónicos ($PVDF/H_3PO_2$) para implementación en celdas de combustible

Resumen
Se prepararon membranas de Polivinil Difluoruro y Acido Hipofosforoso ($PVDF/H_3PO_2$) con diferentes concentraciones de ácido. Los resultados de calorimetría diferencial de barrido (DSC), presentan un escalón característico de la transición vítrea alrededor de 250 K. También se observan dos anomalías endotérmicas: una cercana a 357 K debido a la evaporación de agua, y otra cerca a los 422 K atribuida a la fusión de la fase cristalina del PVDF. Los análisis de Espectrometría de masas (MS) acoplado con Termogravimetría (TGA), revelan la posible presencia de moléculas de (C_2H_2O) y ácido fluorhídrico (HF), esto plantea la posibilidad de que el H_3PO_2 perdió un átomo de hidrógeno y se enlazó a la cadena polimérica del PVDF desplazando un átomo de flúor. Se evidencia la presencia de moléculas de agua a diferentes temperaturas, que sugiere la formación de agua superficial, interna y estructural en el sistema polímero-acido. Esta característica, hace que el sistema $PVDF/H_3PO_2$ sea propuesto como electrolito solido en celdas de combustible.

Palabras clave: celda de combustible; electrolito solido; polímero; calorimetría DSC; termogravimetría; espectrometría MS.

1. Introducción

En la actualidad, existe la necesidad de generar y almacenar energía favoreciendo la protección ambiental. Esto, ha impulsado la investigación de energías alternativas, tales como las celdas de combustible. El bajo nivel de contaminación, la alta eficiencia y los bajos costos de mantenimiento hacen que las celdas de combustible sean

How to cite: Diaz-Ortiz, J.S., Delgado-Rosero, M-I, Jurado-Meneses, N.M. and Aparicio-Rojas, G.M., Análisis térmico y espectrometría de masas en conductores protónicos (PVDF/H3PO2) para implementación en celdas de combustible. DYNA, 85(204), pp. 143-149, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

destacadas respecto a otros dispositivos de conversión de energía [1,2]. Investigaciones recientes, revelan que las celdas de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC) (Proton Exchange Membrane Fuel Cells) y las celdas de combustible de metanol directo (DMFC) (Direct-Metanol Fuel Cells), son las más prometedoras para aplicaciones energéticas en equipos portátiles y automotrices [3,4].

Las PEMFC, funcionan a baja temperatura (entre 333 K y 373 K), pero la acidez de las soluciones empleadas, pueden generar corrosión en las partes metálicas y reducir el tiempo de vida de la celda, por tal motivo, es importante controlar la humedad retenida por la membrana así como la temperatura de funcionamiento, debido a que estas variables influyen considerablemente en la eficiencia, [5,6].

Las membranas de intercambio protónico (PEM) más relevantes hoy en día son las membranas de Nafión® y sus modificados como (Nafión 115 y Nafión 117), los cuales son polímeros sintéticos con buena estabilidad química, térmica y alta conductividad protónica (10^{-2} a 10^{-1} S.cm^{-1}) [7,8]. Sin embargo, el alto costo y problemas de permeabilidad de gases o metanol en la membrana, han llevado a generar otras alternativas en las PEMs que muestren buenas propiedades conductoras de protones, a temperaturas intermedias (T>373 K) para usarse en PEMFC y DMFC.

Debido a que se requieren altos valores de conductividad iónica ($\sigma > 10^{-5}$ S cm^{-1}), se han propuesto como electrolitos solidos poliméricos, diferentes combinaciones de polímero-ácido, como por ejemplo: polivinil alcohol (PVAOH) con ácido hipofosforoso (H_3PO_2) [9,10] y PVDF con ácido sulfónico de poliestireno (PVDF/PSSA) con las que se han obtenido membranas de alta conductividad iónica, baja permeabilidad a gases o metanol y densidades de corriente comparables a las obtenidas con Nafión 115 [11].

Estos antecedentes, muestran la necesidad de encontrar nuevos electrolitos solidos poliméricos con combinaciones de fase aptas para brindar propiedades de conductores protónicos que puedan usarse en celdas de combustible a temperaturas inferiores de 373 K. Con este objetivo se sintetizaron membranas PVDF/H_3PO_2 y se realizaron análisis térmicos para determinar cambios en las fases por efecto de la concentración de ácido.

2. Procedimiento y técnicas experimentales

En este trabajo, se prepararon membranas de PVDF y H_3PO_2 a concentraciones en fracción de masa de 0,10, 0,30 y 0,50 de ácido, con el fin de estudiar las fases de dichas membranas.

2.2. Preparación de muestras

Para la preparación de las membranas, se tuvo en cuenta el procedimiento utilizado por Vásquez y colaboradores [12], en el cual el PVDF de la casa Aldrich, se disuelve en Tetrahidrofurano (THF) y se adiciona H_3PO_2 diluido al 50% de la casa Merck; siguiendo el proceso que se describe a continuación.

En un balón de vidrio de boca esmerilada se deposita THF y se agrega el PVDF en una proporción de 8.4 ml de disolvente por cada 0.1 g de polímero. Se somete a agitación magnética durante 4 horas a una temperatura de 333 K; durante la siguiente hora, se reduce la temperatura a 313 K con el fin de agregar el H_3PO_2 conforme a lo descrito por Vilčiauskas y colaboradores [13] para evitar que el ácido se desproporcione térmicamente por encima de los 323 K. La solución se agita magnéticamente por 2 horas a 313 K. Para evitar la evaporación del solvente durante este proceso, se instaló en el balón de vidrio un condensador para mantener el volumen constante durante todo el proceso.

Tabla 1.
Membranas de PVDF/H_3PO_2 a diferentes concentraciones de ácido y espesor obtenido.

Concentración (X)	Masa del polímero PVDF (g)	Volumen del ácido H_3PO_2 (diluido 50%) (µl)	Espesor (µm)
0,0	0.35	0	98
0,1	0.35	64.2	90
0,3	0.35	247.9	115
0,5	0.35	578	100

Fuente: Los autores.

Las soluciones se depositan en Petri de vidrio y se ubican en un desecador a baja humedad (RH < 30%), el cual contiene sílica gel para evaporar el solvente y el excedente de agua. Finalmente se obtienen membranas aparentemente secas con espesores entre 90–115 µm.

2.3. Análisis térmico

2.3.1. Análisis por calorimetría diferencial de barrido (DSC) y termogravimetría (TGA)

Para los análisis de DSC se utilizó un calorímetro DSC Q2000 marca TA-Instruments, en un rango de temperatura entre 233 K y 773 K, con una rata de calentamiento de 10 K/min, con nitrógeno como gas de purga. Se utilizaron porta muestras de aluminio selladas con muestras entre 3 mg y 3,5 mg. Para los Análisis de TGA, se utilizó un analizador termogravimétrico TGA Q500 marca TA-instruments, en un rango de temperatura entre 298 K y 973 K con una rata de calentamiento de 10 K/min, se utilizó nitrógeno como gas de purga y portamuestras de aluminio con muestras entre 3 mg y 3,5 mg. El análisis de los termogramas se realizó con el software Universal Analysis 2000.

2.4. Análisis espectrometría de masas (MS)

Estos análisis se realizaron en un espectrómetro de masa cuadrupolar MS Discovery, el cual tiene una capacidad de rango de masas de 1-300, sensibilidad mayor de 0.005 unidad de masa atómica (uma), fuente de ionización menor de 100 ppb, con temperatura de línea de transferencia de 300°C. Este sistema funciona como sistema recolector de muestras acoplado con el TGA.

3. Resultados y discusión

3.1. Calorimetría diferencial de barrido (DSC)

Los termogramas de DSC de la Fig. 1, muestran las anomalías encontradas entre 233 K y 733 K, en una membrana

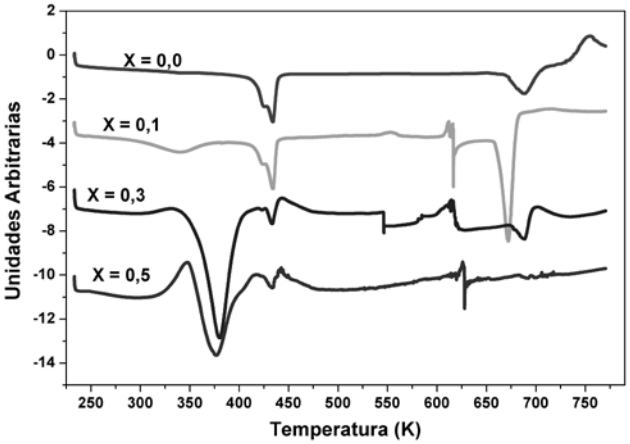


Figura 1. Termogramas de DSC para diferentes concentraciones X de H_3PO_2 en PVDF (X=0,0; 0,1; 0,3; 0,5), entre 233 K y 773 K.
Fuente: Los autores.

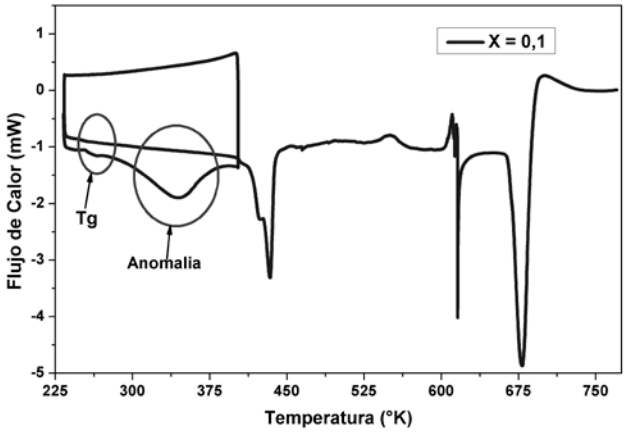


Figura 2. Segundo barrido de DSC, para la membrana de (PVDF/H_3PO_2) con concentración acida de X=0,1
Fuente: Los autores.

Tabla 2.
Entalpías para el complejo (PVDF/H_3PO_2) a diferentes concentraciones (X) de ácido.

X		0	0,1	0,3	0,5
1° pico (Endotérmico)	**T_1 (K)**	--	338,13	380,13	375,12
	Entalpía Δh (J/g)	--	40,65	243,6	220,60
2° pico (Endotérmico)	**T_m (K)**	433,79	434,14	433,72	434,40
	Entalpía Δh (J/g)	54,77	49,94	9,56	8,98
3° pico (Exotérmico)	**T_2 (K)**	--	616,43	616,41	627,80
	Entalpía Δh (J/g)	--	13,83	19,06	5,17
4° pico (Endotérmico)	**T_3 (K)**	689,27	672,15	688,96	--
	Entalpía Δh (J/g)	38,61	104,40	18,27	--

Fuente: Los autores.

de PVDF puro y en las diferentes combinaciones analizadas del sistema PVDF/H_3PO_2. En la membrana de PVDF puro, pueden observarse dos anomalías: la primera en forma de pico endotérmico (hacia abajo) a una temperatura de 433 K, atribuida a la fusión de la fase cristalina del polímero o T_m, [14–17]. La segunda anomalía por encima de 670 K, es atribuida a la degradación del polímero PVDF. El hombro observado en la anomalía de 433 K, se atribuye al efecto del solvente (THF) utilizado en el proceso de elaboración de las membranas.

En los termogramas de la Fig. 1, también se pueden observar nuevas anomalías en forma de picos para las membranas de polímero PVDF que contienen H_3PO_2. La primera anomalía endotérmica, entre 330 K y 380 K, se puede asociar posiblemente a la perdida de agua superficial en la membrana, ya que, por efecto H_3PO_2, este sistema se torna higroscópico, lo que puede corroborarse con los análisis de MS / TGA, mostrados en la Fig. 5, en los que las pérdidas de masa del complejo polimérico corresponden a la unidad de masa atómica de agua (ver tabla 3). Además, un segundo barrido de DSC entre 233 K y 403 K, inmediatamente después de un primer barrido mostrado en la Fig. 2, no presenta esta anomalía lo que confirma que el contenido de agua superficial en las membranas se ha evaporado por el primer calentamiento.

El pico endotérmico observado en los termogramas de la Fig. 1 alrededor de 433 K, fue asociado a la fusión de fase cristalina de PVDF, esto también se presenta para las tres concentraciones de ácido analizadas en la combinación PVDF/H_3PO_2. La tercera anomalía exotérmica, la cual se presenta entre temperaturas de 600 K hasta 650 K, es asociada a interacciones entre H_3PO_2 y PVDF, este hecho se puede deducir del termograma de TGA (Fig. 4) donde se observa pérdida de masa alrededor de dichas temperaturas. Por último, se observa una cuarta anomalía endotérmica alrededor de 660 K hasta 700 K para las concentraciones de X=0,1 y X=0,3 que se asocia a la de degradación de las membranas de PVDF/H_3PO_2. Esta anomalía no se presenta para la concentración de X=0,5. En la tabla 2, se relacionan las concentraciones de ácido (X) de las membranas utilizadas para este análisis, las temperaturas en las que se observa cada una de estas anomalías y la variación de entalpía (Δh). Como puede observarse en la figura 1 la anomalía correspondiente a la fusión de la fase cristalina del PVDF (433 K) disminuye su intensidad a medida que la concentración de H_3PO_2 se incrementa, lo que también puede verse en el decrecimiento de los valores de entalpía correspondientes, mostrados en la tabla 1. Esto indica que la fase cristalina del PVDF decrece con la concentración de H_3PO_2 mientras se incrementa su fase amorfa [18].

En la Fig. 3 se presentan termogramas de DSC en un rango de temperaturas entre 230 y 300 K para las combinaciones del sistema PVDF/H_3PO_2. El escalón observado en este rango es característico de la transición vítrea (T_g) de las membranas. Como puede observarse en el termograma correspondiente a la membrana de PVDF puro, no se observa el escalón característico de la T_g ya que según otros estudios, esta transición se reporta a una temperatura inferior a este rango [19,20]. Para las membranas con diferentes concentraciones de ácido, se observa un corrimiento de la T_g entre 252 K y 259 K, este fenómeno es un indicativo de que se ha formado un nuevo complejo polimérico al adicionar H_3PO_2 al polímero PVDF.

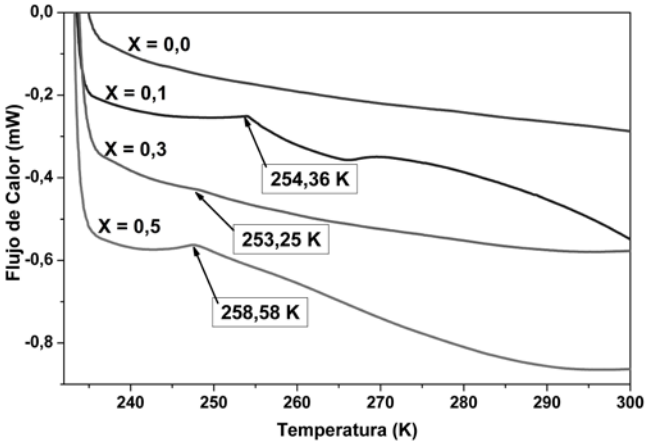


Figura 3: Termograma (DSC), para la membrana de (PVDF/H_3PO_2), entre 230 y 300 K.
Fuente: Los autores.

3.2. Termogravimetría (TGA)

En la Fig. 4, se pueden observar los termogramas de TGA del complejo polimérico PVDF/H_3PO_2 con diferentes concentraciones de ácido. Las curvas de TGA muestran el porcentaje de masa perdido en función de la temperatura, además se puede identificar las temperaturas donde ocurre la máxima pérdida en la derivada de dicha perdida. Como se puede observar en el primer termograma (Fig. 4 a), la cual corresponde a PVDF puro, presenta dos perdidas, la primera de 0,4% desde 298 K hasta 472 K y la segunda 60,1% a partir de 729 K hasta 753 K, lo que indica que el PVDF es estable hasta 729 K aproximadamente.

En los termogramas de las figuras 4b, 4c y 4d; se observan cuatro variaciones significativas del porcentaje de masa del nuevo complejo polimérico PVDF/H_3PO_2. La primera pérdida de masa, aproximadamente a 298 K, la cual está presente en todas las concentraciones, se incrementa conforme aumenta la concentración de ácido, lo que se atribuye a la pérdida de agua superficial. La segunda pérdida de masa, es observada en todas las concentraciones se presenta alrededor de 370 K, en la cual también aumenta su porcentaje de pérdida de masa, conforme aumenta su concentración de ácido. Esta pérdida se puede atribuir a la evaporación de moléculas de agua absorbidas por la membrana y que de alguna forma están atrapadas dentro de las cadenas del polímero [12,21].

La tercera pérdida de masa, se presenta alrededor de 580 K, el porcentaje de pérdida de masa no es proporcional a la concentración de ácido y se asocia a una reacción del ácido hipofosforoso (H_3PO_2) a altas temperaturas, según lo reportado por L. Vilčiauskas y colaboradores [13]. Finalmente, se presenta la cuarta pérdida de masa aproximadamente a 700 K, la cual se asocia a la degradación total del complejo polimérico (PVDF/H_3PO_2).

3.3. Espectrometría de masa (MS)

Se realizó MS a membranas de (PVDF/H_3PO_2) con concentraciones de X=0,3 y X=0,5. En las dos muestras se registraron 14 moléculas, que se identificaron por la relación

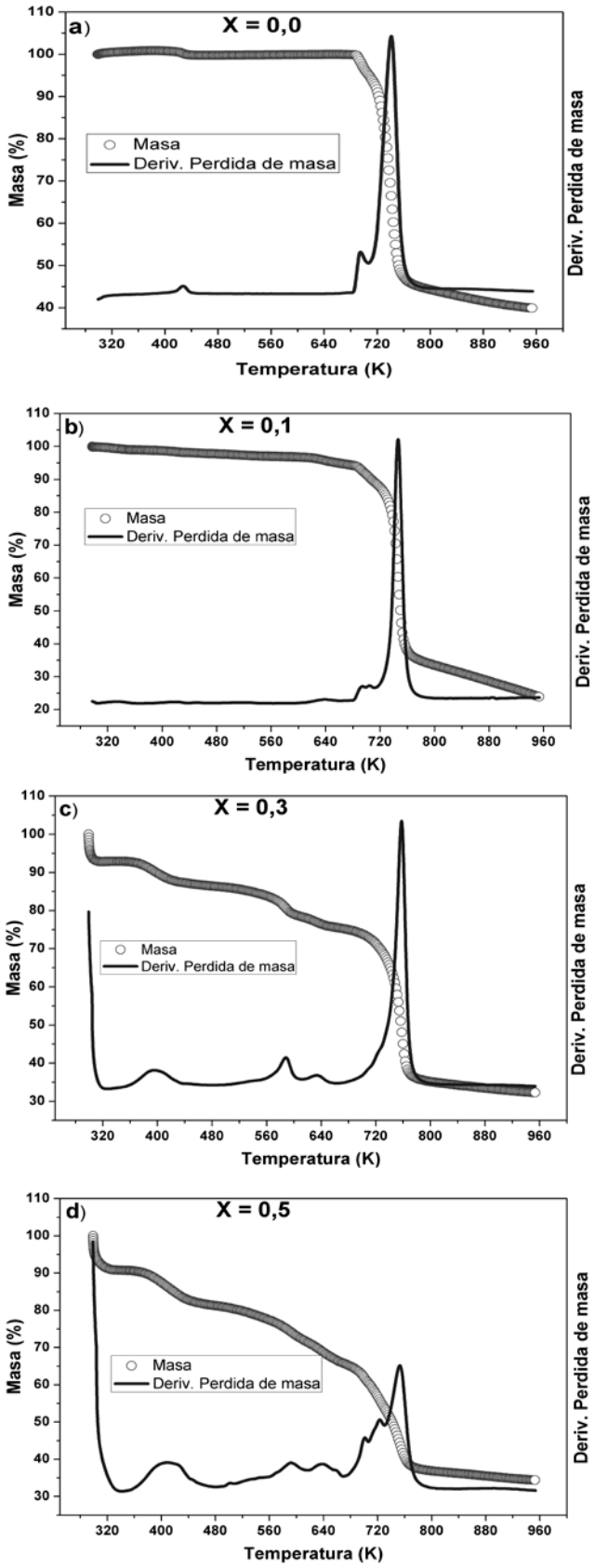


Figura 4: Termogramas TGA para membranas de: a) PVDF puro y el complejo polimérico PVDF/H_3PO_2 b) X=0,1; c) X=0,3 y d) X=0,5.
Fuente: Los autores.

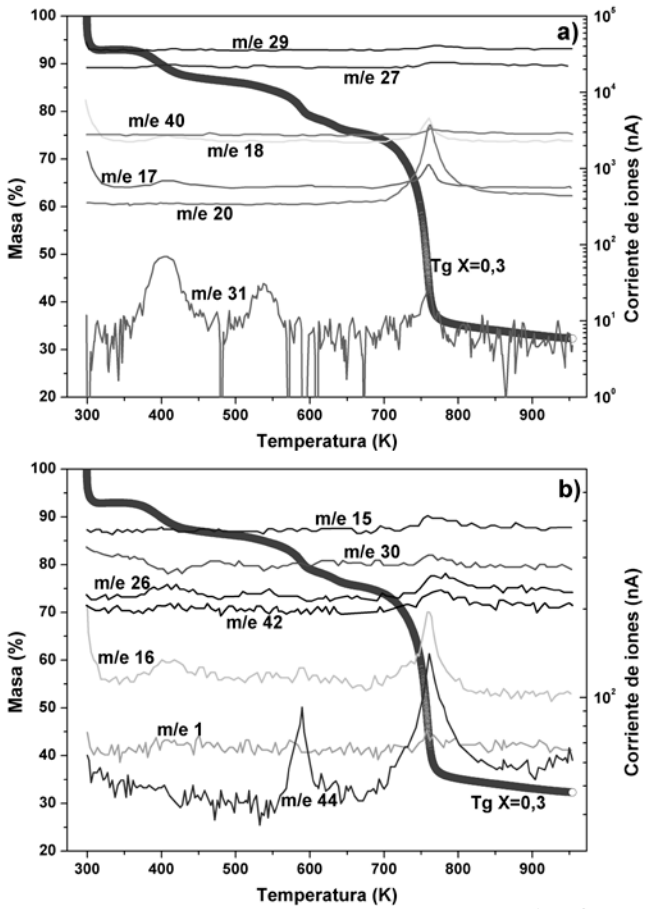


Figura 5 a) y b): Espectros de MS acoplados a TGA como función de la temperatura para el complejo polimérico ($PVDF/H_3PO_2$) para la concentración de ácido X=0,3
Fuente: Los autores.

carga-masa (m/z) propuestas en la tabla 3, junto con las temperaturas en las que se presentó el máximo desprendimiento de estas moléculas. En la Fig. 5, se presenta el espectro de MS para el complejo ($PVDF/H_3PO_2$) con una concentración de ácido de X=0,3.

Se detectó la presencia de moléculas de hidrógeno, grupo metilo (CH_3) y vinilo etenilo (C_2H_3). A baja temperatura (<373 K) se presenta el posible desprendimiento de grupos hidroxilos (OH), oxigeno, acetileno (C_2H_2), formaldehído (CH_2O), agua (H_2O) y ethynol (C_2H_2O); la presencia de agua es atribuida a la higroscopicidad del ácido, que hace que se forme una capa superficial de agua en la membrana. A temperaturas intermedias (373 K – 676 K) se detectó la posible presencia de moléculas de acetileno (C_2H_2) y fosforo (P), también se detectó la presencia de agua. Por último, a temperaturas superiores a 673 K, donde se presenta la degradación total del complejo, se detectó una presencia fuerte de la mayoría de las moléculas.

Las moléculas observadas con MS para la concentración X=0,3 también se presentan para la concentración X=0,5 y se reportan en la tabla 3, junto con las temperaturas a las cuales se presenta su desprendimiento.

Tabla 3.
Relación carga-masa de todos los elementos desprendidos del complejo polimérico ($PVDF/H_3PO_2$).

Relación m/z	Elemento Identificado	Temperatura Máxima De Desprendimiento (K)	
		X=0.3	X=0.5
1	H	Cte.	Cte.
15	CH_3	Cte.	Cte.
16	O	301-323 y 765	301-349 y 761
17	OH	301-323; 403 y 765	301-349; 408; 703 y 761
18	H_2O	301-323; 403 y 765	301-349; 408; 703 y 761
20	HF	765	703 y 761
26	C_2H_2	Cte.	373-393
27	C_2H_3	765	Cte.
29	SN	765	Cte.
30	CH_2O	Cte.	373-393
31	P; CF	403 y 541; 765	408 y 543
40	SN	Cte.	Cte.
42	C_2H_2O; CO_2	Cte.	373-393
44	C_2H_4O; C_3H_6	588 y 765	373-438; 608 y 703

Fuente: Los autores.

Como se evidenció mediante TGA y MS, la presencia de moléculas de agua a diferentes temperaturas sugiere, que se forma una capa superficial de agua y se evapora por debajo de 373 K, también se forman moléculas de agua internamente en la membrana del complejo polímero-acido, las cuales se desprenden entre 403 K a 423 K. Por último, se evidencia la formación de agua estructural en el complejo polímero-acido, donde estas moléculas se desprenden a temperaturas superiores de 703 K. Los picos máximos que indican los desprendimientos de moléculas de agua, son coincidentes con las pérdidas de masa mostradas por el TGA. La inestabilidad térmica ocasionada por la pérdida de agua superficial (temperatura < 370 K) en las membranas $PVDF/H_3PO_2$, puede minimizarse adicionando nanopartículas inertes en el sistema durante el proceso de preparación. Diferentes investigaciones muestran que electrolitos sólidos poliméricos, mejoran sus propiedades térmicas y mecánicas sin afectar las propiedades conductoras de iones [22,23].

La posible presencia de moléculas de (C_2H_2O) y ácido fluorhídrico (HF), plantea la posibilidad de que el ácido hipofosforoso (H_3PO_2) perdió el hidrógeno de su grupo hidroxilo (OH) y se enlazó a la cadena polimérica del PVDF desplazando un átomo de flúor (F), formando así la molécula de ácido fluorhídrico (HF) presente en los espectrogramas de masas. La Fig.6, muestra la posible estructura del complejo $PVDF/H_3PO_2$ en la que se observa en color cian los átomos de carbono, color rojo los átomos de oxígeno, verde oliva los átomos de flúor, en violeta el átomo de fosforo y por último en color blanco los átomos de hidrógeno. La forma de la cadena polimérica corresponde a la fase cristalina β [16], ya que la membrana se formó a una temperatura inferior de 343 K en presencia de solvente.

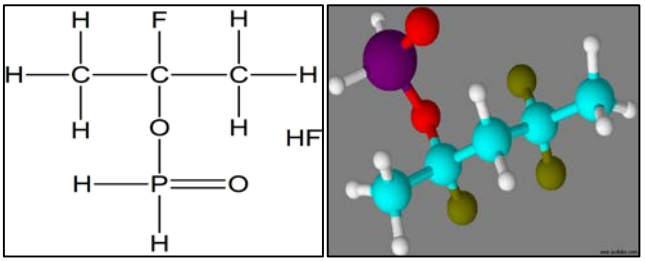


Figura 6: Posible estructura molecular del nuevo complejo polimérico ($PVDF/H_3PO_2$).
Fuente: Los autores.

4. Conclusiones

Los análisis de DSC, muestran el corrimiento del escalón característico de la transición vítrea (T_g) alrededor de 254 K para las membranas de $PVDF/H_3PO_2$. Este fenómeno indica que se ha formado un nuevo electrolito polimérico al adicionar ácido hipofosforoso (H_3PO_2) al polímero (PVDF).

El decrecimiento observado en el pico correspondiente a la T_m o fusión de la fase cristalina del PVDF conforme aumenta la concentración de ácido, indica un decrecimiento en la fracción de la fase cristalina y un incremento en la fase amorfa de las membranas $PVDF/H_3PO_2$.

Los análisis TGA muestran diferentes pérdidas de masa en las membranas de $PVDF/H_3PO_2$, a diferentes temperaturas, lo que evidencia la existencia de humedad superficial que se desprende con facilidad a temperatura de 298 K. También se observa desprendimiento de moléculas de agua a mayor temperatura debido al carácter hidrofilico que le proporciona el H_3PO_2 al polímero, esto sugiere que las moléculas de agua quedan atrapadas en las cadenas del polímero. Esta hipótesis se puede soportar con los resultados de TGA acoplado a MS, donde se observa dicho desprendimiento a temperaturas superiores de 400 K.

Los análisis de TGA, muestran pérdidas de masa considerables a temperaturas superiores de 373 K, lo que indica que las membranas del sistema $PVDF/H_3PO_2$ son estables térmicamente hasta este valor.

La presencia de moléculas de agua que se desprenden a diferentes temperaturas, de acuerdo a los análisis de TGA y MS, sugieren que existe una capa superficial de agua, la cual se desprende por debajo de 373 K. También hay moléculas de agua en el interior de la membrana de $PVDF/H_3PO_2$, la cual se desprende a 370 K aproximadamente. Por último, se evidencia la formación de agua estructural en el sistema polímero-acido, donde estas moléculas se desprenden a temperaturas superiores de 703 K. También, la posible presencia de moléculas de (C_2H_2O) y ácido fluorhídrico (HF), plantea la posibilidad de que el sistema $PVDF/H_3PO_2$ se formó cuando H_3PO_2 perdió el hidrógeno de su grupo hidroxilo (OH) y se enlazó a la cadena polimérica del PVDF desplazando un átomo de flúor (F).

Agradecimientos

Agradecemos a la Universidad del Tolima por la financiación de este trabajo mediante proyectos con códigos 290214 y 310114, a través de la oficina central de investigaciones, al laboratorio de investigación en análisis térmico de la Universidad Autónoma de Occidente por su colaboración y al grupo de química aplicada a procesos ecológicos de la Universidad del Tolima QUAPE por sus aportes.

Referencias

[1] Smitha, B., Sridhar, S. and Khan, A.A., Solid polymer electrolyte membranes for fuel cell applications - A review, J. Memb. Sci. 259, pp. 10-26, 2005. DOI: 10.1016/j.memsci.2005.01.035.

[2] Renzi, M., Agostini, M., Navarra, M.A. and Nobili, F., An innovative membrane-electrode assembly for efficient and durable polymer electrolyte membrane fuel cell operations, Int. J. Hydrogen Energy, 42, pp. 16686-16694, 2017. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.05.168.

[3] Krishnan, N.N., Henkensmeier, D., Park, Y.H., Jang, J.H., Kwon, T., Koo, C.M., Kim, H.J., Han, J. and Nam, S.W., Blue membranes: Sulfonated copper(II) phthalocyanine tetrasulfonic acid based composite membranes for DMFC and low relative humidity PEMFC, J. Memb. Sci. 502, pp. 1-10, 2016. DOI: 10.1016/j.memsci.2015.12.035.

[4] Noponen, T. and Kohonen, A., An alternative concept for DMFC - Combined electrolyzer and H2 PEMFC, International Journal of Hydrogen Energy. 41, pp. 2154-2164, 2016. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2015.12.007.

[5] Alvarado-Flores, J., Estudio comparativo de las diferentes tecnologias de celdas de combustible, Bol. La Soc. Esp. Ceram. Y Vidr, 52, pp. 105-117, 2013. DOI: 10.3989/cyv.142013.

[6] Jeon, S.W., Cha, D., Kim, H.S. and Kim, Y., Analysis of the system efficiency of an intermediate temperature proton exchange membrane fuel cell at elevated temperature and relative humidity conditions, Appl. Energy, 166, pp. 165-173, 2016. DOI: 10.1016/j.apenergy.2015.12.123.

[7] Clochard, M.C., Berthelot, T., Baudin, C., Betz, N., Balanzat, E., Gébel, G. and Morin, A., Ion track grafting: A way of producing low-cost and highly proton conductive membranes for fuel cell applications, J. Power Sources, 195, pp. 223-231, 2010. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2009.07.016.

[8] Zakil, F.A., Kamarudin, S.K. and Basri, S., Modified Nafion membranes for direct alcohol fuel cells: An overview, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 65, pp. 841-852, 2016. DOI: 10.1016/j.rser.2016.07.040.

[9] Vargas, M.A., Vargas, R.A. and Mellander, B., More studies on the PVAl+H3PO2+H2O proton conductor gels, Electrochimica, 45, pp. 1399-1403, 2000.

[10] Fernández, M.E., Murillo, G., Vargas, R.A., Peña Lara, D. and Diosa, J.E., Improvement of Proton-Exchange Membranes Based on (1−x)(H3PO2/PVA)-xTiO2, Ingeniería y Ciencia, 13, pp. 153-166, 2017. DOI: 10.17230/ingciencia.13.25.6.

[11] Byun, J., Sauk, J. and Kim, H., Preparation of PVdF/PSSA composite membranes using supercritical carbon dioxide for direct methanol fuel cells, Int. J. Hydrogen Energy, 34, pp. 6437-6442, 2009. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2009.06.025.

[12] Vásquez-Bonilla, R.A., Síntesis y caracterización de conductores protónicos polifluoruro de vinilideno/ácido hipofosforoso (PVDF/H3PO2), Tesis (MSc. Ciencia-Física), Universidad del Tolima, Ibagué, Colombia, 2015, 46 P.

[13] Vilčiauskas, L., De Araujo, C.C. and Kreuer, K.D., Proton conductivity and diffusion in molten phosphinic acid (H3PO2): The last member of the phosphorus oxoacid proton conductor family, Solid State Ionics, 212, pp. 6-9, 2012. DOI: 10.1016/j.ssi.2012.02.019.

[14] Muniyandi, N., Kalaiselvi, N., Periyasamy, P., Thirunakaran, R., Ramesh, B., Gopukumar, S., Premkumar, T., Renganathan, N.G. and Raghavan, M., Optimisation of PVdF-based polymer electrolytes, J. Power Sources, 96, pp. 14-19, 2001.

[15] Shen, Y.J., Reddy, M.J., Chu, P.P. Porous PVDF with LiClO 4 complex as d solid T and d wet T polymer electrolyte, Solid State Ionics, 175, pp. 747-750, 2004. DOI: 10.1016/j.ssi.2003.10.020.

[16] Tornga, S.C., Yang, D., Orler, B. and Welch, C., Aging of poly (vinylidene fluoride) hollow fibers in light hydrocarbon environments

environments, J. Memb. Sci., 409-410, pp. 302-317, 2012. DOI: 10.1016/j.memsci.2012.03.067.
[17] Jia, N., He, Q., Sun, J., Xia, G. and Song, R., Crystallization behavior and electroactive properties of PVDF, P(VDF-TrFE) and their blend fi lms, Polym. Test., 57, pp. 302-306, 2017. DOI: 10.1016/j.polymertesting.2016.12.003.
[18] Baskaran, R., Selvasekarapandian, S., Kuwata, N., Kawamura, J., Hattori, T., ac impedance, DSC and FT-IR investigations on (x) PVAc –(1 − x) PVdF blends with LiClO4, Mater. Chem. Phys., 98, pp. 55-61, 2006. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2005.08.063.
[19] Polu, A.R. and Rhee, H., Ionic liquid doped PEO-based solid polymer electrolytes for lithium-ion polymer batteries, Int. J. Hydrogen Energy, 42, pp. 7212-7219, 2017. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.04.160.
[20] Singha, S. and Jana, T., Effect of composition on the properties of PEM based on polybenzimidazole and poly (vinylidene fluoride) blends, Polymer (Guildf), 55, pp. 594-601, 2014. DOI: 10.1016/j.polymer.2013.12.021.
[21] González-Trujillo, Y.F. y Vargas-Zapata, R.A., Estudio de las propiedades termodinámicas y eléctricas de materiales compuestos póliméricos basados en el poli(vinil alcohol) (PVA) + H3PO2 + TiO2, Rev. Iberoam. Polímeros, 12, pp. 64-75, 2011.
[22] Hezma, A.M., Elashmawi, I.S., Abdelrazek, E.M., Rajeh, A. and Kamal, M., Enhancement of the thermal and mechanical properties of polyurethane/polyvinyl chloride blend by loading single walled carbon nanotubes, Prog. Nat. Sci. Mater. Int., 27, pp. 338-343, 2017. DOI: 10.1016/j.pnsc.2017.06.001.
[23] Lin, Y., Jia, Y., Alva, G. and Fang, G., Review on thermal conductivity enhancement, thermal properties and applications of phase change materials in thermal energy storage, Renew. Sustain. Energy Rev., 10, pp. 1-13, 2017. DOI: 10.1016/j.rser.2017.10.002.

J.S. Díaz-Ortiz, es MSc. en Ciencias-Físicas de la Universidad del Tolima, Colombia, Ing. Electrónico de la Universidad Antonio Nariño, Colombia. Investigador asociado en el grupo de Investigación en Materiales Semiconductores y Superionicos (GIMSS), en el área de física de nuevos materiales como conductores protónicos y polímeros. Profesor de catedra de física en las áreas de biofísica y física fundamenta I - II.
ORCID: 0000-0002-5361-2719

N.M. Jurado-M., es MSc. en Física de la Universidad del Tolima, Colombia, con pregrado en Física, de la Universidad de Nariño, Colombia. En la actualidad pertenece al grupo de investigación en materiales semiconductores y superiónicos (GIMSS) de la Universidad del Tolima, Colombia.
ORCID: 0000-0002-0474-1098

M.I. Delgado-Rosero, es MSc. y Dr. de la Universidad del Valle, Colombia, actualmente es profesor de planta de la Universidad del Tolima, Colombia y pertenece al grupo de investigación en materiales semiconductores y superiónicos (GIMSS) de la Universidad del Tolima, Colombia.
ORCID: 0000-0003-4620-3623

G.M. Aparicio-Rojas, es Física, MSc. en Física y Dra. en Ciencias-Física de la Universidad del Valle, Colombia. Docente e investigadora de la Universidad Autónoma de Occidente, directora del grupo de investigación en nuevos solidos con aplicación industrial (GINSAI) y directora del laboratorio de investigación en análisis térmico de la Universidad Autónoma de Occidente, investigadora en conductores sólidos y materiales. Ganadora del premio nacional al inventor colombiano 2014, ganadora del premio de la Organización Mundial de la Propiedad Intelectual (OMPI) 2014.
ORCID: 000-0002-7158-1223

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Geológica e Ingeniería de Minas y Metalurgia

Oferta de Posgrados

Especialización en Materiales y Procesos
Maestría en Ingeniería - Materiales y Procesos
Maestría en Ingeniería - Recursos Minerales
Doctorado en Ingeniería - Ciencia y Tecnología de Materiales

Mayor información:

E-mail: acgeomin_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 53 68

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

LTA and FAU zeolites from coal combustion and residue by-products for Chromium removal application

Juan Camilo Arroyave-Manco, Johana Catalina Arboleda, Dora Ángela Hoyos-Ayala & Adriana Patricia Echavarría-Isaza

Facultad de Ciencias Exactas, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia. j.arroyavemanco@gmail.com, johana.arboleda@udea.edu.co, dora.hoyos@udea.edu.co, adriana.echavarria@udea.edu.co

Received: August 16th, 2017. Received in revised form: November 21th, 2017. Accepted: December 11th, 2017.

Abstract
In this paper, the process for the synthesis of LTA and/or FAU zeolites from waste materials from mining and manufacturing industry from Antioquia (Colombia) was described. The product was used as adsorbent for the removal of Cr (III) in solutions prepared in the laboratory. The waste materials were characterized by X-ray fluorescence, and X-ray diffraction. The zeolites were characterized by X-ray diffraction, X-ray fluorescence, scanning electron microscopy (SEM) and BET area. Absorption data in Cr(III) removal tests were obtained by elemental composition from atomic absorption spectroscopy, and evaluated by Langmuir, Freundlich and Temkin models, and four kinetics models. The results showed the formation of zeolites from waste materials, and effective in adsorption tests of Cr (III).

Keywords: waste materials; adsorption; zeolite LTA: zeolite FAU: Cr(III) removal.

Zeolitas LTA y FAU obtenidas a partir de cenizas volantes y su aplicación en remoción de Cromo

Resumen
En este artículo se describe el proceso de síntesis de zeolitas LTA y/o FAU a partir de residuos obtenidos de la industria minera y manufacturera de Antioquia (Colombia), y su uso para la remoción de Cr (III). Los residuos industriales fueron caracterizados por Fluorescencia de Rayos X y Difracción de Rayos X. Así mismo, las zeolitas sintetizadas a partir de estos residuos se caracterizaron por medio de Difracción de Rayos X, Fluorescencia de Rayos X, Espectroscopía Electrónica de Barrido (SEM) y Área BET. Por otra parte los datos de adsorción en el equilibrio para la remoción Cr (III) utilizando las zeolitas sintetizadas, fueron obtenidos por espectroscopia de adsorción atómica, y ajustados a los modelos de adsorción Langmuir, Freundlich y Temkin, y cuatro modelos cinéticos. Los resultados indicaron la obtención de zeolitas a partir de residuos industriales eficientes en las pruebas de adsorción de Cr (III).

Palabras clave: residuos industriales; adsorción; zeolita LTA; zeolita FAU; remoción Cr (III).

1. Introducción

Como consecuencia del desarrollo y constante crecimiento industrial y económico del sector manufacturero y minero, se ha presentado un incremento en la generación de residuos sólidos tipo ceniza provenientes de las plantas termoeléctricas de dichas industrias. Particularmente en Colombia se generan alrededor de 600 kt/año de (FA) de cenizas volantes [1], las cuales en su mayoría no se aprovechando debidamente. Dada la problemática ambiental que generan este tipo de residuos se hace necesario la búsqueda de alternativas de manejo para convertir estos subproductos sólidos en productos de mayor valor agregado. Estos residuos poseen una composición química alta en sílice y alúmina mayor al 70%, lo cual los convierten en potenciales precursores para la síntesis de zeolitas.

La obtención de zeolitas a partir de cenizas volantes ha sido reportada en diversos trabajos bajo el método de síntesis hidrotérmica [2–5]. Los productos obtenidos luego del proceso cubren un amplio rango de estructuras zeolíticas pero con bajo

How to cite: Arroyave-Manco, J.C., Arboleda, J.C., Hoyos-Ayala, D.A. and Echavarría-Isaza, A.P., Zeolitas LTA y FAU obtenidas a partir de cenizas volantes y su aplicación en remoción de Cromo. DYNA, 85(204), pp. 150-160, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

rendimiento en la conversión. Sin embargo, con el fin de mejorar el rendimiento de la reacción durante la síntesis, se han estudiado otros métodos como la fusión alcalina previa a la síntesis hidrotermal. Dicho tratamiento facilita la formación de sales de aluminosilicatos de sodio que son altamente activos y solubles en agua, promoviendo a su vez la formación de fases cristalinas de zeolitas con alta de capacidad de adsorción e intercambio catiónico (CEC) [3,6-8].

Es necesario subrayar que las zeolitas son materiales de gran importancia a nivel industrial principalmente como catalizadores, intercambiadores iónicos y adsorbentes. Si bien, en los últimos 20 años el uso de estos materiales en síntesis inorgánica de productos intermedios y químicos finos ha tenido gran crecimiento, también cabe señalar que su uso en aplicaciones ambientales ha aumentado considerablemente gracias a su alta capacidad de adsorción e intercambio iónico. En efecto, las propiedades físico-químicas de estos materiales los hacen bastante útiles en procesos para la remoción de metales pesados o para el ablandamiento de aguas, e incluso residuos nucleares, siendo de especial utilidad zeolitas con alto contenido de aluminio como las zeolitas tipo A y X [3,8,9].

Entra las diversas aplicaciones ambientales de las zeolitas se destaca la remoción de cromo, aplicación en la cual dichos materiales han demostrado ser altamente eficientes. Por lo que se refiere al cromo, este es uno de los metales de mayor uso a nivel industrial, puesto que está involucrado en gran variedad de procesos como curtientes, pigmentos y conservantes textiles, aleaciones, pinturas, catalizadores, agentes anticorrosivos, fungicidas, conservantes de madera, recubrimientos metálicos, electrogalvanizados, entre otros [10]. Actualmente, no se encuentran tecnologías necesarias para la remoción de este metal en aguas residuales, inclusive se han encontrado procesos industriales en los cuales no se presenta ningún control de este contaminante en los residuos. A causa de ello el estudio de materiales y tecnologías que puedan ser aplicados para la remoción de cromo en distintos procesos industriales se ha convertido en un tema de investigación profunda.

De acuerdo a lo anterior, en este artículo se propone el desarrollo de procesos a escala de laboratorio para la producción de zeolitas tipo A y X a partir de residuos generados por industrias locales de Antioquia, con el fin de evaluar su capacidad como adsorbente en la remoción de Cr^{3+}, y evaluar los fenómenos físico-químicos y la cinética que tiene lugar durante la adsorción del metal mediante un ajuste matemático a tres modelos isotérmicos de adsorción Langmuir, Freundlich y Temkin; y cuatro perfiles cinéticos.

2. Metodología experimental

2.1. Selección de residuos industriales

Luego de un estudio de diferentes residuos generados en las industrias del departamento de Antioquia, se seleccionaron diversas actividades con alto impacto ambiental en el medio. Dicha selección buscaba intervenir actividades empresariales que fueran representativas en el departamento, y en donde la cantidad de residuos producidos fuera significativa. En particular, las actividades económicas seleccionadas fueron principalmente la explotación de minas y canteras e industrias manufactureras, como se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1.
Residuos industriales utilizados en la obtención de zeolitas

Sigla	Fuente
ETR	Escoria de la industria textil
EA	Escoria de planta de alimentos
JMn	Residuo proveniente de la extracción de manganeso
CMA	Ceniza de ciclón de planta de alimentos
CHI	Ceniza de hogar proveniente de planta textil
CMTI	Ceniza multiciclones proveniente de planta textil

Fuente: Autores

2.2. Síntesis de zeolitas

Para la síntesis de las zeolitas a partir de los residuos seleccionados en la Tabla 1, se mezcló homogéneamente una cantidad del residuo con hidróxido de sodio (NaOH Merck) en una relación 1/1.2 en peso. Dicha mezcla se calcinó en una cápsula de platino a 700°C durante tres horas a una velocidad de 1°C/min, en una etapa conocida como fusión alcalina. El sólido resultante se mezcló con agua desionizada en una proporción de 4.89 mL H_2O/g residuo, y se coloco en agitación continua por 24 horas. El gel resultante se dispuso en reactores de acero inoxidable con recubrimiento interno de teflón para la cristalización, a una temperatura de 100 °C, durante varias horas. Para minimizar efectos en la co-cristalización de fases semicristalinas se convino, (i) ajustar la relación Si/Al en el gel de síntesis a un valor cercano a 1, mediante la adición de alúmina pseudobohemita ($NaAlO_2$ Riedel-de Haen) en el gel de síntesis, y (ii) utilizar distintos tiempo de cristalización de 7 y 24 horas. Finalmente, el sólido obtenido se recuperó por filtración al vacío y secado a 60°C por 8 horas.

2.3. Caracterización de los materiales

La composición química de los residuos y materiales obtenidos luego de la transformación hidrotérmica fue determinada por fluorescencia de rayos - X en un espectrómetro PANalytical® modelo Axios de longitud de onda dispersiva con fuente de Rodio. Las muestras fueron perladas en una relación de 1/7 g muestra/g de fundente. De igual forma, se identificaron las distintas fases cristalinas presentes en los sólidos por Difracción de Rayos X (XRD) en un difractómetro PANalytical® Empyrean, equipado con tubo de rayos - X de Cu en configuración θ -2 θ. La recolección de datos se llevó a cabo en el rango 2θ (5-50°), con un tamaño de paso de 0.02°. Los difractogramas fueron analizados mediante refinamiento Rietveld semicuantitativo en el programa Xpert Highscore Plus V3.0 utilizando la base de datos (ICSD) suministrado por PANalytical®.

Por otra parte, la morfología de los productos sintetizados fue determinada por microscopía electrónica de barrido (SEM) en el equipo Jeol JSM-6490LV, usando como detector multielementos de estado sólido de electrón retrodisperso y una resolución de 3.0 mm. Los materiales fueron preparados por deposición del producto en un portamuestras de aluminio usando discos de carbón adhesivo recubiertos con oro para reducir la carga estática. Finalmente, el área BET y volumen de microporos de las zeolitas sintetizadas fueron determinados en un equipo Micromeritics ASAP 2020 Plus, con 100 mg de zeolita, desgasificación a 90°C por una hora y posterior calentamiento a 10°C/min hasta 350 °C por 8 horas.

La capacidad de intercambio iónico efectiva se determinó mediante un proceso en el cual 10 g del material se puso en contacto con 500 mL de una solución de NH_4Cl de concentración molar 0.25 mol/L, bajo agitación constante durante 24 horas; tiempo después del cual se analizó el contenido de sodio (Na) y potasio (K) por adsorción atómica.

2.4. Remoción de Cromo

Se realizaron estudios de sorción de cromo por lotes para determinar los datos de equilibrio y velocidad del sistema. Para ello se usaron distintas soluciones de nitrato de Cromo ($CrNO_3$ $9H_20$) de 42, 88, 135, 150 y 200 ppm preparadas con agua destilada. En particular, se adicionaron 50 mL de estas soluciones a distintos balones volumétricos que contenían diferentes cantidades del material sintetizado (0.1 g, 0.175 g y 0.25 g). Dichas soluciones fueron agitadas magnéticamente y filtradas al vacío luego de ciertos tiempos de contacto con el adsorbente (5, 10, 20, 60 y 90 min). Finalmente, la solución sobrenadante de cromo fue analizada por absorción atómica.

Es preciso definir que la concentración de cromo retenida en el adsorbente es calculada como la diferencia entre la concentración original de la solución y la concentración final en solución luego del equilibrio. El balance de masa puede ser expresado mediante la eq. 1 como:

$$W(q_e-q_0)=V(C_0-C_e) \qquad q_0 = 0 \qquad (1)$$

Donde q_0 y q_e son las concentraciones iniciales y en el equilibrio del adsorbente respectivamente, y C_0 y C_e las concentraciones iniciales y en el equilibrio de la solución respectivamente.

La aplicación exitosa del proceso de adsorción requiere del desarrollo de los modelos característicos (Langmuir, Freundlich y/o Temkin) y de los parámetros cinéticos que rigieron la sorción del metal. Por ello, el efecto del tiempo de contacto, la cantidad de adsorbente y la concentración del adsorbato fueron estudiadas.

3. Resultados y discusión

3.1. Residuos industriales

En la caracterización físico química de los residuos industriales se utilizaron en específico dos técnicas convencionales. En la primera de ellas se determinó la composición química mediante fluorescencia de rayos - X, como se muestra en la Tabla 2, permitiendo hallar la relación SiO_2/Al_2O_3 y la presencia de distintos elementos que se encuentran en los residuos. Dicha composición es determinante al momento de seleccionar los residuos que serán usados para la obtención de las zeolitas, puesto que como se ha concluido en diversos estudios la relación SiO_2/Al_2O_3 es uno de los parámetros más importantes en la síntesis [5,11]. Particularmente, una relación SiO_2/Al_2O_3 de 1.2 es el valor apropiado para obtener materiales tipo zeolita de bajo contenido de Si con una alta capacidad de intercambio iónico.

Tabla 2.
Composición química de los residuos (%p/p)

	ETR	EA	JMn	CMA	CHI	CMTI
SO_3	2.41	0.92	0.13	5.28	1.68	0.56
Na_2O	1.25	0.79	ND	3.35	0.26	0.34
Al_2O_3	27.38	31.48	15.01	21.63	33.68	31.20
SiO_2	35.34	46.72	46.73	27.16	44.41	45.52
K_2O	1.37	1.84	2.69	1.43	1.48	1.33
CaO	3.23	3.39	1.14	5.50	5.80	6.87
Fe_2O_3	5.23	4.87	15.22	4.87	8.85	9.24
ZnO	ND	ND	ND	0.13	ND	ND
MgO	0.94	0.73	3.13	0.77	1.28	1.61
TiO_2	1.08	1.33	0.63	0.91	1.42	1.38
CuO	ND	ND	0.63	ND	ND	ND
PbO	ND	ND	ND	ND	ND	ND
BaO	0.31	0.17	1.07	0.23	0.29	0.33
V_2O_5	0.15	0.12	ND	0.12	0.16	ND
MnO	ND	ND	8.41	ND	ND	ND
SiO_2/Al_2O_3	1.29	1.48	3.11	1.26	1.32	1.35

ND: no detectable –límite de detección < 0.05
Fuente: Autores

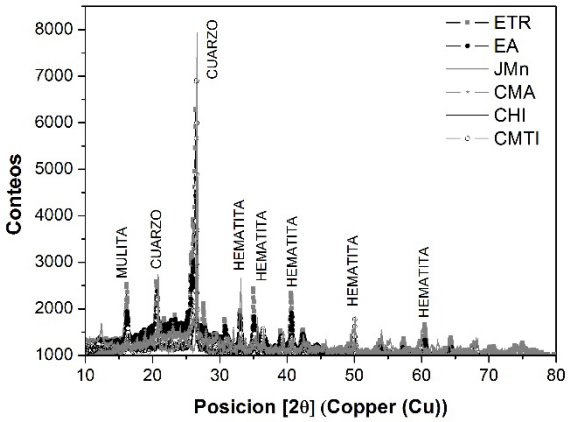


Figura 1. Difractograma residuos industriales
Fuente: Autores

Por otro lado, mediante difracción de rayos X se logró determinar la presencia de distintas fases cristalinas en los residuos, tal como se muestra en la Fig. 1. Como resultado, se lograron identificar tres fases cristalinas principales correspondientes al cuarzo, la mulita y la hematita.

Adicionalmente, se determinó la capacidad de intercambio iónico efectiva de estos residuos. Como era de esperarse la capacidad de intercambio iónica de estos residuos se encuentra muy por debajo de los valores encontrados para otras fases minerales y zeolitas con alta capacidad de intercambio (caolinita, 3-15 meq/100g; vermiculita 100-150 meq/100g, bentonita, 100 meq/100g, faujasita, 390 meq/100g, mordenita 230 meq/100g) [10] como se muestra en la Tabla 3.

3.2. Caracterización zeolitas

El sólido obtenido luego de realizar el tratamiento térmico (fusión alcalina) e hidrotérmico a los residuos seleccionados fue caracterizado bajo diversas técnicas. Como primer paso

Tabla 3.
Capacidad de intercambio iónico efectiva

Residuo	Capacidad de intercambio iónico efectiva (meq/100g)
ETR	0.0028
EA	0.0100
JMn	0.0022
CMA	0.0077
CHI	0.0870
CMTI	0.1000

Fuente: Autores

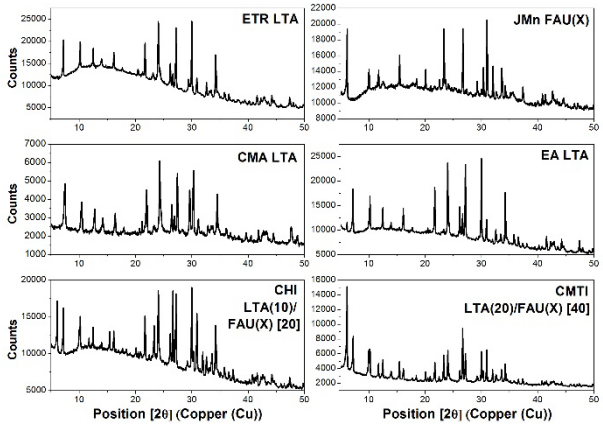


Figura 2. Difractograma de rayos X para Zeolitas sintetizadas a partir de residuos
Fuente: Autores

se realizó una identificación estructural del solido por medio de difracción de rayos – X, donde se pudo observar un decrecimiento en la intensidad de las reflexiones de cuarzo y mulita en los residuos utilizados, conjunto con la aparición de picos correspondientes a las fases LTA, FAU, CAN, SOD (ver Fig. 2). La presencia de estas fases revela una secuencia de reacciones durante la transformación de los residuos, que podría comenzar con la formación de un material amorfo seguido por la subsecuente co-cristalización de las fases LTA, FAU, LTA-FAU y/o CAN y SOD. Estos resultados son consecuentes con el carácter meta-estable de las fases zeolíticas obtenidas. La aparición conjunta de fases meta estables se ve favorecida por las diferencias en la relación Si/Al y el efecto de los cationes presentes en las materias primas y/o residuos.

Cabe señalar que se pudo observar ciertas características específicas en el proceso de síntesis. Por un lado, las zeolitas sintetizadas a partir de los residuos EA, CMTI, y CHI, evidenciaron el aumento en la formación de zeolita LTA luego de la adición de $NaAlO_2$. Simultáneamente, el aumento en el tiempo de cristalización condujo a un aumento de la fase FAU en todos los casos de síntesis, independiente de la adición de $NaAlO_2$. No obstante, la proporción de la fase FAU disminuyo paulatinamente en relación al contenido de potasio en el gel de síntesis, promoviendo así la formación de la fase LTA (CMTI ≥ CMA ≥ CHI ≥ EA ≥ JMn). Particularmente, este hecho se manifiesta debido a que el potasio no tiene la capacidad de compensar las numerosas cargas negativas, dado su gran volumen con respecto al sodio, facilitando así la sustitución de Si por Al (reduciendo la aparición de cargas negativas) en la estructura e induciendo la formación de la zeolita FAU, que posee una relación Si/Al más alta.

De igual manera por medio de difracción de rayos – X se puede realizar un análisis semicuantitativo más detallado de los porcentajes en peso de la fase amorfa y cristalina para cada producto. En general, tal como se muestra en la Tabla 4, se observó aparte de la formación de zeolitas, la alta proporción de fase amorfa que puede ser referida a la presencia de geopolímeros [1,12]. Específicamente, los geopolímeros pueden ser identificados como el equivalente amorfo de estructuras cristalinas de aluminosilicatos que coinciden en composición química con las zeolitas, pero que presentan una estructura desordenada a diferencia de la estructura ordenada propia de las zeolitas [13].

Además de la identificación estructural arrojada por difracción de rayos – X, los sólidos sintetizados se caracterizaron por fluorescencia de rayos – X para determinar su composición química. De los resultados de fluorescencia de rayos X mostrados en la Tabla 5, se observa que el porcentaje en peso de los materiales sintetizados cambia luego de los tratamientos realizados.

En general, las impurezas de los residuos de partida disminuyen bien sea por la acción de los tratamientos térmicos e hidrotérmicos y/o por efectos de dilución luego de la adición de nuevos componentes en el gel de síntesis como la alúmina y el NaOH. No obstante, los porcentajes de Na^+

Tabla 4.
Cuantificación Rietveld fases cristalinas y/o amorfas (%p/p)

	ETR LTA	JMn FAU(X)	CMA LTA	EA LTA	CHI LTA (10)/ FAU(X)[20]	CMTI LTA (20)/ FAU(X)[40]
LTA	34.40	0.00	37.40	39.80	10.20	22.40
FAU X	0.00	44.70	0.00	0.00	19.60	38.30
Cuarzo	0.90	0.00	0.60	2.60	3.40	0.00
Hematita	0.10	1.90	3.50	2.40	0.80	1.90
CAN	7.00	0.20	1.70	9.10	7.50	0.80
Nefelina	6.50	1.50	0.00	0.00	0.00	0.00
Calcita	0.00	0.00	5.60	0.00	0.00	0.00
Dolomita	0.00	0.00	1.50	0.00	0.00	1.40
Albita	0.00	0.00	9.90	0.00	0.00	8.10
ANA	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.40
Fase amorfa	51.00	51.30	39.70	45.90	58.60	25.70

Fuente: Autores

Tabla 5.
Composición Química zeolitas sintétizadas

	ETR LTA	JMn FAU(X)	CMA LTA	EA LTA	CHI LTA (10)/ FAU(X)[20]	CMTI LTA (20)/ FAU(X) [40]
SO_3	0.06	ND	ND	0.13	ND	ND
Na_2O	15.30	13.30	13.36	12.60	12.06	15.24
Al_2O_3	30.70	29.90	19.10	28.60	28.90	26.80
SiO_2	41.20	41.50	33.90	39.10	42.08	43.00
K_2O	0.70	0.77	0.74	0.51	0.46	0.54
CaO	3.46	5.62	1.04	8.10	5.13	4.61
Fe_2O_3	5.44	4.99	15.91	6.72	7.36	6.07
ZnO	ND	ND	ND	ND	ND	ND
MgO	1.52	2.20	3.03	2.19	2.24	2.20
TiO_2	1.13	1.31	0.61	1.25	1.26	1.15
CuO	ND	ND	0.55	ND	ND	ND
PbO	0.34	0.34	1.52	0.43	0.33	0.25
BaO	ND	ND	ND	ND	ND	ND
V_2O_5	ND	ND	10.16	ND	ND	ND
MnO	1.34	1.39	1.77	1.37	1.46	1.60
SiO_2/ Al_2O_3	0.06	ND	ND	0.13	ND	ND

ND: no detectable –límite de detección < 0.05
Fuente: Autores

aumentan significativamente debido a la incorporación de NaOH como agente mineralizante en la síntesis de los materiales. Este hecho en específico se debe a la captura de iones Na^+ por parte de la estructura zeolitica, con el fin de neutralizar la carga negativa del aluminio en la zeolita y/o geopolímero cuando estos se han formado [14].

Por otra parte, luego de conocer detalladamente las características estructurales y químicas de los sólidos sintetizados, fue necesario la caracterización morfológica y textural con el fin de tener un mapa de caracterización más completo del sólido.

En primer lugar, la morfología del solido fue identificada por microscopia electrónica de barrido. En las microfotografías obtenidas y presentadas en las Fig 3-6, se logra evidenciar la presencia de agregados policristalinos de prismas tetragonales, y la aparición de agolomerados lefisfericos alrededor de la superficie de los prismas tetragonales, tal como se muestran en la Fig. 3 y 4. Particularmente, los aglomerados lefisfericos son característicos de las fases sodalita y cancrinita, mientras los prismas tetragonales representan una morfología típica de cristales de las fases LTA y FAU [15,16]. Además de ello en las Fig. 5 y 6, se observa un crecimiento epitaxial de una morfología cubica perfecta, característica de la fase LTA, con una interpenetración de una morfología octaédrica, característica de la fase FAU. Estos agregados son similares a los crecimientos epitaxiales entre las fases LTA y FAU descritos por varios autores [17-19].

Por otra parte, el tamaño de partícula de las zeolitas sintéticas determinada en las micrografías correspondió a los siguientes valores: 6 µm para ETR LTA, 1 µm para EA LTA, 3 µm para JMn FAU(X), 4 µm para CMA LTA, 1.5 µm para CHI LTA(10)/FAU(X)[20], y 2 µm para CMTI LTA(20)/FAU(X)[40]. Además de ello, también se pudo identificar pequeñas trazas de cenosferas de alrededor de 1 µm. Finalmente estas características descritas anteriormente corresponden a los patrones morfológicos de las fases halladas por difracción de rayos - X.

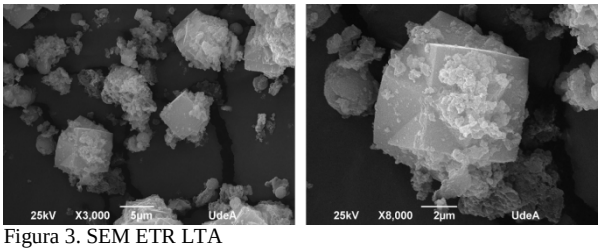


Figura 3. SEM ETR LTA
Fuente: Autores

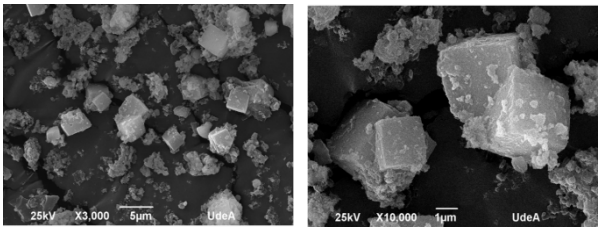


Figura 4. SEM CMA LTA
Fuente: Autores

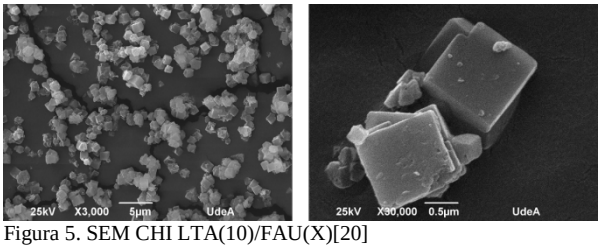


Figura 5. SEM CHI LTA(10)/FAU(X)[20]
Fuente: Autores

Avanzando en la caracterización textural, se pudo determinar mediante fisisorción de N_2 las propiedades texturales de los materiales sintetizados, tal como se resume en la Tabla 6. Particularmente, las isotermas de adsorción de N_2 mostradas en la Fig. 7-a para los materiales sintetizados,

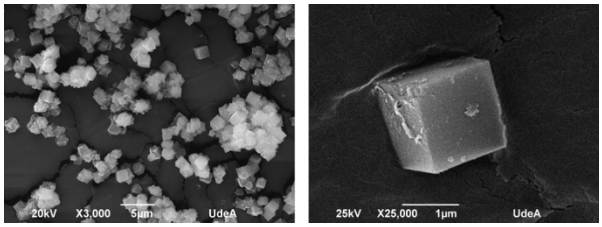


Figure 6. SEM CMTI LTA(20)/FAU(X)[40]
Fuente: Autores

Tabla 6.
Propiedades texturales zeolitas sintéticas

	Área total (m^2/g)	Vol. total poro (cm^3/g)	Vol. micro-poro (cm^3/g)	Área micro-poro (m^2/g)	Área externa (m^2/g)
ETR LTA	52.58	0.02	0.01	34.43	18.15
EA LTA	118.89	0,06	0.03	68.27	50.63
JMn FAU(X)	490.71	0.19	0.15	393.05	97.65
CMA LTA	116.31	0.02	0.06	44.30	72.01
CHI LTA(10) /FAU(X)[20]	289.96	0.08	0.14	218.41	71.55
CMTI LTA(20) /FAU(X)[40]	359.91	0.15	0.11	292.67	67.24

Fuente: Autores

presentan una isoterma tipo IV, según la clasificación IUPAC, con una histéresis a una presión relativa de 0.4. Así mismo, las isotermas de desorción de N_2 presentan una histéresis tipo H1, que evidencia la aglomeración de partículas en el sólido [20], características en su totalidad típicas de sólidos microporosos.

No obstante y a pesar de que las isotermas de adsorción-desorción presentadas por los todos los sólidos son del mismo tipo, la cantidad de volumen adsorbida por cada zeolita es diferente, e incrementa cuando la fase cristalina mayoritaria es del tipo FAU. Dicha característica es más evidente cuando se grafica la distribución de tamaño de poro (DFT) mostrado en la Fig. 7-b, en donde se observa un incremento en la formación de microporos alrededor de 0.6 nm para las zeolitas JMn FAU(X), CHI LTA(10)/FAU(X)[20] y CMTI LTA(20)/FAU(X)[40] comparado con las zeolitas ETR LTA, EA LTA y CMA LTA.

3.3. Remoción de Cr(III)

Finalmente, luego de haber caracterizado el material y tener certeza sobre sus propiedades físico-químicas, se procedió a realizar las pruebas de remoción de cromo en sistemas por lotes usando los materiales sintetizados. En particular se realizaron un total de 450 experimentos para la remoción catiónica de Cr3+, en donde se tuvo en cuenta variables como la concentración del ion metálico, la cantidad de zeolita sintetizada y el tiempo de contacto. La correlación en estos datos medida a través del coeficiente de correlación por el paquete estadístico de EXCEL arrojo valores superiores a 0.98.

3.3.1. Comparación modelos de equilibrio

Luego de obtener una buena correlación entre los datos obtenidos, se realizó un ajuste matemático de los datos sobre

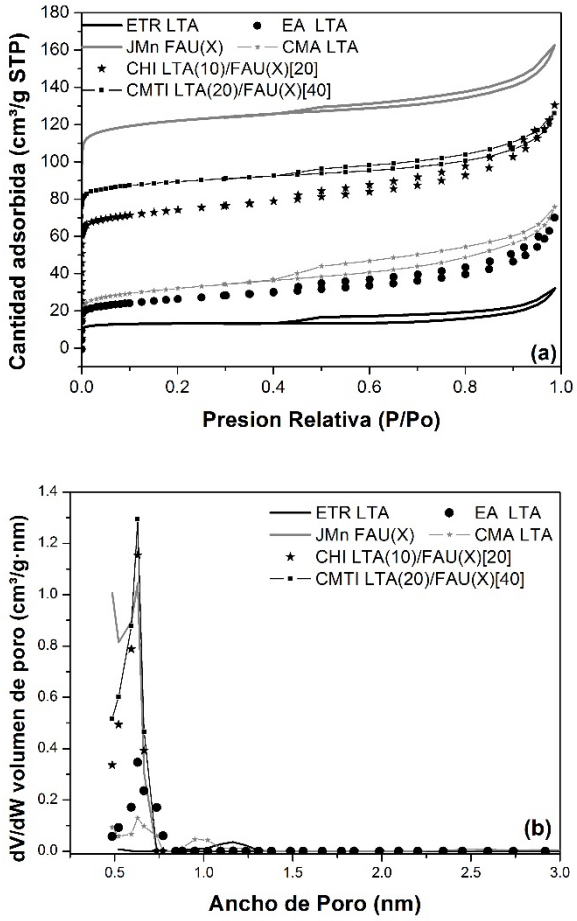


Figura 7 (a) Isotermas de adsorción de N2, (b) Distribución de tamaño de poro (DFT).
Fuente: Autores

tres modelos de adsorción (Langmuir, Freundlich y Temkin), que describen el efecto que se tiene sobre la concentración del metal en la solución luego de haber logrado el equilibrio químico y posterior adsorción sobre el material adsorbente.

Bajo el primer modelo de Langmuir, representado en la eq. 2, la adsorción se explica como un fenómeno de quimisorción monocapa del adsorbato, cromo en este caso, sobre el adsorbente.

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

El segundo modelo o modelo de Freundlich representado en la eq. 3, describe la adsorción como un proceso de fisisorción multicapa bajo la cual la adsorción varía exponencialmente debido al recubrimiento superficial sobre el adsorbente.

$$\log q_e = \log K + \frac{1}{n} \log C_e \quad (3)$$

Y por último el modelo de Temkin, representado en la eq.

4 describe sistemas cuya entalpía de adsorción decrece linealmente con el porcentaje de posiciones ocupadas sobre la superficie del adsorbente.

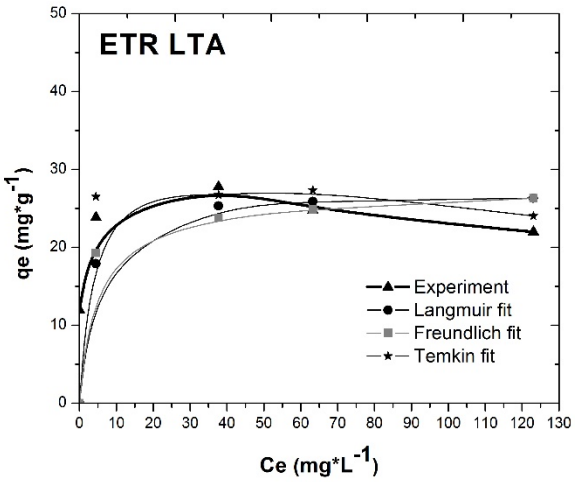
$$q_e = A + \mathrm{B}\log C_e \quad (4)$$

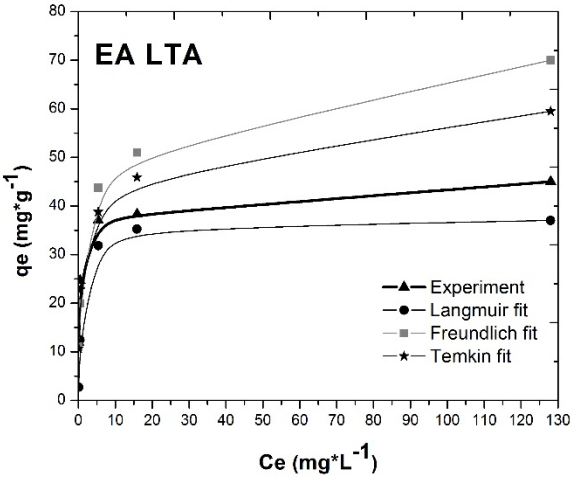
En estas tres ecuaciones los parámetros indican: b [=] $L \cdot mg^{-1}$ constante de afinidad adsorbente – adsorbato, q_m [=] $mg \cdot L^{-1}$ capacidad máxima de sorción del adsorbente, C_e [=] $mg \cdot L^{-1}$ concentración en equilibrio del metal en solución acuosa, q_e [=] $mg \cdot g^{-1}$ cantidad de cationes metálicos adsorbidos por gramo de adsorbente en equilibrio, K [=] $(mg \cdot g^{-1})(mg \cdot L^{-1})$ indicador aproximado de la capacidad de adsorción, 1/n [=] intensidad de la adsorción, A [=] $(mg \cdot g^{-1})$ capacidad máxima de adsorción, y B [=] $(L \cdot mg^{-1})$ la energía de adsorción.

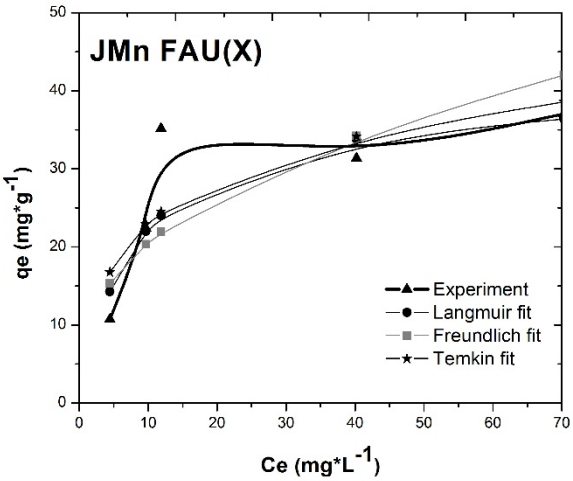
Como resultado se obtuvieron las isotermas de adsorción presentadas en la Fig. 8, donde se representa la relación entre la cantidad de cromo adsorbido por unidad de masa del adsorbente (q_e) y la concentración de cromo en el equilibrio (C_e). Además de ello, para la determinación de cada uno de los parámetros de los modelos en cuestión, fue necesario un ajuste mediante regresiones lineales del paquete estadístico de EXCEL, en donde se pudo estimar el coeficiente de determinación. Los parámetros obtenidos se reportan en la Tabla 7.

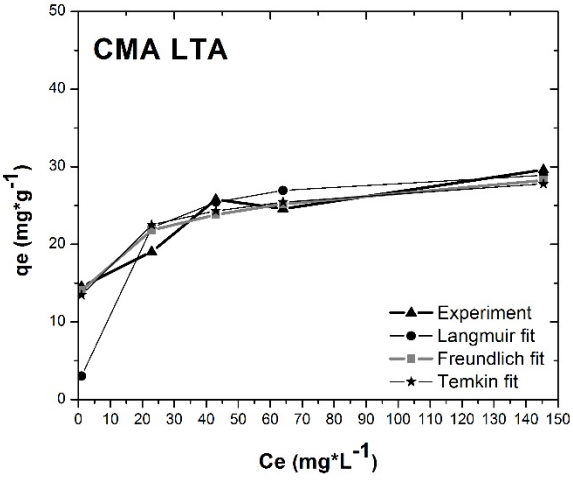
En general y como de esperarse se logra apreciar que los datos experimentales para la remoción de Cr^{3+} se ajustan mejor al modelo matemático de Langmuir, en donde se observan coeficientes de determinación R^2 superiores a 0.97. Este hecho supone que la adsorción del metal sobre las zeolitas sintetizadas se da como un fenómeno de atracción electrostática en donde la energía de adsorción es uniforme.

Durante este proceso de adsorción, los cationes metálicos tienden a moverse a través de los poros y los canales de la zeolita reemplazando en su desplazamiento cationes intercambiables como el sodio Na^+ y el potasio K^+, presentes en los materiales sintetizados como se evidencia en la Tabla 5.









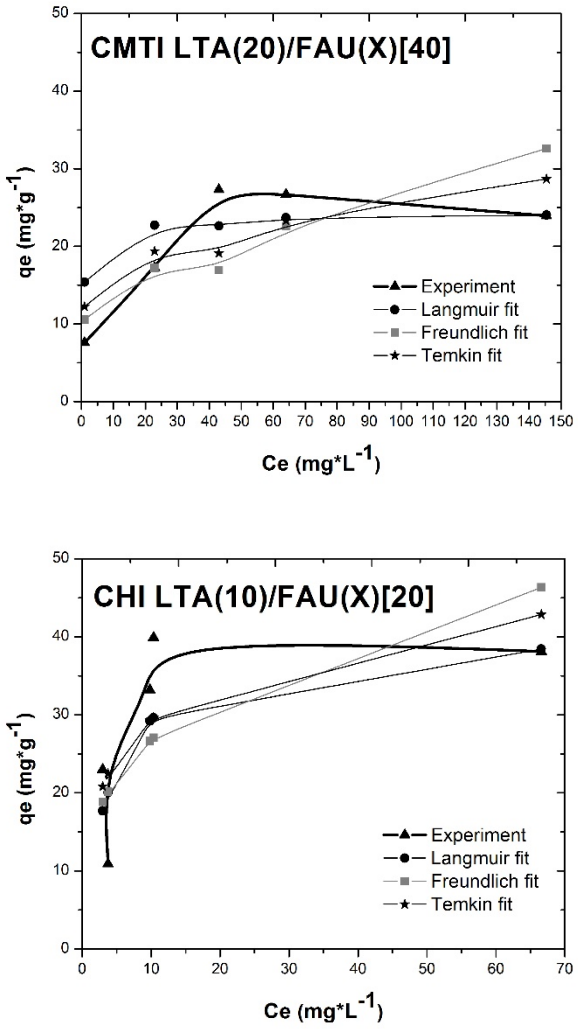


Figura 8. Capacidad de equilibrio (qe) versus concentración en el equilibrio (Ce) para la adsorción de Cr^{3+} con zeolitas sintetizadas a partir de cenizas. Fuente: Autores

Por otra parte se puede asumir que debido al pH de la solución y la electronegatividad del cromo, se pueden formar complejos hidroxilados tal como se presenta en la eq. 10, que son fácilmente adsorbidos sobre la superficie catiónica de la zeolita.

$$Cr^{3+} + 2H_2O \leftrightarrow Cr(OH)_2^{+} + 2H^{+} \quad (10)$$

Particularmente en algunos materiales como la zeolita CMA LTA se presentan buenos coeficientes de determinación R^2 para los modelos de Freundlich y Temkin, indicando que la adsorción de Cr^{3+} sobre este material no se realizó de manera tan uniforme como en los demás casos. Este hecho se debe quizás a la alta presencia de hematita (Fe_2O_3) en la superficie del material, como se evidencia en la Tabla 4 y 5, que supone impedimentos estéricos para la adsorción del metal.

Tabla 7.
Parámetros estimados de las Isotermas

	Langmuir		
	Qm mg/g	b (L/mg)	R^2
ETR LTA	40.00	0.10	0.97
EALTA	41.00	0.90	0.98
JMn FAU(X)	31.60	1.40	0.99
CMA LTA	30.70	0.10	0.98
CHI LTA(10)/FAU(X)[20]	16.10	0.10	0.91
CMTI LTA(20)/FAU(X)[40]	24.00	4.40	1
	Freundlich		
	Kf	n	R^2
ETR LTA	8.87	2.74	0.6
EALTA	23.9	1.91	0.6
JMn FAU(X)	15.1	8.26	0.6
CMA LTA	14	7.17	0.9
CHI LTA(10)/FAU(X)[20]	13.8	3.46	0.5
CMTI LTA(20)/FAU(X)[40]	13	4.6	0.6
	Temkin		
	Kt	B	R^2
ETR LTA	4.9	7.9	0.7
EALTA	27.8	6.5	0.6
JMn FAU(X)	16.1	2.1	0.5
CMA LTA	4.02	10.4	0.9
CHI LTA(10)/FAU(X)[20]	7.1	13.1	0.5
CMTI LTA(20)/FAU(X)[40]	3.2	15.2	0.5

Fuente: Autores

No obstante, estos resultados reflejan que en todos los casos se da una adsorción favorable del metal sobre la zeolita, bajo un modelo acorde a los fenómenos superficiales que se evidencian en la estructura zeolitica. Así mismo, los parámetros obtenidos en la Tabla 7 demuestran que la remoción de Cr^{3+} por parte de los materiales sintetizados es tan efectiva como aquella lograda por otros materiales: ANIZ: Langmuir-Q_o=24, Freundlich-K_f=3.33; Zeolita NaX: Langmuir-Q_o=24, Freundlich-K_f=3.33; Al_2O_3: Langmuir Q_o=24, Freundlich K_f=3.33; zeolite Y comercial Langmuir-Q_o=64 [21].

3.3.2. Comparación modelos cinético

Por otro lado, así como los modelos de adsorción ayudan a establecer la eficiencia en el proceso, también es importante determinar el mecanismo cinético. Los modelos cinéticos de adsorción expresan el tiempo de contacto requerido para la completa adsorción de la especie química. A partir de ellos podemos establecer las condiciones óptimas para un proceso de remoción continua del metal y/o escalado a nivel industrial. Para ello cuatro modelos cinéticos en la interface solido líquido del material zeolitico fueron estudiados [6,22].

El primer modelo representado en la eq. 5, está basado en la variación de la concentración de la solución.

$$-\log(C_A/C_{A0}) = k_1 t \quad (5)$$

El segundo modelo, representado en la eq. 6, está basado en la concentración de la solución y el sólido.

$$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = k_1 t \quad (6)$$

El tercer modelo denominado modelo de primer pseudo-orden o de Lagergren, representado en la eq. 7, está basado en la capacidad de adsorción del sólido.

$$\log(q_e - q_t) = \log q_e - k_1 t \quad (7)$$

Y finalmente el modelo de segundo pseudo-orden o de Ho&Mckay, representado en la eq. 8, está basado en la quimisorción entre el adsorbato-adsorbente.

$$\frac{1}{q_t} = \frac{1}{k_1 q_e^2} + \frac{1}{q_e} t \quad (8)$$

Los parámetros en estos modelos indican: k_1[=]min^{-1} constante de velocidad de adsorción, C_A[=]$mg{\cdot}L^{-1}$ concentración final del metal en solución acuosa, C_{AO}[=]$mg{\cdot}L^{-1}$ concentración inicial del metal en solución acuosa, q_t[=]$mg{\cdot}g^{-1}$ cantidad de cationes metálicos adsorbidos por gramo de adsorbente en el tiempo y q_e[=]$mg{\cdot}g^{-1}$ cantidad de cationes metálicos adsorbidos por gramo de adsorbente en equilibrio.

Los datos de remoción de cromo obtenidos en función del tiempo fueron entonces ajustados a estos modelos cinéticos y nuevamente se determinaron los parámetros mediante regresiones lineales del paquete estadístico de EXCEL. De acuerdo al ajuste lineal realizado y presentado en la Tabla 8, los coeficientes de determinación R^2 sugieren que el modelo cinético de pseudo-segundo orden describe de forma adecuada el mecanismo cinético de adsorción de cromo sobre la zeolita sintetizada. Este mecanismo indica una adsorción química del metal sobre el material sintetizado en correlación al modelo de adsorción encontrado, que De igual modo se puede asumir que la difusión del metal en los canales de la zeolita no es la etapa limitante en el proceso de adsorción del cromo en la zeolita [23], lo cual explicaría la adsorción uniforme sobre la superficie del material adsorbente.

Se observa entonces tal como lo demuestra la constante de velocidad de adsorción en este modelo, que los porcentajes de remoción de cromo son altos en soluciones no saturadas del metal (88 ppm), pero como era de esperarse a medida que la concentración del metal aumenta (150 y 200 ppm) la remoción tiende a disminuir debido a la saturación superficial de la estructura zeolitica.

4. Conclusiones

A partir de métodos hidrotérmicos de síntesis y fusión alcalina, se lograron sintetizar satisfactoriamente zeolitas tipo LTA y FAU a partir de residuos de la industria minera y manufacturera de Antioquia, obteniéndose en su mayoría fases puras y/o combinaciones entre estas zeolitas, y mostrando buenas características texturales y morfológicas apropiadas para procesos de adsorción.

Dichos materiales se utilizaron exitosamente como adsorbentes en pruebas de remoción de Cr^{3+}, determinándose la capacidad de adsorción y el modelo cinético para la remoción de Cr^{3+} de cada material sintetizado. En general las isotermas experimentales se ajustaron al modelo Langmuir que describe una adsorción monocapa sobre una superficie que contiene un número infinito de sitios idénticos.

Tabla 8.
Modelo cinético

	Modelo Cinético (Primer orden)						
	88 ppm		150 ppm		200 ppm		Prom
	K_1 min^{-1}	R^2	K_1 min^{-1}	R^2	K_1 min^{-1}	R^2	
ETR LTA	0.01	0.33	0.01	0.79	0.00	0.82	0.01
EA LTA	0.04	0.87	0.02	0.56	0.03	0.86	0.03
JMn FAU(X)	0.03	0.73	0.03	0.87	0.02	0.95	0.03
CMA LTA	0.00	0.69	0.01	0.64	0.01	0.47	0.01
CHI LTA(10)/ FAU(X)[20]	0.04	0.54	0.01	0.86	0.03	0.84	0.03
CMTI LTA(20)/ FAU(X)[40]	0.02	0.52	0.01	0.82	0.02	0.56	0.02

	Modelo Cinético (Segundo orden)						
	88 ppm		150 ppm		200 ppm		Prom
	K_1 min^{-1}	R^2	K_1 min^{-1}	R^2	K_1 min^{-1}	R^2	
ETR LTA	0.01	0.33	0.01	0.79	0.00	0.82	0.01
EA LTA	0.05	0.87	0.02	0.56	0.03	0.86	0.03
JMn FAU(X)	0.04	0.73	0.03	0.87	0.02	0.95	0.03
CMA LTA	0.00	0.69	0.01	0.64	0.01	0.47	0.01
CHI LTA(10)/ FAU(X)[20]	0.04	0.54	0.01	0.86	0.03	0.84	0.03
CMTI LTA (20)/ FAU(X)[40]	0.02	0.52	0.01	0.82	0.02	0.56	0.02

	Modelo Cinético (Pseudo Primer Orden)						
	88 ppm		150 ppm		200 ppm		Prom
	K_1 min^{-1}	R^2	K_1 min^{-1}	R^2	K_1 min^{-1}	R^2	
ETR LTA	0.01	0.33	0.01	0.79	0.00	0.82	0.01
EA LTA	0.05	0.87	0.02	0.56	0.03	0.86	0.03
JMn FAU(X)	0.04	0.73	0.03	0.87	0.02	0.95	0.03
CMA LTA	0.00	0.69	0.01	0.64	0.01	0.47	0.01
CHI LTA(10)/ FAU(X)[20]	0.04	0.54	0.01	0.86	0.03	0.84	0.03
CMTI LTA(20)/ FAU(X)[40]	0.02	0.52	0.01	0.82	0.02	0.56	0.02

	Modelo Cinético (Pseudo Segundo Orden)						
	88 ppm		150 ppm		200 ppm		Z
	K_1 min^{-1}	R^2	K_1 min^{-1}	R^2	K_1 min^{-1}	R^2	
ETR LTA	0.01	0.33	0.01	0.79	0.00	0.82	0.01
EA LTA	0.05	0.87	0.02	0.56	0.03	0.86	0.03
JMn FAU(X)	0.04	0.73	0.03	0.87	0.02	0.95	0.03
CMA LTA	0.00	0.69	0.01	0.64	0.01	0.47	0.01
CHI LTA(10)/ FAU(X)[20]	0.04	0.54	0.01	0.86	0.03	0.84	0.03
CMTI LTA(20)/ FAU(X)[40]	0.02	0.52	0.01	0.82	0.02	0.56	0.02

Fuente: Autores

Este modelo estuvo correlacionado con el modelo cinético encontrado de pseudo segundo orden, que indica un proceso de quimisorción sobre el adsorbente. Es claro

entonces que la adsorción del metal aumenta rápidamente hasta lograr una saturación superficial en la estructura debido a dos fenómenos en particular. En el primero de ellos se sugiere que existe una concentración comparable de especies catiónicas en los centros activos de la zeolita las cuales puedes ser intercambiadas con el metal en cuestión. Por otro lado la presencia de complejos hidroxilados de cromo aumenta la adsorción de la especie metálica en la superficie de la estructura zeolitica.

Particularmente se evidencio que las zeolitas ETR LTA y EA LTA son los materiales que muestran un mayor desempeño en el proceso de remoción de cromo. Este hecho se evidencia por la alta capacidad de adsorción (Qm) determinada en el modelo de Langmuir con valores de 40 y 41 mg/g respectivamente. De igual forma como lo demuestra la constante de velocidad de adsorción en el modelo de pseudo segundo orden los porcentajes de remoción del metal disminuyen debido a la saturación superficial de la zeolita.

Se corroboró de esta manera la utilidad de un subproducto industrial y su transformación a un producto de mayor valor agregado como las zeolitas. Se demostró la capacidad de adsorción y la eficiencia de estos materiales en el proceso de remoción de Cr (III), lo cual nos lleva a pensar en el potencial desarrollo de tecnologías limpias a escala industrial.

Agradecimientos

A la Universidad de Antioquia y al Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación Colciencias por el apoyo económico al proyecto *Aprovechamiento de Residuos de las Industrias Minera y Manufacturera para la Síntesis de Materiales Potencialmente Útiles en Procesos Ambientalmente Amigables*, enmarcado en la convocatoria 569 - 2012 Banco de Proyectos Elegibles de CTeI.

Referencias

[1] Mejía, J.M., Rodríguez, E.D. y De Gutiérrez, R.M., Utilización potencial de una ceniza volante de baja calidad como fuente de aluminosilicatos en la producción de geopolímeros. Ing. y Univ., 18, pp. 309-327, 2014. DOI: 10.11144/Javeriana.IYU18-2.upcv.

[2] Chang, H. and Shih, W., A general method for the conversion of fly ash into zeolites as ion exchangers for cesium. Ind. Eng. Chem. Res. 5885, pp. 71-78, 1998. DOI: 10.1021/ie970362o.

[3] Izidoro, J.D.C., Fungaro, D.A., Abbott, J.E. and Wang, S., Synthesis of zeolites X and A from fly ashes for cadmium and zinc removal from aqueous solutions in single and binary ion systems. Fuel 103, pp. 827-834, 2013. DOI: 10.1016/j.fuel.2012.07.060.

[4] Wang, J. et al., Supercritical hydrothermal synthesis of zeolites from coal fly ash for mercury removal from coal derived gas. Fuel Process. Technol. 136, pp. 96-105, 2015. DOI: 10.1016/j.fuproc.2014.10.020

[5] Lee, Y.R. et al., Synthesis of nanoporous materials via recycling coal fly ash and other solid wastes: A mini review. Chem. Eng. J. 317, pp. 821-843, 2017. DOI: 10.1016/j.cej.2017.02.124.

[6] Visa, M., Synthesis and characterization of new zeolite materials obtained from fly ash for heavy metals removal in advanced wastewater treatment. Powder Technol. 294, pp. 338-347, 2016. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.02.019.

[7] Czarna, D. et al., Synthetic zeolites as potential sorbents of mercury from wastewater occurring during wet FGD processes of flue gas. J. Clean. Prod, pp. 1-10, 2017. DOI: 10.1016/j.jclepro.2017.11.147.

[8] Koshy, N. and Singh, D.N., Fly ash zeolites for water treatment applications. J. Environ. Chem. Eng. 4, pp. 1460-1472, 2016. DOI: 10.1016/j.jece.2016.02.002.

[9] Meng, Q., Chen, H., Lin, J., Lin, Z. and Sun, J., Zeolite A synthesized from alkaline assisted pre-activated halloysite for efficient heavy metal removal in polluted river water and industrial wastewater. J. Environ. Sci. (China) 56, pp 254-262, 2017. DOI: 10.1016/j.jes.2016.10.010.

[10] Shahid, M. et al., Chromium speciation, bioavailability, uptake, toxicity and detoxification in soil-plant system: A review. Chemosphere 178, pp. 513-533, 2017. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2017.03.074.

[11] Reyes, C.A.R., Synthesis of zeolites from geological materials and industrial wastes for potential application in environmental problems. Thesis, Department of Sciences, University of Wolverhampton, England, 2008.

[12] Davidovits, J., Geopolymers - Inorganic polymeric new materials. J. Therm. Anal. 37, pp. 1633-1656, 1991. DOI: 10.1007/BF01912193

[13] Jaarsveld, J. Van, Deventer, J. Van and Lukey, G., The characterization of source materials in fly ash-based geopolymers. Mater. Lett. 57, pp. 1272-1280, 2003. DOI: 10.1016/S0140-6701(04)91393-8.

[14] Murayama, N., Yamamoto, H. and Shibata, J., Mechanism of zeolite synthesis from coal fly ash by alkali hydrothermal reaction. Int. J. Miner. Process. 64, pp. 1-17, 2002. DOI: 10.1016/S0301-7516(01)00046-1.

[15] Mashal, K., Harsh, J.B., Flury, M. and Felmy, A.R., Analysis of precipitates from reactions of hyperalkaline solutions with soluble silica. Appl. Geochemistry 20, pp. 1357-1367, 2005. DOI: 10.1016/j.apgeochem.2005.01.015.

[16] Deng, Y., Harsh, J.B., Flury, M., Young, J.S. and Boyle, J.S., Mineral formation during simulated leaks of Hanford waste tanks. Appl. Geochemistry 21, pp. 1392-1409, 2006. DOI: 10.1016/j.apgeochem.2006.05.002

[17] de Vos Burchart, E., Jansen, J.C. and van Bekkum, H., Ordered overgrowth of zeolite X onto crystals of zeolite A. Zeolites 9, pp. 432-435, 1989. DOI: 10.1016/0144-2449(89)90099-7.

[18] Traa, Y. and Thompson, R.W., Controlled co-crystallization of zeolites A and X. J. Mater. Chem. 12, pp. 496-499, 2002. DOI: 10.1039/b108634k.

[19] Porcher, F., Dusausoy, Y., Souhassou, M. and Lecomte, C., Epitaxial growth of zeolite X on zeolite A and twinning in zeolite A : Structural and topological analysis. Mineralogical Magazine 64, pp. 1-8, 2000. DOI: 10.1180/002646100549012.

[20] Sing, K.S.W. et al., Reporting physisorption data for gas / solid systems with Special Reference to the Determination of Surface Area and Porosity. Pure Appl. Chem. 57, pp. 603-619, 1985. DOI: 10.1351/pac198557040603.

[21] Mohan, D. and Pittman, C.U., Review. Activated carbons and low cost adsorbents for remediation of tri- and hexavalent chromium from water. J. Hazard. Mater. 137, pp. 762-811, 2006. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2006.06.060.

[22] Pandey, P.K., Sharma, S.K. and Sambi, S.S., Kinetics and equilibrium study of chromium adsorption on zeolite NaX. Int. J. Environ. Sci. Technol. 7, pp. 395-404, 2010. DOI: 10.1007/BF03326149.

[23] Visa, M., Bogatu, C. and Duta, A., Simultaneous adsorption of dyes and heavy metals from multicomponent solutions using fly ash. Appl. Surf. Sci. 256, pp. 5486-5491, 2010. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.02.019.

J.C. Arroyave-Manco, received the BSc. Eng in Chemical Engineering in 2009, and the PhD degree in Chemical Engineering in 2017, all of them from the Universidad de Antioquia. Medellin, Colombia. He worked in programs and projects of the catalysis area, with emphasis on petrochemical and mining industry. He belongs to research group Catalizadores y Adsorbentes Universidad de Antioquia.
ORCID: 0000-0003-2303-7255.

J.A. Arboleda-Echavarría, received the BSc. Eng in Chemical Engineering in 2005, and the PhD degree in Chemical Sciences in 2010, all of them from the Universidad de Antioquia. Medellin, Colombia. She has worked in

programs and projects research of the inorganic catalysis area, synthesis and characterization of new materials. She belongs to research group Catalizadores y Adsorbentes.
ORCID: 000-003-0588-6093.

A.P. Echavarría-Isaza, received the BSc. Eng in Chemical Engineering in 1995, and the PhD degree in Chemical Sciences in 2001, all of them from the Universidad de Antioquia. Medellin, Colombia. She has worked in programs and projects research of the inorganic catalysis area, and their applications on petrochemical reactions. She is coordinator of the research group Catalizadores y Adsorbentes, Universidad de Antioquia.
ORCID: 0000-0002-1733-9583.

D.A. Hoyos-Ayala, received the BSc. Eng in Chemical Engineering in 1997, and the PhD degree in Chemical Sciences in 2005, all of them from the Universidad de Antioquia. Medellin, Colombia, she worked in programs and projects of the mining area, with emphasis on environmental management. She is a full professor in the Universidad de Antioquia.
ORCID: 0000-0002-5707-6677.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Química e Ingeniería de Petróleos

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Química
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Petróleos
Doctorado en Ingeniería - Sistemas Energéticos

Mayor información:

E-mail: qcaypet_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5317

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Fast estimation of earthquake epicenter distance using a single seismological station with machine learning techniques

Luis H. Ochoa, Luis F. Niño & Carlos A. Vargas

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia. lhochoag@unal.edu.co, lfninov@unal.edu.co, cavargasj@unal.edu.co

Received: October 19th, de 2017. Received in revised form: November 28th, 2017. Accepted: December 15th, 2017

Abstract
A Support Vector Machine Regression (SVMR) algorithm was applied to calculate the epicenter distance using a ten seconds signal, after primary waves arrive at a seismological station near to Bogota - Colombia. This algorithm was tested with 863 records of earthquakes, where the input parameters were an exponential function of waveform envelope estimated by least squares and maximum value of recorded waveforms for each component of the seismic station. Cross validation was applied to normalized polynomial kernel functions, obtaining mean absolute error for different exponents and complexity parameters. The epicenter distance was estimated with 10.3 kilometers of absolute error, improving the results previously obtained for this hypocentral parameter. The proposed algorithm is easy to implement in hardware and can be employed directly in the field, generating fast decisions at seismological control centers increasing the possibilities of effective reactions.

Keywords: earthquake early warning; support vector machine regression; earthquake; rapid response; epicenter distance; seismic event; seismology; Bogota - Colombia.

Estimación rápida de la distancia epicentral de un terremoto utilizando registros de una sola estación sismológica, mediante técnicas de aprendizaje de máquinas

Resumen
Se aplicó un algoritmo de máquinas de vector de soporte para calcular la distancia epicentral utilizando una señal de diez segundos, después del arribo de ondas primarias a una estación sismológica cercana a Bogotá - Colombia. Este algoritmo fue probado con 863 registros de terremotos donde los parámetros de entrada fueron una función exponencial de la envolvente estimada para los mínimos cuadrados y el valor máximo de las formas de ondas registradas en cada componente de la estación sísmica. Validación cruzada fue aplicada a funciones kernel polinomiales normalizadas, obteniendo la media del error absoluto para diferentes exponentes y parámetros de complejidad. La distancia epicentral se estimó con 10.3 kilómetros de error absoluto, mejorando los resultados previamente obtenidos para este parámetro hipocentral. El algoritmo propuesto es fácil de implementar y puede ser empleado directamente en campo, generando decisiones rápidas en centros de control sismológico incrementado posibilidades de tener reacciones efectivas.

Palabras clave: alerta temprana de terremotos; máquinas de soporte vectorial; terremoto; respuesta rápida; distancia epicentral; evento sísmico; sismología; Bogotá - Colombia.

1. Introduction

Bogota's Savannah and surrounding areas are home to nearly a third of Colombia's population and are the country's main economic center with around 40% of the gross domestic product [1]. In case of a destructive seismic event in this area, the entire country would face many harmful social and economic effects; this is why a seismic early warning system around Bogota is important and the epicenter distance estimation is one of the main parameters in this system. The

How to cite: Ochoa, L.H., Niño, L.F. and Vargas, C.A., Fast estimation of earthquake epicenter distance using a single seismological station with machine learning techniques. DYNA, 85(204), pp. 161-168, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

epicenter distance represents the length between the earthquake epicenter and the seismological station, and epicenter is the surface area vertically above the earthquake focus [2]. The density of seismological stations around Bogota is not high enough, making the time used for the localization of seismic events longer than the travel time to areas where the early warning is required. In this case, an alternative solution may be implemented, by using seismological data of previous events recorded at one single station in order to calculate earthquake hypocentral parameters. A seismic early warning system emits an alert from a few seconds to a few tens of seconds before the stronger shaking movement arrives; it can be based on one three-component station, implementing methods of bio-inspired computing, natural computation or computational intelligence. These methods have been successfully applied in multiple areas of knowledge; in seismology, these methods allow the estimation of hypocentral parameters using just few seconds of a signal registered at a single seismological station, achieving acceptable accuracy and generating reliable alerts. This approach is very useful in areas with sparse seismic networks [3,4]. Automatic computation algorithms in a single broadband three-component station have been mainly developed for P and S waves onsets detection, allowing the estimation of source location using the back-azimuth and the apparent surface speed measurements [5-7], or seismic moment estimation [8-13]. On the other hand, kernel-based methods have become a very powerful tool for mathematicians, scientists and engineers, providing a very rich and surprising solution in areas such as signal processing and pattern recognition [14]. Its implementation is quite simple by applying a function that combines input variables as a combination of themselves using a function of dot products, obtaining an enhanced new space with more dimensions, mapping variables in a hyperspace where separation of classes (in the case of classification) by a linear function or hyperplane can be achieved.

The study area corresponds to the Bogota's Savannah and its surroundings, where some important fault systems are present, such as Piedemonte Llanero, La Salina, Bogota Savannah and even the Ibague fault system Fig. 1.

Also, the Bogota city has been built on soft lacustrine soil [1], which is a natural seismic wave amplifier producing high damage to the infrastructures, similarly to damages occurred in Mexico City in the past [15]. This area suffers high seismicity that can affect Bogota, the country's capital and most important social and economic populated center.

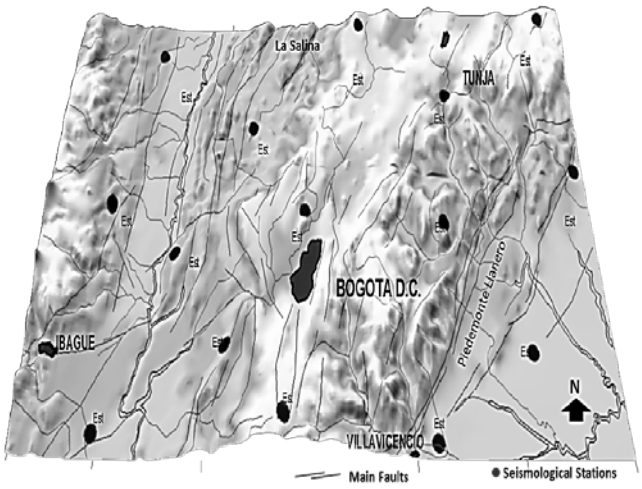


Figure 1. Sketch of Bogota's Savannah and fault systems.
Source: The authors.

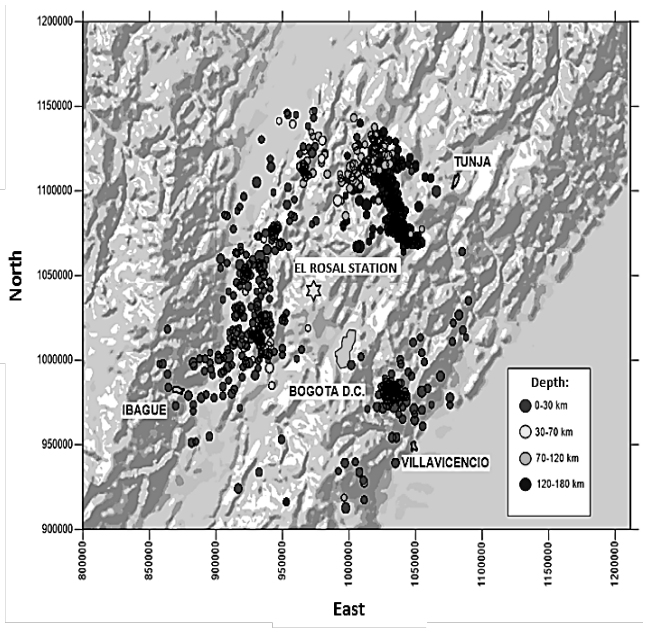


Figure 2. Distribution of seismic events around Bogota.
Source: The authors.

2. Data set used and methods applied

The data set used in this research belongs to *El Rosal* seismological station, located toward north-west Bogota as shows Fig.2. This station is part of the Colombian Seismic Network administrated by The "*Servicio Geológico Colombiano - SGC*" (Colombian Geological Service).

The Colombian Geological Survey has a main network composed by 42 stations transmitting in real time, recording seismic activity for the entire country as shows Fig.3, with an average distance between stations of 162 kilometers. *El Rosal* station employs a brand Guralp CMG - T3E007 sensor in the three components and a nanometrics RD3-HRD24 digitizer, which provides simultaneous sampling of three channels with a 24-bit resolution [16]. The data correspond to the three component raw waveforms recorded directly in this station and a seismic catalogue with 2164 characterized events, selected between January 1st 1998 and October 27th 2008; all these events were located less than 120 kilometers from the station.

2.1. Data pre-processing

Before starting the processing related to SVMR, waveform files from *El Rosal* station were converted to the

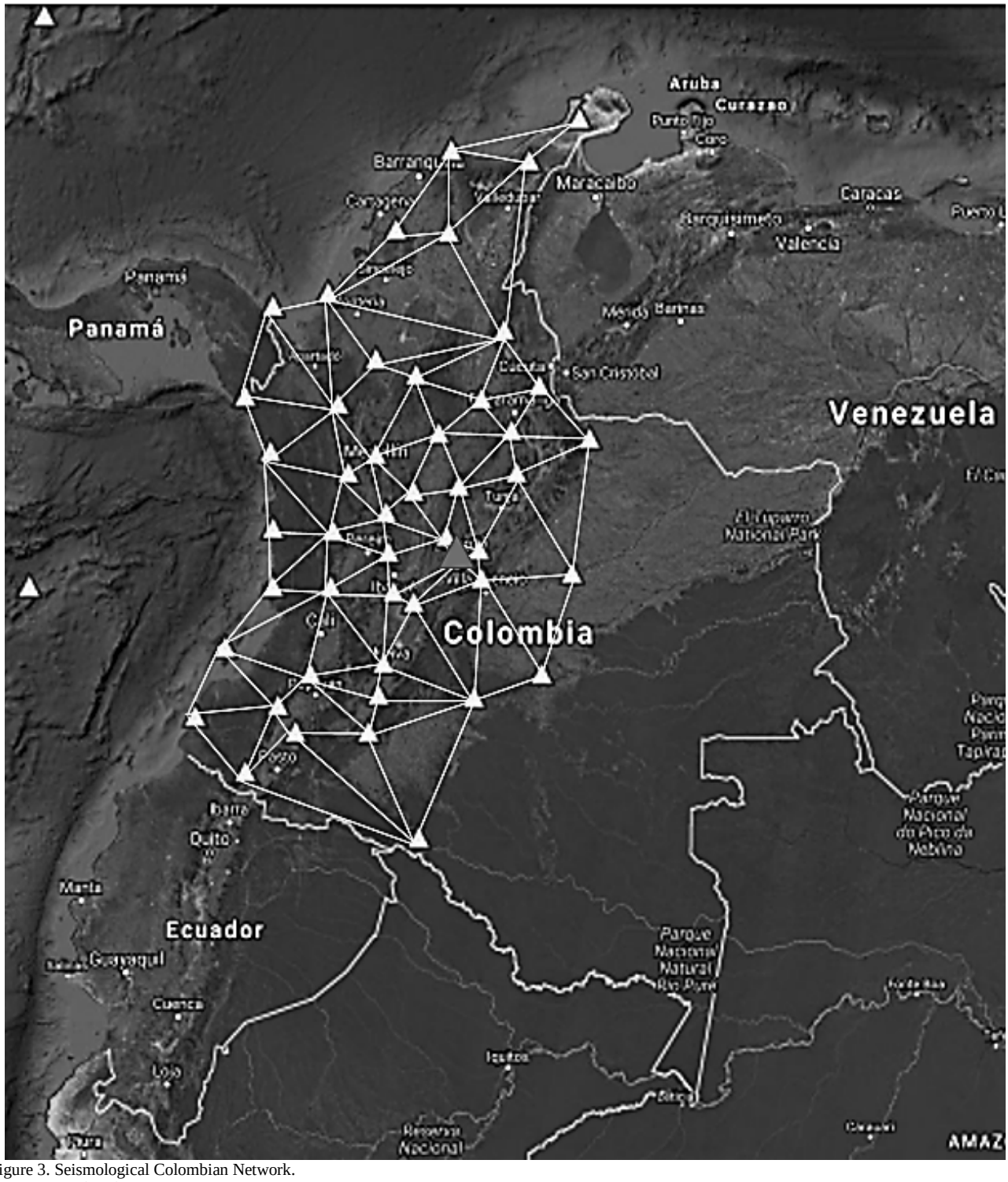


Figure 3. Seismological Colombian Network.
Source: Modified from Google Earth.

American standard code for information interchange (ASCII) format, using a Seisan package tool [17]; earthquakes with magnitudes lower than 2.0 M_L were ignored; therefore the followed processes were applied on the remaining 1011 events. Since the selected seismic records present variable levels of noise, it was necessary to filter them out with both high and low frequency filters. Low frequencies correspond to instrumental noise that can be easily eliminated through the implementation of a high-pass filter with a cut-off frequency of 0.075 Hz [18], while high frequencies were removed with a low-pass filter with a cut-off frequency of 150 Hz.

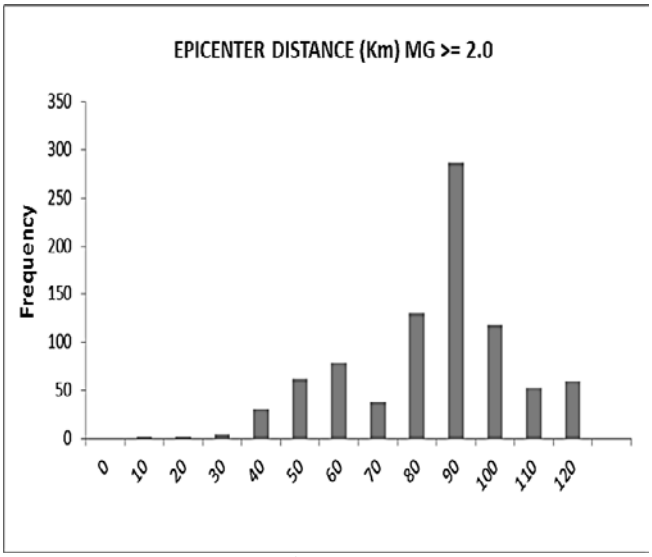


Figure 4. Statistical distribution of epicenter distance.
Source: The authors.

The statistical distribution of epicenter distance values is presented in Fig.4, where main distribution of whole data set is observed. This bar chart shows that the seismicity surrounding *El Rosal* station is presented from 40 kilometers and beyond, with great amount of events close to 90 kilometers. Although this is not a homogeneous distribution, it corresponds to local conditions and regular behavior for this variable and therefore the model has to work properly under this condition.

2.2. Descriptors – Input data set of SVMR

In this study, some parameters that have been previously used for other authors to magnitude estimation were calculated; then, they were employed as input variables or descriptors for the SVMR algorithm. In the first stage, the relationship between maximum amplitude of the wave in a short period of time was selected, along with local magnitude of the earthquake [19]. Consecutive, maximum peaks were highlighted and a linear regression was performed for each of the three components, correlating not only the maximum peak, but also the way it changes while energy reaches the sensors. Three basic parameters were chosen from the linear regressions such as, slope (M), independent term (B) and correlation coefficient (R), for each of the three components. The maximum amplitude values (Mx) obtained for the time of each component were used as descriptors as well. Thus, each event had 12 descriptors associated with this concept.

Furthermore, nine descriptors used previously for epicenter distance estimation were added. These descriptors were performed by adjusting a linear regression of an exponential in eq. (1):

$$Bt\exp(-AT) \tag{1}$$

This equation belongs to the envelope of the seismic record in a logarithmic scale determined by linear regression and its respective correlation coefficient (R) for each component [10].

Similarly, some parameters used for previous back-azimuth determination were used to include information about the source location of the seismic event into the model. Maximum eigenvalues of the two-dimensional covariance matrix were used as input descriptors, calculated as described in [5,20]. A windowing scheme with one second time windows was performed, obtaining consecutive values for which a linear regression was calculated, in a similar way as described above, determining the slope (M), the independent term (B) and the correlation factor (R) of the regression, as well as the arithmetic mean of the eigenvalues (P). Despite this parameter involving three components, only four descriptors were added to the process.

In sum, a total of 25 descriptors were used in the SVMR model for local epicenter distance determination, 12 of them related to previous works on magnitude estimation, 9 were associated with previous epicenter distance estimations and the last 4 descriptors were used in back-azimuth determination. These descriptors were calculated for 5, 10 and 15 seconds signal windows for 1011 selected events with magnitudes greater than 2.0. All extreme or anomalous values were eliminated reducing the data set to 863 events.

2.3. The SVMR model

The model was trained with the refined data set for each time window, using the Weka 3.6 software [21]. This algorithm has a strong statistical support and is easily implemented on the station by electronic processing cards. After performing several tests, a standard normalized polynomial kernel was selected. In order to choose the kernel exponent and the complexity factor, correlation factors and minimum absolute error obtained by a 10 fold cross correlation process were compared. These processes were carried out testing multiple combinations of exponents and complexity factor for deferments magnitudes and time signals. The correlation coefficient calculated for each partition corresponds to the Pearson's Coefficient, which measure the linear relationship between two variables independently of their scales. This coefficient takes values between 1 and – 1; a value of zero means that a linear relationship between two variables could not be found. A positive value of this relation means that two variables change in the same way, i.e. high values of one variable correspond to high values of the other and vice versa. The closer this value is to one, the greater certainty that two variables have a linear relation.

3. Results

Using the descriptors explained above and real magnitude for each considered seismic event, a group of 12 datasets were evaluated. Each dataset corresponds to a combination of 4 minimum magnitude filters (2.0, 2.5, 3.0 and 3.5) and 3 signal length filters (5, 10 and 15 s), evaluating combinations of 7 values for kernel exponent and 6 values for complexity factor, completing a total of 504 tested models of SVMR in order to find the combination of parameters with the best correlation factor in epicenter distance determination.

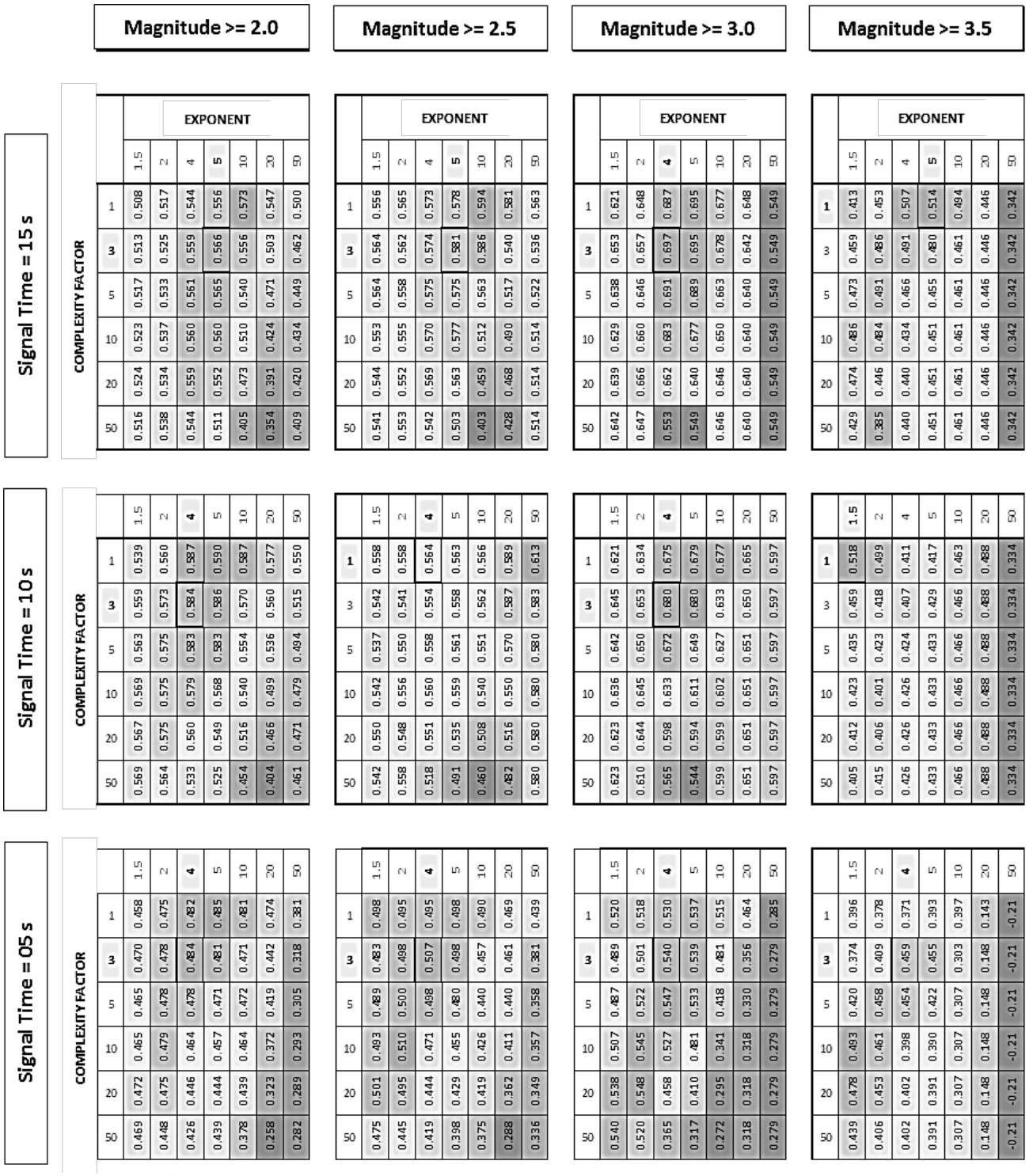


Figure 5. Correlation coefficients for each combination of Kernel.
Source: The authors.

Fig. 5 shows values of correlation coefficients in each combination of cut-off magnitude and time signal where kernel exponents and complexity factors were calculated for each combination, where values in green squares represent better correlation, while those in red squares represent values of lower correlation. Afterward, those with the highest value of correlation coefficient were chosen. Fig. 5 also shows optimal values of correlation coefficients for time signals of 10 and 15 seconds, the average being of 0.7.

This value is an acceptable correlation, indicating that the model is predicting the epicenter distance with good accuracy. For a time signal of 5 seconds, correlation

Table 1.
Summary for the best epicenter distance models in each combination.

SUMMARY OF EPICENTER DISTANCE DETERMINATION - RESIDUAL												
	Signal Time = 15 s				Signal Time = 10 s				Signal Time = 05 s			
Minimum Magnitude	**2.0**	**2.5**	**3.0**	**3.5**	**2.0**	**2.5**	**3.0**	**3.5**	**2.0**	**2.5**	**3.0**	**3.5**
Mean	0.16	0.13	1.03	-0.46	0.21	0.56	0.45	-1.06	1.05	-0.16	-0.96	-0.39
Typical Error	0.51	0.63	0.80	1.14	0.51	0.70	0.80	1.74	0.56	0.73	0.95	0.65
Standard Deviation	15.1	12.3	8.9	6.6	15.0	13.6	9.0	10.0	16.6	14.2	10.6	3.7
Kurtosis	1.34	1.36	5.13	10.85	1.48	0.57	3.30	1.97	0.82	0.92	3.57	18.48
Asymmetric Coefficient	0.18	-0.10	1.51	-2.50	0.10	-0.05	0.14	-1.05	0.35	0.10	0.01	-3.10
Count	863	379	126	33	863	379	126	33	864	377	126	33
Level of Confidence (95%)	1.009	1.245	1.574	2.323	1.00	1.377	1.578	3.540	1.107	1.437	1.873	1.317

Source: The authors.

coefficient values are just above 0.5, pointing out that this time signal is not long enough to estimate an acceptable epicenter distance.

Although a correlation coefficient is more suited to a time signal of 15 seconds, the 10-signal seconds was selected as the best model in the shortest period of time; moreover, a cut-off magnitude must be established for the 10 seconds signal allowing accuracy in the final value of epicenter distance.

The choice of parameters is shown in Fig.6, where correlation coefficient and mean absolute error are presented for each combination of kernel exponent and complexity factor, all of them for the time signal and the cut-off magnitude selected.

CORRELATION COEFFICIENT		EXPONENT									
		0.5	0.8	1.1	1.5	2	4	5	10	20	50
COMPLEXITY FACTOR	0.1	0.568	0.571	0.590	0.606	0.613	0.633	0.638	0.659	0.648	0.596
	0.5	0.604	0.599	0.602	0.608	0.619	0.661	0.675	0.679	0.663	0.596
	0.8	0.597	0.604	0.608	0.618	0.631	0.674	0.679	0.684	0.660	0.596
	1	0.598	0.606	0.612	0.621	0.635	0.675	0.679	0.677	0.665	0.597
	2	0.607	0.618	0.618	0.634	0.653	0.677	0.686	0.638	0.651	0.597
	4	0.611	0.614	0.629	0.645	0.653	0.677	0.667	0.631	0.651	0.597
	5	0.616	0.610	0.632	0.642	0.650	0.672	0.649	0.627	0.651	0.597
	10	0.613	0.625	0.625	0.636	0.645	0.633	0.612	0.602	0.651	0.597
	20	0.428	0.584	0.612	0.623	0.644	0.599	0.594	0.599	0.651	0.597
	50	0.241	0.277	0.596	0.624	0.611	0.565	0.543	0.599	0.651	0.597

MEAN ABSOLUTE ERROR		EXPONENT									
		0.5	0.8	1.1	1.5	2	4	5	10	20	50
COMPLEXITY FACTOR	0.1	12.58	12.35	12.13	11.88	11.66	11.16	10.97	10.43	10.48	11.48
	0.5	11.37	11.28	11.25	11.18	11.02	10.45	10.19	10.20	10.15	10.62
	0.8	11.29	11.30	11.25	11.09	10.94	10.29	10.38	10.30	10.39	10.58
	1	11.31	11.29	11.19	11.05	10.93	10.39	10.52	10.44	10.39	10.56
	2	11.32	11.09	11.14	10.96	10.65	10.74	10.69	11.28	10.76	10.56
	4	11.13	11.16	11.13	10.91	10.93	11.04	11.18	11.75	10.81	10.56
	5	11.10	11.22	11.09	11.01	11.20	11.19	11.49	11.96	10.81	10.56
	10	11.50	11.13	11.44	11.43	11.80	11.94	12.44	12.68	10.81	10.56
	20	14.85	12.00	11.73	12.12	12.08	12.93	13.36	12.70	10.81	10.56
	50	24.05	21.09	12.08	12.56	12.63	14.52	15.18	12.70	10.81	10.56

Figure 6. Parameters selection for each dataset.
Source: The authors.

Table 1 shows, for a time signal of 10 seconds and 3.0 of cut-off magnitude, a mean value of 0.45 kilometers with standard deviation of 9 kilometers, this cut-off being the one finally implemented in the model.

These parameters were calculated using SVMR algorithm in Weka 3.6 with a standard normalized polynomial kernel and 10 fold cross-validations. We can see that quality factors enable an accuracy of 10.9 kilometers in epicenter distance, considering the cross-validation, and also allowing verification of the model at the same time.

Based on these results, a support vector machine of normalized polynomial kernel can be implemented using an exponent of 10 and a complexity factor of 0.8. The standard deviation was of 10.3 kilometers, which is good enough for an early warning generation, considering that most of the seismic events are located farther than 40 kilometers from *El Rosal* station.

Fig. 7 shows the cross-plot with relationship between the real epicenter distance (X axis) and the distance calculated by the model (Y axis). A normal statistical pattern can be observed in the distribution of residuals, also confirming that the calculated distance is of around 10.9 kilometers. The dashed blue line represents the linear behavior of predicted data, corresponding to the locus where prediction is equal to real values.

From these results, we can establish that the model works properly, allowing prediction of the distance where earthquakes occur with good accuracy, considering that the values are obtained with a 10 seconds signal, which is good enough for an early warning system.

4. Conclusions

The SVMR model proposed here is an important step towards the implementation of an early warning system of earthquakes for the city of Bogota - Colombia, and for other populated centers in the world.

The result showed in this study is an improvement on that of [22] and [23], who were as accurate as ±15 and ±16-19 kilometers respectively.

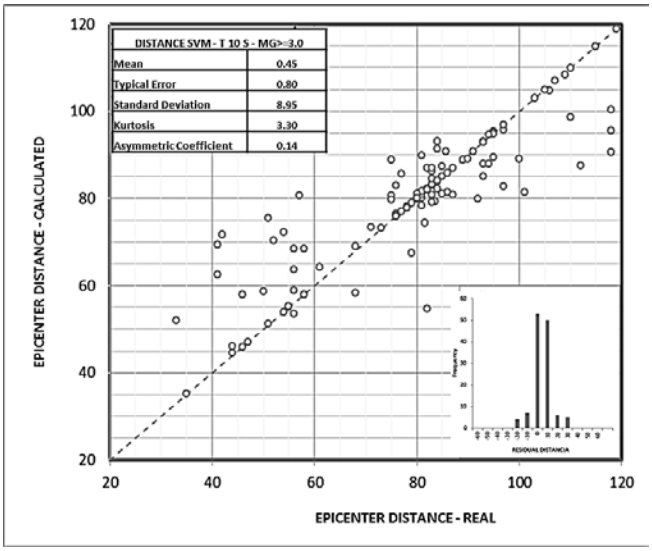


Figure 7. Correlation between real and calculated epicenter distance with SVMR.
Source: The authors.

This model is proposed and evaluated for fast epicenter distance determination, based on support vector machine regression through pattern recognition and characterization of earthquake signals recorded on a three components seismic station in only ten seconds, anticipating the arrival of earthquakes in the city of Bogota. An earthquake travels the distance to main seismic alignments in at least 30 seconds, allowing an early warning generation, which must be in less than 10 seconds. Additionally, this model can be implemented directly in the seismological station embedded in electronic devices, where the main mathematical process corresponds to a simple matrix product involving the given kernel for the epicenter distance and a vector which contains the calculated descriptors of the current event.

5. Recommendations

Despite the good results obtained in terms of epicenter distance determination, it is important to continue developing the model introduced here, in order to calculate other hypocentral parameters.

It is important to find ways to improve the prediction accuracy based on further research, supported by computational intelligence and geophysics research groups as well as the seismological network in Bogota's Savannah and its surroundings managed by the Universidad Nacional de Colombia.

The use of other descriptors such as predominant period, Fourier and wavelet frequency spectra should be considered to obtain higher correlation factors and better estimation values for local magnitude and other hypocentral parameters estimations, required to generate a reliable and fast earthquake early warning system.

Datasets should be complemented with recent seismic events, specifically from October 27th of 2008 to the present, as this period has presented larger set of earthquakes with magnitudes greater than 3.0.

Acknowledgments

The authors are grateful to the Servicio Geológico Colombiano (SGC) for providing the dataset used in this study and to Universidad Nacional de Colombia for supporting our efforts to achieve a fast and reliable early warning system for Bogota D.C. – Colombia.

References

[1] Ojeda, A., Martinez, S., Bermudez, M. and Atakan, K., The new accelerograph network for Santa Fé de Bogotá, Colombia. Soil Dynamics and Earthquake engineering, October - December, 22(9-12), pp. 791-797, 2002. DOI: 10.1016/S0267-7261(02)00100-8

[2] Don, L. and Judson, S., Fundamentos de geología física. México: Editorial Limusa, 2000.

[3] Ochoa, L.H., Niño, L.F. and Vargas, C.A., Severity classification of a seismic event based on the magnitude-distance ratio using only one seismological station. Earth Sciences Research Journal, December, 18(2), pp. 115-122, 2014. DOI: 10.15446/esrj.v18n2.41083

[4] Ochoa, L.H., Niño, L.F. and Vargas, C.A., Fast magnitude determination using a single seismological station record implementing machine learning techniques. Sciences Direct, Geodesy and Geodynamic, March, pp. 1-8, 2017. DOI: 10.1016/j.geog.2017.03.010

[5] Magotra, N., Ahmed, N. and Chael, E., Seismic event detection and source location using single station (three components) data. Bull. Seism. Asoc. Am., June, 77(3), pp. 958-971, 1987.

[6] Roberts, R.G., Christoffersson, A. and Cassidy, F., Real-time detection, phase identification and source location estimation using single station three component seismic data. Geophysical Journal, June, 97(3), pp. 471-480, 1989. DOI: 10.1111/j.1365-246X.1989.tb00517.x

[7] Saita, J. and Nakamura, Y., The early warning systems for mitigation of disasters caused by earthquakes and tsunamis. In: Zschau, J. and Kuppers, A., eds. Early warning systems for natural disaster reduction. Berlin: Springer-Verlag, pp. 453-460, 2003. DOI: 10.1007/978-3-642-55903-7_58

[8] Talandier, J., Reymond, D. and Oka, E.A., Use of variable mantle magnitude for the rapid one-station estimation of teleseismic moments. Geophysical Research Letters, August, 14(8), pp. 840-843, 1987. DOI: 10.1029/GL014i008p00840

[9] Reymond, D., Hyvernaud, O. and Talandier, J., Automatic detection, location and quantification of earthquakes. Pure and Applied Geophysics, March, 135(3), pp. 361-382, 1991. DOI: 10.1007/BF00879470

[10] Odaka, T. et al., A new method for quickly estimating epicentral distance and magnitude from a single seismic record. Bull. Seism. Soc. Am., February, 93(1), pp. 526-532, 2003. DOI: 10.1785/0120020008

[11] Horiuchi, S. et al., An automatic processing system for broadcasting earthquake alarms. Bull. Seism. Asoc. Am., April, 95(2), pp. 708-718, 2005. DOI: 10.1785/0120030133

[12] Wu, Y.M., Shin, T.C. and Tsai, Y.B., Quick and reliable determination of magnitude for seismic early warning. Bull. Seism. Soc. Am., October, 88(5), pp. 1254-1259, 1998.

[13] Espinosa-Aranda, J.M. et al., Mexico city seismic alert system. Seismol. Res. Lett., November, 66(6), pp. 42-53, 1995. DOI: 10.1785/gssrl.66.6.42

[14] Taylor, J.S. and Cristianini, N., Kernel methods for pattern recognition. First ed. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press, 2004.

[15] Rodríguez, J.A., Ramirez, F. and Escallon, J.P., Geotechnical seismic characterization for the microzonation of Bogotá. Thessaloniki-Greece, 4 International Conference on Earthquake Geotechnical Engineering, 2007.

[16] Bermúdez, M.L. and Rengifo, F., EL ROSAL: La Estación Sismológica del CTBTO en Colombia. Bogota, Primer Simposio Colombiano de Sismología, 2002, 8 P.

[17] Ottemoller, L., Voss, P. and Havskov, J., Seisan earthquake analysis software for windows, solaris, Linux and Macosx, s.l.: s.n., 2016.
[18] Wu, Y.M. and Zhao, L., Magnitude estimation using the first three seconds P-wave amplitude in earthquake early warning. Geophys. Res. Lett., August, 33(16), pp. L16312, 2006. DOI: 10.1029/2006GL026871
[19] Wu, Y.M. and Kanamori, H., Rapid assessment of damage potential of earthquakes in Taiwan from beginning of P waves. Bull. Seism. Soc. Am., February, 93(1), pp. 526-532, 2005. DOI: 10.1785/0120040193
[20] Magotra, N., Ahmed, N. and Chael, E., Single-station seismic event detection and location. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, January, 27(1), pp. 15-23, 1989. DOI: 10.1109/36.20270
[21] Eibe, F., Hall, M.A. and Witten, I.H., The WEKA workbench. Online appendix for "Data mining: Practical machine learning tools and techniques. Fourth Edition ed. s.l.: Morgan Kaufmann, 2016.
[22] Lockman, A.B. and Allen, R.M., Single-station earthquake characterization for early warning. Bull. Seism. Soc. Am., December, 95(6), pp. 2029-2039, 2005. DOI: 10.1785/0120040241
[23] Böse, M., Heaton, T.H. and Hauksson, E., Rapid estimation of earthquake source and ground-motion parameters for earthquake early warning using data from a single three-component broadband or strong-motion sensor. Bulletin of the Seismological Society of America, 102(2), pp. 738-750, 2012. DOI: 10.1785/0120110152.

L.H. Ochoa, received his BSc. Eng in Civil Engineering in 1988, a MSc. degree in Geophysics in 2003, a MSc. degree in Geomatics in 2007, and a PhD. in System Engineering in 2017, all of them from the Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. He dedicates himself to research in intelligent systems, geophysics and geodesy. His main interests include earthquake early warning using intelligent systems.
ORCID: 0000-0002-3607-7339

L.F. Niño, received his BSc. Eng in System Engineering (1990) and a MSc. degree in Mathematics in 1995 from Universidad Nacional de Colombia, Bogota – Colombia. A MSc. degree in Computer Science (1999) and a PhD. degree in Computer Science at The University of Memphis – United States of America. He dedicates himself to teaching and research in computer science, and his main academic interests include computational intelligence and its applications, particularly in the life science.
ORCID: 0000-0003-4703-0007

C.A. Vargas, received his BSc. in Geology (1993) from Universidad de Caldas, Colombia. A MSc. degree in Seismic Engineering and Structural Dynamic (2000) from Universidad Politécnica de Catalunya, Spain. A MSc. degree in Physics Instrumentation (2006) from Universidad Tecnológica de Pereira - Colombia. His PhD. in Seismic Engineering and Structural Dynamic (2003) from Universidad Politécnica de Catalunya, Spain. His postdoctoral research (2010) from University of Texas, Institute for Geophysics, United States of America. He dedicates himself to research in geodynamic and basin analysis. His main interest include subduction systems and their response in sedimentary basins.
ORCID: 0000-0002-5027-9519

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Civil

Oferta de Posgrados

Especialización en Vías y Transportes
Especialización en Estructuras
Maestría en Ingeniería - Infraestructura y Sistemas de Transporte
Maestría en Ingeniería – Geotecnia
Doctorado en Ingeniería - Ingeniería Civil

Mayor información:

E-mail: asisacic_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5172

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

CFD simulation of sugarcane bagasse combustion in an industrial grate boiler

Fabian Andrey Diaz-Mateus [a], Helver Crispiniano Alvarez-Castro [a]& Arlex Chaves-Guerrero [b]

[a] *AC Ingeniería Virtual, Bucaramanga, Colombia. fabiandiazmateus@hotmail.com, helver.alvarez@hotmail.com*
[b] *Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia. achavesg@uis.edu.co*

Received: June 12th, 2017. Received in revised form: December 4th, 2017. Accepted: December 18th, 2017.

Abstract
The simulation of an industrial boiler in CFD (Computational Fluid Dynamics) is usually done by stages due to the extensive size and the different physical phenomena that occur in different locations of the equipment. In this work, the simulation of an industrial grate boiler is done in three stages, one for the primary air circuit, another one for the secondary air circuit and the final one is the furnace. The combustion of sugarcane bagasse is a complex phenomenon that involves moisture vaporization, devolatilization and char combustion, in order to account for those phenomena, bagasse particles were modeled in a Eulerian-Lagrangian approach. The simulations were performed in commercial software ANSYS FLUENT and the devolatilization model were programmed in C language as a User Defined Function (UDF). When the results of the simulations were compared with experimental data, a satisfactory agreement was observed. Simulations were performed with primary and secondary air inlets modifications in order to optimize the boiler performance, the results of those simulations showed significant improvement in the combustion parameters.

Keywords: mathematical modeling; numerical simulation; biomass combustion; discrete phase.

Simulación en CFD de la combustión de bagazo de caña en una caldera industrial con parrilla

Resumen
La simulación de una caldera industrial en CFD se realiza, usualmente, por etapas debido al gran tamaño y a los diferentes fenómenos físicos que ocurren dentro del equipo. En este trabajo, la simulación de una caldera industrial de parrilla se realiza en tres etapas, la primera es el circuito de aire primario, la segunda es el circuito de aire secundario y la tercera corresponde a la caldera. La combustión de bagazo de caña es un fenómeno complejo que involucra vaporización de la humedad, devolatilización y combustión del carbón, de forma que para evaluar esos fenómenos las partículas de bagazo fueron modeladas en un marco Euleriano-Lagrangiano. Las simulaciones fueron desarrolladas en el software comercial ANSYS FLUENT y la tasa de devolatilización fue programada en lenguaje C como una función definida por el usuario. Cuando los resultados de las simulaciones se compararon con datos experimentales, se observó una concordancia satisfactoria. Se realizaron simulaciones con modificaciones en las entradas de aire primario y secundario buscando optimizar el funcionamiento de la caldera y los resultados de esas simulaciones presentaron una mejoría significativa en los parámetros de combustión.

Palabras clave: modelamiento matemático; simulación numérica; combustión de biomasa; fase discreta.

1. Introduction

The use of sugarcane bagasse as a fuel for steam generation is widely used throughout South America because, besides the production of sugar, the sugarcane juices are converted into ethanol. In countries as Colombia, ethanol is mixed with regular gasoline up to 20%, while in Brazil, ethanol is sold as fuel and most vehicles can run indifferently on ethanol or gasoline. Brazil is by far the largest producer of sugarcane in the world, producing more than 730 million tons in 2014 [1] and the second largest producer of ethanol in the world [2].

How to cite: Diaz-Mateus, F.A., Alvarez-Castro, H.C. and Chaves-Guerrero, A., CFD simulation of sugarcane bagasse combustion in an industrial grate boiler. DYNA, 85(204), pp. 169-176, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

Steam generation throughout the world has traditionally ran on pulverized coal, and the modeling of this combustion can be considered a mature technology. It is common in countries as Colombia that industrial boilers shift from pulverized coal to pulverized bagasse due to the increase availability and lower price of this biofuel. However, since most of the work on combustion modeling in boilers has been done on coal, it is still difficult to obtain in the literature certain parameters necessary to properly model the bagasse combustion.

The major difference between coal and bagasse is probably the water content. Since the moisture content in coal is usually below 10%, in the bagasse can be up to 56% and, in most cases, is not economically beneficial to dry it out, and it is used as received. This causes a significant load of water in the flue gases and a reduction of the adiabatic flame temperature [3]. Kaewpradap, Yoksenakul & Jugjai [3] assure that a bagasse with moisture content over 56% leads to unstable combustion. According to Shrivastav & Hussain [4] each 1% reduction in the bagasse moisture increases 0.5% the efficiency of the boiler.

Another major difference between coal and bagasse is the volatile content, biomass always has greater volatiles content, even when compared to low-rank coals [5]. The ratio of volatile matter to fixed carbon is typically greater than 4.0 for biomass and lower than 1.0 for coal [6]. This makes devolatilization models and volatile composition of significant importance in the modeling of bagasse combustion. Devolatilization is usually modeled as a first order single rate Arrhenius equation such as presented by Ferreira et al. [7], Zahirovic, Scharler & Obernberger [8], Jin et al. [9], Aboyade et al. [10] and Sanchez & Mendieta [11]. However, according to Smith [12] this single rate models cannot accurately represent the devolatilization rate. Centeno-González et al. [5] presented a two-stage devolatilization model and it is used in this work. Molecular weight of volatiles has been suggested in the range of 20 g/mol [13] up to 30 g/mol [5].

Bagasse particles are in most cases, modeled in a Eulerian-Lagrangian approach, also known as discrete phase [5,6,8,9,12,13]. In this model, the particles are tracked in a continuous phase to which exchange mass and heat. It is recommended that the volume fraction of particles to be below 10% [14], however in grate boilers, the bagasse particles piled up above the grate and unfulfilled that condition. In this particular case, the particles do not behave as a discrete phase and a full Eulerian approach would be more appropriate (also known as granular phase). However, the use of granular phase represents a huge increase in computational effort since governing equations have to be solve for both phases (continuous and granular), while in discrete phase, governing equations are solved only for the continuous phase and particles are tracked every certain number of iterations. The size of an industrial boiler makes almost prohibitive the use of a granular phase for the fuel particles due to the computational effort, one of the few simulations presented in the literature in this manner is from Ferreira et al. [7]. Nevertheless, the issue of the pilling of particles above the grate can be managed, as it will be presented further in this work.

The simulation of an industrial boiler by CFD commercial software ANSYS FLUENT is presented in this work. Due to the size of the boiler, it was divided into three models, the primary air circuit, the secondary air circuit and the furnace. The primary and secondary air are connected to the furnace by profiles of velocity, temperature, turbulent kinetic energy and dissipation rate. A baseline simulation was performed trying to reproduce the main operational parameters, once the results of the simulation reproduced the experimental data with a satisfactory agreement; an optimization of the boiler performance was accomplished. Primary and secondary air inlets were modified and the results of the optimization simulation showed a significant improvement of the operational parameters when compared to the baseline simulation.

2. Flow geometries

The geometry of the primary and secondary air circuits and furnace are presented in Figs. 1 – 3. Air preheaters in primary and secondary air circuits and superheater in furnace correspond to plain tube banks and are not physically modeled, yet they are modeled as a porous zone. In order to account for the pressure loss through the tube bank, viscous resistance ($\boldsymbol{D_j}$) and inertial resistance ($\boldsymbol{C_j}$) have to be properly estimated [15] and included as a source term ($\boldsymbol{S_i}$) in the momentum equation (eq. 1) where $\boldsymbol{v_j}$ corresponds to velocity in *j* direction. The pressure loss in a direction parallel to the tubes can be negligible, and the viscous and inertial resistance can be set to zero. In the other two directions, the tube bank can be treated as a packed bed and the parameters can be estimated with Ergun´s correlation [16] and are presented on Table 1.

The grate has 25800 orifices of 9.5mm diameter. Thus the physical simulation of the grate would cause an unmanageable mesh size. Nevertheless, Gan & Riffat [17] assure that perforated plates can be properly modeled by setting viscous resistance to zero and adjusting inertial resistance to provide the proper pressure drop and flow direction. Inertial resistance values found under these stipulations are shown in Table 1.

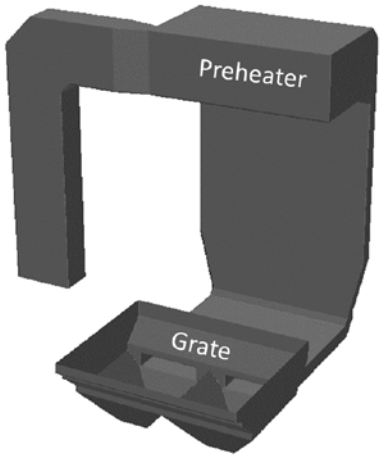


Figure 1. Geometry of the primary air circuit. Source: The authors.

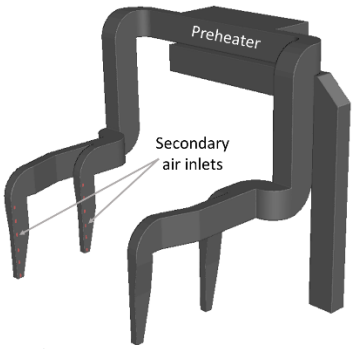


Figure 2. Geometry of the secondary air circuit. Source: The authors.

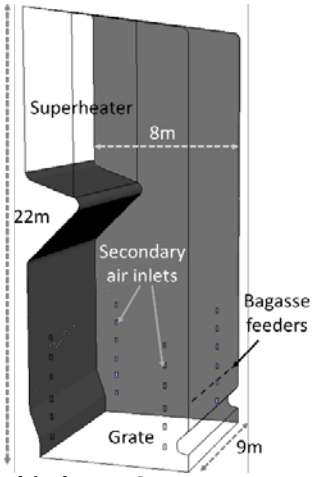


Figure 3. Geometry of the furnace. Source: The authors.

Table 1.
Inertial and viscous resistance for primary and secondary preheater, superheater and the grate.

	Direction	Inertial resistance (1/m)	Viscous resistance (1/m^2)
Primary air preheater	(1, 0, 0)	141	73106
	(0, 1, 0)	0	0
	(0, 0, 1)	141	73106
Secondary air preheater	(1, 0, 0)	350	91597
	(0, 1, 0)	0	0
	(0, 0, 1)	350	91597
Superheater	(1, 0, 0)	8.27	45947
	(0, 1, 0)	0	0
	(0, 0, 1)	8.27	45947
Grate	(1, 0, 0)	50000	0
	(0, 1, 0)	2000	0
	(0, 0, 1)	50000	0

Source: The authors.

$$S_i = -\left(\sum_{j=1}^{3} D_j \mu v_j + \sum_{j=1}^{3} 0.5 C_j \rho |v| v_j\right) \quad (1)$$

3. Physical models

Primary and secondary air circuits were simulated by the solution of continuity, momentum and energy equations with the standard k-epsilon turbulence model. In the furnace; continuity, momentum and energy equations with the standard k-epsilon turbulence model were also solved for the continuous phase (gases), besides the discrete ordinates model for radiation and the eddy dissipation model for the species reactions as recommended by Tabet & Gökalp [17]. Particles are modeled as a discrete phase. Detailed description of these equations can be found on reference [14].

Table 2.
Elemental and proximate analysis of the bagasse in wet basis.

Elemental analysis (%)		Proximate analysis (%)	
C	45.49	Volatile	44.6
H	5.72	Char	2.38
N	0.62	Ash	2.7
O	48.16	Moisture	50.32

Source: The authors.

3.1. Volatile combustion modeling

Two components of the bagasse participate in the combustion, the volatiles and the char. The combustion of volatiles is modeled from the creation of a representative molecule with an atomic composition estimated from the elemental analysis of the bagasse (Table 2) and an estimated molecular weight (30 g/mol). Also, the standard state enthalpy of this molecule was estimated from the higher calorific value (HCV) of the bagasse. (8118498 J/kg). The two-step stoichiometry is presented in eq. (2) – (3).

$$C_{1.06}H_{1.79}O_{0.95}N_{0.014} + 0.5O_2 \Rightarrow 1.06CO + 0.89H_2O + 0.007N_2 \quad (2)$$

$$CO + 0.5O_2 \Rightarrow CO_2 \quad (3)$$

In the eddy dissipation model [18] the net rate of production of the specie i due to reaction r ($R_{i,r}$) is given by the smaller value calculated by eq. (4) or (5). Parameters A and B are known as Magnussen constants, $\nu'_{i,r}$ corresponds to the stoichiometric coefficient, $M_{w,i}$ to the molecular weight, ε/κ to the ratio of turbulent kinetic energy/dissipation rate and Y_R to the mass fraction.

$$R_{i,r} = \nu'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{\kappa} min_R \left(\frac{Y_R}{\nu'_{R,r} M_{w,R}}\right) \quad (4)$$

$$R_{i,r} = \nu'_{i,r} M_{w,i} AB \rho \frac{\varepsilon}{\kappa} min_R \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N \nu''_{j,r} M_{w,j}} \quad (5)$$

The values of A and B default by FLUENT are 4.0 and 0.5 respectively. Those values were found empirically for the combustion of gases and produced unrealistic high flame temperatures and low CO concentration in the simulations. At the best of our knowledge, the only work in the literature dedicated to estimate the Magnussen constants for the combustion of biomass is the one presented by Scharler, Fleckl & Obernberger [19]. They recommend values of 0.6 and 0.5 for Magnussen constants A and B respectively. With those values, the simulations calculated a CO concentration and flame temperature of satisfactory agreement to the experimental values.

Table 3.
Parameters for the devolatilization model.

Conversion fraction interval	$0.0 < \alpha \leq 0.6$	$0.6 < \alpha \leq 1.0$
K (1/s)	88655.18	64561.73
E_a (J/mol)	65173.70	60898.02
Eq.	(7)	(8)

Source: [5]

Table 4.
Parameters for the char combustion model.

C_1 (kg/m^{s}sPa)	$1*10^{11}$
C_2 (kg/m^{s}sPa)	6.7
E_C (J/kmol)	$1.138*10^8$

Source: [24]

3.2. Particle modeling

As already mentioned, bagasse particles are modeled as a discrete phase. These particles pass through a process of heating, moisture evaporation, volatile evaporation, char combustion and ashes heating/cooling.

As the moisture content in the bagasse is high, also a high vaporization rate is expected. In this case, a convection diffusion method for the mass transfer from the particle to the continuous phase is recommended [14]. In Eq. (6), taken from the work of Miller [20] and Sazhin [21]; m_p corresponds to the mass of the particle, k_c to the mass transfer coefficient, A_p to the particle surface area, ρ_c to the gas density and B_m to the Spalding mass number.

$$\frac{dm_p}{dt} = k_c A_p \rho_c ln(1 + B_m) \quad (6)$$

Volatilization rate is an important feature since 95% of the combusting constituents of the bagasse are volatiles. The devolatilization model used in this work is from Centeno-González *et al.* [5] and is presented on eq. (7) and (8). This model was programmed in C language as a UDF with the parameters presented on Table 3, where α corresponds to the conversion fraction, K to the pre-exponential factor, E_a to the activation energy, T_p to the particle temperature and R to the universal gas constant.

$$\frac{d\alpha}{dt} = \mathrm{K} e^{\left(-\frac{E_a}{RT_p}\right)} (1-\alpha)^2 \quad (7)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = \mathrm{K} e^{\left(-\frac{E_a}{RT_p}\right)} (1-\alpha)^3 \quad (8)$$

Once the particle passed through evaporation and volatilization, the char fraction is left to be consumed by the combustion process with the stoichiometry presented in eq. (9). Based on Baum and Street [22] and Field [23] models, char combustion rate is calculated with Eq. (10) with diffusion rate coefficient (D_0) of Eq. (11) and kinetic rate (ψ) of Eq. (12).

$$C(s) + O_2 \rightarrow CO_2 \quad (9)$$

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p P_{ox} \frac{D_0 \psi}{D_0 + \psi} \quad (10)$$

$$D_0 = \frac{C_1 0.5 \left(T_p + T_\infty\right)^{0.75}}{d_p} \quad (11)$$

$$\psi = C_2 e^{\left(\frac{-E_C}{RT_p}\right)} \quad (12)$$

In eq. (10)-(12), the mass diffusion limited rate (C_1), the kinetic limited pre-exponential factor (C_2) and the kinetic limited activation energy (E_C) are from Luo & Stanmore [24]. Those parameters are on Table 4. Also, in eq. (10)-(12) m_p corresponds to the mass of the particle, A_p to the surface area, P_{ox} to the partial pressure of oxidant species, T_∞ to the ambient temperature and E_c to the activation energy of the char combustion reaction.

Default swelling coefficient in FLUENT is 1.4, which is appropriate for coal particles that expand during devolatilization. However, bagasse particles behave the opposite way, according to Li *et al.* [25] as they tend to shrink and a swelling coefficient of 0.7 would be more appropriate.

4. Boundary conditions

The main operational parameters and boundary conditions for the simulation of the boiler are presented in Table 5. Four injections of bagasse particles were performed as function of a particle size distribution that was experimentally measured in a gradation test and can be seen in Table 6.

Profiles of velocity, temperature, turbulent kinetic energy and dissipation rate calculated in the simulation of the primary and secondary air circuits were used in the simulation of the furnace as boundary conditions for the grate and the secondary air inlets. The location of the grate and the secondary air inlets can be seen on Fig. 3.

Table 5.
Main operational parameters for the boiler.

Parameter	Value
Primary air flow	32.2 kg/s (25°C)
Heat transf. primary preheater	82408 W/m^3
Secondary air flow	29 kg/s (25°C)
Heat transf. secondary preheater	92865 W/m^3
Heat transf. superheater	57273 W/m^3
Pneumatic air flow	3.22 kg/s (25°C)
Bagasse feed	22.03 kg/s (25°C)
Walls temperature in furnace	285°C
Walls emissivity	0.85

Source: The authors.

Table 6.
Diameter and mass flow of every injection of bagasse particles.

Injection	Particle diameter (d_p) (mm)	Flow (kg/s)
1	1.70	9.3627
2	1.35	3.3265
3	0.62	8.2612
4	0.25	1.0794

Source: The authors.

It is seen on the operation of the boiler how the bagasse particles tend to pile up above the grate, in order to emulate this behavior in the discrete phase model, it is necessary to trap the particles in the grate. In the rest of the boundaries, particles are reflected except in the outlet, where they scape.

5. Results and analysis

Fig. 4 presents the velocity profile on the grate calculated by the simulation of the primary air circuit. It is notorious the higher velocity in the upper part, which corresponds to the wall where the bagasse feeders are located (Fig. 3). This unbalanced distribution of flow provides an opportunity of improvement that will be exposed further in this paper.

Fig. 5 presents the contours of velocity on each one of the six levels of secondary air inlets in the furnace, being level one, the closer to the bottom and level six, the farthest (see Fig. 7). These contours were obtained in the simulation of the furnace using the velocity profiles calculated in the simulation of the secondary air circuit. It is observed how the highest velocities are found nearby the walls and the lowest by the center. These contours also show a not properly distributed flow inside the furnace that can be improved by a rearrangement of the air nozzle angles.

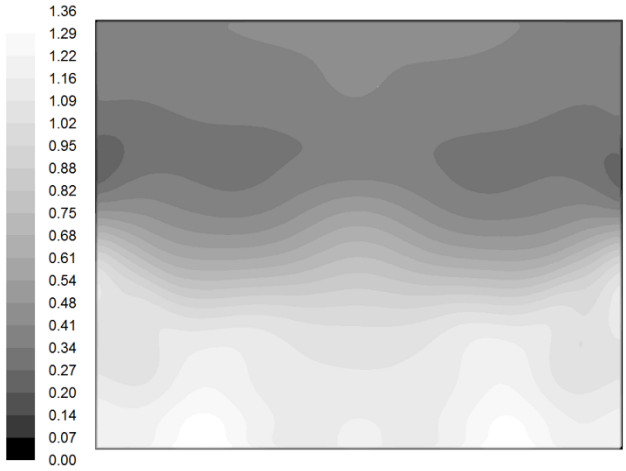


Figure 4. Velocity profile on the grate (m/s).
Source: The authors.

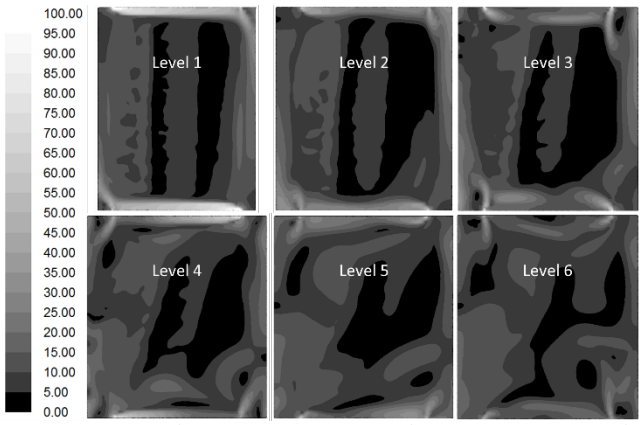


Figure 5. Contours of velocity magnitude (m/s) found in the simulation of the furnace. Source:
The authors.

Contours of temperature and molar fraction of O_2 found in the simulation of the furnace are presented in Fig. 6. and 8. The unbalanced distribution of flow on the grate generates higher temperature at the bottom towards the bagasse feeder's wall as seen on the side contour of Fig. 6. Similarly, the side contour of Fig. 8 shows a reduction of the O_2 fraction towards the opposite wall of the bagasse feeders also caused by the unbalanced distribution of flow on the grate. Location of the planes side, front, level one and level six on the furnace can be seen in Fig. 7.

A comparison of the available experimental data with the results of the simulation of the furnace is presented on Table 7. Temperatures and molar fraction of O_2 and CO_2 show a satisfactory agreement with a percentage of deviation below 5%. However, the concentration of CO is almost 20% deviated from the measured value. Since the CO is an intermediate species in the combustion reaction, it is probably the most difficult to predict. Besides, the concentration of CO is highly dependent on the values of the Magnussen constants (eq. 4-5). A simulation was performed with default FLUENT values (A=4.0, B=0.5) and it calculated a temperature in the lower furnace of 1342°C and a concentration of CO of 0.1568 ppm in the outlet. Those values show a significant difference with the measured data presented in Table 7 and it reveals the strong dependence of the flame temperature and formation of CO with the Magnussen constants.

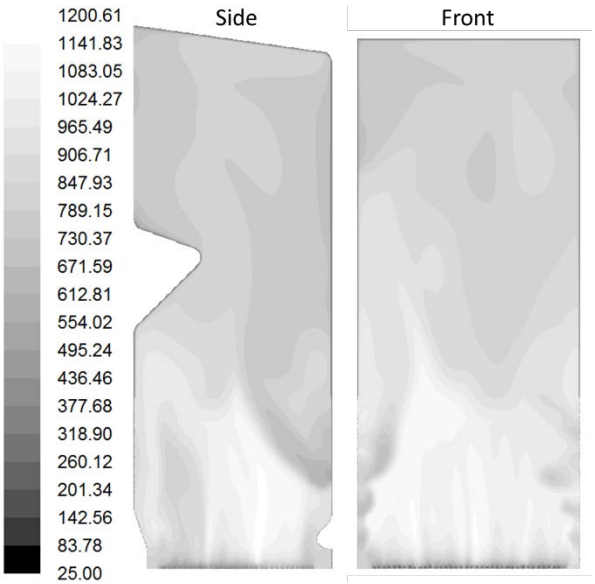


Figure 6. Contours of temperature (°C) found in the simulation of the furnace.
Source: The authors.

Table 7.
Comparison of measured data with the results of the simulation.

Parameter	Measured	Simulated	% deviation
Temp. lower furnace (°C)	1230	1201	-2.41%
Temp. upper furnace (°C)	890	848	-4.95%
Molar fraction O_2 outlet	0.068	0.0651	-4.45%
Molar fraction CO_2 outlet	0.090	0.0922	2.39%
ppm CO outlet	2250	1883.42	-19.46%

Source: The authors.

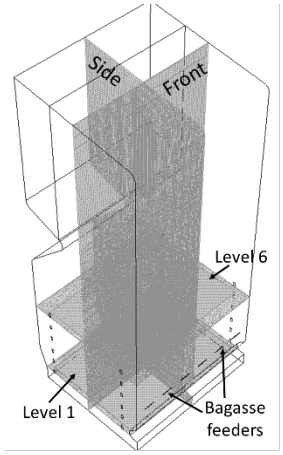


Figure 7. Location of the planes side, front, level one and level six.
Source: The authors.

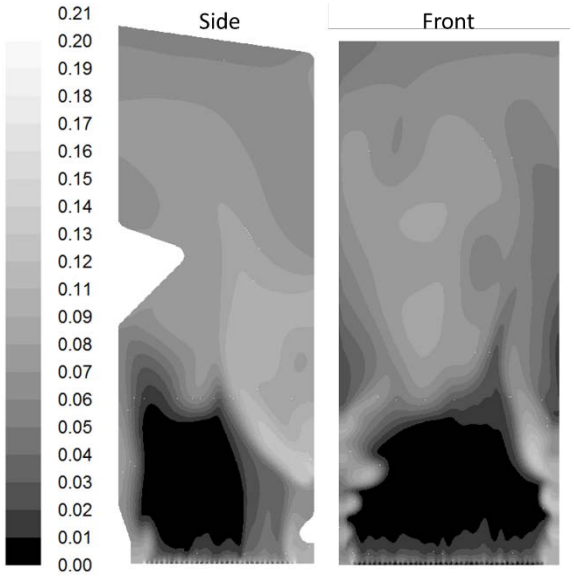


Figure 8. Contours molar fraction of O_2 found in the simulation of the furnace.
Source: The authors.

Table 8 presents a summary of the behavior of the bagasse particles after evaporation, devolatilization and char combustion. Results show that the grate traps most of the biggest particles while the whole of the smallest leave the furnace. The residence time is, evidently, greater in the particles that leave the furnace. The sum of the particles trapped by the grate and leaving the furnace is 0.6072 kg/s and the load of ashes in the bagasse is 0.5948 kg/s (see Table 2) which means that 0.0124 kg/s was left unburned. The flow of particles leaving the furnace (0.33594 kg/s) should correspond to the particulate matter in the flue gases. Unfortunately, there is not experimental measurement of this parameter to confirm the validity of this value.

6. Optimization

The first improvement sought to balance the air flow distribution on the grate. For that purpose, a series of deflectors were located under the grate to evenly distribute the streamlines and can be seen on Fig. 9. The contours of velocity magnitude on the grate found in the simulation of the primary air circuit with the mentioned modifications is shown in Fig. 10. It is seen, a more balanced distribution of the flow.

The entry angle to the furnace of the secondary air nozzles was modified to create two vortexes that enhanced the mixing of air and volatiles and provided a more balanced distribution of the flow inside the furnace (Fig. 11). As result of this modification, the simulation showed a significant reduction of the CO concentration in the outlet, which represented an increase of 1.3% in the combustion efficiency as seen on Table 9. The combustion efficiency was calculated with eq. (13) where X_{CO_2} and X_{CO} correspond to the molar fraction of

Table 8.
Summary of the behavior of the bagasse particles.

Particle diameter (mm)	Trapped by the grate		Leaving the furnace	
	Flow (kg/s)	Residence time (s)	Flow (kg/s)	Residence time (s)
1.70	0.26400	3.3070	0.02156	22.050
1.35	0.00719	4.8040	0.02934	28.110
0.62	0.00008	3.1540	0.25210	5.4220
0.25	0.0	0.0	0.03294	4.4550
Total	0.27126		0.33594	
Average		3.95600		8.317

Source: The authors.

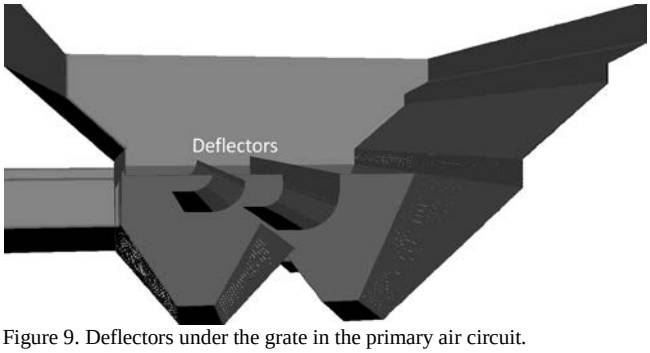


Figure 9. Deflectors under the grate in the primary air circuit.
Source: The authors.

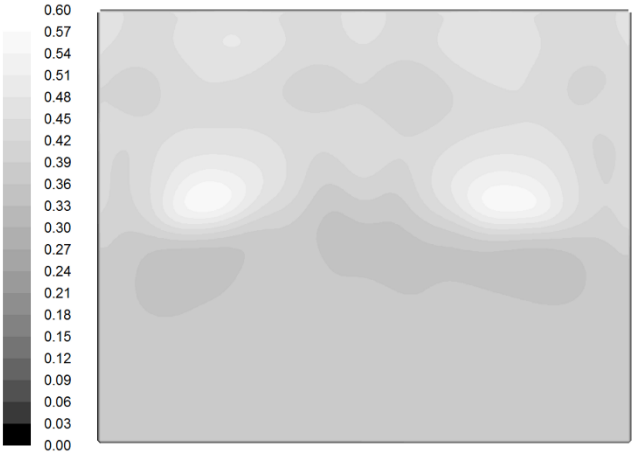


Figure 10. Velocity profile on the grate (m/s) after optimization. Source: The authors.

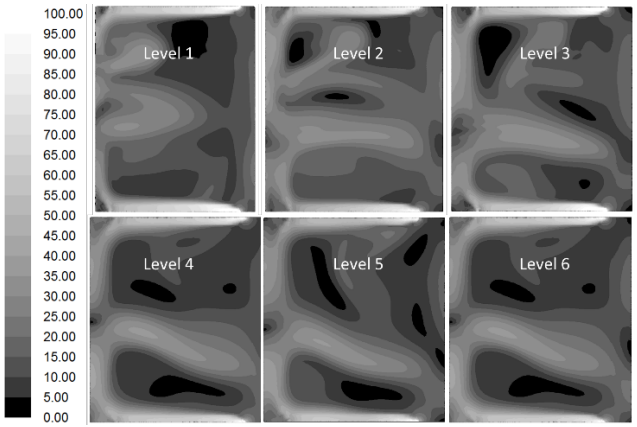


Figure 11. Contours of velocity magnitude (m/s) found in the simulation of the furnace after optimization. Source: The authors.

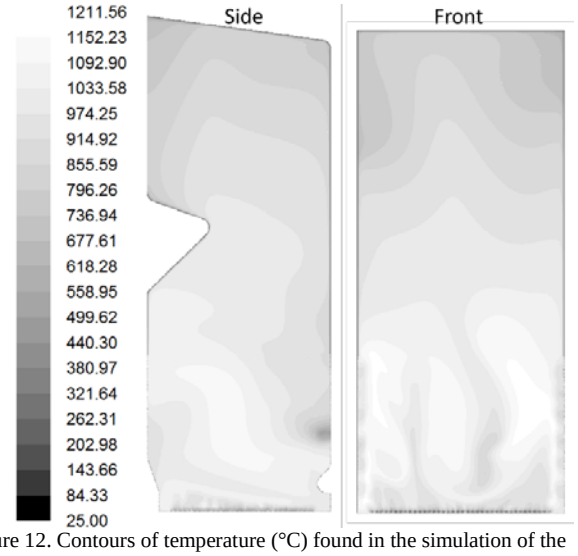


Figure 12. Contours of temperature (°C) found in the simulation of the furnace after optimization.
Source: The authors.

Table 9.
Comparison of the baseline and the optimized simulation.

Parameter	Baseline	Optimized
CO (ppm) outlet	1883.42	320.67
Molar fraction CO_2 outlet	0.0922	0.1249
Molar fraction O_2 outlet	0.0651	0.0247
Temp. lower furnace (°C)	1201	1211
Combustion Efficiency	98.52	99.82

Source: The authors.

Table 10. Behavior of the bagasse particles in the baseline and the optimized simulation.

Particle diameter (mm)	Baseline (kg/s)		Optimized (kg/s)	
	Trapped by the grate	Leaving the furnace	Trapped by the grate	Leaving the furnace
1.70	0.2640	0.0216	0.2440	0.0061
1.35	0.0072	0.0293	0.0689	0.0170
0.62	0.0001	0.2521	0.0805	0.1424
0.25	0.0000	0.0329	0.0156	0.0136
Total	0.2713	0.3359	0.4090	0.1790

Source: The authors.

CO_2 and CO respectively. In Table 9 can also be seen an increase in the CO_2 concentration as result of the reduction of CO formation. Contours of temperature found in the simulation of the furnace, after optimization of the air flow on the grate and the entry angle of the secondary air nozzles, are presented in Fig. 12. This figure shows a more balanced distribution of the temperature in the lower furnace.

$$CE = 100 * \frac{X_{CO_2}}{X_{CO_2} + X_{CO}} \quad (13)$$

Table 10 presents the behavior of the bagasse particles after evaporation, devolatilization and char combustion in the baseline and the optimized simulation. Here, it can be seen an important increase in the mass of particles trapped by the grate and a reduction of the particles leaving the furnace which indicates a reduction of the particulate matter in the flue gases.

7. Conclusions

The simulation of the combustion of bagasse is a complicated task since it involves a series of physical processes such as heating, vaporization, devolatilization, char combustion and ash heating/cooling. The literature is still scarce on studies regarding devolatilization and char combustion of bagasse particles. Most studies model devolatilization with a first order single rate Arrhenius equation, yet researchers [12] have pointed out that single rate models cannot accurately represent devolatilization. At the best of our knowledge, the only set of kinetic parameters available in the literature to simulate the char combustion of sugarcane bagasse are from Luo & Stanmore [24]. In their work, a single sample of bagasse is analyzed; therefore, it is uncertain the effect of the composition of the bagasse in the kinetic parameters for char combustion.

At the best of our knowledge, the effect of the Magnussen constants for the eddy dissipation model in the combustion of biomass has been analyzed only by Scharler, Fleckl & Obernberger [19]. The default values of these constants provided by FLUENT calculated unrealistic high temperatures (1342°C) and extremely low CO formation (0.1568 ppm). With the values proposed by Scharler, Fleckl & Obernberger the simulation calculated a temperature in the low furnace with a 4.95% of deviation from the measured value and a CO concentration in the outlet with a 19.46% of deviation. These results indicate that there is a strong dependence of the flame temperature and the formation of CO with the Magnussen constants. However, Scharler, Fleckl & Obernberger studied only the effect of the A constant in the formation of CO while the *B* constant was left fixed in a value of 0.5. This means that only the effect of the *A* Magnussen constant has been studied in the combustion of biomass and there is still, uncertainty regarding the effect of the *B* constant in this matter.

The baseline CFD simulation provided an insight of the performance of the boiler and permitted the development of a series of modifications that optimized that performance. The results of the simulations after optimization of the boiler showed an increase of 1.3% in the combustion efficiency and

a reduction of 53% in the particulate matter in the flue gases.

Acknowledgments

The authors wish to acknowledge BIOCONDENSADOS (Cali, Colombia) for providing the experimental data used in this work.

References

[1] Alexandratos, N. and Bruinsma, J., World agriculture towards 2030/2050: The 2012 revision, FAO Agricultural Development Economics Division, 2012.
[2] Global Ethanol Production. [online]. Available at: https://www.afdc.energy.gov/data/10331. 2017.
[3] Kaewpradap, A., Yoksenakul, W. and Jugjai, S., Effects of moisture content in simulated bagasse by equilibrium analysis. Proceedings of the 4th TSME International Conference on Mechanical Engineering (TSME-ICOME). October, 2013.
[4] Shrivastav, S. and Hussain, I., Design of bagasse dryer to recover energy of water tube boiler in a sugar factory. International Journal of Science and Research (IJSR), 2(8), pp. 356-358, 2013.
[5] Centeno-Gonzáleza, F., Silva-Lora, E.D., Villa-Nova, H.F., Mendes Neto, L.J., Martínez-Reyes, A.M., Ratner, A. and Ghamari, M., CFD modeling of combustion of sugarcane bagasse in an industrial boiler. Fuel, 193, pp. 31-38, 2017. DOI: 10.1016/j.fuel.2016.11.105
[6] Demirbas, A., Potential applications of renewable energy sources, biomass combustion problems in boiler power systems and combustion related environmental issues. Prog. Energy Combust. Sci., 31, pp. 171-192, 2005. DOI: 10.1016/j.pecs.2005.02.002
[7] Ferreira, D.J.O., Sosa-Arnao, J.H., Moreira, B.C., Paes-Rangel, L. and Park, S.W., A comprehensive CFD model for sugar-cane bagasse heterogeneous combustion in a grate boiler system. International Journal of Chemical, Molecular, Nuclear, Materials and Metallurgical Engineering, 9(5), pp. 593-600, 2015. DOI: 10.1999/1307-6892/10001615
[8] Zahirovic, S., Scharler, R. and Obernberger, I., Advanced CFD modelling of pulverised biomass combustion. Proc. of the Internat. Conf. Science in Thermal and Chemical Biomass Conversion. pp. 267-283, 2006.
[9] Jin, B., Yan, L., Higgins, B. and Liu, G., CFD Modeling of biomass combustion for conversion application. NALCO Mobotec Clearwater Coal Conference, 2011. DOI: 10.3390/ijms9061108
[10] Aboyadea, A.O., Hugo, T.J., Carriera, M., Meyer, E.L., Stahl, R., Knoetzea, J.H. and Görgens, J.F., Non-isothermal kinetic analysis of the devolatilization of corn cobs and sugarcane bagasse in an inert atmosphere. Thermochimica Acta, 517, pp. 81-89, 2011. DOI: 10.1016/j.tca.2011.01.035
[11] Sánchez-Castro, Z. and Mendieta-Menjura, O.A., Setting of a mathematical model for the sugarcane bagasse combustion in a Ward-Cimpa chamber. Corpoica Cienc. Tecnol. Agropecu., 15(2), pp. 133-151, 2014.
[12] Smith, J.D., Foundations of a three-dimensional model for predicting coal combustion characteristics in industrial power generation plants. In: Dept of Chemical Engineering. Provo, Utah, USA: Brigham Young University, 1990.
[13] Yin, C., Kaer, S.K., Rosendahl, L., Hvid, S.L., Modeling of pulverized coal and biomass co-firing in a 150 KW swirling stabilized burner and experimental validation. In: Proceedings of the international conference on powder engineering-09. (ICOPE-09). Kobe, Japan; November 16–20, 2009. DOI: 10.1299/jsmeicope.2009.2._2-305_
[14] ANSYS FLUENT User Manual, release 16.0. ANSYS Inc.
[15] Torresi, M., Saponaro, A., Camporeale, S.M. and Fortunato, B., CFD analysis of the flow through tube banks of HRSG. Proceedings of ASME Turbo Expo 2008: Power for Land, Sea and Air, 2008.
[16] Ergun, S., Fluid flow through packed columns. Chem. Eng. Prog. 48(2), pp. 89-94, 1952.
[17] Tabet, F. and Gökalp, I., Review on CFD based models for co-firing coal and biomass. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 51, pp. 1101-1114, 2015. DOI: 10.1016/j.rser.2015.07.045
[18] Magnussen, B.F. and Hjertager, B.H., On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In 16th Symp. (Int'l.) on Combustion. The Combustion Institute, 1976. DOI: 10.1016/S0082-0784(77)80366-4
[19] Scharler, R., Fleckl, T. and Obernberger, I., Modification of a magnussen constant of the Eddy dissipation model for biomass grate furnaces by means of hot gas in-situ FT-IR absorption spectroscopy. Progress in Computational Fluid Dynamics, 3(4), pp. 102-111, 2003. DOI: 10.1504/PCFD.2003.003776
[20] Miller, R.S., Harstad, K. and Bellan, J., Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many droplet gas-liquid flow simulations. International Journal of Multiphase Flow. 24(6), pp. 1025-1055, 1998. DOI: 10.1016/S0301-9322(98)00028-7
[21] Sazhin, S.S., Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. Progress in Energy and Combustion Science. Elsevier Science. 32, pp. 162-214, 2006. DOI: 10.1016/j.pecs.2005.11.001
[22] Baum, M.M. and Street, P.J., Predicting the combustion behaviour of coal particles. Combust Sci Technol. 3, pp. 231-243, 1971. DOI: 10.1080/00102207108952290
[23] Field, M.A., Rate of combustion of size-graded fractions of char from a low-rank coal between 1200 K and 2000 K. Combust Flame. 13, pp. 237-252, 1969. DOI: 10.1016/0010-2180(69)90002-9
[24] Luo, M, and Stanmore, B., The combustion characteristics of char from pulverized bagasse. Fuel. 71(9), pp. 1074-1076, 1992. DOI: 10.1016/0016-2361(92)90117-7
[25] Li, J., Paul, M.C., Younger, P.L. Watson, I. Hossain, M. and Welch, S., Characterization of biomass combustion at high temperatures based on an upgraded single particle model. Applied Energy. 156, pp. 749-755, 2015. DOI: 10.1016/j.apenergy.2015.04.027

F.A. Diaz-Mateus, received the BSc. Eng in Chemical Engineering in 2004, from the Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga Colombia. The MSc. degree in Chemical Engineering in 2008, from the Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brazil. The PhD degree in Chemical Engineering in 2016 from the Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia. He has over 10 years of experience working as a consultant for different companies in computational simulation, programming and numerical modelling. Currently, he serves as technical manager of AC Ingenieria Virtual.
ORCID: 0000-0001-9637-109X

H.C. Alvarez-Castro, graduated the BSc. in Chemical Engineering at Industrial University of Santander-UIS- Colombia, 2007. He completed his MSc. in Chemical Engineering (2011) and his PhD in Chemical Engineering (2014) at University of Campinas - UNICAMP -. He has experience in chemical engineering, focusing on computational fluid dynamics (CFD), stirred tanks, petrochemical processes, heat transfer, besides with training and skills in design, process simulation, economic analysis, development of technology products and research among others. Currently, he serves as commercial manager of AC Ingenieria Virtual.
ORCID: 0000-0002-3180-1420

A. Chaves-Guerrero, he is a BSc. Chemical Engineer and Sp. in Thermal Sciences of the Universidad del Valle, Cali Colombia. He received his MSc. degree in Mechanical Engineering and his PhD degree from the University of Puerto Rico, Mayagüez, Puerto Rico. He is currently professor of the School of Chemical Engineering in the Universidad Industrial de Santander, Colombia. His research is focused on ferrohydrodynamic, magneto-rheology, and simulation of transport phenomena.
ORCID: 0000-0003-4481-4818

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Dynamic consumption representation of electric vehicles based on battery capacity

Adriana Marcela Quintero-Montenegro, Cristian Camilo Mendoza-Grosso, Francisco Santamaría & Jorge Alexander Alarcón-Villamil

Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia, amquinterom@correo.udistrital.edu.co, ccmendozag@correo.udistrital.edu.co, fsantamariap@udistrital.edu.co, jaalarconv@udistrital.edu.co

Received: August 04rd, 2016. Received in revised form: August 01rd, 2017. Accepted: November 25th, 2017.

Abstract
This paper presents a methodology for generating different charge characteristics using probability function of battery capacity and Tremblay non-linear battery electric model. The battery capacities are grouped into five categories to obtain a behavior of the charging curve variable over time and to determine the probability function of discharged energy. The charging curves of each electric vehicle will represent instantaneous power consumption in a low voltage distribution system with 56 nodes and will allow the comparison between the proposed methodology and the case that considers a linear characteristic of battery charging curve.

Keywords: probability function; capacity; battery; charging characteristic; state of charge; electric vehicles.

Representación del consumo dinámico de los vehículos eléctricos en función de las capacidades de las baterías

Resumen
Este artículo presenta una metodología para generar diferentes características de carga a partir de la función de probabilidad de las capacidades de las baterías y el modelo eléctrico no lineal de Tremblay. Después las capacidades de las baterías son agrupadas en cinco categorías para obtener un comportamiento de la curva de carga variable en el tiempo y determinar la función de probabilidad de la energía descargada. Las curvas de carga de cada vehículo eléctrico representarán el consumo de potencia instantáneo en un sistema de distribución de 56 nodos de baja tensión y permitirán la comparación entre la metodología propuesta y el caso en el que se considera una característica lineal de la curva de carga de la batería.

Palabras clave: función de probabilidad; capacidad; baterías; característica de carga; estado de carga; vehículos eléctricos.

1. Introduction

A basic requirement for propulsion of electric vehicle is a portable energy source which allows conversion of electrical energy into mechanical energy in the electric motor. One of the technologies widely used to feed the electric vehicle is obtained by transforming the chemical energy stored in devices such as batteries and fuel cells; therefore, these devices become a focus of research to improve the services they can provide according to the recharging system.

This research has given great importance to the charging model, whereas battery allows the characterization of the vehicle depending on traveled distance, power capacity, weight, cost, and lifetime [1], through an attempt to ensure that behavior during recharge will be close to reality and the model can be applied to the most representative electric vehicles in the market.

Considering battery behavior within a dynamic frame of reference, it is possible to evidence the impact of recharging a set of vehicles with different characteristics, which can be extended if the traveled distance by these vehicles is different until their next battery recharge.

This random component is a starting point for adding the load represented by the vehicles in a residential distribution system and allows analyzing different case studies.

The objective of this research is to present a methodology

How to cite: Quintero-Montenegro, A.M., Mendoza-Grosso,C.C., Santamaría, F. and Alarcón-Villamil, J.A., Dynamic consumption representation of electric vehicles based on battery capacity. DYNA, 85(204), pp. 177-184, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

for characterizing the consumption of electric vehicles based on the battery capacities, considering the model proposed by Tremblay [2] and the characteristics of some batteries presented by Martinez [3], so the increment of power consumed by a residential distribution circuit can be evaluated from the random behavior of three variables: battery capacity, time of connection, and discharged energy.

2. Methodology for characterizing the dynamic consumption of electric vehicle based on battery capacity

This paper proposes a methodology for finding the probability function of battery capacity of vehicles connected to the distribution system at a given time. In this regard, the characteristic curve for charge and discharge of battery is constructed using data provided by manufacturers and implementing the battery discharge model developed by Tremblay [2].

Additionally, it is possible to know the probability function of energy requirement of batteries. To that end, a number of hourly electric vehicle connections is randomly generated from mobility data of the city. The steps defined in this methodology can be summarized as follows:

1) Define the distribution system to which a number of electric vehicles are expected to be connected.
2) Generate a random number of electric vehicle connections based on the number of load nodes in the system and the quantity of trips by private vehicles in the city.
3) Select a battery charging method seeking to preserve battery life and set the variables involved in the non-linear recharging model of the battery.
4) Group batteries according to the capacity of those commercially available.
5) Construct the characteristic curve of battery charge and discharge, from steps 3 and 4.
6) Run the load flow to determine the hourly power consumption of electric vehicles according to charge characteristics of the batteries.
7) Construct a probability distribution of expected battery capacities.
8) Construct the probability function of the energy consumed by electric vehicles connected to the system using average specific consumption of the most representative electric vehicles in the market.

3. Battery charging and discharging methods

An electric battery has the capacity to store certain amount of energy to be delivered later. This parameter determines the distance that an electric vehicle can travel until battery discharge, and it is expressed in Ampere-hour (Ah) as a measure of current flowing by the battery during an hour [4]. However, in practice, this is not how it works, because batteries are highly non-linear electrochemical systems, governed by a complex mixture of laws of thermodynamics, electrode kinetics, and ion transport phenomena [5].

In order to make a distinction between battery capacities, indices were established to obtain battery capacity when discharging at a certain rate, denoted with letter C. For example, when indicating that a battery has a capacity of 40 Ah, this is interpreted as C = 40 Ah, and if it discharges at a rate of 0.2 C, discharge current is 8 A. Similarly, a subindex that allows determining the time in hours the battery takes to discharge is included; this means the slower discharge is, the more energy the battery can provide [6].

A battery is considered fully discharged when its voltage drops below certain value [3]. Usually from that value, battery voltage decreases abruptly; this directly affects the relation capacity [Ah] voltage [V], i.e. the energy stored in the battery [Wh].

From this relation, parameters of the main charging methods to preserve battery life in each recharge are defined, as summarized below:

3.1. Constant voltage method

It consists in applying a fixed voltage on battery terminals initially limiting the input current; due to low battery voltage, current would be very high and overcharge the device. Charge current can be high at the initial stage and it gradually decreases to zero when the battery is fully charged. The disadvantage of this method is the requirement of very high power at the initial stage of charging, not available for most residential structures [7].

3.2. Constant current method

In this scheme, charging voltage applied to the battery is controlled, thereby allowing its increase while the battery is charged with a constant current. The challenge of this method is to define the time when the battery completes its recharge. At this time, the supply cuts to avoid temperature increase, the minimum voltage changes or the expected charging time exceeds [8,9].

3.3. Combination of constant voltage and constant current method

At the initial stage, the battery can be pre-charged at a high constant current, while voltage increases. When battery voltage reaches certain threshold, the voltage remains constant and the current begins to decrease. In this way, battery voltage remains constant if recharging is complete and it is still connected to power supply [3].

One of the most used methods for recharging lithium ion (Li-ion) batteries is the combination of constant voltage and constant current [10] due to the sensitivity of the cells to overcharge, since charge control can accurately modify the variables determining the power consumed by the battery.

The effectiveness of this method also depends on the estimation of battery state of charge (SoC). This provides a percentage of battery capacity with respect to its nominal capacity, in order to control voltage and current under its actual charge condition. However, more variables are expected to determine this, such as temperature and useful life of battery, so that several methods can take into account the dynamic behavior of cells to determine the state of charge [11].

In order to develop the proposed consumption model, the

recharges using the combination of constant voltage and constant current method as well as the estimation of the state of charge (SoC) for a given consumption condition are considered.

4. Electric model of battery recharge

Experimental and electrochemical models are not well adapted to the representation of dynamic battery for estimating the state of charge; this requires extensive experimentation and more complex computer processing [12,13]. By contrast, electric models represent electrical variables in a simple way, including analysis of state of charge.

The simplest electric model is an ideal voltage source in series with an internal resistor [14]. Although it does not take into account battery state of charge, it was extended to a circuit which includes the open-circuit voltage in series with a resistor and a parallel RC circuit; this arrangement is known as Warburg impedance [15]. The identification of the parameters of this model is based on the technique of impedance spectroscopy [16].

However, Shepherd wrote an equation to describe the electrochemical behavior of a battery in terms of terminal voltage, open circuit voltage, internal resistance, discharge current, and state of charge [17]. This model has been widely used, improved and even adopted in battery simulation as a generic element in Matlab/Simulink libraries [18]. One of the main modifications to the Shepherd model was to define a polarization voltage instead of a polarization resistance in order to remove the loops generated in Simulink. This model, proposed and validated by Tremblay [2] in electric vehicles, is used as a reference to describe the behavior of battery recharge during this research. The model consists of a dependent voltage source and a resistor in series, as shown in Fig. 1.

Based on this model, the behavior of internal voltage of battery is described in (1) and graphically represented during recharge in Fig.2. It is important to note that the maximum voltage is reached at 70% of charge and remains constant while the battery is still connected to the power supply.

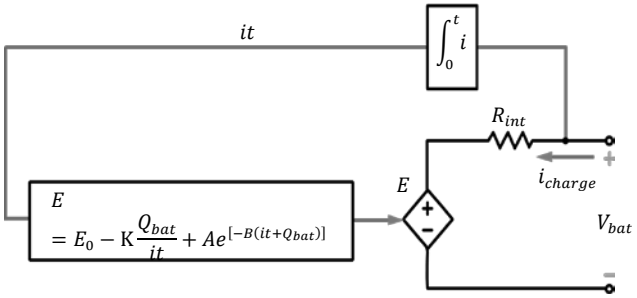


Figure 1. Non-linear electric model of battery during recharging.
Source: The authors.

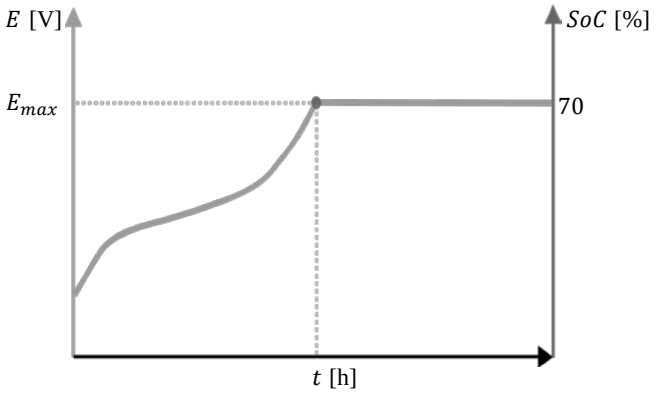


Figure 2. Behavior of internal voltage during recharging.
Source: The Authors.

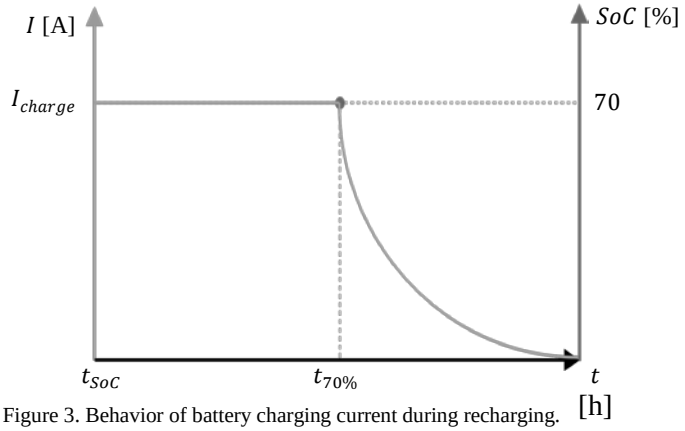


Figure 3. Behavior of battery charging current during recharging.
Source: The Authors.

$$E = \begin{cases} E_0 - 0.7\mathrm{K}\frac{Q_{bat}}{it+0.1\left(Q_{bat}\frac{Q_0}{100}\right)} + Ae^{\left[-B\left(\left(Q_{bat}\frac{Q_0}{100}\right)+it\right)-0.7BQ_{bat}\right]} & si\ \left[\frac{it+Q_0}{Q_{bat}}\right] < 0.7 \\ E_0 - \mathrm{K} + \mathrm{A} & si\ \left[\frac{it+Q_0}{Q_{bat}}\right] \geq 0.7 \end{cases} \quad (1)$$

Likewise, as the selected method establishes, the behavior of the charging current of the battery would be opposite to the internal voltage, as shown in Fig.3, exponentially decreasing to zero when it reaches 70% of charge, as shown in (2).

$$I_{charge} = \begin{cases} (V_{charging} * Q_{bat})e^{\left(\frac{E*Q_{bat}*V_{carga}}{0.3*Q_{bat}}\right)*\left(-t+\frac{0.7}{V_{carga}}-\frac{Q_0}{V_{carga}*100}\right)} & si\ \left[\frac{it+Q_0}{Q_{bat}}\right] > 0.7 \\ V_{carga} * Q_{bat} & si\ \left[\frac{it+Q_0}{Q_{bat}}\right] \leq 0.7 \end{cases} \quad (2)$$

In order to identify the parameters in voltage and current equations, battery manufacturers show the characteristics for one cell. However, an electric vehicle battery consists of several cell arrangements; this involves determining the parameters of a particular battery based on a set of cells. To do this, the characteristics of a set of cells up to reach battery capacity and voltage are associated in [3]. Once the number of cells and their distribution are determined, other model parameters are calculated as described in [2]. In order to determine the parameters characterizing equations (1) and (2), values adopted in [3] are shown in Table 1 and used as a reference.

Table 1
Voltage and current parameters during recharging

Parameter	Interpretation	Provided by
E	Internal battery voltage or open circuit voltage	Equation (1)
I_{charge}	Current provided to battery during recharge	Equation (2)
it	Actual battery charge $[Ah]$	$\int I_{carga}\, dt$
R_{int}	Internal resistance of battery	Manufacturers
V_{bat}	Cell voltage or nominal battery voltage	
$V_{charging}$	Battery charging speed	
Q_{bat}	Battery capacity $[Ah]$ $[Wh]$	Electric Vehicle
Q_0	Battery state of charge	Vehicle consumption
E_0	Constant battery voltage	Tremblay [2]
A	Voltage drop during the exponential zone	
K	Polarization voltage	
B	Inverse time constant $[Ah^{-1}]$	

Source: The Authors.

Table 2
Battery parameters of the most representative electric vehicles available in the market

Parameter	Toyota Plug-in Prius	Mitsubishi I-Miev	Nissan Leaf	Mini-e	Tesla Roadster
Capacity $[kWh]$	< 10	10 - 20	20 - 30	30 - 40	40 <
Q_{bat} $[Ah]$	25	50	135	92	141
Q_{bat} $[kWh]$	5	16	24	35	53
V_{bat} $[V]$	201	330	180	380	375
R_{int} $[\Omega]$	0.605	0.484	0.097	0.304	0.197
A $[V]$	33	52.8	28.8	61.2	60.6
B $[Ah^{-1}]$	0.171	0.085	0.031	0.046	0.030
K $[V]$	1.642	2.628	1.433	3.046	3.016
E_0 $[V]$	214.77	343.63	187.43	398.3	394.39

Source: D. Martinez [3].

4.1. Battery classification based on capacity

Based on the electric model proposed by Tremblay [2] and data sheets of manufacturers, Martinez [3] calculated the parameters of some types of batteries of the most representative electric vehicles in the market and classified them into five categories according to their nominal capacity, as summarized in Table 2.

The parameters shown in Table II will be used as a starting point in the research to calculate the characteristic of consumed power by an electric vehicle while charging its battery, considering that this will depend on the SoC, charging rate, and battery capacity. This ensures that several vehicles that have traveled the same distance will not necessarily follow the same charging curve, since the capacities of their batteries are different.

5. Probability function of expected battery capacities for electric vehicle

In order to consider the variability of the batteries used by electric vehicles, the expected battery capacities are modeled by means a probability distribution [3], generating random samples based on the characteristics of electric vehicles available in the market, as shown in Table 3 [3].

Grouping these capacity values, as shown in Fig.4, a logarithmic normal probability function is obtained [3,19] divided into five segments. As can be seen, it is more likely that those vehicles with batteries between 10 and 20 kWh are connected. However, advances about batteries are related to the increase in their energy density in order to extend traveled distances; therefore, it is expected that current capabilities will be multiplied by 10 by 2020 [20].

6. Case study: 56 node distribution system

In order to develop this case study, a 56-nodes test system was selected; it has bus bars of 23 kV and a low voltage network of 415 V. The system has three low voltage feeders with 18 nodes representing residential users. It is assumed that each node has the same probability of one electric vehicle connected. This topology was taken from the study conducted by Deilami and Masoum [21] in order to compare obtained results; it can be seen in Fig.5.

Once the system is selected, from the trip distribution by private vehicles in Bogotá Colombia and the number of load nodes in the network, a random number of vehicles expected to connect is generated [22]. Likewise, the method selected to be used for battery recharge is the constant voltage and constant current combination, considering the implicit variables of the non-linear electric model proposed by Tremblay, as explained in Section 4.

Table 3
Expected Capacity and Consumption Characteristics of Different Types of Electric Vehicles Available in the Market

Electric Vehicle Brand	Capacity [kWh]	Consumption [kWh/km]
BYD F3DM	16.5	0.160
Brusa Spyder	16.0	-
BYD e6 (200kW)	59.4	0.175
BYD e6 (75kW)	59.4	0.160
Chevrolet Volt	16.5	-
Chevy Spark EV	21	-
Citroën C-Zero	16.5	-
Fiat 500e	24	-
Honda Fit EV	20	-
Micro-Vett Fiat 500	22.0	-
Micro-Vett Fiorino M1-Fi(HC-Eg)-Li(S)	21.0	0.240
Micro-Vett Fiorino M1-Fi(LC-EG)-Li	13.5	-
Micro-Vett Fiorino M1-Qu(HC-Eg)-Li(L)	32.0	0.240
Micro-Vett Fiorino M1-Qu(HC-Eg)-Li(S)	21.0	0.240
Mini-E	35.0	0.130
Mitsubishi iMiEV	16.5	0.100
Nissan Leaf	24.0	-
Opel Ampera	16.5	0.133
Peugeot ION	46.5	0.013
Phoenix SUT	35.0	-
REVA NXR	13.5	0.090
SEAT Leon Twin Drive Ecomotive	12.0	0.240
Smart electric drive Cabrio	14.5	0.122
Smart electric drive Coupé	14.5	0.122
Smart Fortwo Electric Drive	17.6	-
Tata Indica Vista EV	26.5	0.133
Tesla Roadster	51.5	0.231
Toyota Prius Plug-In Hybrid	5.0	0.062
Volkswagen Golf	26.5	-

Source: The Authors.

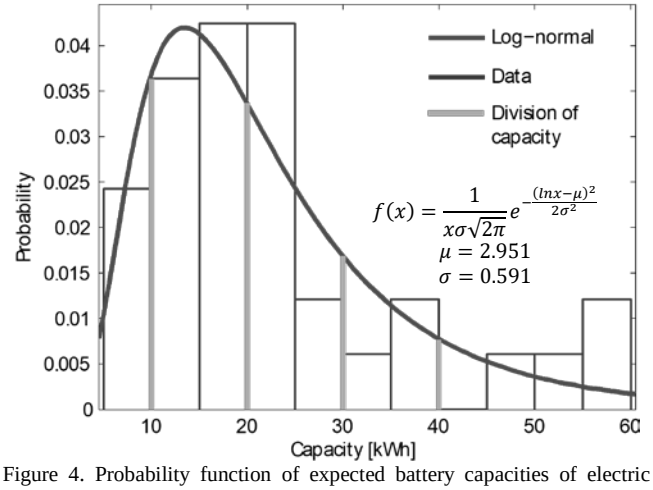


Figure 4. Probability function of expected battery capacities of electric vehicles.
Source: The Authors.

According to these considerations and taking into account battery classification shown in Table 2, battery non-linear charging and discharging characteristics are generated. To do this, a simulation between 16:00 and 22:00 with a penetration level of electric vehicles of 100% was scheduled; the results obtained are shown in Fig.6.

Fig.6 shows that the proposed methodology allows the non-linear battery behavior to be determined; this makes maximum power consumption vary according to the number of connected vehicles and the capacity of their batteries. This represents a major difference from the results obtained by Deilami and Masoum [21], who pioneered the characterization of electric vehicle consumption and assumed that all the batteries of electric vehicles have the same capacity (10 kWh) and an associated charging rate of 8 kWh; this allows linear charging characteristics to be obtained, as shown in Fig.7.

The advantage of obtaining a non-linear charging characteristic, as the one proposed in this paper, is that the method for managing energy of electric vehicles [23] may consider this power variability and select the charging combination that meets the constraints of the system under study at a given time [24,25].

Although Fig.6 shows the power requirement and total charging time according to battery capacity, this is important to find the probability function corresponding to the capacity of batteries expected to be connected to the system, as presented in Section 5. Based on the obtained results in this case study, it is possible to state that the batteries between 10 kWh and 20 kWh are the ones most likely to be present in the distribution network, as shown in Fig.8.

On the other hand, the energy required by the electric vehicles can be represented by a probability function [22], as shown in Fig.9. According to these results, it was possible to state that energy consumed by vehicles connected between 16:00 and 22:00 to the distribution system under study is between 2.8 kWh and 4.3 kWh.

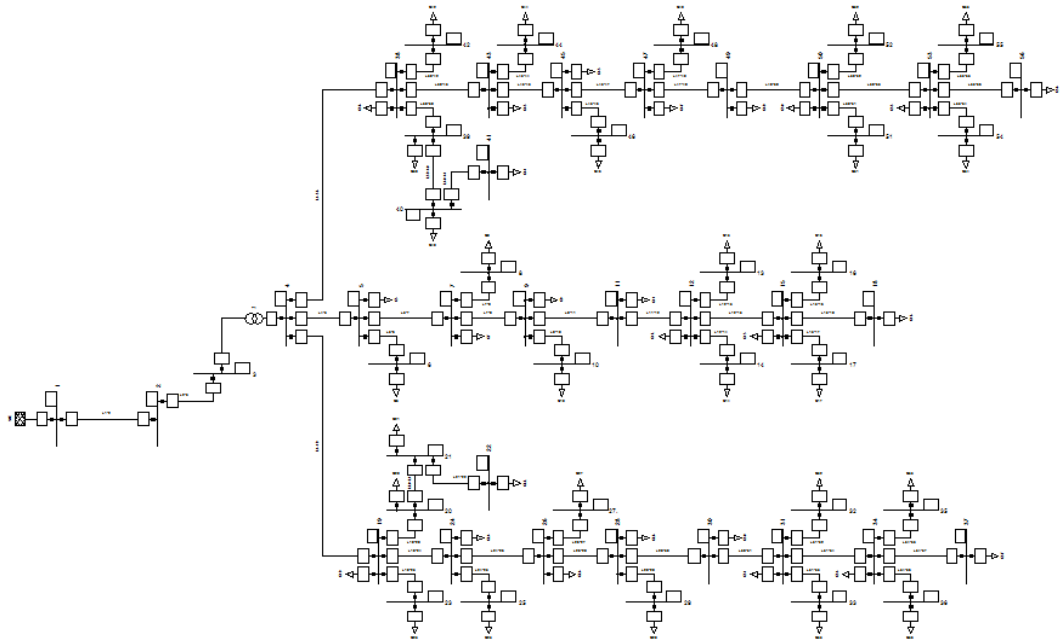


Figure 5. System topology of the 56 nodes test system selected.
Source: The Authors.

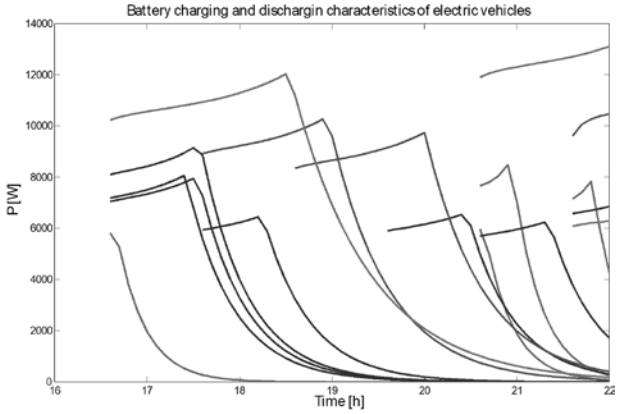


Figure 6. Battery charging and discharging characteristics of electric vehicles generated between 16:00 and 22:00 hours.
Source: The Authors.

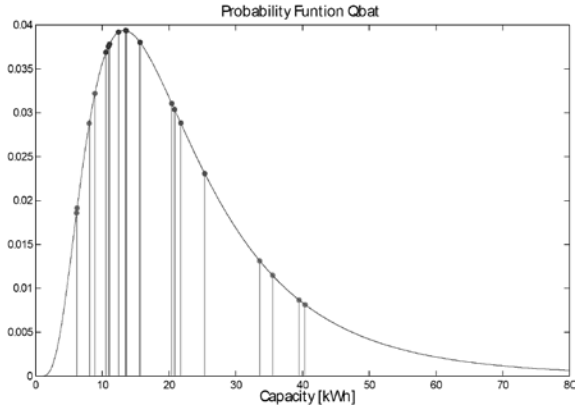


Figure 8. Probability function corresponding to the capacity of batteries expected to be connected to the system between 16:00 and 22:00 hours.
Source: The Authors.

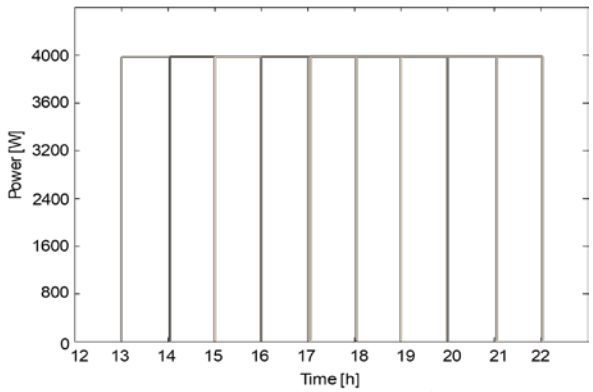


Figure 7. Battery charging characteristics obtained from the methodology proposed by Deilami and Masoum [21].
Source: The Authors.

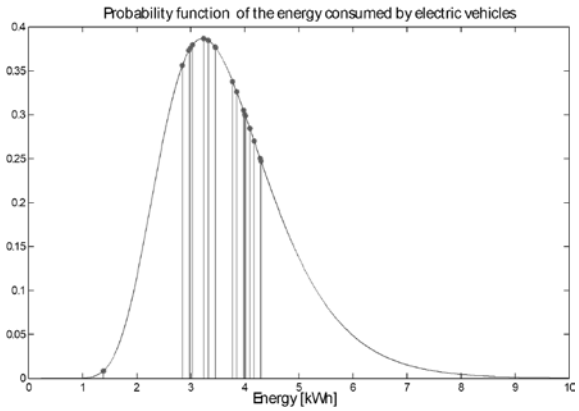


Figure 9. Probability function of the energy consumed by electric vehicles connected to the distribution system between 16:00 and 22:00 hours.
Source: The Authors.

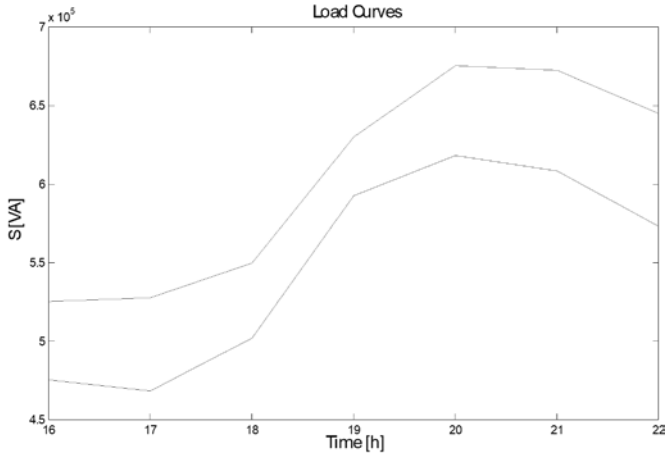


Figure 10. Behavior of the load curve of the distribution system between 16:00 and 22:00 hours, without electric vehicles (down curve) and with electric vehicles (up curve).
Source: The Authors.

Finally, the effect of simultaneous connection of electric vehicles on the load curve of the transformer feeding the distribution circuit was analyzed [26], and it was obtained that on average the increment in the load curve is 10%, compared with the case without vehicles, as shown in Fig.10.

7. Conclusions

By establishing the non-linear behavior of battery recharge of electric vehicles, the variation in peak demand on the system at a given time can be determined. This would allow the network operator to consider whether the charging condition would be favorable for the network.

Likewise, the non-linear model proposed by Tremblay allows the construction of different charging characteristics depending on battery capacity, SoC, and type of vehicle connected to the system. According to these and taking into account the probability function of battery capacities, it is possible to deduce that most vehicles expected to be connected to the system are hybrid.

Given that the methodology proposed in this research is based on random charging conditions, it is possible to apply it to any distribution system and for different case studies, as long as an arrival model of electric vehicles and discharged energy in battery is considered.

Finally, by finding the probability function of consumed energy, the behavior of both the batteries and the load curve of the distribution circuit can be predicted: the network operator could analyze the existing infrastructure in terms of demand increase.

References

[1] Marra, F., Yang, G., Træholt, C., Larsen, E. Rasmussen, C. and You, S., Demand profile study of battery electric vehicle under different charging options, de IEEE Power and Energy Society General Meeting, San Diego, 2012.

[2] Tremblay, O. and Dessaint, L.-A., Experimental validation of a battery dynamic model for electric vehicles applications, World Electric Vehicle Journal, 3, pp. 1-9, 2009.

[3] Martínez, D., El impacto del vehículo eléctrico en la red de distribución, Barcelona, 2012.

[4] Larminie, J. and Lowry, J., Electric vehicle technology explained, Chichester: Wiley, 2003. DOI: 10.1002/0470090707

[5] Barreras, J.V., Schaltz, E., Andreasen J. and Minko, T., Datasheet-based modeling of Li-Ion batteries, IEEE Vehicle Power and Propulsion Conference, pp. 830-835, 2012. DOI: 10.1109/VPPC.2012.6422730

[6] MIT Electric Vehicle Team, A guide to understanding battery specifications, MIT, Massachusetts, 2008.

[7] Dhameja, S., Electric vehicle battery systems, Boston: Newnes, 2002.

[8] Young, K., Wang, C., Wang, L.Y. and Strunz, K., Electric vehicle battery technologies, New York: Springer, 2012.

[9] Romero, M.F., Gallego, L.E., Müller, S. and Meyer, J., Characterization of non-linear household loads for frequency domain modeling, Ingeniería e Investigación, 35(1), pp. 65-72, 2015. DOI: 10.15446/ing.investig.v35n1Sup.53895

[10] Notten, P., Het Veld, J.O. and van Beek, J., Boostcharging li-ion batteries: A challenging new charging concept, Journal of Power Sources, 145(1), pp. 89-45, 2005. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2004.12.038

[11] Piller, S., Perrin, M. and Jossen, A., Methods for state-of-charge determination and their applications, Journal of Power Sources, pp. 113-120, 2001. DOI: 10.1016/S0378-7753(01)00560-2

[12] Thirugnanam, K., Saini, H. and Kumar, P., Mathematical modeling of Li-ion battery for charge/discharge rate and capacity fading characteristics using genetic algorithm approach, Indian Institute of Technology Guwahati/Electronics and Electrical Engineering, 2012.

[13] Rodriguez, L.F., Perez, S.M. and Mora-Flores, J.J. Load area aggregation considering integration of electric vehicles to the system, Ingeniería e Investigación, 35(1), pp. 42-49, 2015. DOI: 10.15446/ing.investig.v35n1Sup.53652

[14] Durr, M., Cruden, A., Gair, S. and McDonald, J.R., Dynamic model of a lead acid battery for use in a domestic fuel cell system, Journal of Power Sources, 161(2), pp. 1400-1411, 2006. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2005.12.075

[15] Kuhn, E., Forgez, C., Lagonotte, P. and Friedrich, G., Modelling Ni-mH battery using Cauer and Foster structures, Journal of Power Sources, 158(2), pp. 1490-1497, 2006. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2005.10.018

[16] Mauracher, P. and Karden, E., Dynamic modelling of lead/acid batteries using impedance spectroscopy for parameter identification, Journal of Power Sources, 67(1-2), pp. 69-84, 1997. DOI: 10.1016/S0378-7753(97)02498-1

[17] Shepherd, C.M., Design of primary and secondary cells - Part 2. An equation describing battery discharge, Journal of Electrochemical Society, 112, pp. 657-664, 1965. DOI: 10.1149/1.2423659

[18] The MathWorks, Inc., Implement generic battery model: help, Matlab, 2013.

[19] Valsera, E., Sumper, A., Villafafila, R. and Martínez, D., Probabilistic Method to assess the impact of charging of electric vehicle on distribution grids, Energies, 2012, pp. 1503-1531. DOI: 10.3390/en5051503

[20] Navigant research, Electric vehicle batteries Lithium Ion batteries for hybrid, plug-in hybrid, and battery electric light duty vehicles: Market Analysis and Forecasts, Navigant, 2013.

[21] Deilami, S., Masoum, A., Moses, P. and Masoum, M., Real-time coordination of plug-in electric vehicle charging in smart grids to minimize power losses and improve voltage profile, IEEE Transaction on Smart Grid, 2(3), pp. 456-467, 2011. DOI: 10.1109/TSG.2011.2159816

[22] Mendoza-Grosso, C.C., Quintero-Montenegro, A.M., Santamaria, F. y Alarcon, J.A., Estimation of electric energy required by electric vehicles based on travelled distances in a residential zone, Tecciencia, 11(21), 2016. DOI: 10.18180/tecciencia.2016.21.4

[23] Mendoza-Grosso, C.C., Quintero-Montenegro, A.M., Santamaria, F. and Alarcon, J.A., Methodology to manage electric vehicles charging in real-time, IEEE Latin America Transactions, 14(2), pp. 782-191, 2016. DOI: 10.1109/TLA.2016.7437223

[24] Mendoza-Grosso, C.C., Quintero, A.M., Santamaria, F. and Alarcon, A., Coordinated recharge of electric vehicles in real time, DYNA, 83(197), pp. 223-232, 2016.

[25] Mendoza-Grosso, C.C., Quintero-Montenegro A.M. y Alarcon, A., Algoritmo de gestión para la recarga de vehículos eléctricos, Revista Tecnura, 19(CITIE), pp. 90-98, 2015.
[26] Mendoza-Grosso, C.C., Quintero-Montenegro, A.M., Santamaria, F. and Alarcon, J.A., Impact analysis of plug-in electric vehicles on an electric distribution network, Transmission & Distribution Conference and Exposition - Latin America (PES T&D-LA), 2014 IEEE PES, 2014, pp. 1-5.

A.M. Quintero-Montenegro, completed her Sp. degree in Projects Development and Management at Escuela Colombiana de Ingeniería Julio Garavito, Bogotá, Colombia, in 2017, the BSc. degree in Electrical Engineer at Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia, in 2013 and her degree in Telecommunications Technology at SENA – Servicio Nacional de Aprendizaje, Bogotá, in 2005. Since 2012, she has been a member of the Electromagnetic Compatibility and Interference Research Group at the Universidad Distrital Francisco José de Caldas (GCEM). She has experience in the area of telecommunications in oil companies, and control and protections in high voltage substations. She works in the electric sector as an electrical engineer in the extra high voltage and high voltage substations and transmission lines design.
ORCID: 0000-0002-9794-4870

C.C. Mendoza-Grosso, completed his BSc. degree in Electrical Engineering at Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia, in 2013. Since 2012, he has been member of the Electromagnetic Compatibility and Interference Research Group at the Universidad Distrital Francisco José de Caldas (GCEM). He works in the electric sector as an electrical engineer in the high voltage area.
ORCID: 0000-0002-8017-5374

F. Santamaria, completed his BSc., MSc. and PhD degrees in Electrical Engineering at Universidad Nacional de Colombia in 2002, 2007 and 2013, respectively. From 2004 to 2010 he was a full time research engineer with the Electromagnetic Compatibility Research Group at the Universidad Nacional de Colombia (EMC-UNC) where he carried out research on the lightning phenomena, electromagnetic compatibility, gas discharges and pulsed power systems. In 2010, he joined the staff of the Department of Electrical Engineering at Universidad Distrital Francisco Jose de Caldas, Colombia, where he currently works as an associate professor and member of the Electromagnetic Compatibility and Interference Research Group (GCEM). His research interests include electromagnetic interference, electric vehicles, distributed generation and energy management.
ORCID: 0000-0002-0391-4508

J.A. Alarcón-Villamil, completed his BSc. and MSc. degrees in Electrical Engineering at the Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, in 2002 and2013, respectively. From 2004 to 2008, he was a research engineer with the Electromagnetic Compatibility Research Group, at Universidad Nacional de Colombia (EMC-UNC), where he investigated the corona effect, electromagnetic compatibility, dielectric materials, and surge protection devices. In 2010, he joined the Department of Electrical Engineering, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, where he is currently an assistant professor and member of the Electromagnetic Compatibility and Interference Research Group (GCEM). His research interests include high voltage engineering, electric vehicles and smart grids, renewable energies, and electromagnetic compatibility.
ORCID: 0000-0002-8718-2542

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Eléctrica e Ingeniería de Control

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Eléctrica

Mayor información:

E-mail: ingelcontro_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 52 64

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Development of a fortified drink from the mixture of small colombian native fruits

Angélica María Serpa-Guerra [a], Jorge Andrés Velásquez-Cock [b], Jaime Alejandro Barajas-Gamboa [a], Lina María Vélez-Acosta [a], Beatriz Gómez-Hoyos [b] & Robin Zuluaga-Gallego [a]

[a] *Facultad de Ingeniería Agroindustrial, Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia. angelicamaria.serpa@upb.edu.co, jaimealejandro.barajas@upb.edu.co, lina.velez@upb.edu.co, robin.zuluaga@upb.edu.co*
[b] *Facultad de Ingeniería Química, Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia. sorsa55@gmail.com, beatriz.gomez@upb.edu.co*

Received: September 7th, de 2017. Received in revised form: November 17th, 2017. Accepted: December 20th, 2017

Abstract
Strawberry (*Fragaria ananassa*), blackberry (*Rubus glaucus*), Peruvian cherry (*Physalis peruviana* L.) and purple passion fruit (*Passiflora edulis Sims*) are important fruit crops in Colombia, due to their organoleptic properties and nutritional qualities, making them attractive for international markets. This study was undertaken to characterize the physicochemical properties of these four fruits and to present an alternative for their use. To achieve this goal, the moisture, pH, soluble solids, acidity, color, iron and vitamin C concentration were determined, and a fortified mixed fruit drink was developed. All of the fruits can be classified as high acidity products due to the acidity results. Purple passion fruit and Peruvian cherry presented the highest content of soluble solids, while blackberry, purple passion fruit and Peruvian cherry did not exhibit statistically significant differences in their iron contents, and strawberry exhibited the highest contribution of vitamin C.

Keywords: fruits; characterization; mixed fruit drink; vitamin C; iron

Desarrollo de un refresco fortificado con hierro a partir de la mezcla de frutas pequeñas nativas colombianas

Resumen
La fresa (*Fragaria ananassa*), la mora (*Rubus glaucus*), la uchuva (*Physalis peruviana L.)* y la gulupa (*Passiflora edulis Sims)* son cultivos frutales importantes en Colombia por sus propiedades organolépticas y nutritivas. Este estudio se realizó para caracterizar las propiedades fisicoquímicas de estos cuatro frutos y presentar una alternativa para su uso. Para lograr este objetivo, se caracterizaron las cuatro frutas determinando humedad, pH, sólidos solubles, acidez, color, contenido de hierro y la concentración de vitamina C. Posteriormente se desarrolló una bebida fortificada de frutas. De acuerdo a los resultados de acidez, todos los frutos se pueden clasificar como productos de alta acidez. La gulupa y la uchuva, presentaron el mayor contenido de sólidos solubles, mientras que la mora, la gulupa y la uchuva, no presentaron diferencias estadísticamente significativas en su contenido de hierro. La fresa presentó la mayor contribución de la vitamina C.

Palabras clave: frutas; caracterización; refresco de frutas; vitamina C; hierro

1. Introduction

Fruits are an important part of human nutrition, and they are widely recommended for their health-promoting properties. They provide vitamins and minerals to the daily diet, coupled with their role as the main source of antioxidants, phytoestrogens, and anti-inflammatory agents [1].

Due to the nutritional properties of fruits, in recent years, the consumption of minimally processed juices, beverages and smoothies has become an alternative for healthy eating habits [2-3] This can be associated with the development of fortified foods, in representing an alternative to the actual market, this new option is characterized by food products that contribute to an increase in the content of micronutrients

How to cite: Serpa-Guerra, A.M., Velásquez-Cock, J.A., Barajas-Gamboa, J.A., Vélez-Acosta, L.M., Gómez-H., B. and Zuluaga-Gallego, R., Development of a fortified drink from the mixture of small colombian native fruits. DYNA, 85(204), pp. 185-193, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.
Revista DYNA, 85(204), pp. 185-193, March, 2018, ISSN 0012-7353
DOI: http://dx.doi.org/10.15446/dyna.v85n204.67548

(vitamins and minerals) and antioxidant capacity in the body [4]. This trend can be seen in the increased market of functional products in the United States, which went from US 37 billion in 2011 to US 43.9 billion in 2012, and has an annual growth projection of 8.7 % worldwide [5].

Micronutrients are essential compounds for the proper function of the body; for instance, iron is part of different enzymes and molecular complexes involved in metabolic processes [6], the primary functions of which include the transportation of oxygen by hemoglobin [7], degradation and storage of neurotransmitters [8], and the erythropoietic function and immune response of cells [9]. Conversely, antioxidants are exogenous compounds that contribute to the stabilization of reactive species or free radicals in the body, playing an important role on the reduction of the risk of degenerative diseases such as cardiovascular and neurological illnesses [10].

Given the growing trend for healthy foods and the potential in fruits for their development, a variety of native fruits can be used in order to obtain new products, including fortified/functional beverages, the sales of which are projected to increase based on their importance in the health and wellness industry [11]. In Colombia, small native fruit crops, such as strawberry (Fragaria ananassa), blackberry (Rubus glaucus), Peruvian cherry (Physalis peruviana L.) and purple passion fruit (Passiflora edulis Sims), stand out, especially Peruvian cherry and purple passion fruit, because of their importance for the domestic market associated with their exportation, which reaches values of USD 12.0 million and USD 29.2 million respectively [12]. This behavior derives from the new preferences of the international markets because of their organoleptic properties, their nutritional qualities, and their potential to be transformed by various processes to obtain different food products, including fruit beverages and jams [13], purees [14-15], ice cream [16] and dried fruits [17-19].

According to the importance of these fruits for the Colombian market and the growing interest for healthier products, this research seeks the development of an iron-fortified mixed drink with the inclusion of strawberry, blackberry, Peruvian cherry and purple passion fruit. To this end, the moisture, pH, acidity, color, content of soluble solids, iron and vitamin C contents were determined in the four fruits, and an orthogonal experimental design was presented for a mixed beverage development.

2. Materials and methods

2.1. Material

The four fruits studied, strawberry, blackberry, Peruvian cherry and purple passion fruit, all from the eastern region of the department of Antioquia, were purchased in a wholesale market of Medellin (Colombia). The selection of the fruit was performed by a visual method using color tables according to the last two stages of maturity [20-23]. The iron compound used for beverage fortification was ferrous bisglycinate, due its bioavailability [24-25].

The ferrous bisglycinate for food fortification, reference standard Vitamin C (Supelco) and analytical grade ascorbic acid (Merck), sodium hydroxide (Merck) and metaphosphoric acid (Panreac) were purchased from a local provider.

2.2. Characterization of the four fruits

The selected fruits were characterized in triplicate, determining moisture content, pH, soluble solids, titratable acidity, color, iron and vitamin C content.

2.2.1. Chemical characterization

Moisture, pH and soluble solids

Moisture was verified using the gravimetric official method AOAC 934.01 / 05 [26] The pH was determined using a potentiometric detector (Schott Instruments Lab. 850), according to the standard methods defined for this type of matrix [26] and soluble solids were obtained by refractometric readings using a digital refractometer (Atago pal-1), previously calibrated with water.

Titratable acidity

The titratable acidity of the four fruits was established in terms of citric acid content by a potentiometric titration with a previously standardized 0.1 N NaOH solution, according to the official method, AOAC 942.15 [27].

2.2.2. Nutritional characterization

Iron content

The iron content of the four fruits was measured by atomic absorption spectroscopy with a previous acid digestion of the samples. The absorbance reading was performed in triplicate for each fruit using an atomic absorption spectrophotometer (Thermo Scientific Series 3000) at 248 nm [28-29].

Vitamin C content

The content of vitamin C of the four fruits, was determined by a chromatographic method. The ascorbic acid was extracted from the matrix according to a modification of the method developed by Kubola et al. [30]. Briefly, 10 g of the fruit was mixed with 50 mL of a metaphosphoric acid solution, followed by stirring for 5 min and a centrifugation of the resulting suspension at 9000 rpm for 20 min. The supernatant was filtered by a 0.25 µm disc filter.

The filtrate obtained in the previous step was injected into an Ultra High Pressure Chromatographer (Ultimate 3000 UHPLC, Thermo Fisher scientific) using a C-18 HypersilGold column (Length 250 mm Internal Diameter 4,6 mm; 5 µm particle size) (Thermo Fisher Scientific). The samples were eluted with an acidic phosphate buffer at 0.1 mL min-1. The eluting components were measured with an UV-Vis detector (Ultimate 3000 VWD, Thermo Fisher Scientific) at 245 nm. The calibration curve was made with a standard solution of ascorbic acid diluted at different concentrations in metaphosphoric acid.

2.2.3. Optical characterization

Color

Color was determined by CIELAB coordinates [31], using a sphere X-RITE SP60 spectrophotometer, measuring the parameters (L *), (a*) and (b*) for each fruit at three

points of the equator line, and expressed as the arithmetic average. Finally, the angular pitch (hab) was calculated as a qualitative attribute of color; and chroma (Cab*) as a quantitative attribute of colorfulness, following Eq. 1 and Eq. 2 [23].

$$C^*_{ab} = [(a^*)^2 + (b^*)^2]^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

$$h_{ab} = \arctan\left(\frac{b^*}{a^*}\right) \quad (2)$$

2.3. Statistical analysis

The statistical analysis was performed by a one-way ANOVA using a Fisher's exact test in statistical software (Statgraphics Centurion XVII, Statpoint Technology).

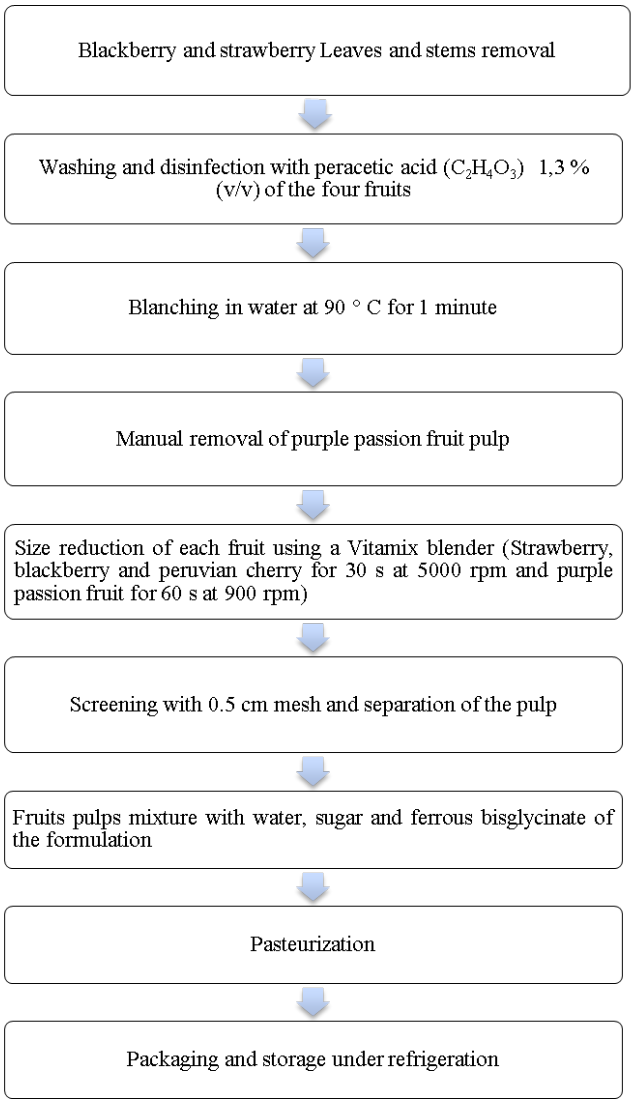


Figure 1. Activities for the fortified mixed drink development
Source: The authors.

Table 1.
Levels and factors of the experimental design for the drink development

Factor	Levels	
	Middle	Upper
% Purple passion fruit (A)	6.75	10.00
% Peruvian cherry (B)	6.75	10.00
% Blackberry (C)	6.75	10.00
% Strawberry (D)	6.75	10.00
% Iron daily intake (E)	20.00	30.00

Source: The authors.

2.4. Transformation of the four fruits

After their characterization, the four fruits were processed to obtain an iron-fortified mixed drink, following the process diagram depicted in Fig 1.

To define the levels of the factors A, B, C and D, preliminary tests were conducted, considering the fruit characterization and the Colombian regulation for this type of product, in order to have a minimum of 8 wt% of fruit in the final product [32]. The E levels were established according to the information reported for the recommended daily intake value for iron of 14 mg [33].

2.5. Sensory analysis

The response variable of the experimental design was the mixed drink acceptance, determined by a quantitative descriptive sensory analysis, carried out in triplicate. To perform this analysis a panel of six experts was developed. The panelists selected 11 descriptors: color, characteristic odor/aroma, objectionable odor, acidic flavor, sweet flavor, blackberry flavor, strawberry flavor, Peruvian cherry flavor, purple passion fruit flavor, astringent sensation and spicy sensation. The selected descriptors according to the Colombian legislation [34], were evaluated on a scale of 0 (absent) to 7 (severe), and the acceptance of the mixed drink was established by Karlsruhe test [35], based on the overall quality determination.

The 8 obtained formulations were characterized to determine soluble solids, titratable acidity and pH in order to compare the values with those established in Colombian legislation.

2.6. Characterization of the developed prototype

The final prototype was characterized by the determination of the vitamin C and iron contents, with the same methods shown above, in order to establish the contribution of the fruits and the iron compounds to the nutritional characteristics of the mixed drink.

3. Results

3.1. Chemical characterization

While fruit and vegetable products are characterized by large differences in composition, generally the fruit stand out

Table 2.
Physicochemical analysis results of strawberry, blackberry, peruvian cherry and purple passion fruit

Parameter		Strawberry	Blackberry	Purple Passion Fruit	Peruvian cherry
Moisture	(%)	91.640 ± 0.903 **a**	87.758 ± 0.806 **a**	73.694 ± 1.552 **a**	83.04 ± 1.0919 **a**
Titrable Acidity	(g citric acid/100ml)	0.723 ± 0.069 **d**	2.343 ± 0.055 **b**	3.528 ± 0.178 **a**	1.361 ± 0.011 **c**
Soluble solids	(ºBrix)	7.554 ± 0.722 **c**	8.118 ± 1.319 **b**	15.013 ± 0.873 **a**	14.575 ± 0.524 **a**
pH		3.403 ± 0.097 **a**	2.823 ± 0.063 **b**	2.869 ± 0.091 **b**	3.364 ± 0.315 **a**
Vitamin C	(mg/100g pulp)	27.996 ± 7.122 **a**	10.385 ± 1.712 **c**	22.919 ± 3.629 **a, b**	19.593 ± 3.453 **b**
Iron	(mg/100 g pulp)	0.2605 ± 0.0825 **b**	0.5088 ± 0.1555 **a**	0.6467 ±0.0752 **a**	0.5412 ± 0.0290 **a**

For each row there is no statistically significant difference between the values that share the same letter
(Fisher test with 95% confidence).
Source: The authors.

Table 3.
Color analysis results of strawberry, blackberry, peruvian cherry and purple passion fruit

Parameter		Strawberry	Blackberry	Purple Passion Fruit	Peruvian cherry
Color	L	32.344 ± 1.5411 **b**	18.421 ± 0.982 **c**	31.717 ± 1.792 **b**	62.411 ± 1.692 **a**
	a	27.113 ± 1.9597 **a**	5.558 ± 1.145 **c**	6.246 ± 1.530 **c**	22.843 ± 1.463 **b**
	b	15.719 ± 2.1275 **b**	1.003 ± 0.303 **d**	3.338 ± 0.825 **c**	50.824 ± 0.790 **a**
	h_{ab}	30.037 ± 3.239 **b**	10.079 ± 1.101 **c**	28.553 ± 6.320 **b**	65.925 ± 0.954 **a**
	C^{ab}	31.386 ± 2.276 **b**	5.649 ± 1.179 **c**	7.121 ± 1.548 **c**	55.731 ± 1.232 **a**

For each row there is no statistically significant difference between the values that share the same letter
(Fisher test with 95% confidence).
Source: The authors.

by their high water content. This is verified in Table 2 where the results of the fruit characterization are shown. The obtained values show that the moisture content of the four fruits does not exhibit a statistically significant difference, with values between 82 % and 92 %. In contrast, the titratable acid content shows that the purple passion fruit has the highest titratable acidity, followed by the blackberry; consequently, these samples presented the lowest pH values.

3.2. Nutritional characterization

The strawberry showed the lowest iron content; the other fruits did not exhibit a statistically significant difference (Table 2). For the vitamin C content, the strawberry and purple passion fruit presented the highest values, without a statistically significant difference, followed by Peruvian cherry and blackberry. According to these results, the purple passion fruit is the smallest fruit with the highest nutritional intake of vitamin C and iron.

3.3. Optical characterization

The color analysis indicated positive values of a and b coordinates (Table 3), which established that the four fruits presented shades between red and yellow.

Although statistically significant differences were present in the L coordinate, all the values are related to clear luminosities (white), while those obtained for the chroma or Cab, allows the association of the strawberry and Peruvian cherry with higher color intensities (higher values of Cab), than those obtained for purple passion fruit and blackberry, which presented statistically similar results. However, all the fruits are related to medium-high intensities of color, characteristics of yellow, orange and red colors [36]. Moreover, the value obtained for the angular pitch or hab, locates the four fruits within the range set for the orange color [36].

3.4. Transformation of the four fruits

The formulation for the 8 prototypes evaluated for the transformation of the four fruits are reported in Table 4. In this case, the sugar content added in the formulation was initially determined as a relation between the fruit content (strawberry, blackberry, purple passion fruit and Peruvian cherry), therefore it is not included in the design.

The prototypes were characterized and the results are presented with their respective statistical analyses and shown in Table 5.

The 8 formulations meet the values for acidity levels (minimum 0.2), soluble solids (maximum 13) and pH (maximum 4), as described in Colombian legislation [32].

Table 4.
Formulations of the fortified drink prototypes

Prototype	Purple passion fruit (%)	Peruvian cherry (%)	Blackberry (%)	Strawberry (%)	Sugar (%)	% Ferrous bisglicinate	Water (%)
517	6.70	6.70	6.70	6.70	4.00	0.02	68.90
264	6.70	6.70	6.70	10.00	4.90	0.03	64.80
844	6.70	10.00	10.00	6.50	5.90	0.02	60.60
527	6.70	10.00	10.00	10.00	6.90	0.03	56.30
190	10.00	6.70	10.00	6.50	5.90	0.03	60.60
273	10.00	6.70	10.00	10.00	6.90	0.02	56.30
944	10.00	10.00	6.70	6.50	5.90	0.03	60.60
593	10.00	10.00	6.70	10.00	6.90	0.02	56.30

Source: The authors.

Table 5.
Results of the chemical characterization of the fortified drink prototypes

Prototype	Titrable acidity (g citric acid/100ml)	Soluble solids	pH
517	0.5 ± 0.006 ***a***	7.0 ± 0.052 ***e***	3.2 ± 0.006 ***a***
264	0.6 ± 0.079 ***a, b***	8.3 ± 0.122 ***d***	3.2 ± 0.006 ***b***
844	0.6 ± 0.006 ***a, b***	10.0 ± 0.052 ***c***	3.2 ± 0.006 ***c***
527	0.6 ± 0.012 ***a***	11.6 ± 0.842 ***a***	3.2 ± 0.001 ***a, c***
190	0.6 ± 0.027 ***c***	10.0 ± 0.075 ***c***	3.1 ± 0.006 ***d***
273	0.6 ± 0.009 ***b***	10.9 ± 0.472 ***b***	3.1 ± 0.006 ***d***
944	0.6 ± 0.033 ***a, b***	9.8 ± 0.207 ***c***	3.1 ± 0.006 ***e***
593	0.6 ± 0.017 ***a***	11.0 ± 0.082 ***b***	3.3 ± 0.006 ***a***

For each column there is no statistically significant difference between the values that share the same letter (Fisher test with 95% confidence).
Source: The authors.

The results show some homogeneous groups, such as those observed during the determination of soluble solids, which clearly reflects the dependence of this variable on the fruit content and the sugar added during the development; the higher values of soluble solids were achieved by the formulations with greater sugar and fruit content: 36.7 wt% (527, 273 and 593), followed by the prototypes with 33.5 wt% (944, 190, 844) and 30.2 wt% fruit (264). Finally, the 517 prototype showed the lowest content of soluble solids, which is concordant with its fruit content (27 wt%). Additionally, this result can be also related to the sugar added during the formulation, being this prototype the one with the less amount of this additive. The previous behavior stablish the direct relation between fruit and sugar content of the product and its soluble solids. However, the fruit percentage evaluated had an impact on the measured variables. Despite this, it is possible to use four fruits for the development of iron-fortified mixed drinks. This is confirmed by the results obtained during the sensory characterization (Table 6).

Table 6.
Results of the sensory characterization of the fortified drink prototypes

Prototype	High overall quality %	Acceptance %
517	81.0	100
264	86.7	100
844	100.0	100
527	100.0	100
190	100.0	100
273	100.0	100
944	76.7	100
593	86.7	100

Source: The authors.

The prototypes showed variations in the 12 descriptors selected during their sensory analysis that included the evaluation of the color, the characteristic aroma, the sweet taste, the astringent sensation and the spicy sensation. This behavior can be observed through the variations evidenced in the high overall quality of each sample. However, all prototypes achieved 100 % acceptance; this is associated with the overall quality, which was higher than 3.5 (the low value of the average quality category). These results did not allow the realization of the Taguchi method, "more is better", of statistical analysis [37], considering that the response variable "sensory acceptance" presented the same numerical score (100 %) for all the prototypes, making its optimization impossible. In this way, the selection of the final prototype (527) was done by taking into account the one that allowed a greater incorporation of fruits and iron.

Table 7.
Results of the nutritional characterization of the developed fortified drink

Parameter	Value
Iron (mg/250 ml)	4.1875 ± 0.042
Vitamin C por HPLC (mg/250 ml)	23.071 ± 2.707

Source: The authors.

3.5. Characterization of the developed prototype

For the iron and vitamin C content in the 527 prototype, the results that are shown in Table 7 confirm that the developed iron-fortified mixed drink contributes 30 % of the recommended daily value of iron established in Colombian regulations [33].

4. Discussion

4.1. Chemical characterization

The results obtained for the moisture content of the fruits are similar to those reported in the literature of 90.00 % and 90.95 % for strawberry [38-39], between 84.57 % and 87.33 % for blackberry [40-41], and between 84.09 % and 86.65 % for Peruvian cherry [31]. In the case of purple passion fruit, the reported values for the moisture content, between 82.1 % and 88.9 % [23,42] are higher than those obtained experimentally; this behavior can be associated with the high susceptibility of dehydration of the pasifloras, related to the transport and post-harvest processes, which generates wrinkling of the shell and a mass loss [42].

The variation observed for the titratable acidity and pH values of the fruits is associated with the fruit selection process, since in the latter stages of development the ripening process results in a reduction of the organic acids [43] and an increase in soluble solids due to the transformation of starch reserves in sugars [44]. Nevertheless, the four fruits can be classified as high acid foods, since they present pH values lower than 3.7 [45], unlike low-acid foods such as banana, which have pH values between 5.3 and 5.7 [46], or mango, which is classified as a medium-acidity food with a pH value of 5.3 [47].

In general, the results obtained during the chemical characterization of the four small Colombian fruits are in the ranges reported in the literature and show the potential of these fruits for the development of food products as an alternative for their use. However, it is important to note that the variations found are explained by the influence of agronomic conditions and postharvest management. Climatic conditions such as temperature and light intensity have a strong effect on the nutritional quality of fruits [48]. Additionally, soil type, rootstock, mulching, irrigation, fertilization and other cultural practices influence the water and nutrient supply of the plant, which can affect the composition of the fruit [49].

4.2. Nutritional characterization

Fruits are recognized worldwide as an excellent source of nutrients [50] which include vitamins, minerals and other biologically active compounds such as anthocyanins and carotenoids associated with decreased a risk of disease [51]. This study emphasized two nutrients: iron and vitamin C. The first was chosen for its importance for the proper behavior of the human body, and the second because of its importance as an exogenous antioxidant [52] in the human diet and as a marker of quality in the food industry.

Variations of iron content between the fruits are associated with changes during their primary production; this mineral acts as a micronutrient and is important for the development of plants, being involved in processes such as photosynthesis and electron transport [53], but due to differences in farming practices [54], its concentration may vary. This is corroborated by comparing experimental results with those presented in the USDA database, which reported values for the strawberry (0.41 mg / 100 g), and purple passion fruit (1.6 mg / 100 g) (USDA, 2014), that are greater than those established in this investigation, similar to the behavior presented with Peruvian cherry (1.2 mg / 100 g) [55].

As for the results of the quantification of vitamin C in the four small Colombian fruits, some variations are observed from the values reported by the USDA. Strawberry (27.996 mg / 100 g) and blackberry (10.385 mg / 100 g) showed lower values than those reported, namely, 58 mg / 100 g and 21 mg / 100 g, respectively [56], while the vitamin C contents for Peruvian cherry (19.593 mg / 100 g) and purple passion fruit (22.419 mg / 100 g) are close to the reported values of 20 mg / 100 g for Peruvian cherry [57] and between 18 and 30.00 mg / 100 g for purple passion fruit [58-59]. The previous behavior is mainly because the vitamin C content in fruits and vegetables is highly influenced by different factors, including preharvest climatic conditions, maturity, harvesting methods and postharvest handling procedures [48].

According to the results obtained for the four fruits it can be established that none of them represents a high source of vitamin C, especially when given the values reported for fruits with a high intake of this vitamin, such as guava with 228 mg / 100 g [56] and acerola with 1341 mg / 100 g [60]. These measurements highlight the importance of the fortification of any products developed using these fruits, in order to improve the nutritional value of the final products. After assessing the nutritional properties of the small Colombian fruits it is important to assess their optical properties as they could affect the resulting mixed drink and could aid in the understanding of the previous results.

4.3. Optical characterization

Positive values of a and b coordinates obtained for the four fruits are characteristic of fruits with a high content of carotenoids, substances responsible for red and yellow colors [61], and the four small native Colombian fruits have representative values of this type of compound [13,23,40,62].

Finally, the color coordinates established experimentally are similar to those reported for purple passion fruit [23], strawberry and blackberry [15], while the values for the Peruvian cherry differ from those reported in the literature [31]. This is likely due to variation in the maturity stage, considering that during ripening, the degradation of chlorophyll and the synthesis of other compounds responsible for color occurs [63], including the development of anthocyanins, compounds associated with red, blue and purple colors [41].

The results obtained during the determination of color are a clear example of the heterogeneity of fruits [23], where the pigment distribution depends on the maturity stage and is indicated in the significant variation of the obtained values; for this reason the food industry relies on pigments to standardize the color of products. However, the current development seeks to obtain a product without added colorants and stabilizers, given the growing interest of consumers for more natural products.

4.4. Characterization of the developed prototype

The developed product presents higher contents of vitamin C than a portion of blackberry, purple passion fruit or Peruvian cherry contributing with the 38.3 % of the recommended daily value of vitamin C [64]. In addition, this contribution, allows the classification of the product as a “High Source” of Vitamin C, according to the FDA nutrition content claims [65], making a mixed drink from strawberry, blackberry, Peruvian cherry and purple passion fruit a good source for incorporating vitamin C in the human diet. However, it is important to note that during the storage process, there can be degradation of this vitamin in the product, so the above expression should be adjusted according to the final value in the product.

The sugar content is another important characteristic of the developed product, since this corresponds to a prototype with higher content of added sugar. Due to the effect of sugar consumption on human health and the growing interest of consumers for healthier foods [66], this aspect can be reviewed in further investigations, in order to evaluate the effect of other types of sweeteners in this product.

The results obtained during the transformation of the four small Colombian fruits show that they can be used for food development, including in mixed fruit drinks that meet the parameters set for these products and that is sensorily attractive for the consumers, especially given the current market requirements for more healthy nutritional products that contribute to the maintenance of the human organism.

In addition, this fortified mixed drink shows the potential of these four fruits, which are highly important to the Colombian market, for developing new processed foods, allowing not only the generation of new alternatives for their use, but it also represents an attractive opportunity for producers to increase their incomes and improve their profits.

5. Conclusions

The results demonstrated that the four fruits stand out for their high water content and can be classified as high acidity products. Purple passion fruit and Peruvian cherry were highlighted for presenting the highest content of soluble

solids. Strawberry showed the lowest iron content but the highest value of vitamin C. According to the color analysis, the four fruits are associated with yellow, orange and red colors. Consequently, they can be used toward the development of an attractive iron-fortified mixed drink. Finally, a further study on the nutritional components may be important to complement the results on the characterization of strawberry, blackberry and purple passion fruit grown in the eastern region of Antioquia, Colombia.

Acknowledgments

The authors would like to thank the Antioquia Government, its "Sistema Genral de Regalias", the Agroindustrial Research Group (GRAIN) of the Universidad Pontificia Bolivariana and the Corporación Universitaria Lasallista, which provided essential support for the realization of this research.

References

[1] Rekhy, R. and McConchie, R., Promoting consumption of fruit and vegetables for better health. Have campaigns delivered on the goals?, Appetite, 79, pp. 113-123, 2014. DOI: 10.1016/j.appet.2014.04.012

[2] George, T., Waroonphan, S., Niwat, C., Gordon, M. and Lovegrove, J., Effects of acute consumption of a fruit and vegetable purée-based drink on vasodilation and oxidative status, British Journal of Nutrition, 109, pp. 1442-1452, 2013. DOI: 10.1017/S0007114512003315

[3] Tadapaneni, R.K., Edirisinghe, I. and Burton-Freeman, B., High-pressure processing, strawberry beverages, and composition of bioactives, in Processing and Impact on Active Components in food, Preedy, V. Ed. Academic Press, pp. 619-627, 2015.

[4] Park, Y.S., Ham, K.S., Park, Y.K., Leontowicz, H., Leontowicz, M., Namieśnik, J., Katrich, S. and Gorinstein, S., The effects of treatment on quality parameters of smoothie-type 'Hayward' kiwi fruit beverages, Food Control, 70, pp. 221-228, 2016. DOI: 10.1016/j.foodcont.2016.05.046

[5] Bogue, J., Collings, O. and Troy, A.J., Market analysis and concept development of functional foods, in Developing New Functional Food and Nutraceutical Products, D. Bagchi, Ed. Houston: Academic Press, 2017, pp. 29-45.

[6] Conrad, M. and Umbreit, J., Iron absorption and transport-an update, American Journal of Hematology, 64, pp. 287-298, 2000. DOI: 10.1002/1096-8652(200008)64:43.0.CO;2-L

[7] Toxqui, L., De Piero, A., Courtois, V., Bastida, S. y Vaquero, M.P., Deficiencia y sobrecarga de hierro; implicaciones en el estado oxidativo y la salud cardiovascular, Nutrición Hospitalaria, 25, pp. 350-365, 2010.

[8] Suárez, H., Ciminio, F. y Bonilla, E., Hierro en el sistema nervioso central: metabolismo y consideraciones fisio-patológicas, Investigación Clínica, 26, pp. 247-322, 1985.

[9] Muñoz, M., Leal-Noval, S., García-Erce, J. y Naveira, E., Prevalencia y tratamiento de la anemia en el paciente crítico, Medicina Intensiva, 31, pp. 388-398, 2007.

[10] Karadeniz, F., Burdurlu, H.S., Koca, N. and Soyer, Y., Antioxidant activity of selected fruits and vegetables grown in Turkey, Turkish Journal of Agriculture and Foresty, 29, pp. 297-303, 2005.

[11] Euromonitor International, "Euromonitor," Fortified/Funtional Beverages in the US, 2016. [Online]. [Accessed: 20-Jun-2010]. Available at: www.euromonitor.com/fortified-functional-beverages-in-the-us/report.

[12] Legiscomex, Exportación de frutas exóticas colombianas, 2013. [Online]. Available at: http://www.legiscomex.com/BancoMedios/Documentos PDF/estudio-frutas-exoticas-colombia-completo.pdf.

[13] Ramadan, M., Bioactive phytochemicals, nutritional value, and functional properties of cape gooseberry (Physalis peruviana): An overview, Food Research International, 44, pp. 1830-1836, 2011. DOI: 10.1016/j.foodres.2010.12.042

[14] Jacopo, D., Francesca, B., Lucia, D.V., Franco, C., Clara, B. Annalisa, B., Francesca, G., Maurizio, B. and Bruno, M., Physico-chemical characteristics of thermally processed purée from different strawberry genotypes, Journal of Food Composition and Analysis, 43, pp. 106-118, 2015. DOI: 10.1016/j.jfca.2015.05.006

[15] Patras, A., Brunton, N.P., Da Pieve, S. and Butler, F., Impact of high pressure processing on total antioxidant activity, phenolic, ascorbic acid, anthocyanin content and colour of strawberry and blackberry purées, Innovative Food Science and Emerging Technologies, 10, pp. 308-313, 2009.

[16] Erkaya, T., Dağdemir, E. and Sengül, M., Influence of cape gooseberry (Physalis peruviana L.) addition on the chemical and sensory characteristics and mineral concentrations of ice cream, Food Research International, 45, pp. 331-335, 2012. DOI: 10.1016/j.foodres.2011.09.013

[17] Adak, N., Heybeli, N. and Ertekin, C., Infrared drying of strawberry, Food Chemist, 219, pp. 109-116, 2017. DOI: 10.1016/j.foodchem.2016.09.103

[18] Bernal, C.A., Aragón, M. and Baena, Y., Dry powder formulation from fruits of Physalis peruviana L. standardized extract with hypoglycemic activity, Powder Technology, 301, pp. 839-847, 2016. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.07.008

[19] Maritza, A.M. Sabah, M., Anaberta, C.M., Montejano-Gaitán, J.G. and Allaf, K., Comparative study of various drying processes at physical and chemical properties of strawberries (Fragariavarcamarosa), Procedia Engineering, 42, pp. 267-282, 2012. DOI: 10.1016/j.proeng.2012.07.418

[20] ICONTEC, Frutas frescas. Mora de Castilla. Especificaciones. Colombia: Instituto Colombiano de Normas Técnicas y Certificación, 1997.

[21] CONTEC, Frutas frescas. Fresa variedad Chandler. Especificaciones. Colombia: Instituto Colombiano de Normas Técnicas y Certificación, 1997.

[22] ICONTEC, Uchuva (Physalis peruviana), para el consumo fresco o destinado al procesamiento industrial. Colombia. Colombia: Instituto Colombiano de Normas Técnicas y Certificación, 1999.

[23] Jiménez, A.M., Sierra, C.A., Rodríguez-Pulido, F.J., González-Miret, M.L., Heredia, F.J. and Osorio, C., Physicochemical characterisation of gulupa (Passiflora edulis Sims. fo edulis) fruit from Colombia during the ripening, Food Research International, 44, pp. 1912-1918, 2011. DOI: 10.1016/j.foodres.2010.11.007

[24] Bovell-Benjamin, A., Viteri, F. and Allen, L., Iron absortion from ferrous bisglycinate and ferric trisglycinate in whole maize is regulated by iron status, American Journal of Clinical Nutrition, 71, pp. 1563-1569, 2000.

[25] Rojas, M.L., Sánchez, J., Villada, O., Montoya, L., Díaz, A., Vargas, C., Chica, J. y Herrera, A.M., Eficacia del hierro aminoquelado en comparación con el sulfato ferroso como fortificante de un complemento alimentario en preescolares con deficiencia de hierro (Medellín, 2011), Revista Biomédica, 33, pp. 350-360, 2013.

[26] AOAC- Association of Official Analytical Chemist, Official Methods of Analysis of AOAC International, 16th ed. Arlington: AOAC International, 1995.

[27] AOAC- Association of Official Analytical Chemist, Official Methods of Analysis of AOAC International, 18th ed. Arlington: AOAC International, 2005.

[28] United States Eviromental Protection Agency, Method 3050B: Acid digestion of sediments, sludges, and soils, December. pp. 1-12, 1996.

[29] United States Eviromental Protection Agency, Method 7950: Zinc (Atomic absorption, direct aspiration), September. pp. 1-3, 1986.

[30] Kubola, J., Siriamornpun, S. and Meeso, N., Phytochemicals, vitamin C and sugar content of Thai wild fruits, Food Chemestry, 126, pp. 972-981, 2011. DOI: 10.1016/j.foodchem.2010.11.104

[31] Mendoza, J., Rodríguez de S., A. and Millán, P., Caracterización físico química de la Uchuva (Physalis peruviana) en la región de Silvia Cauca, Biotecnología en el Sector Agropecuario y Agroindustrial, 10, pp. 188-196, 2012.

[32] Ministerio de Salud y Protección Social, Resolución 3929 de 2013, 2013.

[33] Ministerio de la Protección Social, Resolución 333 de 2011. Bogotá, 2011.
[34] ICONTEC, NTC 3932 Análisis sensorial. Identificación y selección de descriptores para establecer un perfil sensorial por una aproximación multidimensional. Colombia, 1996.
[35] Zamora-Utset, E., Evaluación objetiva de la calidad sensorial de alimentos procesados. Ciudad de la Habana: Editorial Universitaria, 2007.
[36] Gupte, V., Expressing colours numerically, in Colour Measurement: Principles, Advances and Industrial Applications, M.L. Gulrajani, Ed. Cambrige: Woodhead Publishing, 2010, 432 P.
[37] Villarroel, M., Castro, R. y Junod, J., Desarrollo de una formulación optimizada de mermelada de damasco de bajo contenido calórico utilizando la metodología Taguchi, Archivos Latinoamericanos de Nutrición, 53, pp. 8-19, 2003.
[38] Giampieri, F., Tulipani, S., Alvarez-Suarez, J.M., Quiles, J.L., Mezzetti, B. and Battino, M., The strawberry: Composition, nutritional quality and impact on human health, Nutrition, 28, pp. 9-19, 2012. DOI: 10.1016/j.nut.2011.08.009
[39] Pinheiro-Camargo, L.K., Viela-de Resende, J.T., Goncalves-Galvao, A., Baier, J.E., Ventura-Faria, M. and Kopanski-Camargo, C., Chemical characterizayion of strawberry fruits in the organic and conventional cropping systems in pots, Ciencias Agrárias, 30, pp. 993-998, 2009. DOI: 10.5433/1679-0359.2009v30n4Sup1p993
[40] Souza, V.R., Pereira, P.A., da Silva, T.L., de Oliveira-Lima, L.C., Pio, R. and Queiroz, F., Determination of the bioactive compounds, antioxidant activity and chemical composition of Brazilian blackberry, red raspberry, strawberry, blueberry and sweet cherry fruits, Food Chemestry, 156, pp. 362-368, 2014. DOI: 10.1016/j.foodchem.2014.01.125
[41] Tosun, I., Ustun, N.S. and Tekguler, B., Physical and chemical changes during ripening of blackberry fruits, Scientia Agricola, 65, pp. 87-90, 2008. DOI: 10.1590/S0103-90162008000100012
[42] Orjuela-Baquero, N.M., Campos-Alba, S., Sánchez-Nieves, J., Melgarejo, L.-M. and Hernández, M.-S., Manual de manejo poscosecha de la Gulupa (Passiflora edulis Sims), in Poscosecha de la gulupa (Passiflora edulis Sims), Melgarejo, M.L and Hernández, M.S. Eds. Universidad Nacional de Colombia, 2011, pp. 7-22.
[43] López-Camelo, A., Manual para la preparación y venta de frutas y hortalizas. Roma: Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación, 2003.
[44] Beattie, B. and Wade, N., Storage, ripening and handling of fruit, in Fruit Processing, Arthey, D. and Ashurst, P.R., Eds. Cambrige: Springer Science Business Media, 1996, pp. 1-244.
[45] Nunes-Damaceno, M., Caracterización y procesado de kiwi y fresa cultivados por diferentes sistemas, Tesis, Universidad de Santiago de Compostela, España, 2007.
[46] Millán L.J. and Ciro-Velásquez, H., Caracterización mecánica y físico-química del banano tipo exportación (CAVENDISH VALERY), Corporación Universitaria Lasallista, 2012. [Online]. [Accessed: 21-Oct-2015]. Available at: http://repository.lasallista.edu.co/dspace/bitstream/10567/136/1/10.163-192.pdf.
[47] Quintero, V., Giraldo, G., Lucas, J. and Vasco, J., Caracterización fisicoquímica del mango comun (Mangifera indica L.) durante su proceso de maduración, Biotecnología en el Sector Agropecuario y Agroindustrial, 11, pp. 10-18, 2013.
[48] Lee, S.K. and Kader, A.A., Preharvest and postharvest factors influencing vitamin C content of horticultural crops, Postharvest Biology and Technology, 20, pp. 207-220, 2000. DOI: 10.1016/S0925-5214(00)00133-2
[49] Remorini, D., Tavarini, S., Degl'Innocenti, E., Loreti, F., Massai, R. and Guidi, L., Effect of rootstocks and harvesting time on the nutritional quality of peel and flesh of peach fruits, Food Chemestry, 110, pp. 361-367, 2008. DOI: 10.1016/j.foodchem.2008.02.011
[50] Liu, R.H., Health benefits of fruit and vegetables are from additive and synergistic combinaions of phytochemicals, American Journal of Clinical Nutrition, 78, pp. 3-6, 2003.
[51] Ruel, G., Shi, Z., Zhen, S., Zuo, H., Kröger, E., Sirois, C., Lévesque, J.F., and Taylor, A.W., Association between nutrition and the evolution of multimorbidity: The importance of fruits and vegetables and whole grain products, Clinical Nutrition, 33, pp. 513-520, 2014. DOI: 10.1016/j.clnu.2013.07.009
[52] Cobley, N.J., McHardy, H., Morton, J.P., Nikolaidis, M.G. and Close, G.L., Influence of vitamin C and vitamin E on redox signalling: Implications for exercise adaptations, Free Radical and Biology Medicine, 84, pp. 65-76, 2015. DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2015.03.018
[53] Tafur, S.M. y Menjivar, J.C., Nutrición mineral del arroz, en: Producción Eco-eficiente del arroz en América Latina, Degiovanni, V., Martínez, C. and Motta, F., Eds. Cali: Centro Internacional de Agricultura Tropical, 2010, pp. 3-447.
[54] Roca, N., Pazos, M.S. and Bech, J., Disponibilidad de cobre, hierro, manganeso, zinc en suelos del NO Argentino, Ciencia del Suelo, 25, pp. 31-42, 2007.
[55] Floréz, R., Fisher, G. and Sora, A., Producción, poscosecha y exportación de la uchuva (Physalis peruviana L.). Tesis, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia, 2000.
[56] USDA, National nutrient database of standard references. Realese 27, 2014. [Online]. Available at: http://ndb.nal.usda.gov/ndb/foods/show/2210?fg=&man=&lfacet=&format=&count=&max=25&offset=&sort=&qlookup=blackberry+raw.
[57] Restrepo-Duque, A.M. y Cortés-Rodríguez, M., Desarrollo de nuevos productos de uchuva y fresa con valor agregado. Tesis de grado, Corporación Universitaria Lasallista, Medellin, Colombia, 2013.
[58] Ocampo-Pérez, J., Marín, C., Posada-Quintero, P., López, N. y Solano, R., Establecimiento y zonas productoras del cultivo de la Gulupa, en: Tecnología para el cultivo de gulupa en Colombia, Ocampo-Pérez J. and Wyckhoys, K. Eds. Bogota: CIAT, 2012, pp. 33-37.
[59] Ojasild, E., Elaboración de néctares de gulupa (passiflora edulis f. edulis) y curuba (Passiflora mollissima), bdigital, 2009. [Online]. [Accessed: 28-Mar-2015]. Available at: http://www.bdigital.unal.edu.co/2449/1/107416.2009.pdf.
[60] Marques, L.G., Ferreira, M.C. and Freire, J.T., Freeze-drying of acerola (Malpighia glabra L.), Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 46, pp. 451-457, 2007. DOI: 10.1016/j.cep.2006.04.011
[61] Wills, R., Lee, T., Graham, D., McGlasson, W. y Hall, E. Fisiología y manipulación de frutas y hortalizas postrecolección. Zaragoza: Acribia S.A., 1984.
[62] Seeram, N., Berry Fruits: Compositional elements, biochemical activities, and the impact of their intake on human health, performance, and disease, Journal of Agriculture and Food Chemestry, 56, pp. 627-629, 2008. DOI: 10.1021/jf071988k
[63] Ruiz-López, M.D., García-Villanova-Ruiz, B. y Abellán-Ballesta, P., Frutas y productos derivados, en: Tratado de nutrición: composición y calidad nutritiva de los alimentos, Madrid: Editorial Médica Panamericana, 2010, 812 P.
[64] Center for Food Safety and Applied Nutrition, Labeling & Nutrition - Guidance for Industry: A food labeling guide (14. Appendix F: Calculate the percent daily value for the appropriate nutrients), Maryland, 2013.
[65] Food and Drugs Administration, Guidance for industry: A food labeling guide (10. appendix B: additional requirements for nutrient content claims), Maryland, 2013.
[66] Cavaliere, A., De Marchi, E. and Banterle, A., Investigation on the role of consumer health orientation in the use of food labels, Public Health, 147, pp. 119-127, 2017. DOI: 10.1016/j.puhe.2017.02.011

A.M. Serpa-Guerra, received the BSc. Eng. in Agroindustrial Engineering in 2012 from the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia, and the MSc. degree in Food Inovation and Nutrition in 2016 from the Corporación Universitaria Lasallista. Currently she is a PhD student of the Agroindustrial Research Group (GRAIN) of the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia.
ORCID: 0000-0003-4506-6794

J.A. Velásquez-Cock, received the BSc. Eng. in Chemical Engineering in 2012 and the MSc. degree in Engineering in 2014, both from the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia. Currently he is a Ph.D student of the

Agroindustrial Research Group (GRAIN) of the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia.
ORCID: 0000-0001-5698-0640

J.A. Barajas-Gamboa, received the BSc. Eng. in Agroindustrial Engineering in 2014 from the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia. Currently he is a member of the Technological Surveillance Program (VIGILA) of the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia.
ORCID: 0000-0002-1654-0779

L.M. Vélez-Acosta, received the BSc. Eng. in Food Engineering in 1993 from the Corporación Universitaria Lasallista and the MSc. degree Development in 2007 from the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia. Currently she is a research professor at the Universidad Pontificia Bolivariana. She is a member of the Agroindustrial Research Group (GRAIN) of the same University.
ORCID: 0000-0002-7774-7378

B. Gómez-Hoyos, received the BSc. as Chemist in 1989 from the Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia and the Sp. degree in Enviromental Engineering in 1996 from the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia. Currently she is a research professor at the Universidad Pontificia Bolivariana. She is a member of the Enviromental Research Group (GIA) of the same University.
ORCID: 0000-0003-4259-943X

R. Zuluaga-Gallego, received the BSc. Eng. in Agroindustrial Engineering in 2003 and the PhD degree in 2009, both from the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia. Currently he is a research professor at the Universidad Pontificia Bolivariana. He is a member of the Agroindustrial Research Group (GRAIN) o the same University.
ORCID: 0000-0002-7039-0038

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Química e Ingeniería de Petróleos

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Química
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Petróleos
Doctorado en Ingeniería - Sistemas Energéticos

Mayor información:

E-mail: qcaypet_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5317

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Construction of index with artificial intelligence to evaluate vulnerability to climate change in Andean tropical micro-watersheds. Study case in Colombia

Viviana Vargas-Franco [a] & Inés Restrepo-Tarquino [b]

[a] *Facultad de Ingeniería y Administración, Universidad Nacional de Colombia, Palmira, Colombia, vvargasf@unal.edu.co*
[b] *Instituto CINARA, Universidad del Valle, Cali, Colombia, ines.restrepo@correounivalle.edu.co*

Received: August 14th, de 2017. Received in revised form: December 19th, 2017. Accepted: January 6th, 2018

Abstract
This article constructs and applies an index to estimate vulnerability level to climate change (CCI) in tropical Andean micro-watersheds. The ICC was constructed with a combination of two analytical methodologies: Pressure-State-Response (PER) indicators and fuzzy logic from artificial intelligence. One pressure indicator, three statuses and two response indicators were defined. Each indicator is associated with a fuzzy logic function. For the operation of the index, 234 decision rules were generated, which were programmed in the MATLAB program. The index was applied to the tropical Andean microcuenca Chocho located in the Department of Valle del Cauca in Colombia. With the application of the ICC index in this micro-basin, the high level of vulnerability of this microwatershed was evidenced in the low, medium and high zone. The ICC is a support for the decision making by different actors of the micro-watershed.

Keywords: climate change index; vulnerability to climate change; the Chocho micro-watershed; artificial intelligence; pressure-state-response indicators.

Construcción de índice con inteligencia artificial para evaluar vulnerabilidad al cambio climático en microcuencas andinas tropicales. Caso de estudio en Colombia

Resumen
Este artículo construye y aplica un índice para estimar el nivel de vulnerabilidad al cambio climático (ICC) en microcuencas andinas tropicales. El ICC fue construido con una combinación de dos metodologías analíticas: indicadores presión-estado-respuesta (PER) y lógica difusa de la inteligencia artificial. Se generaron: un indicador de presión, tres de estado y dos de respuesta. A cada indicador se le asoció una función de lógica difusa. Para la operatividad del índice se generaron 234 reglas de decisión, que fueron programadas en el programa MATLAB. El índice se aplicó a la microcuenca andina tropical el Chocho ubicada en el Departamento del Valle del Cauca en Colombia. Con la aplicación del índice ICC en esta microcuenca se evidenció el alto nivel de vulnerabilidad de esta microcuenca en la zona baja, media y alta. El ICC es un apoyo para la toma de decisiones por diferentes actores de la microcuenca.

Palabras clave: índice de cambio climático; vulnerabilidad al cambio climático; microcuenca el Chocho; inteligencia artificial; indicadores presión-estado-respuesta.

1. Introducción

El cambio y variabilidad climática son fenómenos que están afectando fuertemente a diversos países, con fenómenos naturales extremos como sequías, inundaciones, ciclones y deslaves, entre otros. Uno de los países que ha sufrido eventos extremos es Colombia, con impacto en pérdidas de vidas humanas, ecosistemas, biodiversidad y

How to cite: Vargas-Franco, V. and Restrepo-Tarquino I., Construcción de índice con inteligencia artificial para evaluar vulnerabilidad al cambio climático en microcuencas andinas tropicales. Caso de estudio en Colombia. DYNA, 85(204), pp. 194-203, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

pérdidas económicas considerables. A pesar de que el país cuenta con estudios sobre cambio climático (CC), estos han sido desarrollado a escala país o por departamentos administrativos, más que a nivel local o microcuencas. Así mismo, el énfasis está enfocado en la variabilidad de temperatura y precipitación [1]. Generalmente, a escala local, no se dispone de datos ni información suficiente, ni con el nivel de certidumbre necesario para tomar decisiones de planificación. El estudio de la vulnerabilidad al CC es un aspecto importante a nivel mundial, este concepto es multidimensional, complejo y de observación no directa [2] y medirla es un desafío. Diversas definiciones de vulnerabilidad se pueden encontrar en la literatura: grado en el cual un sistema es susceptible a efectos adversos o incapaz de hacerles frente [3]. Según el Panel Intergubernamental del Cambio Climático [4], la vulnerabilidad se puede expresar mediante la ecuación 1.

$$V = (E + S) - CA \quad (1)$$

Donde:
V: vulnerabilidad
E: exposición
S: sensibilidad
CA: capacidad de adaptación

La vulnerabilidad debe analizarse como una condición sistémica, multifactorial, multisectorial, multitemporal, multiescalar, y dinámica [5]. Una opción para acercarse a la evaluación de la vulnerabilidad es a través de índices ambientales (IA). Los IA son agregados de indicadores, que tienen como objetivo ser una herramienta para la planeación y la toma ágil de decisiones políticas por diversos actores. Algunos IA se han desarrollado relacionados al CC. RClimDex calcula 27 índices para evaluar variación de precipitación y temperatura [6]. En Colombia, se aplicaron índices para evaluar el cambio en temperatura y precipitación, para diversos periodos [1]. También existen índices más integrados, la mayoría a nivel de país. Se definió y aplicó un índice de vulnerabilidad al CC para América Latina y el Caribe, calificando el nivel de riesgo por país [3].

En Andalucía, España, se aplicaron indicadores PER para evaluar el riesgo al CC [7]. En México, se propusieron y aplicaron 60 indicadores para evaluar la vulnerabilidad al CC en el sector agrícola, a nivel municipal [3]. Así mismo, se desarrolló un estudio que utilizó lógica difusa y redes neuronales para estudiar el riesgo y costo del CC en puertos marítimos en China [8]. Igualmente, se desarrolló un estudio para evaluar el riesgo al CC en Egipto utilizando lógica difusa y análisis multicriterio [9]. Se estudió, a través de un índice, las relaciones entre los riesgos relacionados con el CC y el patrimonio cultural en Australia [10]. Un análisis fuzzy-multicriterio fue desarrollado para evaluar vulnerabilidad al CC en Corea del Sur [11]. Se realizaron estudios de simulación para evaluar la vulnerabilidad al CC en 6 fincas en Nueva Zelanda [12]. En el altiplano boliviano se realizó un estudio basado en juicio de expertos sobre dos temas: i) los impactos del CC en rendimientos de cultivos en tres comunidades y ii) la eficacia de técnicas específicas de riego para mitigar los impactos del CC [13].

A pesar de los múltiples estudios para evaluar la vulnerabilidad al CC, no se encontró uno a escala de microcuenca en general y en particular para la región andina tropical. La mayoría de los estudios revisados trabajan a nivel de país o de regiones administrativas, más que a nivel de cuenca o microcuenca, escala natural para la planeación. De igual forma, el énfasis cuando se operan los indicadores es analizar solamente precipitación y temperatura. En otros casos, como Sermanat y Pita, los indicadores PER solo se dejan enunciados y no se presentan metodologías analíticas para su análisis. En este sentido la propuesta del indicador ICC es innovadora y se puede seguir aplicando a otras microcuencas andinas tropicales del país o la región. En estudios posteriores se puede aplicar a otras escalas como subcuencas, cuencas o grandes cuencas hidrográficas y estimar su nivel de desempeño.

Una microcuenca es una cuenca que se encuentra dentro de una subzona hidrográfica con área inferior a 500 km^2 [1]. Las microcuencas son áreas estratégicas en relación con el suministro de servicios ecosistémicos, para un número importante de habitantes del país y estas son aproximadamente el 99,8% de las cuencas del país [1]. Conocer la vulnerabilidad al impacto de variabilidad y cambio climático nivel de microcuencas permitirá generar políticas específicas con impacto local. Por lo anterior, este estudio tiene como objetivo construir un índice de evaluación de la vulnerabilidad al CC en microcuencas andinas tropicales, aplicando una combinación de indicadores Presión-Estado-Respuesta y lógica difusa. El índice se aplicó a la microcuenca el Chocho, ubicada en el departamento del Valle del Cauca, Colombia. Esta microcuenca es estratégica pues provee de servicios ecosistémicos a alrededor de 15.000 habitantes y presenta serios problemas a nivel socioambiental.

1.1. Indicadores Presión-Estado-Respuesta (PER)

Los indicadores PER fueron desarrollados por Anthony Friend, en 1970 y adoptados por la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos (OCDE) [14]. El modelo PER considera las actividades humanas que ejercen Presión (P) sobre el ambiente y afecta y genera unos niveles de calidad y cantidad de recursos naturales, Estado (E), entonces la sociedad responde a esos cambios mediante políticas ambientales, económicas y sectoriales, Respuesta (R). Los indicadores de P perciben las causas de efectos ambientales adversos, responden a preguntas como: ¿por qué está ocurriendo?, ¿qué fuerzas sociales, políticas, económicas y otras están involucradas? [15]. Los indicadores de E, responden a la pregunta: ¿cómo es el estado ambiental de los recursos naturales?, y los indicadores de R, responden a la pregunta ¿qué se está haciendo social y políticamente para reducir la presión y el estado sobre los recursos naturales?, como se presenta en la Fig. 1.

1.2. Lógica difusa (LD)

La lógica difusa (LD) es una rama de la inteligencia artificial. El modelo de LD es una extensión de la lógica Booleana y utiliza conceptos de pertenencia de conjuntos que son más parecidos a la forma del pensamiento humano. La LD es usada en problemas altamente no lineales en los cuales no existe un modelo matemático preciso para modelar el

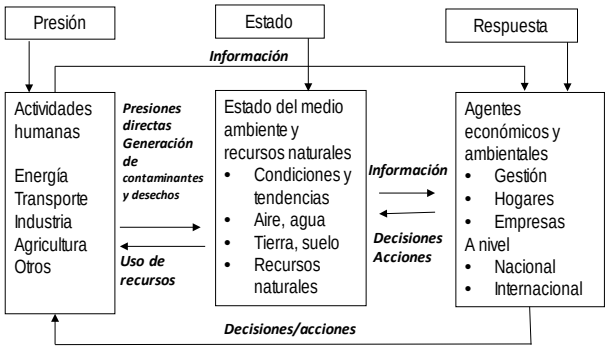


Figura 1. Esquema del modelo Presión-Estado-Respuesta (PER)
Fuente: [14].

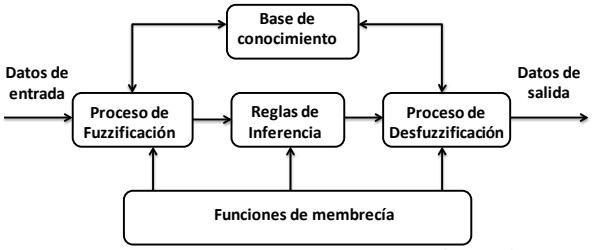


Figura 2. Estructura de un sistema conceptual de la lógica difusa.
Fuente: autores

problema, es una herramienta científica donde el conocimiento es representado por reglas lingüísticas de la forma SI…..ENTONCES (IF….THEN); valores reales son transformados en valores lingüísticos por una operación llamada fuzzificación [16].

La estructura general de un sistema conceptual de lógica difusa se muestra en la Fig. 2. En el primer bloque llamado fuzzificador, los datos de entrada son procesados para calcular el grado de membresía que tendrán dentro del controlador. Posteriormente el dispositivo de inferencia, junto con la base de conocimientos, realizan la toma de decisiones que definirá la forma como decidirá el sistema. El método de inferencia se basa en el grado de pertenencia de los datos de entrada a los conjuntos difusos, que permitirán tomar una decisión en el espacio de salida. La última etapa que se tiene dentro del controlador es el desfuzzificador, quien realiza el procesado final con el fin de adecuar los valores difusos obtenidos de la inferencia en valores no difusos útiles para el proceso de toma de decisiones.

Una variable lingüística es definida por cuatro aspectos fundamentales: el nombre de la variable, sus valores lingüísticos, las funciones de membresía de los valores lingüísticos y el dominio físico sobre la cual la variable toma sus valores cuantitativos.

Matemáticamente, un conjunto difuso A sobre el dominio X se define mediante un conjunto de pares ordenados: $A = \{(x, \mu_A(x))/\ x \in X\}$, donde, X es el universo de discurso, discreto o continúo y $\mu_A(x)$ es la función de pertenencia para el conjunto difuso A, ver ecuación 2.

$$\mu_A(x): X \rightarrow [0,1] \qquad (2)$$

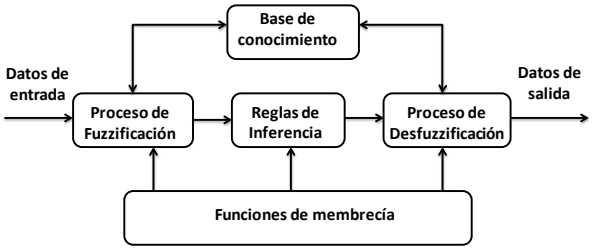


Figura 2. Estructura de un sistema conceptual de la lógica difusa.
Fuente: autores

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 0, & si\ x \le a \\ \frac{x-a}{m-a},\ si\ a < x \le m \\ \frac{b-x}{b-m},\ si\ m < x < b \\ 0,\ si\ x \ge b \end{cases} \qquad (3)$$

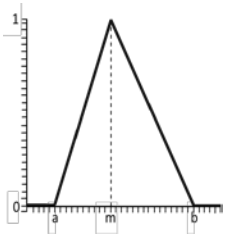


Figura 3. Ecuación y gráfica de una función de pertenencia triangular para un conjunto difuso.
Fuente: autores

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 0,\ si(x < a) \text{ó } (x > d) \\ \frac{x-a}{b-a},\ si\ a \le x \le b \\ 1,\ si\ b \le x \le c \\ \frac{d-x}{d-c},\ si\ c \le x \le d \end{cases} \qquad (4)$$

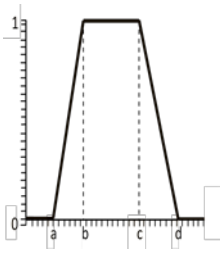


Figura 4. Ecuación y gráfica de una función de pertenencia trapezoidal para un conjunto difuso.
Fuente: autores

- Si $\mu_A(x) = r$, entonces r es el grado en que x pertenece al conjunto A.
- Si $\mu_A(x) = 0$ el elemento no pertenece al conjunto A.
- Si $\mu_A(x) = 1$ el elemento pertenece totalmente al conjunto A.

Las funciones de pertenencia generalmente se eligen con funciones matemáticas sencillas, para facilitar los cálculos de fuzzificación y desfuzzicación. Las funciones de pertenencia más utilizadas son triangulares, trapezoidales y singletón, por su facilidad de computación. La función triangular es definida mediante el límite inferior ***a***, el superior ***b*** y el valor modal ***m***, tal que ***a*<*m*<*b***, ver ecuación 3. La función no es necesariamente simétrica, como se ilustra en la Fig. 3.

La función trapezoidal, es definida por sus límites inferior ***a***, superior ***d***, y los límites de soporte inferior ***b*** y superior ***c***, tal que ***a*<*b*<*c*<*d***, ver ecuación 4. En este caso, si los valores de ***b*** y ***c*** son iguales, se obtiene una función triangular. También es posible que las funciones trapezoidales tomen valores no finitos: ***a*** = ***b*** = -∞, como se presenta en la Fig. 4,

La función llamada singleton, tiene un valor único cuando ***x*=*a***, ver ecuación 5, es una función delta de Dirac, como se presenta en la Fig. 5.

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 0, & si\ x \neq a \\ 1, & si\ x = a \end{cases} \quad (5)$$

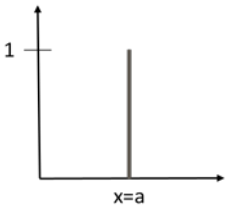


Figura 5. Ecuación y gráfica de una función de pertenencia singleton para un conjunto difuso.
Fuente: autores

Las funciones de membresía se operan a través de reglas de decisión o inferencia, las cuales son construidas a través de gestión de conocimiento: revisión de literatura y entrevista a expertos. Se utiliza el conocimiento y experiencia de un operador humano para construir un controlador difuso que simule el comportamiento de un experto. Comparado con el proceso tradicional de toma de decisiones, el control difuso tiene dos ventajas prácticas, una es que el modelo matemático del proceso no es requerido y otra es que se obtiene un procesador de decisiones no lineal desarrollado empíricamente sin conocer el proceso matemático de cada indicador. Una vez se han definido las funciones de pertenencia, se definen las reglas de decisión que a su vez realizaran los procesos de inferencia del sistema difuso.

De igual forma, debe definirse el proceso de desfuzificación, que a través del proceso generará un valor del sistema real. Diversos métodos para el proceso de desfuzificación se pueden utilizar, entre los que se encuentran: método bisector, método de centroide, el máximo medio, el máximo mínimo, máximo, el centro de sumas y el centro de grandes áreas, entre otros. El método más utilizado es el del centro de gravedad o centroide, que se calcula por medio de la ecuación 6, para un conjunto difuso A.

$$W = \frac{\int x.\mu_A(x)dx}{\int \mu_A(x)dx} \quad (6)$$

2. Metodología

2.1. Construcción del índice

El proceso general para la construcción del índice para evaluar la vulnerabilidad al cambio climático en microcuencas andinas tropicales se presenta en la Fig. 6 Se utilizó una combinación de dos modelos analíticos para la construcción del índice del ICC: el modelo presión-estado-respuesta y el modelo de lógica difusa, del área de la inteligencia artificial. Inicialmente se definieron los indicadores de presión-estado-respuesta, para ser aplicados en cada una de las zonas de la microcuenca: alta, media y baja.

Los indicadores fueron construidos con base en los criterios básicos de la OCED: i) ofrecer una visión de las condiciones ambientales, presiones ambientales y respuestas de la sociedad o el gobierno, para entender el fenómeno, ii) ser sencillos, fáciles de interpretar y capaces de mostrar la tendencia a través del tiempo y iii) responder a cambios en el ambiente y en las actividades humanas relacionadas. Así mismo, es importante considerar la escala y la resolución espacial, en este sentido los indicadores deben ser diseñados para la escala que se pretenden

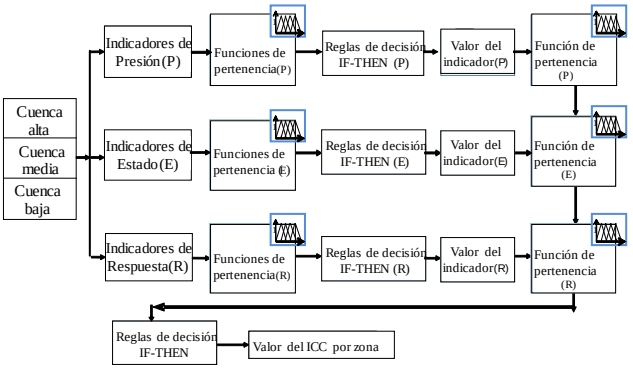


Figura 6. Modelo conceptual para la construcción del ICC.
Fuente: autores

aplicar. Mientras los índices ambientales son un agregado de indicadores ambientales y tienen como objetivo dar una visión general de la situación ambiental, como un sistema complejo. Entre los índices para evaluación de la sustentabilidad ambiental se tienen, Índice del Planeta Viviente, la Huella Ecológica e Índice de Sustentabilidad Ambiental.

En este estudio, se definieron 6 indicadores (PER); uno de presión, tres de estado y dos de respuesta. Estos indicadores fueron definidos considerando el nivel de importancia en la evaluación de la vulnerabilidad al CC en una microcuenca andina tropical. A cada indicador se le definió una función de pertenencia, entre triangular, trapezoidal y singleton. La definición de cada una de las funciones de pertenencia se desarrolló por una combinación de revisión de literatura y revisión con cinco expertos en los procesos de planeación de cuencas y microcuencas hidrográficas. El indicador de presión genera los niveles de presión de la microcuenca a través de las reglas de decisión definidas. La combinación de las funciones de pertenencia, de los indicadores de estado, a través de las reglas de decisión define el nivel de estado de la microcuenca. De igual forma la combinación de las reglas de decisión de los indicadores de respuesta define el nivel de respuesta de una microcuenca andina.

Siguiendo el proceso de lógica difusa, se construyeron las reglas de inferencia para los indicadores y sus conectores lógicos. Las reglas de decisión se construyeron de tal forma que permitieran evaluar el nivel del estado (E), la presión (P) y la respuesta (R). Posteriormente, los niveles de presión, estado y respuesta fueron combinados a través de reglas de decisión para definir el valor del índice de vulnerabilidad al cambio climático (ICC). Las reglas de decisión se construyeron a través de revisión de literatura y entrevistas directas con expertos en el área

Para el indicador de P se generaron 3 reglas, para el indicador de E 36 reglas y para el indicador de R 12 reglas. La combinación de las funciones PER generó 27 reglas. Para un sub-total de 78 reglas considerando las diversas zonas de la microcuenca, alta, media y baja. Generando un total de 234 reglas para la operación del índice de vulnerabilidad ICC. Las funciones de membresía y las reglas fueron programadas en el software computacional MATLAB (MATrix LABoratory). Esta herramienta computacional es un

software matemático con un entorno de desarrollo integrado y lenguaje de programación propio (lenguaje M), con interfaces amigables al usuario. Se puede utilizar en diversas plataformas como Unix, Windows, Mac OS X y GNU/Linux.

2.2. Zona de estudio

Como caso de estudio, el índice ICC se aplicó a la microcuenca andina tropical el Chocho ubicada en el Departamento del Valle del Cauca-Colombia, ver Fig. 7. Esta microcuenca nace en el Corregimiento la Paz, en la Cordillera Occidental de los Andes, a una altura aproximada de 2.000 msnm., tiene una extensión total de 21,3 km^2 y una longitud de 10 km. La microcuenca abastece a 8 acueductos veredales para provisión de agua a 15.000 habitantes, para uso doméstico y productivo, a través de los acueductos de Lomitas, Golondrinas, El Pinar, Villa del Rosario, Montebello, Campoalegre y Las Palmas [17].

Esta microcuenca presenta diversos problemas socioambientales por el cambio de uso de suelo, el incremento de la población en asentamientos subnormales, el vertimiento de aguas residuales e industriales sin tratamiento a las fuentes de agua superficial, mal manejo de residuos sólidos, lo que constituye una amenaza para la reserva forestal protectora y para la calidad del agua [17]. Así mismo, existe minería ilegal del carbón, amplias zonas con niveles de erosión severa, importantes extensiones de tierra en ganadería, se presentan conflictos por el uso del suelo y el agua y el trabajo interinstitucional es muy débil, asociado a una baja participación comunitaria en la toma de decisiones socioambientales.

De igual forma, esta microcuenca se ha visto afectada por eventos naturales extremos como sequias, inundaciones y remociones en masa, que afectan la prestación de los servicios ecosistémicos para los recursos naturales, los habitantes y sus procesos productivos.

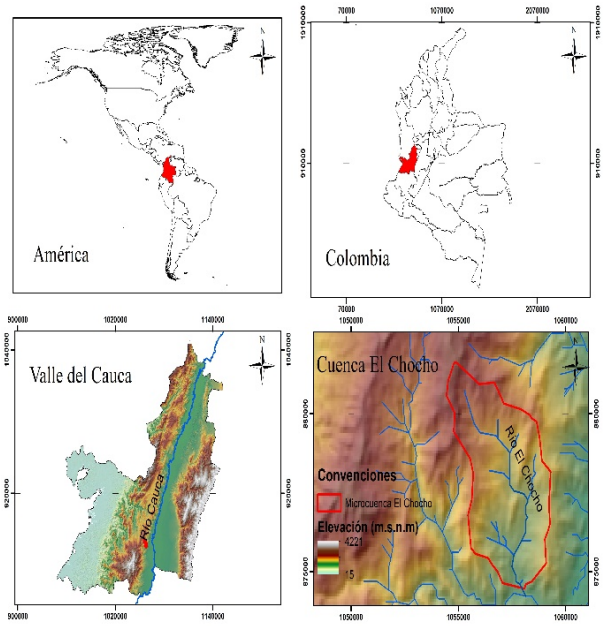


Figura 7. Ubicación espacial de la microcuenca el Chocho-Valle del Cauca-Colombia.
Fuente: autores

Tabla 1.
Descripción geográfica de estaciones de monitoreo de precipitación y temperatura.

Nombre de la estación	Coordenadas				Altura (msnm)
Pichinde	3	26	17,4	N	1651
	76	36	5,6	W	
Queremal	3	31	3,8	N	1496
	76	42	31,6	W	
La Cumbre	3	38	52,3	N	1580
	76	33	5,9	W	

Fuente: elaboración propia, con datos CVC

2.3. Procesamiento de datos

Se utilizó la herramienta ArcGis parar procesar el Modelo de Elevación Digital (MED) para representar la microcuenca el Chocho. Se realizaron procesos geoestadísticos con la herramienta de interpolación *spline*, con el fin de espacializar la variación de precipitación y temperatura anual y estimar su variación anual. Se utilizó la herramienta Excel para el procesamiento estadístico de los datos meteorológicos, facilitados por el Instituto de Hidrología, Meteorología y estudios Ambientales (IDEAM). Se analizaron series históricas de datos de precipitación y temperatura correspondientes a tres estaciones de monitoreo, las cuales se describen en la Tabla 1. Las series correspondieron a los años de 1990 a 2014.

Se realizaron visitas y entrevistas no estructuradas con diversos actores de la microcuenca, entre los que se encuentran funcionarios de la Corporación Autónoma Regional del Valle del Cauca (CVC), Departamento Administrativo del Medio Administrativo de Gestión del Medio Ambiente (DAGMA) y Unidad Municipal de Asistencia Técnica (UMATA). Así mismo, se entrevistaron operadores y administradores de acueductos veredales y propietarios de fincas y pequeños terrenos. Los datos recolectados se ingresaron al software MATLAB en el cual se realizó la aplicación del índice ICC.

3. Resultados y discusión

3.1. Indicadores PER

Los indicadores PER definidos para evaluar la vulnerabilidad al CC en microcuencas andinas se presentan en la Tabla 2. El indicador de Presión está asociado al incremento de actividades que generen emisiones de gases efecto invernadero (GEI), específicamente el dióxido de carbono (CO_2), debido a su alta contribución en el calentamiento global en los últimos 30 años, con un aporte del 77% sobre los otros GEI [18]. El CO_2 es el GEI más importante en términos de volumen emitido, su larga vida en la atmósfera (entre 5 y 200 años) y el notable incremento de su concentración en la atmósfera [19]. Este indicador coincide con los definidos por Semarnat (2012) y Pitta *et al.* (1998). Al igual que en Semarnat (2013), en este estudio esta medición se realiza de forma indirecta, considerando el incremento de actividades relacionadas con el consumo y quema de combustibles fósiles. Sin embargo, Sermanat (2017), en México, mide los valores de CO_2 de forma directa con bases de datos a nivel global, nacional y por el cambio del uso del suelo [20].

Tabla 2.
Indicadores PER para vulnerabilidad al CC en una microcuenca andina.

Presión (P)	Estado (E)	Respuesta (R)
Incremento de actividades que generen emisiones de dióxido de carbono (ICO_2)	Variación anual de precipitación (VPA) Variación anual de temperatura (VTA) Incremento anual de eventos naturales extremos (Sequías, inundaciones, deslizamientos de tierra, etc.) (IENE)	Estrategias de adaptación al cambio climático (EACC) Estrategias de control para la contaminación de aire (ECA)

Fuente: elaboración propia

Los indicadores de estado definidos en este estudio son: variación anual de precipitación y variación anual de temperatura, estos coinciden con los definidos con Semarnat (2013) y Pitta *et al* (1998), sin embargo, dadas las condiciones de vulnerabilidad en las regiones andinas, se introduce adicionalmente, el indicador de ocurrencia de eventos extremos, tales como sequías, inundaciones y movimientos en masa, entre otros. Sin embargo, Sermanat (2017), definió dos indicadores de estado: concentración atmosférica global de CO_2 y cambios de temperatura global [20], eliminando el indicador de precipitación que esta organización había definido años anteriores. Si bien estos nuevos indicadores son importantes en la evaluación del cambio climático, estos tienen una característica global y su impacto o medición local podría no ser apropiada, de igual forma estos valores son de difícil disponibilidad a nivel local o a escala de microcuenca.

Para el cálculo del indicador IENE, se utilizaron imágenes satelitales para evaluar niveles de deslizamientos, y se utilizaron las encuestas y entrevistas a diversos actores de la microcuenca para estimar el valor del indicador. Las preguntas asociadas fueron eventos extremos recientes como sequías, inundaciones y deslizamientos, entre otros.

Los indicadores de respuesta definidos en este estudio son: estrategias de adaptación al CC e implementación de estrategias para mitigación y abatimiento de contaminación del aire, considerando que se estudia la vulnerabilidad al CC. Estos son totalmente diferentes a los definidos por Semarnat (2013) y Pitta *et al*, (1998), quienes definieron como indicadores de respuesta uso de energías sostenibles, que para el caso de vulnerabilidad no presentan una importancia directa, sin embargo, Sermanat (2017), redefinió este indicador como medidas tomadas por México sobre el cambio climático. Este último tiene una relación más directa con el concepto de indicador de respuesta ante la vulnerabilidad, tal como los definidos en el presente estudio.

3.2 *Funciones de membresía de lógica difusa*

A cada uno de los indicadores PER definidos anteriormente, se le asigna una función de membresía de la lógica difusa, con el fin de poder operar estos indicadores, contrario a Semarnat (2013, 2017) y Pitta *et al* (1998), que no operaron los indicadores PER. Los rangos y valores lingüísticos en las funciones se construyeron a través de gestión de conocimiento y revisión de literatura. Por facilidad en sus procesos y cálculos, las funciones definidas son trapezoidal, triangular y singleton. La función de membresía para el indicador de presión; incremento de actividades que generan CO_2, se presenta en la Fig. 8. Esta genera los valores del indicador de Presión con valores de fuerte, moderado y débil.

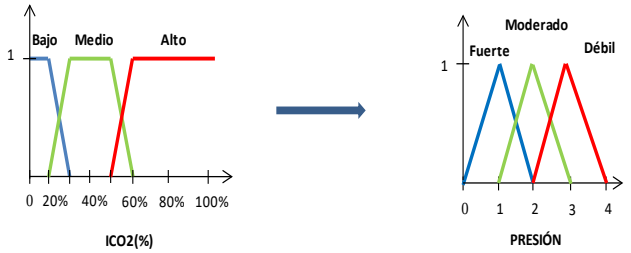


Figura 8. Funciones de pertenencia para el indicador que genera el valor de Presión.
Fuente: autores

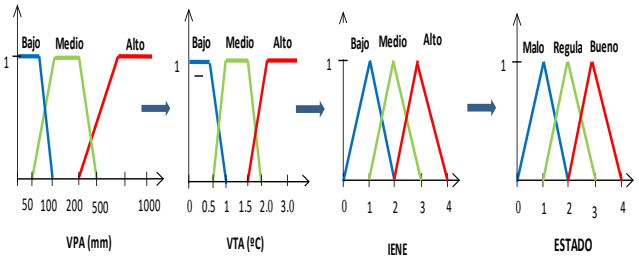


Figura 9. Funciones de pertenencia para los indicadores que generan el valor de Estado.
Fuente: autores

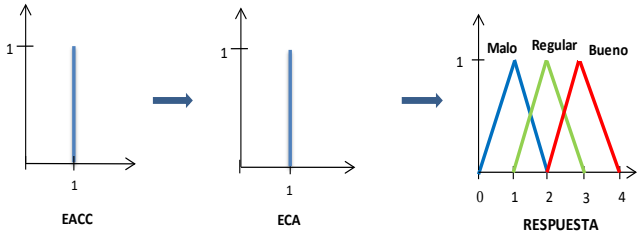


Figura 10. Funciones de pertenencia para los indicadores que generan el valor de Respuesta.
Fuente: autores

Las funciones definidas para los indicadores que van a generar el valor de Estado en una microcuenca andina, se presentan en la Fig. 9. La combinación de los valores de los indicadores genera los valores del indicador de Estado con valores de malo, regular y bueno.

Las funciones definidas para los indicadores que van a generar el valor de Respuesta en una microcuenca andina, se presentan en la Fig. 10. La combinación de los valores de los indicadores genera los valores del indicador de Respuesta con valores de malo, regular y bueno.

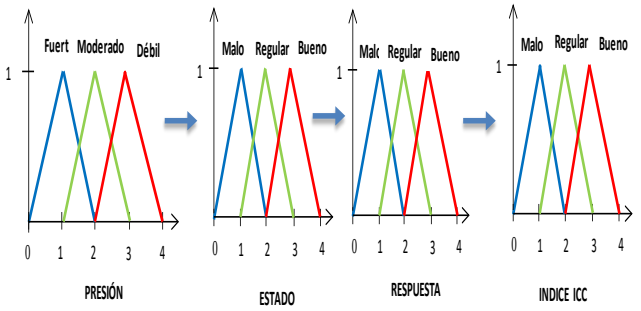


Figura 11. Funciones de pertenencia para los indicadores que generan el valor del índice para valorar la vulnerabilidad al cambio climático.
Fuente: autores

Tabla 3.
Reglas de decisión para el indicador de Presión.

No.	REGLAS
1	IF (ICO2 IS BAJO) THEN PRESION IS DEBIL
2	IF (ICO2 IS MEDIO) THEN PRESION IS MODERADO
3	IF (ICO2 IS ALTO) THEN PRESION IS FUERTE

Fuente: elaboración propia

La combinación de los valores de los indicadores de Presión-Estado-Respuesta generan los valores del índice de vulnerabilidad al cambio climático para microcuencas andinas tropicales, tal como se presenta en la Fig. 11, generando valores de malo, regular y bueno.

La base de conocimiento se generó con el fin de evaluar el nivel de vulnerabilidad al cambio climático en una microcuenca, a través de la definición de reglas lingüísticas de control para la toma de decisiones sobre el nivel de vulnerabilidad al CC. En este estudio se utilizó el método Mamdani, que utiliza reglas de decisión del tipo si-entonces (if-else). En este sistema tanto el antecedente como el consecuente son expresiones lingüísticas. Estas reglas se pueden aplicar a cada una de las zonas de una microcuenca, presentándose probablemente diversos valores para cada zona. En la Tabla 3, se presentan las tres reglas de decisión que dan valor al nivel del indicador Presión.

En la Tabla 4, se presentan algunas reglas de decisión que dan valor al nivel del indicador Estado, similarmente estas reglas se pueden aplicar en cada una de las zonas de una microcuenca, el sub-total de reglas para cada zona es de 27, para un total de 81 reglas para el indicador de Estado. En la Tabla 5, se presentan las reglas de decisión que darán el valor del indicador de Respuesta, para cada una de las zonas de una microcuenca andina. Existen 4 reglas por zona, para un total de 12 para toda la microcuenca andina tropical. En la Tabla 6, se presentan algunas reglas que dan el valor del índice de vulnerabilidad al cambio climático en una microcuenca andina tropical, con un sub-total de 27 reglas y un total de 81.

3.2. Caso de estudio

En la Tabla 7, se presentan los indicadores que fueron definidos para aplicar el índice de vulnerabilidad al CC en una microcuenca andina tropical.

Tabla 4.
Reglas de decisión para el indicador de Estado.

No.	REGLAS
1	IF (VPA IS BAJO) AND (VTA IS BAJO) AND (IENE IS BAJO) THEN ESTADO IS BUENO
2	IF (VPA IS BAJO) AND (VTA IS MEDIO) AND (IENE IS BAJO) THEN ESTADO IS BUENO
3	IF (VPA IS BAJO) AND (VTA IS ALTO) AND (IENE IS BAJO) THEN ESTADO IS BUENO
…	…..
…	…..
25	IF (VPA IS ALTO) AND (VTA IS BAJO) AND (IENE IS ALTO) THEN ESTADO IS MALO
26	IF (VPA IS ALTO) AND (VTA IS MEDIO) AND (IENE IS ALTO) THEN ESTADO IS MALO
27	IF (VPA IS ALTO) AND (VTA IS ALTO) AND (IENE IS ALTO) THEN ESTADO IS MALO

Fuente: elaboración propia

Tabla 5.
Reglas de decisión para el indicador de Respuesta.

No.	REGLAS
1	IF (MACC IS SI) AND (IMA IS SI) THEN RESPUESTA IS BUENO
2	IF (MACC IS NO) AND (IMA IS SI) THEN RESPUESTA IS REGULAR
3	IF (MACC IS SI) AND (IMA IS NO) THEN RESPUESTA IS REGULAR
4	IF (MACC IS NO) AND (IMA IS NO) THEN RESPUESTA IS MALO

Fuente: elaboración propia

Tabla 6. Algunas reglas de decisión para el valor del índice de vulnerabilidad al CC en una microcuenca andina.

No.	REGLAS
1	IF (ZONA_CUENCA IS ZONA_ALTA) AND (PRESION IS DEBIL) AND (ESTADO IS BUENO) AND (RESPUESTA IS BUENO) THEN ICC_ALTA IS BUENO
2	IF (ZONA_CUENCA IS ZONA_ALTA) AND (PRESION IS DEBIL) AND (ESTADO IS REGULAR) AND (RESPUESTA IS BUENO) THEN ICC_ALTA IS BUENO
…	…..
…	…..
25	IF (ZONA_CUENCA IS ZONA_ALTA) AND (PRESION IS FUERTE) AND (ESTADO IS BUENO) AND (RESPUESTA IS MALO) THEN ICC_ALTA IS MALO
26	IF (ZONA_CUENCA IS ZONA_ALTA) AND (PRESION IS FUERTE) AND (ESTADO IS REGULAR) AND (RESPUESTA IS MALO) THEN ICC_ALTA IS MALO
27	IF (ZONA_CUENCA IS ZONA_ALTA) AND (PRESION IS FUERTE) AND (ESTADO IS MALO) AND (RESPUESTA IS MALO) THEN ICC_ALTA IS MALO

Fuente: elaboración propia

La estimación de los niveles de CO_2, se estimó a través del incremento de las tasas anuales de las actividades que generan este gas, como son: la deforestación y el incremento de ganadería en cada una de las zonas de la microcuenca. Los niveles de deforestación se estimaron con imágenes satelitales y el incremento de zonas ganaderas con entrevistas directas a diversos actores de la microcuenca.

Tabla 7. Valores de los indicadores en cada zona de la microcuenca el Chocho.

No.	Descripción	Nombre del Indicador	Valor
1	Incremento porcentual de emisiones de bióxido de carbono	**ICO_2**	0% - 100%
2	Variación de la precipitación anual	**VPA**	0 – 1000 mm
3	Variación de la temperatura anual	**VTA**	0°C – 3.0°C
4	Nivel de ocurrencia de eventos naturales extremos	**IENE**	Alto/Medio/Bajo
5	Aplicación de estrategias de adaptación al CC	**IACC**	Si/No
6	Estrategias de control para la contaminación del aire	**IECA**	Si/No

Fuente: elaboración propia

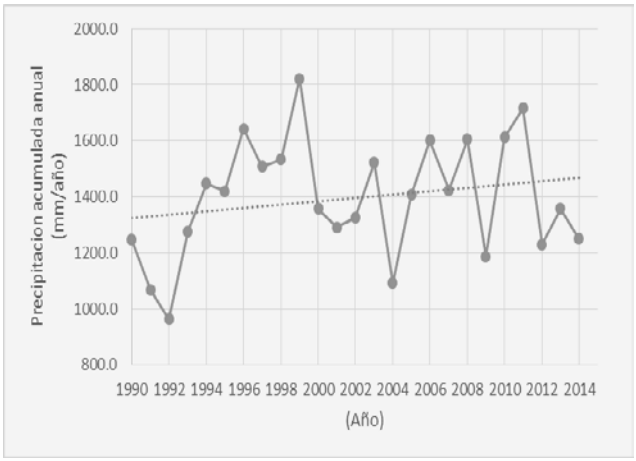


Figura 12. Variación temporal de precipitación acumulada anual, microcuenca el Chocho.
Fuente: elaboración propia, con datos IDEAM 2016

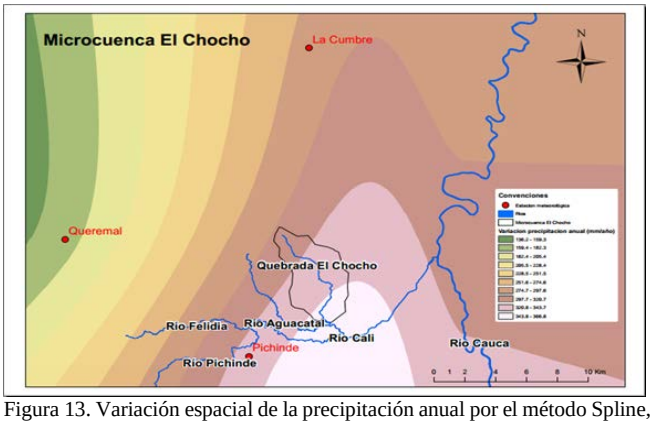


Figura 13. Variación espacial de la precipitación anual por el método Spline, microcuenca el Chocho.
Fuente: elaboración propia con datos IDEAM 2016

Para los indicadores VTA y VPA se analizaron series de precipitación y temperatura en la microcuenca. Para estimar la variación anual de la precipitación y la temperatura se tomó la desviación estándar de los últimos 24 años (1990-2014), de tres estaciones de monitoreo del IDEAM. En la Fig. 12, se

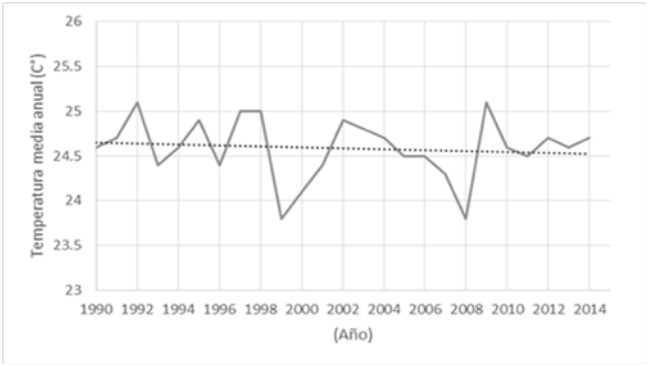


Figura 14. Variación de la temperatura promedio anual, microcuenca el Chocho.
Fuente: elaboración propia, con datos IDEAM 2016

Tabla 8.
Valores de los indicadores en cada zona de la microcuenca el Chocho.

No.	Nombre del Indicador	Sitio de la microcuenca			Fuente de información
		Cuenca alta	Cuenca media	Cuenca Baja	
1	**ICO_2**	60%	40%	60%	Visitas y entrevistas
2	**VPA**	309 mm	332 mm	355 mm	IDEAM, 2016
3	**VTA**	0,3°C	0,3°C	0,3°C	IDEAM, 2016
4	**IENE**	Medio	Medio	Medio	UMATA. 2016
5	**IACC**	No	No	No	UMATA, 2016
6	**IECA**	No	No	No	UMATA, 2016

Fuente: elaboración propia, con datos de IDEAM y UMATA.

presentan las tendencias de la precipitación acumulada anual, donde se estima la variación anual histórica de precipitación.

De igual modo, se estima con el método Spline, cual es la variación de la precipitación en cada una de las zonas de la microcuenca el Chocho, ver Fig. 13. Para el indicador VAT, se analizó la tendencia histórica de la temperatura promedio anual para la microcuenca el Chocho, ver Fig. 14.

Los valores estimados de los indicadores PER para calcular el índice ICC, para la zona alta, media y baja de la microcuenca el Chocho, se presentan en la Tabla 8. El resultado de estas encuestas permitió estimar los valores de los indicadores ICO_2, IENE, IACC y IECA. Las respuestas no se validaron, pero se contrasto la información de la comunidad con la información de funcionarios de instituciones. Los valores de eventos extremos, aplicación de estrategias de adaptación y abatimiento de la calidad de aire, fueron complementados por la Unidad Municipal de Asistencia Técnica Agropecuaria, UMATA.

Para el indicador ICO_2, se analizó que en la zona alta no existen industrias ni parque automotor y no se han incrementado en los últimos años, sin embargo, existen problemas de deforestación y aumento de la ganadería, por tal razón se le asignó un valor de 60%. En la zona media, se presenta tránsito de vehículos por el desarrollo vial, no existen zonas marcadas de deforestación, por lo cual se atribuye un incremento del 40%.

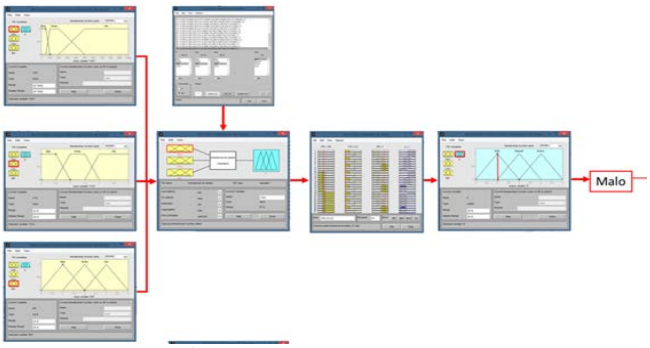


Figura 15. Aplicación del indicador de Estado en la zona baja de la microcuenca El Chocho.
Fuente: autores

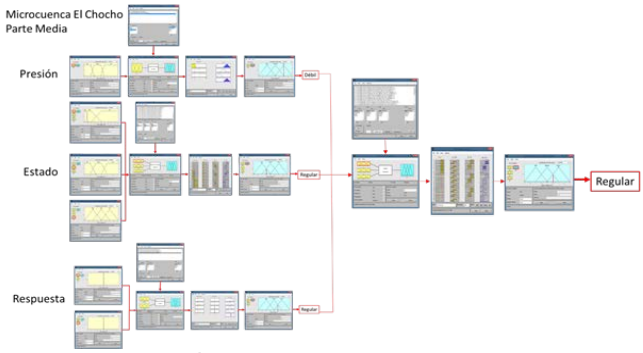


Figura 16. Valor del índice ICC en la zona media de la microcuenca El Chocho.
Fuente: autores

En la zona baja, el valor asignado fue de 60%, considerando que se identifican actividades de minería de carbón, crecimiento poblacional y un incremento de actividades industriales. Para estimar la variación anual de la precipitación y la temperatura se tomó la desviación estándar de los últimos 24 años (1990-2014), de tres estaciones de monitoreo del IDEAM.

Los valores de los indicadores PER en la microcuenca, las funciones de membresía y las reglas de decisión de la lógica difusa se procesaron en el programa computacional MATLAB. En la Fig. 15, se presenta un ejemplo de la interface de este proceso, con el resultado del valor del indicador de Estado para la zona baja de la microcuenca el Chocho y en la Fig. 16, se presenta la interface que une los valores de los indicadores de PER en el índice ICC para la zona media de la microcuenca el Chocho.

Los resultados de la aplicación del índice ICC en la microcuenca el Chocho mostraron un nivel de vulnerabilidad alto, en la parte alta, media y baja, como se muestra en la gráfica radial de la Fig. 17. Este conocimiento debe permitir de forma ágil y oportuna la definición de intervenciones para disminuir los niveles de vulnerabilidad al cambio y la variabilidad climática en cada zona de la microcuenca.

Aunque algunos valores de los indicadores fueron medidos de manera indirecta, se espera que en el futuro se pueda contar con datos más confiables. Así mismo, las autoridades ambientales podrían priorizar el monitoreo de datos, información y conocimiento para aplicar este índice.

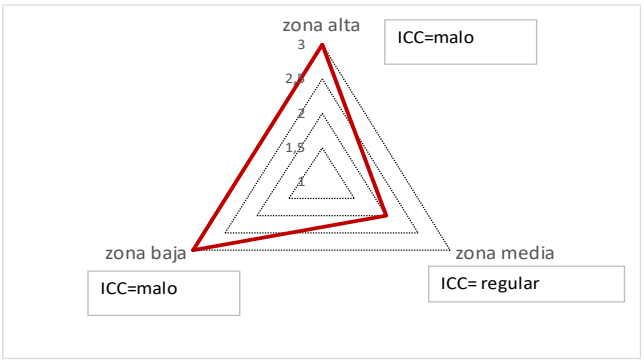


Figura 17. Resultados del índice ICC para la microcuenca el Chocho en el Valle del Cauca.
Fuente: autores

Con este índice se podría simular diversos valores para estimar los niveles de sensibilidad de la microcuenca a la vulnerabilidad al CC. Este índice puede utilizarse para medir la vulnerabilidad a nivel espacial y temporal, en la medida que puede aplicarse en diferentes zonas de la microcuenca y puede medirse en diversos años y contrastar así la evolución de la vulnerabilidad. De igual forma, sirve como una herramienta de simulación pues se pueden ingresar diversos conjuntos de datos para evaluar el cambio y sensibilidad del índice. Este índice se puede aplicar y evaluar en otras microcuencas andinas, del pacífico y cuencas de escala mayor, como subcuencas, cuencas y grandes cuencas hidrográficas para evaluar su desempeño y realizar los ajustes requeridos.

4. Conclusiones

Se construyó un índice cualitativo para evaluar la vulnerabilidad de microcuencas andinas tropicales ante el cambio y la variabilidad climática, utilizando dos modelos analíticos: indicadores presión-estado-respuesta (PER) e inteligencia artificial por lógica difusa. El índice ICC es un apoyo a la planeación y toma de decisiones para la definición y aplicación de intervenciones sustentables para disminuir o sostener los niveles de vulnerabilidad al CC. A la fecha no se ha aplicado ninguna otra herramienta en la microcuenca El Chocho para evaluar el nivel de vulnerabilidad al CC. El ICC es una herramienta potencial para estimar el nivel de vulnerabilidad al CC en otras microcuencas andinas tropicales. Más aplicaciones del ICC son necesarias. Se deben generar intervenciones para disminuir los niveles de vulnerabilidad en cada una de las zonas evaluadas. El presente trabajo evidenció la poca disponibilidad de datos e información a nivel de microcuencas andinas en el país para evaluar la vulnerabilidad al cambio y variabilidad climática, lo que demuestra la urgente necesidad de conformar bases de datos históricas y el empleo de herramientas analíticas para la toma de decisiones en intervenciones para disminuir la vulnerabilidad al CC y VC.

Referencias

[1] IDEAM y PNUD. Nuevos escenarios de cambio climático para Colombia 2011-2100. Nivel Nacional-Departamental. Estudio

Técnico Completo. 3ra comunicación nacional de cambio climático, Colombia, Instituto de Hidrología, Meteorología y Estudios Ambientales, 2015, 279 P.
[2] Monterroso, R.A., Conde, A.C., Gay, G.C., Gómez, D.J. y López. G.J., Indicadores de vulnerabilidad y cambio climático en la agricultura de México, México, Universidad Autónoma de Chapingo, 2012, 10 P.
[3] CAF. Índice de vulnerabilidad y adaptación al cambio climático en la región de América Latina y el Caribe, Corporación Andina de Fomento, 2014, 212 P.
[4] IPCC. Cambio climático 2014. Mitigación del cambio climático. Resumen para responsables de política. Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático, 2014, 40 P.
[5] Magaña, V., Guía metodológica para la evaluación de la vulnerabilidad ante el cambio climático, México, Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC) y Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo (PNUD), 2012, 62 P.
[6] Vázquez-Aguirre, J.L., Guía para el cálculo y uso de índices de cambio climático en México, 2010, México, Instituto Nacional de Ecología, Secretaria de Medio Ambiente y Recursos Naturales, 2010, 88 P.
[7] Pita-López, M.F., Aguilar-Alba, M., Megías-Casas, M. y Caramillo-Naranjo, J.M., Propuesta de sistema de indicadores climáticos ambientales para Andalucía, España, Consejería de Medio Ambiente, Andalucía, 1998, 60 P.
[8] Yang, Z., Ng, N.K.A., Lee, T.P., Wang, T., Qu, Z., Sánchez, R. V., Pettit, S., Harris, I., Zhang, D. and Lau, Y., Risk and cost evaluation of port adaptation measures to climate change impacts, 2017, article in press. DOI: 10.1016/j.trd.2017.03.004.
[9] Batisha, F.A., Implementing fuzzy decisión making technique in analyzing the Nile Delta resilience to climate change, Alexandria Engineering Journal, 54, pp. 1043-1056, 2015. DOI: 10.1016/j.aej.2015.05.019.
[10] Forino, G., MacKee, J. and von Meding, J., A proposed assessment index for climate change-related risk for cultural heritage protection in Newcastle (Australia), International Journal of Disaster Risk Reduction, 19, pp. 235-248, 2016. DOI: 10.1016/j.ijdrr.2016.09.003.
[11] Jun, K., Chung, E., Kim, Y. and Kim, Y., A fuzzy multi-criteria approach to flood risk vulnerability in South Korea by considering climate change impacts, Expert Systems with Applications, 40, pp. 1003-1013, 2012. DOI: 10.1016/j.eswa.2012.08.013.
[12] Kalaugher, E., Beukes, P., Bomman, F.J., Clark, A. and Campbell, D.I., Modelling farm-level adaptation of temperate, pasture-bases dairy farms to climate change, 153, pp. 53-68, 2017. DOI: 10.1016/j.agsy.2017.01.008.
[13] Martínez-Cruz, L.A., Juárez-Torres, M. and Guerrero, S., Assessing impacts from climate change on local social-ecological systems in contexts where information is lacking: An Expert Elicitation in the Bolivian Altiplano, Ecological Economics, 137, pp. 70-82, 2017. DOI: 10.1016/j.ecolecon. 2017.03.03.
[14] OECD. Towards sustainable development. Indicators to measura progress. Rome Conference. Sustainable Development, Frnace, Public Affairs and Communication Directorate, 2000, 417 P.
[15] Hughey, K.F.D., Cullen, R., Kerr, G.N. and Cook, A.J., Application of the pressure-state-response framework to perceptions reporting of the state of the New Zealand environment, Journal of Environmental Management, 70, pp. 85-93, 2003. DOI: 10.1016/j.jenvman.2003.09.020.
[16] Phillis, Y.A. and Andriantiatsaholiniaina, L.A., Sustainability: an ill-defined concept and its assessment using fuzzy logic. Ecological Economics, 37**,** pp. 435-456, 2001.
[17] Dominguez, I.C. y Corrales, S.M., Caso de estudio. Microcuenca de la Quebrada el Chocho, Colombia, IWMI; CGIAR y CINARA-Univalle, 2006, 67 P.
[18] IPCC. Cambio climático 2014. Mitigación del cambio climático. Resumen para responsables de políticas. Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el cambio climático, Suiza, 2014, 40 P.
[19] Semarnat. Informe de la situación del medio ambiental en México. Compendio de estadísticas ambientales. Indicadores clave y de desempeño ambiental, Edición 2012, México, Secretaria de Medio Ambiente y Recursos Naturales, 2013, 382 P.
[20] Semarnat. Mexico´s environmental performance indicators [en línea] México, Secretaria de Medio Ambiente y Recursos Naturales, 2017 [consulta 1 de octubre de 2017]. Disponible en: http://apps1.semarnat.gob.mx/dgeia/indicadores13_eng.

V. Vargas-Franco, es Matemática, Estadística, Esp. en Ingeniería de Sistemas, MSc en Ingeniería de Sistemas y Dra. en Ingeniería Sanitaria y Ambiental. Experiencia en proyectos de investigación y desarrollo alrededor de los recursos hídricos y la gestión de cuencas hidrográficas. Directora de proyectos de investigación y dirección de tesis alrededor de las áreas de la planeación y toma de decisiones sobre los recursos hídricos y el manejo de cuencas hidrográficas, con énfasis en microcuencas andinas tropicales. Profesora asociada de la Universidad Nacional de Colombia. Sede Palmira. ORCID: 0000-0002-6448-9234

I. Restrepo-Tarquio, es Ingeniera Sanitaria, MSc. Sistemas (Sistemas Ambientales), Dra. en Ingeniería. Experiencia en saneamiento ambiental, gestión del agua y transferencia de tecnología. Nominada al Premio Senior del Agua (Semana del Agua de Estocolmo), participante por Colombia en el Comité Técnico de GWP. Premio ONU a iniciativas que contribuyen a la mitigación del cambio climático (COP2015). Profesora asociada de la Universidad del Valle.
ORCID: 0000-0003-4705-2062

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
de Sistemas e Informática

Oferta de Posgrados

Especialización en Sistemas
Especialización en Mercados de Energía
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Sistemas
Doctorado en Ingeniería- Sistemas e Informática

Mayor información:

E-mail: acsei_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5365

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Water quality modeling of the Aguas Claras stream, canton Quevedo, Ecuador

Julio César Pazmiño-Rodríguez, Gabriela Lisseth Zambrano-Ganchozo & Hevert Aarón Coello-Burgos

Facultad de Ciencias Ambientales, Universidad Técnica Estatal de Quevedo, Ecuador. jpazmino@uteq.edu.ec, gabriela.zambrano@uteq.edu.ec, hevert.coello@gmail.com

Received: June 22th, 2017. Received in revised form: December 7th, 2017. Accepted: January 19th, 2018.

Abstract
This paper studies the behavior of dissolved oxygen (DO) and biochemical oxygen demand (BOD) in the Aguas Claras stream, located southwest of Quevedo. The impact of the modeling conditions the calibration process, which consisted of adjusting the kinetic constant reaeration (k_a), deoxygenation (k_d) and total removal of the BOD (k_r), using the GLUE methodology, through Monte Carlo simulations. The study shows that k_a is greater than (k_d), a condition indicating a high potential for self-purification, while high values of k_r are attributed to shallow low-depth currents, demonstrating that they are relatively simple systems to biodegrade. Finally, the performance analysis of the OD and BOD showed differences less than 10% for the Streeter-Phelps model and more than 50% for QUAL2K software, due to the lack of information required by the model of k_a and k_r

Keywords: dissolved oxygen; BOD; Streeter-Phelps; Qual2k; calibration; GLUE methodology; Monte Carlo.

Modelización de la calidad del agua del estero aguas Claras, cantón Quevedo, Ecuador

Resumen
Se estudió el impacto de la descarga de aguas residuales en el comportamiento del oxígeno disuelto y la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) en el estero Aguas Claras, ubicado al suroeste del cantón Quevedo, durante los meses de octubre 2016 a febrero 2017. La simulación se realizó en tres tramos de la corriente, por medio del modelo de Streeter-Phelps y el programa QUAL2K. Los modelos se calibraron ajustando las constantes de reaireación (k_a), desoxigenación (k_d) y remoción total (k_r), empleando la metodología GLUE (Estimación de la probabilidad de incertidumbre generalizada), a través de simulaciones de Monte Carlo. El análisis de rendimiento determinó valores promedio del coeficiente de determinación R^2 y del coeficiente de Nash-Sutcliffe de 0,99, revelando un buen ajuste del modelo de Streeter-Phelps. El ajuste para QUAL2K fue sensiblemente inferior. El estudio sugiere una importante capacidad de autodepuración del estero por los altos valores de k_a y k_r

Palabras clave: oxígeno disuelto; DBO; modelo Streeter-Phelps; Qual2k; metodología GLUE; simulación Monte Carlo.

1. Introducción

El estero Aguas Claras, que pertenece a la parte alta de la subcuenca del río Macul, atraviesa zonas marginales de las parroquias urbanas 24 de Mayo y El Guayacán, del cantón Quevedo, el área administrativa de mayor población de la provincia de Los Ríos y de la Zona de Planificación 5 del Ecuador, con 173 575 habitantes de acuerdo con el Censo de Población y Vivienda del año 2010 [1]. Quevedo evidencia un proceso de consolidación como nodo intermedio de desarrollo nacional y regional.

Aunque el principal curso de agua superficial de Quevedo es el río del mismo nombre, su red hidrográfica es muy amplia, y muchos esteros escurren a través de zonas densamente pobladas. Además, la cobertura del sistema de alcantarillado alcanza sólo el 23% y no existe una planta operativa de tratamiento de las aguas residuales municipales [2].

How to cite: Pazmiño-Rodríguez, J.C., Zambrano-Ganchozo, G.L. and Coello-Burgos, H.A., Modelización de la calidad del agua del estero Aguas Claras, cantón Quevedo, Ecuador. DYNA, 85(204), pp. 204-214, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

La situación actual sobre la disposición final de las aguas residuales generadas en la urbe de Quevedo ha alcanzado niveles preocupantes, debido a que todo el sistema de recolección de aguas servidas desemboca en caudales naturales sin previo tratamiento; un ejemplo de aquello es el deterioro de la calidad de agua del río Quevedo y los esteros Guayil, Macache y El Atascoso, cuyas características hidromorfológicas y propiedades fisicoquímicas se han deteriorado.

En la última década la cantidad y la calidad de recursos hídricos han disminuido significativamente, y se prevé el empeoramiento de las condiciones de las aguas superficiales a mediano y largo plazo. Este escenario ha configurado un importante problema ambiental relacionado con la calidad del agua superficial en el cantón, debido a que las descargas domésticas, industriales y agrícolas sin tratamiento previo constituyen las principales fuentes de contaminación hídrica en el cantón y el país [3]. En este contexto, el Aguas Claras se ha convertido en un receptor de residuos y efluentes domésticos; esta carga orgánica ha comprometido su calidad como ecosistema, disminuyendo su capacidad de autodepuración y conspirando, asimismo, contra la salud pública de los sectores por los que atraviesa.

El panorama descrito justifica la importancia de la aplicación de modelos matemáticos, los cuales permiten simular el comportamiento de la calidad del agua en una corriente natural, describir el estado ecológico de un sistema fluvial y predecir escenarios futuros cuando ciertas condiciones límite o iniciales se alteran. Estos cambios pueden deberse a modificaciones morfológicas en el cuerpo de agua, cambios en el tipo, cantidad y ubicación de la carga contaminante en el sistema, y los cambios en las condiciones meteorológicas debido a las tendencias cambiantes del clima.

La presente investigación estableció, además de las características hidromorfológicas, la variabilidad de las concentraciones del oxígeno disuelto y de la demanda bioquímica de oxígeno en el estero, y simuló el impacto de las descargas de aguas residuales en el comportamiento de tales parámetros, a través del uso del modelo matemático de Streeter-Phelps y el programa QUAL2K. La obtención de modelos calibrados que simulen adecuadamente las características de la corriente permitirá disponer de mejores elementos para la toma de decisiones relacionada con la regulación de la calidad del agua superficial y el control de la descarga de aguas residuales en el cantón.

2. Metodología

2.1. Identificación puntos de muestreo

Se consideró un segmento de 2,53 km, dividido de acuerdo a sus características hidromorfológicas y la presencia de aportes a la corriente principal, en tres tramos. Se identificaron dos afluentes: en el inicio del primer tramo, una descarga continua de aguas servidas provenientes de los sectores Los Chirijos, Juan de Dios Zarate y Divino Niño, en la parroquia 24 de Mayo; y en el segundo tramo, un riachuelo que se origina en el sector San José Sur.

El estero *Aguas Claras* llega hasta el sector La Virginia, donde desemboca en el estero Macache. En la Tabla 1 se muestra la información general de los tramos de modelización en el estero Aguas Claras.

Tabla 1.
Información general de los tramos de modelización en el estero Aguas Claras

Segmentación	Longitud (m)	Características
Tramo 1	1791	Recibe las aguas servidas provenientes de la parroquia 24 de Mayo
Tramo 2	544	Recibe el aporte del tributario principal.
Tramo 3	195	Recibe el aporte del tributario que tiene menos del 10% del caudal promedio multianual del tributario principal sin ningún aporte de cargas contaminantes

Fuente: Autores, 2017

Tabla 2.
Coordenadas de los puntos de muestreo

Estaciones de monitoreo		Coordenadas UTM Longitud E	Latitud N	Distancia desde la cabecera (m)
PM1	Aguas arriba	669319	9886799	0
PM2	Descarga 1	669297	9886783	0
PM3	Tramo 1	668291	9885644	1718
PM4	Tributario 1	668234	9885571	1791
PM5	Tramo 2	667871	9885300	2333
PM6	Tramo 3	667760	9885366	2495

Fuente: Autores, 2017

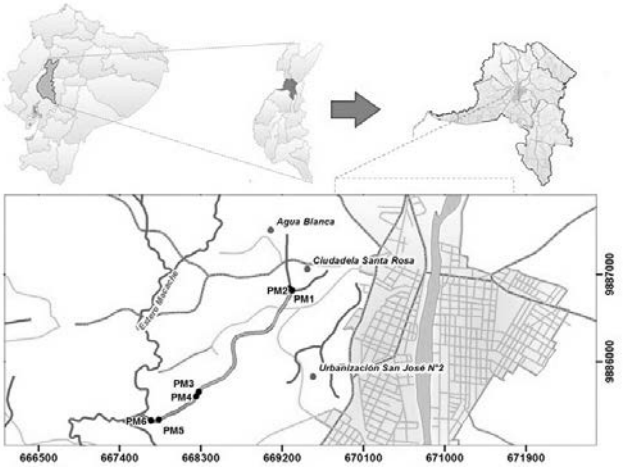


Figura 1. Ubicación geográfica del estero Aguas claras y ubicación de los puntos de muestreo.
Fuente: Instituto Geográfico Militar; Carta Topográfica Quevedo (Escala 1:50000), I.G.M., Quito 2013

Se establecieron seis puntos de muestreo, los cuales se detallan en la Tabla 2. Además, la Fig. 1 muestra la ubicación de los puntos de muestreo en el mapa urbano de Quevedo.

2.2. Determinación de las características hidromorfológicas

Se realizaron aforos quincenales durante los meses de octubre del año 2016 hasta el mes de febrero del año 2017, considerando la estación lluviosa y seca. Además, se hicieron mediciones de la profundidad de la corriente y del ancho de del cauce.

Para estimar el caudal se utilizó el método del flotador, el

cual consistió en determinar el área de la sección transversal de la corriente empleando estacas, flexómetro, cinta y cuerda; posteriormente, se determinó la velocidad de la corriente empleando una pelota de peso ligero, cuyo tiempo de traslado se midió con un cronómetro en una longitud de corriente uniforme que osciló entre ocho y diez metros. El valor de la velocidad de la corriente se obtuvo dividiendo la distancia seleccionada entre el tiempo del viaje del flotador. El caudal en los tramos de modelización, tributarios de aguas superficiales y descargas de aguas servidas se obtuvo, con base en la ecuación de continuidad, multiplicando el área de la sección transversal por la velocidad de la corriente.

$$\mathrm{Q} = \mathrm{A} \times \mathrm{V}$$

El área de la sección se obtuvo utilizando la siguiente integral definida:

$$\int_{X_0}^{X_f} f(z)\, dz \qquad (1)$$

Donde los límites inferior y superior de la integral, X_0 y X_f, son el inicio y el final del ancho del cauce; y $f(z)$ es la curva de ajuste resultante de la medición de la profundidad en las secciones transversales de los tramos modelizados.

2.3. Estimación de los parámetros fisicoquímicos requeridos para el modelo de calidad de agua

Simultáneamente a los aforos, se recolectaron muestras de agua en los seis puntos de muestreo identificados en la Tabla 2, considerando los criterios establecidos por las normas INEN 2176:1998, e INEN 2226:2000, sobre manejo y conservación de muestras, y técnicas de muestreo de aguas, respectivamente [4] [5].

Se realizaron análisis de los parámetros fisicoquímicos básicos: oxígeno disuelto (OD), demanda bioquímica del oxígeno (DBO), y temperatura del agua, en ocho campañas de muestreo. Se realizaron análisis de los parámetros fisicoquímicos básicos: oxígeno disuelto (OD), demanda bioquímica del oxígeno (DBO), y temperatura del agua, en ocho campañas de muestreo. El análisis de las muestras de las cinco primeras campañas se efectuó en el Laboratorio de Suelos y Agua de la Universidad Técnica Estatal de Quevedo, y los tres restantes en un laboratorio acreditado por el Servicio de Acreditación Ecuatoriano (SAE), con la intención de garantizar la confiabilidad de los resultados obtenidos en el laboratorio de la institución.

2.4. Modelización la calidad del agua del estero Aguas Claras aplicando las ecuaciones de Streeter-Phelps

2.4.1. Modelo de Streeter-Phelps

El oxígeno disuelto y la DBO en el estero *Aguas Claras*, se modelizaron a través de las ecuaciones establecidas en el modelo matemático de Streeter-Phelps, asumiendo fuentes puntuales y continuas de carga orgánica. Así, el déficit de oxígeno disuelto y la variación de la DBO última, L_x, se calcularon con las ecuaciones [6].

$$D_x = D_o(e^{-k_a t}) + \frac{k_d L_o}{k_a - k_r}(e^{-k_d t} - e^{-k_a t}) \qquad (2)$$

$$L_x = L_0 e^{(-k_r t)} \qquad (3)$$

Donde, D_x es el déficit de oxígeno disuelto a cualquier distancia aguas debajo de la corriente, D_o es el déficit inicial de oxígeno disuelto, L_o es la DBO última de la corriente, L_x es la variación espacial de la DBO última, k_a es la constante de reaireación, k_d es la constante de desoxigenación, k_r es la constante de remoción total de la DBO, y t es el tiempo de viaje de la corriente de agua.

El oxígeno disuelto a una distancia x aguas abajo se expresa como:

$$OD_x = OD_{sat} - D_x \qquad (4)$$

Donde, OD_{sat} es el oxígeno disuelto de saturación.

De conformidad con el protocolo de aplicación del modelo, en primer lugar, se determinaron las condiciones iniciales de cada tramo en el estero, mediante balances de masa, utilizando las medias de los caudales de cada descarga o tributario, y también de las concentraciones.

2.4.2. Determinación de las contantes cinéticas de desoxigenación, reaireación, y remoción total de la DBO

2.4.2.1. Contante de desoxigenación, k_d

Para la estimación de la constante de desoxigenación en cada tramo se utilizó la ecuación de Hydroscience (1971), propuesta para corrientes pocos profundas donde la degradación producida por las bacterias en el fondo es más pronunciada [6]:

$$\begin{array}{l} si\ 0 \le H \\ \le 2{,}4\ m \end{array} \qquad k_d = 0{,}3\left(\frac{H}{2{,}4}\right)^{-0{,}434} \qquad (5)$$

Donde, H es la profundidad del agua en el cauce

2.4.2.2. Constante de reaireación, k_a

En primera instancia, la constante de reaireación se determinó utilizando las fórmulas empíricas más utilizadas, en función de los rangos de profundidad (H) y velocidad de la corriente (U) [7], Tabla 3.

Otra de las fórmulas empíricas empleadas para calcular la constante de reaireación es la propuesta por Langbein y Durum (1967), empleados del US Geological Survey, quienes combinaron los datos del rio utilizados en las ecuaciones de O'Connor y Dobbins (1958), Churchill, Elmore, Buckingham (1962) con datos del laboratorios de Krenkel y Orlob (1963), de Streeter, Wright y Kerr (1936) [8]. Su expresión, recogida por Chapra (2008) es la siguiente:

Tabla 3.
Fórmulas para el cálculo de la constante de reaireación

Autores	Año	Características de la corriente	Ecuación
O'Connor y Dobbins	1958	0,30 m < H < 9,14 m 0,15 < U < 0,49 m/s	$k_a = 3{,}93\frac{U^{0,5}}{H^{1,3}}$
Churchill y otros	1962	0,61 m < H < 3,35 m 0,55 < U < 1,52 m/s	$k_a = 5{,}026\frac{U}{H^{1,67}}$
Owens, Gibbs y otros	1964	0,12 m < H < 0,73 m 0,03 < U < 0,55 m/s	$k_a = \frac{5{,}32 \times U^{0,67}}{H^{1,85}}$

Fuente: Bilibio C, Hensel O, Selbach J. Sustainable water management in the tropics and subtropics; 2011.

$$k_a = 5{,}13\left(\frac{U}{H^{1,33}}\right) \quad (69)$$

2.4.2.3. Contante de remoción total de la DBO, k_r

La estimación de la contante de remoción total de la DBO (k_r) se basó en la propuesta de Sierra (2013), que consistió en tomar las concentraciones de la DBO entre dos sitios de similares características hidromorfológicas, con la condición de que la DBO aguas arriba sea mayor que aguas abajo. La expresión matemática para calcula k_r se expresa como [9]:

$$k_r = v\left(\frac{\ln\frac{L_1}{L_2}}{x_2 - x_1}\right) \quad (7)$$

donde, L_1 y L_2 son los valores de DBO medidos aguas arriba y aguas abajo, respectivamente, en una sección de la corriente; x_2 y x_1 son las distancias a los puntos de muestreo considerados; y v es la velocidad promedio de la corriente en el tramo considerado.

2.4.2.4. Calibración del modelo de Streeter-Phelps

La calibración paramétrica se efectuó ajustando las constantes de reaireación (k_a), desoxigenación (k_d) y de remoción total de la DBO (k_r), empleando la metodología GLUE (*Generalized Likelihood Uncertainty Estimation*), la cual es utilizada en la calibración de modelos de calidad del agua, y su aplicación básicamente consiste en seleccionar rangos de variación de los parámetros, y luego, mediante simulaciones de Monte Carlo, generar combinaciones de valores de los parámetros, de modo que en términos de probabilidad, se identifiquen las combinaciones óptimas mediante una función objetivo, incluyendo la sensibilidad paramétrica [10]. Para tal efecto, a través de simulaciones de Monte Carlo se obtuvieron 10000 posibles combinaciones de los parámetros calibrados, con el fin de obtener valores de las constantes cinéticas que arrojen predicciones en el modelo con el mínimo error estadístico con respecto a los valores determinados en el campo y laboratorio. De esta manera se verificó la capacidad del modelo de Streeter-Phelps calibrado para predecir el oxígeno disuelto y la DBO.

2.5. Simulación la calidad del agua del estero Aguas Claras con software

Mediante el programa de calidad de agua superficial QUAL2K, versión 2.12, desarrollado por las USEPA (Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos), se obtuvieron curvas que simulan la variación del oxígeno disuelto y la demanda bioquímica de oxígeno a lo largo de la corriente del estero *Aguas Claras*.

QUAL2K se basa en ecuaciones diferenciales para sistemas unidimensionales y un flujo de estado estacionario. Es un modelo eficaz para simular la calidad del agua y las condiciones hidrológicas en ríos, así como en sistemas con cargas difusivas de contaminación. La base del cálculo del transporte de la masa contaminante se logra aplicando la integración numérica en tiempo y espacio para cada parámetro de calidad del agua. Esta ecuación incluye los efectos de advección, dispersión, dilución, reacciones de los componentes e interacciones, fuentes y vertimientos. Para todo contaminante C, esta ecuación puede escribirse como:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{Q_{i-1}}{V_i}C_{i-1} - \frac{Q_i}{V_i}C_i - \frac{Q_{ab,i}}{V_i}C_i + \frac{E_{i-1}}{V_i}(C_{i-1} - C_i) + \frac{E_i}{V_i}(C_{i+1} - C_i) + \frac{W_i}{V_i} + S_i \quad (8)$$

Donde, C_i es la concentración del contaminante; Q_i es el flujo en el iésimo segmento; Q_{ab} es la salida en el elemento i debido a extracción puntual o difusa; Vi: Volumen incremental del iésimo segmento; t es el tiempo; S_i son las fuentes y sumideros del constituyente debido a reacciones y mecanismos de transferencia de masa; E_i es el coeficiente de dispersión longitudinal entre segmentos i y $i + 1$; y, W_i es la carga externa del constituyente en el elemento i.

2.6. Tratamiento de datos

2.6.1. Análisis de rendimiento

Asimismo, se efectuó el análisis de rendimiento del modelo en la predicción del oxígeno disuelto y la DBO para determinar el error estadístico entre los valores medidos en el campo y los valores pronosticados, mediante el coeficiente de determinación R^2, el coeficiente de Nash-Sutcliffe (NSE), la suma de cuadrados del error (RSS, por sus siglas en inglés), y el error relativo [11], Tabla 4.

Tabla 4.
Medidas de bondad de Ajuste

Coeficiente de determinación R^2	$R^2 = \left(\frac{\sum_{j=1}^{N}(y_j - \bar{y})(\hat{y}_j - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{j=1}^{N}(y_j - \bar{y})^2}\sqrt{\sum_{j=1}^{N}(\hat{y}_j - \bar{y})^2}}\right)^2$
Índice de rendimiento de Nash-Sutcliffe	$NSE = 1{,}0 - \frac{\sum_{j=1}^{N}(y_j - \hat{y}_j)^2}{\sum_{j=1}^{N}(y_j - \bar{y})^2}$
Suma de cuadrados residuales de ajuste	$RSS = (y_j - \hat{y}_j)^2$
Error relativo	$RE = \frac{\lvert y_j - \hat{y}_j \rvert}{\hat{y}_j} \times 100$

Fuente: Chin DA. Water-Quality Engineering in Natural Systems: Fate and Transport Processes in the Water Environment; 2013

3. Resultados

3.1. Estimación de las constantes cinéticas

Se utilizó la fórmula de Owens y Gibbs (1964) para calcular la contante de reaireación, que considera corrientes con una profundidad mayor a 0,12 m y menor de 0,73 m, con velocidades que oscilen entre 0,03 y 0,55 m/s. Los valores obtenidos con este método variaron entre 8,1 d^{-1} hasta 38,0 d^{-1}, que de acuerdo al ajuste inicial del modelo de Streeter-Phelps, sobreestimaron la concentración de oxígeno disuelto y, por ende, la eficiencia de reaireación atmosférica en cada uno de los tramos; resultados similares reportó Rivera (2015) para la zona baja de la microcuenca del río Frío, cuya tasa de reaireación por este método fue de 45,04 d^{-1} [12]. Por lo anterior, la constante de reaireación fue recalculada con la fórmula de Langbein y Durum, siguiendo el criterio de Pazmiño (2015), quien obtuvo buenos resultados para una corriente de similares características. Así, los valores de la tasa de reaireación calculados con esta fórmula oscilaron entre 0,12 d^{-1} y 18,07 d^{-1} [13].

En los tres tramos de la corriente, la constante de reaireación fue mayor que la constante de desoxigenación, la cual oscilan entre 0,34 d^{-1} y 1.85 d^{-1}, una condición que indica un potencial de autodepuración alto, en especial en la temporada de lluvia. Los valores de la constante de reaireación y desoxigenaciónson similares al estudio realizado por Rivera (2015), quién establece que, en ríos con profundidades inferiores a un metro, la reaireación es significativa debido a la turbulencia generada por la alta rugosidad de tales corrientes someras, a pesar de no tener una gran interface de disolución [14]. La constante de remoción total de la DBO, k_r, obtuvo valores que oscilaron entre 1,38 d^{-1} y 28,04 d^{-1}, considerándose altos en comparación con el estudio realizado por Valcárcel y colaboradores (2010), quienes reportaron valores inferiores a 0,90 d^{-1} en el río Luyanó de La Habana, Cuba [15]. Sin embargo, Rivera (2011), argumenta que en sistemas de baja profundidad existe una mayor tasa de remoción de la DBO, lo que demuestra que se trata de efluentes relativamente sencillos de biodegradar [12].

Tabla 5.
Calibración paramétrica de las contantes cinéticas.

Fecha	Tramo	Contantes cinéticas			RSS OD	RSS DBO
		ka	kd	kr		
Octubre	1	5,81	1,32	4,86	1,38E-02	1,07E-01
	2	2,28	0,45	1,38	1,59E-05	1,98E-03
	3	7,37	1,17	28,04	5,49E-04	2,21E-05
Noviembre	1	6,18	0,68	20,40	2,52E-04	2,50E-04
	2	9,16	1,36	4,54	5,78E-04	1,27E-03
	3	13,81	1,83	7,54	1,41E-04	3,60E-05
Diciembre	1	7,61	1,47	1,80	8,90E-02	2,28E-01
	2	8,22	1,80	4,59	1,62E-03	2,38E-03
	3	6,88	0,80	6,18	2,61E-04	6,76E-04
Enero	1	9,18	1,76	9,63	9,72E-05	2,69E-04
	2	2,27	1,85	2,28	6,66E-06	1,48E-03
	3	16,75	1,17	24,17	1,34E-05	4,00E-08
Febrero	1	10,21	1,18	5,62	6,36E-04	9,67E-06
	2	0,12	1,79	2,13	2,25E+0	3,53E-01
	3	0,35	1,88	8,57	1,85E-01	7,80E-03

Fuente: Autores, 2017

3.2. Calibración de constantes ka, kd y kr

Con las simulaciones de Monte Carlo, aplicando el método GLUE, la calibración paramétrica de las tres constantes cinéticas del modelo de Streeter-Phelps obtuvo los resultados mensuales mostrados en la Tabla 5.

3.3. Comportamiento del oxígeno disuelto y la demanda bioquímica de oxígeno

La Tabla 6 muestra los datos de caudal, temperatura, oxígeno disuelto y DBO característicos de los aportantes a la corriente del estero Aguas Claras.

Así, el modelo de Streeter-Phelps, aplicado a partir de las condiciones iniciales resultante del balance de masas realizado con los datos de la Tabla 6, estimó concentraciones mensuales de oxígeno disuelto y DBO, los que se muestran comparativamente en la Tabla 7, con los valores medidos en el laboratorio, incluyendo el error relativo entre ambos.

A parir de los datos de la Tabla 7, se obtuvieron los perfiles de oxígeno disuelto y DBO, presentados en los Gráficos 1 al 10, que muestran las curvas con el ajuste inicial, el modelo calibrado, los puntos correspondientes a los valores medidos experimentalmente, y la relación en términos de error relativo, entre los valores observados y los estimados por el modelo.

Tabla 6.
Características de la cabecera, tributario y fuentes de los puntos de muestreo

	Fecha	Q (m^3/s)	T (ºC)	OD (mg/l)	DBOu (mg/l)
Corrientes aguas arriba	Octubre	0,043	24,6	1,33	65
	Noviembre	0,035	25,6	1,45	110
	Diciembre	0,016	25,6	3,58	50
	Enero	0,090	28.0	1,53	35
	Febrero	0,430	28,5	4,33	12
Descarga tramo 1	Octubre	0,011	24,7	2,22	38
	Noviembre	0,011	25,7	2,13	65
	Diciembre	0,003	25,7	2,00	40
	Enero	0,037	28,6	2,28	10
	Febrero	0,155	28,3	3,38	20
Tributario tramo 2	Octubre	0,008	24.0	6,67	10
	Noviembre	0,006	27,2	3,21	6
	Diciembre	0,007	29,8	3,00	4
	Enero	0,007	29,8	6,83	2
	Febrero	0,171	28,3	6,76	6

Fuente: Autores, 2017

Tabla 7.
Comparación de los valores observados de oxígeno disuelto y DBO y los predichos por el modelo de Streeter- Phelps

	Meses	Criterio	Tramo 1	Tramo 2	Tramo 3
OD	Octubre	Modelo	1,10	2,42	2,87
		Observado	1,22	2,41	2,85
		RE (%)	9,70	0,32	0,83
	Noviembre	Modelo	1,64	2,65	2,97

		Observado	1,66	2,63	2,98
		RE (%)	1,20	0,91	0,20
		Modelo	1,35	2,27	2,80
	Diciembre	Observado	1,30	2,40	2,80
		RE (%)	3,83	5,58	0,07
		Modelo	2,87	2,70	3,20
	Enero	Observado	2,88	2,70	3,20
		RE (%)	0,22	0,10	0,06
		Modelo	4,55	4,98	5,33
	Febrero	Observado	4,54	4,97	5,33
		RE (%)	0,14	0,24	0,07
		Modelo	20,3	16,0	10,0
	Octubre	Observado	20	16	10
		RE (%)	1,50	0,30	0,05
		Modelo	34,00	24,00	21,90
	Noviembre	Observado	34,00	24.00	22,00
		RE (%)	0	0,15	0,25
		Modelo	5,1	4,0	3,0
DBO	Diciembre	Observado	5	4	3
		RE (%)	2,00	0,39	0,02
		Modelo	14,00	11,96	10,00
	Enero	Observado	14,00	12	10
		RE (%)	0	0,29	0
		Modelo	7,00	5,99	5,96
	Febrero	Observado	7,00	6,00	6,00
		RE (%)	0	0,18	0,72

Fuente: Los autores, 2017

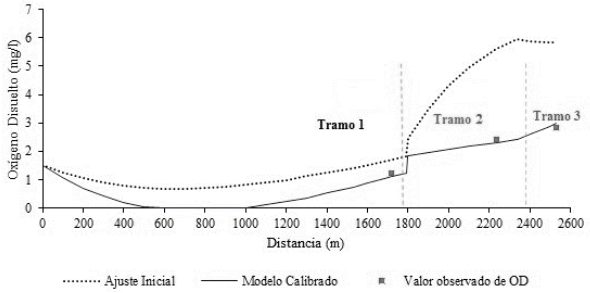


Gráfico 1. Perfil de OD en de octubre
Fuente: Los autores, 2017

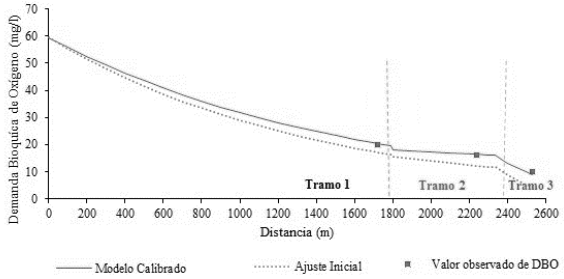


Gráfico 2. Perfil de la DBO en octubre
Fuente: Los autores, 2017

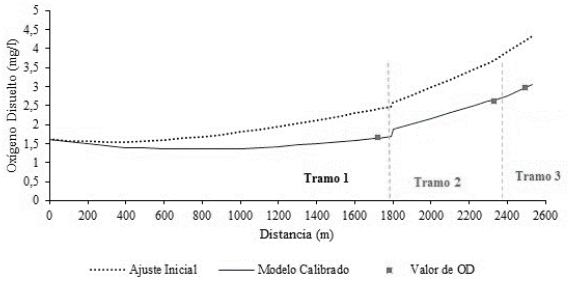


Gráfico 3. Perfil de OD en noviembre
Fuente: Los autores, 2017

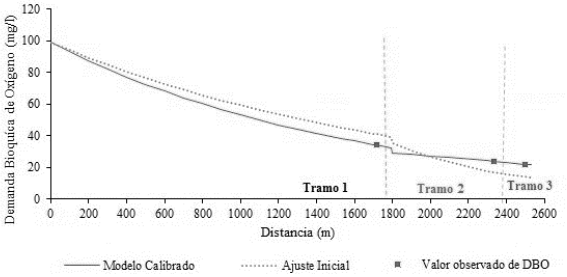


Gráfico 4. Perfil de la DBO en noviembre
Fuente: Los autores, 2017

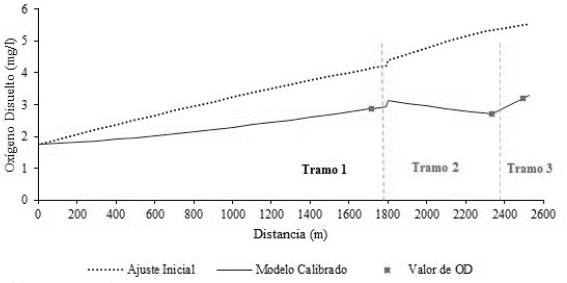


Gráfico 5. Perfil del OD en diciembre
Fuente: Los autores, 2017

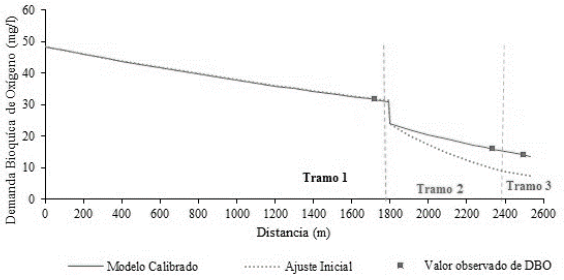


Gráfico 6. Perfil de la DBO en diciembre
Fuente: Los autores, 2017

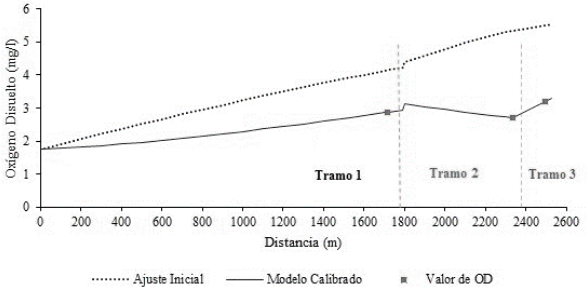


Gráfico 7. Perfil del OD en enero
Fuente: Los autores, 2017

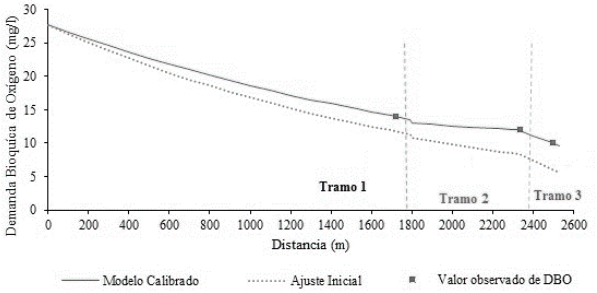


Gráfico 8. Perfil de la DBO en enero
Fuente: Los autores, 2017

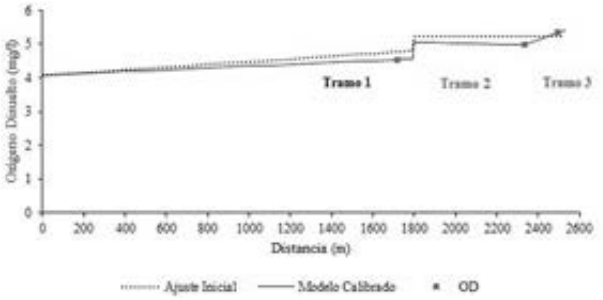


Gráfico 9. Perfil del OD en febrero
Fuente: Los autores, 2017

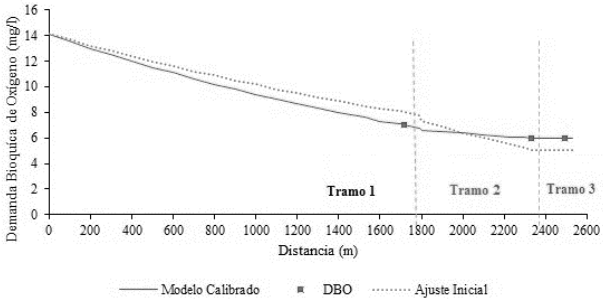


Gráfico 10. Perfil de la DBO en febrero
Fuente: Los autores, 2017

Los perfiles de oxígeno disuelto en los meses de la época seca mostraron la forma característica del perfil de oxígeno disuelto a lo largo del primer tramo, incluyendo un segmento de condiciones anaeróbicas de 500 m de longitud, como resultado del aporte de materia orgánica procedente de la descarga de aguas servidas en la parroquia 24 de mayo, que desploma la concentración de oxígeno disuelto por debajo del estándar ambiental (<80% de saturación), y que afecta el desarrollo de la vida acuática en el estero [16]. En los tramos dos y tres, la tendencia de recuperación de los valores de oxígeno disuelto se acentúa. Por el contrario, en los meses de la época lluviosa (enero y febrero), los perfiles describen un incremento sostenido del oxígeno disuelto en el tramo uno, desde su valor mínimo que ocurre en la descarga puntual; esto se debe al aumento de la tasa de reaireación promovida por las precipitaciones; sin embargo, en el segundo tramo, se produce un descenso del oxígeno disuelto a partir de la desembocadura del riachuelo del sector 17 de Marzo, que se explica por el mayor arrastre superficial de partículas y materia orgánica causado por el incremento del caudal en temporada de lluvias, incluyendo el incremento de la profundidad del cauce en el mencionado tramo. El tramo tres describe una recuperación del oxígeno disuelto, básicamente por ser el menos profundo y de mayor caudal y turbulencia mecánica [17].

El perfil de la DBO presenta una tendencia descendente a medida que la corriente avanza, a lo largo de los tramos modelizados, como consecuencia de los valores altos de la constante de remoción total de la DBO. No obstante, las curvas evidencian mayores niveles de DBO en el primer tramo en los meses de la época seca, principalmente noviembre (DBO inicial mayor a 100 mg/l), con respecto a los meses de la temporada lluviosa. Esta variación se explica en términos de la influencia del incremento considerable del caudal por las precipitaciones y la consecuente dilución mayor de la materia orgánica [17].

El método de simulación de Montecarlo permitió obtener valores calibrados de las constantes cinéticas, disminuyendo el error relativo entre las concentraciones de OD y DBO observadas en el campo y las estimadas por el modelo. Los resultados obtenidos se expresaron en términos de error relativo. Estos oscilaron entre 0,07% - 10% para el oxígeno disuelto, y de 0% a 8,51% para la DBO. Estos resultados concuerdan con el argumento de algunos modeladores, quienes afirman que el ajuste es aceptable cuando las diferencias entre los valores estimados por el modelo y los valores medidos son menores del 10% [9].

3.3.1. Análisis de rendimiento del modelo Streeter-Phelps

El rendimiento del modelo refleja un ajuste óptimo de los valores medidos, tanto para el oxígeno disuelto como para la DBO, tal como lo indican los valores del índice de eficiencia de Nash-Sutcliffe, y del coeficiente de determinación (Ver Tabla 8).

La calibración del modelo de Streeter-Phelps permitió reducir significativamente la diferencia entre valores observados en el campo y los valores predichos por el modelo. Así, en ambos

Tabla 8.
Rendimiento del modelo de Streeter-Phelps

Fecha de muestreo	OD		DBO	
	R^2	NSE	R^2	NSE
Octubre	0,999	0,990	0,990	0,998
Noviembre	0,999	0,999	0,999	0,999
Diciembre	0,999	0,998	0,999	0,998
Enero	0,999	0,999	1,000	1,000

Fuente: Autores, 2017

casos se obtuvo un valor promedio de 0,99 para el coeficiente de determinación y el índice de eficiencia de Nash-Sutcliffe.

3.4. Simulación de la calidad del agua con QUAL2K

En la simulación del oxígeno disuelto y la DBO por medio del programa QUAL2K, se emplearon los valores correspondientes a las distintas variables hidrodinámicas del estero, así como datos geográficos de la localidad, y valores de las constantes cinéticas (k_a y k_d) previamente calibradas. Además, se supuso que los valores de la DBO introducidos en el programa corresponden a la DBO rápida, y que la información relativa al régimen hidráulico del sistema se empleó la ecuación empírica de Manning. Todos los demás valores establecidos por defecto en la hoja de cálculo de datos sobre las constantes y coeficientes cinéticos se conservaron.

Los perfiles resultantes de la simulación (Gráficos 11 a 20), difieren ampliamente con el modelo de Streeter-Phelps en lo relacionado con la DBO. Sin embargo, en el caso del oxígeno disuelto, hay similitud en la tendencia descrita en los meses de enero y febrero; y con respecto a la variación de la DBO, la tendencia es similar a la obtenida con el modelo de Streeter-Phelps en los meses de la época seca. Por esto, al menos en el caso del oxígeno disuelto, y hasta que se pueda mejorar la calibración de la DBO en QUAL2K con más datos históricos y parámetros hidrodinámicos adicionales, la consistencia entre los resultados de QUAL2K con el modelo de Streeter-Phelps confirma la validez de utilizar a este último como una herramienta relativamente sencilla para modelizar la calidad del agua en el estero Aguas Claras [18].

Los resultados de la simulación computacional se muestran comparativamente para cada uno de los tramos y meses, en la Tabla 9.

Tabla 9.
Comparación de los valores observados con los estimados por el programa QUAL2K

	Meses	Criterio	Tramo 1	Tramo 2	Tramo 3
OD	Octubre	Modelo	1,80	2,10	2,20
		Observado	1,22	2,41	2,85
		RE (%)	32,2	14,8	29,6
	Noviembre	Modelo	1,90	1,95	2,00
		Observado	1,66	2,63	2,98
		RE (%)	12,6	34,9	49,0
	Diciembre	Modelo	1,30	1,90	2,20
		Observado	1,30	2,40	2,80
		RE (%)	0	26,3	27,3
	Enero	Modelo	2,55	2,40	2,70
		Observado	2,88	2,70	3,20
		RE (%)	12,94	12,50	18,52
	Febrero	Modelo	4,70	4,75	5,20
		Observado	4,54	4,97	5,33
		RE (%)	3,40	4,63	2,50
DBO	Octubre	Modelo	46,6	43,0	42,5
		Observado	20,0	16,0	10,0
		RE (%)	57,1	62,8	76,5
	Noviembre	Modelo	87,0	78,0	72,0
		Observado	34,0	24,0	22,0
		RE (%)	60,9	69,2	69,4
	Diciembre	Modelo	21,2	20,1	19,8
		Observado	5,0	4,0	3,0
		RE (%)	76,4	80,1	84,8
	Enero	Modelo	23,0	21,6	21,4
		Observado	14,0	12,0	10,0
		RE (%)	39,1	44,4	53,3
	Febrero	Modelo	12,4	11,2	11,1
		Observado	8,0	7,0	6,0
		RE (%)	35,5	37,5	45,9

Fuente: Autores, 2017

3.4.1. Análisis de rendimiento del software QUAL2K

El ajuste entre los valores medidos y los simulados con QUAL2K fue mejor en el caso del oxígeno disuelto, pero en menor medida con respecto al ajuste logrado con el modelo de Streter-Phelps. Los valores de DBO medidos no mostraron una adecuada bondad de ajuste.

El ajuste del oxígeno disuelto fue óptimo con respecto al coeficiente de determinación (R^2), alcanzando valores muy cercanos a 1, sin embargo, ocurrió lo contrario con el índice de Nash-Sutcliffe, dado que incluso presentó valores negativos. El ajuste de la simulación de la DBO es muy pobre por los bajos valores de R^2, pero sobre todo por los valores del índice NSE (ver Tabla 10).

Tabla 10.
Rendimiento del software QUAL2K en relación al oxígeno disuelto y DBO

Fecha de muestreo	OD		DBO	
	R^2	NSE	R^2	NSE
Octubre	1,00	0,40	0,75	-48,20
Noviembre	0,93	-0,58	0,94	-98,50
Diciembre	0,97	-0,58	1,00	0,08
Enero	0,97	-2,50	0,84	-36,89

Fuente: Autores, 2017

Los resultados del análisis de rendimiento responden a que el balance de masa que realiza el software QUAL2K incluye todos los aportes y salidas que se presentan en el tramo, es decir, se realiza en todo el tramo, mientras que el balance de masa el modelo de Streeter-Phelps se hace en único punto. De acuerdo con Formica et al., las diferencias entre el software QUAL2K y el modelo de Streeter-Phelps, se debe a las descargas difusas de origen antrópico causadas por la cercanía de las áreas urbana [19]. Situación similar presentaron Arroyave et al., quienes utilizaron el modelo QUAL2K para simular la calidad del agua del río Sinú, demostrando que la escasez de datos causa problemas de calibración, debido al gran número de parámetros susceptibles a ajustes y a la reducción del número de comparaciones experimentales [20].

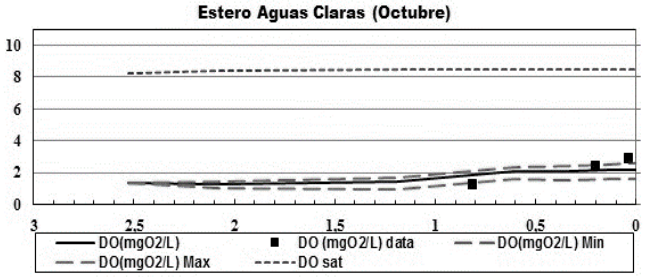


Gráfico 11. Simulación del OD con QUAL2K en octubre
Fuente: Los autores, 2017

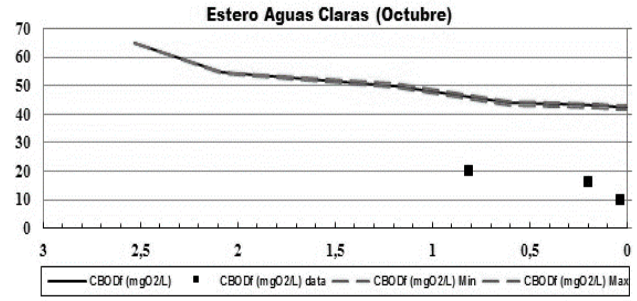


Gráfico 12. Simulación de la DBO con QUAL2K en octubre
Fuente: Los autores, 2017

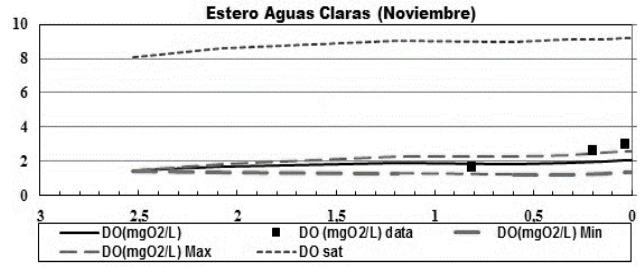


Gráfico 13. Simulación del OD con QUAL2K en noviembre
Fuente: Los autores, 2017

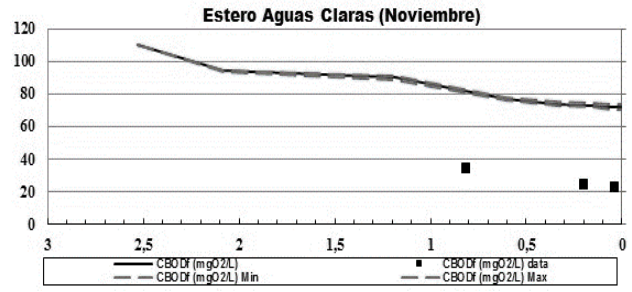


Gráfico 14. Simulación del OD con QUAL2K en noviembre
Fuente: Los autores, 2017

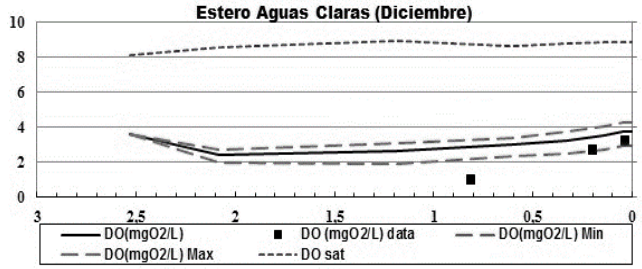


Gráfico 15. Simulación del OD con QUAL2K en diciembre
Fuente: Los autores, 2017

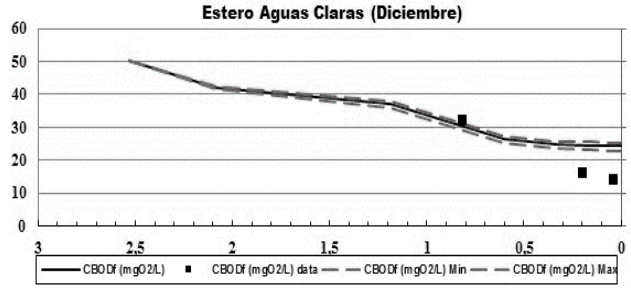


Gráfico 16. Simulación del DBO con QUAL2K en diciembre
Fuente: Los autores, 2017

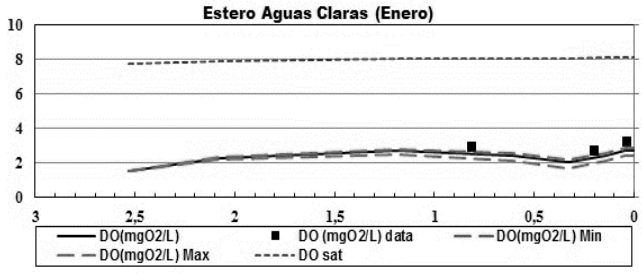


Gráfico 17. Simulación del OD con QUAL2K en enero
Fuente: Los autores, 2017

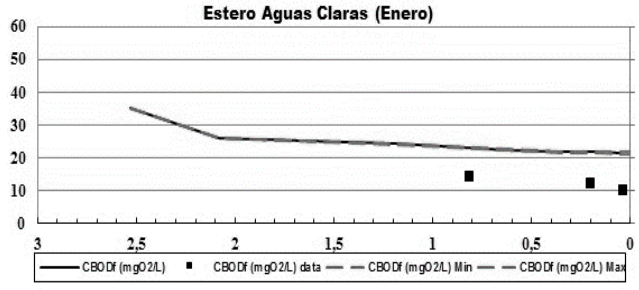


Gráfico 18. Simulación del DBO con QUAL2K en enero
Fuente: Los autores, 2017

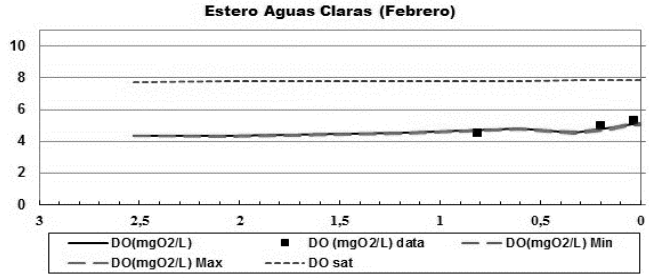


Gráfico 19. Simulación del OD con QUAL2K en febrero
Fuente: Los autores, 2017

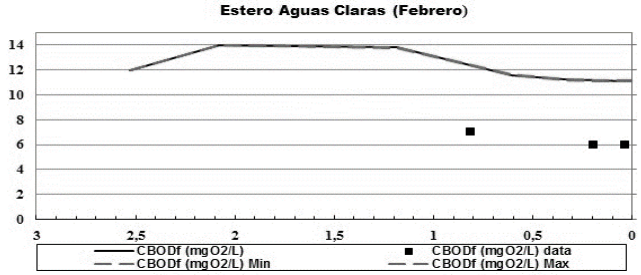


Gráfico 20. Simulación del DBO con QUAL2K en febrero
Fuente: Los autores, 2017

4. Conclusiones

- El perfil de oxígeno disuelto en el estero Aguas Claras demuestra que el impacto de la carga orgánica proveniente de las descargas de aguas residuales domiciliaria ocasiona que la concentración del parámetro disminuya por debajo del límite máximo permisible establecido en la normativa ecuatoriana (<80% de saturación), tanto en la estación seca como en la lluviosa, incluyendo la formación de una zona anaeróbica en el mes de menor caudal. Sin embargo, la capacidad de autodepuración del estero tiende a duplicar los valores de oxígeno disuelto en los dos últimos tramos con respecto al primero, lo cual está relacionado con valores altos de la constante de reaireación, de hasta dos órdenes de magnitud mayores con respecto a los usualmente reportados para corrientes superficiales.
- La disminución de la carga orgánica mostrada en los perfiles de la DBO evidencia el importante papel que desempeña la constante de remoción total en el proceso de autodepuración del estero, llegando a remover valores de materia orgánica cercanos al 50 % al final del último de los tramos evaluados.
- El análisis de rendimiento del modelo de Streeter-Phelps determinó un buen ajuste entre los valores medidos y los predichos, con valores promedios de 0,99 tanto para el coeficiente de determinación como para el índice de Nash-Sutcliffe.
- La simulación de los niveles de oxígeno disuelto con QUAL2K mostró un ajuste muy similar al observado en la modelización de Streeter-Phelps, por lo que, al comparar las predicciones, estas reflejaron un error menor al 40% en casi todos los casos. Las predicciones de la DBO en la simulación con QUAL2K, tuvieron un ajuste claramente menor, debido a la falta de información requerida por el software.

Referencias

[1] Departamento de Planificación de la Prefectura de Los Ríos, Sistema ecológico ambiental de la Provincia de Los Ríos, Plan de Desarrollo y Ordenamiento Territorial, 2011.
[2] Dirección de Planificación y Gestión Municipal del Cantón Quevedo, Plan de Desarrollo y Ordenamiento Territorial 2012-2016, 2014.
[3] Secretaria Nacional de Planificación y Desarrollo (Senplades), Plan Nacional para el Buen Vivir 2013-2017, 1ra Ed., Quito, 2013.
[4] INEN, NTE INEN 2176: Agua. Calidad de agua. Muestreo. Técnicas de muestreo, Quito, 1998.
[5] INEN, NTE INEN 2226: Agua. Calidad del agua. Muestreo. Diseño de los programas de muestreo, 2000.
[6] Chapra, S.C., Surface water-quality modeling, 2da Ed., Long Grove, Waveland PRESS, INC., 2008.
[7] Bilibio, C., Hensel, O. and Selbach, J., Sustainable water management in the tropics and subtropics, 2, Brasil: Board for editing, 2011.
[8] Kenneth, G., Geological survey professional paper, Washington: United States Goverment Printing Office, 1972.
[9] Sierra-Ramírez C.A., Calidad de agua: evaluación y diánostico, Bogotá: Ediciones de la U, 2011.
[10] Vargás, A., Estudio del comportamiento de modelos hidrológicos bajo un análisis de sensibilidad e incertidumbre, EIDENAR, [en línea] 1(10), 2011. [Fecha de consulta: 30 de agosto de 2017]. Disponible en: http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=231122666006
[11] Chin, D.A., Water-quality engineering in natural systems: Fate and transport processes in the water environment, 2da Ed., Canadá: John Wiley & Son, Inc. Publication, 2013.
[12] Rivera-Gutiérrez, J.V., Evaluación de la cinética de oxidación y remoción de materia orgánica en la autopurificación de un río de montaña, DYNA, 82(191), pp. 183-19, 2015. DOI: 10.15446/dyna.v82n191.44557
[13] Pazmiño-Rodríguez, J.C., Modelización de la incidencia del oxígeno disuelto y la demanda bioquímica de oxígeno en la calidad del agua del estero Atascoso, cantón Quevedo, Tesis MSc., Universidad de Guayaquil, Ecuador.
[14] Rivera-Gutiérrez, J.V., Evaluación de la materia orgánica en el río Frío soportada en el QUAL2K versión 2.07, DYNA, 78(169), pp. 131-139, 2011.
[15] Valcárcel-Rojas, L., Borroto-Portela, J., Alberro-Macías, N., Griffith-Martínez, J., Derivet-Zarzabal, M., Flores, P., Cuesta-Borges, J., Rodríguez-González, M., Herrero, Z., Rodríguez-Garcez, A. y Domínguez-Catasus, J., Modelación de la calidad del agua en el segmento medio del río Luyanó, NUCLEUS, 47, pp. 16-23, 2010.
[16] Montelongo-Casanova, R., Gordillo-Martínez, A.J., Otazo-Sánchez, E.M., Villagómez-Ibarra, J.R., Acevedo-Sandoval, O.A. y Prieto-García, F., Modelacón de la calidad del río Tula, Estado Hidalgo, México, DYNA, 75(154), pp. 5-18, 2008.
[17] Montes, R., Navarro, I, Domínguez, R. y Jiménez, B., Modificación de la capacidad de autodepuración del río Magdalena ante el cambio climático, Tecnología y Ciencias del Agua, [en línea]. 4(5), pp. 71-83, 2013. [Fecha de consulta: 13 de agosto de 2017]. Disponible en: http://www.scielo.org.mx/pdf/tca/v4n5/v4n5a5.pdf
[18] Fan, C., Ko, C.-H. and Wang, W.S., An innovative modeling approach using Qual2K and HEC-RAS integration to assess the impact of tidal effect on River Water quality simulation, Journal of Environmental Management, 90 (5), p. 1824-1832, 2009.
[19] Formica, S. M., Sacchi, G.A., Campodonico, V.A., Pasquini, A.I. y Cioccale, M.A., Modelado de calidad de agua en ríos de montaña con impacto antrópico. Caso de estudio: Sierra Chica de Córdoba, Argentina, Revista Ingenierías Universidad de Medellín, 31(4), pp. 327-341, 2015.
[20] Arroyave-Gómez, D.M., Toro-Botero, F.M., Moreno-Tovar A.A., Gallego-Suárez, D.J. y Carvajal-Serna, L.F., Estudio del modelamiento de la calidad del agua del río Sinú, Revista Ingenierías Universidad de Medellín, [en línea]. 12(22), pp. 3-44, 2013. Fecha de

consulta: 13 de agosto de 2017]. Disponible en: http://revistas.udem.edu.co/index.php/ingenierias/article/viewFile/621/562

J. Pazmiño-Rodríguez, es Ing. en Gestión Ambiental por la Universidad Técnica Estatal de Quevedo, Ecuador (2007), y MSc en Administración Ambiental por la Universidad de Guayaquil, Ecuador (2015). Docente de la Facultad de Ciencias Ambientales (desde 2011) con experiencia y habilidades en calidad ambiental; imparte asignaturas de praxis profesional tales como modelización de la calidad del agua, modelos de dispersión del aire, y tratamiento de aguas residuales.
ORCID: 0000-0001-6339-8245

G. Zambrano-Ganchozo, es Ing. en Gestión Ambiental en 2017 de la Universidad Técnica Estatal de Quevedo (UTEQ), Ecuador.
ORCID: 0000-0001-6002-5507

H. Coello-Burgos, es Ing. en Gestión Ambiental en 2017 de la Universidad Técnica Estatal de Quevedo (UTEQ), Ecuador.
ORCID: 0000-0002-2949-7140

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Medio Ambiente

Oferta de Posgrados

Especialización en Aprovechamiento de Recursos Hidráulicos
Especialización en Gestión Ambiental
Maestría en Ingeniería Recursos Hidráulicos
Maestría en Medio Ambiente y Desarrollo
Doctorado en Ingeniería - Recursos Hidráulicos
Doctorado Interinstitucional en Ciencias del Mar

Mayor información:

E-mail: acma_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5105

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Adoption's problems of information technology service management models. A systematic literature review

Karin Ana Melendez-Llave & Abraham Eliseo Dávila-Ramón

Departamento de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica del Perú, Lima, Perú. kmelendez@pucp.edu.pe, abraham.davila@pucp.edu.pe

Received: April 20th, 2016. Received in revised form: November 21th, 2017.Accepted: December 11th, 2017

Abstract
Information technologies service management (ITSM) models have developed due to the increasing use of information technologies in order that organizations can deliver services efficiently and with a higher level of quality. However, models' compliance has not been an easy job and the organizations have found problems achieving partial adoptions. The aim of this study is to analyze the problems that organizations had in the adoption of an ITSM model. To achieve this goal a systematic literature review was performed. The review confirmed that only some processes had adopted by the companies. The analysis shows us that more recurrent difficulties are lack of commitment from senior management and lack of knowledge about the ITSM model and its benefits.

Keywords: service management information technology; ISO / IEC 20000; ITIL; CMMI-SVC.

Problemas en la adopción de modelos de gestión de servicios de tecnologías de información. Una revisión sistemática de la literatura

Resumen
Ante el creciente uso de las tecnologías de información se han desarrollado modelos de gestión de servicios de tecnología de información (GSTI) con la finalidad que las organizaciones puedan ofrecer servicios de manera eficaz y con mayor nivel de calidad. Sin embargo, el cumplimiento de estos modelos no ha representado un trabajo fácil y las organizaciones han encontrado diversos problemas logrando adopciones parciales. El objetivo del estudio es analizar los problemas que las organizaciones han tenido en la adopción de un modelo de GSTI y para ello se ha realizado una revisión sistemática de la literatura. En la revisión se encontró que sólo algunos procesos fueron adoptados como parte de la implementación de los modelos y del análisis realizado podemos mencionar que las dificultades más recurrentes son: la falta de compromiso de la alta dirección y la falta de conocimiento sobre los modelos de GSTI y sus beneficios.

Palabras clave: gestión de servicios de tecnología de información; ISO/IEC 20000; ITIL; CMMI-SVC.

1. Introducción

Hacia finales de la década de los noventa aparecieron las primeras versiones de los modelos de Gestión de Servicios de Tecnologías de Información (GSTI): ITIL [1], COBIT [2], ISO/IEC 20000 [3] y CMMI-SVC [4], entre otros. Estos modelos surgieron como respuesta a la creciente demanda sobre el uso de las tecnologías de información y la necesidad de gestionar sus operaciones diarias.

Los servicios de tecnologías de información (TI) pueden ser conceptualizados como un conjunto de herramientas, aplicaciones o procesos, que permiten dar soporte a los negocios de una organización [3], entre ellos se puede mencionar los sistemas de software en línea como los ERP, sistemas BigData, Business Process Outsourcing (BPO), etc. La gestión de servicios está determinada por un grupo de capacidades y procesos que permiten controlar las actividades del proveedor de servicios y el cumplimiento con los requisitos del servicio [3]. Tener la capacidad de gestionar todo lo necesario para garantizar un buen nivel de calidad en los servicios que ofrece es cada vez más crítico y en algunos contextos se vuelve condicionante para crecer [5]. Esta situación ha presionado a las organizaciones a adopten los modelos de GSTI según sus propias necesidades de gestión

How to cite: Melendez-Llave, K and Davila-Ramón A., Problemas en la adopción de modelos de gestión de servicios de tecnologías de información. Una revisión sistemática de la literatura. DYNA, 85(204), pp. 215-222, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

[5]. Sin embargo, algunos autores [5,6,7], mencionan que las organizaciones encuentran demasiada complejidad en los modelos de GSTI, razón por la cual los adoptan de manera parcial.

En una revisión preliminar de la bibliografía sobre taxonomías o clasificación de problemas de GSTI no se encontró ningún estudio al respecto. Sin embargo sí se encontró propuestas para el contexto del desarrollo de software; por lo que, en este estudio, se optó por determinar la aplicabilidad de al menos uno de ellos al contexto de la GSTI. Para justificar esta decisión se consideró que ambos contextos corresponden al de mejora de procesos.

En este trabajo se presenta una revisión sistemática de la literatura que permita identificar los problemas que las organizaciones han tenido en el momento de la adopción de algún modelo de GSTI. El artículo se organiza de la siguiente manera: en la Sección 2, se presentan modelos de procesos para la GSTI; en la Sección 3, se describe la revisión sistemática de la literatura, así como las actividades realizadas para su aplicación; la Sección 4, muestra una síntesis de los resultados, así como el análisis de los resultados; y la Sección 5, contiene la discusión final y recomendaciones para trabajos futuros.

2. Marco de referencia

Para el presente estudio se consideró los siguientes modelos y los clasificadores de problemas en adopción.

2.1. Modelos de GSTI

Los modelos de GSTI son una colección de buenas prácticas que sus creadores han recogido como experiencias obtenidas en las organizaciones [3]. Estos modelos intentan ayudar a las organizaciones sobre cómo pueden gestionar, de manera eficaz, los servicios de TI que brindan o que utilizan [8,9]. A continuación, se describen algunos de los modelos más usados:

a. ITIL(Information Technology Infrastructure Library) es una estándar de facto del mercado que define los requisitos, habilidades y actividades organizacionales que permitan la gestión de las tecnologías de información y su infraestructura [10]. La primera versión se publicó en 1989 y hoy se encuentra en la versión 3 [1]. En ITIL se establecen directrices para la gestión de servicios a lo largo del ciclo de vida [1]. Las directrices se encuentran expresadas como un conjunto de procesos, los cuales se ejecutan según la etapa del ciclo de vida de un servicio: Estrategia del servicio, Diseño del servicio, Transición del servicio, Operación del servicio y Mejora continua del servicio [10].
b. ISO/IEC 20000 es un estándar que muestra un enfoque en procesos integrando un sistema de gestión, diseño, operación, configuración de los servicios y relaciones con los clientes o usuarios de los servicios [3].
c. COBIT es un marco de trabajo para la gobernabilidad y la gestión de las TI en una organización [2]. Está compuesto de prácticas y principios referidos a la gestión y gobierno de las TI de una empresa [2]. Integra prácticas de ITIL y normas ISO relacionadas a su objetivo [2].
d. CMMI-SVC es una colección de buenas prácticas agrupadas en 24 áreas de proceso para gestión de servicios de TI y 4 categorías de procesos: Proyectos y gestión del Trabajo, Soporte, Establecimiento y Entrega del Servicio, y Gestión de Procesos [4]. El modelo permite a las organizaciones cubrir actividades necesarias para establecer, entregar y gestionar los servicios de TI [4].

2.2. Clasificadores de problemas de adopción de modelos de software

Con la finalidad de lograr una mejor síntesis de los hallazgos que se vayan encontrando, se revisaron algunos Factores Críticos de Éxito (FCE) en mejora de procesos presentados en los estudios [11,12,13] y así mismo la taxonomía de FCE presentada por [14] también para mejora de procesos de software.

Los clasificadores considerados para este trabajo se presentan a continuación, asignándole una abreviatura a cada uno de los factores para facilitar su posterior uso:

a. Niazi et al. [11], determina un conjunto de FCE en la implementación de mejora de procesos de software. Dichos FCE han sido obtenidos por medio de un trabajo empírico basado en entrevistas a profesionales (desarrolladores, jefes, gerentes de proyecto y directores, entre otros). Esta propuesta comprende los siguientes 22 FCE: Compromiso de la alta dirección (CAD), Formación (FOR), Conciencia (CON), Asignación de recursos (ARE), Personal con experiencia (PEX), Metodología de implementación de SPI – del inglés de software process improvement- definido (MET), Participación del personal (PPE), Facilitadores (FAC), Comunicación (COM), Gestión de proyectos (GPR), Seguro de calidad (SCA), Documentación formal (DFO), Revisores (REV), Herramientas automatizadas (HER), Cultura de la empresa (CEM), Satisfacción del cliente (SCL), Agentes de aplicación externos (AAE), Secuencia u orden de ejecución SPI lógico (SOE), Medición (MED), Adaptación de las iniciativas de mejora (AIM), Relación formalizada entre los equipos de desarrollo (RFE), Moral del personal elevada (MPE).
b. Trujillo et al. [12] hacen su propuesta sobre la base del estudio de las dificultades de las organizaciones en la mejora de procesos de software, además de encuestas realizadas, los autores identificaron 18 FCE: Apoyo de la alta gerencia (AAG), Compromiso de la alta gerencia (CAG), Disponibilidad de recursos (DRE), Formación del personal (FPE), Experiencia del personal (EPE), Establecimiento y dominio de los objetivos (EDO), Gestión de cambio (GCA), Motivación del personal (MPE), Compromiso del personal (CPE), Colaboración (COL), Conciencia de los beneficios (CBE), Comunicación (COM), Enfoque a procesos (EPR), Cultura del trabajo en equipo (CTE), Enfoque a la mejora continua (EMC), Estabilidad interna de la organización (EIO), Herramientas de apoyo a los procesos (HAP), Adecuación de los procesos (APR).
c. Bayona et al. [13] realizaron una revisión sistemática de literatura sobre los FCE en la mejora y despliegue de procesos, logrando identificar los siguientes:

Compromiso (COM), Formación al personal (FPE), Alineados con los objetivos (AOB), Definición de procesos (DPR), Objetivos claros (OCL), Roles y responsabilidades bien definidas en el proyecto (RRE), Participación en la definición y revisión de procesos (PDR), Cultura organizacional (COR), Conocimientos y habilidades (CHA), Experiencia del personal en los procesos (EPP), Metodología de despliegue (MDE), Gestión del cambio (GCO), Comunicación/Colaboración (COC), Motivación/Satisfacción (MSA).

d. Bayona et al. [14] realizaron el trabajo basado en una taxonomía para clasificar FCE obtenidos de revisiones sistemáticas, experiencias y conocimientos de expertos. Entre los FCE descritos están: 1) Organización: Alineación con la estrategia de negocios y objetivos (AEN), Compromiso (COM), Visión corporativa (VCO), Infraestructura (INF), Políticas (POL), Cultura organizacional (COR), Estándares y procedimientos (EPR), Aprendizaje organizacional (AOR); 2) Personas: Entrenamiento (ENT), Comunicación (COM), Habilidades (HAB), Participación del personal (PPE), Gestión de cambios (GCA), Roles y responsabilidades (RRE), Liderazgo (LID), Conocimiento (CON), Actitud (ACT), Valores (VAL), Trabajo en equipo (TRE); 3) Proceso: Definición de procesos (DPR), Librería de activos de proceso (LAP), Proceso de implementación (PIM), Institucionalización (INS); 4) Producto: Auditoría de calidad (ACA), Calidad de producto (CPR); 5) Otros: Globalización del mercado (GME).

3. Realización de la revisión sistemática de la literatura

La Revisión Sistemática de la Literatura (RSL) permite realizar un estudio a profundidad para determinar la respuesta a una pregunta de investigación. Kitchenham [15] define tres pasos principales que permiten realizar un proceso de RSL formal, riguroso y fiable de investigación (ver Fig. 1) y que incluye: (1) Planificación de la revisión, (2) Ejecución de la revisión, y (3) Reporte de la revisión.

3.1. Planificación de la revisión

3.1.1. Definir la pregunta de investigación

Para la realización de este estudio se estableció las siguientes preguntas de investigación (PI) que se pueden ver en la Tabla 1.

3.1.2. Protocolo de la revisión

Para la obtención de los estudios que formarán parte de nuestra revisión se definió y ejecutó el siguiente protocolo:

a. Criterios de exclusión e inclusión: a continuación, se describen los criterios para la selección de estudios:

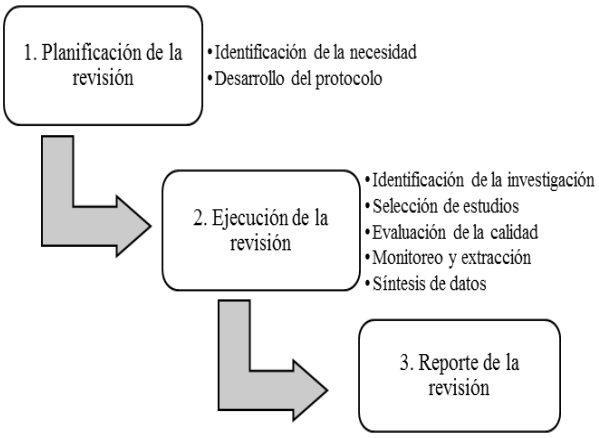


Figura 1. Proceso RSL.
Fuente: Adaptado de [15]

Tabla 1.
Preguntas de investigación.

Pregunta	Motivación
PI 1. ¿Qué problemas podemos encontrar al adoptar un modelo de gestión de servicios de TI?	Conocer con que problemas o dificultades se enfrentan las organizaciones (ya sean empresas o unidades organizacionales) cuando intentan seguir las buenas prácticas de los modelos, marcos de trabajo o procesos sobre gestión de servicios de TI.
PI 2. ¿Qué procesos de los modelos conocidos son los frecuentemente adoptados para gestión de servicios de TI?	Conocer qué procesos de los modelos que frecuentemente las organizaciones intentan adoptar de manera total o parcial son adoptados y en cuáles encontraron dificultades.

Fuente: Elaboración propia

- Criterio de exclusión (CE). Se consideró de esta manera a:
  - (CE1) Todos aquellos estudios repetidos.
  - (CE2) Estudios que no pertenezcan a ponencias de conferencias o revistas científicas indexadas.
  - (CE3) Estudios escritos en idiomas diferentes al inglés o español.
- Criterio de inclusión (CI). Se incluyen aquellos estudios que cumplan con lo siguiente:
  - (CI1) Estudios que pertenezcan a librerías digitales.
  - (CI2) Títulos del estudio obtenido que guarden relación directa con las PI.
  - (CI3) Resúmenes de cada estudio que podrían ayudar a dar respuesta a las PI.
  - (CI4) Contenido de cada estudio que contribuye a responder las PI.

b. Procedimiento para selección de estudios: Se realizó en dos etapas:
- Primera etapa. Se inició con la ejecución de la cadena de búsqueda y luego se aplicó los criterios: CI1, CI2, CE2 y CE3.
- Segunda etapa. Sobre el subconjunto de estudios restantes se aplicó los criterios: CE1, CI3 y CI4, luego obteniendo un grupo de estudios primarios.

c. Verificación de la calidad del estudio (VC): Para la evaluación de la calidad de los estudios primarios se

consideró que deben satisfacer las siguientes preguntas:

- (VC1) ¿El estudio primario contribuye a dar respuestas a las preguntas de investigación?
- (VC2) ¿El estudio primario contiene referencias a estudios publicados en revistas, conferencias o congresos?
- (VC3) ¿El estudio está basado en una investigación?
- (VC4) ¿Existe una declaración clara de los objetivos de la investigación?
- (VC5) ¿El estudio primario presenta un protocolo de investigación empírico directo (estudio de caso, propuestas comprobadas, ciencia del diseño) o indirecto (encuesta) y revisiones de literatura?
- (VC6) ¿Fue el análisis de datos suficientemente riguroso?
- (VC7) ¿Hay una declaración clara de los resultados?

3.1.3. Definición de la cadena de búsqueda

Para elaborar la cadena de búsqueda se optó por usar PICO (Población, Intervención, Comparación, Resultados) [16] en un proceso iterativo dónde se hicieron algunos ajustes según los resultados y las librerías digitales consultadas a manera de comprobación inicial:

Estas cadenas incluían una combinación de los siguientes elementos:

a. Población: Corresponde a los elementos que son objeto de revisión. Para este estudio son los modelos, marcos de trabajo o sistemas de gestión de servicios de TI.
b. Intervención: Refiere a los elementos que se evalúan en la población bajo revisión. Para este estudio se trata de experiencias de adopción de los modelos de servicios, sin entrar al detalle del tipo servicio de TI para lograr una mayor amplitud de resultados.
c. Comparación: Se refiere a los elementos que permiten comparar las intervenciones. Para este estudio no fue necesario.
d. Resultados: Se trata de la información que se espera obtener de la investigación. En nuestro caso es la información sobre los problemas presentados en la adopción de los modelos de servicios en las organizaciones.

3.2. Ejecución de la revisión

La cadena de búsqueda estuvo representada como: Población AND Intervención AND Resultados y fue ejecutada con los términos mostrados (en su versión en Inglés) en la Tabla 2.

Las búsquedas se realizaron en el mes de diciembre del 2017. Las librerías digitales consultadas fueron:

- EBSCO (https://www.ebscohost.com/)
- IEEE Xplore (http://ieeexplore.ieee.org/)
- ProQuest (http://search.proquest.com/)
- ScienceDirect (http://www.sciencedirect.com)
- Scopus (http://www.scopus.com/)

3.2.1. Selección de estudios

De los resultados de las búsquedas se obtuvo un total de 752 estudios. Luego de pasar por las dos primeras etapas del protocolo de la revisión obtuvimos un total de 23 estudios primarios, tal como se muestra en la Tabla 3.

Tabla 2.
Estructura PICO.

Elemento	Términos
Población	("ITIL" or "CMMI-SVC" or "20000" or "MOF" or "COBIT" or "IT service management" or "IT infrastructure library" or "ITSM")
Intervención	("adoption" or "implementation" or "management" or "operation" or "support")
Resultados	("critical factors" or "failure causes" or "problems" or "difficulties" or "adoption" or "postmortem analysis")

Fuente: Elaboración propia

Tabla 3.
Total de estudios primarios seleccionados.

Librería Digital	Descubiertos	Etapa 1 CI1-CI2-CE2-CE3	Etapa 2 CE1-CI3-CI4
EBSCO	231	44	7
IEEE Explore	153	13	4
ProQuest	131	19	6
ScienceDirect	104	21	3
Scopus	133	16	3
Total	**752**	**113**	**23**

Fuente: Elaboración propia

Tabla 4.
Distribución de estudios en conferencias y revistas.

	Estudios primarios
Conferencia	[17], [18], [19], [20], [21], [6], [22], [23], [24]
Revista	[8], [25], [26], [27], [28], [5], [29], [9], [30], [31], [32], [33], [34], [35]

Fuente: Elaboración propia

Tabla 5.
Protocolos de investigación de los estudios primarios.

Protocolo	Estudios primarios
Ciencia del diseño	[6]
Encuesta	[18], [25], [5], [29], [34], [23]
Entrevista	[26], [9], [22]
Estudio de caso	[8], [27], [19], [20], [28], [5], [31], [32], [33], [24]
Revisión de literatura	[17], [21], [30], [32], [35]

Fuente: Elaboración propia

Los estudios primarios seleccionados fueron validados según los criterios de verificación de la calidad. Los 23 estudios provienen de ponencias en conferencias y revistas indexadas (Tabla 4). Se pudo encontrar que el protocolo más empleado en los estudios primarios fue el estudio de caso (Tabla 5) los cuales contribuyeron en el mayor número de problemas de adopción identificados.

3.2.2. Monitoreo y síntesis de los datos:

Considerando los años de publicación de los estudios seleccionados, se encontró que en el 2012 y 2013 se presentó un mayor número de publicaciones (ver Fig. 2), lo que se relaciona con las publicaciones de ITIL v3.0 (2011), ISO/IEC 20000 (2011) y CMMI SVC (2010).

Luego de la revisión de los 23 estudios primarios sobre la adopción de modelos en GSTI, se extrajeron un total de 28

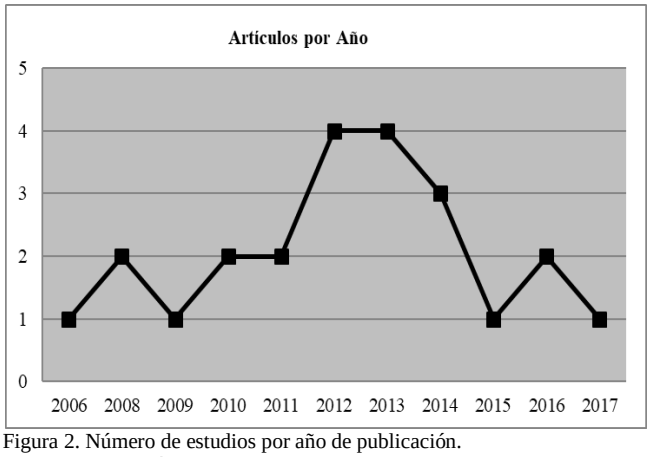


Figura 2. Número de estudios por año de publicación.
Fuente: Elaboración propia

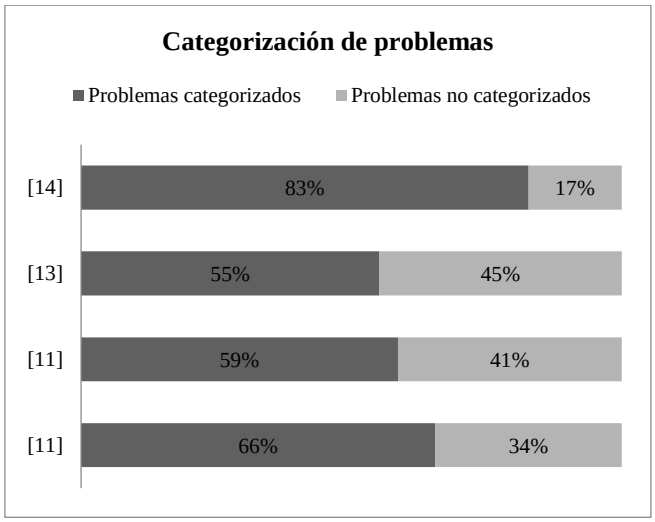


Figura 3. Categorización de problemas versus FCI.
Fuente: Elaboración propia

problemas o dificultades. La determinación de los problemas se obtuvo en algunos casos de manera explícita y en otros se infirió por el contexto de lo expresado en el estudio.

A fin de sintetizar y ver alguna forma de clasificación para un mejor análisis de los resultados, se optó por categorizar el conjunto de problemas según los FCE de la Sección 2.2. Tal como se muestra en la Tabla 6, se puede observar que la mayor cantidad de problemas encontrados en la RSL pueden ser categorizados según la taxonomía [14] (83% según se muestra en la Fig. 3). Por lo anterior la taxonomía de Bayona & otros [14] fue seleccionada para el presente trabajo. Si bien los FCE fueron tomados del contexto del desarrollo de software, se puede observar que varios de ellos son aplicables al contexto de GSTI, como es el caso del "compromiso de la dirección" o "recursos", entre otros.

4. Reporte de la revisión

Como resultado de la Revisión Sistemática de la Literatura se procede a responder las preguntas de investigación:

Tabla 6.
Problemas respecto de las taxonomías identificadas.

Problemas	**Niazi et al.** [11]	**FCE** **Trujillo et al.** [12]	**Bayona et al.** [13]	**Bayona et al.** [14]
Costos adicionales incurridos en la implementación	GPR	---	---	---
Costos elevados en la GSTI	GPR	---	---	---
Falta de compromiso de la dirección	CAD	CAG	COM	VAL
Falta de estrategias	GPR	EIO	---	AEN
Falta de recursos	GPR	DRE	---	INF
Limitados recursos de tiempos y financieros	GPR	DRE	---	INF
Dificultad para comprender el modelo	PEX	---	FPE	DPR
Dificultades para seleccionar procesos	---	---	EPP	DPR
Falta de conciencia sobre ITSM	FOR	CBE	EPP	ENT
Falta de conocimiento de los beneficios y/o del modelo	---	CBE	---	---
Falta de entrenamiento	FOR	FPE	FPE	ENT
Resistencia al cambio	---	GCA	GCO	GCA
Modelos difíciles de adoptar en organizaciones medianas y pequeñas	MET	---	---	PIM
Modelos sin directrices para su adopción	---	---	---	PIM
Estándares, modelos y protocolos complejos	MET	---	---	PIM
Falta de técnicas y herramientas adecuadas	GPR	HAP	---	INF
Las áreas de TI no tienen suficiente conocimiento de los negocios de las organizaciones	---	EDO	AOB	AEN
Comunicación de resultados	COM	COM	COC	COR
Falta de indicadores para medir los resultados de la adopción	MED	---	---	PIM
Falta de retroalimentación	GPR	---	---	AOR
Sobrecarga de trabajo	GPR	---	---	---
Falta de involucramiento	CAD	CAG	POR	PPE
Falta de motivación	PPE	MPE	MSA	PPE
Dependencia de la trayectoria y contexto de la organización	---	EDO	AOB	AEN
Organizaciones de TI complejas	---	EDO	OCL	AEN
Falta de competencias y habilidades	---	FPE	FPE	HAB
Falta de gestión de personal	GPR	MPE	RRE	POL
La mejora no es percibida rápidamente por los clientes	GPR	EMC	MSA	---

Fuente: Elaboración propia

Tabla 7.
Problemas categorizados según Taxonomía de Bayona & otros [14].

Problema	Referencia
Categoría: Organización	
Falta de estrategias	[18]
Falta de recursos	[5], [6], [34], [18] [35]
Limitados recursos de tiempos y financieros	[18], [25], [27] [23]
Falta de técnicas y herramientas adecuadas	[31]
Las áreas de TI no tienen suficiente conocimiento de los negocios de las organizaciones	[17], [19]
Dependencia de la trayectoria y contexto de la organización	[20]
Organizaciones de TI complejas	[17]
Comunicación de resultados	[26]
Falta de gestión de personal	[25]
Falta de retroalimentación	[19], [21]
Categoría: Personas	
Falta de compromiso de la dirección	[25], [26], [27], [31], [34]
Resistencia al cambio	[19], [18]
Falta de involucramiento	[29], [31]
Falta de motivación	[9]
Falta de conciencia sobre ITSM	[5], [35]
Falta de entrenamiento	[18], [25], [26]
Falta de competencias y habilidades	[26], [19], [5], [34] , [35]
Categoría: Procesos	
Dificultades para seleccionar procesos	[9], [35]
Modelos difíciles de adoptar en organizaciones medianas y pequeñas	[28]
Modelos sin directrices para su adopción	[30]
Estándares, modelos y protocolos complejos	[5], [32], [35]
Falta de indicadores para medir los resultados de la adopción	[8], [19], [33], [22]
Dificultad para comprender el modelo	[21], [23]
Otros	
La mejora no es percibida rápidamente por los clientes	[8], [27]
Costos adicionales incurridos en la implementación	[8]
Costos elevados en la GSTI	[6]
Sobrecarga de trabajo	[5]
Falta de conocimiento de los beneficios y/o del modelo	[8], [18], [9], [6], [31]
Totales	
28 problemas	20 estudios primarios

Fuente: Elaboración propia



Figura 4. Clasificación de los problemas aplicando la taxonomía de [14]. Fuente: Elaboración propia

4.1. PI1. Problemas en la adopción

De la Taxonomía descrita por [14] podemos ver que para el despliegue de los procesos de GSTI, los problemas que se presentan (Tabla 7) están referidos o dependen principalmente de la Organización (36%) que se refleja en la Fig. 4.

Entre los problemas más resaltantes que dependen de la organización tenemos: (1) la falta de recursos, (2) limitados recursos de tiempo y financieros, ambos son necesarios de resolver para una implementación de procesos, ya que como todo proyecto, es necesario contar de recursos y presupuesto para llevarlo a cabo; y (3) la falta de retroalimentación y el insuficiente conocimiento de los negocios, en este caso el problema dificulta el aprendizaje de las experiencias y la transferencia de conocimientos muy importantes para fomentar el aprendizaje organizacional, contar con una estrategia de base de conocimientos disminuye el riesgo de tener este problema .

Respecto a la categoría de personas podemos mencionar que lo más sobresalientes son: (1) la falta de compromiso de la dirección, conlleva al fracaso en la adopción de modelos de GSTI, es necesario contar con el respaldo de la dirección para que el personal colabore y se sienta motivado sobre la ejecución de las actividades de proceso; (2) la falta de competencias y habilidades; y (3) falta de entrenamiento, consideramos están muy relacionadas en cuanto al conocimiento y las habilidades de los equipos de trabajo respecto a modelos de GSTI; adicionalmente (4) la falta de motivación, que puede ser generada desde la dirección con la finalidad de lograr mayor participación de los equipos de trabajo en el proyecto.

En la categoría de procesos vemos que los problemas sobresalientes son: (1) la falta de indicadores para medir los resultados de la adopción, frente a ello es clara la necesidad de realizar mediciones y con ello demostrar los beneficios en la adopción de un modelo; y (2) los estándares, modelos y protocolos complejos, frente a estos problemas, muchos autores mencionan la complejidad de los modelos por lo que se hace necesario contar con estudios o propuestas de marcos de trabajo ligeros que introduzcan a las organizaciones a un trabajo basado en estándares de calidad.

Finalmente, cabe mencionar que se identificaron cinco problemas que no pudo categorizarse en la propuesta de [14], los problemas identificados son: (1) la mejora no es percibida rápidamente por los clientes, este problema puede implicar que la organización deje de lado la adopción, por lo que sería conveniente incluir algunas estrategias que impacten directamente en los clientes; (2) los costos adicionales incurridos en la implementación y los costos elevados en la GSTI, están relacionados al retorno de la inversión que creemos será percibido en el largo plazo cuando la organización aplica sin problemas las recomendaciones de mejora de un modelo de GSTI; (3) la sobrecarga de trabajo, consideramos que se hace presente al inicio de todo proyecto de adopción pero conforme se va consolidando la adopción se va percibiendo las mejoras y la sobrecarga disminuye; (4) la falta de conocimiento de los beneficios y/o modelo, en este caso creemos que una estrategia de generación de indicadores y capacitaciones podría minimizar el efecto negativo de este problema.

4.2. PI2. Modelos utilizados

En la mayoría del conjunto de estudios seleccionados, las organizaciones tienden a utilizar el modelo ITIL, la mayoría

Tabla 8.
Modelos de ITSM y estudios primarios.

Modelo ITSM	Estudios primarios
ITIL	[8], [17], [25], [26], [27], [20], [28], [5], [29], [9], [31], [33], [22], [34], [23], [24]
ISO/IEC 20000, ITIL	[18], [19], [32]
IT Service CMM	[21]
En general ITSM	[6], [30], [35]

Fuente: Elaboración propia

Tabla 9.
Procesos ITIL adoptados.

Etapa	Proceso
Operación	Gestión de incidentes
Operación	Gestión de problemas
Operación	Gestión del cambio
Operación	Gestión de niveles de servicio
Operación	Gestión del catálogo de servicios
Negocio	Gestión financiera

Fuente: Elaboración propia

adopta sólo algunos procesos. Además algunas utilizan ITIL como base para adoptar la ISO/IEC 20000 y obtener la certificación [26] (ver Tabla 8).

Entre los modelos ITIL e ISO/IEC 20000, los procesos comúnmente adoptados fueron los que se relacionan a la operativa del servicio. Este hecho es comprensible considerando que la necesidad de las organizaciones suele ser mejorar el quehacer diario, lo que correspondería a la etapa de operación dentro del ciclo de vida del servicio (ver Tabla 9).

5. Discusión final y trabajos futuros

Cuando se realiza la mejora de procesos en cualquier contexto surgen distintos problemas y en el caso de los modelos de gestión de servicios de tecnología de información no son la excepción. En nuestra revisión encontramos problemas con los que pudimos confirmar dicha situación. Encontramos un conjunto de problemas recurrentes agrupados en tres de las categorías de FCE definidas en [14]. Se observa que la mayoría de los problemas dependen de la organización donde se adopta el modelo, de los procesos que se crean y las personas que lo usan. Por lo tanto, estos problemas son claves de resolver cuando se trata de adoptar modelos de GSTI.

Para finalizar podemos concluir que en: (a) Organización: definitivamente la adopción de modelos de GSTI implica contar con recursos como personas, tiempos, financieros [18,25,27,5,6,34,35,23], por lo que una organización deberá pensar que un proyecto de adopción implicará una inversión inicial. (b) Proceso: la definición de indicadores [8,19,33,22] resulta muy útil para demostrar las mejoras obtenidas como parte de la adopción de un modelo, igualmente contar con modelos pequeños, guías o directrices de adopción puede facilitar el entendimiento y adopción de modelos o estándares percibidos como complejos [5,32,35]. (c) Persona, el compromiso debe estar presente en la dirección o los altos mandos [25,26,27, 31,34] de una organización para respaldar cualquier acción de mejora de procesos o adopción de modelos, desarrollar competencias, habilidades [26,19,5,34,35], entrenamientos [18,25,26], los cuales pueden ser de manera previa, durante la adopción y en el despliegue de los procesos, puede generar motivación, mayor participación del personal y minimizar la resistencia al cambio.

El presente trabajo puede servir de base para desarrollar, con mayor detalle, un clasificador de los problemas de adopción de un modelo de GSTI debido a que el de Bayona (desarrollado para el contexto de desarrollo de software) cubre 83% de los problemas encontrados en la adopción de GSTI. Asimismo, este trabajo puede servir como una entrada para la elaboración de un modelo reducido que permita a las organizaciones adoptar algunos procesos e ir trabajando bajo estándares de calidad y de manera gradual adoptar modelos más amplios considerados como complejos por algunos autores. En este último caso se ha desarrollado un como parte del Proyecto ProCal-ProSer [36] en donde se ha elaborado un modelo de gestión de servicios basado en la ISO/IEC 15504-8 e ISO/IEC 20000-4 y que será probado en un conjunto de empresas que desarrollan software y ofrecen servicios asociados; siendo además pequeñas organizaciones.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado dentro del proyecto ProCal-ProSer financiado por Innóvate Perú bajo el Contrato 210-FINCYT-IA-2013 y parcialmente soportado por el Departamento de Ingeniería y el Grupo de Investigación y Desarrollo de Ingeniería de Software (GIDIS) de la Pontificia Universidad Católica del Perú.

References

[1] Nabiollahi, A., Alias, R.A. and Sahibuddin, S., A review on multiple perspectives of IT services in information systems and computer science (A multi-disciplinary overview), in 2011 International Conference on Research and Innovation in Information Systems, ICRIIS'11, 2011, pp. 1-4. DOI: 10.1109/ICRIIS.2011.6125704.

[2] ISACA, COBIT, About COBIT 5, 2017.

[3] ISO/IEC, ISO/IEC 20000-1 Information technology - service management Part.1 Service management system requirements, 2nd ed., Geneva, 2011, DOI: 10.1109/IEEESTD.2010.5733835.

[4] SEI, CMMI® for Services, Version 1.3 CMMI-SVC, V1.3, Pittsburgh, 2010.

[5] P. Küller, M. Vogt, D. Hertweck, and M. Grabowski, IT Service Management for Small and Medium- Sized Enterprises: A Domain Specific Approach, J. Innov. Manag. Small Mediu. Enterp., vol. 2012, no. March 2016, pp. 1–17, 2012, DOI: 10.5171/2012.475633.

[6] Göbel, H., Cronholm, S. and Seigerroth, U., Towards an agile method for ITSM self-assessment: A design science research approach, in Proceedings of the International Conference on Management, Leadership and Governance (ICMLG2013), 2013, , pp. 135-142.

[7] Machado, R.F., Reinehr, S. and Malucelli, A., Towards a maturity model for IT Service Management applied to small and medium enterprises, in EuroSPI: European Conference on Software Process Improvement, 19, 2012, pp. 157-168, DOI: 10.1007/978-3-642-31199-4_14.

[8] Shang, S.S.C. and Lin, S.-F., Barriers to implementing ITIL-a multi-case study on the service-based Industry, Contemp. Manag. Res., 6(1), pp. 53-70, 2010, DOI: 10.7903/cmr.v6i1.1131.

[9] Hoerbst, A., Hackl, W.O., Blomer, R. and Ammenwerth, E., The status of IT service management in health care - ITIL® in selected European countries, BMC Med. Inform. Decis. Mak., 11(76), pp. 1-12, 2011. DOI: 10.1186/1472-6947-11-76.

[10] Itservicemngmt, A brief history of ITIL, ITIL_Service_Management, 2017.

[11] Niazi, M., Wilson, D. and Zowghi, D., Critical success factors for software process improvement implementation: An empirical study, Softw. Process Improv. Pract., 11, pp. 193-211, 2006, DOI: 10.1002/spip.261.
[12] Trujillo-Casañola, Y., Febles-Estrada, A., León-Rodríguez, G. and Betancourt, Y., La gestión de información y los factores críticos de éxito en la mejora de procesos, Cienc. la Inf., 44(3), pp. 27-33, 2013.
[13] Bayona, S., Calvo-Manzano, J.A., Cuevas, G. y San-Feliu, T., Revisión sistemática: Factores críticos de éxito en la mejora y despliegue de procesos, Conferência Ibérica Sist. e Tecnol. Informação, pp. 232-238, 2011.
[14] Bayona-Oré, S., Calvo-Manzano, J.A., Cuevas, G. and San-Feliu, T., Critical success factors taxonomy for software process deployment, Softw. Qual. J., 22, pp. 21-48, 2014, DOI: 10.1007/s11219-012-9190-y.
[15] Kitchenham, B. and Charters, S., Guidelines for performing Systematic literature reviews in software engineering Version 2.3, Engineering, 45(4ve), 2007, 1051 P, DOI: 10.1145/1134285.1134500.
[16] Santos, C.M.D.C., Pimenta, C.A.D.M. and Nobre, M.R.C., A estratégia PICO para a construção da pergunta de pesquisa e busca de evidências, Rev. Lat. am Enferm., 15(3), pp. 2-5, 2007, DOI: 10.1590/S0104-11692007000300023.
[17] Bozga, L., Mateescu, M. and Suba, G., Current challenges of IT service management, in Managerial Challenges of the Contemporary Society, no. 5, 2013, pp. 44-49.
[18] Iliev, A. and Kitanovski, I., Integrated approach To IEC/ISO 20000 adoption based on ITIL v3 framework in the case of Macedonian companies, in Proceedings of the International Conference on Information Technologies (InfoTech-2011), 2011, pp. 85-94.
[19] Heikkinen, S. and Jäntti, M., Identifying IT service management challenges: A case study in two IT service provider companies, in 23rd International Workshop on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2012), 2012, pp. 55-59, DOI: 10.1109/dexa.2012.32.
[20] Wagner, H.T., Managing the impact of IT on firm success: The link between the resource-based view and the IT infrastructure library, in Proceedings of the Annual Hawaii International Conference on System Sciences (39th HICSS), 39, 2006, pp. 1-10, DOI: 10.1109/HICSS.2006.265.
[21] Daneshgar, F., Ramarathinam, K. and Ray, P.K., Representation of knowledge in information technology Service Capability Maturity Model (IT Service CMM), in Second International Conference on Research Challenges in Information Science, 2008, pp. 215-226, DOI: 10.1109/RCIS.2008.4632110.
[22] Saleh, J.M. and Almsafir, M.K., The drivers of ITIL adoption in UNITEN, in Proceedings of International Conference on Advanced Computer Science Applications and Technologies, ACSAT 2013, 2013, pp. 479-484, DOI: 10.1109/ACSAT.2013.100.
[23] Cronholm, S. and Persson, L., Best practice in IT service management: Experienced strengths and weaknesses of using ITIL, 2012, pp. 60-68.
[24] Raflesia, S.P., Surendro, K. and Passarella, R., The user engagement impact along informationtechnology of infrastructure library (ITIL) Adoption, pp. 184-187, 2017.
[25] Marrone, M., Gacenga, F., Cater-Steel, A. and Kolbe, L., IT service management: A cross-national study of ITIL adoption, Commun. Assoc. Inf. Syst., 34(49), pp. 865-892, 2014.
[26] Iden, J. and Langeland, L., Setting the stage for a successful ITIL adoption: a Delphi study of IT experts in the Norwegian armed forces, Inf. Syst. Manag., 27(2), pp. 103-112, 2010, DOI: 10.1080/10580531003708378.
[27] Nicho, M. and Al Mourad, B., Success factors for integrated ITIL deployment: An it governance classification, J. Inf. Technol. Case Appl. Res., 14(1), pp. 25-54, 2012, DOI: 10.1080/15228053.2012.10845694.
[28] Weil, N., How small companies can make a big impact with the IT infrastructure Library: ITIL isn't just for large organizations anymore. 2015.
[29] Conger, S., Venkataraman, R., Hernandez, A. and Probst, J., Market potential for ITSM graduates: a survey, Inf. Syst. Manag., 26, pp. 176-181, 2009, DOI: 10.1080/10580530902797573.
[30] Arcilla, M., Calvo-Manzano, J.A. and San-Feliu, T., Building an IT service catalog in a small company as the main input for the IT financial management, Comput. Stand. Interfaces, 36(1), pp. 42-53, 2013, DOI: 10.1016/j.csi.2013.07.003.
[31] Lucio-Nieto, T., Colomo-Palacios, R., Soto-Acosta, P., Popa, S. and Amescua-Seco, A., Implementing an IT service information management framework: the case of COTEMAR, Int. J. Inf. Manage., 32(6), pp. 589-594, 2012, DOI: 10.1016/j.ijinfomgt.2012.08.004.
[32] Mesquida, A.-L. and Mas, A., Integrating IT service management requirements into the organizational management system, Comput. Stand. Interfaces, 37, pp. 80-91, 2015, DOI: 10.1016/j.csi.2014.06.005.
[33] Valverde, R., Saade, R.G. and Talla, M., ITIL-based IT service support process reengineering, Intell. Decis. Technol., 8(2), pp. 111-130, 2014, DOI: 10.3233/IDT-130182.
[34] Iden, J. and Eikebrokk, T.R., Using the ITIL process reference model for realizing IT governance: An empirical investigation, Inf. Syst. Manag., 31(1), pp. 37-58, 2014, DOI: 10.1080/10580530.2014.854089.
[35] Melendez, K., Dávila, A. and Pessoa, M., Information technology service management models applied to medium and small organizations: A systematic literature review, Comput. Stand. Interfaces, 47, pp. 120-127, 2016, DOI: 10.1016/j.csi.2015.10.001.
[36] Dávila, A., ProCal-ProSer: Determinación de factores que influyen en la PROductividad y CALidad en organizaciones que desarrollan PROductos software y ofrecen SERvicios software utilizando como base normas ISO en pequeñas organizaciones, 2013. .

K.A. Meléndez-Llave, es profesora a tiempo parcial en la Pontificia Universidad Católica del Perú (PUCP) y es investigadora del proyecto ProCal-ProSer (2013-2016), consultor en calidad de software y miembro del Comité técnico de normalización en ingeniería de software y sistemas de información en el Perú. MSc. en Administración Estratégica de Empresas en Centrum Católica, Escuela de Negocios por la PUCP (2013), e Ing. Informática de la PUCP (2003). Sus principales áreas de investigación son la gestión de procesos para desarrollo de software y servicios de tecnologías de información.
ORCID: 0000-0002-9518-3879

A.E. Dávila-Ramón, es investigador y profesor principal de la Pontificia Universidad Católica del Perú (PUCP) desde el 2000. Dirige y es investigador principal del proyecto ProCal-ProSer (2013-2016) y miembro fundador de GIDIS-PUCP. Posee un grado de BSc. en Ciencias con mención en Ingeniería Mecánica y un grado de MSc. en Informática por la Pontificia Universidad Católica del Perú. Sus principales áreas de interés son calidad en informática (a nivel de procesos, productos y gestión de servicios) y educación en ingeniería de software.
ORCID: 0000-0003-2455-9768

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Enzymatic modification of cassava starch (Corpoica M-Tai) around the pasting temperature

Jairo Salcedo-Mendoza [a], Sergio Paternina-Urzola [b], Deivis Lujan-Rhenals [b] & Jorge Figueroa-Flórez [c]

[a] *Facultad de Ingeniería, Universidad de Sucre, Sincelejo, Colombia. jairo.salcedo@unisucre.edu.co*
[b] *Facultad de Ingeniería, Universidad de Córdoba, Montería, Colombia. spaternaurzola@unicordoba.edu.co, dlujan@correo.unicordoba.edu.co*
[c] *Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia. joafigueroafl@unal.edu.co*

Received: July 27th, de 2017. Received in revised form: November 9th, 2017. Accepted: November 28th, 2017

Abstract
Cassava starch variety Corpoica – TAI, was modified with a commercial α-amylase, in order to evaluate the effects of temperature, reaction time and enzyme/substrate (E/S) ratio on the degree of hydrolysis, and production of enzymatic modified starches. The modified starches presented dextrose equivalents (DE) ranging between 13 and 92%, yield (Y) between 0 and 45.5%. The Scanning electron microscope (SEM) analysis showed that the granules suffered exo-corrosion in agreement with the degree of hydrolysis. The crystallinity degree increased following modification. The granule morphology of hydrolyzed starch was different compared to the native starch. The gelatinization temperature in the residues of hydrolyzed cassava starches hydrolyzed increased with the crystallinity degree as well with the reduction in the amylose content. The native starch showed a greater setback and amylose values than hydrolyzed starches, which indicates that it is more susceptible to retrogradation or water lost (syneresis).

Keywords: α-amylase; granule; crystallinity; hydrolyzed starches.

Modificación enzimática de almidón de yuca (Corpoica M-Tai) alrededor de la temperatura de pasta

Resumen
Almidón de yuca variedad Corpoica – TAI fue modificado con α-amilasa comercial, para evaluar el efecto de la temperatura alrededor de la temperatura de pasta, tiempo de reacción y relación enzima/sustrato (E/S) sobre el grado de hidrólisis y producción de almidones modificados enzimáticamente. Los almidones modificados presentaron equivalentes de dextrosa (DE) entre 13 y 92 %, valores de rendimiento (Y) hasta del 45.5%. El análisis Microscopia de barrido electrónico (SEM) mostró que los gránulos presentaron exo-corrosión en concordancia con el grado de hidrólisis. La cristalinidad aumento después de la modificación y la morfología del granulo fue diferente comparada con el almidón nativo. Los almidones hidrolizados presentaron un aumento en la estabilidad (breakdown) y disminución en el asentamiento (setback). La temperatura de gelatinización se incrementó con la cristalinidad y disminuyó con el contenido de amilosa. Los almidones hidrolizados fueron más susceptibles a la retrogradación o pérdida de agua (sinéresis).

Palabras clave: α-amilasa; granulo; cristalinidad; almidones hidrolizados.

1. Introduction

Enzymatic hydrolysis of granular starch has been used as an effective tool to better understand the starch granule structure. Starch granule is organized in amorphous areas and regions of higher and lower crystallinity, and the transition between them is gradual. The crystalline area is constituted of linear fractions of amylopectin, whereas branch points and amylose are the main components of amorphous areas [1,2].

Differences in the enzymatic susceptibilities of starches have been attributed to the interactions of many factors such as starch source, granule size, and extension of association between starch components, ratio of amylose and amylopectin content, crystallinity, polymorphic type, type of

How to cite: Salcedo-Mendoza, J., Paternina-Urzola, S., Lujan-Rhenals, D. and Figueroa-Flórez, J., Enzymatic modification of cassava starch (Corpoica M-Tai) around the pasting temperature. DYNA, 85(204), pp. 223-230, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

enzyme, and hydrolysis conditions such as concentration, pH and temperature [1,3-5]. Franco [6] reported that the enzymatic attack on the large granules of cassava and corn starches (>16 μm) was characterized by considerable corrosion of granule surface, mainly in the radial direction. Starches with different polymorphic patterns (A, B, or C) have shown different susceptibilities due to enzymatic hydrolysis. According to Hoover y Zhou [1], granular starches (C-type) are more susceptible to pancreatic α-amylase than granular starches with high amylose (B-type), but less susceptible than granular starches (A- type).

The enzymatic hydrolysis of granular starch also causes significant changes in the functional properties of starches such as gelatinization temperatures, gel formation, and paste viscosity, which are very important to define the industrial uses of starches. Hydrolyzed starches obtained with enzymes have their molecular weight reduced and show reduction of paste viscosities and swelling power [7]. Cassava, sweet potato, Peruvian carrot, and potato starches were hydrolyzed by bacterial α-amylase at 37°C for 48 h, and the physicochemical properties of the residues from hydrolysis were determined. Cassava starch was the most susceptible to enzyme attack displaying 20.9% of hydrolysis, whereas potato starch was the most resistant with 5.9 % [5]. These study showed that Cassava and sweet potato starches displayed an A-type X-ray diffraction pattern, while Peruvian carrot and potato starches showed a B-type pattern. These results suggested that hydrolysis occurred in amorphous and crystalline areas of the granules. The B type diffraction pattern in conjunction with the big granule size of the potato starch may have contributed to the greatest resistance of this starch to hydrolysis. The purpose of this study was to assess the dextrin production around of pasting temperature of cassava starch, and determine the morphology, structure and functional properties of the hydrolyzed starch residues, for future industrial applications.

2. Materials and methods

2.1. Source of materials

Starch cassava samples were supplied by the company "Almidones de Sucre S.A.S", which located in Corozal (Sucre, Colombia). The enzyme α-amylase from *Bacillus licheniformis* (Novozyme®), with enzymatic activity 129 KNU/g was used in the hydrolysis of starch, enzyme/substrate ratio (E/S=0.81, 1.3, 2.6 KNU/g), temperature (T= 70, 80 and 90 °C) and reaction time (15, 17.5 and 20 min).

2.2. Enzymatic modification of cassava starch

The method applied by Matute [8], was used to determine α-amylase activity. To modify the cassava of starch, 120 mL of starch slurry to concentrations of 20, 40 and 60 g/L of starch was prepared, and 315 μL of the hydrolyzing enzyme was dissolved in it. The starch slurry was maintained in agitation at temperatures of 70, 80 and 90°C, with pH of 5.5 (0.1mol/L sodium citrate buffer). During the reaction, samples were taken at timed intervals according experimental design (15, 17.5 and 20 min) to determine reducing sugars using the dinitrosalicylic acid method, Miller [9] and to calculate dextrose equivalent percentage (DE) and yield (Y), which was defined as the ratio between the amount of starch at the end of enzymatic hydrolysis and the initial amount of starch at the beginning of the hydrolysis process. The reaction was stopped by using hydrochloric acid (2 mol/L) to decrease the pH to 1.5 over the course of 5 min and then using sodium hydroxide (2 mol/L) to increase the pH to 6. Finally, the starch was allowed to settle, the supernatant was removed and dried at 40 °C up to a moisture content nearly 12 % w.b.

2.3. Scanning electron microscope (SEM)

Dehydrated cassava starch samples were placed in a vacuum evaporator and covered with 9 mm-carbon tape and gold-palladium coating. The samples were analyzed in a scanning electron microscope (JEOL, JSU-5600 LV, Japon and SEI, detectors, USA) operating at 15 kV accelerating voltage as reported by Sánchez [10].

2.4. X-ray diffractometry (XRD)

X-ray the diffractograms of starches were recorded with a diffractometer (Panalytical, X'Pert MPD, Switherland) operating at 1.8 kW, 40 mA. The Diffractograms were acquired over 2θ range of 4 to 45°, with a step of 0.013°, a time step of 59 s, divergence grating of 1° wide, a dispersion grating of 1°, a 10 mm mask, and a solar grating of 0.07 rad. The method described by Nara y Komiya [11], was used to determine the material's crystallinity degree (CD). This method estimates the ratio of absorption peak areas (due to crystalline regions) and total sample area throughout integration [12]. The CD was calculated using Equation 1.

$$CD(\%) = \left(\frac{A_C}{A_C + A_A} \right) x\ 100 \qquad (1)$$

Where, A_C corresponds to the crystalline areas of absorption peaks and A_A is the diffractograms amorphous area. The CD of the starch samples was quantitatively determined with the program Origin 8.0®, trial version. (Origin Lab Corporation, USA).

2.5. Fourier transform infrared spectra (FTIR)

Infrared spectra of native and modified starches were acquired using a Spectrometer of Fourier Transform Infrared (Thermo Scientific, IS50 FTIR, USA) in the region from 4000 to 500 cm^{-1}, the analysis was conducted with the software Thermo Scientific OMNIC. The crystals were obtained by mixing 20 mg of starch with KBr at a ratio of 1: 5 (starch: KBr). Thirty-two readings were collected at a resolution of 4 cm^{-1} [13].

2.6. Amylose content

The amylose content of the starch was determined in accordance with the methods of ISO [14], using the standardized iodine colorimetry method. Potato amylose was acquired from Sigma Aldrich (St Louis. MI, USA) and was used as the standard for generating the calibration curve. The

absorbance of the starch-iodine mixture was read at 620 nm.

2.7. Cold water solubility (CWS)

Cold-water solubility of the starches was determined following the method described by Schoch [15] with some modifications. Starch sample (0.5 g) was added and solubilized in distilled water (50 ml) with manual stirring. Starch suspension (25 ml) was then transferred in tubes and centrifuged at 920 x g during 10 min. A 20 mL aliquot of the supernatant was transferred to a tared Petri dish and dried in an oven at 110°C during 4 h. The cold water solubility (CWS) expressed in percentage was defined as shown in Equation 2.

$$CWS(\%) = \frac{\text{Solids in supernatant (g)}}{\text{Sample (g)}} \text{ x } 100 \qquad (2)$$

2.8 *Water holding capacity (WHC)*

Water holding capacity is defined as the amount of water retained by the sample without being subjected to any stress, the method described by Sosulky [16] with some changes was used. A sample starch suspension (12 ml) was prepared with distilled water at 10% (w/v) and 30 °C. The sample suspension was mixed with a vortex, 10 g were transferred to a centrifuge tube and centrifuged at 800 x g during 30 min. Then, the hydrated solid was weighed after removing the excess of water. The water holding capacity expressed in percentage was calculated as shown in the equation (Eq. 3).

$$WHC\ (\%) = \frac{\text{Weight suspension (g) - Water removed (g)}}{\text{Precipitate Starch (g)}} \text{ x } 100 \qquad (3)$$

2.9. Freeze–thaw stability (FTS)

Native and hydrolyzed cassava starches suspension (5% w/w) were heated in water bath at 90 °C for 10 min, cooled to room temperature and storage at -4.0 °C during 24 h, followed by 1.5 h in a water bath at 30 °C. These samples were centrifuged at 2800 × g during 15 min and the amount of water separated after the freeze-thaw cycle was determined. Then the samples were frozen again at -4.0 °C and the same procedure was repeated. Measurements were carried out during three freeze-thaw cycle. The syneresis was calculated as the ratio between the weights of the separated liquid from gel and the gel collected after centrifugation [10].

2.10. Pasting properties

Various pasting parameters of starches such as: maximum viscosity (V_m), pasting temperature (T_p), final viscosity (V_f), final viscosity at 95 °C ($V_{f\text{-}95}$), breakdown (Bd), and setback (Sb) were determined using a Rheometer (MCR 302, Anton Paar, Austria) and a rapid analyzer starch (Anton Paar, SAA24-2D/2V, Austria). The Approved Methods of the American Association of Cereal Chemists [17] was used to determine the viscosity profiles of the starch dispersions. Starch suspensions (2 g) were prepared to determine the viscosity profiles of the starches using a 23 min standard test, which involved: initial equilibrium at 50 °C for 1 min, heating from 50 °C to 95 °C over 7.5 min; holding at 95 °C for 5 min; cooling from 95 °C to 50 °C over 7.5 min, and holding at 50 °C for 2 min.

2.11. Experimental design

A central composite design was applied to examine the combined effects on the degree of hydrolysis, yield, the functional properties, morphology and structure of cassava during enzymatic hydrolysis of three independent variables: enzyme/substrate (E/S=0.81, 1.3, 2.6 KNU/g) ratio, temperature (T= 70, 80 and 90 °C) and reaction time (15, 17.5 and 20 min). A comprehensive study of the effects of these process parameters and their interactions was carried out with the aid of the statistical software (R). Experimental data to a second order model were adjusted to equation (Eq. 4).

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{3} \beta_i X_i + \sum_{i=1}^{3} \beta_{ii} X_i^2 + \sum \sum_{i<j=1}^{3} \beta_{ij} X_i X_j \qquad (4)$$

Where β0, βi, βii and βij are regression coefficients for the intercept, linear interaction terms and quadratic, respectively and X is the independent variable.

3. Results and discussion

3.1. Enzymatic modification

Two products were obtained from the production of enzymatically hydrolyzed cassava starches: liquid dextrin with different DE and starch granule residues. Table 1, summarizes the results of Y and DE of the hydrolyzed starches solutions. Equation 5 explains this behavior with a regression coefficient of 92.49% and lack fit of 0.41 for DE, indicating that the model is appropriate for describing the behavior of the phenomenon. Obtaining DE values of between 13.92 and 92%. The temperature had a greater effect over DE. The yield values were obtained between 0 and 45.5%. Furthermore, hydrolyzed starch residues (Y) were obtained when the process temperature for the modification starches was close of the pasting temperature of native cassava starch (69.4°C), and the yield was reduced with the increment of the reaction temperature, but E/S ratio increased yield slightly.

Analysis of variance showed that temperature had a significant effect on the DE obtained ($p<0.05$), while neither

$$DE = 33.59 + 9.45T - 14.19\left(\frac{E}{S}\right) + 3.60t + 7.99(T)t - 2.29\left(\frac{E}{S}\right)^2 - 5.46t^2 \qquad (5)$$

Table 1.
Yields and percentage of dextrose equivalent (DE) in the production of enzymatic starches.

No. Sample	E/S (KNU/g)	Temperature (°C)	Time (min)	DE (%)	Yield
1	0.81	90	15	41.10	39.00
2	0.81	90	20	46.38	0
3	2.60	70	15	33.49	0
4	1.71	80	21.7	44.89	0
5	2.60	90	20	71.22	0
6	1.71	80	17.5	13.92	12.50
7	2.60	70	20	39.38	45.50
8	1.71	80	13.3	71.48	0
9	0.20	80	17.5	36.58	0
10	0.81	70	15	33.54	0
11	2.60	90	15	41.42	0
12	1.71	96.82	17.5	92.00	0
13	0.81	70	20	45.05	0
14	3.21	80	17.5	33.54	0
15	1.71	63.2	17.5	25.00	28.00
16	1.71	80	17.5	25.38	31.80

Source: Authors

the other factors nor their interaction had effects. When the enzymatic modification was performed at over 90°C, which corresponds to the maximum activity conditions of the α-amylase enzyme, DE values maximum were obtained. This phenomenon is related to the starch gelatinization process, which begins at around 69.4°C in native cassava starches. This process involves the breaking of the hydrogen bonds and the bond strength that keep the crystalline structure organized, resulting in the loss of the intragranular order, which promotes the absorption of water and the leaching of hydrated molecules to the outside of the granule. Thus the starch thus becomes more digestible as the degree of gelatinization increases and present a most availability to the enzyme action [2,4].

3.2. Scanning electron microscopy (SEM)

Scanning electron microscopy revealed the effects of the enzyme attack on the starch granules. The granules of native starch cassava have spherical shapes with truncated extremes and some oval shapes, according to results reported by Sívoli [18]. After enzymatic hydrolysis, cassava starches showed granules degraded mainly on their external surface and possibly internal surfaces (Fig.1) according to results reported by Khatoon [19], enzymes cause alteration on the granule surface and degrade the external part by exo-corrosion. When endo-corrosion occurs, the granule is corroded forming small pores through which the hydrolyzing agents penetrate into the granule, indicating that hydrolysis occurred by two type of attack, either tangential or radial (exo-corrosion and endo-corrosion), changing its internal structure. In the surface of native starch granules, no pores or pits were observed. When cassava starches were hydrolyzed, the granule morphology was different to the native starch, granule degradation increases when temperature and time also increase, close of temperature of major enzymatic activity of the α-amylase. The sample No 7 revealed a higher degradation than the other samples, which corresponds to the greatest time and E/S ratio. SEM images are different to the reported by Chen and Zhang [20], where the reaction temperature was below the gelatinization temperature (50°C) with a glucosidase enzyme and not show the destruction of the granules by gelatinization process. After hydrolysis, cassava starch showed some granules degraded on their external part, indicating that hydrolysis occurred by exo-corrosion, and it was not uniform for all granule, enzymes cause alteration on the granule surface and degrade the external part by exo-corrosion. When endo-corrosion occurs, the internal part of the granule is corroded forming small pores through which enzymes penetrate into the granule. In this study, it was not possible to observe any endo-corrosion of the starches after hydrolysis.

3.3. X-ray diffraction (XRD)

The XRD diffractograms of native and starch residues hydrolyzed by α- amylase are shown in Fig.2, peaks were observed at 15°, 17°, 18° and 23°, these starches presented an A-type diffraction pattern. This type of pattern is characteristic of starches from tubers with low degrees of crystallinity, since the double helixes from the amylopectin in their structures are packaged in a monocyclic shape and consist of 4-8 water molecules, forming a less organized structure. The peak intensity and the crystallinity degree (Table 2) of enzymatic starch residues increased lightly during hydrolysis, the results of XRD for enzymatic starch residues indicated that amorphous structure was hydrolyzed faster than crystalline structure. This observation agrees with Shariffa [2], who suggested that amylolysis primarily occurs in the amorphous region of starch granules.

Hydrolyzed cassava starch had a reduction in relative crystallinity compared to control starch. It is feasible that, apart from amorphous region, a portion of the amylopectin in crystalline regions was also degraded [21]. Rocha [5] concluded that cassava starch showed increased susceptibility to enzymatic attack because the amylose-amylopectin packaging complex, gives a less rigid and organized structure. Results show that A-Type, are more susceptible to α- amylase than are the B- and C- type starches [22,23].

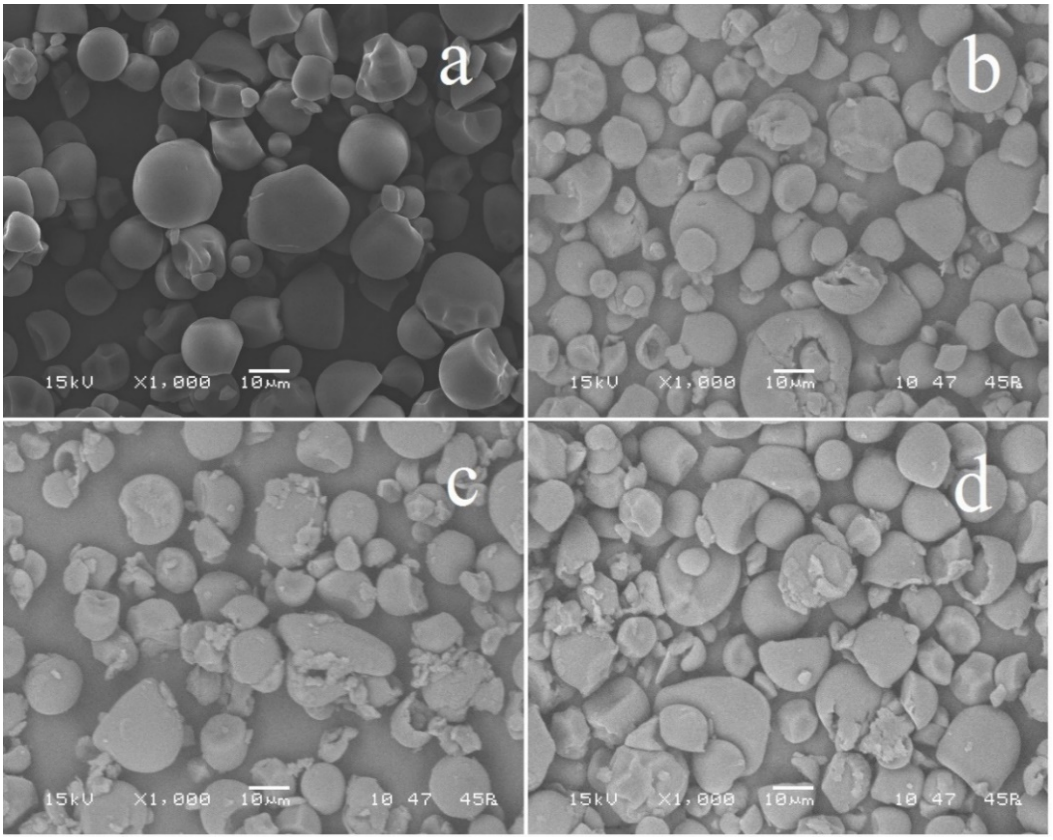


Figure 1. Scanning electron microscopy of: a) native cassava starch, b) hydrolyzed starch No 15, c) hydrolyzed starch No 7, d) hydrolyzed starch No 6
Source: Authors

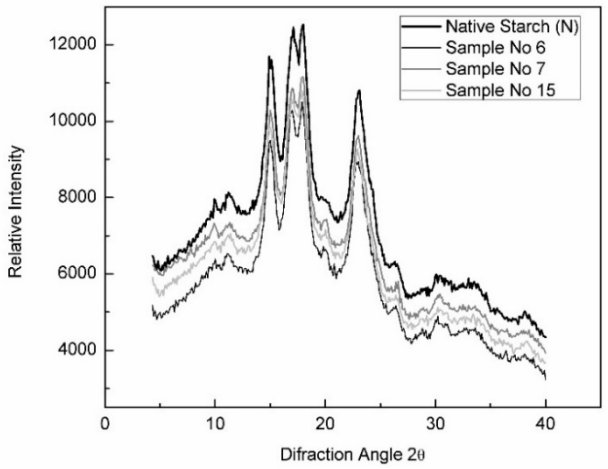


Figure 2. X- ray diffractograms of native cassava starch (N) and samples of residue of hydrolyzed cassava starches (No 6,7 and 15)
Source: Authors

3.4. Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR)

Fig.3 shows, the FTIR spectra of the native cassava starch and the hydrolyzed cassava starches. The FTIR spectroscopy has been used as a quantitative tool and describes the organization and structure change in starch. The residue of hydrolyzed cassava starches (samples No 6, No 7 and No 15) showed an increase in absorbance than native starch, in the region between 800 and 1500 cm^{-1} provided highly overlapping and complex spectra making the band assignment more complicated and dominated by the vibrations of glucose molecules [19]. Infrared absorption at 928 - 930 cm^{-1} was attributed to the glycosidic linkages in starches, the absorption bands at 1020 - 1250 cm^{-1} are related with CH_2OH mode as well as the C–O–H deformation mode, the infrared absorption region 1630- 1640 are related with the tightly water, the FTIR spectra in the region 2800- 3000 cm^{-1} was due to the C–H stretching mode and the O–H stretching mode of starch was observed in the region of 3000–3600 cm^{-1} [24]. Starch residues had changes in absorbance compared to the native starch, but do not showed major changes in the organization and structure of starches.

3.5. Amylose content

The amylose content in native cassava starch was of the 19.46%, result similar to the reported by Rocha [5]. After the hydrolysis process, the amylose content decreases slightly concerning native starch (Table 2). These results agree with those reported in cassava starch, corn and sago treated with enzymes α-amylase [21]. Also, higher amylolytic degradation was observed, when was increased the E/S ratio and period of hydrolysis corresponding to treatment No. 7, reflected in the decrease

Table 2.
Functional and physical properties of untreated cassava starch (Native) and Samples (No 7, 6, 15) residue of hydrolyzed cassava starches.

No Sample	CWS (%)	WHC	Amylose (%)	CD	S1 (%)	S2 (%)	S3 (%)
No 6	8.19 ±0.10	77.38 ±0.12	18.60 ±0.17	48.94	61.62 ±1.15	19.78 ±0.07	10.46 ±0.10
No 7	6.32 ±0.15	110.35 ±0.55	16.78 ±0.06	50.00	41.00 ±0.85	16.62 ±0.13	0.00
No 15	10.91 ±0.20	101.82 ±0.12	17.83 ±0.01	49.20	41.66 ±0.03	18.10 ±0.23	0.00
Native	1.21 ±0.1	7.84 ±0.13	19.46 ±0.19	47.67	2.45 ±0.10	6.66 ±0.02	22.41 ±0.11

Cold water solubility (%CWS); Water holding capacity (WHC); Crystallinity degree (CD); Syneresis percentage (S) (three cycles).
Average of three replicates.
Source: Authors

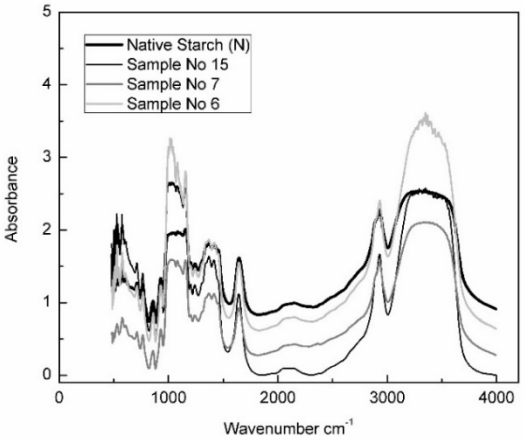


Figure 3. FTIR spectra of native cassava starch (N) and samples of residue of hydrolyzed cassava starches (No 6, 7 and 15)
Source: Authors

of amylose, an increased degree of crystallinity and morphological alterations in the hydrolyzed starch, resulting in the granule exo-corrosion. Studies report that amylolytic enzymes can hydrolyze both fractions of amylose and amylopectin, simultaneously, although it is unclear what fraction is more susceptible to enzymatic attack [2,5]. However, Uthumporn [21] reported that the enzymes attack and preferably hydrolyze the amorphous region where the linear chains are accommodated, causing a decrease in amylose content in the granule.

3.6. Cold water solubility (CWS), water holding capacity (WHC) and freeze–thaw stability (FTS).

Table 2 shows the CWS and WHC of modified and native cassava starches. The solubility behavior of the starches depends of amylose content, lipids content, granule structure, amylose - lipid complex and the leaching of amylose [25]. The results showed, an increasing of the CWS and WHC of hydrolyzed starches compared with the native cassava starch. Similar results were reported in hydrolyzed starches of corn, cassava, sago and beans [20]. This result can be explained because amylose (amorphous region) in cassava starch hydrolyzed was degraded, resulting in better absorption of water and solubilization of the starch granules. Furthermore, the change in the CWS and WHC of modified starch compared to native starches is closely associated with the decrease of amylose content and increased peak maximum viscosity. This change is related to the morphological and structural alterations suffered by the granule during hydrolysis [2].

FTS in cassava starch was influenced by treatment with amylolytic enzymes. a significant increase ($P<0.05$) syneresis in the native for each refrigeration cycle starch was observed; which is associated with the regrouping of linear chains of amylose and amylopectin, originated closer interaction between them by hydrogen bonds that release water, presenting a strong syneresis as shown (Table 2) in the third refrigeration cycle [26].

In the starches treated enzymatically, the phenomenon of syneresis decreases significantly with the hydrolysis process, which is most evident in the treatment No 7 and No 15, possibly due to decreased amylose or depolymerization of amylose molecules producing areas more linear, argue that the gelatinization and starch retrogradation are closely related to the amylose content [5], results consistent with the results obtained in treatments No 7 and No 15 in the third refrigeration cycle, where samples showed a decrease of amylose content and lower retrogradation (Sb) compared to native starch. The enzymatic hydrolysis produced changes in the structure of amylose, increasing capacity of remove water. Also, the amylose gels retrograde faster and achieve the retrogradation limit after two days, while the amylopectin crystallizes after five days. The reduction of syneresis in hydrolysed starches is associated with the increasing of the crystallinity

3.7. Pasting properties

Fig.4, shows the gelatinization profiles of the native and modified cassava starches, and Table 3 shows the pasting properties. A reduction in values of pasting parameters (Vf, Vf-95, Sb) was observed in starch residues hydrolyzed by α-amylase. Values of T_p and Bd of starches residue hydrolyzed varied from 71.4 to 75.5 °C and 3450.1 to 5048.7 cp, which were higher than native starch (69.4 °C and 1744.3 cp) respectively, the increase in the breakdown viscosity (Bd) indicate a greater instability of the paste in the residues starches hydrolyzed and a reduction in the (Sb) shows a decrease in cohesive properties. The residues starches hydrolyzed showed higher values of V_m than native starch, due to the reduction of amorphous region and lixiviation of short chains and amylose, an opposite behavior was reported for hydrolyzed corn starches with hydrochloric acid and hydrolyzed cassava starch with bacterial α-amylase at 37 °C for 48 h [5,25], and hydrolysis of granular starch at sub-temperature gelatinization [21].

Table 3.
Pasting profile of native cassava starch and Samples (No 7, 6, 15) residue of hydrolyzed cassava starches.

No Sample	T_p (°C)	V_m (cp)	V_f (cp)	$V_{f\text{-}95}$ (cp)	Bd (cp)	Sb (cp)
No 6	71.4	5141	318.3	155.5	4985.5	162.8
No 7	75.5	3557	131.4	106.9	3450.1	24.5
No 15	74.6	5296	923.2	347.3	5048.7	575.9
Native	69.4	2725	1981.0	980.7	1744.3	1000.3

Maxima viscosity (V_m); pasting temperature (T_p); final viscosity (V_f); final viscosity at 95 °C (V_{f95}); breakdown (Bd) and setback (Sb).
Average of three replicates.
Source: Authors

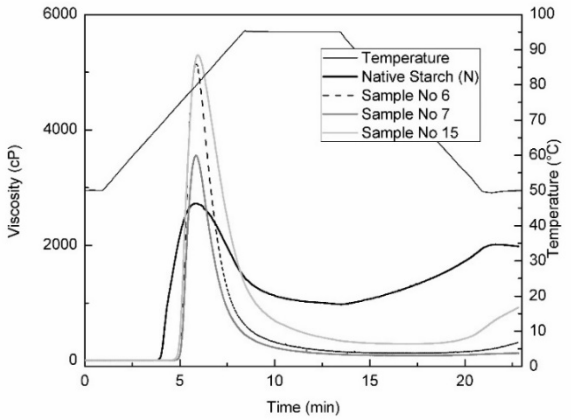


Figure 4. Viscoamylograms of native cassava starch (N) and samples of residue of hydrolyzed cassavastarches (No 6, 7 and 15)
Source: Authors

The pasting temperature (Tp) of residues of hydrolyzed cassava starches increased with the crystallinity degree (CD) and decreased the amylose content due to the reduction the amorphous region of the granule. The native starch showed a greater Sb and amylose values than hydrolyzed starches; therefore, is more susceptible to retrogradation or lose water (syneresis) after 24 hours, that is accompanied by gradual increases in rigidity and a phase separation between solvent and polymer chains when the gel is exposed to the effects of freeze – thaw cycles, causing a decrease in water-holding capacity (WHC), which is fairly common for most native starches aging gels. Also, there is an increase in the cold water solubility (CWS) in the residue of hydrolyzed cassava starches, this is important in the production of liquid beverages.

4. Conclusions

The structural characterization did not show substantial changes in the organization and structure of starches, but the granule morphology was different to the native starch and granule degradation increased with the increment of temperature and time. The native starch presented a greater Sb and amylose values than hydrolyzed starches, thus is most susceptible to retrogradation or lose water (Syneresis), that is accompanied by gradual increases in rigidity and a phase separation between solvent and polymer chains when the gel is exposed to the effects of freeze – thaw cycles, causing a decrease in water-holding capacity (WHC). Also, had an increase in the cold water solubility (CWS) in the residue of hydrolyzed cassava starches. The procedure of how is carried out the hydrolysis of native starches produced different effects on the properties of hydrolyzed starches.

The enzymatic starch can be used as: anti-aging agent of bread, in humectant products, in the preparation of beverages by increasing the solubility in cold water and the decrease of syneresis at a long time (third cycle) and the preparation of yogurts, purées, sauces, creams, cake shop. Avoid using enzymatically modified starches in products where high temperatures are required due to low resistance to these processes

Acknowledgements

The authors would like to thank the Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación (COLCIENCIAS) and the Gobernación de Sucre for funding the research work.

References

[1] Hoover, R. and Zhou, Y., In vitro and in vivo hydrolysis of starches by α-amylase and resistant starch formation in legumes – A review. Carbohydrate Polymers, 54(4), pp. 401-417, 2003. DOI: 10.1016/S0144-8617(03)00180-2

[2] Shariffa, Y.N., Karim, A.A., Fazilah, A. and Zaidul, I.S., Enzymatic hydrolysis of granular native and mildly heat-treated tapioca and sweet potato starches at sub-gelatinization temperature. Food Hydrocolloids, 23(2), pp. 434-440, 2009. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2008.03.009

[3] Li, J.H., Vasanthan, T., Hoover, R. and Rossnagel, B.G., Starch from hull-less barley: V. In-vitro susceptibility of waxy, normal, and high-amylose starches towards hydrolysis by alpha-amylases and amyloglucosidase. Food Chemistry, 84(4), pp. 621-632, 2004. DOI: 10.1016/S0308-8146(03)00287-5

[4] Tester, R.F., Qi, X. and Karkalas, J., Hydrolysis of native starches with amylases. Animal Feed Science and Technology 130(1-2), pp. 39-54, 2006. DOI: 10.1016/j.anifeedsci.2006.01.016

[5] Rocha, T.S., Carneiro, A.P. and Franco, C.M., Effect of enzymatic hydrolysis on some physicochemical properties of root and tuber granular starches. Ciência e Tecnologia de Alimentos, 30(2), pp. 544-551, 2010. DOI: 10.1590/S0101-20612010000200039

[6] Franco, C.M., Preto, R.S. and Ciacco, C.F., Factors that affect the enzymatic degradation of natural starch granules: Effect of size of the granules. Starch/Stärke, 44(11), pp. 422-426, 1992. DOI: 10.1002/star.19920441106

[7] Noda, T., Takigawa, S., Matsuura, E.C., Saito, K., Takata, K., Tabiki, T., Mangalika, W.H. and Yamauchi, H., The physicochemical properties of partially digested starch from sprouted wheat grain. Carbohydrate Polymers, 56(3), pp. 271-277, 2004. DOI: 10.1016/j.carbpol.2003.10.015

[8] Matute, L., Bertsch, A. y Diaz, I., Evaluación de la actividad amilolítica de *Aspergillus niger* (ANM-1) en fermentaciones en estado sólido y sumergido para la obtención y caracterización de

aditivos enzimáticos. Revista Facultad de Agronomia (UCV), 38(1), pp. 9-17, 2012.
[9] Miller, G.L., Use of dinitrosalicylic acid reagent for determination of reducing sugar. Analytical Chemistry, 31(1), pp. 426-428, 1959. DOI: 10.1021/ac60147a030
[10] Sánchez, L.H., Solorza, J.F., Méndez, M.G., Paredes, L.O. and Bello, L.P., Isolation and partial characterization of Okenia (*Okenia hypogaea*) starch. Starch/Stärke, 54(5), pp. 193-197, 2002. DOI: 10.1002/star.200300235
[11] Nara, S. and Komiya, T.T., Studied on the relationship between water-saturated state and crystallinity by the diffraction method for moistened potato starch. Starch/Starke, 35, pp. 407-410, 1983. DOI: 10.1002/star.19830351202
[12] Frost, K., Kaminski, D., Kirwan, G., Lascaris, E. and Shanks, R., Crystallinity and structure of starch using wide angle X-ray scattering. Carbohydrate Polymers, 78(3), pp. 543-548, 2009. DOI: 10.1016/j.carbpol.2009.05.018
[13] Colussi, R., Mello, S., Zanella, V., Bartz, J., Gutkoski, L., Zavareze, E. and Guerra, A., Acetylation of rice starch in an aqueous medium for use in food. LWT - Food Science and Technology, 62(2), pp. 1076-1082, 2015. DOI: 10.1016/j.lwt.2015.01.053
[14] International Standardization Organization (ISO). Rice-Determination of amylose content. Part 2: Routine Method, ISO 6647-2. Switzerland: ISO, 2003.
[15] Schoch, T.J., Swelling power and solubility of granular starches, in Whistler, R.L. Methods in carbohydrate chemistry. London: Academic Press, 1964. pp. 534-544.
[16] Sosulky, F., The centrifuge method for determining flour absorption in hard red spring wheats. Cereal Chemists, 39(1), pp. 344-349, 1962.
[17] Association of Cereal Chemistry International (AACC). Approved methods of the american of american association of cereal chemist. AACCI method pasting properties of oat - rapid viscosity analysis. St. Paul, MN: AACC, 2000.
[18] Sívoli, L., Pérez, E. y Rodríguez, P., Análisis estructural de almidón nativo de yuca (*Manihot esculenta* C.) empleando técnicas morfométricas, químicas, térmicas y reológicas. Revista de la Facultad de Agronomía (LUZ), 29, pp. 293-313, 2012.
[19] Khatoon, S., Sreerama, Y.N., Raghavendra, D., Bhattacharya, S. and Bhat, K.K., Properties of enzyme modified corn, rice and tapioca starches. Food Research International, 42, pp. 1426-1433, 2009. DOI: 10.1016/j.foodres.2009.07.025
[20] Chen, G., and Zhang, B., Effect of resistant starch on hydrolysis and fermentation of corn starch for ethanol. Journal of Cereal Science, 56, pp. 316-320, 2012. DOI: 10.1007/s12010-009-8651-7.
[21] Uthumporn, U., Zaidulb, I.S. and Karim, A.A., Hydrolysis of granular starch at sub-gelatinization temperature using a mixture of amylolytic enzymes. Food and Bioproducts Processing, 8(8), pp. 47-54, 2010. DOI: 10.1016/j.fbp.2009.10.001
[22] Funa, H., Takaga, T. and Sugimoto, J., Mechanisms of saccharide polymerization and depolymerization. New York: Academic Press, 1980.
[23] Gallant, D., Bouchet, B., Bouleon, A. and Perez, S., Physical characteristics of starch granules and susceptibility to enzyme degradation. European Journal of Clinical Nutrition, 46(2), pp. S3-S16, 1992.
[24] Mathew, S. and Abraham, T.E., Characterization of ferulic acid incorporated starch-chitosan blend films. Food Hydrocolloids, 22(5), pp. 826-835, 2008. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2007.03.012.
[25] Sandhu, K. and Singh, N., Some properties of corn starches II physicochemical, gelatinization, retrogradation, pasting and textural properties. Food Chemistry, 101(4), pp. 1499-1507, 2007. DOI: 10.1016/j.foodchem.2006.01.060
[26] Doue, G.G., Megnanou, R.M., Bedikou, E.M. and Niamke, L.S., Physicochemical characterization of starches from seven improved cassava varieties: Potentiality of industrial utilization. Journal of Applied Biosciences, 73, pp. 6002-6011, 2014.

J.S. Salcedo-Mendoza, received the BSc in Chemical Engineering in 1984 at the Universidad del Atlántico, Colombia, Sp. in Environmental Sciences in 2000 at the Universidad de Sucre, Colombia, and Dr. in Chemical Engineering at the Universidad del Valle, Colombia, university professor since 1994, professor since 1994, is currently a professor - researcher at the University of Sucre, Colombia.
ORCID: 0000-0002-9901-9793

S. Paternina-Urzola, received the BSc. in Biology in 2007 at the Universidad de Sucre, Colombia, MSc. in Biotechnology in 2017 at the Universidad de Cordoba, Colombia, currently, I work as a high school teacher in the department of Cordoba. His topic of interest as professor and researcher include food biotechnology, fermentations, bioprocess, and food conservation, biofuel.
ORCID: 0000-0003-2335-3952

D.E. Luján-Rhenals, received the BSc. in Food Engineering in 1999 at the Universidad de Córdoba, Colombia, and the Dr. in Food Science at the University of Arkansas, U.S.A., in 2013. He has been professor at the Universidad de Córdoba since February of 2000 in the Department of Food Engineering, where currently is the Department Head since February of 2014. His topic of interest as professor and researcher include food biotechnology, fermentations, bioprocess, and food conservation; topics in which have published several papers in peer-reviewed journals.
ORCID: 0000-0002-2882-9692

J.A. Figueroa-Flórez, received the BSc. in Agroindustrial Engineering in 2010 at the Universidad de Sucre, Colombia, MSc. in Agroindustrial Engineering in 2016, and actually is student of the doctoral program in Biotechnology at the Universidad Nacional de Colombia. He was professor and reseacher at the Universidad de Sucre until December of 2016. His topic of interest as professor and researcher include food biotechnology, bioprocess and food conservation and transformation; topics in which have published several papers in peer-reviewed journals.
ORCID: 0000-0003-1050-0677



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Química e Ingeniería de Petróleos

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Química
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Petróleos
Doctorado en Ingeniería - Sistemas Energéticos

Mayor información:

E-mail: qcaypet_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5317

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Study of different routes of renewable synthesis for Caprolactam production

Diego Alejandro Trujillo-Vera & Yesid Vélez-Salazar

Escuela de Ingenierías, Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia. dtrujillovera@gmail.com, yesid.velez@upb.edu.co

Received: September 7th, 2017. Received in revised form: December 22th, 2017. Accepted: January 31th 2018.

Abstract
There are not methods for direct biobased synthesis of caprolactam (CPL), the combination of biotechnological production of renewable raw materials with physical and chemical modifications are emerging and showing promising results. Among these raw materials there are some acids: adipic, glucaric, glutamic, levulinic, succinic, muconic, 2,5-furanicarboxylic, 6-aminocaproic; and other compounds: adiponitrile, lysine, 1,3-butadiene, 1,4-butanediol, Hydroxymethylfurfural, adipic semialdehyde, benzene, phenol and ethanol. There are barriers that have not allowed the viability and commercial development of these processes, such as limitations on the fractionation of lignocellulosic biomass, high-energy requirements for separation of products, low yield, biological inhibition, limited chemical selectivity and low purity of products. Research and development efforts of any of these processes were not identified in Colombia. The route through the lysine is the most promising by involving few reaction stages, by having economic raw materials and because it is carried out under moderate operating conditions.

Keywords: caprolactama; nylon 6; lysine; adipic acid.

Estudio de las diferentes rutas de síntesis renovables para la producción de Caprolactama

Resumen
No existen métodos para la síntesis biobasada directa de la caprolactama (CPL), la combinación de la producción biotecnológica de materias primas renovables con modificaciones por procesos físicos y químicos están emergiendo y mostrando resultados prometedores. Entre estas materias primas se encontraron los ácidos adípico, glucárico, glutámico, levulínico, succínico, mucónico, 2,5-furandicarboxílico, 6-aminocapróico, adiponitrilo, lisina, 1,3-butadieno, 1,4-butanodiol, hidroximetilfurfural, semialdehído adípico, benceno, fenol y etanol. Hay barreras que no han permitido la viabilidad y desarrollo comercial de estos procesos, como las limitaciones en torno al fraccionamiento de la biomasa lignocelulósica, altos requerimientos de energía para separación de productos de poco rendimiento, inhibición biológica, selectividad química limitada y baja pureza de los productos. En Colombia no se identificaron esfuerzos de investigación y desarrollo de ninguno de estos procesos. La ruta a través de la lisina es la más prometedora al involucrar pocas etapas de reacción, tener materias primas económicas y llevarse a cabo bajo condiciones de operación moderadas.

Palabras clave: caprolactama; nylon 6; lisina; ácido adípico.

1. Introducción

La caprolactama (CPL) es un compuesto orgánico utilizado principalmente para la producción de Nylon 6, tiene un precio cercano a los 1800 USD/t, una demanda de 6500 ktpa y perspectivas de crecimiento de alrededor del 3.0% anual. La CPL es derivada del benceno, siendo el 83 % producido a través del ciclohexano, el 16% del fenol y el resto del tolueno y de polímero reciclado. El proceso de producción dominante de CPL no es sostenible a largo plazo y es dependiente del petróleo. Se basa en la conversión de la ciclohexanona a ciclohexanona oxima. Esta reacción ocurre típicamente en presencia de sulfato de hidroxilamina, bajo condiciones búfer de pH. La oxima es convertida en CPL por medio de la reacción de rearreglo de Beckmann en presencia de ácido sulfúrico fumante. A escala comercial, la separación de la CPL se realiza por la adición de

How to cite: Trujillo-Vera, D.A. and Vélez-Salazar Y., Estudio de las diferentes rutas de síntesis renovables para la producción de Caprolactama. DYNA, 85(204), pp. 231-237, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

NH_3 con un rendimiento del 98%. Este último paso requiere de solventes orgánicos para la purificación y genera como subproducto entre 1.8 y 5.0 kg de sulfato de amonio por cada kilogramo de CPL producida [1].

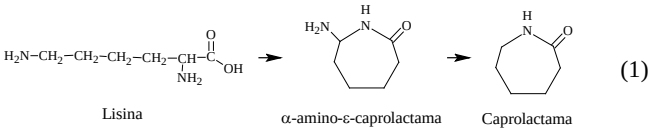
Se han realizado esfuerzos para reducir la formación de sulfato de amonio [2,3], entre los que resaltan la ruta Montedison, una alternativa de oxidación de la ciclohexanona usando NH_3 y un catalizador de TiO_2 y SiO_2. Otras alternativas son los procesos de DSM/Stamicarbon y su arreglo de Beckmann catalizado; el de Bayer, con un catalizador de B_2O_3 y Al_2O_3; el proceso BASF/Inventa, donde la ciclohexanona oxima se forma por una hidrogenación catalítica de óxido nítrico en una solución de sulfonato de amonio seguida por una reacción con ciclohexanona. También se tienen el proceso HPO (hidroxilamina – fosfato – oxima) desarrollado por DSM, la Nitración Fotoquímica de Ciclohexano (PNC) de Toray, el proceso SNIA, entre otros [4]. Sin embargo, sólo la ruta Sumitomo ha probado ser comercialmente competitiva. Esta ruta produce ciclohexanona oxima por una amoximación directa del NH_3 y el H_2O_2 usando un catalizador TS-1 [5]. El uso subsecuente de un catalizador MFI produce CPL, mientras elimina la formación de sulfato de amonio [6].

2. Rutas renovables para la producción de CPL

Aunque no existen actualmente métodos comerciales para la síntesis biobasada directa de la CPL, la combinación de la producción biotecnológica de materias primas básicas o plataformas con subsecuentes modificaciones por procesos físicos y químicos están emergiendo y mostrando resultados prometedores [7]. Estos procesos deben a su vez optimizarse a manera de biorrefinerías para lograr una real viabilidad. Las siguientes son las rutas de producción de CPL a partir de diferentes compuestos intermedios que pueden ser producidos a partir de materias primas renovables.

2.1. Síntesis de CPL por la vía de la Lisina (LYS)

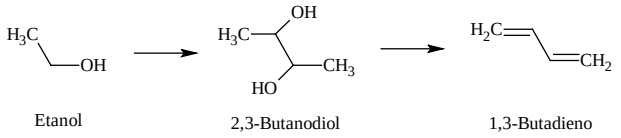
La LYS se produce a escala industrial por fermentación usando *Corynebacterium glutamicum*, con un rendimiento estimado del 40-50%mol. La investigación para mejorar su producción se centra en el desarrollo de nuevas cepas de bacterias más eficientes. La LYS se puede utilizar como materia prima para la síntesis de CPL debido a su estructura similar. Su modificación química muestra un rendimiento del 75% global. Sin embargo, los altos precios de la LYS limitan la aplicación comercial [1]. La tecnología Draths convierte la glucosa en LYS, luego en aminocaprolactama y finalmente en CPL, con un rendimiento del 60% mol/mol de CPL sublimada a partir de LYS. Draths Corporation fue fundada en diciembre de 2005 para comercializar la tecnología desarrollada en el laboratorio de John Frost y Karen Draths. En 2011 Draths fue comprado por Amyris [8], quienes reportaron la conversión de la LYS a α-amino-ϵ-caprolactama en reflujo con 1,2-propanodiol logrando un 96% de rendimiento. La deaminación siguiente se realiza a -5°C, en presencia de KOH y ácido hidroxilamina-O-sulfónico, con formación de N_2 y K_2SO_4 (Ec.1). La CPL es purificada por sublimación con un rendimiento del 75% [9].



(1)

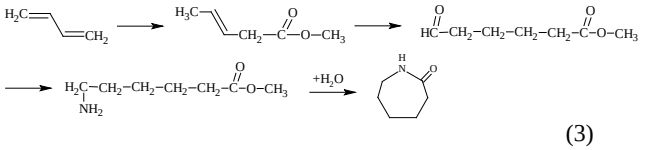
2.2. Síntesis de CPL a partir de Butadieno (BD)

Una ruta convencional para la síntesis de CPL que puede convertirse a biobasada utiliza el BD como materia prima, su reacción con cianuro de hidrógeno produce adiponitrilo y a partir de este proceso se pueden obtener tanto hexametilendiamina, como CPL. Por otra parte, el BD se puede convertir en ácido 6-aminocapróico y posteriormente en CPL en un proceso de varios pasos. Los rendimientos son bajos (34% global), sin embargo, la conversión subsiguiente del 6-ACA a CPL ha demostrado ser eficiente (rendimiento del 95%). El BD puede ser producido a partir de bioetanol, con un rendimiento del 87% (Ec.2) [1].

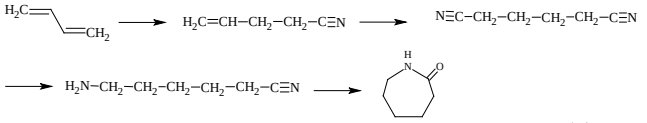


(2)

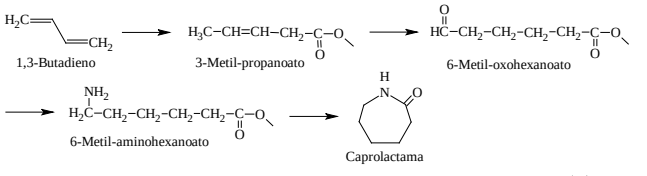
Otro proceso de síntesis de CPL a partir de BD es el de hidroesterificación, desarrollado por BASF [10] y DSM/DuPont [11,12] (Ec.3). Otro proceso similar, implica la hidrocianación como paso clave (Ec.4). El proceso ALTAM de DSM (ALTternativa caprolactAMa) consiste en la carbonilación del BD para obtener 3-metil-pentanoato (Ec.5); su posterior hidroformilación y aminación produce 6-aminocaproato, un precursor de la CPL [13], sin embargo, se han dado a conocer pocos detalles. Estos procesos no se han implementado porque son más costosos que las rutas basadas en benceno.



(3)



(4)

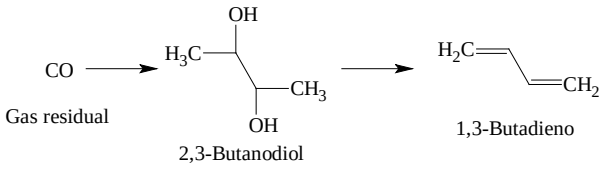


(5)

La dimerización del bioetanol provee una ruta prometedora al BD. Actualmente, se aplican dos métodos biobasados a nivel comercial. El primero, el proceso Lebedev, operado en Brasil y

Polonia, usando un catalizador de MgO y SiO_2 a 370-390°C para deshidrogenar y dimerizar el bioetanol, dando 70% de selectividad para el BD. El segundo es el proceso Ostromislensky que usa bioetanol, bioacetaldehído y un catalizador, también con rendimientos del 70% para el BD [4]. Una ruta alternativa es la de Ohnishi y otros, esta ruta usa un catalizador de MgO y SiO_2 (1:1) y Na_2O (0.1%) a 350°C, dando BD con un rendimiento del 87% [14,15].

Por otra parte, es posible obtener BD a partir de monóxido de carbono (Ec.6) [16]. Múltiples colaboraciones de empresas biotecnológicas y químicas están combinando ingeniería genética y la tecnología de fermentación con experiencia en catálisis y la ingeniería de procesos. Ejemplos de tales asociaciones son Genomatica y Versalis [17], Global Bioenergies y Synthos [18] e Invista y LanzaTech [19].

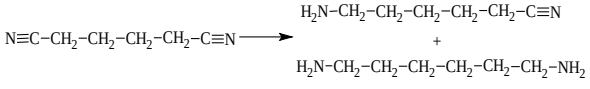


(6)

Varias empresas han reportado la producción directa de BD a partir de fuentes renovables, entre ellas están Genomatica, Global Bioenergies y Cobalt Technologies [20-23]. Otro interesado es Invista, asociado con Arzeda y colaborando con el Centro para la Innovación de Procesos del Reino Unido para desarrollar una producción directa de BD a partir de la fermentación de gases de síntesis; además de trabajar con LanzaTech para utilizar la fermentación sintética a 2,3-butanodiol con conversión catalítica adicional a BD [24,25]. Finalmente, Michelin tiene un proyecto de producción de BD biobasado llamado "BioButterfly", en conjunto con Axens, IFP Energies Nouvelles y Tereos [26-28].

2.3. Producción de CPL utilizando Adiponitrilo (ADN)

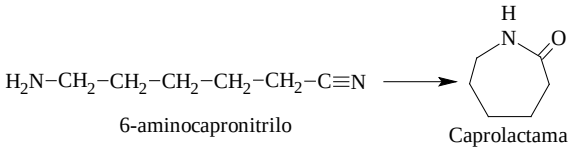
Este proceso fue desarrollado por BASF (en colaboración con DuPont) y Rhodia. El ADN se hidrogena para dar una mezcla de 6-aminocapronitrilo y hexametilendiamina (Ec.7).



(7)

El 6-aminocapronitrilo puede usarse para producir CPL mientras que la hexametilendiamina es un precursor para el nylon 6,6 mediante la reacción con ácido adípico. Aunque este proceso ofrece flexibilidad, no se ha implementado debido a los altos costos en comparación con las rutas basadas en el benceno [1]. El proceso depende de una recirculación del ADN para conseguir una conversión completa, con 70% de conversión de ADN por ciclo.

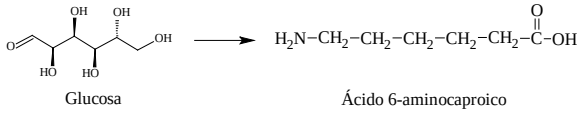
La hidrólisis catalítica consecutiva de 6-aminocapronitrilo produce 79% de CPL (Ec.8), en presencia de agua y etanol, a 70 bar y 220°C [29].



(8)

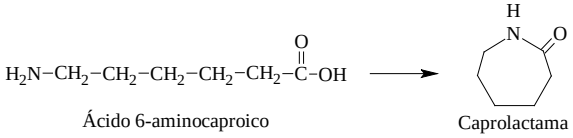
2.4. Síntesis de CPL por la vía del ácido 6-aminocapróico (6-ACA)

La producción biotecnológica directa del 6-ACA ha ganado interés recientemente (Ec.9). Compañías como DSM [30], Genomatica [31], y Celexion LLC [32], reclaman cada una de estas rutas de síntesis, sin embargo, ninguna detalla el proceso. A diferencia del ácido adípico y del ácido succínico, el 6-ACA es un aminoácido no natural, que puede ser potencialmente producido en un proceso de pH neutro, similar a fermentaciones industriales de aminoácidos por bacterias. *Escherichia coli* mostró mejor tolerancia al 6-ACA en comparación con *Bacillus subtilis* y *Saccharomyces cerevisiae* [33]. Zhou et al. demuestran, mediante un diseño experimental y una aproximación estadística, que la eficiencia de la producción de 6-ACA por las cepas de *E. Coli* es resultado de la covariación entre la regulación génica de diferentes enzimas involucradas y los componentes del medio de cultivo [62]. El 6-ACA producido por fermentación necesita ser ciclado primero a CPL antes de la polimerización. Esta ciclación puede llevarse a cabo directamente usando un caldo de fermentación pretratado, sin necesidad de purificación previa del 6-ACA, como se describe en la patente de Guit [34]. Puede conseguirse una purificación adicional de la CPL mediante destilación [35].



(9)

El 6-ACA se puede convertir en CPL en ausencia de un catalizador, como lo demostró BASF [36] y DSM [37]. Una reacción por lotes, utilizando vapor de agua sobrecalentado, generó el 99% de rendimiento. Un proceso continuo en condiciones similares generó el 95% de rendimiento de CPL (Ec.10).

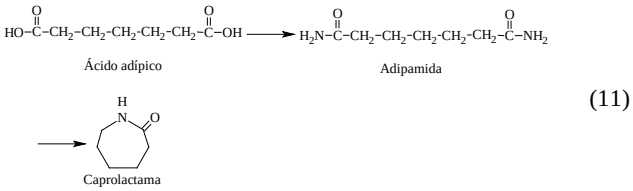


(10)

Genomatica prepara 6-ACA a partir del ácido 5-formilvalérico usando un biocatalizador [38] y también tiene una patente donde describe cómo producir una versión de los compuestos intermedios claves usados para la producción de nylon, entre ellos, el 6-ACA, a partir de materias primas renovables como los carbohidratos comercialmente disponibles [39]. Por otro lado, DSM ha demostrado a nivel de laboratorio dos vías sintéticas para la producción fermentativa de 6-ACA mediante ensayos enzimáticos in vitro con un conjunto de proteínas seleccionadas expresadas en la *E. coli* [33]. Por otra parte, tiene una patente para la transformación del 6-ACA a CPL [40].

2.5. El ácido adípico (ADA) para la producción de CPL

Otra ruta emergente para la producción de CPL, es la del ADA. Recientemente, Coudray y colaboradores demostraron la conversión directa en un solo recipiente del ADA a CPL con un rendimiento del 64% (Ec.11) [41].



(11)

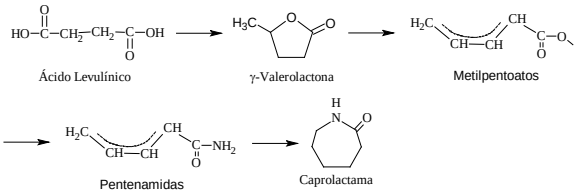
El ADA puede convertirse en ADN que a su vez puede convertirse en CPL. En la actualidad, el BD se utiliza para producir ADN, ya que es más económico, sin embargo, el aumento de los precios del BD butadieno han obligado a los participantes del mercado a revisar la ruta de ADA biobasado [42]. Entre las empresas que trabajan para desarrollar el ADA biobasado están DSM, BioAmber, Rennovia, Genomatica, Verdezyne y Biochemtex [43,44]. El proceso de Rennovia, que utiliza la oxidación del aire para convertir la glucosa en ácido glucárico, seguido por la hidrodesoxigenación para convertir el ácido glucárico en ADA, tiene un alto potencial para ser competitivo en costos con el proceso convencional DuPont/Invista de oxidación de ciclohexano, al igual que el proceso de Verdezyne, que utiliza enzimas modificadas genéticamente para fermentar la glucosa a ADA. La ventaja de ambas rutas biológicas es el uso de glucosa como materia prima, en comparación con el proceso convencional que utiliza ciclohexano con un precio mayor en el mercado. Sin embargo, desafíos significativos afectan a estos procesos alternativos como la alta carga, selectividad y productividad del catalizador (en el caso de Rennovia), y la alta tasa de rotación enzimática y cinética satisfactoria para la ruta de fermentación enzimática de Verdezyne [45].

2.5.1. Ruta del Ácido cis,cis-mucónico (MA) para la producción de ADA

La conversión del MA en ADA proporciona un rendimiento del 97%. Sin embargo, la producción del MA a partir de glucosa tiene un bajo rendimiento (24%), combinado con dificultades en su purificación. Por otra parte, convertir el MA directamente en CPL es otra ruta reciente. Se han obtenido rendimientos del 55% y es probable que mejoren rápidamente. Sin embargo, la producción biotecnológica del MA todavía tiene un bajo rendimiento y altos costos de procesamiento [46].

2.5.2. Producción de ADA a partir de Ácido Levulínico (LA)

La producción de ADA a través del LA y γ-valerolactona (GVL) da un rendimiento teórico global del 34%, en cuatro pasos. Sin embargo, el bagazo o residuos de alimentos se pueden usar como la materia prima de fermentación para producir el LA con un rendimiento del 83%. Raoufmoghaddam estudia una ruta catalizada desde el LA a la CPL (Ec.12). La transformación de LA en GVL mediante una reacción de hidrogenación tiene un rendimiento alto (>95%). La ruta propuesta procede a través de la destilación reactiva catalizada por ácido de GVL con metanol a una mezcla de metil pentenoatos isoméricos (MP), reacción de MP con amoníaco a las correspondientes pentenamidas, que finalmente se convierten en CPL a través de una reacción de hidroamidometilación intramolecular catalizada con rodio [47].



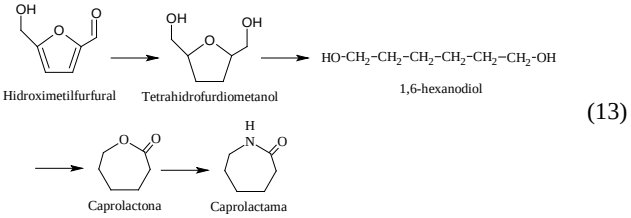
(12)

2.5.3. El Ácido Succínico (SA) para la producción de ADA

La ruta de SA a ADA a través del 1,4-butanodiol (BDO) muestra un 66% de rendimiento teórico, en dos pasos. Del mismo modo, residuos de panadería pueden ser usados como la materia prima de la fermentación para el SA, con un 35% de rendimiento global. Además, se espera que los precios del LA y SA caigan radicalmente a medida que mejoren sus métodos biotecnológicos de producción [1].

2.5.4. Síntesis de ADA a partir de 5-hidroximetilfurfural (HMF)

La ruta del HMF al ADA ha sido muy investigada. A partir de fructosa se tiene un rendimiento teórico de ADA hasta del 78%. Sin embargo, estas son materias primas costosas y el margen económico hacia el ADA es pequeño. El HMF obtenido partir de materias primas más baratas proporcionaría márgenes económicos más grandes, promoviendo su viabilidad. Por otro lado, Teddy estudia la conversión catalizada del HMF al 1,6-hexanodiol a través del Tetrahidrofurdiometanol (THFDM), convirtiéndolo luego a caprolactona y finalmente a CPL (Ec.13) [48].

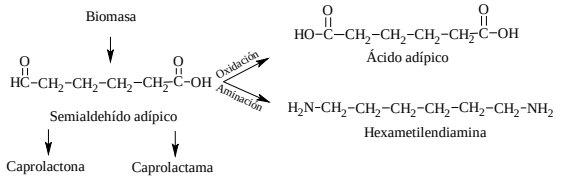


(13)

2.5.5. Semialdehído Adípico (SAA) como precursor de ADA

La ruta del SAA es otra combinación de biotecnología y catálisis química. Sin embargo, esta ruta se encuentra en fase inicial. Recientemente, la empresa BioAmber, un pionero en la producción de SA de base biológica, compró la licencia de la ruta de síntesis de Celexion [49] para explorar vías biotecnológicas para producir SAA [50], además, tiene una patente sobre la producción de SAA y otros compuestos orgánicos a partir de microorganismos recombinantes [51].

Este compuesto se puede utilizar como material de partida para producir caprolactona, CPL y HMDA (Ec.14). Por otra parte, su oxidación puede proporcionar una ruta atractiva para ADA [49,50]. Invista también cuenta con una patente sobre la producción de SAA a partir de microorganismos [52].



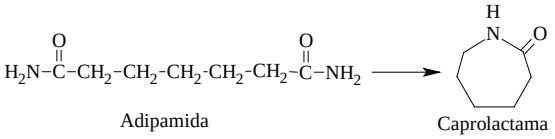
(14)

2.5.6. Reducción de Ácido Glucárico (GA) para la producción de ADA

Un ejemplo prometedor es la oxidación selectiva de la glucosa a GA (66% de rendimiento) y su posterior reducción a ADA (89% de rendimiento). El rendimiento global teórico es del 59%, sin embargo, la desactivación del catalizador es un problema. Un proceso combinado estable y eficiente abriría un camino viable a una ruta del ADA. Rennovia utiliza un proceso químico catalítico patentado para producir ADA, usando glucosa como materia prima. El proceso utiliza catálisis heterogénea, que primero produce ácido glucárico a través de una oxidación aeróbica de glucosa seguida de hidrogenación catalítica a ADA [53,54].

2.5.7. Ruta de la Adipamida

También se observa la valorización de la adipamida, un subproducto común en las reacciones del MA y en la síntesis de CPL. El rendimiento máximo conseguido hasta ahora para la conversión de adipamida a CPL es sólo del 35%. La adipamida se puede obtener del adiponitrilo o a través de la amidificación del ADA. Para convertir directamente adipamida a CPL, Frost y colaboradores utilizan un catalizador 8.6% Pd/Davisil 635 (mol 5.6%) en diglima, a 250 °C (Ec.15) [41].



(15)

2.6. Benceno

La producción de BTX (Benceno, Tolueno, Xileno) a partir de biomasa es un enfoque relativamente nuevo, el proceso aún no es comercial, sin embargo, tiene el potencial para serlo. Utilizando biomasa lignocelulósica como materia prima alcanza rendimientos alrededor del 15% [55]. El proceso BioForming® de Virent convierte materias primas derivadas de plantas en un producto BioFormate® que es análogo al reformado del petróleo. Usando procesamiento convencional de aromáticos, Virent ha producido paraxileno renovable, xilenos mixtos, tolueno, benceno y Aromático 100 [56,57]. Por otro lado, Anelloteh, ha desarrollado un proceso de pirolisis catalítica rápida (CFP) en un reactor de lecho fluidizado para la conversión de biomasa no alimentaria en BTX. El producto de salida del reactor requiere solo un hidrotratamiento suave para eliminar las impurezas de trazas utilizando la tecnología de refinado de petróleo existente [58,59].

2.7. Fenol

La producción renovable del fenol se ha enfocado a través de la pirolisis o despolimerización térmica de biomasa lignocelulósica en ausencia de oxígeno añadido, proceso en el que se produce un bioaceite. El espectro de productos obtenidos de este proceso depende de las condiciones de temperatura, presión y tiempo de residencia de los vapores liberados de la pirólisis. Los principales compuestos de valor obtenidos en este proceso son fenoles, ácidos orgánicos, furfural, HMF y levoglucosano. La base para la producción del fenol y los otros compuestos de valor, es el fraccionamiento o separación del bioaceite en varias calidades de aceites y su refinamiento hasta los compuestos finales puros [44,60].

También se ha demostrado la producción del fenol a partir de glucosa, usando tirosina como precursor y con una cepa tolerante a solventes como la *Pseudomonas putida* S12. Esta cepa produce entre 0.14 y 0.47 g/L de fenol, con un rendimiento 3.5 g/g glucosa en 24 h, incrementándose a 5.5 g/L al extraerse con octanol. Por esta vía, el mantenimiento de la biomasa bacteriana durante períodos prolongados es un factor crítico, así como el mejoramiento de las condiciones óptimas de cultivo que determinan la eficiencia de la ruta metabólica [61].

3. Conclusiones

A pesar de encontrar muchas alternativas para la producción biobasada de CPL, este no es un tema que aparezca frecuentemente en la literatura científica; debido a que la CPL no es uno de los focos de investigación de la biotecnología mundial. Sin embargo, si se logra su producción con éxito mediante la fermentación, puede entrar en la producción industrial muy rápidamente, lo que conduciría a importantes cambios en la industria del nylon y la cadena de suministro de poliamidas. Aunque cada una de las rutas de síntesis planteadas tiene elementos a favor y en contra, la ruta a través de la LYS es la más referenciada en la literatura ya que es la ruta que se observa más prometedora al involucrar pocas etapas de reacción, tener la posibilidad de partir de materias primas económicas y llevarse a cabo bajo condiciones de operación moderadas, que, si se logran mejorar los rendimientos, conduciría a un proceso económicamente viable y de rápida implementación.

En Colombia no se identificaron esfuerzos importantes de investigación y desarrollo de ninguno de los procesos presentados, a pesar de su potencial por la abundancia de materias primas renovables. Sin embargo, la biotecnología debe ser considerada como un sector clave sobre el cual se sustente el avance de la sociedad colombiana y mundial, y debe contribuir a su desarrollo económico, competitividad y calidad de vida. En consecuencia, la Administración Pública,

desde su responsabilidad y competencia, debe poner todos los instrumentos a su alcance para permitir, facilitar y promover el adecuado desarrollo de la biotecnología, con actuaciones en diversos ámbitos, entre los que se incluyen la regulación normativa y legislativa, la financiación, la educación y la divulgación.

4. Referencias

[1] Beerthuis, R., Rothenberg, G. and Shiju, N.R., Catalytic routes towards acrylic acid, adipic acid and ε-caprolactam starting from biorenewables. Green Chemistry. Royal Society of Chemistry, 17, pp. 1341-1361, 2015. DOI: 10.1039/c4gc02076f.

[2] Xiang, L., Polyamide & Intermediates Markets - World Market Overview. Tecnon Orbichem. Seoul: Synthetic Fibres Raw Materials Committee Meeting at APIC. 2015.

[3] Son, P.A., Syntheses of levulinic acid g-valerolactone from biomass-derived compounds using heterogeneous catalyts. School of Materials Science. Japan Advanced Institute of Science and Technology. [online]. 2014. Available at: http://hdl.handle.net/10119/12228.

[4] NTHU. Chap 17 Bio-based production of Chemicals. [online]. 2015. Available at: che.nthu.edu.tw: http://www2.che.nthu.edu.tw/~biohu/download/handouts/2015%20Introduction%20to%20Biotechnology/Chap17%20Bio-based%20Production%20of%20Chemicals.pdf.

[5] Fukao, M. and Tomoi, H., Method for manufacturing cyclohexanone oxime, Patent US 0078014 A1, 2012.

[6] E4tech; RE-CORD; WUR., From the sugar platform to biofuels and biochemicals final report for the European Commission. contract No. ENER/C2/4232012/SI2.673791. 2015. London.

[7] Basudeb, S.M.M. and Abu, O., Advances in 5-hydroxymethylfurfural production from biomass in biphasic solvents. Green Chemistry, 16, pp. 24-38, 2014. DOI: 10.1039/C3GC41324A.

[8] Lunt, J., Marketplace opportunities for integration of biobased and conventional plastics, AURI, Minnesota, [online] 2014, 115 P. Available at: http://www.auri.org/assets/2014/09/AIC185.iobased1.pdf

[9] Frost, W.J., Synthesis of caprolactam from lysine, Patent US 8367819 B2, 2013.

[10] Sandström, A.G., Almqvist, H., Portugal-Nunes, D., Neves, D., Lidén, G. and Gorwa-Grauslund, M.F., Saccharomyces cerevisiae: A potential host for carboxylic acid production from lignocellulosic feedstock. Appl Microbiol Biotechnol. 98(17), pp. 7299-7318, 2014. DOI: 10.1007/s00253-014-5866-5.

[11] Wolters, H.F., Lane, S.L., Buijs, W., Haasen, N.F. and Herkes, F.E., Process for the preparation of epsilon-caprolactam and epsilon-caprolactam precursors. Patent US 5700934 A, 1996.

[12] Li, W., Xu, Z., Zhang, T., Li, G., Jameel, H., Chang, H.-m. and Ma, L., Catalytic conversion of biomass-derived carbohydrates into 5-hydoxymethylfurfural using a strong solid acid catalyst in aqueous gamma-valerolactone. BioResources, 11(3), pp. 5839-5853, 2016.

[13] Bioplastics Magazine. Versalis and genomatica produce bio-rubber with bio-butadiene from sugars. [online]. 17 february 2017. Available at: http://www.bioplasticsmagazine.com/en/news/meldungen/20170217-Genomatica-and-Versalis-reach-milestone-in-bio-based-rubber.php.

[14] Angelici, C., Weckhuysen, B.M. and Bruijnincx, P., Chemocatalytic conversion of ethanol into butadiene and other bulk chemicals. ChemSusChem, 6(9), pp. 1595-1614, 2013. DOI: 10.1002/cssc.201300214.

[15] Abubackar, H.N., Veiga, M.C. and Kennes, C., Ethanol and acetic acid production from carbon monoxide in a clostridium strain in batch and continuous gas-fed bioreactors. International Journal of Environmental Research and Public Health, 12, pp. 1029-1043, 2015. DOI: 10.3390/ijerph120101029.

[16] BioplasticsMAGAZINE. Novamont opens plant for industrial production of bio-based butanediol. Monchengladbach: Polymedia Publisher GmbH. October 2016.

[17] Eni. Eni/Versalis and genomatica launch joint venture for bio-based butadiene production, San Donato Milanese, [online]. 2013, 2 P. Available at: https://www.eni.com/docs/en_IT/enicom/media/press-release/2013/04/2013-04-11-versalis-eni-launch--bio-based-production.pdf.

[18] Business Wire., Global bioenergies hits milestone in synthos partnership by opening the way to bio-sourced butadiene, EVRY, France and OŚWIEÇIM, Poland, [online]. 2012. Available at: http://www.businesswire.com/news/home/20121205006561/en/GLOBAL-BIOENERGIES-hits-milestone-SYNTHOS-partnership-opening

[19] Invista. Invista and lanzatech sign joint development agreement for bio-based butadiene, [online]. 2012. Available at: http://www.invista.com/en/newsroom/pr-invista-and-lanzatech-sign-joint-development-agreement-for-bio-based-butadiene.html

[20] Bomgardner, M., Cobalt advances two biobased chemicals, Chemical & Engineering News, [online]. 91(16), pp. 18-19, 2013. Available at: http://cen.acs.org/articles/91/i16/Cobalt-Advances-Two-Biobased-Chemicals.html?type=paidArticleContent.

[21] Bomgardner, M., Renewable butadiene deals proliferate. Chemical & Engineering News, [online]. 91(50), pp. 13-14, 2013. Available at: http://64.124.29.44/articles/91/i50/Renewable-Butadiene-Deals-Proliferate.html?type=paidArticleContent.

[22] Berg, C., Genomatica enters strategic partnership with M&G, Renewable Chemicals. [online]. 2014. Availabel at: http://stage.renewablechemicals.agra-net.com/genomatica-enters-strategic-partnership-with-mg/

[23] Lane, J., Global bioenergies: biofuels digest's 2014 5-minute guide, Biofuels Digest. [online]. 2014. Available at: http://www.biofuelsdigest.com/bdigest/2014/03/06/global-bioenergies-biofuels-digests-2014-5-minute-guide/

[24] Zanghellini, A., Invista and Arzeda enter agreement to develop bio-derived raw materials, in: Wichita, K. and Seattle, [online]. 2013. OAvailable at: http://arzeda.com/2013/02/invista-and-arzeda-enter-agreement-to-develop-bio-derived-raw-materials-2/

[25] Bomgardner, M., ... And work with Lanzatech on biobased butadiene, Chemical & Engineering News, [online]. 90(34), pp. 14-15, 2012. Available at: http://cen.acs.org/articles/90/i34/Work-LanzaTech-Biobased-Butadiene.html?type=paidArticleContent

[26] Bomgardner, M., Biobased chemicals and fuels face growing pains, Chemical & Engineering News, [online]. 91(26), pp. 14-15, 2013. Available at: http://cen.acs.org/articles/91/i26/Biobased-Chemicals-Fuels-Face-Growing.html?type=paidArticleContent

[27] Bomgardner, M., Two biobased rubber projects launch, Chemical & Engineering News, 91(46), [online]. pp. 17-18, 2013. Available at: http://cen.acs.org/articles/91/i46/Two-Biobased-Rubber-Projects-Launch.html?type=paidArticleContent

[28] Makshina, E.V., Dusselier, M., Janssens, W., Degreve, J., Jacobs, P. A. and Sels, B.F., Review of old chemistry and new catalytic advances in the on-purpose synthesis of butadiene, Chemical Society Reviews, 43, pp. 7917-7953, 2014. DOI:10.1039/C4CS00105B

[29] Shen, Z., Yu, X. and Chen, J. Production of 5-Hydroxymethylfurfural from fructose catalized by sulfonated bamboo-derived carbon prepared by simultaneous carbonization and sulfonation. BioResources, 11(2), 3094-3109, 2016.

[30] Raemakers-Franken, P.C., Nossin, P.M., Brandts, P.M. and Wubbolts, M.G., Biochemical synthesis of 6-amino caproic acid. Patent EP 1706501 B1, 2010.

[31] Smolarski, N., High-value opportunities for lignin: Unlocking its potential market insights. [online]. 2013. Available at: greenmaterials.fr: https://www.greenmaterials.fr/wp-content/uploads/2013/01/High-value-Opportunities-for-Lignin-Unlocking-its-Potential-Market-Insights.pdf

[32] Miller, J. and Faleiros, M., Lignin: Technology, applications, and markets. RISI Latin American Pulp & Paper Outlook Conference. [online]. 2016. Market-Intell LLC. Available at: http://events.risiinfo.com/latin-american-conference/sites/default/files/presentations/2016/Miller%20Presentation.pdf

[33] Turk, S.C., Kloosterman, W.P., Ninaber, D.K., Kolen, K.P., Knutova, J., Suir, E., Schürmann, M, Raemakers-Franken, P.C., Müller, M., de Wildeman, S.M., Raamsdonk, L.M., van der Pol, R., Wu, L., Temudo, M.F., van der Hoeven, R.A., Akeroyd, M., van der Stoel, R.E., Noorman, H.J., Bovenberg, R.A. and Trefzer, A.C., Metabolic engineering toward sustainable production of Nylon-6, ACS Synth. Biol., 5(1), pp. 65-73, 2016. DOI:10.1021/acssynbio.5b00129

[34] U.S. Department of Agriculture. Renewable chemicals & materials opportunity assessment. Final report. New York: Nexant. [online]. 2014. Available at: http://www.usda.gov/oce/reports/energy/USDA_RenewChems_Jan2014.pdf
[35] Lau, P.C., Quality living through chemurgy and green chemistry. Green Chemistry and Sustainable Technology. Québec, Canada: Springer, 2016. DOI: 10.1007/978-3-662-53704-6.
[36] Pharmacompass. [online]. 2017. Available at: https://www.pharmacompass.com/active-pharmaceutical.
[37] Klausli, T., A new process for a particular platform chemical could be set to benefit the biofuels world. DOIng it the 5-HMF way. (AVA-Biochem, Ed.) Biofuels International, [online]. 75, 2014. Available at: http://www.ava-biochem.com/media/downloads_EN/documents/Biofuels_International_5-HMF_Article.pdf
[38] Petronella, C.R.F., Schurmann, M., Trefzer, A.C. and De Wildeman, S.M.A., Preparation of 6-aminocaproic acid from 5-formylvaleric acid. Patent US 8673599 B2, 2014.
[39] De Jong, E., Higson, A., Walsh, P. and Wellish, M., Bio-Based chemicals value added products from biorefineries. Task 42 Biorefinery, IEA Bioenergy, Wageingen, [online]. 2012. Available at: http://www.ieabioenergy.com/wp-content/uploads/2013/10/Task-42-Biobased-Chemicals-value-added-products-from-biorefineries.pdf.
[40] Teong, S.P., Yi, G. and Zhang, Y., Hydroxymethylfurfural production from bioresources: past, present and future. Green Chemistry, 16, pp. 2015-2026, 2014.
[41] Coudray, L., Bui, V. and Frost, J.W., Procédé de préparation du caprolactame et de polyamides à partir de celui-ci. Patent WO 141997 A1, 2012.
[42] Transparency. Synthetic and bio-based adipic acid market - global industry analysis, market size, share, growth and forecast, 2012-2018. Transparency Market Research, Albany New York, United States, 2012, 86 P.
[43] Babic, K., Parton, R. and Engendahl, B., Bioboost.eu. [online]. 2015. Renewable phenol for DSM. A process for chemicals and fuels. Available at: http://www.bioboost.eu/uploads/files/07-engendahl_babic_dsm.pdf
[44] De Jong, E., Higson, A., Walsh, P. and Wellisch, M., Biobased chemicals value added products from biorefineries, IEA Bioenergy, [online]. 2013. Available at: http://www.ieabioenergy.com/wp-content/uploads/2013/10/Task-42-Biobased-Chemicals-value-added-products-from-biorefineries.pdf
[45] IHS, Bio-based adipic acid, Report 284, IHS Markit, [online]. 2012. Available at: http://www.ihs.com/products/chemical/technology/pep/bio-based-adipic-acid.aspx
[46] Coudray, L., Bui, V., Frost, J.W. and Schweitzer, D., Process for preparing caprolactam and polyamides therefrom. Patent US 0085255 A1, 2013.
[47] Raoufmoghaddam, S., Development of homogeneous catalysts for the selective conversion of levulinic acid to caprolactam. Dissertation, Leiden University, Leiden, Países Bajos, [online]. 2013. Available at: https://openaccess.leidenuniv.nl/bitstream/handle/1887/22931/01.pdf?sequence=21
[48] Teddy, T., Caprolactam from renewable resources: catalytic conversion of 5-hydroxymethylfurfural into caprolactone. MSc. Thesis, University of Groningen, Groninga, Países Bajos, 2013.
[49] European Commission. Environmental Factsheet: Amino acids. [online]. 2015. Available at: https://biobs.jrc.ec.europa.eu/sites/default/files/generated/files/documents/BISO%20EnvSust%20-%20Bioproducts%20-%20Amino%20Acids%20v2_151127.pdf
[50] Bioamber. Adipic semialdehyde C6 platform. Ontario, Canada, [online]. 2013. Available at: http://www.bio-amber.com/bioamber/en/innovation/c6_platform
[51] Lane, I., Rennovia and Johnson Matthey Davy Technologies to collaborate for glucaric acid, adipic acid project. Biofuel Digest. [online]. 2014. Available at: http://www.biofuelsdigest.com/bdigest/2014/03/23/rennovia-and-johnson-matthey-davy-technologies-to-collaborate-for-glucaric-acid-adipic-acid-project/
[52] Invista, Botes, A.L. and Conradie, A.V.E., Methods of producing 6-carbon chemicals via CoA-dependent carbon chainelongation associated with carbon storage. Patent US 031227, 2013.
[53] Lane, J., Johnson Matthey process technologies, rennovia start-up mini-plant for bio-based glucaric acid. Biofuels Digest, [online]. 2015. Available at: http://www.biofuelsdigest.com/bdigest/2015/07/19/johnson-matthey-process-technologies-rennovia-start-up-mini-plant-for-bio-based-glucaric-acid/
[54] McCoy, M., Duo to develop biobased adipic acid. Chemical & Engineering News, [online]. 2014. Available at: http://cen.acs.org/articles/92/i13/Duo-Develop-Biobased-Adipic-Acid.html
[55] Meuwese, A., The sustainability of producing BTX from biomass, Master report, Default Journal, University of Groningen, Groninga, Países Bajos, 2013.
[56] Moore, J., Frontiers in bioaromatics: Characterization, refining, and applications. World Congress on Industrial Biotechnology, Montreal, [online]. 2015. Available at: https://www.bio.org/sites/default/files/WorldCongress/Frank%20Liotta.pdf
[57] Virent., BioForm BZ® Bencene, Madison, Wisconsin, [online]. 2015. Available at: http://www.virent.com/wordpress/wp-content/uploads/2015/06/BioForm-BZ-Technical-Datasheet-May-2015.pdf
[58] Anellotech, Mazanec, T., Schmelzer, E., Pesa, F., McCullough, D., Song, R. and Cheng, Y., Chemical intermediates by catalytic fast pyrolysis process. Patent US 9249080 B2, 2016.
[59] Anellotech., Cost-competitive benzene, toluene and xylenes from biomass conversion. World Congress on Industrial Biotechnology, Philadelphia, PA, [online]. 2014. Available at: https://www.bio.org/sites/default/files/WorldCongress/David%20Sudolsky.pdf
[60] Cherubini, F., Jungmeier, G. and Bird, D.N., Greenhouse gas (GHG) and energy analysis of a bioethanol oriented biorefinery based on wood, IEA, Task 38 Bioenergy, Wageingen, [online]. 2012. Available at: http://task38.org/case%20studies/Austria_Case_Study_Long_form_final.pdf
[61] Fu, K., Chap 17 bio-based production of chemicals, en generic and tissue engineering lab, National Tsing Hua University (NTHU), [online]. 2015. Available at: http://www2.che.nthu.edu.tw/~biohu/download/handouts/2015%20Introduction%20to%20Biotechnology/Chap17%20Bio-based%20Production%20of%20Chemicals.pdf
[62] Zhou, H., Vonk, B., Roubos, J., Bovenberg, R. and Voigt, C., Algorithmic co-optimization of genetic constructs and growth conditions: application to 6-ACA, a potential nylon-6 precursor. Nucleic Acids Res, 43(21), pp. 10560-10570, 2015. DOI: 10.1093/nar/gkv1071.

D.A. Trujillo-Vera, es Esp en Gestión Energética Industrial 2011, del Instituto Tecnológico Metropolitano, Medellín, Colombia. Actualmente se desempeña como ingeniero de procesos en Enka de Colombia S.A. y estudiante de Maestría en el Centro de Estudios y de Investigación en Biotecnología CIBIOT.
ORCID: 0000-0002-1613-1334.

Y. Vélez-Salazar, es MSc en Biotecnología 2011, de la Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia. Actualmente se desempeña como docente investigador en la Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia y estudiante de Doctorado en el Centro de Estudios y de Investigación en Biotecnología (CIBIOT). Su trabajo se centra en el desarrollo de procesos biotecnológicos y síntesis orgánica.
ORCID: 0000-0002-2272-7222

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Sensitivity analysis of engine warm-up performance at idle conditions to the changes in compression ratio, ethanol content in gasoline fuel and cylinder head material

Carlos Alberto Romero-Piedrahita [a], Luz Adriana Mejía-Calderón [b] & Yamid Alberto Carranza-Sánchez [a]

[a] *Facultad de Tecnologías, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia. cromero@utp.edu.co, yamid@utp.edu.co*
[b] *Facultad de Ingeniería Mecánica, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia. adriamec@utp.edu.co*

Received: August 28th, de 2017. Received in revised form: January 16th, 2018. Accepted: January 31th, 2018

Abstract
This paper presents the evaluation of the effects caused by variations of the compression ratio, the material of the cylinder head and the composition of the fuel on the engine speed, fuel consumption, warm-up time and emissions of an air-cooled spark ignited engine using an experimental design methodology. The objective of the work was to determine the sensitivity of the engine responses operating at idle conditions, as well as the optimal combination between the mentioned parameters. Of the three factors evaluated, the compression ratio is the factor that has exerted the largest influence on the performance of the engine at idle speed. The steady-state temperatures of the engine reduce with the increase in the compression ratio, with the higher conductivity of the material and with the higher ethanol content.

Keywords: combustion engine; compression ratio; ethanol-gasoline blends; material; warm-up.

Estudio de sensibilidad del desempeño durante el calentamiento en vacío de un motor de combustión interna a cambios en su relación de compresión, el contenido de etanol en la mezcla combustible con gasolina y el material de la culata

Resumen
En este trabajo se presenta la evaluación de los efectos causados por variaciones de la relación de compresión, el material de la culata y la composición del combustible sobre la velocidad del motor, el consumo de combustible, el tiempo de calentamiento y las emisiones de un motor de encendido por chispa enfriado por aire, bajo una metodología de diseño de experimentos. El objetivo del trabajo ha sido determinar la sensibilidad de las respuestas del motor operando en vacío, así como la combinación óptima entre los parámetros mencionados. De los tres factores evaluados bajo los límites de las pruebas realizadas, la relación de compresión es el factor que ha ejercido la mayor influencia sobre el desempeño del motor bajo el régimen de marcha en vacío. Las temperaturas de estado estacionario del motor bajan con el aumento de la relación de compresión, con la mayor conductividad del material y con el mayor contenido de etanol.

Palabras clave: calentamiento; material de culata; mezcla etanol-gasolina; motor de combustión; relación de compresión.

1. Introducción

Entre las medidas para reducir la alta dependencia de los combustibles fósiles y para reducir las emisiones de CO, NOx, HC, material particulado, el perfeccionamiento de tecnologías para mejorar la eficiencia de los motores de combustión (aumento de la relación de compresión, reducción de las pérdidas de calor, sobrecarga, etc.) y la

How to cite: Romero-Piedrahita, C.A., Mejía-Calderón, L.A. and Carranza-Sánchez, Y.A., Estudio de sensibilidad del desempeño durante el calentamiento en vacío de un motor de combustión interna a cambios en su relación de compresión, el contenido de etanol en la mezcla combustible con gasolina y el material de la culata. DYNA, 85(204), pp. 238-247, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

sustitución de la gasolina por combustibles alternativos, figuran entre las más aplicadas [1]. De los combustibles alternativos, el etanol es uno de los más ampliamente utilizados por su alto octanaje, alta velocidad de combustión y la menor producción de gases contaminantes [2-4].

En Colombia, los incentivos orientados a desarrollar la agroindustria, promover el empleo en las zonas rurales, junto con las regulaciones gubernamentales para diversificar las fuentes de energía y reducir las emisiones de gases de efecto invernadero, apuntalan el uso del etanol para ser mezclado con la gasolina. En marzo de 2009, el gobierno promulgó el decreto 1135, estipulando que a partir del 1 de enero de 2012 el 60% de todos los vehículos nuevos con motores de hasta 2 litros deberían estar provistos de tecnología de combustible flexible que les permitiera operar con una mezcla de combustible 85% de etanol y 15% de gasolina (E85).

La evaluación del desempeño de motores de automóviles de encendido provocado alimentados con mezclas de etanol-gasolina ha sido objeto de trabajo de muchos investigadores y entre ellos destacan Hsieh et al. [5], Gravalos *et al.* [6], Sarkar *et al.* [7], Yücesu *et al.* [8].

La Universidad Tecnológica de Pereira, en Colombia, realizó y publicó los resultados de un estudio sobre el efecto y el rendimiento de los combustibles mezclados con etanol al 20 por ciento en volumen en automóviles propulsados por motores de encendido por chispa usados en Colombia [9], bajo el proyecto denominado *Protocolo E-20*.

Una amplia revisión de las investigaciones relacionadas sobre la operación de motores alternativos con mezclas de gasolina-etanol, fue realizada por el grupo del profesor Mantilla et. al [10]. Los autores analizan la influencia sobre el desempeño y las emisiones de los motores encendidos por chispa, cuando la gasolina es reemplazada por mezclas de gasolina y etanol, y fundamentan la necesidad de explotar la mejora del octanaje de sus mezclas mediante la modificación de la cámara de combustión y el aumento de la relación de compresión. También explican las necesidades de ajustar el transcurso de la combustión requeridas por la mayor temperatura necesaria para que el combustible inicie su proceso de oxidación, porque los calores de vaporización de las mezclas gasolina-etanol son mayores que los de la gasolina sin mezclar. Adicionalmente, Mantilla et. al invitan a la realización de ensayos experimentales para encontrar las relaciones entre la velocidad de la llama, las propiedades del combustible, y los parámetros característicos del proceso de combustión, de desempeño y las emisiones. Un factor que debe agregarse al estudio de desempeño de los motores con mezclas gasolina-etanol, es el material de la cámara de combustión (propiedades térmicas y físicas del material de las superficies de contorno), que influyen en las propiedades de la capa térmica, la interacción de ésta con la masa de trabajo y de manera importante en los procesos de intercambio de calor (calentamiento/enfriamiento de las partes metálicas del motor y de la mezcla, pérdidas de calor) [11-14].

Pese al extenso trabajo de investigación disponible relacionado con la gama de mezclas combustibles de etanol-gasolina en motores de combustión, la mayoría de ellos se han realizado con motores de automoción, mientras que es menos abundante la información relacionada con la influencia del etanol y sus mezclas con la gasolina sobre la operación de motores industriales y domésticos pequeños [15,19], motores cuyo número está aumentando, al tiempo que se procura la reducción del consumo de combustible y la limitación de las emisiones contaminantes en éstos.

Los motores pequeños tienen particularidades constructivas que los diferencian de los utilizados en automoción y son muy sensibles a las calibraciones de la mezcla aire-combustible. Estas diferencias y sensibilidades hacen suponer que los efectos producidos por la composición de las mezclas gasolina-etanol se manifiestan de manera especial en el desempeño y las emisiones de los motores pequeños [15, 16]. La mayoría de los motores de encendido provocado durante el calentamiento tras su puesta en marcha y también mientras funcionan en vacío, operan con mezclas ricas en combustible, por lo que la combustión es incompleta y son elevadas las emisiones de monóxido de carbono (CO) y de hidrocarburos sin quemar (HC) [20]. De ahí que, en la búsqueda de reducir las emisiones contaminantes, se busque reducir el tiempo de calentamiento de los motores, mediante diferentes estrategias en el sistema de gestión térmica de los motores y mediante las investigaciones en materiales para las partes, ante todo las que conforman la cámara de combustión [21-25]. La sensibilidad del motor a la composición del combustible depende también de su tiempo de operación en servicio: los depósitos acumulados en la cámara de combustión durante la operación de los motores, resultado de la acumulación de carbón, reducen la disipación de calor (los depósitos llegan a tener capacidad aislante cercana a la de algunos cerámicos como el óxido de zirconio) [16-18]; el desgaste del motor se refleja en el tiempo en la reducción de su relación de compresión efectiva.

Fundamentado en lo dicho, después del proyecto *Protocolo E-20*, se ha iniciado un nuevo estudio dirigido a la evaluación de la influencia de las mezclas de etanol en el rendimiento de los motores pequeños, considerando las variaciones de la relación de compresión (RC) y también los posibles efectos producidos por las propiedades de los materiales de la cámara de combustión. Se trata de un estudio a desarrollar en varias fases y la fase preliminar de ellas aquí presentada aborda, bajo una metodología de diseño de experimentos (DOE), la exploración de la sensibilidad del tiempo de calentamiento, el desempeño y las emisiones del motor operando en condiciones de ralentí, a los cambios en la composición del combustible, las propiedades térmicas de la culata y la RC.

Las propiedades térmicas de la culata y más ampliamente de todas las partes que cierran el volumen de los gases de trabajo en un motor, afectan los procesos de turbulencia, combustión, transferencia de calor *convectiva* entre los gases y las paredes del cilindro (influencia en procesos internos de turbulencia y combustión) y transferencia de calor *conductiva-convectiva* a través de los espesores de las paredes hacia el refrigerante y el ambiente (influencia en refrigeración y control de temperaturas de partes) [17]. Para simular la influencia integrada de dichas propiedades térmicas, se han considerado para la culata del motor dos materiales: aluminio y hierro fundido (la culata ha sido objeto de fabricación en el mismo marco del proyecto).

En el presente documento se describe inicialmente la

adecuación experimental para realizar los ensayos del motor en ralentí, posteriormente se describen las particularidades de los factores variados y seguidamente se explica la metodología de medición seguida. En la tercera parte del trabajo se analizan los resultados de los experimentos y en la parte final del documento se presentan las conclusiones.

2. Configuración experimental

El objetivo de este trabajo ha sido evaluar la influencia de las propiedades térmicas de la culata (empleando para su fabricación hierro fundido y aluminio), la RC y la composición del combustible sobre el tiempo de calentamiento del motor, su desempeño (expresado en la variación de las revoluciones y el consumo de combustible) y las emisiones en condiciones de ralentí, aplicando un Diseño de Experimentos (DOE). Además de proveer la alimentación con dos combustibles, los requisitos a cumplir por la instalación necesaria para realizar el estudio aquí presentado fueron varios. En primer lugar, el motor debía permitir el fácil desmontaje y montaje de las culatas de aluminio o de hierro fundido. En segundo lugar se tuvo que considerar una forma simple para cambiar la RC del motor. En tercer lugar, la instalación debía incorporar la instrumentación para medir la velocidad del motor, el consumo de combustible, las temperaturas y las emisiones.

Motor de prueba. El motor utilizado para realizar el trabajo experimental es un ROBIN EY 15D monocilíndrico de cuatro tiempos, de carburador, de válvulas en el bloque, culata de tipo L, con una cilindrada de 143 cm^3, potencia nominal 1,6 kW a 3000 rpm, diámetro/carrera de 63/46 mm, bloque y culata originales de aluminio, RC nominal de 7,2. Es un motor, representativo del grupo de "motores utilitarios" (clasificación de la EPA –Agencia para la Protección Ambiental- para equipos no manuales). Es un motor pequeño muy usado en aplicaciones de campo y también en conjuntos de moto-bombas y compresores. El diseño de su culata es simple, fácil de reproducir y de instalar; dado el recorrido de admisión, la mezcla llega con poca velocidad al cilindro, la turbulencia es casi nula, la combustión es lenta y propensa a presentar detonación por la larga longitud de la llama; la relación área/volumen de la cámara es alta y determina relativamente grandes pérdidas de calor [26,27].

Material de la culata. Para simular la reducción de la transferencia de calor de las paredes del cilindro (reducción que en operación puede ser causada por la acumulación de depósitos en la cámara de combustión o por suciedad externa de las superficies del motor), se moldeó y fabricó una culata de hierro fundido, preservando la geometría del diseño original. La conductividad térmica de la fundición es menor que la del aluminio ($K_{al} \approx 170$ W/m•K, $K_{hfl} \approx 80,2$ W/m•K).

Variación de la relación de compresión. Se adecúa la variación de la RC adecuando una pequeña cámara (una forma de cilindro hueco) roscada en el alojamiento de la bujía. Esto hace posible aumentar el volumen de compresión y así la RC. La solución es similar a las cámaras de combustión dividida, no introduce partes móviles, no demanda grandes cambios en la culata y, en consecuencia, es más adaptable al motor base. Con el adaptador, la RC original de 7,2 se reduce a 6,6. Es una reducción representativa de un motor desgastado por el uso (lo que, de paso, podría aprovecharse para valorar la influencia de las mezclas a medida que el motor se desgasta por el uso). Como el volumen de la *precámara adicionada* es relativamente pequeño en relación con el volumen de la cámara de combustión principal, constituye cerca de 9 %, se infiere que los pequeños efectos adicionales que pueden tenerse en el desarrollo de la combustión por el incremento de turbulencia, se compensarán con el pequeño también incremento de la transferencia de calor. En efecto, la variación de la relación área/volumen de la cámara de combustión es insignificante (la original es de 0,463 cm^{-1}, mientras que en la modificada es de 0,465 cm^{-1}). Un estudio experimental fundamental con mediciones en la cámara de combustión permitiría precisar estas incertidumbres.

Combustibles de prueba. Un motor es optimizado en fábrica para el combustible con el que presumiblemente operará. Sin embargo, en los motores pequeños industriales y estacionarios a los que se refiere esta investigación no se realizan, de forma general, modificaciones para aprovechar las ventajas del etanol en las mezclas etanol-gasolina. Aparte de esto, los servicios post-venta no prevén ajustes según el combustible dispuesto por el usuario. En general, los fabricantes de motores pequeños no asumen responsabilidades de garantía por la regularidad de operación de los motores alimentados con mezclas etanol-gasolina y los usuarios son los responsables de realizar los afinamientos, sin que se siga un instructivo recomendado y probado en algún banco de regulación. Son los técnicos de servicio quienes, con su experiencia más que con capacitación formal, realizan los afinamientos de motor cuando operan con combustible no previsto por el fabricante. Las mezclas etanol-gasolina utilizadas en este trabajo fueron E10 y E20. El "E" se refiere al etanol en volumen en la mezcla, y el "10" se refiere a 10 % de etanol, gasolina al 90%. Cuanto mayor sea el contenido de etanol en la mezcla, admitida al motor, mayor será el contenido de oxígeno en ella y, de no efectuarse las correcciones en el sistema de carburación, habrá cambios en la riqueza de la mezcla a medida que aumenta el contenido de etanol en el combustible. Para la preparación de las mezclas, se utilizó la gasolina comercial (provista al laboratorio) junto con alcohol etílico de 99,7% de pureza [28]. Las mezclas se prepararon diariamente para minimizar cualquier posibilidad de cambio de contenido causado por evaporación o humedad atmosférica. Las propiedades de los combustibles utilizados se muestran en la Tabla 1.

Equipo de medida. El consumo de combustible se mide con una balanza LEXUS de 0,5 g de resolución y un embudo de 300 ml. Se toman muestras de gases de escape a la salida del motor y se miden las emisiones de CO, CO_2 y HC con un analizador de gases QRO-401; la velocidad del motor se mide con un tacómetro de contacto TMRT de la serie SKF; las temperaturas del motor en el bloque y la culata se miden con un termómetro digital FLUKE 54 II y dos termopares tipo K. La presión de compresión del motor se mide con un medidor de compresión Milton. En la Fig. 1 se ilustra la configuración experimental.

Tabla 1.
Propiedades de las mezclas etanol-gasolina

Parámetro de calidad		Método de ensayo	Unidad	Gaso base	E10	E20
Contenido de etanol		ASTM D5501	% vol.	7,7	12,3	22,3
Rango de destilació	10 % evaporado	ASTM D86	ºC	51,8	52,3	53,4
	50 % evaporado		ºC	87,9	69,1	70,8
	90 % evaporado		ºC	161,4	159,3	154,9
	Punto final de ebullición		ºC	217,3	206	201,2
Contenido de agua		ASTM E203	% vol.	0,061	0,087	0,136
Presión de vapor Reid		ASTM D323	psi	8,8	8,7	8,4
Poder calorífico		ASTM D3338	MJ/kg		45,86	44,8
Número de octano (investigativo)		ASTM D2699	RON	89	90,9	95

Fuente: Adaptado de [28]

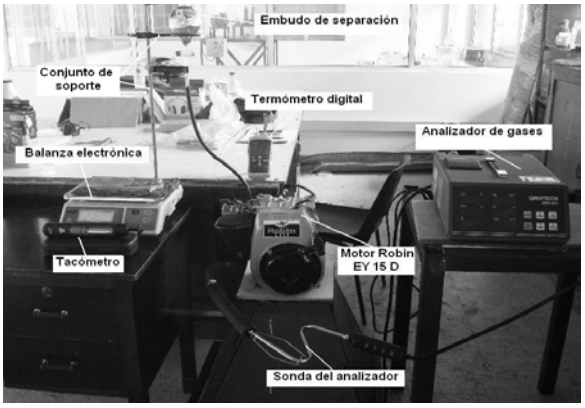


Figura 1. Configuración experimental.
Fuente: Los autores.

Tabla 2.
Diseño factorial del experimento

Prueba Nº	Material	RC, ε	Mezcla de combustible
1	-1, Al	1, 6,6	1, E10
2	-1, Al	1, 6,6	-1, E20
3	1, FUND	-1, 7,2	1, E10
4	1, FUND	1, 6,6	1, E10
5	-1, Al	-1, 7,2	-1, E20
6	1, FUND	-1, 7,2	-1, E20
7	1, FUND	1, 6,6	-1, E20
8	-1, Al	-1, 7,2	1, E10

Fuente: Los autores.

La evaluación del consumo de combustible se realiza con base en el ciclo de trabajo. El volumen total de combustible gastado se divide por el número total de ciclos que el motor completa durante la prueba. Así, para un ensayo cuya duración es de 47 minutos, a una velocidad de manivela de 1651,5 rpm, el motor monocilíndrico de cuatro tiempos ha completado 38810,25 ciclos, consumiendo 200 ml, con lo que el consumo de combustible es de 0,005153 ml/ciclo.

3. Diseño experimental

La instalación descrita se utiliza para investigar la influencia del material de la culata, la composición del combustible y la RC sobre el tiempo de calentamiento, el desempeño y las emisiones del motor. El desempeño del motor se evalúa en función del consumo de combustible y de la variación (aumento o disminución) de las revoluciones del motor, ajustadas inicialmente para el motor base (sin afinamiento). El interés de evaluar el tiempo de calentamiento del motor reside en el hecho de que la temperatura del motor (interna y externa) influye sobre el proceso de combustión, la transferencia de calor interna y externa del motor, y en la formación de emisiones de HC y CO. La temperatura del motor tiene efectos significativos en el consumo de combustible. Especialmente, las pérdidas energéticas por transferencia de calor y las pérdidas mecánicas disminuyen a medida que el motor se calienta. Por tanto, estas pérdidas son particularmente elevadas a temperatura ambiente durante los primeros minutos después del arranque en frío del motor hasta que éste alcanza su estado térmico óptimo (temperatura del aceite cercana a 90 ºC). En general, el calentamiento del motor es un período de sobreconsumo significativo de combustible [23,24,29].

Para la prueba de sensibilidad del comportamiento global del motor a los cambios en la conductividad de las paredes, la RC y la composición de la mezcla de etanol-gasolina, se eligió una metodología de *screening* (cribado). Para obtener el modelo empírico basado en experimentos factoriales, los parámetros operativos fueron codificados desde un bajo nivel de operación de -1 a un nivel de operación alto de +1. Todos los ensayos del motor (experimentos con sus réplicas) se hicieron sin realizar ajustes a los dispositivos controladores de mezcla en el carburador, ni al ángulo de avance del encendido (se trabajó con los ajustes recomendados para operación con gasolina regular), independientemente del cambio de los factores. En el diseño factorial completo se realizan ocho ensayos con ocho repeticiones para cada uno de ellos, como se describe en la Tabla 2.

4. Resultados y análisis

Después de procesar las respuestas de los 8 ensayos realizados para cada prueba, el resumen de los resultados se presenta en la Tabla 3. El análisis estadístico de los resultados del diseño de experimentos (DOE), explicado en esta sección, se realiza utilizando el programa computacional Statgraphics®, tomando cada variable de respuesta (consumo de combustible, variación de revoluciones, emisiones de escape y tiempo de calentamiento del motor en ralentí) en función de los factores (RC, material de la culata y composición del combustible). El análisis utiliza la tabla de análisis de varianza (ANOVA), el gráfico de Pareto, la media cuadrática y las superficies de respuesta. Se consideró un *p-valor* de 0,05 para la valoración de los factores estadísticamente significativos.

4.1. Análisis de consumo de combustible

El análisis de varianza para el consumo de combustible se presenta en la Tabla 4. Los resultados muestran que no hubo diferencias significativas en ninguno de los factores estudiados, ni en sus interacciones. La importancia relativa de los factores sobre el consumo de combustible se puede seguir en el gráfico de Pareto de la Fig. 2, destacándose la RC.

Tabla 3.
Resultados de las pruebas

Prueba Nº	Material	RC, ε	Mezcla de combustible	Consumo de combustible, ml/cicle	CO, %	CO_2, %	HC, ppm	RPM, min^{-1}
1	-1, Al	1, 6,6	1, E10	0,004976	0,36	5,15	2844	1651,5
2	-1, Al	1, 6,6	-1, E20	0,005243	0,19	5,10	3353,67	1576,7
3	1, FUND	-1, 7,2	1, E10	0,004601	4,44	10,87	1698,67	2079,8
4	1, FUND	1, 6,6	1, E10	0,004628	1,25	8,30	4603,50	1494,8
5	-1, Al	-1, 7,2	-1, E20	0,004225	0,62	12,20	1882,67	1920,5
6	1, FUND	-1, 7,2	-1, E20	0,004096	1,79	11,57	2263,50	1931
7	1, FUND	1, 6,6	-1, E20	0,005022	0,51	8,05	4714,67	1487,7
8	-1, Al	-1, 7,2	1, E10	0,004061	1,45	12,37	1564,17	2083

Fuente: Los autores

Tabla 4.
Análisis de varianza para el consumo de combustible

Fuente	Suma de Cuadrados	GdL	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
A:Material	3,10866e-9	1	3,10866e-9	0,04	0,8755
B: CR	1,04264e-6	1	1,04264e-6	13,15	0,1713
C:Mezcla	1,28721e-8	1	1,28721e-8	0,16	0,7561
AB	1,20222e-7	1	1,20222e-7	1,52	0,4342
AC	3,65446e-8	1	3,65446e-8	0,46	0,6203
BC	1,25776e-7	1	1,25776e-7	1,59	0,4272
Error total	7,92617e-8	1	7,92617e-8		
Total	1,42042 e-6	7	R-Square = 94,4199 %		

*GdL = grados de libertad
Fuente: Los autores.

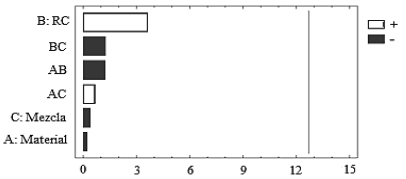


Figura 2. Diagrama de Pareto para consumo de combustible
Fuente: Los autores

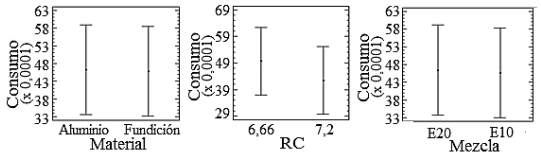


Figura 3. Gráficos de medias del consumo de combustible.
Fuente: Los autores.

En las gráficas de medias de la Fig. 3, con respecto al material de la culata y la composición del combustible, se observa que las medias correspondientes de consumo de combustible son muy cercanas. Para el factor de RC, hay una ligera diferencia en las medias de consumo.

La Fig. 4 muestra las superficies de respuesta de consumo de combustible para los dos materiales, variando la RC y la composición de combustible. El consumo máximo de combustible por ciclo (0,005243 ml/ciclo) corresponde a la culata de aluminio, RC de 6,6, y mezcla de combustible E20.

El consumo mínimo de combustible por ciclo (0,004061 ml/ciclo) tiene lugar con la culata de aluminio, RC de 7,2 y mezcla de combustible E10, traduciéndose en una reducción del 22,8% respecto al máximo consumo de combustible. A partir de la inclinación de la respuesta superficial en el plano frontal, puede decirse que hay una tendencia sólida en la influencia de la RC sobre el consumo de combustible del ciclo, que disminuye casi linealmente con el aumento de ésta.

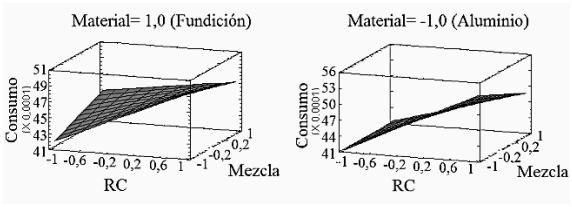


Figura 4. Superficie de respuesta para el consumo de combustible.
Fuente: Los autores.

Tabla 5.
Análisis de varianza de la velocidad del motor

Fuente	Suma de Cuadrados	GdL	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
A:Material	7100,74	1	7100,74	19,48	0,1418
B: CR	406649,0	1	406649,0	1115,63	0,0191
C:Mezcla	19337,6	1	19337,6	53,05	0,0869
AB	8001,13	1	8001,13	21,95	0,1339
AC	827,024	1	827,024	2,27	0,3731
BC	6574,6	1	6574,6	18,04	0,1472
Error total	364,5	1	364,5		
Total	448854,0	7	R-Square = 99,9188 %		

Fuente: Los autores.

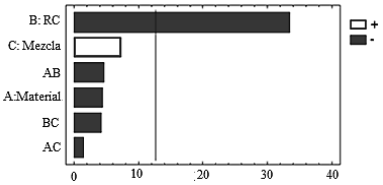


Figura 5. Diagrama de Pareto para la velocidad del motor.
Fuente: Los autores.

4.2. Análisis de afectación de la velocidad del motor

En la Tabla 5 se resume el análisis de varianza para la velocidad del motor. Las gráficas de Pareto de la Fig. 5, resumen y muestran la importancia relativa de cada factor sobre la velocidad.

Asumiendo que la potencia se gasta en vencer las pérdidas mecánicas, un aumento de revoluciones de ralentí indica una mayor conversión de la energía de combustible en energía mecánica. No hay diferencias significativas atribuibles al material de la culata, ni a la mezcla de combustible, aunque la velocidad del motor experimenta una diferencia estadísticamente significativa con la RC.

En la Fig. 6 se ilustran las medias de la velocidad del motor. Si bien es difícil detectar una diferencia significativa entre los materiales, la media de la velocidad es mayor con la

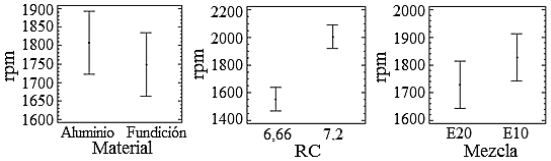


Figura 6. Gráficos de medias de la velocidad del motor.
Fuente: Los autores.

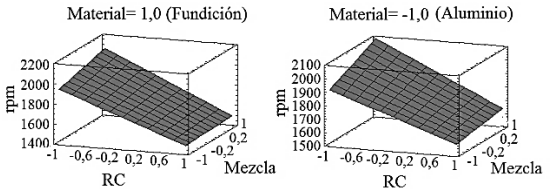


Figura 7. Superficies de respuesta de la velocidad del motor.
Fuente: Los autores.

RC 7,2, dando un aumento de la velocidad del motor cercano al 22,5%. El contenido de etanol en la mezcla también influencia ligeramente, aunque menos que la RC. Es mayor, en general, la velocidad del motor para la mezcla de combustible E10 en comparación con E20, lo que puede ser parcialmente explicado por su mayor poder calorífico.

Las superficies de respuesta de la Fig. 7 permiten la interpretación visual de los efectos de los factores sobre la velocidad del motor en función de la RC y la composición del combustible para valores fijos del material. La velocidad del motor aumenta linealmente con el aumento de la RC y la reducción del contenido de etanol en el de combustible. La mayor velocidad del motor, 2089,75 rpm, tiene lugar para una combinación de material aluminio, RC de 7,2 y mezcla de combustible E10. La velocidad más baja, 1480,92 rpm, ocurre con una combinación de material de hierro fundido, RC de 6,6 y mezcla de combustible E20.

4.3. Análisis de emisiones

De la revisión presentada por Orbital Engine Company [15] y de otras fuentes revisadas [5,7,8,10,19,30], se ve que un resultado de alimentar los motores con mezclas de etanol, bajo carga, es la reducción de las emisiones de CO y HC. Para ponderar los resultados de las emisiones en la presente investigación, debe considerarse que, a diferencia de los trabajos en la literatura, el motor aquí se ha ensayado en ralentí, con variación libre de la velocidad y de manera original (hasta donde los autores tienen conocimiento), combinando simultáneamente tres factores –RC, composición etanol-gasolina y material de la culata-. Adicionalmente como se anotó anteriormente, el motor ensayado no fue ajustado ni en mezcla aire/combustible, ni en avance de la chispa para simular el escenario real de operación en ralentí de un motor sin realización de afinado, dejando libre la variación de las revoluciones. Por esto último, los resultados de emisiones obtenidos en esta investigación pueden diferir de los obtenidos bajo carga en otras investigaciones en la literatura.

Análisis de monóxido de carbono. Del análisis de varianza que se muestra en la tabla 6 y del gráfico de Pareto

Tabla 6.
Análisis de varianza para las emisiones de CO

Fuente	Suma de Cuadrados	GdL	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
A:Material	3,60461	1	3,60461	18,46	0,1456
B: CR	4,48501	1	4,48501	22,96	0,1310
C:Mezcla	2,40901	1	2,40901	12,33	0,1766
AB	1,08781	1	1,08781	5,57	0,2552
AC	0,714013	1	0,714013	3,66	0,3068
BC	0,825612	1	0,825612	4,23	0,2882
ErrorTotal	0,195313	1	0,195313		

Fuente: Los autores.

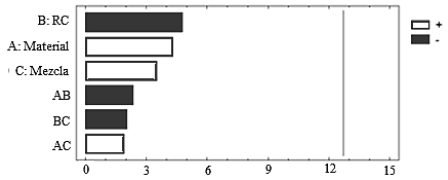


Figura 8. Diagrama de Pareto para las emisiones de CO.
Fuentes: Los autores.

ilustrado en la Fig. 8, se deduce que las contribuciones de los tres factores estudiados son del mismo orden. Además, la influencia de las interacciones en la respuesta estudiada es comparable a la de los principales factores. Esto dificulta aislar la influencia de cada uno de los factores implicados.

En la Fig. 9 se ilustran las medias de las emisiones de CO. No es posible a partir de las imágenes detectar una diferencia significativa entre las medias de CO generados por los niveles bajos y altos de los factores estudiados.

Durante el funcionamiento del motor en el modo de ralentí, los descensos de temperatura y presión al paso de la mezcla etanol-gasolina/aire por el difusor y la mariposa de aceleración del carburador, y las variaciones reales de la RVP de la mezcla pueden reflejarse en mezclas imperfectas, o muy ricas o muy pobres, que no queman bien, generan irregularidades de las revoluciones y pueden generar niveles de CO mayores a los generados cuando el motor trabaja bajo carga. Efectivamente, explicaciones más detalladas de lo que puede pasar se derivan de los análisis de Mantilla [10], quien observa que "puede pasar que al llegar la mezcla al cilindro, si no se dispone de energía suficiente para mantener la mezcla en estado de vapor, lo cual sucede, va a volver rápidamente a un estado líquido".

Las superficies de respuesta de las emisiones de CO como funciones de la RC y mezclas de combustible dejando fijo el factor material de culata, se muestran en la Fig. 10, donde la dependencia entre los niveles de emisiones de CO y el contenido de etanol en el combustible es lineal. A un nivel alto de la RC, cuanto mayor sea el contenido de etanol, menores serán los niveles de emisión de CO. Para el nivel bajo de la RC, la influencia del contenido de etanol no es definida cuando se usa la culata de aluminio. En general, a partir de las superficies de respuesta, se puede concluir que con la culata de hierro fundido los niveles de emisiones de CO son mayores que con la de aluminio. Esto podría atribuirse a la reducción de la transferencia de calor de la culata, que genera una reducción en la eficiencia volumétrica y, por consiguiente, en el contenido de aire de la mezcla.

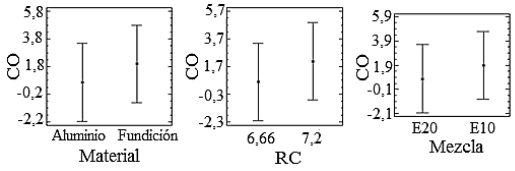


Figura 9. Gráfico de medias de las emisiones de CO.
Fuente: Los autores.

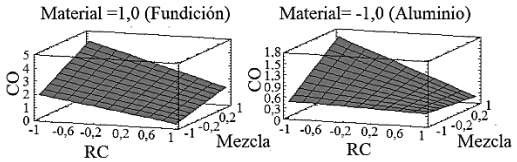


Figura 10. Superficies de respuesta de CO.
Fuente: Los autores.

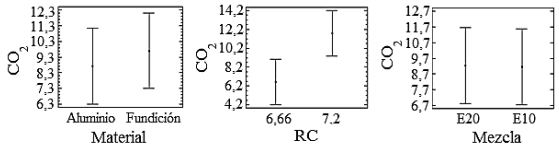


Figura 12. Gráficos de medias de emisiones CO_2.
Fuente: Los autores.

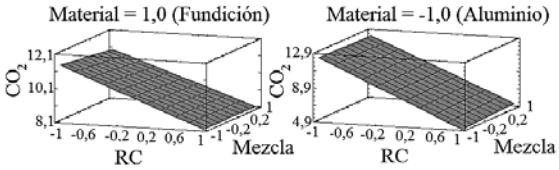


Figura 13. Superficie de respuesta de CO_2.
Fuente: Los autores.

Tabla 7.
Análisis de varianza para emisiones CO_2

Fuente	Suma de Cuadrados	GdL	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
A:Material	1,97011	1	1,97011	13,77	0,1676
B: CR	52,071	1	52,071	363,85	0,0333
C:Mezcla	6,6125e-3	1	6,6125e-3	0,05	0,8652
AB	8,46661	1	8,46661	59,16	0,0823
AC	5,61125e-2	1	5,61125e-2	0,39	0,6439
BC	8,61125e-2	1	8,61125e-2	0,60	0,5800
Error total	0,143112	1	0,143112		
Total	69,7997	7	R-Square = 99,7721%		

Fuente: Los autores.

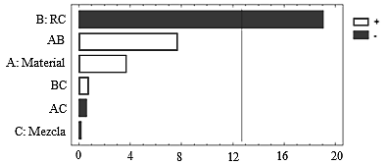


Figura 11. Diagrama de Pareto para emisiones CO_2.
Fuente: Los autores.

Los valores bajos de emisiones CO (0,203% en volumen) corresponden a la combinación de culata de aluminio, RC 6,6 y mezcla E10. Este resultado es inesperado, toda vez que las menores medias de emisiones de CO se dieron con mezcla E20. Esta aparente inconsistencia podría deberse a alguna variabilidad en el experimento porque el gráfico de medias de CO indica que la mezcla de combustible E20 produce menos emisiones de CO. La mayor cantidad de emisiones de CO (4,284%) se produce con la culata de hierro fundido, RC de 7,2 y mezcla E10.

Análisis de dióxido de carbono. A partir de la tabla de varianza, Tabla 7, y del diagrama de Pareto de la Fig. 11, se observa que el mayor efecto sobre las emisiones de CO2 se da con la RC, seguido del material de la culata y la interacción de estos dos factores.

Observando los diagramas de medias de la Fig. 12, se puede concluir que los valores altos de CO_2 son producidos con la mayor RC (un incremento cercano al 32% en las emisiones de CO_2, para un cambio de 6,6 a 7,2). El incremento de emisiones de CO_2 se debe a una mejor combustión. Las mezclas E10 y E20 son prácticamente idénticas en términos de emisiones de CO_2, emisiones medias bajo condiciones de ralentí y sin realizar cambios en el ajuste de calibración del motor. En estas condiciones, algunas propiedades del combustible, omo la velocidad de llama laminar y temperatura de vaporización pueden imponerse a la energía contenida en el combustible, como el poder calorífico, para reducir las emisiones de CO_2.

En la Fig. 13, las medias de las emisiones de CO_2 describen una marcada influencia lineal de la RC en las emisiones de CO_2, con una mayor inclinación para el aluminio, lo que indica una mayor sensibilidad de las emisiones a los cambios en las propiedades térmicas de los materiales de la cámara de combustión. De igual manera ocurre para el CO, los valores más bajos de emisiones de CO_2 ocurren con la culata de aluminio.

Las menores emisiones de CO_2 (4,96% en volumen) bajo las condiciones de los experimentos llevados a cabo en este trabajo corresponden a la combinación de culata de aluminio, RC de 6,6 y mezcla E20. Las pruebas con mayores emisiones de CO_2 (12,34% en volumen) corresponden a la combinación de culata de aluminio, RC 7,2 y mezcla E20. La aparente contradicción entre las gráficas de medias y las superficies de respuesta en relación con el material de la culata es debida a que el rango de variación del CO_2 es mayor para el aluminio que para la fundición. Debido a esto, el análisis de medias entrega valores de CO_2 mayores para la fundición con respecto al aluminio.

Análisis de emisiones de hidrocarburos. El análisis de varianza para hidrocarburos se presenta en la Tabla 8. Se observan diferencias significativas en el factor de RC, seguido por el factor de material de la culata y la interacción de estos dos factores. El diagrama de Pareto de la Fig. 14, confirma la fuerte influencia de la RC en las emisiones de HC. A diferencia del diagrama de Pareto para el CO_2, la composición de la mezcla ejerce cierta influencia en los niveles de emisiones HC no quemadas. Incrementando el contenido de etanol en la mezcla, las emisiones de HC se disminuyen considerablemente en condiciones de ralentí.

En la Fig. 15 se ilustra la gráfica de medias de las emisiones de HC. El incremento de la RC se traduce en una reducción de las emisiones HC. Las medias de HC son menores para relación de 7,2, lo cual se explica por el mejoramiento del proceso de combustión, la reducción del área de intersticios y del volumen de la cámara de combustión.

Tabla 8.
Análisis de varianza de emisiones de hidrocarburos

Fuente	Suma de Cuadrados	GdL	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
A:Material	1,6524e6	1	1,6524e6	31,79	0,1117
B: CR	8,21509e6	1	8,21509e6	158,06	0,0505
C:Mezcla	2,82816e5	1	2,82816e5	5,44	0,2578
AB	8,48364e5	1	8,48364e5	16,32	0,1545
AC	2,89446e3	1	2,89446e3	0,06	0,8525
BC	8,61263e3	1	8,61263e3	0,17	0,7539
Error total	5,19757e4	1	5,19757e4		
Total	1,10622e7	7	R-Square = 99,5301 %		

Fuente: Los autores.

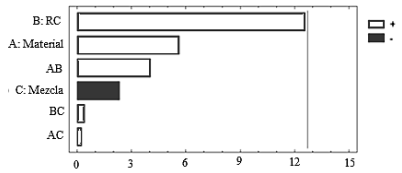


Figura 14. Diagrama de Pareto para emisiones HC
Fuente: Los autores.

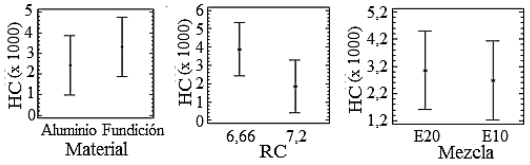


Figura 15. Gráficos de medias para las emisiones de hidrocarburos.
Fuente: Los autores.

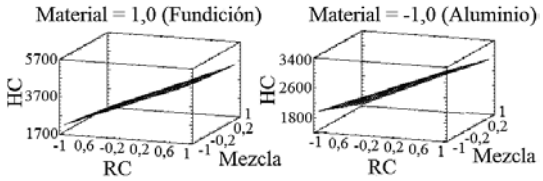


Figura 16. Superficie de respuesta para las emisiones HC.
Fuente: Los autores.

Con la culata de aluminio las emisiones de HC son menores que usando la culata de fundición. La media de emisiones de hidrocarburos es ligeramente superior para la mezcla E20. Es difícil concluir sobre el efecto de la interacción de la RC y material de culata en las emisiones de HC, aunque una explicación podría darse a partir de las particularidades de la combustión y la limpieza del volumen adicional de la precámara creada para reducir la RC, donde se posiciona la bujía de encendido (efectivamente, el tipo de trabajo no contempla la valoración de las alteraciones del proceso de combustión causadas por la precámara).

En la Fig. 16 se presenta la superficie de respuesta de las emisiones de HC en función de la RC y el material de la culata. Se observa que las pendientes de las emisiones de HC en función de la RC son más pronunciadas para la culata de fundición que para la de aluminio. La menor cantidad de emisiones HC (1438,57 ppm) se obtienen con una combinación de factores de culata de aluminio, mayor RC (7,2) y mezcla E20. La mayor cantidad de emisiones HC (4795,27 ppm) corresponde a la interacción de culata de fundición, menor RC y mezcla E20.

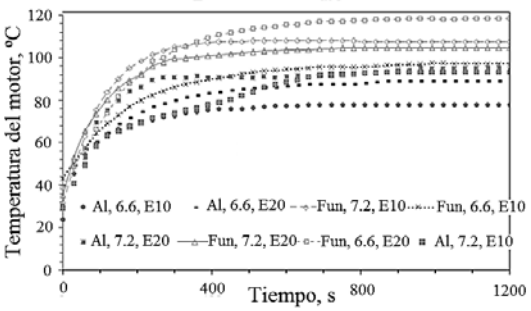


Figura 17. Histórico de temperaturas del motor durante el calentamiento.
Fuente: Los autores.

Tabla 9.
Tiempo requerido para alcanzar la temperatura objetivo de motor.

Número de prueba	Tiempo, $t_{75ºC}$, min
1 (Al, 6,6, E10)	6
2 (Al, 6,6, E20)	3,65
3 (FUND, 7,2, E10)	1,5
4 (FUND, 6,6, E10)	2,85
5 (Al, 7,2, E20)	1,9
6 (FUND, 7,2, E20)	2,1
7 (FUND, 6,6, E20)	1,7
8 (Al, 7,2, E10)	5,4

Fuente: Los autores.

Tabla 10.
Análisis de varianza del tiempo de calentamiento del motor.

	Suma de Cuadrados	GdL	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
A:Material	1,36125	1	1,36125	1,29	0,4590
B: CR	5,12	1	5,12	4,87	0,2708
C:Mezcla	9,68	1	9,68	9,21	0,2027
AB	0,045	1	0,045	0,04	0,8701
AC	0,0245	1	0,0245	0,23	0,7137
BC	3,51125	1	3,51125	3,34	0,3187
Error total	1,05125	1	1,05125		
Total	21,0137	7	R-Square = 94,9973 %		

Fuente: Los autores.

4.4. Análisis del calentamiento

Las curvas de variación de la temperatura del motor durante el periodo de calentamiento operando en vacío, después del arranque del motor, son presentadas en la Fig. 17. En la Tabla 9, se muestra el periodo de calentamiento del motor, definido aquí como el tiempo requerido para alcanzar una temperatura de 75ºC.

Es importante señalar las elevadas temperaturas de culata alcanzadas en las pruebas correspondientes a la culata de hierro fundido en combinación con el valor más alto de la RC. Como es de esperar, la temperatura en estado estacionario es menor para los ensayos con culata de aluminio. Con la culata de fundición y RC baja, el aumento del contenido de etanol tiene un efecto muy grande, superando el sobrecalentamiento relativo los 20 ºC.

En la Tabla 10 se tiene el análisis de varianza para el calentamiento del motor.

Aunque no hay una diferencia significativa del efecto de los factores sobre el calentamiento del motor, sí puede observarse que el material de la culata tiene una mayor influencia, seguido de la mezcla de combustible. El diagrama de Pareto de la Fig. 18 confirma la importancia del material de la culata en el calentamiento del motor.

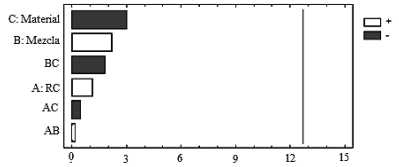


Figura 18. Diagrama de Pareto para el tiempo de calentamiento del motor. Fuente: Los autores.

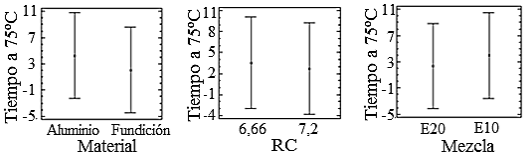


Figura 19. Gráficos de medias para el tiempo de calentamiento del motor. Fuente: Los autores.

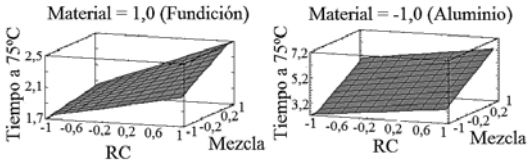


Figure 20. Superficie de respuesta del tiempo de calentamiento del motor. Fuente: Los autores.

En la Fig. 19, se muestran los diagramas de medias del tiempo de calentamiento. A partir de ellos, se puede observar que la temperatura de calentamiento de 75ºC se alcanza primero en el motor con culata de hierro fundido y luego en el de aluminio. En ambos casos, la presencia de etanol y el incremento de la RC mejoran la combustión y el tiempo de calentamiento del motor disminuye. Las temperaturas de estado estacionario del motor bajan con el aumento de la RC, con la mayor conductividad del material y con el mayor contenido de etanol. Las diferencias de temperatura de estado estacionario con el cambio de E10 a E20 son mayores cuando el material es de mayor conductividad térmica.

En la Fig. 20 se tienen las superficies de respuesta del tiempo de calentamiento. El calentamiento más lento se realiza con la combinación de culata de aluminio, menor RC y mezcla E10. El motor tiene el calentamiento más rápido, 1,7375 min, con la culata de fundición, RC 7,2 y mezcla combustible E20.

5. Conclusiones

En el presente artículo se ha presentado la exploración de la influencia combinada de la RC, el material de la culata y el contenido de etanol en la gasolina sobre el desempeño de un motor mono-cilíndrico comercial pequeño, siguiendo una metodología de diseño de experimentos. Los ensayos se han realizado sin carga y la valoración del desempeño se ha hecho a través de las revoluciones del cigüeñal, tomado como indicador de variación de la potencia asumiendo constantes las pérdidas mecánicas, el consumo volumétrico de combustible por ciclo, las emisiones en los gases de escape y el tiempo de calentamiento hasta alcanzar la temperatura de 75 ºC en las superficies de la culata.

Tabla 11.
Optimización de las variables de respuesta

Variable de respuesta	Material		Relación de compresión	Mezcla	Valor
Consumo de combustible por ciclo, ml/cilo	Mínimo	Aluminio	7,2	E20	0,00412
Velocidad de motor, rpm	Máximo	Aluminio	7,2	E10	2089,75
CO, %	Mínimo	Aluminio	6,6	E10	0,20375
CO_2, %	Máximo	Aluminio	7,2	E20	12,3338
HC, ppm	Mínimo	Aluminio	7,2	E10	1483,57

Fuente: Los autores.

Las combinaciones óptimas de los factores para el motor estudiado, bajo condiciones de operación en ralentí se resumen en la Tabla 11. Las propiedades térmicas del aluminio y la mayor RC favorecen el desempeño del motor y la reducción de las emisiones.

En general, en las condiciones de los ensayos (operación en ralentí del motor sin afinamiento de relación aire/combustible, ni de avance de encendido) y dentro de los niveles de los factores, las mezclas de combustible E10 y E20 tuvieron un comportamiento muy similar en lo que respecta a las emisiones, confirmando los resultados encontrados por otros investigadores [5,7,8,10,19,30].

A iguales condiciones de operación, las revoluciones del motor son mayores cuando su culata es de fundición, que cuando es de aluminio. El tiempo requerido por el motor para alcanzar una temperatura de operación estable es menor cuando se opera con culata de fundición.

Se evidencia que la RC es el factor que más influye en cada una de las tres respuestas estudiadas. El incremento en la RC reduce el consumo de combustible, siendo mayor esta reducción cuando se opera con E20.

La velocidad del motor se ve reducida cuando el motor opera con una menor RC. Adicionalmente, el motor presenta mayor velocidad de giro cuando se alimenta con E10, siendo este incremento más notable cuando se emplea la culata fabricada en aluminio.

Las emisiones de CO se reducen a medida que la RC aumenta. Por su parte, una reducción en el contenido de etanol del combustible muestra, en general, un incremento en las emisiones de CO.

La propuesta hecha en este trabajo, de evaluar la influencia en el desempeño del motor del cambio de material de la culata, estimando el consumo cíclico de combustible y tiempo de calentamiento es, a juicio de los autores, una iniciativa original en nuestro medio. Se pondera la fabricación de una parte importante del motor como la culata y el tiempo de calentamiento como parámetro de calidad importante. En una fase posterior del trabajo se estudiará el comportamiento bajo carga del motor, bajo las combinaciones de los factores estudiados con afinamiento del motor para cada mezcla.

Referencias

[1] Holmborn, J., Alternative fuels for internal combustion engines. A literature review on fuel properties to guide future fuel candidates for

internal combustion engines. Institutionen för Maskinkonstruktion. Skolan för industriell teknik och management. KTH. March 2015.
[2] Kojima, M. and Johnson, T., Potential for biofuels for transport in developing countries. UNDP/World Bank Energy Sector Management Assistance Programme (ESMAP), 2005.
[3] Hammond A., Alcohol: A Brazilian answer to the energy crisis. Science, New series, 195(4278), pp. 564-566, 1977.
[4] Bayraktar, H., Experimental and theoretical investigation of using gasoline-ethanol blends in spark-ignition engines. Renewable Energy, 30, pp.1733-1747, 2005. DOI: 10.1016/j.renene.2005.01.006.
[5] Hsieh, W., Chen, R., Wu, T. and Lin, T. Engine performance and pollutant emission of an SI engine using ethanol-gasoline blended fuels. Atmospheric Environment. 36(3), pp. 403-410, 2002, DOI: 10.1016/S1352-2310(01)00508-8.
[6] Gravalos, I., Moshou, D., Gialamas, T., Xyradakis, P., Kateris, D., and Tsiropoulos., Z., Performance and emission characteristics of spark ignition engine fuelled with ethanol and methanol gasoline blended fuels, Environmental Sciences, Alternative Fuel, 2011, DOI: 10.5772/23176.
[7] Sarkar, A. Chowdhuri, A. Bhowal, A.J. and Mandal, B.K., The performance and emission characteristics of si engine running on different ethanol-gasoline blends. International Journal of Scientific and Engineering Research, 3(6), pp. 1-6, 2012.
[8] Yücesu, H.S., Topgül, T., Cinar, C. and Okur, M., Effect of ethanol-gasoline blends on engine performance and exhaust emissions in different compression ratios. Applied Thermal Engineer, 26(17-18), pp, 2272-2278, 2006. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2006.03.006.
[9] Ríos, L.C., Quirama, L.F. y Gaviria, L.G., Informe ejecutivo: Determinación del impacto producido por el uso del E20 en el parque automotor colombiano. Universidad Tecnológica de Pereira, Grupo de Investigación en Sistemas Térmicos y Potencia Mecánica, Pereira, Colombia, 2013.
[10] Mantilla, J., Modelado de la combustion en mezclas gasolina-etanol en motores de combustion interna, PhD. Thesis. Universidad Nacional de Colombia sede Medellin, Colombia, 2010,
[11] Frank, R.M. and Heywood, J.B., The effect of piston temperature on hydrocarbon emissions from a spark-ignited direct-injection engine. SAE Technical Paper, 910558, 1991. DOI: 10.4271/910558.
[12] Kaplan, J. and Heywood, J., Modeling the spark ignition engine warm-up process to predict component temperatures and hydrocarbon emissions. SAE Technical Paper, 910302, 1991. DOI: 10.4271/910302
[13] Monteiro-Sales, L.C. and Sodré, J.R., Cold start emissions of an ethanol-fuelled engine with heated intake air and fuel. Fuel, 95(1), pp. 122-125, 2012. DOI: 10.1016/j.fuel.2011.11.067.
[14] Shayler, P.J., Chik, J.P. and Ma, T., Correlation of engine heat transfer for head rejection and warm-up modelling. SAE Technical Paper, 971851,1997. DOI: 10.4271/971851.
[15] Orbital Engine Company, A literature review based assessment on the impacts of a 10% and 20% ethanol gasoline fuel blend on non-automotive engines, Report to Environment Australia, 2002.
[16] Kalghatgi, G.T., McDonald, C.R. and Hopwood. A.B., An experimental study of combustion chamber deposits and their effects in a spark-ignition engine. SAE Technical Paper, 950680, 1995. DOI: 10.4271/950680.
[17] Jaichandar, S. and Tamilporai, P., Low heat rejection engines – An overview. SAE Technical Paper, 2003-01-0405, 2003. DOI: 10.4271/2003-01-0405.
[18] Kamo, R., Assanis, D.N. and Bryzik, W., Thin thermal barrier coatings for engines. SAE Technical Paper, 890143, 1983. DOI: 10.4271/890143.
[19] Waytulonis, R., Kittelson, D. and Zarling, D., Report to the Minnesota Department of Commerce. E20 effects in small non-road SI engines. A literature and information search. University of Minnesota, Center for Diesel Research, 2008.
[20] Romero, C., Contribución al conocimiento del comportamiento térmico y la gestión térmica de los motores de combustión interna alternativos. Ph.D. Thesis, Universidad Politécnica de Valencia, Spain, 2009.
[21] Degrauwe, B., Contribution to the thermal management of DI diesel engines. Ph.D. Thesis, Universidad Politécnica de Valencia, Spain, 2006.
[22] Torregrosa, A.J., Olmeda, P., Martin, J. and Degrauwe, B., Experiments on the influence of inlet charge and coolant temperature on performance and emissions of a DI diesel engine. Experimental Thermal and Fluid Science, 30(7), pp. 633-641, 2006. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2006.01.002.
[23] Torregrosa, A.J., Broatch, A., Olmeda, P. and Romero, C., Assessment of the influence of different cooling system configurations on engine warm-up, emissions and fuel consumption. International Journal of Automotive Technology, 9(4), pp. 447-458, 2008. DOI: 10.1007/s12239-008-0054-1
[24] Romero, C., Torregrosa, A., Olmeda, P. and Martin, J., Energy balance during the warm-up of a diesel engine. SAE Technical Paper, 2014-01-0676, 2014. DOI: 10.4271/2014-01-0676.
[25] Romero, C., Torregrosa, A.J., Olmeda, P. and Martín, J., A tool for predicting the thermal performance of a diesel engine. Heat Transfer Engineering, 32(10), pp. 891-904, 2011. DOI: 10.1080/01457632.2011.548639.
[26] Obert, E.F., Motores de combustión, interna análisis y aplicaciones, CECSA, 26a edición, México, 2000.
[27] Bascunana, J.L., Divided combustion chamber gasoline engines. A review for emissions and efficiency. Journal of the Air Pollution Control Association, 24(7), pp. 674-679, 1974. DOI: 10.1080/00022470.1974.10469956.
[28] ECOPETROL. Certificado de análisis biogasolinas, protocolo E20. Empresa Colombiana de Petróleos - Ecopetrol, 2011.
[29] Trapy J.D. and Damiral P., An investigation of lubricating system warm-up for the improvement of cold start efficiency and emissions of SI automotive engines. SAE Technical Paper, 902089, 1990. DOI: 10.4271/902089
[30] Lin, W., Chang, Y. and Hsieh, Y., Effect of ethanol gasoline blends on small engine generator energy efficiency and exhaust emission. Journal of the Air & Waste Management Association, 60(2), pp. 142-148, 2010. DOI: 10.3155/1047-3min289.60.2.142

C.A. Romero-Piedrahita, es Ing. automovilista y MSc. del Instituto Politécnico de Bielorrusia graduado en 1986, Esp. en Instrumentación Física de la Universidad Tecnológica de Pereira en 1992, MSc. en Motores de Combustión Interna del Centro de Motores Térmicos de la Universidad Politécnica de Valencia, España, en 2007, Dr. en Sistemas Propulsivos de Medios de Transporte de la Universidad Politécnica de Valencia, España, en 2009. Actualmente vinculado como profesor de la Facultad de Tecnología de la Universidad Tecnológica de Pereira. Sus áreas de investigación incluyen Máquinas de Combustión Interna, Diseño de automóviles y Diseño de Máquinas.
ORCID: 0000-0001-5647-1918

L.A. Mejía-Calderón, es Ing. Mecánica por la Universidad Tecnológica de Pereira en 1999, MSc. en Sistemas Automáticos de Producción por la Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia, en 2005, MSc. en Ingeniería Mecánica en 2009 y Dra. en Ingeniería por la Universidad Politécnica de Valencia, España, en 2016. Actualmente trabaja como docente de la Facultad de Ingeniería Mecánica de la Universidad Tecnológica de Pereira. Sus áreas de investigación incluyen modelado y simulación de sistemas multicuerpo, teoría de máquinas y mecanismos y robótica.
ORCID: 0000-0003-3008-2476

Y.A. Carranza-Sánchez, es Ing. Mecánico en 1998 por la Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia, MSc. en Ingeniería Mecánica en la Universidad de los Andes, Colombia en 2000. En 2017 recibió el título de DSc. en la Universidad de São Paulo, Brasil. Actualmente es profesor de la Facultad de Tecnologías de la Universidad Tecnológica de Pereira. Sus áreas de interés son las ciencias térmicas y de los fluidos.
ORCID: 0000-0001-6144-9037

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Evaluation of coupled porewater pressure and stress-strain constitutive model in granular soils

Oscar Moreno-Torres [a], Gustavo Chang-Nieto [b] & Andrés Salas-Montoya [c]

[a] *Civil Engineering Department, Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia and Civil Engineering Department, Universidad de la Guajira, Riohacha, Colombia. oshemoreno@yahoo.com*
[b] *Civil Engineering Department, Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia. gchang@engineer.com*
[c] *Civil Engineering Department, Universidad Nacional de Colombia, Manizales, Colombia, asalasmo@unal.edu.co*

Received: August 19th, 2016. Received in revised form: March 29th, 2017. Accepted: November 25th, 2017.

Abstract
The evaluation of performance of three coupled pressure (PWP) generation models and stress-strain constitutive models are applied to granular soils. Those constitutive models are used to recommend them for subsequent application in seismic site-response analysis in effective stresses. The performance of the three-coupled models were evaluated using a database of 25 selected high quality cyclic simple shear tests. The conducted analysis suggested that the simple Coupled GMP and stress-strain constitutive model reasonably capture PWP behavior observed in the laboratory tests, they are analyzed better than using advanced constitutive models, and all of them can be used to perform effective stress-based one-dimensional site-response analysis.

Keywords: constitutive models; granular materials; laboratory tests; seismic site-response analysis.

Evaluación de modelos constitutivos esfuerzo-deformación acoplados con presión de poros en suelos granulares

Resumen
En el presente artículo se evaluó el desempeño de tres modelos constitutivos esfuerzo-deformación acoplados con presión de poros a suelos granulares con el objetivo de recomendar su posterior aplicación en el análisis sísmico de respuesta de sitio. El desempeño de los tres modelos acoplados se evaluó utilizando una base de datos de 25 ensayos de corte simple cíclico de alta calidad. Los análisis realizados sugieren que el modelo acoplado de esfuerzo-deformación y GMP captura razonablemente el comportamiento de presión de poros observado en los ensayos de laboratorio de una mejor manera que los modelos constitutivos más avanzados y todos ellos se pueden utilizar para realizar análisis unidimensional de respuesta de sitio considerando esfuerzos efectivos**.**

Palabras clave: análisis sísmico de respuesta de sitio; ensayos de laboratorio; materiales granulares; modelos constitutivos,

1. Introduction

Seismic site-response analysis is routinely used to quantify the influence of surficial soil layers on ground motion propagation. Typically, one-dimensional (1D) frequency-domain (i.e., equivalent linear) or time-domain (i.e., nonlinear) analyses are performed in a total stress framework. However, downhole array and surface acceleration records available at sites that experienced level-ground cyclic liquefaction—for example, 1964 Niigata (Kawagishi-cho apartment buildings; Ishihara and Koga, 1981); 1987 Superstition Hills (Wildlife site [1])—illustrate that porewater pressure (PWP) generation and concurrent strain-softening can significantly alter the acceleration time histories and response spectra [2]. When these sites are analyzed using a total-stress, equivalent-linear constitutive formulation, poor agreement generally is observed between predicted and field measured response [3-6].

In order to improve the predicted seismic site-response, researchers have proposed PWP generation models (e.g.,

How to cite: Moreno-Torres, O., Chang-Nieto, G. and Salas-Montoya, A., Evaluation of coupled porewater pressure and stress-strain constitutive model in granular soils. DYNA, 85(204), pp. 248-256, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

Vucetic [4], Matasovic [5], Seed et al. [7], Martin et al. [8], Dobry et al. [9,10], Green et al. [11], Green [12], Polito et al. [13], Ivsic [14]) and effective stress-based soil constitutive models (e.g., Wang et al. [15], Elgamal et al. [16], Park and Byrne [17], Jefferies and Been [18], Boulanger and Ziotopoulou [19]) that can be used for seismic site-response analysis. For example, Booker et al. [20] first proposed an effective stress-based model (named GADFLEA) to study the generation and dissipation of PWP.

In this context, the objective of this study is to evaluate the performance of three coupled PWP and stress-strain constitutive models, used in granular soils, and further recommend them for subsequent application in site-response analysis in effective stresses. For this evaluation, the authors collected 12 bins cyclic simple shear tests (25 individual tests) [21] available in the referred literature. To facilitate comparisons, the laboratory tests were binned based on similar soil response. The PWP coupled stress-strain constitutive models were then evaluated using the laboratory test data, and statistics (i.e., residuals) were used to identify the most effective model.

The three PWP coupled stress-strain constitutive models evaluated corresponded to the:

- Green et al. [11]/Green [12]/Polito et al. [13] model, termed the GMP model coupled with hyperbolic stress-strain model,
- Elgamal model [16], and
- PM4SAND model [19].

2. Methodology

In this paper, the authors collected 12 bins cyclic simple shear tests (25 individual tests) [21] available in the referred literature. Those tests were reproduced using three PWP coupled stress-strain constitutive models and the framework of the models used in here is presented next. The results of the numerical simulation were compared with the data obtained in the Laboratory tests. The comparisons with the laboratory tests were evaluated using statistics (i.e., residuals) to identify the most effective model.

2.1. Coupled porewater pressure (PWP) and stress-strain constitutive models

In response to undrained cyclic loading, saturated soils generate excess PWP, which can be separated into transient and residual components. The transient excess PWP results from changes in the mean normal stress during cyclic loading [22,23] and thus do not affect the soil effective stress. The residual excess PWP develops from the tendency for volume decrease during undrained cyclic loading, and therefore result in a decrease in effective stress and stiffness. This residual excess PWP can be defined as the PWP in excess of hydrostatic conditions when the cyclic stress is zero [9,11]. Most PWP generation models were developed to represent residual excess PWP and they can be incorporated in 1D site-response analysis studies to account for changes in effective stress and stiffness related to PWP generation. A brief description of coupled PWP and stress-strain constitutive models is subsequently presented.

2.1.1. GMP model coupled with hyperbolic stress-strain model

Building on the work by Hardin and Drnevich [24], Matasovic [9] proposed two degradation indices that introduce excess PWP-induced material softening into a simplified hyperbolic constitutive model. The modulus degradation index (δ_G) and stress degradation index (δ_τ) reduce the shear stress mobilized during the loading-unloading process as a result of PWP increase [9], and are defined as:

$$\delta_G = \sqrt{1 - r_u} \qquad \delta_\tau = 1 - (r_u)^{\vartheta} \tag{1}$$

where r_u = excess PWP/σ'_{vo} or $\Delta u/\sigma'_{vo}$; and ϑ = dimensionless exponent generally equal to 3.5 [9] based on matching the stress-strain hysteresis loops over a wide range of r_u-values for Santa Monica Beach sand, Wildlife Site sands A and B, Heber Road point bar (PB) and channel fill (CF) sands. The advantage of the degradation indices is that they can use r_u values defined by any PWP generation model.

The modified hyperbolic model presented by Phillips and Hashash [25] was further modified to incorporate the degradation indices previously defined. Moreno-Torres et al. [26] proposed the following equations to compute shear stresses (τ) during loading and unloading-reloading, respectively, corresponding to a given strain.

Loading:

$$\tau = \frac{G_0 \cdot \delta_G \cdot \gamma_c}{1 + \beta' \cdot \left(\frac{\delta_G}{\delta_\tau}\right)^t \cdot \left(\frac{\gamma_c}{\gamma_r}\right)^t} \tag{2}$$

Unloading – Reloading:

$$\tau = F(\gamma_m) \cdot \left[\frac{G_0 \cdot \delta_G \cdot 2 \cdot \left(\frac{\gamma_c - \gamma_{rev}}{2}\right)}{1 + \beta' \cdot \left(\frac{\delta_G}{\delta_\tau}\right)^t \cdot \left(\frac{\gamma_c - \gamma_{rev}}{2 \cdot \gamma_r}\right)^t} - \frac{G_0 \cdot \delta_G \cdot (\gamma_c - \gamma_{rev})}{1 + \beta' \cdot \left(\frac{\delta_G}{\delta_\tau}\right)^t \cdot \left(\frac{\gamma_m - \gamma_r}{\gamma_r}\right)^t} \right] + \frac{G_0 \cdot \delta_G \cdot (\gamma_c - \gamma_{rev})}{1 + \beta' \cdot \left(\frac{\delta_G}{\delta_\tau}\right)^t \cdot \left(\frac{\gamma_m - \gamma_r}{\gamma_r}\right)^t} + \tau_{rev} \tag{3}$$

where γ_c = given shear strain; γ_{rev} = reversal shear strain; τ_{rev} = reversal shear stress; γ_m = maximum shear strain; γ_r = reference shear strain; t = dimensionless exponent; β' = dimensionless factor; δ_G = modulus degradation index; δ_τ = stress degradation index; $F(\gamma_m)$ = reduction factor; and G_0 = initial shear modulus.

Based on the energy-based models proposed by Green et al. [11], Green [12], Polito et al. [13], Davis and Berrill [27], [28] and Berrill and Davis [29], proposed the following empirical expression, termed the GMP model:

$$r_u = \sqrt{\frac{W_s}{PEC}} \leq 1 \quad (4)$$

where W_s = energy dissipated per unit volume of soil divided by the initial mean consolidation stress (i.e., normalized unit energy), and PEC = a calibration parameter termed the pseudoenergy capacity. The GMP model was developed using results from stress-controlled, undrained cyTxC tests performed on nonplastic silt-sand mixtures that ranged from clean sands to pure silts. For each test, W_s can be computed as:

$$W_s = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1}(\tau_{i+1} + \tau_i) * (\gamma_{i+1} - \gamma_i) \quad (5)$$

where n = number of load increments imposed during cyclic loading on the stress-strain curve until $r_u = 1$ [11]; τ_i and τ_{i+1} = applied shear stress at load increment i and i+1, respectively; and γ_i and γ_{i+1} = shear strain at load increment i and i+1, respectively. Simply stated, Eq. (4) employs the trapezoidal rule to compute the area bounded by the hysteretic stress-strain loop.

For the GMP model, It is used the model parameter correlations reported by Polito et al. [13], which are defined as:

$$\ln(PEC) = \begin{cases} \exp(0.0139 * D_r) - 1.021 & \text{if } FC < 35\% \\ -0.587 * FC^{0.312} + \exp(0.0139 * D_r) - 1.021 & \text{if } FC \geq \end{cases} \quad (6)$$

where PEC = pseudoenergy capacity; D_r = Relative Density; and FC = fines content.

2.1.2. Elgamal model

The numerical framework of this model uses two-phase (fluid and solid) fully-coupled FE (Finite Element) formulation [30,31] based on Biot's theory [32]. The saturated soil system is analyzed such as two-phase material. The *u-p* formulation (displacement of the soil skeleton, *u*, and pore pressure *p* are the primary unknowns) is a simplified numerical framework of this theory [33]. This model was implemented for the simulation of two-dimensional (2D) and 3D response scenarios [30,31,34,35].

The *u-p* formulation is defined by an equation of motion for the solid-fluid mixture, and by an equation of mass conservation for the fluid phase that incorporates equation of motion for the fluid phase and Darcy's law [33]. The two governing equations are presented in the following finite element matrix form [33]:

$$\begin{aligned} &[M]\{\ddot{U}\} + \int_{\Omega} [B]^T\{\sigma'\}\,d\Omega + [Q]\{p\} - \{f^s\} = \{0\} \\ &[Q]^T\{\dot{U}\} + [S]\{\dot{p}\} + [H]\{p\} - \{f^p\} = \{0\} \end{aligned} \quad (7)$$

where [M] is the total mass matrix, $\{\ddot{U}\}$ is the second derivative of displacement vector, $[B]^T$ the strain-displacement transposed matrix, $\{\sigma'\}$ the effective stress tensor, Ω is the body volume, $d\Omega$ is derivative of the body volume, Q is the discrete gradient operator coupling the solid and fluid phases, $[Q]^T$ is the discrete transposed gradient operator coupling the solid and fluid phases, {p} is the pore pressure vector, [S] is the compressibility matrix, {0} is a cero vector, and [H] is the permeability matrix. The vectors $\{f^s\}$ and $\{f^p\}$ represent the effects of body forces and prescribed boundary conditions for the solid-fluid mixture and the fluid phase, respectively. Those Equations are integrated in the time domain using a single-step predictor multi-corrector scheme of the Newmark type [30,33].

For cyclic and seismic loading scenarios, multi-surface plasticity pressure independent (Von-Mises) and pressure dependent models are able to reproduce the cyclic shear stress-strain response characteristics of the soil conditions. A soil constitutive model pressure-dependent for frictional soils [30,31,34] was developed based on the Prevost [36] original framework. The focus of the formulation was placed on simulating the liquefaction-induced shear strain accumulation mechanism in clean medium-dense sands [31,37]. Special attention was given to the deviatoric-volumetric strain coupling (dilatancy) under cyclic loading, because this causes increased shear stiffness and strength at large cyclic shear strain excursions (i.e., cyclic mobility). The main modeling parameters [38] include standard dynamic soil properties such as low-strain shear modulus and friction angle, as well as parameters to control the dilatancy effects (phase transformation angle, contraction, and dilation), and the level of liquefaction-induced yield strain (γ_y).

2.1.3. PM4SAND model

The sand plasticity model presented follows the basic framework of the stress-ratio controlled, critical state compatible, bounding-surface plasticity model for sand presented by Dafalias and Manzari [39]. The Dafalias and Manzari [39] model extended the previous work by Manzari and Dafalias [40] by adding a fabric-dilatancy related tensor quantity to account for the effect of fabric changes during loading. The fabric-dilatancy related tensor was used to macroscopically model the effect that microscopically observed changes in sand fabric during plastic dilation have on the contractive response upon reversal of loading direction.

Basic stress and strain terms

The basic stress and strain terms for the model are described. The basic model is supported on effective stresses and the conventional prime symbol is skipped from the stress terms for convenience. All stresses are effective for the model considered. The stresses are represented by the tensor σ, the principal effective stresses σ_1, σ_2, and σ_3, the mean effective stress p, the deviatoric stress tensor (s), and the deviatoric stress ratio tensor (r). The implementation was simplified by forming various equations and relationships in terms of the in-plane stresses only. This procedure limits the implementation to plane-strain applications and is not correct for general cases. This has the advantage of simplifying the implementation and improving computational speed by

reducing the number of operations. Expanding the implementation to include the general case should not affect the general features of the model. Consequently, the relationships between the various stress terms can be summarized next:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \tag{8}$$

$$p = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2} \tag{9}$$

$$s = \sigma - pI = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} - p & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} - p \end{pmatrix} \tag{10}$$

$$r = \frac{S}{p} = \begin{pmatrix} \frac{\sigma_{xx} - p}{p} & \frac{\sigma_{xy}}{p} \\ \frac{\sigma_{xy}}{p} & \frac{\sigma_{yy} - p}{p} \end{pmatrix} \tag{11}$$

where σ_{xx} is the stress in the plane x, σ_{yy} is the stress in the plane y, σ_{xy} is the shear stress in the plane xy and I is the unitary matrix.

The strain model is represented by a tensor (ε) (strains) that can be separated into the volumetric strain (ε_v) and the deviatoric strain tensor (e). The volumetric strain is represented as:

$$\varepsilon_v = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} \tag{12}$$

where ε_{xx} is the strain in the plane x, ε_{yy} is the strains in the plane y and the deviatoric strain tensor (e) is represented by:

$$e = \varepsilon - \frac{\varepsilon_v}{3} I = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} - \frac{\varepsilon_v}{3} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xx} - \frac{\varepsilon_v}{3} \end{pmatrix} \tag{13}$$

In incremental form, the deviatoric (de) and volumetric strain ($d\varepsilon_v$) terms are decomposed into an elastic and a plastic part as they are presented next.

$$\begin{aligned} de &= de^{el} + de^{pl} \\ d\varepsilon_v &= d\varepsilon_v^{el} + d\varepsilon_v^{pl} \end{aligned} \tag{14}$$

where de^{el} is the elastic deviatoric strain increment tensor, de^{pl} is the plastic deviatoric strain increment tensor, $d\varepsilon_v^{el}$ is the elastic volumetric strain increment and $d\varepsilon_v^{pl}$ is the plastic volumetric strain increment.

3. Results

3.1. Prediction of PWP using coupled PWP and stress-strain constitutive models

The authors used 12 cySS bins for the prediction exercise (Table 1). Model parameters for each of the models were determined using recommendation and formulation for that purpose. Figs. 1 - 3 compare the PWP time histories computed using the GMP model coupled with hyperbolic stress-strain, Elgamal and PM4SAND models to the measured responses of cySS tests in bins S3B, S6B, and S8B, respectively. In general, the GMP model coupled with hyperbolic stress-strain

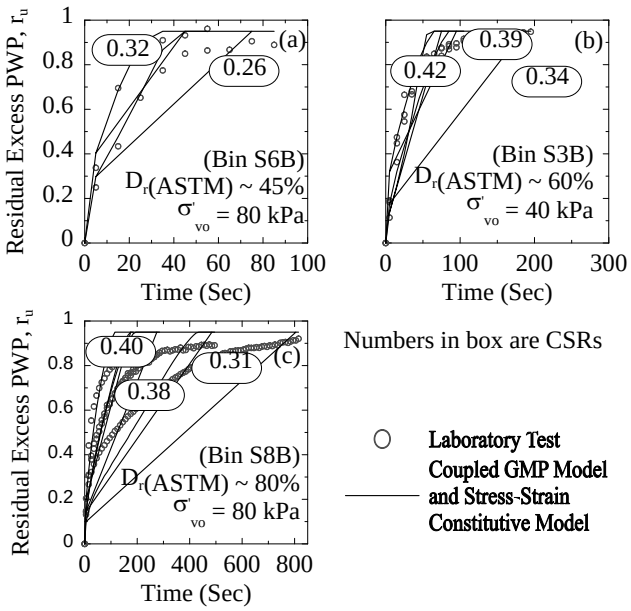


Figure 1. Comparison of calculated GMP model coupled with hyperbolic stress-strain constitutive model and measured PWP ratios for cySS tests: (a) loose specimens; (b) medium-dense specimens; and (c) dense specimens. (Note the differences in the time scales for the various plots.)
Source: The authors.

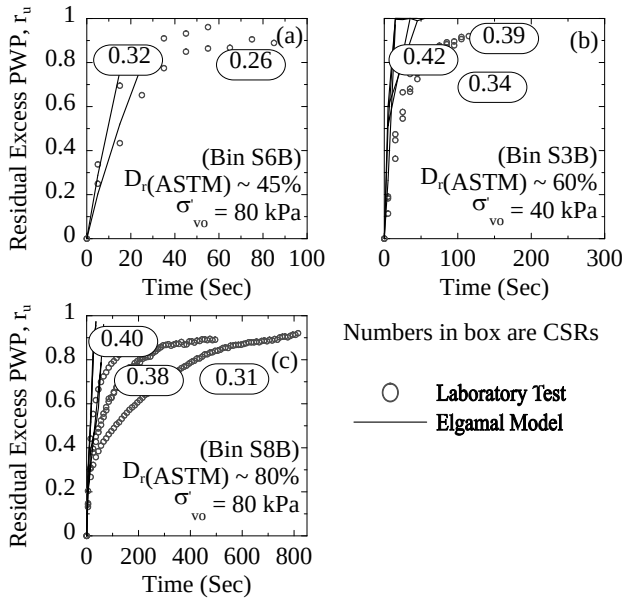


Figure 2. Comparison of calculated Elgamal model and measured PWP ratios for cySS tests: (a) loose specimens; (b) medium-dense specimens; and (c) dense specimens. (Note the differences in the time scales for the various plots.)
Source: The authors.

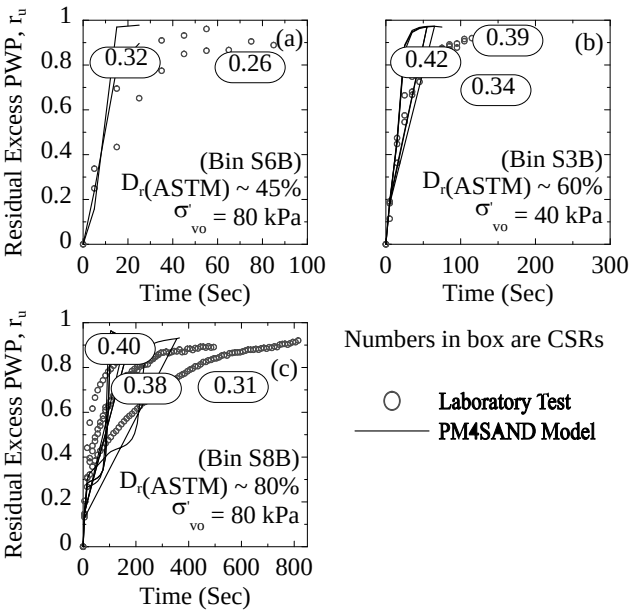


Figure 3. Comparison of calculated PM4SAND model and measured PWP ratios for cySS tests: (a) loose specimens; (b) medium-dense specimens; and (c) dense specimens. (Note the differences in the time scales for the various plots.)
Source: The authors.

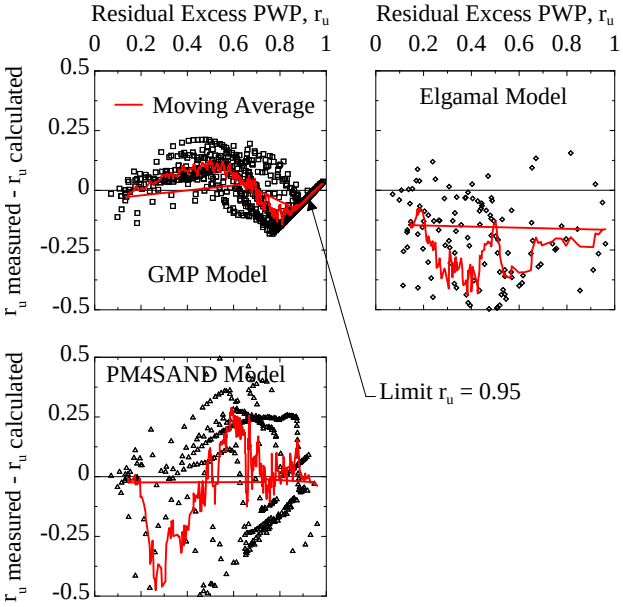


Figure 4. Residuals computed from r_u time histories for tests considered using: (a) GMP model coupled with hyperbolic stress-strain constitutive model; (b) Elgamal model and (c) PM4SAND model.
Source: The authors.

reasonably predict PWP generation in loose to medium-dense specimens (Fig. 1 (a) and (b), respectively). As expected, the model more poorly predict PWP generation in dense specimens (Fig. 1 (c)). The Elgamal and PM4SAND models fairly predict PWP generation in loose to dense specimens (Figs. 2 through 3, respectively) for different CSR magnitudes (i.e., different FSliq).

Table 1.
Summary of cySS tests used in prediction phase of the models.

Bin	Sub-bin	Test	e_o	$D_{r,c}$ (%)	σ'_c (kPa)	CSR	FC (%)	D_{50} (mm)
S2	A	M17	0.71	45	40	0.170	0	0.36
		M72	0.71	45	40	0.190	0	0.36
		M62	0.71	45	40	0.214	0	0.36
		M73	0.71	45	40	0.225	0	0.36
		M82	0.71	45	40	0.233	0	0.36
	B	M47	0.71	45	40	0.303	0	0.36
S3	A	M61	0.67	60	40	0.263	0	0.36
		M78	0.67	60	40	0.303	0	0.36
		M60	0.67	60	40	0.292	0	0.36
	B	M7	0.67	60	40	0.347	0	0.36
		M66	0.67	60	40	0.390	0	0.36
		M83	0.67	60	40	0.428	0	0.36
S4	A	M70	0.6	80	40	0.453	0	0.36
	B	M71	0.6	80	40	0.528	0	0.36
S5	-	M21	0.75	35	80	0.177	0	0.36
S6	B	M20	0.71	45	80	0.264	0	0.36
		M124	0.71	45	80	0.328	0	0.36
S8	A	M36	0.6	80	80	0.241	0	0.36
	B	M34	0.6	80	80	0.310	0	0.36
		M105	0.6	80	80	0.389	0	0.36
		M33	0.6	80	80	0.389	0	0.36
		M30	0.6	80	80	0.401	0	0.36
S9	A	M88	0.71	45	180	0.163	0	0.36
	B	M90	0.71	45	180	0.192	0	0.36
		M103	0.71	45	180	0.209	0	0.36

Source: The authors.

Fig. 4 presents the residuals for measured and predicted r_u values (at each cycle) for the 12 cySS bins (25 individual cySS tests) in the prediction dataset. These data illustrate that the coupled GMP with stress-strain constitutive model yields small residuals (±0.25), but contain some bias. The Elgamal and PM4SAND models yield medium residuals (±0.5) with high bias concentrated in the underprediction side for Elgamal model and PM4SAND presents bias in the under and overprediction sides. However, all models qualitatively capture initial liquefaction.

3.2. Evaluation of predicted stress-strain behavior using coupled PWP and stress-strain constitutive models

The authors used the same 12 cySS bins considered for the PWP prediction exercise to evaluate the stress-strain behavior of the models. Model residuals were calculated using computed and measured shear stresses when the measured shear strain, γ_c = 0%.

Figs. 5 through 7 compare the stress-strain and excess r_u-strain behavior computed using the GMP model coupled with hyperbolic stress-strain, Elgamal and PM4SAND models to the measured responses of cySS tests in bins S3B, S6B, and S8B, respectively. In general, the three models reasonably predict stress-strain and r_u-strain behavior in loose to dense specimens for strains less that γ_c = 5%. As expected, the coupled GMP model with stress-strain constitutive model more poorly predict stress-strain and r_u-strain behavior when dilation becomes more pronounced (γ_c > 5% and r_u > 0.65) and significant modulus degradation occurs. Instead, Elgamal and PM4SAND can capture the initial part of dilation spikes and the degradation of the modulus in a good manner when γ_c > 5% and r_u > 0.65, but the both codes are not able to support

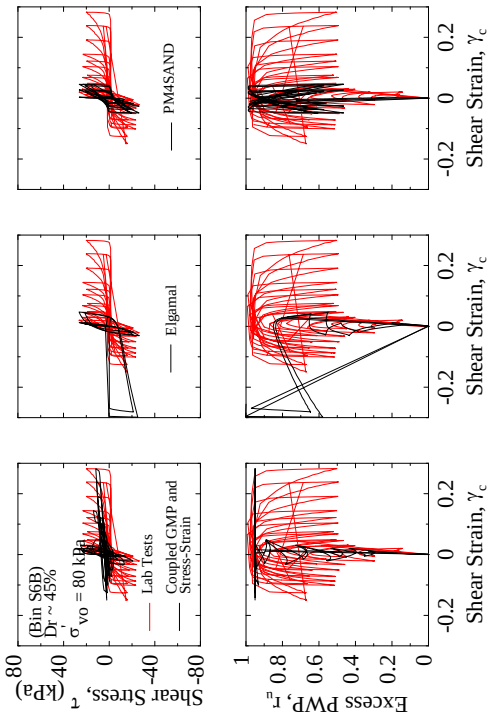


Figure 5. Comparison of calculated GMP coupled with hyperbolic stress-strain, Elgamal and PM4SAND models and measured PWP ratios for cySS test loose specimens.
Source: The authors.

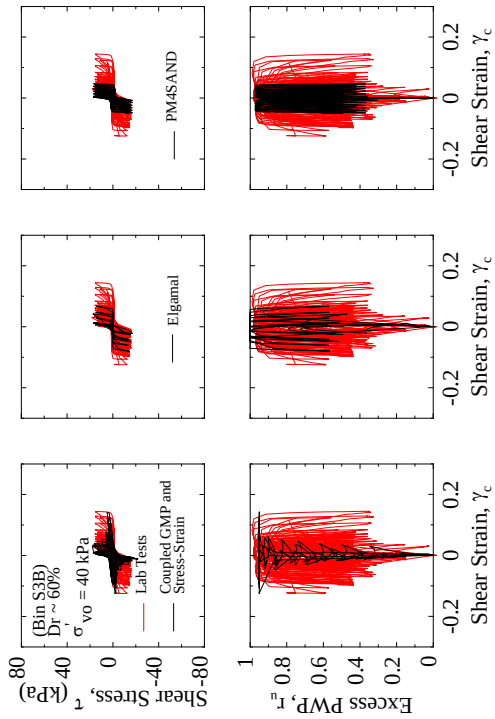


Figure 6. Comparison of calculated GMP coupled with hyperbolic stress-strain, Elgamal and PM4SAND models and measured PWP ratios for cySS test medium-dense specimens.
Source: The authors.

more than a couple of cycles after $r_u > 0.98$ and the codes stop the calculation.

Figs. 5 through 7 compare the stress-strain and excess r_u-strain behavior computed using the GMP model coupled with hyperbolic stress-strain, Elgamal and PM4SAND models to the measured responses of cySS tests in bins S3B, S6B, and S8B, respectively. In general, the three models reasonably predict stress-strain and r_u-strain behavior in loose to dense specimens for strains less that $\gamma_c = 5\%$. As expected, the coupled GMP model with stress-strain constitutive model more poorly predict stress-strain and r_u-strain behavior when dilation becomes more pronounced ($\gamma_c > 5\%$ and $r_u > 0.65$) and significant modulus degradation occurs. Instead, Elgamal and PM4SAND can capture the initial part of dilation spikes and the degradation of the modulus in a good manner when $\gamma_c > 5\%$ and $r_u > 0.65$, but the both codes are not able to support more than a couple of cycles after $r_u > 0.98$ and the codes stop the calculation.

Fig. 8 presents the residuals determined for measured and predicted τ/σ'_{vo} values (CSRs) at each cycle for the 12 cySS bins (25 individual cySS tests) in the prediction dataset. These data illustrate that the coupled GMP with stress-strain constitutive model and PM4SAND yield relatively low residuals (< ±0.25) for $r_u < 0.65$ although the models generally overestimate the values of r_u. For high r_u-values ($r_u > 0.65$), the residual increases (±0.35), although the bias decreases for both models. Instead, Elgamal model yields very low residuals (< ±0.05) through all r_u-values, and no bias is presented with means that this model can reproduce the strain-stress behavior in a good shape.

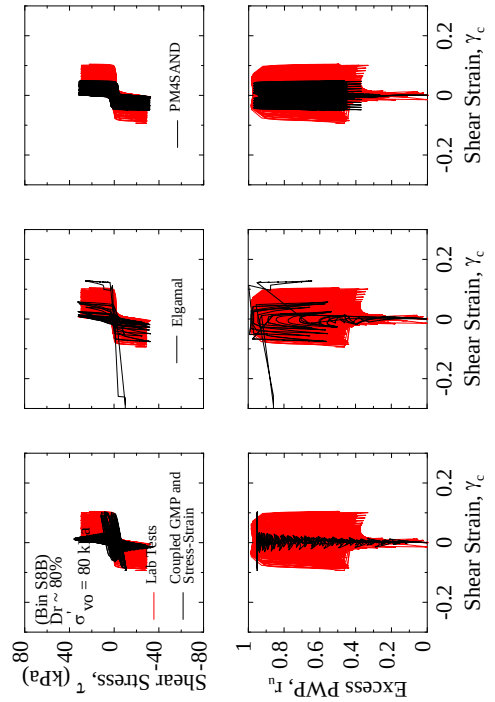


Figure 7. Comparison of calculated GMP coupled with hyperbolic stress-strain, Elgamal and PM4SAND models and measured PWP ratios for cySS test dense specimens.
Source: The authors.

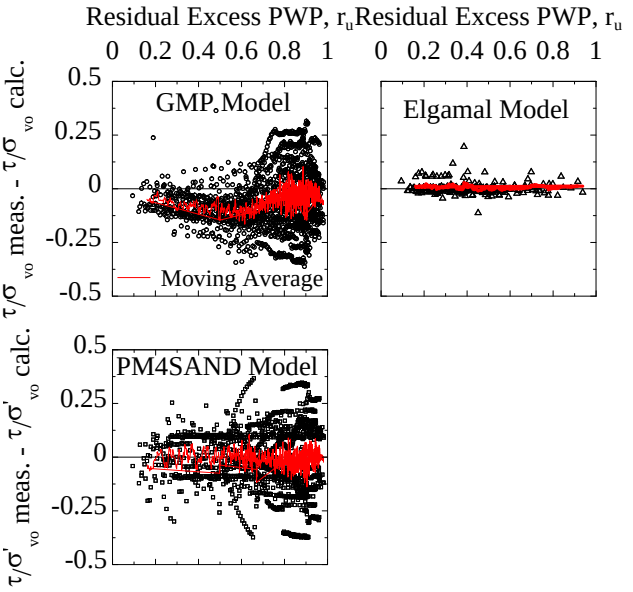


Figure 8. Residuals computed from measured and computed CSR values (τ/σ'_{vo}) for tests considered using: (a) GMP model coupled with hyperbolic stress-strain constitutive model; (b) Elgamal model and (c) PM4SAND model..
Source: The authors.

4. Conclusion

In this paper, three coupled PWP and stress-strain constitutive models (termed GMP, Elgamal and PM4SAND) are described. Those constitutive model uses different approach to incorporate porewater pressures (PWP) predicted by PWP generation models available in the literature. The evaluation process consisted of a prediction phase, the coupled GMP and stress-strain constitutive model exhibited relatively low residuals compared with Elgamal and PM4SAND model (more advanced constitutive models), but the bias in the coupled GMP and stress-strain constitutive model is more reduced than the other models considered here.

Given the ability of the coupled GMP and stress-strain constitutive model to reasonably predict PWP generation in the prediction phase over the widest range of r_u and over all values of D_r, it was expected a reasonable stress-strain prediction. The modified hyperbolic constitutive model coupled with the GMP model qualitatively captures the stress-strain behavior for $r_u \leq 0.65$, but the inability of the hyperbolic constitutive model to reproduce dilation at r_u values exceeding approximately 0.65 reduces the accuracy of the coupled GMP and stress-strain model compared with the Elgamal and PM4SAND models can reproduce the dilation process in better way. The advanced models predict PWP fairly reasonably until initial liquefaction with bias more pronounced. Even, the found limitations that were exposed, all the models can be used in site response analysis with good results in reproduction of the soil response in an earthquake event when liquefaction is an issue.

5. List of Symbols

{0} = cero vector
β' = dimensionless factor
$[B]^T$ = strain-displacement transposed matrix
cySS = cyclic simple shear
D_r = relative density
e = deviatoric strain tensor
ε = strains tensor
ε_{xx} = strain in the plane x
ε_{yy} = strains in the plane y
ε_v = volumetric strain
δ_G = modulus degradation index
δ_τ = stress degradation index
de = deviatoric strain
$d\varepsilon_v$ = volumetric strain
de^{el} = elastic deviatoric strain increment tensor
de^{pl} = plastic deviatoric strain increment tensor
ε_v^{el} = elastic volumetric strain increment
$d\varepsilon_v^{pl}$ = plastic volumetric strain increment.
dΩ = derivative of the body volume
Δu = excess of porewater pressure
FC = fine content
$F(\gamma_m)$ = reduction factor
$\{f^s\}$ = effects of body forces vector
$\{f^p\}$ = prescribed boundary conditions for the solid-fluid mixture and the fluid phase vector
G_0 = initial shear modulus
[H] = permeability matrix
I = unitary matrix
γ_c = cyclic shear strain
γ_i = shear strain at load increment i
γ_{i+1} = shear strain at load increment i+1
γ_m = maximum shear strain;
γ_r = reference shear strain
γ_{rev} = reversal shear strain
[M] = total mass matrix
n = number of load increments imposed during cyclic loading on the stress-strain curve
ϑ = dimensionless exponent
Ω is the body volume
p = mean effective stress
PEC = a calibration parameter termed the pseudoenergy capacity
PWP = porewater pressure
{p} = pore pressure vector,
Q = discrete gradient operator coupling the solid and fluid phases,
$[Q]^T$ = discrete transposed gradient operator coupling the solid and fluid phases,
r_u = excess PWP ratio
s = deviatoric stress tensor
[S] = compressibility matrix
σ = The stress tensor
σ_{xx} = stress in the plane x
σ_{yy} = stress in the plane y
σ_{xy} = shear stress in the plane xy
$\{\sigma'\}$ = effective stress tensor
σ'_{vo} = initial effective vertical stress
W_s = energy dissipated per unit volume of soil
t = dimensionless exponent
τ = shear stress
τ_i = applied shear stress at load increment i
τ_{i+1} = applied shear stress at load increment i+1
τ_{rev} = reversal shear stress

{Ü} = second derivative of displacement vector

Acknowledgments

The authors want to thank Dr. Jiaer Wu for sharing his cySS tests with the authors. The authors also thank the Universidad del Magdalena, Universidad de la Guajira and Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales for providing the conditions required by authors to further explore and analyze the soils database to be able to complete this study.

References

[1] Bennett, M.J., McLaughlin, P.V., Sarmiento, J.R. and Youd, T.L., Geotechnical investigation of liquefaction sites, Imperial Valley, California, Open File Report 84-252, U.S Geological Survey, Menlo Park, CA, 1984.

[2] Moroni, M., Sarrazin, M., Venegas, B. and Villarroel, J., Behavior of Chilean bridges with seismic protection devices., Revista de la Construccion, 14(1), pp. 53-59, 2015. DOI: 10.4067/S0718-915X2015000100007.

[3] Lee, K.L. and Finn, A., Earthquake induced settlements in saturated sands., Journal of Geotechnical Engineering, ASCE, 100(GT4), pp. 387-406, 1978.

[4] Vucetic, M., Pore pressure buildup and liquefaction at level sandy sites during earthquakes, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, NY, 1986.

[5] Matasovic, N., Seismic response of composite horizontally-layered soil deposits, University of California, Los Angeles, CA, 1993.

[6] Youd, T.L. and Carter, B., Influence of soil softening and liquefaction on response spectra for bridge design, Report No UT-03.07, Utah Department of Transportation Research and Development Division, USA, 2003.

[7] Seed, H.B., Martin, P.P. and Lysmer, J., The generation and dissipation of pore water pressure during soil liquefaction, Report No EERC-75-26, University of California, Berkeley, California, USA, 1975.

[8] Martin, G.R., Finn, W.D.L. and Seed, H.B., Fundamentals of liquefaction under cyclic loading, J. Geotech. Engrg. Div., 101(5), pp. 423-438, 1975.

[9] Dobry, R., Ladd, R.S., Yokel, F.Y., Chung, R.M. and Powell, D., Prediction of pore water pressure buildup and liquefaction of sands during earthquakes by the cyclic strain method., Building Science Series 183, National Bureau of Standards, U.S. Department of Commerce Washington D.C., USA, 1982.

[10] Dobry, R., Pierce, W.G., Dyvik, R., Thomas, G.E. and Ladd, R.S., Pore pressure model for cyclic straining of sand., Research Report, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, NY, USA, 1985.

[11] Green, R.A., Mitchell, J.K. and Polito, C.P., An energy-based excess pore pressure generation model for cohesionless soils, Proceedings of the John Booker Memorial Symposium, Sidney Australia, A.A Balkema Publishers, Rotterdam, Netherlands, 2000.

[12] Green, R.A., Energy-based evaluation and remediation of liquefiable Soil., Virginia Polytechnic Institute and State University, 2001.

[13] Polito, C.P., Green, R.A. and Lee, J., Pore pressure generation models for sands and silty soils subjected to cyclic loading., Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 134(10), pp. 1490-1500, 2008. DOI: 10.1061/(ASCE)1090-0241(2008)134:10(1490), 1490-1500.

[14] Ivsic, T., A model for presentation of seismic pore water pressures, Soil Dynamic and Earthquake Engineering, 26, pp. 191-199, 2006. DOI: 10.1016/j.soildyn.2004.11.025.

[15] Wang, Z.L., Chang, C.Y. and Mok, C.M., Evaluation of site response using downhole array data from a liquefied site, Proceedings: 4th International Conference on Recent Advances in Geotechnical Earthquake Engineering and Soil Dynamics and Symposium in Honor of Professor W.D. Liamn Finn, San Diego, California, USA, 2001.

[16] Elgamal, A., Yang, Z. and Parra, E., Computational modeling of cyclic mobility and post-liquefaction site response., Soil Dynamic and Earthquake Engineering 22(2), pp. 259-271, 2002. DOI: 10.1016/S0267-7261(02)00022-2

[17] Park, S.S. and Byrne, P.M., Numerical modelling of soil liquefaction at slope site, fundamentals of soil dynamics, Proceedings of the International Conference on Cyclic Behavior of Soils and Liquefaction, pp. 571- 580, 2004.

[18] Jefferies, M. and Been, K., Soil liquefaction - A critical state approach, Taylor & Francis, New York, 2006.

[19] Boulanger, R.W. and Ziotopoulou, K., PM4Sand (Version 3): A sand plasticity model for earthquake engineering applications, Report No. UCD/CGM-15/01, Center for Geotechnical Modeling, University of California, Davis, CA, USA, 2015.

[20] Booker, J.R., Rahman, M.S. and Seed, H.B., GADFLEA - A computer program for the analysis of pore pressure generation and dissipation during cyclic or earthquake loading, Rep. No. EERC 76-24, Earthquake Engineering Research Center, Univ. of California at Berkeley, Berkeley, California, USA, 1976.

[21] Wu, J., Seed, R.B. and Pestana, J.M., Liquefaction triggering and post liquefaction deformations of Monterey 0/30 sand under uni-directional cyclic simple shear loading, Berkeley, College of Engineering University of California, Berkeley, 2003.

[22] Lambe, T.W. and Whitman, R.V., Soil mechanics, New York, New York, Wiley & Sons, 1969.

[23] Scott, R.F., Principles of soil mechanics, New York, Addison-Wesley Pub, 1963.

[24] Hardin, B.O. and Drnevich, V.P., Shear modulus and damping in soils: Measurement and parameter effects, Journal of Soil Mech. and Found. Eng. Div., 98(SM6), pp. 603-624, 1972.

[25] Phillips, C. and Hashash, Y.M.A., Damping formulation for nonlinear 1D site response analysis., Soil Dynamics and Earthquake Engineering, 29(6), pp. 1143-1158, 2009. DOI: 10.1016/j.soildyn.2009.01.004.

[26] Moreno-Torres, O., Olson, S.M. and Hashash, Y.M.A., A simplified coupled soil-pore water pressure generation for use in site response analysis, Geoflorida 2010, Conference (ASCE) GSP 199, Advances in Analysis, Modeling and Design, West Palm Beach, USA, pp. 3080-3089, 2010. DOI: 10.1061/41095(365)314.

[27] Davis, R.O. and Berrill, J.B., Energy dissipation and seismic liquefaction in sands., Soil Dynamics and Earthquake Engineering, 10(1), pp. 59-68, 1982.

[28] Davis, R.O. and Berrill, J.B., Pore pressure and dissipated energy in earthquakes-field verification., Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 127(3), pp. 269-274, 1985. DOI: 10.1061/(ASCE)1090-0241(2001)127:3(269),269-274.

[29] Berrill, J.B. and Davis, R.O., Energy dissipation and seismic liquefaction of sands: revised model, Soils Foundation, 25(2), pp. 106-118, 1985. DOI: 10.3208/sandf1972.25.2_106.

[30] Parra, E., Numerical modeling of liquefaction and lateral ground deformation including cyclic mobility and dilation response in soil systems, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, NY, USA, 1996.

[31] Yang, Z. and Elgamal, A., Influence of permeability on liquefaction-induced shear deformation., Journal of Engineering Mechanics, ASCE, 128(7), pp. 720-729, 2002. DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:7(720).

[32] Biot, M.A., The mechanics of deformation and acoustic propagation in porous media., Journal of Applied Physics, 33(4), pp. 1482-1498, 1962. DOI: 10.1063/1.1728759.

[33] Chan, A.H.C., A unified finite element solution to static and dynamic problems in geomechanics., University College of Swansea, Swansea, U.K., 1988.

[34] Yang, Z., Development of geotechnical capabilities into OpenSees platform and their applications in soil-foundation-structure interaction analyses., University of California, Davis, CA, USA, 2002.

[35] Lu, J., Parallel finite element modeling of earthquake site response and liquefaction., University of California, La Jolla, CA, USA, 2006.

[36] Prevost, J.H., A simple plasticity theory for frictional cohesionless soils., International Journal of Soil Dynamics and Earthquake Engineering, 4(1), pp. 9-17, 1985. DOI: 10.1016/0261-7277(85)90030-0.

[37] Elgamal, A., Yang, Z., Parra, E. and Ragheb, A., Modeling of cyclic mobility in saturated cohesionless soils, International Journal of Plasticity, 19(6), pp. 883-905, 2003. DOI: 10.1016/S0749-6419(02)00010-4.
[38] Yang, Z., Elgamal, A. and Parra, E., A computational model for cyclic mobility and associated shear deformation., Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, ASCE, 129(12), pp. 1119-1127, 2003. DOI: 10.1061/(ASCE)1090-0241(2003)129:12(1119).
[39] Dafalias, Y.F. and Manzari, M.T., Simple plasticity sand model accounting for fabric change effects, Journal of Engineering Mechanics, ASCE, 130(6), pp. 622-634, 2004. DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9399(2004)130:6(622).
[40] Manzari, M.T. and Dafalias, Y.F., A critical state two-surface plasticity model for sand, Géotechnique, 47(2), pp. 255-272, 1997. DOI: 10.1680/geot.1997.47.2.255.

O. Moreno-Torres, received the BSc. Eng in Civil Engineering in 1996, the MSc. degree in Civil Engineering in 2000, and currently PhD Candidate in Civil Engineering. He is an assistant professor in the Civil Engineering Department, Universidad del Magdalena, Colombia and Professor in the Civil Engineering Department, Universidad de la Guajira, Colombia. His research interests include: simulation, modeling and forecasting in geotechnical earthquake engineering.
ORCID: 0000-0003-2038-0824.

G. Chang-Nieto, received the BSc. Eng in Civil Engineering in 1997, the MSc. degree in Civil Engineering in 1999, He is an associate professor in the Civil Engineering Department, Universidad del Magdalena, Colombia. His research interests include: simulation, modeling and forecasting in structural earthquake engineering.
ORCID: 0000-0001-8646-708X.

A. Salas-Montoya, received the BSc. In Civil Engineering, Universidad del Valle in Cali, Colombia. He is a Dr. in Materials Engineering at Universidad del Valle, Colombia. He had a Posdoctoral position at the Civil and Environmental Engineering Department at the University of Illinois, USA. He is an associate professor at the Universidad Nacional de Colombia at the Civil Engineering Department. He is a researcher in supplementary cementing materials, concrete durability, environmentally friendly materials and sustainability.
ORCID: 0000-0003-2779-1634.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Civil

Oferta de Posgrados

Especialización en Vías y Transportes
Especialización en Estructuras
Maestría en Ingeniería - Infraestructura y Sistemas de Transporte
Maestría en Ingeniería – Geotecnia
Doctorado en Ingeniería - Ingeniería Civil

Mayor información:

E-mail: asisacic_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5172

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

A GIS approach based on user location to evaluate a bike-sharing program

Juan David Zuluaga [a], Diego Alexander Escobar [a] and Camilo Younes [b]

[a] *Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Departamento de Ingeniería Civil, Universidad Nacional de Colombia, Manizales, Colombia. judzuluagaga@unal.edu.co, daescobarga@unal.edu.co*
[b] *Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Departamento de Ingeniería Eléctrica y Electrónica, Universidad Nacional de Colombia, Manizales, Colombia. cyounesv@unal.edu.co*

Received: September 11th, de 2017. Received in revised form: January 16th, 2018. Accepted: February 13th, 2018

Abstract
Over the past decade, bike-sharing systems (BSS) and Bike-sharing programs (BSP) have been implemented around the globe due to their benefits and for changing the established paradigm that the car is the main mode of transportation in urban areas. For that reason, one of the most important elements that needs careful planning is the location of the bike stations. This research evaluates the location of the BSP bike stations in a small Colombian city based on the location of the system's users. Additionally, two alternatives are shown to achieve a better understanding of how the BSP could be well planned and consolidated. The results were obtained with a location-allocation model which assigns each user with an impedance value from each station.

Keywords: location-allocation; maximize coverage; bike sharing systems; users; GPS.

Aproximación GIS para la evaluación de programa para compartir bicicleta basado en la localización de los usuarios

Resumen
Los sistemas para compartir bicicletas (BSS) y programas para compartir bicicletas (BSP) han sido implementados alrededor del mundo en la última década por sus beneficios y con el fin de cambiar el paradigma que el carro no debería ser el principal modo de transporte de las áreas urbanas. Por esta razón, uno de los elementos más importantes que necesita ser bien planeada es la localización de las estaciones de bicicletas. Esta investigación evalúa la localización de las estaciones de bicicleta de un BSS en una ciudad pequeña de Colombia, basado en la localización de los usuarios del sistema. Adicionalmente, se presentan dos propuestas para obtener un mejor entendimiento de cómo el BSP podría ser bien planeado y consolidado. Los resultados fueron obtenidos con un modelo de localización-asignación que asigna cada usuario que está dentro de un valor de impedancia para cada estación.

Palabras clave: localización-asignación; cobertura maximizada¸ sistemas para compartir bicicleta; usuarios; GPS.

1. Introduction

Over recent years, urban transport planners have attempted to promote the bicycle as an alternative mode of transportation. Reducing car usage would not only create positive social and economic effects but also positive effects for the individual. Bikes are cheaper and more efficient that cars and public transport, but in large cities the use of bikes has huge obstacles. The main hurdle is the long distances that people have to travel to commute or study. In this respect, complementing public transportation with cycling could improve its performance. However, implementation is more complicated in developing countries as, on a psychological level, people think that owning a car is synonymous with well-being.

This research tries to evaluate the location of the bike-sharing system's users as well as the location of the bike stations. The users are first located with Google API, which

How to cite: Zuluaga, J.D., Escobar, D.A. and Younes, C., A GIS approach based on user location to evaluate a bike-sharing program. DYNA, 85(204), pp. 257-263, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

obtains their coordinates based on their address. The location-allocation problem is subsequently resolved with the network analyst toolbox in Arcmap 10.2.

1.1. City being analyzed

As can be observed in Fig. 1, Manizales is the capital city of Caldas (one of the smallest Colombian departments), which is located in the Colombian Central Mountain Range. According to IGAC[1] this city has an extension of 508 km^2, and, according to Mobility Urban Plan of Manizales, the urban transport network is about 749 km in length. According to DANE[2], the city has 415.124 residents distributed in 114 neighborhoods[3]. The city has a BSP program called "Manizales en Bici", which has been operating for two years and has 135 bikes distributed throughout eight (8) stations. It can be seen in Fig. 2

The literature on cycling has grown rapidly over the past decade as it has become a popular mode of transportation. Since 1965, cycling has become an alternative mode of transportation due to a scheme called "bike-sharing system"

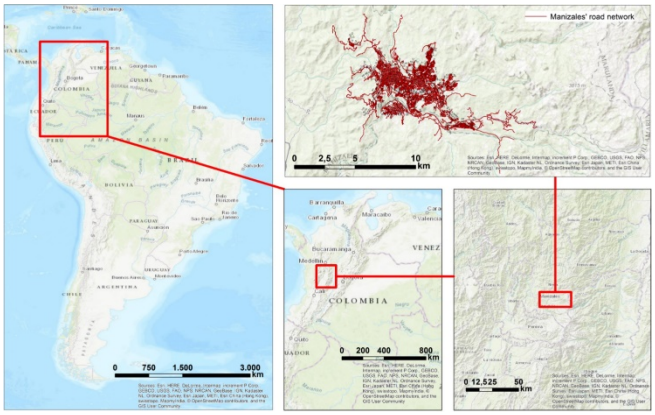


Figure 1. Location of Manizales.
Source: The authors.

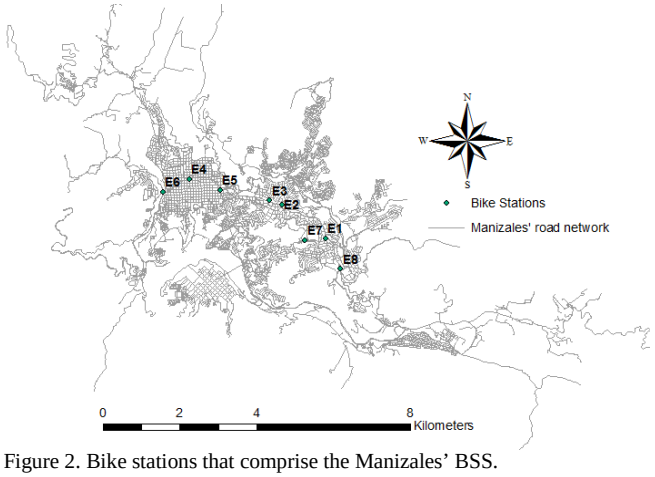


Figure 2. Bike stations that comprise the Manizales' BSS.
Source: The authors.

[1-3], which is a public service: people who need to travel from one point to another can pick-up a bicycle from a station near their origin and return it to a different station near their destination [4]. From 1965 to date, BSS have been implanted in more than 1,188 cities around the globe and have a total of more than 2,294,600 bicycles [5,6]. This shows the positive impact that BSS has generated and has the potential to generate despite the fact that the car is currently more widely used in urban areas [7].

Over the last decade, several manuals, such as the OBIS[4] project, have tried to establish the way BSS needs to be implemented [8]; however they lack technical experience due to the field´s recent development. The more critical guides that have been elaborated are the planning guide suited for the American experience [9] and the global experience guide [10]; both detail the variables that need to be evaluated in order to plan a BSS in a modern city. The latter has four principles to plan a system:

- Minimum coverage of the system must be 10 km^2.
- It was estimated that a value within a range of 10 and 30 bikes per 1000 inhabitants is an optimum value.
- Station density: a value between 10 and 16 stations per square kilometer was recommended.
- There should be between 2 and 2.5 spaces to anchor each bike.

These principles were used to propose a relevant indicator that analyses the context of transportation system coverage [11]. The first step to improve BSS coverage is to establish the optimal location of the bike stations [12,13]. Stations must be located close to other stations to give people the facility to make short trips as well as being located in residential, commercial, and cultural areas to increase the number of origins and destinations and provide the possibility of trips on bikes for commuting or studying [14].

In large cities, BSS have become important and complementary to public transportation; they help raise the transportation system's radius of influence. For this reason, stations must be located near the public transportation network [15]. In Europe and Japan, many BSS have been installed in areas closest to the rail and Metro stations [1,15].

Defining the optimal location for urban facilities is an important issue, not only for BSS, but also for issues relating to urban planning. Since the location-allocation problem was analyzed [16-19], there have been many studies to find the best location for different types of urban facilities: the most frequent are the following: health care facilities [20], schools [21], open-space planning [22], container yards, waste disposal [23], conservation-reserve planning [24], optimal location of bike stations [12,25,26], and feasibility roads infrastructure, etc.

Optimal location models for locating any type of equipment are contained in many GIS software packages. This study used the location-allocation problem by ArcGIS Network Analyst. For most Network Analyst problems, the principal algorithm is the multiple shortest path of the Dijkstra algorithm [27]; however, in this case, we used a solver for the facility location problem by ArcGIS Network

[1] The Colombian Geographic Institute.

[2] National Administrative Institute of Statistics.

[3] https://www.datos.gov.co/Inclusi-n-Social-y-Reconciliaci-n/Barrios-y-Veredas-de-Manizales/ja6y-94kz/data

[4] Optimizing Bike Sharing in European Cities

Analyst (location-allocation package). We also used Heuristics to solve the location-allocation problems. This solver begins by creating an origin-destination matrix of shortest-path costs (time, distance, impedance, etc.) between identified demand point locations and all the target facilities along the network. Given M demand points with a weight and N candidate facilities, the solver process choose a subset of the facilities, P, so that the sum of the weighted cost (time, distances, impedances, etc.) from each M to the closest P is minimized [28].

2. Methodology

The methodology used in this research has five stages: First, Manizales' transport network was updated to accurately develop the model, and the data related to the speed between each link of the network was analyzed and established. Two alternatives were then defined based on the city's characteristics. The second stage was geolocating the Manizales bike-sharing system's registered users with Google API Open Refine. The third stage is calculating the location-allocation problem using ArcGIS for the current situation and the two alternatives; in this stage, we used the Institute for Transportation and Development Policy (ITDP) guide, which states that each station has a 500 meter sphere of influence [10]. The fourth stage involves analyzing the results. The fifth is the comparative analysis with the current situation and the two alternatives. An overview of the methodology is presented in Fig. 3.

2.1. Updating the transport network and the new proposals

The principal tool to develop accessibility models is a transport network, composed of nodes and arcs: nodes represent intersections and arcs represent road segments in which the average speed is loaded. In some cases, additional nodes are located to improve the interpolation of data.

Manizales' transport network was created in the 2010 PMM, and it was updated based on official documents such as the Territorial Management Plan (POT for its acronym in Spanish) and non-official documents including the Alcaldía de Manizales' aerial photos, google maps, street view, and open street maps.

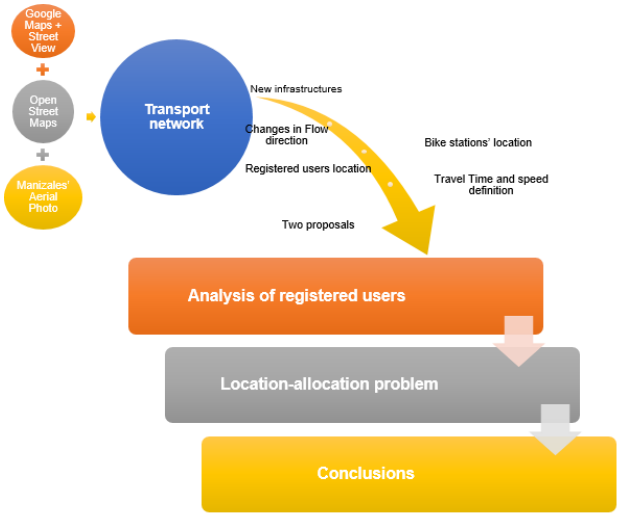


Figure 3. Methodology used in the research
Source: The authors.

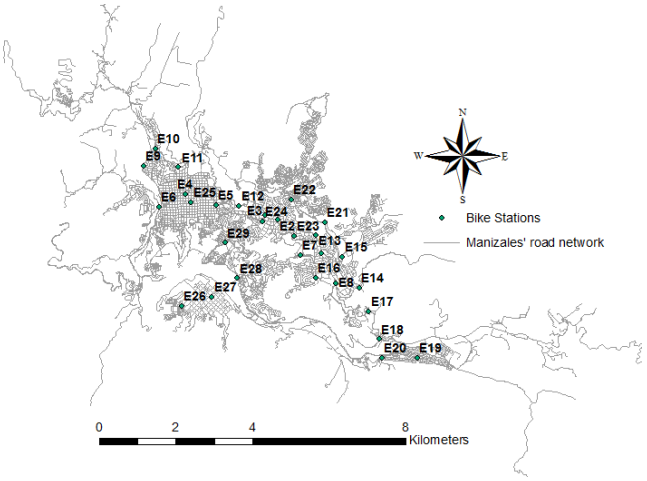


Figure 4. First alternative.
Source: The authors.

"Manizales en Bici" was planned without demand studies, and its bike stations were implanted intuitively in places where people usually go on a daily basis. It is for this reason that the two alternatives studied are based on sociodemographic data and the population distribution that are both included in the current POT.

For the first alternative, the same approach was used: crowded places marked new stations. 29 bike stations (8 current stations and 21 new stations) were implanted, which increased the number of stations in the system by 262.5%. See Fig. 4.

For the second alternative, new bike stations in residential areas were used based on POT sociodemographic information. 46 bike stations (8 current stations and 36 new stations) were implanted, increasing the number of stations in the system by 475%. See Fig. 5. The operational speed was stored in the road segments as it provides information that can be used to calculate the travel time in the arcs: we defined the theoretical walking speed. Previous research showed that average walking speed is about 4.32 km/h and is affected by the network slope: 0.36 km/h for 10% [29].

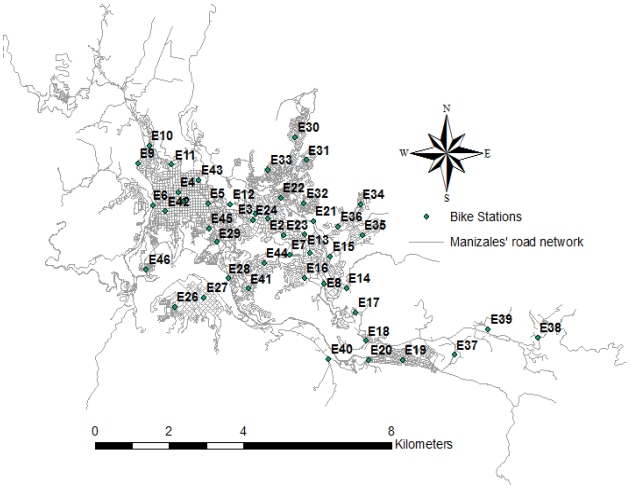


Figure 5. Second alternative.
Source: The authors.

2.2. Bike-sharing users' location

The database with the users' addresses was obtained from "Manizales en Bici", the company which operates the system. In the database, each user is identified with only one ID and one home address. First the database was cleaned as it registered some inaccurate values. For example, the cells had different ways of registering the word "Carrera", (one name for a street): "KR", CR", and "Kra". The main goal was to unify the words in all the rows in the database. For that reason, we developed a unification criteria:

- Initial Code: refers to the principal name of the street: "Carrera", "Calle", or "Avenida".
- First Number: refers to the number of the main street.
- Symbol "#"
- Second Number: number of the second main street.
- Symbol "- "
- Door: door number.

  In this order, the code would be:
  Initial Code_First Number_#Second Number-Door.
  Calle 24 #21-30.

Afterwards, in Google's API Open Refine, the database was updated. A first column was created to obtain the general data from Google using the command:

- http://maps.googleapis.com/maps/api/geocode/xml?address='+escape(value,'url')+',+Manizales,+Caldasandsensor=false'.

The next stage was to obtain the latitude and longitude from the data.

- Latitude
  value.parseHtml().select("geometry")[0].select("location")[0].select("lat")[0].replace("<lat>","").replace("</lat>","")
- Longitude
  value.parseHtml().select("geometry")[0].select("location")[0].select("lng")[0].replace("<lng>","").replace("</lng>","").

After obtaining the coordinates for each user, the data was uploaded in Arcmap. Overall, the data contains 3,314 registered users.

2.3. Location-allocation problem

"Location-allocation (LA) problem is to locate a set of new facilities such that the transportation cost from facilities to customers or customers to facilities are minimized and an optimal number of facilities have to be placed in an area of interest in order to satisfy the customer demand." [30].

The basic components of the location-allocation problem consist of facilities, and customers. In this research, facilities consist of the bike stations, and customers consist of system's registered users.

If it is assumed that there are a number of customers (n) and several facilities (m), the main goal of this algorithm is to reduce the total cost of transportation between the facilities for customers (φ).

The eq. (1) resumes the formulation of the location-allocation problem, where Wij is the quantity supplied to customer j by facility i; d(xi,aj) is the distance between a customer j and a new facility i; xi are the coordinates of the new facilities i=1, 2, …., m.

$$Min\ (\varphi) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} W_{ij} d(x_i a_j) \quad (1)$$

The model, in this case, has only one constraint; the maximum distance which the station could cover is 500 meters, d (xi, aj) <=500.

3. Results

3.1. Current situation

Fig. 6 presents the results of the location-allocation problem for the current situation. It shows that users are almost uniformly distributed throughout the city. However, there are not many people within 500 meters of the stations. The system works for around 698 of the 3,314 registered users, which represents only 21.06% of users who were registered by June 2016 who have an average of 332 meters to get to any station. Those 698 users represent 0.17% of the city's total population. If only 0.17% of population are registered, the system has no efficient coverage, and it needs to be improved.

Fig. 7 shows the distribution of registered users covered by each station. Fundadores station and Cable station are the most important stations in the system. Both stations service almost the 50% of users in the city while Unal station has only 1.6% of users. Despite not having many users near the station, Unal station is important as it is located near the university zone in Manizales: an area which attracts many trips during the day.

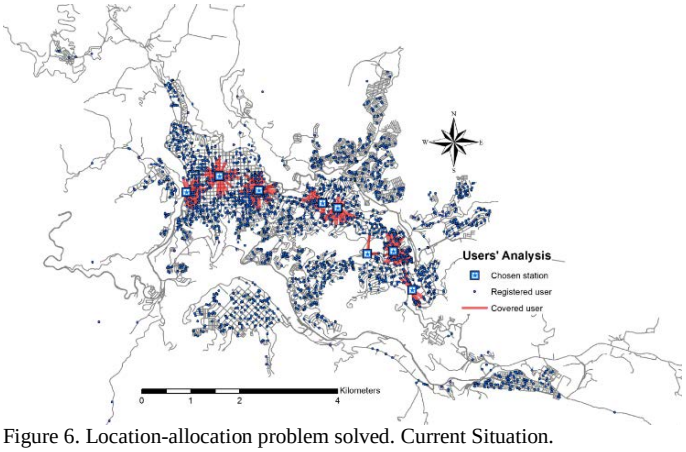


Figure 6. Location-allocation problem solved. Current Situation.
Source: The authors.

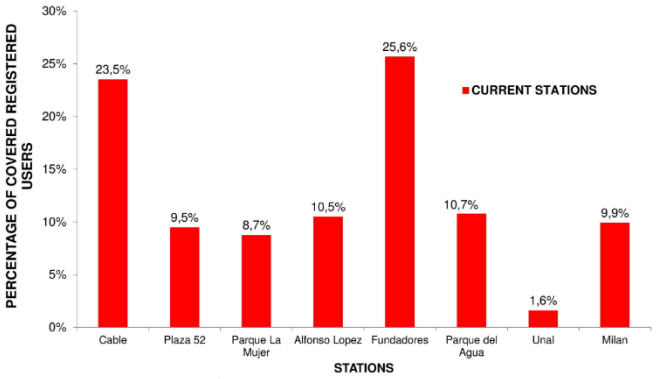


Figure 7. Distribution of registered users covered by the stations. Current Situation.
Source: The authors.

3.2. First alternative

Fig. 8 presents the results of the location-allocation problem for the first proposal. Increasing the number of stations improves the system's coverage. However, the system works for around 1,423 out of 3,314 registered users, which represents only 42.94% of users who were registered by June 2016 and who have an average of 324 meters to get any station. The 1,423 users represent 0.34% of the city's total population. Between the current situation and the first proposal, coverage increased by only 0.17%: meaning that there was low coverage despite increasing the number of stations.

Fig. 9 shows the distribution of registered users in the stations. Fundadores station and Cable station continue to be the most important stations in the system. Both serve almost 20% of registered users in the system. Despite not having many users near the station, Unal station, Expoferias station, Cambulos station, and Bengala stations, are in zones that have a high number of trips. Users who are not assigned to any station are those people who, despite being registered, have no station within 500 meters.

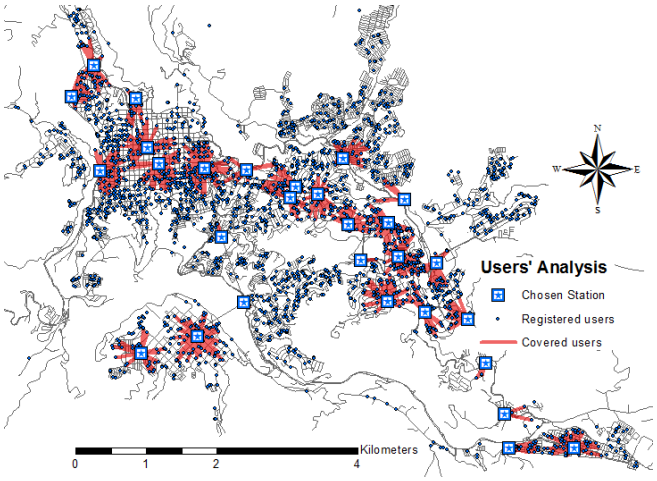


Figure 8. Location-allocation problem solved. First alternative
Source: The authors.

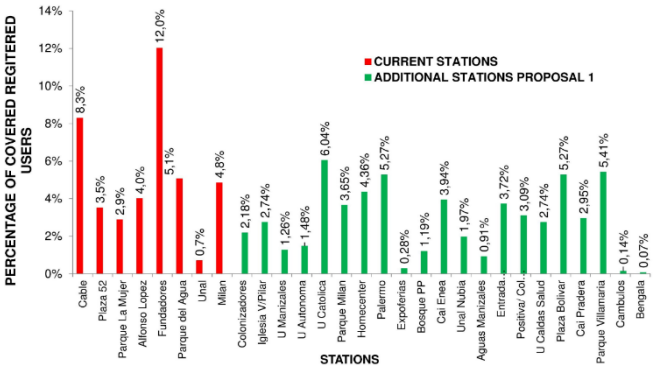


Figure 9. Distribution of registered users covered by the stations. First Alternative.
Source: The authors.

3.3. Second alternative

Fig. 10 presents the results of the location-allocation problem for the second alternative. The system services around 2,022 of 3,314 registered users, which represents only 61.01% of users who were registered by June 2016 and who have an average of 332 meters to get to any station. Those 2022 users represent 0.49% of the city's total population. Coverage increased by 0.32% from the current situation.

These results show that Sena station, Licorera station, and Maltería station do not cover any of the system's users; for this reason, they appears in red in the figure.

Fig. 11 shows the distribution of registered users covered by the stations. Fundadores station and Cable station continue being the most important stations. This trend has been shown in the current situation and the two new alternatives, and it indicates that the implementation of these stations was correct from the beginning as they generate and attract several trips throughout the day.

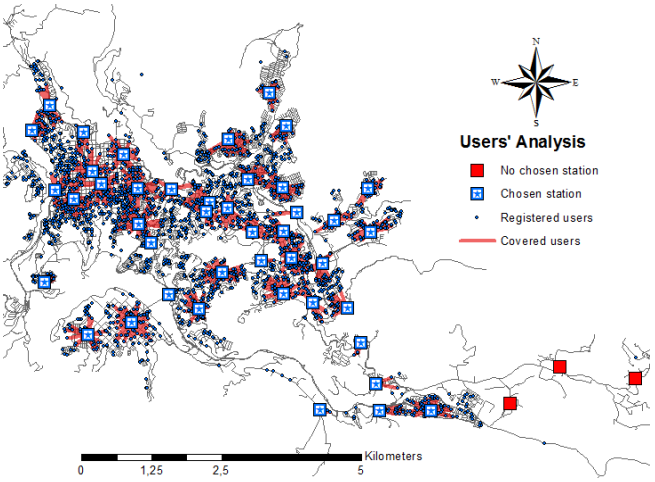


Figure 10. Location-allocation problem solved. Second alternative
Source: The authors.

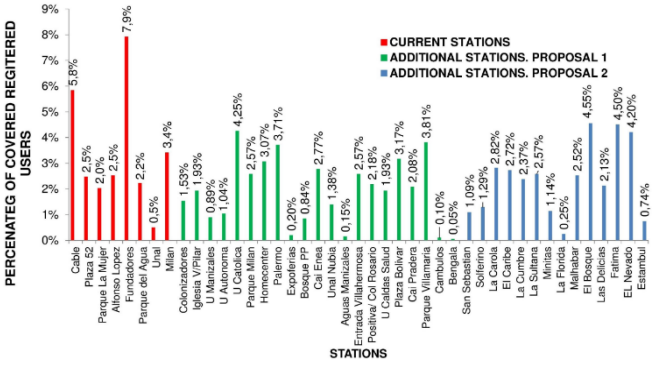


Figure 11. Distribution of registered users covered by the stations. Second alternative.
Source: The authors.

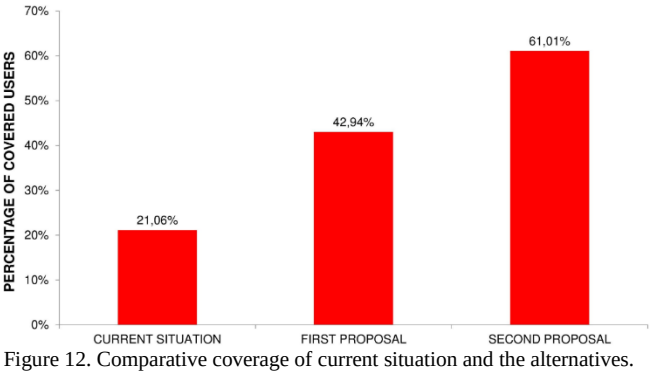


Figure 12. Comparative coverage of current situation and the alternatives. Source: The authors.

3.4. Comparative analysis between current situation and the two alternatives.

Fig. 12 presents the comparative coverage of the current situation and the two alternatives. Increasing the number of stations will increase the number of users who are within 500 meters of the stations. These users could use a bicycle to commute or study. The second alternative shows 61% of registered users; however, on comparing this value with the city's total population, only 0.49% of population is covered.

5. Conclusion

This research was developed based on the location of the stations and the location of the users registered in June 2016. Data related to the trips in the system could not be obtained, so the analysis only emphasizes in spatial coverage. The system should collect all data related to trip origins and destinations, user profiles (to understand their behavior), and common users' socioeconomic characteristics.

Manizales bike-sharing system needs to be improved to become an alternative mode of transportation. Technical studies need to be carried out for system expansion. It has been shown that despite having users throughout the entire city, the system cannot be used for daily trips by more than 90% percent of population as they would need to travel long distances and spend a considerable amount of time to get to where the stations are currently located. Specialized studies by experienced transport planners need to be undertaken to enhance the system's performance.

In this research, distance was used as the impedance to analyze the influence of a bike station; however, in the future, it is highly important to evaluate monetary costs, physical impediments, slopes, bike road tracks, meeting points, and social behavior to obtain a better understanding of bike sharing users. This is because accessibility based on travel time and distance may favor faster modes rather than slower modes.

Future research needs to prove that one of the system's the main characteristics should be bike stations that are close to bus stops. As such, the bike-sharing system can be used as an extend form of public transportation, which would solve the first and last mile of travel and increase Manizales transport system's radius of influence.

Acknowledgments

This research was conducted at the National University of Colombia, Manizales campus. It was born from the National announcement of projects to strengthen research, creation, and innovation at the National University of Colombia 2016-2018. The authors would like to thank the Research Direction Office in Manizales (DIMA for its acronym in Spanish) for helping and motivating young researchers to develop new and technical studies that benefit the city. This research is part of a Master's Thesis entitled "Propuesta metodológica para el diagnóstico y planificación urbana de una red de ciclorutas. Caso de estudio: Manizales" (Cod: 35178).

References

[1] DeMaio, P. and Gifford, J., Will smart bikes succeed as public transportation in the United States?. Journal of Public Transportation, 7(2), pp. 1-15, 2004. DOI: 10.5038/2375-0901.7.2.1

[2] DeMaio, P., Smart bikes: Public transportation for the 21st century. Transportation Quarterly, [online]. 57(1), pp. 9-11, 2003. [date of reference April 12th of 2017]. Available at: http://www.metrobike.net/wp-content/uploads/2013/10/Smart-Bikes.pdf

[3] DeMaio, P., Bike-sharing: History, impacts, models of provision, and future. Journal of Public Transportation, 12(4), pp. 41-56, 2009. DOI: 10.5038/2375-0901.12.4.3

[4] Shaheen, S., Guzman, S. and Zhang, H., Bikesharing in Europe, the Americas, and Asia: past, present, and future. Transportation Research Record: Journal of the Transportation Research Board, 2143, pp. 159-167, 2010. DOI: 10.3141/2143-20

[5] Schuijbroek, J., Hampshire, R.C. and Van Hoeve, W-J., Inventory rebalancing and vehicle routing in bike sharing systems. European Journal of Operational Research, 257(3), pp. 992-1004, 2017. DOI: 10.1016/j.ejor.2016.08.029

[6] Meddin, R. and DeMaio, P., The bike sharing world map. [online]. [date of reference May 8th of 2017]. Available at: http://www.bikesharingworld.com

[7] Fishman, E., Washington, S. and Haworth, N., Bike share: A synthesis of the literature. Transport Reviews, 33(2), pp. 148-165, 2013. DOI: 10.1080/01441647.2013.775612

[8] Intelligent Energy Europe program (IEE). Optimising bike sharing in european cities: A Handbook, [online]. pp. 1-90, 2011. [date of reference March 13th of 2017]. Available at: https://ec.europa.eu/energy/intelligent/projects/sites/iee-projects/files/projects/documents/obis_handbook_en.pdf

[9] Toole Design Group and the Pedestrian and Bicycle Information Center. Bike sharing in the United States: state of the practice and guide to implementation. U.S. Department of Transportation, Federal Highway Administration, [online]. pp. 1-68, 2011. [date of reference May 15th of 2017]. Available at: https://www.bikesharing.ch/fileadmin/redaktion/bikesharing/Dokumente/Documents_et_autres/Bikesharing_in_the_United_States.pdf

[10] Institute for Transportation and Development Policy - ITDP. Guía de Planeación del Sistema de Bicicleta Pública, [online]. pp. 1-152, 2013. [date of reference June 10th of 2017]. Available at: https://3gozaa3xxbpb499ejp30lxc8-wpengine.netdna-ssl.com/wp-content/uploads/2013/12/Gu%C3%ADa-Bici-P%C3%BAblica-ITDP-Mexico.pdf

[11] Magalhães, M.T., Spatial coverage index for assessing national and regional transportation infrastructures. Journal of Transport Geography, 56, pp. 53-61, 2016. DOI: 10.1016/j.jtrangeo.2016.08.015

[12] García-Palomares, J.C., Gutiérrez, J. and Latorre, M., Optimizing the location of stations in bike-sharing programs: a GIS approach. Applied Geography, 35(1), pp. 235-246, 2012. DOI: 10.1016/j.apgeog.2012.07.002

[13] Lin, J.R. and Yang, T.H., Strategic design of public bicycle sharing systems with service level constraints. Transportation Research Part E: Logistics and Transportation Review, 47(2), pp. 284-294, 2011. DOI: 10.1016/j.tre.2010.09.004

[14] Midgley, P., Bicycle-sharing schemes: Enhancing sustainable mobility in urban areas. United Nations, Department of Economic and Social Affairs, [online]. pp. 1-26, 2011. [date of reference July 21th of 2017]. Available at: https://sustainabledevelopment.un.org/content/dsd/resources/res_pdfs/csd-19/Background-Paper8-P.Midgley-Bicycle.pdf
[15] Martens, K., Promoting bike-and-ride: The Dutch experience. Transportation Research Part A: Policy and Practice, 41(4), pp. 326-338, 2007. DOI: 10.1016/j.tra.2006.09.010
[16] Pucher, J., Komanoff, C. and Schimek, P., Bicycling renaissance in North America?: Recent trends and alternative policies to promote bicycling. Transportation Research Part A: Policy and Practice, 33(7), pp. 625-654, 1999. DOI: 10.1016/S0965-8564(99)00010-5
[17] Cooper, L., Location-allocation problems. Operations Research, 11(3), pp. 331-343, 1963. DOI: 10.1287/opre.11.3.331
[18] Hakimi, S.L., Optimum locations of switching centers and the absolute centers and medians of a graph. Operations Research, 12(3), pp. 450-459, 1964. DOI: 10.1287/opre.12.3.450
[19] Hillsman, E.L., Spatial analysis and location-allocation models. Economic Geography, [online]. 64(2), pp. 196-198, 1988. Available at: http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.2307/144127
[20] Liu, N., Huang, B. and Chandramouli, M., Optimal siting of fire stations using GIS and ANT algorithm. Journal of Computing in Civil Engineering, 20(5), pp. 361-369, 2006. DOI: 10.1061/(ASCE)0887-3801(2006)20:5(361)
[21] Teixeira, J., Antunes, A. and Peeters, D., An optimization-based study on the redeployment of a secondary school network. Environment and Planning B: Urban Analytics and City Science, 34(2), pp. 296-315, 2007. DOI: 10.1068/b31173
[22] Yeh, A. and Chow, M., An integrated GIS and location-allocation approach to public facilities planning—an example of open space planning. Computers, Environment and Urban Systems, 20(4-5), pp. 339-350, 1996. DOI: 10.1016/S0198-9715(97)00010-0
[23] List, G. and Mirchandani, P., An integrated network/planar multiobjective model for routing and siting for hazardous materials and wastes. Transportation Science, 25(2), pp. 146-156, 1991. DOI: 10.1287/trsc.25.2.146
[24] Gerrard, R.A., Church, R.L., Stoms, D.M. and Davis, F.W., Selecting conservation reserves using species-covering models: Adapting the ARC/INFO GIS. Transactions in GIS, 2(1), pp. 45-60, 1997. DOI: 10.1111/j.1467-9671.1997.tb00004.x
[25] Frade, I. and Ribeiro, A., Bike-sharing stations: A maximal covering location approach. Transportation Research Part A: Policy and Practice, 82, pp. 216-227, 2015. DOI: 10.1016/j.tra.2015.09.014
[26] Zhang, Y., Zuidgeest, M., Brussel, M., Sliuzas, R. and Van Maarseveen, M., Spatial location-allocation modeling of bike sharing systems: a literature search, Proceedings of the 13th World Conference on Transportation Research (WCTR), Rio de Janeiro, [online]. 2013. Available at: http://www.wctrs-society.com/wp/wp-content/uploads/abstracts/rio/selected/1717.pdf
[27] Dijkstra, E.W., A note on two problems in connexion with graphs. Numerische Mathematik, 1(1), pp. 269-271, 1959. DOI: 10.1007/BF01386390
[28] ArcGIS Desktop Manual. [online]. [date of reference January 29th of 2018]. Available at: http://desktop.arcgis.com/en/arcmap/latest/extensions/network-analyst/algorithms-used-by-network-analyst.htm#ESRI_SECTION1_6FFC9C48F24746E182082F5DEBDBAA92
[29] Instituto de Desarrollo Urbano – IDU. Guía práctica de la movilidad peatonal urbana. Santa Fé de Bogota, [online]. 2008. [date of reference August 11th of 2017]. Available at: http://www.pactodeproductividad.com/pdf/guiageneralsobreaccesibilidad.pdf
[30] Farahani, R.Z. and Hekmatfar, M., Facility location: Concepts, models, algorithms and case studies. Series: Contributions to Management Science. Physica-Verlag, Heidelberg, Germany, 2009, 549 P. DOI: 10.1007/978-3-7908-2151-2

J.D. Zuluaga-García, received a BSc. in Civil Engineering in 2014 from the Universidad Nacional de Colombia, a post graduate diploma in road and transport in 2014 from the Universidad Nacional de Colombia, and he is currently studying a MSc. in infrastructure and transport Systems at the Universidad Nacional de Colombia. Since 2013 he has worked on several consultancy projects involving transport and transit. He is currently working in the Area Metropolitana del Valle de Aburra, which is the transport authority in the Valle de Aburra. His research interests include: accessibility, transport policy and planning, simulation, demand forecasting, and modelling.
ORCID: 0000-0003-0704-659X

D. A. Escobar-García, received a BSc. in Civil Engineering in 1999 from the Universidad Nacional de Colombia, a MSc. in civil engineering in 2001 from the Universidad de los Andes, Colombia, and a PhD in land management and transport infrastructure in 2008 from the Universidad Politécnica de Cataluña, Spain. From 1999 to 2001, he worked for road construction companies and since 2001 he has worked for the Universidad Nacional de Colombia. He is currently a full professor in the Civil Engineering Department, Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Nacional de Colombia, Sede Manizales. His research interests include: accessibility, sustainable models transit and transport planning, simulation, modeling and forecasting in transport, and forecasting using geostatistical techniques.
ORCID: 0000-0001-9194-1831

C. Younes-Velosa, received a BSc. in Electrical Engineering in 1999 from the Universidad Nacional de Colombia, a MSc. in high voltage engineering in 2002 from the Universidad Nacional de Colombia, a PhD in electrical engineering from the Universidad Nacional de Colombia, and a law degree from the Universidad de Manizales in 2014. Since 2006, he has worked as a full professor in the Electric, Electronic and Computing Engineering Department, Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Nacional de Colombia, Manizales. His research interests include: energy policy on lighting, renewable energy sources and transport regulation, electromagnetic compatibility, and lightning protection.
ORCID: 0000-0002-9685-8196



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
de Sistemas e Informática

Oferta de Posgrados

Especialización en Sistemas
Especialización en Mercados de Energía
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Sistemas
Doctorado en Ingeniería- Sistemas e Informática

Mayor información:

E-mail: acsei_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5365

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Swash excursion patterns at two contrasting beaches: Hollywood and Costa Verde beach, Colombia

Jennifer Montaño-Muñoz [a], Andrés F. Osorio [a] & Luis Otero [b]

[a] *Grupo de Investigación, OCEANICOS, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia. fer7062@gmail.com, afosorioar@unal.edu.co*
[b] *Grupo de Investigación en Geociencias GEO4, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia. ljotero@uninorte.edu.co*

Received: March 17th, 2017. Received in revised form: November 21th, 2017.Accepted: January 30th, 2018

Abstract
The swash zone is the part of the beaches that are consecutively dry and wet due to the rise and fall of the sea by waves and tides. This zone is particularly important in beach systems, as here erosion and accretion of the coastline and coastal inundation occur; therefore, understanding of the dynamics in this zone allows the prediction and mitigation of potential impacts on beaches, dunes and coastal structures under different climate scenarios.
In situ measurements of variables such as pressure, velocity and sediment concentrations on the swash were carried out for the first time at two beaches in the Colombian Caribbean: Costa Verde beach, (Ciénaga) and Hollywood beach (Cartagena). The data were used to compare the velocity and sediments transport patterns in the swash zone due to the beach slope on this zone and to the influence of different wave frequencies (IG or SS). In addition, a first approximation to link small spatio-temporal scales (swash cycles) with larger spatio-temporal processes (erosion-accretion) was carried out.

Keywords: swash zone; velocities; concentrations; uprush; backwash; infragravity waves (IG); Sea-Swell waves (SS).

Patrones en las excursiones de swash en dos playas contrastantes: Playas Hollywood y Costa Verde, Colombia

Resumen
La zona de swash es la parte de la playa que esta consecutivamente seca y húmeda debido al ascenso y descenso del mar producto del oleaje y la marea. Esta zona es de gran importancia en los sistemas de playas, ya que allí se desarrollan los procesos de erosión/acreción de la línea de costa y las inundaciones; por lo tanto, el entendimiento de las dinámicas que ocurren en esta zona son vitales para predecir y mitigar los posibles impactos en playas, dunas y estructuras costeras bajo diferentes escenarios climáticos.
Mediciones de variables in situ como presiones, velocidades y concentraciones de sedimento en la zona de swash, fueron llevadas a cabo en dos playas en el Caribe Colombiano: Playa Costa Verde, (Ciénaga) y Playa Hollywood, (Cartagena). Los datos fueron usados para comparar los patrones de velocidades y concentraciones de sedimentos en la zona de swash debido a la influencia de la pendiente de la playa en esta zona y la influencia de las diferentes frecuencias de las ondas (infragravitatorias (IG) o Sea-Swell (SS)). Adicionalmente, se propone una aproximación para ligar pequeñas escalas espacio-temporales (ciclos de swash) con procesos espacio-temporales mayores (erosión-acreción).

Palabras clave: zona de swash; velocidades; concentraciones; uprush; backwash; ondas infragravitatorias (IG), ondas Sea-Swell (SS)

1. Introducción

Las playas son el resultado de un balance dinámico entre los procesos marinos y terrestres, cumplen diversas funciones entre ellas se puede destacar; uso turístico, habitat de ecosistemas importantes y protección costera. Estas funciones se ven afectadas por los procesos erosivos que ocurren en las playas, aumentando los riesgos para los ecosistemas presentes y el desarrollo humano en estas regiones. En este contexto, la predicción de la evolución de

How to cite: Montaño-Muñoz, J., Osorio, A.F. and Otero, L., Patrones en las excursiones de swash en dos playas contrastantes: Playas Hollywood y Costa Verde, Colombia. DYNA, 85(204), pp. 264-271, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

las playas es necesaria para la planificación y toma de decisiones relacionadas con el desarrollo de las zonas costeras alrededor del mundo. Esto es particularmente importante ante los impactos del cambio climático en la costa como el incremento del nivel del mar y la intensificación del oleaje, especialmente en costas de baja elevación y en países en vías de desarrollo. Sin embargo, la necesidad de comprender los procesos en estos sistemas y el desarrollo de modelos que describan su evolución bajo diferentes forzadores, requieren un conocimiento profundo de los procesos físicos de pequeña escala (espacio-temporal) que tienen lugar en las playas. Gran parte de estos procesos se producen en la zona de ascenso-descenso (conocida en inglés como zona de swash).

La zona de swash se define como la parte de la playa que esta consecutivamente húmeda y seca debido a los movimientos del mar: olas y mareas. Sin embargo, ésta definición es obsoleta durante condiciones de oleaje extremo [1]. La zona de swash es una de las áreas más dinámicas en la región cercana a la costa, caracterizada por flujos fuertes e inestables, altos niveles de turbulencia, grandes tasas de transporte de sedimentos y cambios morfológicos en amplias escalas espaciales y temporales [2]. Las dinámicas de la zona de swash son particularmente importantes debido a que en esta tiene lugar el intercambio de sedimentos entre la zona subaérea y subacuática de la playa, lo que contribuye de manera significativa a procesos de acreción y erosión de la línea de costa. Además, una fracción importante del transporte longitudinal de sedimentos se produce en esta zona contribuyendo en gran medida a la deriva litoral total [2,3].

Por las razones mencionadas anteriormente, el interés en estudiar las dinámicas en la zona de swash se ha incrementado considerablemente en las últimas décadas [3].

Sin embargo y a pesar de la importancia de la zona de swash para varios propósitos prácticos, aún existen considerables incertidumbres fundamentales acerca de la dinámica de esta zona debido a la complejidad de los procesos y a la dificultad de mediciones directas en entornos de alta energía. El empleo de la información de corto plazo para predecir la evolución de largo plazo para su aplicación en ingeniería costera es uno de los principales retos para la comunidad científica avocada al estudio de esta zona.

En la literatura están indicados como relevantes una serie de procesos hidrodinámicos en la zona de swash a pequeña escala, algunos de ellos son descritos a continuación:

1.1. Hidrodinámica de la zona de swash

La excursión del swash incluye un patrón cíclico comprendido por el *uprush* (ascenso de la lámina de agua) y *backwash* (descenso de la lámina de agua). Durante el *uprush* existe una disminución en la velocidad del flujo (debido a la fricción con el fondo y la fuerza de la gravedad) hasta llegar a cero. En general, la aceleración *uprush* es corta y fuerte y las velocidades alcanzan una mayor magnitud que en el *backwash*, en el cual la velocidad aumenta de nuevo, pero dirigida hacia el mar [4].

Las diferencias en la velocidad del agua en los ciclos del swash dependen del estado de la playa (playas disipativas, intermedias y reflejantes). Se ha encontrado que las velocidades durante el uprush y el backwash, son mayores en playas reflejantes (mayor pendiente) que en las playas disipativas [5-7]. Además de los cambios en los campos de velocidad y en las profundidades de la lámina de agua, también las características de infiltración y exfiltración del agua dentro y fuera de la matriz de sedimentos dependen de los tipos de playa, de las características de los sedimentos y de las condiciones de contorno. Estos procesos de infiltración / exfiltración pueden generar cambios en la estructura de la capa límite que afectan el esfuerzo cortante en el lecho, la turbulencia y la movilidad de sedimentos [7].

Uno de los principales vacíos en la comprensión de los procesos de la zona de swash es la dinámica de los procesos turbulentos, principalmente debido a la complejidad de la recopilación de datos en esta zona altamente energética. Diferentes características de la turbulencia se han descrito para cada una de las etapas del ciclo del swash. Durante el uprush, los procesos turbulentos predominan debido a los *bores*, mientras que el backwash es dominado por fuerzas cortantes en el lecho. Sin embargo, [8-10] mostraron que la energía cinética turbulenta fue mayor que las fuerzas cortantes en el lecho y casi igual durante el *uprush* y el *backwash.* Esta diferenciación en los procesos dominantes durante cada ciclo del swash está relacionada con el tipo de transporte de sedimento que se presenta durante cada uno de estos ciclos.

Especialmente los procesos de interacción swash-swash (colisión entre uprush / backwash), pueden cambiar los patrones en la dinámica swash, generando vórtices en el backwash que probablemente son los mecanismos de erosión y suspensión de sedimentos más eficientes, sin embargo, estas interacciones no han sido investigadas en detalle con datos de campo en playas naturales.

Los aspectos anteriores y otros como la capa límite, los esfuerzos cortantes, los gradientes de presión y las asimetrías de las ondas generan también cambios en las dinámicas de esta zona.

1.2. Oscilaciones del swash en la banda de Sea-swell e infragravitatoria

Las ondas pueden descomponerse en períodos de Sea-Swell (SS) que son ondas de períodos cortos (4 s <t <20 s) y periodos de infragravedad (IG), ondas largas con períodos entre 20 s <t <300 s. Las oscilaciones del swash en la banda de SS son el resultado del colapso de bores controlados por la disipación de estas frecuencias, mientras que las oscilaciones del swash en la banda de infragravedad son el resultado de la no- rotura de las ondas IG, que se reflejan en la playa y pueden generar ondas estacionarias y ondas de borde, las cuales son responsables del transporte de sedimentos y de las formas ondulatorias (procesos 3D) en el frente costero (ej. “beach cusps”). Finalmente, esto va a condicionar la pendiente y el tipo de playa (playas reflejantes, disipativas o intermedias).

El tipo de movimiento del swash (SS o IG) puede cambiar los patrones en la cinemática del flujo interno. Por ejemplo, si las oscilaciones del swash son dominadas por ondas IG, los movimientos en el uprush y backwash son más simétricos, y las variaciones en las profundidades del flujo aumentan

gradualmente; en cambio, las oscilaciones del swash inducidas por bores en la banda de SS, muestran que las duraciones del backwash son típicamente mayores y hay un aumento muy rápido de la profundidad durante el uprush que subsecuentemente vuelve de nuevo a cero durante el backwash [7]. Estas diferencias en las dinámicas del swash debidas a oscilaciones de SS o IG pueden causar diferencias en los modos de transporte de sedimentos y direcciones residuales hacia la costa o hacia el mar [8].

El tipo de movimiento prevalente en la zona de swash (SS o IG) depende de las condiciones de las ondas incidentes y la morfología de la playa. Varios estudios han encontrado que cuando las ondas incidentes se reflejan en la costa (playas intermedios y reflejantes), la energía de SS domina el espectro de swash [11-14] y cuando las ondas incidentes son disipadas por la rotura de las olas en la zona de rompientes (playas disipativas o condiciones offshore altamente energéticas), las frecuencias en la banda IG dominan el espectro de swash [15-16]. Además, [10] encontraron en una playa intermedia que durante la marea baja las ondas IG dominaron la energía en la zona de swash, mientras que durante la marea alta la energía en la zona de swash estuvo dominada por las ondas SS. La influencia de las ondas IG en la zona de swash durante eventos extremos, también ha sido encontrada por diferentes autores [9], [15], lo que ha permitido incorporar el efecto de las ondas IG en los modelos de run -up, sin embargo la incorporación de estas ondas en formulaciones de transporte de sedimentos durante estos eventos ha sido menor [1]. Esto también es válido para eventos de swash individuales y escalas de tiempo en la banda de SS, pero se ha realizado menos énfasis en los esfuerzos cortantes en el lecho, la hidrodinámica y el transporte de sedimentos asociados con las ondas IG.

1.3. Transporte de sedimentos

En las playas ocurren procesos morfodinámicos longitudinales y transversales. En dichos procesos morfodinámicos interactúan muchos agentes (condiciones hidrodinámicas, tipo de rotura, pendiente de las playas, tipo de grano, etc), sin embargo se puede caracterizar el transporte de sedimentos que ocurre en la dirección transversal, como el impulsado por las ondas en dirección hacia el mar o hacia la costa, mientras que el transporte de sedimentos que ocurre en la dirección longitudinal ocurre de manera paralela a la orientación de la línea de costa. Comúnmente, se supone que los flujos en la zona de swash actúan sólo en dirección transversal a la costa, a pesar de que los procesos a lo largo de la orilla de la playa pueden desempeñar un papel importante en el transporte de sedimento total en las zonas cercanas a la costa. La influencia de los flujos longitudinales en la turbulencia, los esfuerzos cortantes en el lecho, movilización de sedimentos y la variabilidad morfológica tiene aún preguntas de investigación abiertas [1].

Sin embargo, hablar de procesos de transporte transversal y longitudinal no es suficiente desde la óptica hidráulica. Tres principales tipos de transporte son relevantes en la zona de swash: transporte de arrastre de fondo, transporte de suspensión y transporte de flujo laminar (*sheet flow*, similar al transporte de arrastre de fondo, pero con muy altos esfuerzos cortantes durante flujos fuertes). Debido a las pequeñas profundidades de agua en la zona de swash, se espera que el transporte de arrastre de fondo (o flujos laminares) sea dominante en esta zona. Sin embargo, el sedimento puesto en suspensión debido al colapso de los bores y posteriormente transportado por las oscilaciones en la zona de swash, también podría ser un mecanismo importante de transporte de sedimentos, o incluso ser dominante en esta zona de la playa [4]. Hasta la fecha, la interacción de la turbulencia, la permeabilidad (infiltración / exfiltración), y el transporte de sedimentos se han estudiado principalmente a través de experimentos de laboratorio [16] y modelos numéricos [17], lo que necesariamente se basa en supuestos y simplificaciones. En los últimos años y gracias al desarrollo de nuevos instrumentos de medición, se han incrementado los estudios en playas naturales, dirección en la cual deben ir encaminadas futuras investigaciones.

En general, las mediciones de un ciclo completo de swash son complicadas, especialmente en las primeras partes del ciclo, debido a los procesos complejos que se dan en esta zona como la interacción swash-swash o el colapso del bore debido a que generan alta turbulencia y están cargados de burbujas, condiciones en las que los sensores ópticos y acústicos comunes pueden fallar. Por otro lado, la última parte del ciclo de swash (backwash) deja sólo una película delgada de agua, donde, en la parte final del ciclo, el nivel de agua cae por debajo de alcance de los sensores.

Una de las principales incertidumbres que aún persiste es como relacionar estos procesos de pequeña escala con los procesos de avance y retroceso de la línea de costa [1]. Esto incluye las observaciones directas, además de herramientas de sensores remotos como imágenes de video o metodologías basadas en imágenes LIDAR, u otras alternativas para estudiar esta compleja zona.

En el presente trabajo se analizan los patrones de velocidades y transporte de sedimentos en dos playas en el caribe Colombiano, Costa Verde (Ciénaga) y Hollywood (Cartagena), con el fin de encontrar diferencias en su comportamiento atribuidas a la pendiente en la zona de swash. Y posteriormente se realiza una aproximación entre las pequeñas escalas (segundos – metros) con procesos erosivos en escalas espacio-temporales mayores (meses - Kilómetros) en la playa de Costa Verde.

2. Métodos

Las mediciones para el análisis del transporte de sedimentos en la zona de swash, se llevaron a cabo en las campañas de campo de Enero-Febrero de 2014 en la playa Hollywood, Cartagena y en Febrero de 2015 en la misma playa Hollywood y en la playa de Costa Verde, Ciénaga.

Ambas playas presentan una zona de rompientes altamente disipativa, sin embargo, sus respectivas zonas de swash exhiben pendientes contrastantes. A pesar de que la zona de rompientes en la playa Costa Verde es más disipativa (β= 0.03), su zona de swash tiene una pendiente reflejante (β= 0.09) como se muestra en la Fig. 1.

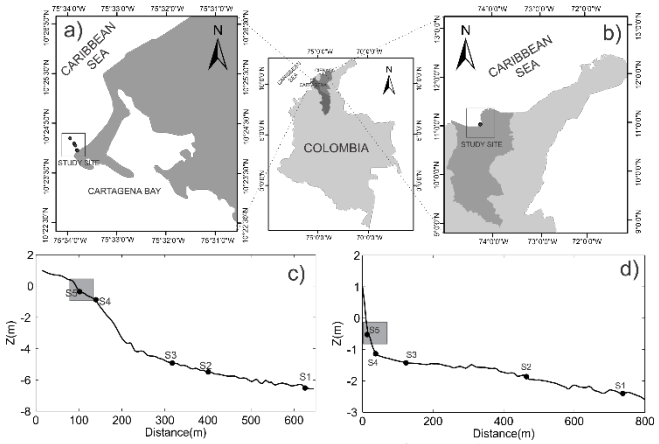


Figura 1. Zonas de estudio a) y c) Localización y Perfil Playa Hollywood, Cartagena c) y d) Localización y Perfil Playa Costa Verde, Ciénaga.
Fuente: Autores

En las diferentes campañas fue diseñado un montaje para la medición de velocidades transversales y longitudinales en la zona de swash (Fig. 2), a través de un ADV Nortek (Acoustic Doppler Velocimeter) con una frecuencia de muestreo de 10 Hz para la campaña de 2014 y 20 Hz para las campañas de 2015.

Presiones y concentraciones fueron medidas a través de una sonda multiparamétrica OBS 3A Campbell con una frecuencia de muestreo de 1 Hz y 2 Hz, para las campañas de 2014 y 2015, respectivamente. Este sensor fue instalado en la zona de swash, junto con el ADV, a 15 cm del lecho, permitiendo estimar el transporte de sedimentos en esta zona.

El ADV permite medir el perfil de velocidades en una celda de 3 cm, sin embargo se observó que la variación de la velocidad fue mínima en las celdas medidas, por lo que se optó por trabajar con la velocidad promedio en el perfil.

El OBS muestra las mediciones en *"counts"*. Para obtener la transformación de *counts* a unidades de concentración es necesario hacer la calibración del equipo con los sedimentos de la zona. Sin embargo, para los propósitos acá analizados, las mediciones muestran las variaciones de las concentraciones, por lo que no se calibró el equipo.

El montaje usado para las mediciones es mostrado en (Fig. 2). Además, durante la campaña de campo se dispuso de un arreglo de sensores transversales a la playa para la medición de presiones y velocidades (Fig. 1,c,d). Siendo S1 el sensor más alejado de la costa y S5 el montaje de la zona de swash.

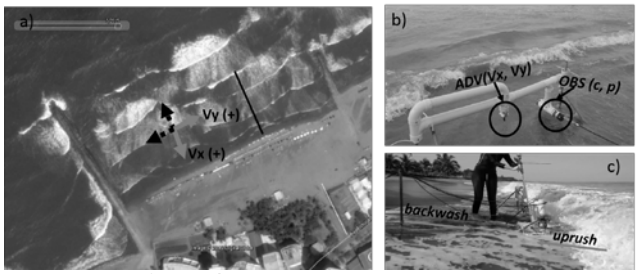


Figura 2. a) Configuración del sensor de velocidades (velocidades positivas flechas grises) b) Montaje de equipos para la medición de velocidades y concentraciones en la zona de swash c) Backwash y uprush
Fuente: Autores

3. Resultados

Para analizar la influencia de la pendiente de la zona de swash en las principales variables que controlan el transporte de sedimentos en esta zona, se realizó un análisis de las diferentes series medidas en la campaña de 2015 en las dos playas de estudio.

La Fig. 3 muestra un ejemplo de la evolución de la energía en la playa Costa Verde, Ciénaga. Como puede ser visto, en el sensor S1 (panel superior), la energía de SS domina el espectro de energía (peridos ~ 8 s o menores). Además, se observa que en los sensores cercanos a la costa, la energía IG comienza a ser igual de importante (peridos ~ 16 s o superiores) (Fig. 3 panel inferior)

Similares resultados a los observados en la Fig. 3, fueron encontrados en la Playa Hollywood, sin embargo, en los sensores cercanos a la costa, la energía SS fue casi totalmente disipada, con lo que la energía IG dominó el espectro (no mostrado). Estos cambios en la distribución de la energía cerca de la costa, pueden ser explicados debido a las diferencias en las pendientes en las zonas más cercanas a la costa (zona de swash). Playas más disipativas (Hollywood, Cartagena) tendrán más influencia de las ondas IG, mientras la energía de SS es disipada en la zona de rompiente. Por el contrario, playas con pendientes más reflejantes causaran menos disipación de la banda SS.

En las Figs. 4 y 5 se observan los valores de profundidades, velocidades transversales y longitudinales y concentraciones de solidos suspendidos, para la playa de Ciénaga y Cartagena, respectivamente. Una comparación entre ambas figuras, muestra que las profundidades (presiones) en la zona de swash son mayores en Ciénaga (zona de swash reflejante). Además se observa una simetría entre el uprush y backwash, con duraciones promedio en los ciclos de swash es de aproximadamente 8 segundos, observándose una separación temporal entre ciclos de swash consecutivos, sin interacciones swash-swash considerables (Fig. 4a).

La Fig. 4b muestra que las velocidades transversales a la playa Vx (línea negra), alcanzan magnitudes hasta de 1.8 m/s en el uprush y backwash, sin embargo, se observa que no es posible capturar el ciclo completo de swash, principalmente durante el backwash, esto puede ser debido a la alta pendiente en esta zona y la porosidad de la playa, lo que hacía que la lámina de agua se redujera rápidamente impidiendo la medición de esta variable por el equipo. También se observa que las velocidades longitudinales tienen magnitudes hasta de 1.2 m/s, siendo principalmente negativas (dirección S-O, Fig. 7). Es importante notar también que la diferencia registrada en el perfil de velocidades transversales en la Playa de Costa Verde, Fig. 4b, se debe a que la duración del uprush es menor que la del backwash, indicando el trabajo efectivo de las tensiones de corte con el fondo en el retardo del flujo.

En la Fig. 4, al comparar las gráficas correspondientes a las velocidades y a las concentraciones de sedimentos representadas en *counts*, se pueden apreciar comportamientos asimétricos entre el uprush y el backwash, con magnitudes muy bajas en este último. Esto puede ser debido a que el transporte de fondo y/o el transporte de flujo laminar es mucho mayor que el transporte en suspensión, sin embargo,

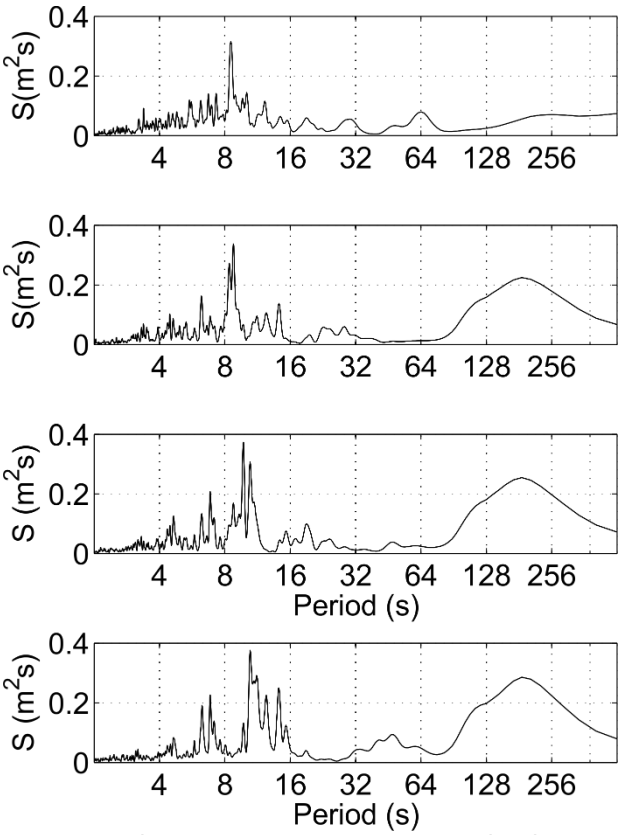


Figura 3. Evolución de los espectros de densidad de energía Ciénaga desde aguas intermedia hasta aguas someras. Panel superior: Sensor S1. Panel Inferior: Sensor S4.
Fuente: Autores

debido a la robustez del instrumento es posible que éste no registrara valores de concentraciones de sólidos suspendidos, debido a la reducción súbdita de la lámina de agua.

Por otra parte, la Fig. 5a muestra que las presiones en la zona de swash en la playa Hollywood (zona de swash disipativa) presenta ciclos de swash promedio más largos que los registrados en Ciénaga, además se observa que los ciclos no son completos (existencia de interacción swash-swash). Las velocidades en esta zona (Vx y Vy) fueron mucho menores a las registradas en Costa Verde porque la energía asociada a la banda SS se ha disipado por completo a su llegada a la zona de swash, predominando la energía en la banda IG en esta parte de la playa. Esto también ha permitido observar en muchos casos el ciclo completo de velocidades (*uprush* y *backwash*); además las velocidades longitudinales y transversales muestran un comportamiento y magnitudes similares (Fig. 5b) contrario a lo reportado en Costa Verde. Los valores de concentraciones de solidos, fueron menores que los medidos en Costa Verde, sin embargo, se observó el mismo comportamiento, con valores muy bajos durante el backwash.

Una comparación más detallada de los resultados descritos anteriormente, es mostrada en la Fig. 6, donde se analizan dos ciclos de swash consecutivos en ambas playas. La Fig. a y b muestran que dos ciclos de swash consecutivos en playa Hollywood (Cartagena), equivalen a 2.5 veces el tiempo necesario para dos ciclos de swash en la playa de Costa Verde (Cienaga).

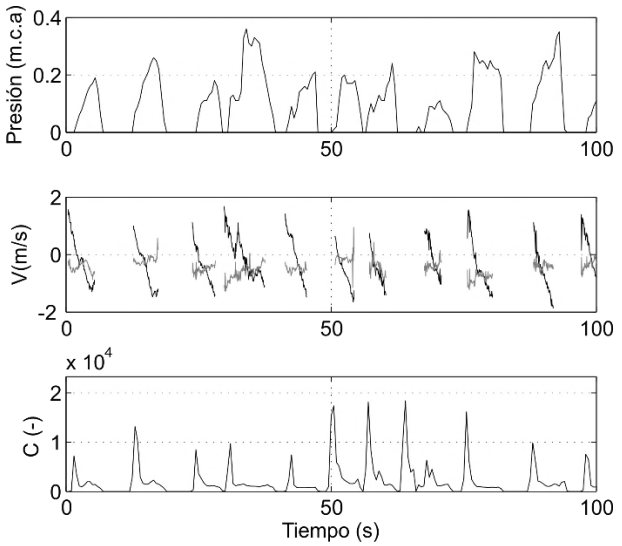


Figura 4. Variables medidas en la zona de swash en la playa Costa Verde (Ciénaga), Febrero de 2015. Panel Superior a) Presiones, panel medio b) Velocidades transversales -Vx (línea negra) y longitudinales-Vy (línea gris), panel inferior c) concentración de sólidos suspendidos.
Fuente: Autores

En la Fig. 6c y d se observan detalladamente las diferencias en los patrones de velocidades, mostrando que en la playa Hollywood (Cartagena) fue posible capturar ciclos de velocidades completos e interacciones swash-swash, presentando magnitudes y direcciones similares en dirección transversal y longitudinal durante el uprush y el backwash. El comportamiento de las velocidades similares transversales y logitudinales para playa Hollywood (Fig 6d) se podría explicar por el hecho de que la playa se encuentra entre dos espolones y por tanto puede estar dejando atrapada parte de la energía liberada IG en ondas de borde, sin embargo esta hipótesis se debe profundizar con medidiones de mayor detalles. Por el contrario, en Costa Verde (Cienaga) las velocidades transversales y longitudinales

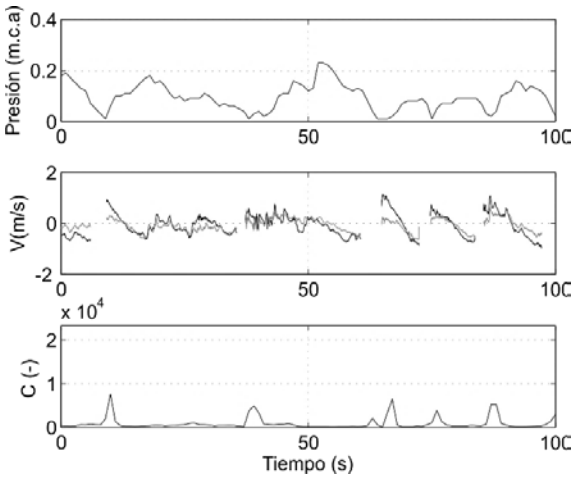


Figura 5. Variables medidas en la zona de swash en la playa Hollywood (Cartagena), Febrero de 2015. Panel superior a) Presiones, panel medio b) Velocidades transversales–Vx (línea negra) y longitudinales-Vy (línea gris), panel inferior c) concentración de sólidos suspendidos.
Fuente: Autores

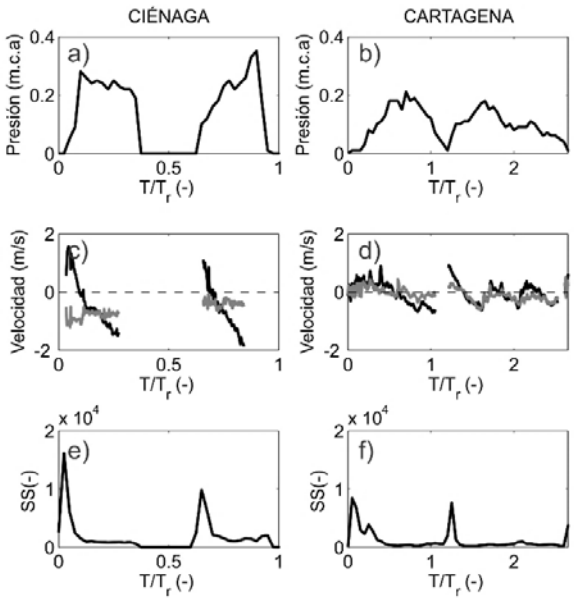


Figura 6. Dos ciclos de swash consecutivos en la playa Hollywood (Cartagena) (a,c y e) y en la playa Costa Verde (Cienaga) (b,d y f), Febrero de 2015. a) y b) Presiones; c) y d) Velocidades transversales–Vx (línea negra) y longitudinales-Vy (línea gris); e) y f) concentración de sólidos suspendidos. $\boldsymbol{T_r}$ equivale al tiempo de referencia (duración de dos ciclos de swash consecutivos en Costa Verde).
Fuente: Autores

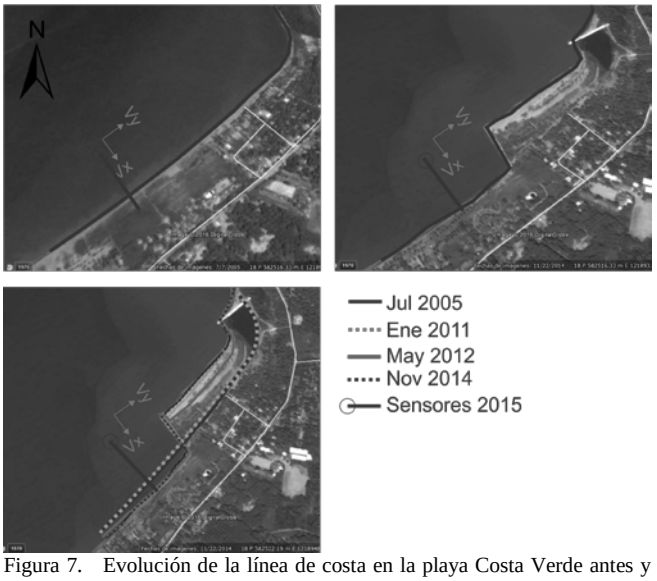


Figura 7. Evolución de la línea de costa en la playa Costa Verde antes y después de la construcción del espolón. a) línea base en Julio de 2005, antes de la construcción de dos espolones, b) la costa en Noviembre de 2014, c) líneas de costa analizadas antes y después de la construcción del espolón. Fuente: Autores

tuvieron diferente comportamiento, siendo estas últimas principalmente negativas.

La Fig. 6e y f muestran comportamientos muy similares en los patrones de concentración en ambas playas, a pesar de las diferencias en las demás variables medidas, incluso en la playa Hollywood (Cartagena) no son observadas interacciones swash-swash en esta variable, lo que puede ser debido a las limitaciónes de la técnica de medición con el OBS, como fue argumentado anteriormente.

Para entender las implicaciones que tienen estas altas velocidades longitudinales negativas en los procesos erosivos presentados en la playa de Costa Verde, se muestra la Fig. 7, donde se observa la evolución de la línea de costa desde Julio de 2005 hasta Noviembre de 2014. La Fig. 7, a muestra la línea base en Julio de 2005, antes de la construcción de dos espolones y la Fig. 7b muestra el estado de la costa en Noviembre de 2014. En este periodo de tiempo fueron analizados un total de 15 fechas diferentes, de las cuales 5 estuvieron comprendidas entre Julio de 2005 y Enero de 2012 (antes de la construcción del espolón), en las cuales no se observaron cambios significativos en la línea de costa.

Por el contrario, cuando se analiza la evolución de la línea de costa entre Enero de 2012 y Mayo de 2012, se observa en este corto intervalo de tiempo, un retroceso en la línea de costa en la margen izquierda del espolón de aproximadamente 40 m, ésta erosión se extiende hasta 1 kilómetro de la margen izquierda del espolón. En la Fig. 7c se muestran algunas de las líneas de costa analizadas antes y después de la construcción del espolón.

Debido a las altas velocidades longitudinales negativas Vy (en dirección NE – SW), observadas en las Fig. 4b y Fig. 6c y la interrupción del suministro de sedimentos debido al espolón, se observan fuertes procesos de erosión en esta playa (Fig. 8), ya que estas altas velocidades no tiene sedimento que transportar. La persistencia de velocidades longitudinales en el sentido NE-SW en la zona de swash de Costa Verde, medidas durante las campañas realizadas en diferentes épocas de los años 2014 y 2015, permiten inferir que esta playa se encuentra la mayor parte del año bajo el efecto de este patrón de corrientes, independientemente de los cambios estacionales en la región del caribe Colombiano. Esto quiere decir que el flujo neto longitudinal de sedimentos en la zona de swash en esta playa tiene un sentido NE-SW. Este análisis, permite explicar cómo las dinámicas de pequeña escala (ciclos de swash), pueden contribuir al entendimiento de las dinámicas espacio temporales mayores como la evolución de la línea de costa.

Un análisis similar de las características de los ciclos individuales de swash (*uprush y backwash*) para los datos recolectados en la campaña de campo de 2014 fue llevado a cabo en la playa de Cartagena. Resultados de dos ciclos característicos son mostrados en la Fig. 9. En este caso los ciclos de swash tienen una duración aproximada de 25 s. Las líneas grises en la Fig. 9c y d muestran las velocidades transversales V_x (positivas hacia la costa, negativas hacia el mar) en la celda superior e inferior, donde no se observan cambios significativos; las velocidades longitudinales V_y están representadas por la línea negra, siguiendo las direcciones mostradas en la Fig. 2.

Para la campaña de 2014, el montaje de sensores en la zona de swash se encontraba a profundidades mayores, sin embargo, las características durante el uprush y el backwash en las presiones y profundidades (Fig 9a,b) son similares a las observadas en 2015 en la misma playa (Fig. 5a). Los

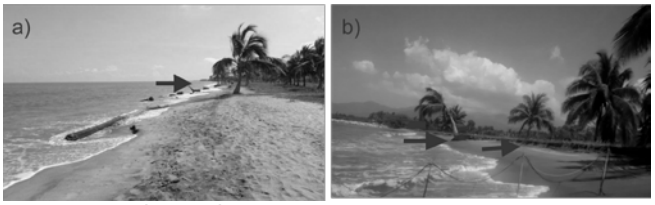


Figura 8. Erosión de la línea de costa en la playa Costa Verde a) Noviembre de 2014 b) Febrero de 2015.
Fuente: Autores

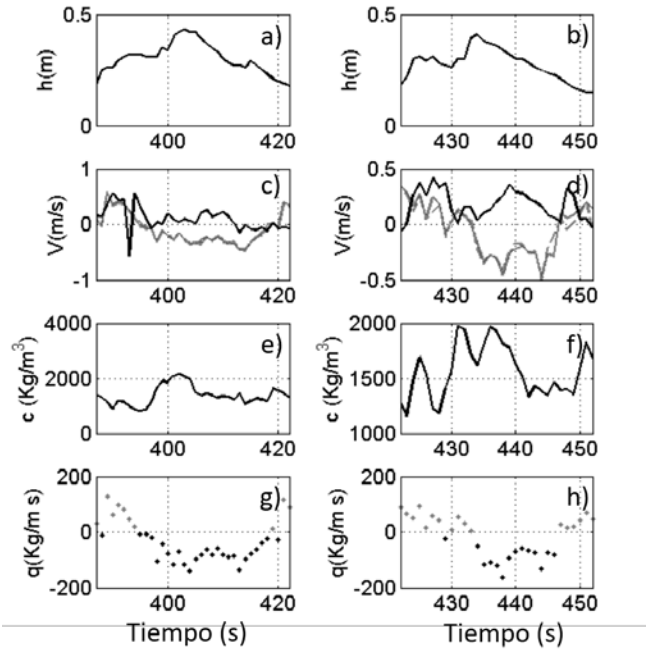


Figura 9. Ciclos de swash individuales, Playa Hollywood (Cartagena), Febrero de 2014 a,b) Presiones c,d) Velocidades transversales–Vx (líneas grises) y longitudinales-Vy (línea negra) e,f) concentración de sólidos suspendidos g,h) Transporte de sedimento transversal. Nota: Los valores de transporte de sedimentos no se encuentran calibrados, pero permiten hacer una correcta interpretación física.
Fuente: Autores

patrones de concentraciones de sólidos y de transporte de sedientos son diferentes (entre Feb 2014 y Feb 2015), ya que se observan magnitudes similares (~100-150 Kg/m s) durante el uprush y el backwash (Fig 9 g,h), al contrario que en Feb 2015, donde las magnitudes de concentraciones y velocidades entre uprush y backwash son diferentes (Fig 5b,c). Para la campaña de 2014 el equipo midió en unidades de concentración (no en *counts*). Sin embargo, aunque las magnitudes no están calibradas, los patrones observados tienen las mismas interpretaciones físicas.

Para entender la influencia de un ciclo de swash característico (procesos de pequeña escala) en escalas espacio-temporales mayores como la evolución de la línea de costa, se procedió a cuantificar para un estado de mar, el transporte de sedimentos durante el uprush y el backwash. La Fig. 10 muestra que para el estado de mar seleccionado el transporte de sedimentos promedio es principalmente direccionado hacia el mar (backwash) (~50 Kg/m s), mientras

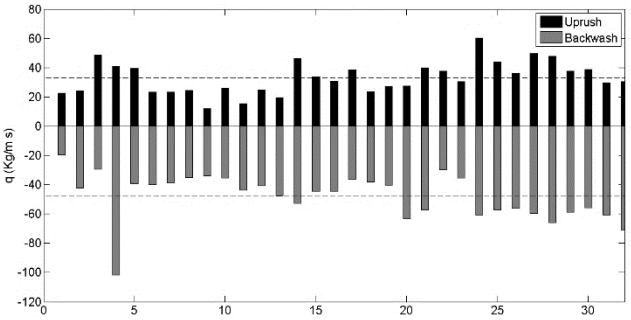


Figura 10. Promedio de transporte de sedimentos hacía la costa (agradación) y hacia el mar (erosión) para un estado de mar debido al transporte durante el uprush y el backwash, respectivamente (el eje X representa cada ciclo de swash). Nota: Los valores de transporte de sedimentos no se encuentran calibrados pero permiten hacer una correcta interpretación física.
Fuente: Autores

que en dirección costa (uprush) los valores son menores (~ 35 Kg/m s), lo cual podría estar relacionado con procesos erosivos, y por tanto pérdida de línea de costa.

4. Conclusiones

Una comparación entre las principales variables que dominan el transporte de sedimentos en la zona de swash fue analizado para la playa Costa Verde (Ciénaga) y playa Hollywood (Cartagena). En ambas playas la energía IG en las zonas cercanas a la costa fue alta, sin embargo, se observó mucha más disipación en la banda de SS en la playa Hollywood, mientras en Costa Verde, parte de la energía de SS es observada incluso muy cerca a la costa.

Se llevó un análisis detallado de las dinámicas de pequeña escala, mostrando que existen diferencias entre los ciclos de swash entre ambas playas. El análisis de las profundidades en la playa de Costa verde (Cienaga) mostró ciclos más ordenados, con separación temporal entre ciclos, mientras que la playa Hollywood (Cartagena) tuvo mayores asimetrías entre el uprush y backwash, mayor duración en cada ciclo e interacciones swash-swash. Las diferencias en los patrones de las excursiones de swash en ambas playas son atribuidas a las pendientes en la zona de swash, mostrando más interacciones swash-swash y asimetrías en la playa dominada por las ondas IG (Playa Hollywood), en contraste con lo reportado en estudios previos. Sin embargo, esta playa mostró variaciones más graduales en el aumento de las profundidades y velocidades, que la playa influenciada por las ondas de SS (Playa Costa Verde).

Las velocidades transversales en Costa verde fueron mayores que las registradas en playa Hollywood, dificultándose la obtención de ciclos completos de swash, ya que el descenso de la lámina de agua durante el backwash era rápido debido a la fuerte pendiente en esta zona y una mayor porosidad, lo que contribuía a una rápida infiltración de la lámina de agua.

Las velocidades longitudinales en la playa de Costa Verde fueron altas e incluso mayores que las medidas en la dirección principal (velocidades transversales) en la playa Hollywood, además se observó que las velocidades longitudinales (Vy) fueron principalmente negativas, lo que

indica direcciones (NE- SW), lo que puede explicar el rápido retroceso en la línea de costa, después de la construcción del espolón, debido a la interrupción del suministro de sedimentos.

Por otro lado, en la Playa Hollywood, Cartagena, se observó que las velocidades longitudinales fueron similares a las transversales en magnitud y dirección, esto podría ser atribuido a una onda atrapada entre los dos espolones (Fig. 2), sin embrago se deben llevar a cabo más estudios para comprobar esta hipótesis.

En ambas playas debido a las limitaciones del instrumento es difícil conocer el comportamiento del trasporte de sedimentos durante el backwash.

El estudio de la influencia de los ciclos de swash individuales (uprush y backwash), y su influencia en los procesos de erosión y agradación, en playa Hollywood durante la campaña de campo de 2014, fue llevado a cabo, encontrando que el transporte hacia el mar (erosión/backwash) fue mayor que el transporte hacia la costa (uprush/agradación), para el estado de mar analizado.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por COLCIENCIAS, en el marco del Proyecto “Análisis de las Oscilaciones Infragravitatorias en la Zona de Rompientes de Playas Micromareales Disipativas y Reflejantes” Convocatoria 569 - 2012 banco de proyectos elegibles de CTi – recuperación contingente. También agradecemos a los equipos de trabajo en las campañas de campo de la Universidad Nacional y la Universidad del Norte.

Referencias

[1] Puleo, J.A. and Torres-Freyermuth, A., The second international workshop on swash zone processes, Coast. Eng., [online]. 2015. Available at: https://sites.udel.edu/jpuleo/swash-zone-and-nearshore-sediment-transport/

[2] Masselink, G. and Russell, P., Flow velocities, sediment transport and morphological change in the swash zone of two contrasting beaches, Mar. Geol., 227(3–4), pp. 227-240, 2006. DOI: 10.1016/j.margeo.2005.11.005

[3] Chardón-Maldonado, P., Pintado-Patiño, J.C. and Puleo, J.A., Advances in swash-zone research: Small-scale hydrodynamic and sediment transport processes, Coast. Eng., January-Dec., 2015.

[4] Van Rooijen, A.A., Modelling sediment transport in the swash zone, 2011.

[5] Masselink, G. and Hughes, M., Field investigation of sediment transport in the swash zone, Cont. Shelf Res., 18, pp. 1179-1199, 1998. DOI: 10.1016/S0278-4343(98)00027-2

[6] Butt, T. and Russell, P., Suspended sediment transport mechanisms in high-energy swash, Mar. Geol., 161, pp. 361-375, 1999. DOI: 10.1016/S0025-3227(99)00043-2

[7] Elfrink, B. and Baldock, T., Hydrodynamics and sediment transport in the swash zone: a review and perspectives, Coast. Eng., 45(3–4), pp. 149-167, 2002. DOI: 10.1016/S0378-3839(02)00032-7

[8] Aagaard, T. and Greenwood, B., Suspended sediment transport and the role of infragravity waves in a barred surf zone, Mar. Geol., 118(1–2), pp. 23-48, 1994. DOI: 10.1016/0025-3227(94)90111-2

[9] Stockdon, H.F., Holman, R.A., Howd, P.A. and Sallenger, A.H., Empirical parameterization of setup, swash, and runup, Coast. Eng., 53(7), pp. 573-588, 2006. DOI: 10.1016/j.coastaleng.2005.12.005

[10] Guedes, R.M.C., Bryan, K.R., Coco, G. and Holman, R.A., The effects of tides on swash statistics on an intermediate beach, J. Geophys. Res., 116(C4), pp. C04008, 2011. DOI: 10.1029/2010JC006660

[11] Hughes, M.G., Aagaard, T., Baldock, T.E. and Power, H.E., Spectral signatures for swash on reflective, intermediate and dissipative beaches, Mar. Geol., 355, pp. 88-97, 2014. DOI: 10.1016/j.margeo.2014.05.015

[12] Ruessink, B.G., Kleinhans, M.G. and Van Den Beukel, P.G.L., Observations of swash under highly dissipative conditions Waddensea, 103, pp. 3111-3118, 1998.

[13] Ruggiero, P., Holman, R.A. and Beach, R.A., Wave run-up on a high-energy dissipative beach, J. Geophys. Res., 109(C6), p. C06025, 2004. DOI: 10.1029/2003JC002160

[14] Ruju, A., Lara, J.L. and Losada, I.J., Radiation stress and low-frequency energy balance within the surf zone: A numerical approach, Coast. Eng., 68, pp. 44-55, 2012. DOI: 10.1016/j.coastaleng.2012.05.003

[15] Senechal, N., Coco, G., Bryan, K.R. and Holman, R.A., Wave runup during extreme storm conditions, J. Geophys. Res., 116(C7), p. C07032, 2011. DOI: 10.1029/2010JC006819

[16] Kikkert, G.A., O’Donoghue, T., Pokrajac, D. and Dodd, N., Experimental study of bore-driven swash hydrodynamics on impermeable rough slopes, Coast. Eng., 60, pp. 149-166, 2012. DOI: 10.1016/j.coastaleng.2011.09.006

[17] Pintado-Patiño, J.C., Torres-Freyermuth, A., Puleo, J.A. and Pokrajac, D., On the role of infiltration and exfiltration in swash zone boundary layer dynamics, J. Geophys. Res. Ocean., pp. 6329-6350, 2015.

J.K. Montaño-Muñoz, recibió el título de Ing. Civil en 2012, y el grado de MSc. en Recursos Hidráulicos en 2016 de la Universidad Nacional de Colombia. Ha trabajado en sistemas de playas, estudiando la evolución y transformación del oleaje, a través de mediciones de campo y sistemas de cámaras. Actualmente realiza su PhD en la Universidad de Auckland, Nueva Zelanda en temas relacionados con erosión costera.
ORCID: 0000-0002-4142-6214

A.F. Osorio, es Ing. Civil (Universidad del Valle, Colombia) en 1999, MSc. y Dr. en Ciencias y Tecnologías Marinas (Universidad de Cantabria, España) en 2001 y 2005, respectivamente. Es profesor de la Universidad Nacional de Colombia desde 2006, actualmente tiene la categoría de profesor titular y es Director grupo de investigación OCEANICOS de la Universidad Nacional de Colombia. Tiene una gran experiencia en la Gestión de las zonas oceánicas y costeras (MIZC), Energías Renovables Marinas (MRE), Modelado Numérico para retroanálisis y previsión (olas, mareas y variables oceanográficas) y morfodinámica de playas. Ha estado involucrado con varios proyectos internacionales como: The European Project – Coast View (vigilancia de los sistemas costeros en países europeos) y el desarrollo del Sistema de Modelado Costero (SMC, www.smc.unican.es).
ORCID: 0000-0003-4891-9115

L. Otero, es Oceanógrafo Físico del año 1999 de la Escuela Naval Almirante Padilla, MSc. en Ciencias y Tecnologías Marinas en 2003 y Dr. en Ciencias y Tecnologías Marinas del año 2008, ambas de la Universidad de Cantabria (España). Desde 2000 hasta 2011 se desempeñó en la Armada Nacional de Colombia como subdirector y director del Centro Control Contaminación del Pacifico (CCCP), subdirector del Centro de Investigaciones Oceanográficas e Hidrográficas del Caribe (CIOH) y decano de la Facultad de Oceanografía Fisica de la Escuela Naval Almirante Padilla. Actualmente es profesor tiempo completo del Departamento de Fisica de la Universidad del Norte (Barranquilla, Colombia). Sus intereses de investigación se enfocan en. ondas en el océano, amenazas naturales de origen marino: tsunamis, ondas de tormenta y oleaje extremo; modelación numérica de procesos de transporte de sustancias contaminantes en el medio marino, hidrodinámica en la zona de rompientes, dinámica de estuarios, manejo integral de zonas costeras y marinas.
ORCID: 0000-0002-1322-253X

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Viability of probiotic bacteria *Bacillus Polymyxa*, *Bacillus Megaterium* and *Lactobacillus Delbruekii* subsp. *bulgaricus* microencapsulated under the spray-drying technique

Natalia De Araújo-Uribe [a], Orlando S. Ruiz-Villadiego [b], Olga Inés Montoya-Campuzano [c] & Luz Adriana Gutiérrez-Ramírez [d]

[a] *Facultad de Ciencias, Área curricular Biotecnología,Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia. ndeu@unal.edu.co*
[b] *Facultad de Ciencias, Escuela de Geociencias, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia. osruiz@unal.edu.co*
[c] *Facultad de Ciencias, Escuela de Biociencias, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia. oimontoy@unal.edu.co*
[d] *Facultad de Ciencias Administrativas y Agropecuarias, Grupo de Investigación en Producción, Desarrollo y Transformación Agropecuaria, Corporación Universitaria Lasallista, Caldas, Antioquia. lugutierrezramirez@gmail.com*

Received: December 19th, 2016. Received in revised form: October 23th, 2017. Accepted: November 19th, 2017

Abstract
Most microorganisms that are considered as probiotics have received much attention in recent scientific research, supporting their important role in improving bowel function in both human and animal health. Probiotics have the ability to modulate the immune system of the host, compete for colonization with pathogenic microorganisms and improve digestion of food. One disadvantage in the use of probiotics in food processing is the low viability of probiotics that may be affected by environmental conditions including air, humidity and temperature. An alternative to avoid these effects is by developing protective conditions that ensure the viability and activity of these microorganisms during use and food application, ensuring they are released into the intestine where their action is required. Accordingly, this study aims to assess the influence of spray drying technique with maltodextrin and inulin on viability of a consortium of three types of probiotic bacteria widely used in the food industry.

Keywords: inulin; maltodextrin; microencapsulation; probiotics; viability.

Viabilidad de las bacterias probióticas *Bacillus polymyxa*, *Bacillus megaterium* y *Lactobacillus delbruekii* subsp. *bulgaricus* microencapsuladas bajo la técnica de secado por aspersión

Resumen
La mayoría de microorganismos considerados como probióticos, tienen un papel importante en el mejoramiento de la función intestinal, tanto para la salud humana como animal. Gran parte de estos microorganismos probióticos, son muy sensibles a condiciones ambientales como la humedad, la temperatura, la concentración de oxígeno, las sales biliares, y el pH estomacal y, al ser procesados o almacenados como alimentos funcionales se puede ver afectada su viabilidad. Debido a esto, es necesario desarrollar condiciones protectoras que garanticen la viabilidad y actividad de estos microorganismos cuando son adicionados y procesados en matrices alimentarias, y asegurar que sean liberados en el intestino donde se precisa su acción. De acuerdo a lo anterior, el presente proyecto propone evaluar la influencia de la técnica de secado por aspersión con maltodextrina más inulina sobre la viabilidad de un consorcio de tres tipos de bacterias probióticas ampliamente utilizadas en la industria alimentaria.

Palabras clave: inulina; maltodextrina; microencapsulación; probióticos; viabilidad.

1. Introduction

Most microorganisms considered as probiotics belong to the lactic acid bacteria (LAB) where the most representative genera of sporulated bacilli includes *Lactobacillus sp.*, *Lactococcus sp.*, *Bifidobacterium sp.*, and *Bacillus* sp. These

How to cite: De Araujo-Uribe, N., Ruiz-Villadiego, O.S., Montoya-Campuzano, O.I. and Ramírez-Gutiérrez, L.A., Viability of probiotic bacteria Bacillus Polymyxa, Bacillus Megaterium and Lactobacillus Delbruekii subsp. bulgaricus microencapsulated under the spray-drying technique. DYNA, 85(204), pp. 272-276, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

bacteria produce a series of metabolites such as lactic acid, hydrogen peroxide, aromatic compounds (diacetyl, acetaldehyde), and other bacteriocins that are capable of inhibiting the growth of pathogenic organisms therein generating cell lysis [1]. There are several studies on the beneficial properties attributed to the probiotic microorganisms to human health, that describes how these bacteria act as a barrier protecting the gastrointestinal tract, inducing activation of the immune system and contributing to better digestion and absorption of nutrients [2]. For all these reasons, probiotics have been considered of great biotechnological value, being widely used in controlling pathogens, to prevent both bacterial and fungal infections in animals and in man [3].

One of the challenges for food technology regarding the addition of probiotics in food, is to ensure that these microorganisms arrive alive and in good condition to their action site within the body of the host, and ensure implementation in a wider range food. The survival of these bacteria, depends on the vehicle in which they were built, therefore, it is necessary to generate strategies to ensure their survival in the matrix where they are incorporated, during storage and their passage through the gastrointestinal tract [4].

Among the technologies proposed to ensure cell viability of these microorganisms in food, microencapsulation technique offers protection to probiotic microorganisms against adverse conditions. Several studies are related to this subject such as a research carried out by Khosravi Zanjani, Tarzi, Sharifan, & Mohammadi (2014), who aimed to study the protective role of this technique in the bacterias *Lactobacillus casei* and *Bifidobacterium bifidum*, via emulsion technique. Mokarram, Mortazavi, Najafi, & Shahidi, (2009), demonstrated that microencapsulation of *Lactobacillus acidophilus* and *Lactobacillus rhamnosus*, ensures its survival against temperature and pH changes. Also in the study of Ding & Shah, (2009), the spray-drying technology was the most often used in the food industry for probiotics microencapsulation [5-7].

According to the above, in the present study, cell viability of three types of probiotic bacteria was evaluated: *Bacillus polymyxa, Bacillus megaterium* and *Lactobacillus delbruekii* ssp. *bulgaricus*, microencapasulated under spray drying technique with maltodextrin more inulin, as well as the effect of pH, bile salts and temperature on the microcapsules obtained.

2. Materials and methods

2.1. Activation of strains

Probiotic bacteria (*B. polymyxa*, *B. megaterium* and *L. delbruekii* ssp *bulgaricus*) were granted by Corporación Universitaria Lasallista and previously isolated, characterized, and stored at 80 °C in glycerol 7.5%. *B. polymyxa*, and *B. megaterium* activation was produced by sowing the strains with the exhaustion agar Plate Count technique (Merk KGaA, Darmstadt, Germany) at 37 ºC for 48 hours under aerobic conditions and *L. delbruekii* ssp *bulgaricus* in M17 agar (Merck KgaA, Darmstadt, Germany) at 37 ° C for 48 hours under anaerobic conditions.

After incubation period, colonies were recovered separately in a sterile solution of deionized water to reach a final count of $3x10^9$ bacteria million cells / mL according to the Mc. Farland 10 pattern. Volumes obtained were mixed in equal proportions, and to this solution was added the corresponding concentration of maltodextrin and inulin (Tecnas, Itagüí, Colombia).

2.2. Microencapsulation process

BÜCHI Mini Spray Dryer B-290 Swiss-made was used for microencapsulation. Optimization of microencapsulation processes was obtained through a central composite design with five replicates in the center with the help of Statgraphics. The response variable, survival of microencapsulated bacteria was evaluated, measuring the number of colony forming units per gram (CFU / g).

2.3. Spray drying technique using maltodextrin and inulin

Suspensions with maltodextrin and inulin were prepared following the protocol described by Rodriguez, (2012). Maltodextrin concentrations used here were 10 to 35% w / v in a suspension with a prebiotic and cells in a ratio of 1:1 (w/v) with a final concentration of microorganisms $3x10^9$ CFU / mL. This preparation was homogenized at 4000 rpm for 10 minutes and maintained under constant stirring at room temperature during the power supply, where an air inlet temperature range between 76-144 °C, a percentage of aspiration between 40 % and 90 %, an airflow of 450-565 L/h and a feed flow of 6 mL /minute was used (Table 1). Microencapsulated material was collected and sealed in sterilized foil pouches and stored at room temperature and at 4 °C.

2.4. Response surface methodology

To estimate the optimal levels of the variables needed for the encapsulation process that would ensure greater viability, a central composite design was applied with three independent variables: temperature input (X1), percentage of aspiration (X2) and maltodextrin concentration (X3). The dependent variable: viability of probiotic bacteria (Y). The number of experiments was calculated based on the following equation: 1) 2K + 2 (K) + Cp = 23 + 2 (3) +5 = 19; where K = number of independent variables, and Cp = central point of the design.

Table 1.
Independent variables real levels for spray drying technique with Maltodextrin -Inulina

Air inlet temperature (º C)	Percentage of aspiration (%)	Maltodextrin concentrations (w/v)
76	40	10.00
90	50	15.00
110	65	22.50
130	80	30.00
144	90	35.00

Source: The autors.

2.5. Evaluation of survival microencapsulated probiotic bacteria

In order to determine the survival of microencapsulated probiotic bacteria, counting was assessed by CFU subjecting the microcapsules to serial dilutions in PBS (phosphate buffered saline), then seeded in selective culture media for each bacterial strain and survival was determined by counting colony forming units per gram (CFU / g).

The temperature, rate of aspiration and maltodextrin concentration that obtained the highest bacterial count in units' formers Cologne per gram (CFU/g) was selected, and the effect of pH 2.5 and bile salt concentration was evaluated at 0.3 % p/v for 4 hours. Similarly, stability of the microcapsules to temperature was determined and subjected to 10 minutes of heating at 70 °C, then viability was evaluated. Likewise, they were stored for 1, 30, and 60 days at temperatures of 4 °C and 25 °C in order to assess its strength and viability over time. All experiments were done in triplicate.

The colonies recovered were subjected to Gram staining and biochemical tests API® 50 CHL and CHB bioMerieux to confirm that it was initially used strains and discard any contamination.

2.6. Statistical tests

For analysis of the results, a two factors analysis of variance with three samples per group was used. Statgraphics software was used.

3. Results and discussion

The recovery percentage of microencapsulated material in grams was averaged in 40 % per 100 mL of solution.

When assessing the effect of spray drying process on the viability of the three probiotic strains contained in the suspensions with maltodextrin more inulin, growth in both, sporulated bacilli and lactobacilli was evidenced. Gram staining and biochemical tests of recovered colonies confirmed that were the baseline strains. These results confirm other studies where the survival of encapsulated probiotic based on this method was significantly higher compared to the free microorganisms, and ensure the stability of such microorganisms in functional food products [1].

Other studies have also reported the effectiveness of this technique in the microencapsulation of probiotic, including lactic acid bacteria and sporulated bacilli [8-10].

According to response surface analysis the most important effect for the survival of microorganisms was the temperature (X1) (Fig. 1).

Most viable microorganisms were recovered at 76 °C where the survival average for sporulated bacilli at day 1 was $6{,}33x10^6$ CFU / g and for lactic acid bacteria was $5{,}12x10^6$ CFU/gr. However, when the viability of such microorganisms was evaluated at 144 °C a count of 1.28×10^6 CFU / g for sporulated bacilli and 1.08×10^6 CFU / g for lactic acid bacteria was obtained. These data indicate that the greater tolerance by sporulated bacilli against high temperatures is probably due to the ability of these microorganisms to form spores, which allows them to tolerate extreme environmental conditions. Likewise, previous studies have claimed that the characteristics of each strain and tolerance to different stress levels are crucial for their viability when subjected to these procedures [11].

Moreover, analysis of variance for the viability of the sporulated bacilli indicated that there were statistically significant differences in the interaction between the viability of microorganisms and temperature ($p < 0.05$), while the concentration of maltodextrin and the percentage of aspiration showed have no a significant effect (Table 2).

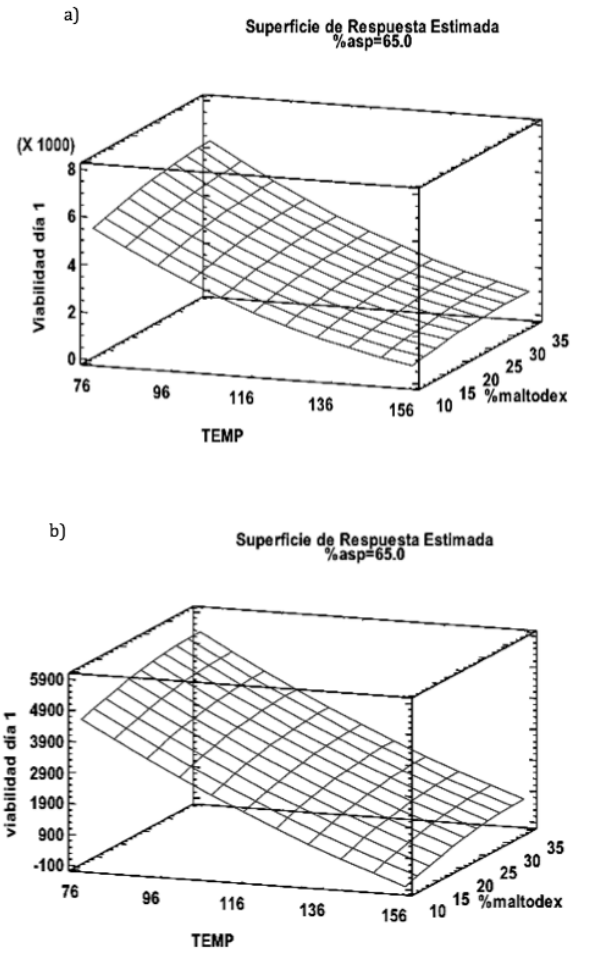


Figure 1. a) Estimated Response surface for the survival of sporulated bacilli. b) estimated response surface for the survival of lactic acid bacteria. Source: The authors.

Table 2.
Analysis of Variance for sporulated bacilli viability

Source	Sum of Squares	Degrees of Freedom	Value-P
A: Inlet temperature	2.55702E7	1	0.0000
B: Percentage of aspiration %	209534.	1	0.0570
C: Maltodextrin concentration	620980.	1	0.0540

Source: The autors.

Table 3.
Analysis of Variance for lactic acid bacteria viability

Source	Sum of Squares	Degrees of Freedom	Value-P
A: Inlet temperature	1.99547E7	1	0.0000
B: Percentage of aspiration %	74164.5	1	0.0377
C: Maltodextrin concentration	725496.	1	0.0000

Source: The autors.

Lactic bacteria however, showed a significant difference ($p < 0.05$) for the CFU counts with respect to temperature, the rate of aspiration and concentration of maltodextrin (Table 3). Similarly, analysis of variance for viability carried out between these groups of bacteria showed a significant difference ($p < 0.05$).

According to other studies, the viability of lactic acid bacteria depends greatly on the drying temperatures to be used during this process, due to damage that can occur on the cell membrane, also parameters such as air flow and encapsulant material also affect the survival of these bacteria [12]. During storage of the microcapsules, a continuous decrease in the viability of both groups of microorganisms was observed. There was no significant difference for the microencapsulated bacteria count when stored at 25 ° C compared to 4 °C and viability, both, day 30 and day 60 was obtained. The average count of sporulated bacilli obtained for day 30 was $3.11x10^6$ CFU / g and for day 60 $2.84 x10^6$ CFU/g, while for lactic acid bacteria an average of $2.44 x 10^6$ CFU/g was obtained for day 30 and $1.70 x 10^6$ CFU/g for day 60, with an increase in the count of CFU/g of the encapsulated material stored at 4 ° C with respect to the stored at 25 ° C. Studies reported so and obtained a greater reduction in the number of microorganisms encapsulated stored at 25 °C because at this temperature the metabolic activity is higher and nutrients are consumed quickly [13]. Similarly, other studied have shown that microencapsulation with maltodextrin and thermoprotectant agents like inulin increase the microorganisms survival after drying and during storage over 21 days at room temperature, because is minimized mechanical, oxidative and osmotic stress to which they are subjected [14].

Variables values that optimized microorganism's viability in the microcapsules were: temperature 76 °C, percentage of aspiration of 60 % and maltodextrin concentration of 35 % w/v, with a count of $6.7x10^6$ CFU / g for Bacillus and $5.4X10^6$ CFU / g for Lactobacillus (Fig. 2).

These results are consistent with investigations where the authors used air inlet temperature ranges between 70 and 100 for achieving a microbial survival lactic bacteria of 60 % [15]. We also found a significant difference ($p < 0.05$) for the strains under the effects of temperature, pH and concentration of bile salts with $3.7 x 10^6$ CFU / g regarding to the strains unexposed with $6 x 10^6$ CFU/g (Fig. 3).

In the same way, other studies showed survival in the microcapsules of *Lactobacillus acidophilus* after being subjected to pH conditions of 2.0 and 0.5 % bile salts and 1 % for six hours of incubation [16].

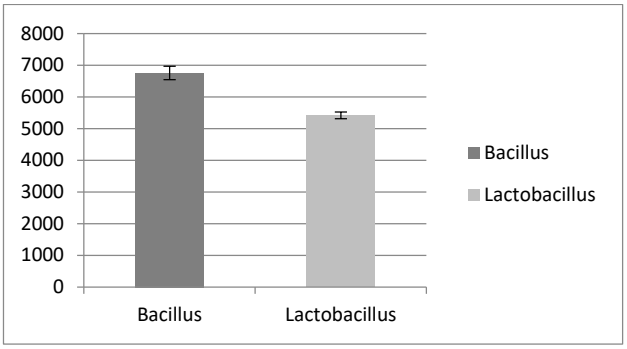


Figure 2. CFU Counts for bacilli and lactic acid bacteria under variables that optimized viability in the microcapsules: 76 °C, percentage of aspiration of 60 % and maltodextrin concentration of 35 %.
Source: The autors.

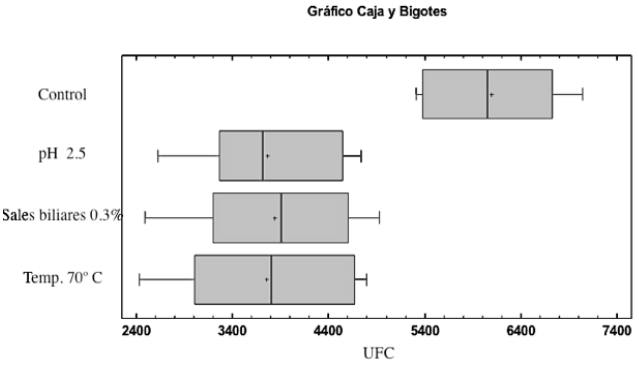


Figure 3. Comparison of the strains subjected to the effects of pH 2.5, 0.3 % bile salts and 70 °C temperature versus control strains.
Source: The autors.

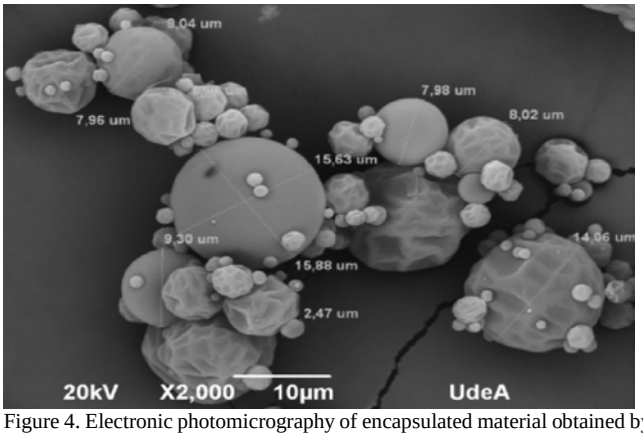


Figure 4. Electronic photomicrography of encapsulated material obtained by spray drying technique.
Source: The autors.

The electronic photomicrography showed circular and irregular particles with sizes ranging from 7 to 15 micrometres on average (Fig. 4). Similar data were obtained in other studies with microencapsulated material consisting of spherical particles with shape and sizes of $5.21 \pm 4,16$ µm on average and typical concavities produced by spray drying due to shrinkage that occurs during the process [14].

4. Conclusions

Microencapsulation under the spray drying technique is an alternative to maintain the integrity of the probiotic strains facilitating their incorporation in various food and pharmaceutical matrices. Also protects the bacteria from temperatures of 70 °C and retain their stability after being subjected to conditions simulating the digestive system such as pH 2.5 and bile salt concentration of 0.3 % w/v, ensuring the minimum concentration of $1x10^6$ CFU / gr, recommended by the Food and Drug Administration (FDA), Food and Agriculture Organization of the United Nations (FAO) and the World Health Organization (WHO).

Acknowledgements

Thanks to Corporación Universitaria Lasallista and The General System of Royalty of the Government of Antioqia for the financing of this project.

References

[1] Das, J.K., Mishra, D., Ray, P., Tripathy, P., Singh, N. and Suar, M., In vitro evaluation of anti-infective activity of a Lactobacillus plantarum strain against Salmonella enterica serovar Enteritidis. Gut Pathogens, [online]. 5(11), pp. 1-11, 2013. Available at: http://www.gutpathogens.com/content/5/1/11

[2] Martínez, M.J. y Muñoz, R.A., Probióticos. Generalidades. En Álvarez, G., Probióticoterapia en Gastroenterología, Madrid, España, Pharma & Health Consulting. 2013, pp. 18-23.

[3] Larsen, A.M., Mohammed, H.H. and Arias, C.R., Characterization of the gut microbiota of three commercially valuable warmwater fish species. Journal of Applied Microbiology, 116(6), pp. 1396-1404, 2014. DOI: 10.1111/jam.12475

[4] Rathore, S., Desai, P.M., Liew, C.V., Chan, L.W. and Heng, P.W.S., Microencapsulation of microbial cells. Journal of Food Engineering, 116, pp. 369-381, 2013.

[5] Khosravi-Zanjani, M.A., Tarzi, B.G., Sharifan, A. and Mohammadi, N., Microencapsulation of probiotics by calcium alginate-gelatinized starch with chitosan coating and evaluation of survival in simulated human gastro-intestinal condition, Iran J. Pharm. Res., 13(3), pp. 843-852, 2014.

[6] Mokarram, R.R., Mortazavi, S.A., Najafi, M.B.H. and Shahidi, F., The influence of multi stage alginate coating on survivability of potential probiotic bacteria in simulated gastric and intestinal juice, Food Research International, 42(8), pp. 1040-1045, 2009. DOI: 10.1016/j.foodres.2009.04.023

[7] Ding, W.K. and Shah, N.P., Effect of various encapsulating materials on the stability of probiotic bacteria, J Food Science, 74(2), 2009. DOI: 10.1111/j.1750-3841.2009.01067.x

[8] Cassanego, E., da Silva,T., Goulart, J., de Oliveira, G. and San´tAnna, E., *Lactobacillus paracasei* isolated from grape sourdough: acid, bile, salt, and heat tolerance after spray drying with skim milk and cheese whey. European Food Research and Technology, 240(5), pp. 977-984, 2015

[9] Ma, X., Wang, X., Cheng, J., Nie, X., Yu, X., Zhao, Y. and Wang, W., Microencapsulation of Bacillus subtilis B99-2 and its biocontrol efficiency against Rhizoctonia solani in tomato, Biological Control, 90, pp. 34-41, 2015. DOI: 10.1016/j.biocontrol.2015.05.013

[10] Yonekura, L., Sun, H., Soukoulis, C. and Fisk, I., Microencapsulation of Lactobacillus acidophilus NCIMB 701748 in matrices containing soluble fibre by spray drying: Technological characterization, storage stability and survival after in vitro digestión. Journal of Functional Foods, 6, pp. 205-214, 2014.

[11] Corcoran, B.M., Ross, R.P., Fitzgerald, G.F. and Stanton, C., Comparative survival of probiotic lactobacilli spray-dried in the presence of prebiotic substances, Journal of Applied Microbiology, 96(5), pp. 1024-1039, 2004. DOI: 10.1111/j.1365-2672.2004.02219.x

[12] Peighambardoust, S.H., Golshan Tafti, A., Hejazi, M.A. and Hesari, J., Application of spray drying for preservation of lactic acid starter cultures: a review. Trends in Food Science & Technology, 2011. DOI: 10.1016/j.tifs.2011.01.009.

[13] Avila-Reyes, S.V., Garcia-Suarez, F.J., Jiménez, M.T., San Martín-Gonzalez, M.F. and Bello-Perez, L.A., Protection of L. rhamnosus by spray-drying using two prebiotics colloids to enhance the viability. Carbohydrate Polymers, 102, pp. 423-430, 2014.

[14] Rodríguez-Barona, S., Montes, L.M., Ramírez, D., Microencapsulation of probiotic by spray drying in the presence of pr ebiotic. Vitae, 19(1), pp. 185-188, 2012.

[15] Ananta, E., Volkert, M. and Knorr, D., Cellular injuries and storage stability of spray-dried Lactobacillus rhamnosus GG. International Dairy Journal, 15(4), pp. 399-409. 2005. DOI: 10.1016/j.idairyj.2004.08.004

[16] Iyer, C. and Kailasapathy, K., Effect of co-encapsulation of probiotics with prebiotics on increasing the viability of encapsulated bacteria under in vitro acidic and bile salt conditions and in yogurt, Journal of Food Science, 70(1), pp. 18-23, 2005.

N. De Araújo-Uribe, received the BSc. Microbiologist and Bioanalist in 2008, at Universidad de Antioquia, Colombia, the Sp. degree in Clinical Microbiology in 2010 at Colegio Mayor de Antioquia, Colombia, and since her last diploma as a Sp. in Clinical Microbiology she have been involved in tropical diseases research (mainly dengue and leishmaniasis), and conducted a three-month internship at Inviragen, Madison, and Wisconsin University, to advance her training in diagnostic test for dengue disease and research methodology (2011-2013). Currently, she is finishing a MSc. with emphasis in Biotechnology and microencapsulation of probiotics at University National of Colombia (2014-2016).
ORCID: 0000-0001-5485-7251.

O. Ruiz-Villadiego, is Assoc. Prof. Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín, Facultad de Ciencias, Escuela de Geociencias. Chemist, MSc.
ORCID: 0000-0003-2555-2867.

O. Montoya-Campuzano, is Biologist, and Food Engineer, MSc. in Science with emphasis in microbiology, research line probiotics, associate professor School of Biosciences, Faculty of Sciences, at the Universidad Nacional de Colombia, Medellin.
ORCID: 0000-0002-4820-0381.

L. Gutierrez-Ramírez, is a Dr. in Biotechnology research line in microorganisms with industrial activity, currently works in the Lasallian University Corporation, where she performs various investigations in the area of probiotics microorganism.
ORCID: 0000-0003-1174-5553.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Production of bioabsorbible nanoparticles of polycaprolactone by using a tubular recirculating system

Gabriel Colmenares-Roldán [ac], Liliana Agudelo-Gómez [a,c], Rodolfo Pinal [b] &, Lina Hoyos- Palacio [a,c]

[a] *Grupo de Investigación en Biología de Sistemas, Escuela de Ciencias de la Salud, Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia, gabriel.colmenares@upb.edu.co*
[b] *Department of Industrial & Physical Pharmacy, College of Pharmacy, Purdue University, Indiana, USA, rpinal@purdue.edu*
[c] *Grupo de Investigación en Nanotecnología y Materiales, Nanomat, Medellín, Colombia, nanomatsas@gmail.com*

Received: January 30th, 2017. Received in revised form: October 13st, 2017. Accepted: December 15th, 2017.

Abstract
Encapsulation and controlled release of substances using polymeric nanoparticles require that these have a high reproducibility, homogeneity, and control over their properties, especially when they are to be used in medical, pharmaceutical or nutritional applications among others. This work shows a high productivity system to synthesize nanoparticles in an easy, fast and controlled way. This study shows the effect of molecular weight of the polymer, the type of surfactant and the relationship between the volumes of the aqueous and the organic phases. It was found that the first two variables have a statistically significant effect on the diameter of the nanoparticles while the relationship between the volume of the aqueous phase and the organic phase does not significantly affect the diameter of the nanoparticles. Additionally, it was found that none of the three variables significantly affects the polydispersity index (PI) of the nanoparticles.

Keywords: nanoparticles; polycaprolactone; nanoprecipitation; encapsulation; delivery

Producción de nanopartículas bioabsorbibles de policaprolactona empleando un sistema de recirculación tubular

Resumen
La encapsulación y la liberación controlada de sustancias que utilizan nanopartículas poliméricas requieren que estas tengan una alta reproducibilidad, homogeneidad y control sobre sus propiedades, especialmente cuando se van a utilizar en aplicaciones médicas, farmacéuticas o nutricionales entre otras. Este trabajo muestra un sistema de alta productividad para sintetizar nanopartículas poliméricas de una forma fácil, rápida y de manera controlada. Este estudio muestra el efecto del peso molecular del polímero, el tipo de tensioactivo y la relación entre los volúmenes de las fases acuosa y orgánica. Se encontró que las dos primeras variables tienen un efecto estadísticamente significativo sobre el diámetro de las nanopartículas, mientras que la relación entre el volumen de la fase acuosa y la fase orgánica no afecta significativamente el diámetro de las nanopartículas. Además, se encontró que ninguna de las tres variables afecta significativamente el índice de polidispersidad de las nanopartículas.

Palabras clave: nanopartículas; policaprolactona; nanoprecipitación; encapsulación; liberación.

1. Introduction

The appropriate design of encapsulation systems and controlled release systems for multiple applications in the pharmaceutical, nutrition, agricultural, textile, paints and personal care, among others, can guarantee the delivery and preservation in the short, medium and long-term of different substances [1,2]. The use of nanoparticles, specifically polymeric nanoparticles in controlled release, is a subject of increasing interest of study [3-5]. Nanoparticles of biodegradable polymers are considered important for drug delivery systems since they are very stable, easily adapt to industrial manufacturing processes over other types of nanoparticles and can be modified at their surfaces to modulate

How to cite: Colmenares-Roldan, G.J., Agudelo-Gomez, L.M., Pinal, R. and Hoyos-Palacio, L.M., Production of bioabsorbible nanoparticles of polycaprolactone by using a tubular recirculating system. DYNA, 85(204), pp. 277-282, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

their properties [1,6-9]. Additionally, polymeric nanoparticles can be engineered to control the rate of release of drugs as well as to control their release at a specific site in the body (9). The modulation of their characteristics is achieved through the properties of the polymer and the chemical composition of the surface of the nanoparticles [9,10].

To date, conventional bulk synthesis methods for the production of polymer nanoparticles have been studied, such as nanoprecipitation, emulsion-diffusion, emulsion-coacervation, double emulsion, polymer coating, supercritical fluids and layer by layer deposition, among others [11-13]. Despite advances in each of these methodologies, the scientific community continues to face a significant challenge, namely, to guarantee the properties and reproducibility of the nanoparticles as well as to scale these systems for use in clinical trials [14,15]. The main concern in conventional bulk synthesis methods is the heterogeneous mixing. This usually takes too much time and requires a lot of energy, which results in an expensive process and produces larger and polydisperse particles [16].

Recent studies, show that microfluidic platform can enhance the controllability and reproducibility of synthesized nanoparticles compared to the conventional bulk synthesis method, because the microfluidic platform can offer precisely controlled reaction environments like rapid mixing of reagents, control of temperature, and precise spatiotemporal manipulation of reactions that are difficult, if not impossible, in larger reactors. However, the productivity of microfluidic systems is lower than that of batch reactors due to low flow rates, which can limit the application of nanoparticles synthesized by microfluidic systems [17-20].

This work introduces a system for synthesizing polymeric nanoparticles with high productivity. The approach can easily control the characteristics of the nanoparticles obtained and does not require specialized equipment. Additionally, the system is quite flexible and can produce small amounts of nanoparticles or it can be readily adjusted to produce large amounts. The system is based on a continuous tubular reactor that initially recirculates the aqueous phase. The organic phase is injected into the aqueous stream. The turbulence of the system in the pipe section leads to the immediate formation of nanoparticles by the phenomenon of nanoprecipitation. The present work evaluated the flow relationship between the two currents, the molecular weight of the polymer and the influence of the surfactants in the system.

2. Materials

Polycaprolactone (PCL) Mw=14,000, 45,000 and 80,000 $g \cdot mol^{-1}$, Acetone and surfactants (Pluronic F-127, Poloxamer 188 and Tween 80) were purchased from Sigma Aldrich

3. Methods

3.1. Recirculating system

The recirculation system is based on a continuous tubular reactor with adjustable length and tubular diameters, depending on the performance requirements. The length of the system can be varied from 30cm to 15m and the internal diameter of the reactor from 0.79mm to 38mm. For this work, the diameter of the reactor used was 3.175mm. The material of the tubular reactor used was VMQ (Vinyl Methyl-Quality) solvent-resistant silicone tubing, used in the organic phase for this study. It is recommended that materials complying with USP Class VI specifications be used. The injection of the organic phase can be modulated by changing the injection needle (18G, 20G, 21G, 22G, 23G, 25G, 27G, 29G, 30G, 31G) and modulating the injection rate, thereby controlling the particle size distribution of the nanoparticles. For this work, the 30G needle was used. Peristaltic pumps were used to control flow rates in this system.

In this system, the flow rates of the organic phase and the recirculation stream can be adjusted, varying the turbulence and the flow ratio between the two, thus controlling the size and polydispersity of the nanoparticles obtained. The recirculation system is described in Fig. 1 and the process of preparation of the nanoparticles step by step in the Fig. 2.

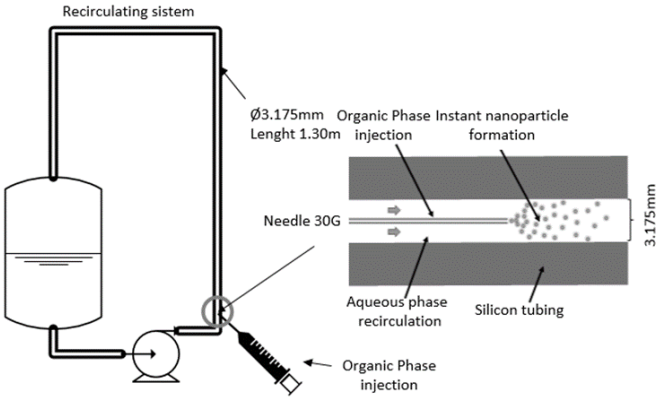


Figure 1. Description of the recirculating system
Source: Authors



Figure 2. The process of preparation of the nanoparticles step by step using the recirculation system.
Source: Authors

3.2. Preparation of the nanoparticles

To prepare the nanoparticles, it was necessary to use two phases. First, the organic phase was prepared to contain the polymer, the solvent and the active compound to encapsulate. Subsequently, the aqueous phase was prepared with deionized water and one or more surfactants. Is possible to use some additives both phases in order to modify the properties of the final nanoparticles. Fig. 2 shows the process used to prepare the polymeric nanoparticles using the recirculating system from the preparation of the precursor solutions, the operation of the recirculation system, the recovery of the nanoparticles and the characterization of the nanoparticles.

3.3. Design of experiments

In previous work carried out by the research group, it was found that the diameter of the polymer nanoparticles strongly depends on the turbulence generated in the recirculation system. For this reason, the flow rate of the recirculation system was set at 162mL·min^{-1} for a Reynolds number of Re=1,249 [21]. The statistical analysis of this work was carried out using the software Statgraphics Centurion XV. For this design of experiments, three variables (molecular weight of the polymer, type of surfactant and ratio between the aqueous phase and the organic phase) were used, each with three level as shown in Fig. 3, for a total of 27 trials. The concentration of polymers in the organic phases used in this work was 4mg·mL^{-1} and the concentration of the surfactants in the aqueous phases was 0.25% w/v according to previous tests [21]. All assays were performed with 20 mL of the organic phase and the volume of the aqueous phase was adjusted according to the ratio of each assay (40mL, 100mL, and 200mL).

3.4. Morphology

Transmission electron microscopy (TEM) with TEM microscope (FEI Tecnai T20) was used to study nanoparticle morphology. A droplet of the sample was mixed with a contrasting agent (1% phosphotungstic acid, pH 7.0 adjusted with 1M KOH solution) was placed on a carbon grid. The grid was pushed onto the surface of the droplet in order to create a film over the grid. The prepared sample was then placed in the TEM after 5 min for analysis.

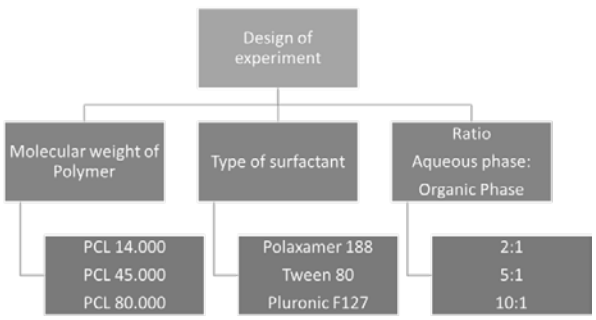


Figure 3. Design of experiment
Source: Authors

3.5. Size and size distribution

The nanoparticle size and polydispersity index (PI) were evaluated by dynamic light scattering (DLS) using a Malvern Zetasizer (Nano ZS, Malvern Instruments). All measurements were carried out at 25 °C using a refractive index of 1.44 and material absorption of 0.001.

3.6. Statistical analysis

Statistical analysis of the particle size was performed applying multifactorial variance (ANOVA) using the program Statgraphics Centurion XV. Differences were considered to be significant at a level of $p < 0.05$.

4. Results

4.1. Statistical analysis of DLS results

With the experimental design employed, it was possible to study the effect of the three design variables on the recirculation system and their effect on the diameter and polydispersity of the nanoparticles. The analysis of variance for the average diameter (Z_{ave}) of the nanoparticles revealed that the molecular weight of the polymer ($p = 0.0247$) and the surfactant type ($p = 0.0012$) have both $p<0.05$. Therefore, these two factors have a statistically significant effect on Z_{ave} with 95% confidence level. Conversely, the relationship between the aqueous phase and the organic phase shows a value ($p = 0.4378$). This result is important since it indicates that in order to control the diameter of the particles, it is not necessary to work with highly diluted systems. Such a situation favors the later recovery of the nanoparticles, reducing the cost and recovery time.

From the analysis of the multiple range test for the average diameter with respect to the polymer, two homogeneous groups were found. There is no statistical difference between the results with PCL of 14,000 g·mol^{-1} and 45,000 g·mol^{-1}, nor between PCL of 45,000 g·mol^{-1} and 80,000 g·mol^{-1}. However, a significant difference was identified between the PCL of 14,000 g·mol^{-1} and 80,000 g·mol^{-1}, as can be seen in Table 1 and Fig. 4.

The results of the multiple range test for the Z_{ave} relative to the surfactant showed two homogeneous groups. There is no statistical difference between the results from Tween 80 and Pluronic F-127, but there is a statistical difference between these two and Poloxamer 188, as can be seen in Table 2 and Fig. 5.

Table 1.
Method: 95% Tukey HSD for Z_{ave} and Polymers.

Polymer	Cases	Means LS	Sigma LS	Homogeneous Groups
PCL 14,000	9	85.9111	8.54749	X
PCL 45,000	9	93.0000	8.54749	XX
PCL 80,000	9	120.178	8.54749	X

Source: Authors

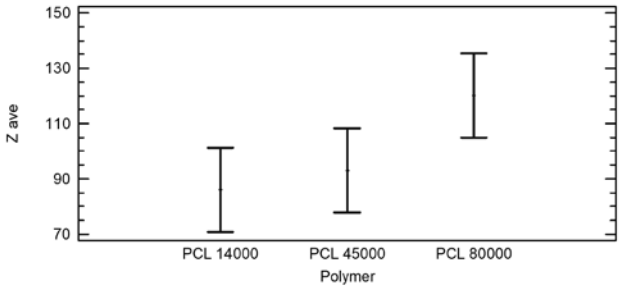


Figure 4. Means and 95% Tukey HSD Intervals for Zave and Polymers.
Source: Authors

Table 2.
Method: 95% Tukey HSD for Z_{ave} and surfactants.

Surfactant	Cases	Means LS	Sigma LS	Homogeneous Groups
Tween 80	9	78,6667	8,54749	X
Pluronic F127	9	91,0667	8,54749	X
Poloxamer 188	9	129,356	8,54749	X

Source: Authors

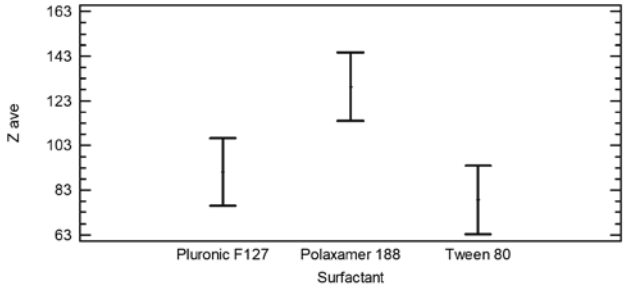


Figure 5. Means and 95% Tukey HSD Intervals for Zave and surfactants.
Source: Authors

Table 3.
Method: 95% Tukey HSD for Z_{ave} and different ratios of the aqueous phase and organic phase.

Ratio Aq ph:Or ph	Cases	Means LS	Sigma LS	Homogeneous Groups
5:1	9	90,6111	8,54749	X
2:1	9	103,233	8,54749	X
10:1	9	105,244	8,54749	X

Source: Authors

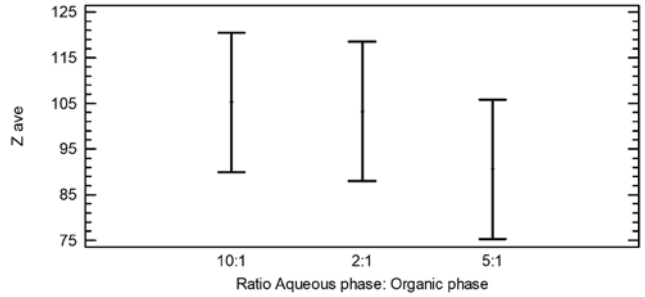


Figure 6. Means and 95% Tukey HSD Intervals for Zave and different ratios of the aqueous phase and organic phase.
Source: Authors

The results of the multiple tests of ranges for the Z_{ave} regarding the relation of the aqueous phase and the organic phase revealed a homogeneous group and no statistical difference was found between the three levels evaluated. This result was expected, due to the statistical non-significance of this variable in the variance test. The results obtained can be seen in Table 3 and in Fig. 6.

From the analysis of variance on polydispersity index (PI), we found that none of the variables (molecular weight of the polymer (p = 0.4208), surfactant type (p = 0.1403), the relationship between aqueous phase and organic phase P = 0.9546) has a significant effect on the PI response variable at the 95% confidence level. On the other hand, the average polydispersity of the system was 0.206 and the standard deviation among the tests for the said variable was 0.036. These results are very significant and reinforce the results from previous studies where the index of polydispersity and diameter of the nanoparticles was found to be dependent on the turbulence in the flow of the system [21]. We should point out that in this work we used a constant flow for all the tests, decreasing the variation of polydispersity index. This further demonstrates the stability and reproducibility of the nanoparticles generated using the recirculation system.

The morphology of the PCL nanoparticles obtained was determined by TEM imaging, with well-defined spherical particles and low polydispersity index (PI <0.250). No agglomeration of the nanoparticles was observed in the analyzed images. Fig. 7. shows three TEM images as well as their corresponding histograms obtained by DLS.

Comparing the obtained results of diameter and polydispersity with other authors that employ different techniques, we find that the obtained results are quite promising. Most of the reports found in the literature talk about nanoparticles and nanocapsules but when the diameter is observed, it is usually higher than 100 nm and the polydispersity index is usually greater than 0.25. For example, Grillo et al obtained particles of polycaprolactone between 232 and 290 nm with a polydispersity close to 0.2 according to the interfacial deposition of pre-formed polymer method. The study development for Prieto and Calvo using the supercritical technic for encapsulation of Vitamin E in polycaprolactone obtain nanoparticles in the nanometer range, with mean size that varied between 8 and 276nm with polydispersity index around 0.26, which increased to 0.40 or 0.54 in some samples [22]. Othman et al. obtain nanoparticles of polycaprolactone using solvent displacement method with mean size that varied between 196 and 464nm and a polydispersity index between 0.128 and 0.389 [23]. Ezhilaras et al reported nanoparticles of polycaprolactone between 183 and 714 nm to encapsulate fish oil using freeze-drying method [24]. On the other hand, the work of Dash and Konkimalla collects different reports around polycaprolactone in which they show particles of 230-280 nm for the release of dexamethasone, particles of 257 nm for the release Etoposideproduced by the method of displacement of solvent and nanoparticles of 250 -300nm to encapsulate Tamoxifen and 180-340 nm to encapsulate Mitomycin-C using the solvent diffusion method [25].

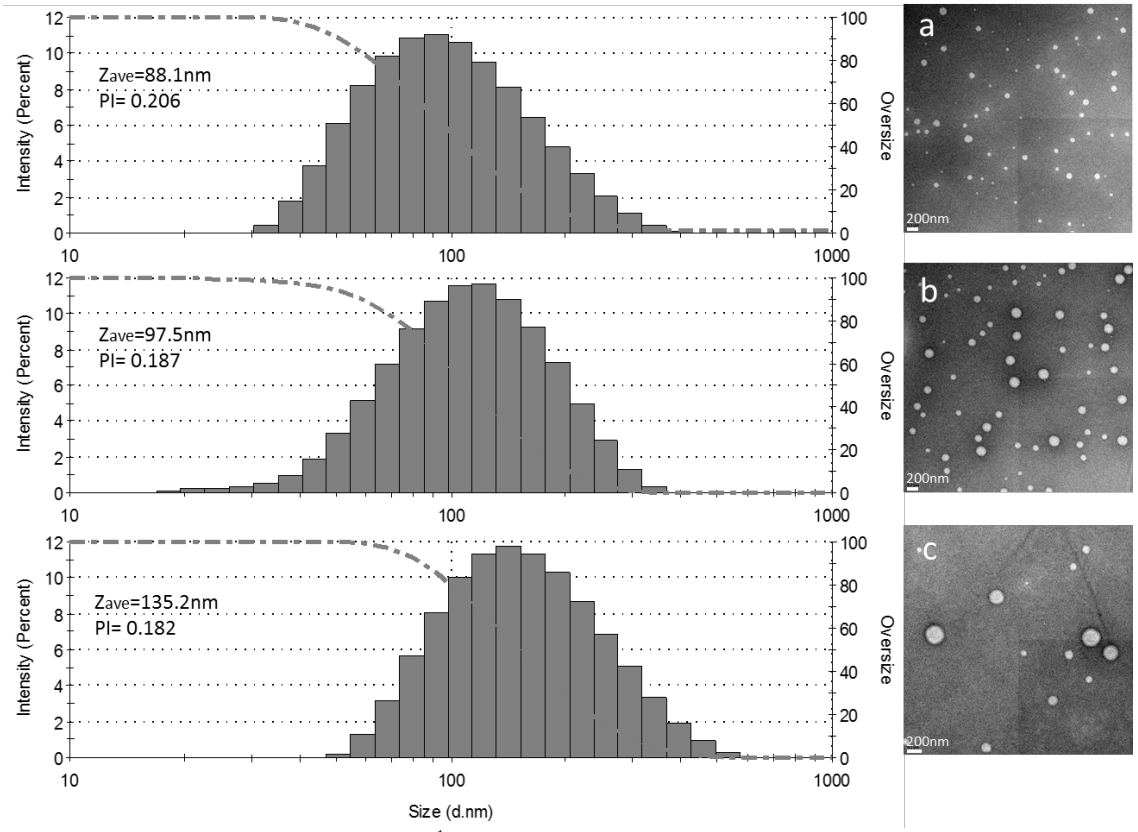


Figure. 7. DLS histogram and TEM image a) PCL 14,000 g·mol^{-1}, Poloxamer 188 and Ratio 5:1 aqueous phase and an organic phase, b) PCL 45,000 g·mol^{-1}, Poloxamer 188 and Ratio 5:1 aqueous phase and organic phase, c) PCL 80,000 g·mol^{-1}, Poloxamer 188 and Ratio 10:1 aqueous phase and organic phase. Source: Authors

5. Conclusion

The experimental design developed for this work showed that the molecular weight of the polymer and the type of surfactant used are relevant factors on the average diameter of the nanoparticles obtained. On the other hand, it was found that the relative proportions between the aqueous phase and the organic phase have no statistical significance on the average diameter of the nanoparticles obtained in the recirculation system developed. This is a very important result, since it demonstrates that it is possible to work with systems for nanoparticle generation that are more concentrated than commonly employed, without significantly affecting the diameter of the nanoparticles obtained. Additionally, the approach from this work allows faster, simpler and economic recovery of the nanoparticles as well as the solvent used.

The control of flow and mixing conditions in the recirculating system led to improved homogeneity of nanoparticles and control of particle size in a reproducible fashion. Continuous synthesis of nanoparticles in this recirculating system tends to have better reproducibility and controllability compared to batch-type bulk synthesis methods.

The results of the present paper show that the proposed recirculation system presents a high potential for production of polymer nanoparticles with good morphological characteristics, particle size distributions in the nano range with a low polydispersity.

Acknowledgment

The authors thank the Universidad Pontificia Bolivariana, to Ruta n and Colciencias for the financial support provided to investigators, and Professor Teresa Carvajal of Purdue University for facilitating the characterizations of the samples by DLS and TEM.

Conflict of Interest: The authors declare no competing financial interest.

References

[1] Shi, J, Votruba, A.R., Farokhzad, O.C. and Langer, R., Nanotechnology in drug delivery and tissue engineering: From discovery to applications. Nano Lett. 10(9), pp. 3223-3230, 2010. DOI: 10.1021/nl102184c.

[2] Rose, J., Auffan, M., Proux, O., Niviere, V. and Bottero, J.Y., Encyclopedia of nanotechnology. In: Bhushan, B, ed., Encyclopedia of nanotechnology. Dordrecht: Springer Netherlands, 2012, pp. 1485-912. DOI: 10.1007/978-90-481-9751-4.

[3] Gyulai, G., Preparation and characterization of cationic Pluronic for surface modification and functionalization of polymeric drug delivery nanoparticles. Express Polym Lett. 10(3), pp. 216-226, 2015. DOI: 10.3144/expresspolymlett.2016.20

[4] Hickey, J.W., Santos, J.L., Williford, J.M. and Mao, H.Q., Control of polymeric nanoparticle size to improve therapeutic delivery. J. Control Release,219, pp. 535-547, 2015. DOI: 10.1016/j.jconrel.2015.10.006.

[5] Sanna, V., Lubinu, G., Madau, P., Pala, N., Nurra, S., Mariani, A. et al., Polymeric nanoparticles encapsulating white tea extract for nutraceutical application. J. Agric. Food Chem., 63(7), pp. 2026-

2032, 2015. DOI: 10.1021/jf505850q.
[6] Villafuerte-Robles, L., Nanotecnología farmacéutica. Razón y Palabra. 68, pp. 1-20, 2009.
[7] Goldberg, M., Langer, R. and Jia, X., Nanostructured materials for applications in drug delivery and tissue engineering. J. Biomater Sci. Polym. Ed. 18(3), pp. 241-268, 2007. DOI: 10.1163/156856207779996931.
[8] Wang, A.Z., Langer, R. and Farokhzad, O.C., Nanoparticle delivery of cancer drugs. Annu Rev. Med., 63(1), pp.185-198, 2012. DOI: 10.1146/annurev-med-040210-162544
[9] Kamaly, N., Yameen, B., Wu, J. and Farokhzad, O.C., Degradable controlled-release polymers and polymeric nanoparticles: Mechanisms of controlling drug release. Chem Rev., 116(4), pp. 2602-2663, 2016. DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00346
[10] Farokhzad, O.C. and Langer, R., Impact of nanotechnology on drug delivery. ACS Nano. 3(1), pp. 16-20, 2009. DOI: 10.1021/nn900002m.
[11] Mora-Huertas, C.E., Fessi, H. and Elaissari, A., Polymer-based nanocapsules for drug delivery. Int. J. Pharm., 385(1–2), pp. 113-142. 2010. DOI: 10.1016/j.ijpharm.2009.10.018.
[12] Anandharamakrishnan, C., Techniques for nanoencapsulation of food ingredients. In: Hartel, R.W., Clark, J.P., Finley, J.W., Rodriguez-Lazaro, D. and Topping, D., eds. New York, NY: Springer New York; 2014. 89 P. (SpringerBriefs in Food, Health, and Nutrition). DOI: 10.1007/978-1-4614-9387-7.
[13] Fakirov, S., ed. Nano-size polymers. Cham: Springer International Publishing, 2016, 399 P. DOI: 10.1007/978-3-319-39715-3.
[14] Lim, J.M., Swami, A., Gilson, L.M., Chopra, S., Choi, S., Wu, J. et al., Ultra-high throughput synthesis of nanoparticles with homogeneous size distribution using a coaxial turbulent jet mixer. ACS Nano. 8(6), pp. 6056-6065, 2014. DOI: 10.1021/nn501371n.
[15] Valencia, P.M., Farokhzad, O.C., Karnik, R. and Langer, R., Microfluidic technologies for accelerating the clinical translation of nanoparticles. Nat. Nanotechnol. 7(10), pp. 623-629, 2012. DOI: 10.1016/j.surg.2006.10.010
[16] Lim, J-M. and Karnik, R., Optimizing the discovery and clinical translation of nanoparticles: could microfluidics hold the key? Nanomedicine (Lond). 9(8), pp. 1113-1116, 2014. DOI: 10.2217/nnm.14.73.
[17] Jahn, A., Reiner, J.E., Vreeland, W.N., DeVoe, D.L., Locascio, L.E. and Gaitan, M., Preparation of nanoparticles by continuous-flow microfluidics. J. Nanoparticle Res., 10(6), pp. 925-934, 2008. DOI: 10.1007/s11051-007-9340-5.
[18] Lim, J., Gilson, L.M., Chopra, S., Farokhzad, O., Karnik, R. and Swami, A., High-throughput synthesis of nanoparticles. WO 2015/061768 Al, 2015, 55 P.
[19] Marre, S. and Jensen, K.F., Synthesis of micro and nanostructures in microfluidic systems. Chem. Soc. Rev., 39(3), pp. 1183-1202, 2010. DOI: 10.1039/b821324k.
[20] Xie, H., She, Z.G., Wang, S., Sharma, G. and Smith, J.W., One-step fabrication of polymeric Janus nanoparticles for drug delivery. Langmuir, 28(9), pp. 4459-4463, 2012. DOI: 10.1021/la2042185.
[21] Colmenares, G., Agudelo, L., Quintero, Y. and Hoyos, L., Synthesis of bioabsorbable polymeric nanoparticles for controlled drug release using a recirculating system. Proceedings of XXV International Materials Research Congress. Cancun, [online]. 2016. Available at: https://www.mrs-mexico.org.mx/imrc2016/app_abstractsbook-authors-abstract.php?name=Colmenares Roldan, Gabriel Jaime
[22] Prieto, C. and Calvo, L., Supercritical fluid extraction of emulsions to nanoencapsulate vitamin E in polycaprolactone. J. Supercrit. Fluids, 119, pp. 274-282, 2017. DOI: 10.1016/j.supflu.2016.10.004.
[23] Othman, R., Vladisavljević, G.T., Shahmohamadi, H., Nagy, Z.K. and Holdich, R.G., Formation of size-tuneable biodegradable polymeric nanoparticles by solvent displacement method using micro-engineered membranes fabricated by laser drilling and electroforming. Chem. Eng. J., [online]. 304, pp. 703-713, 2016. Available at: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1385894716309573
[24] Ezhilarasi, P.N., Karthik, P., Chhanwal, N. and Anandharamakrishnan, C., Nanoencapsulation techniques for food bioactive components: a review. Food Bioprocess Technol., 6(3), pp. 628-647, 2013. DOI: 10.1007/s11947-012-0944-0.
[25] Dash, T.K. and Konkimalla, V.B., Poly-e-caprolactone based formulations for drug delivery and tissue engineering: a review. J. Control Release, 158(1), pp. 15-33, 2012. DOI: 10.1016/j.jconrel.2011.09.064.

G.J. Colmenares-Roldán, received the BSc. Eng in Chemical Engineering in 2009, of the University of Antioquia of Colombia and MSc. degree in Engineering in 2015 from the same University. Actually, is a PhD. student of Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia and Manager of Nanomat. His research interests include drug delivery systems, biomaterials, encapsulation and polymeric nanoparticles.
ORCID: 0000-0001-7577-7162

L.M. Agudelo-Gomez, received the BSc. Eng in Mechanical Eng. in 2010, the Sp. degree in management projects from the same University. Actually, she is MSc. student in Engineering in the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia and Researcher of Nanomat. His research interests include drug delivery systems and biomaterials.
ORCID: 0000-0001-8918-5707

L.M. Hoyos-Palacio, is BSC. In Chemical Eng. in 2005, of the Universidad Nacional de Colombia. PhD. in Engineering; currently holds the position of associate professor in the School of Medicine and Engineering of the Universidad Pontificia Bolivariana, Colombia. She is the author of multiple articles in indexed journals and in international conference papers. She is a project evaluator for Colciencias and magazines, she is director of undergraduate and postgraduate students at the Universidad Pontificia Bolivariana.
ORCID: 0000-0003-2430-8504

R. Pinal, is PhD in Pharmaceutical Sciences and associate professor of Industrial and Physical Pharmacy at Purdue University. Before Purdue, he worked for over 13 years in the pharmaceutical industry in the areas of preformulation, formulation and physical characterization of solids. Current research interests focus on the solubility, solubilization techniques and formulation strategies for improving the bioavailability of poorly soluble drugs.
ORCID: 0000-0002-8983-6239



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Geológica e Ingeniería de Minas y Metalurgia

Oferta de Posgrados

Especialización en Materiales y Procesos
Maestría en Ingeniería - Materiales y Procesos
Maestría en Ingeniería - Recursos Minerales
Doctorado en Ingeniería - Ciencia y Tecnología de Materiales

Mayor información:

E-mail: acgeomin_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 53 68

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Hydrothermal synthesis of hydroxyapatite nanorods using a fruit extract template

Maritza Buitrago-Vásquez [a] & Claudia Patricia Ossa-Orozco [a]

[a] *Grupo de Investigación en Biomateriales, Programa de Bioingeniería, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia. maritza.buitrago89@gmail.com, claudia.ossa@udea.edu.co*

Received: June 20th, 2017. Received in revised form: October 13st, 2017. Accepted: December 15th, 2017.

Abstract
Biocompatible materials development for the replacement of human body parts has been one of the needs of science. Hydroxyapatite is a bioceramic similar to the mineral component present in the human hard tissues and animal body. In this work, hydroxyapatite nanorods were synthesized and characterized using a hydrothermal reaction with templates of fruit extracts in order to control the particles size and morphology. The powders obtained were characterized by scanning electron microscopy, X-ray diffraction, and infrared spectroscopy. Hydroxyapatite nanorods were obtained with diameters between 43.47 and 48.56 nm and lengths between 148.47 and 265.96 nm. For all assays, an adequate HA synthesis was confirmed because the XRD showed the main and secondary peaks. The crystallite size was calculated with the Scherrer equation, obtaining values between 5.99 and 6.96 nm and percentages crystallinity between 55.61 and 65.9%. The synthesized material can be a suitable biomaterial for the manufacture of bone substitutes.

Keywords: hydroxyapatite; bioceramics; nanorods; hydrothermal reaction; fruit extract template.

Síntesis hidrotermal de nanobarras de hidroxiapatita usando plantillas de extractos de fruta

Resumen
El desarrollo de biomateriales para el reemplazo de partes del cuerpo humano ha sido una de las necesidades de la ciencia. La hidroxiapatita es un biocerámico similar al componente mineral de los tejidos duros del cuerpo humano y animal. En la presente investigación, se sintetizaron nanobarras de hidroxiapatita usando síntesis hidrotermal con plantillas de extractos de fruta para controlar el tamaño de partícula. Los polvos obtenidos se caracterizaron por microscopia electrónica de barrido, difracción de rayos x y espectroscopia infrarroja. Las nanobarras obtenidas presentaron diámetros entre 43,47 y 48,56 nm, longitudes entre 148,47 y 265,96 nm. para todos los ensayos los DRX mostraron los picos principales y secundarios de la hidroxiapatita. El tamaño del cristalito fue calculado con la ecuación de Scherrer con valores entre 5,99 y 6,96 nm. y porcentajes de cristalinidad entre 55,61 y 65,9%. En conclusión el material sintetizado puede usarse como biomaterial para aplicaciones óseas.

Palabras clave: hidroxiapatita; biocerámicos, nanobarras; síntesis hidrotermal; plantilla de extracto de fruta.

1. Introduction

The development of new materials to replace parts of the human body, which can be in direct contact with living tissue without causing any damage or condition, has been one of the aims of science during the last couple of decades. Such materials, once proven not to generate adverse reactions with tissues, they have biocompatible characteristic; this properties are related to the biological acceptance by the body‘s tissues and they are dependent upon material/tissue interaction, by mechanical stress and by the reaction of degradation generated during implantation. The main use of biocompatible materials is for medical devices that are in direct contact with the human or animal body, such as: prosthesis, pins, osteosynthesis plates, mounting clips/brackets, stents, pacemakers, breast implants, and

How to cite: Buitrago-Vásquez, M. and Ossa-Orozco, P., Hydrothermal synthesis of hydroxyapatite nanorods using a fruit extract template. DYNA, 85(204), pp. 283-288, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

elements of stiches, among others [1–3].

Hydroxyapatite (HA) is a biocompatible ceramic, and it is a calcium phosphate similar to the mineral component seen in the hard tissues of the human and animal body, such as bones and teeth, which it is one of the most studied bioceramics. Its chemical formula is $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ and stoichiometric ratio Ca/P is equal to 1.67; it can be synthesized by various methods such as solid state reaction, co-precipitation, sol-gel, microemulsion and hydrothermal reaction [1,4].

Current investigations seek to obtain materials that are as similar as possible mechanically and morphologically to the tissues of the human body, specifically the bone, which is constituted mainly by type I collagen fibers and HA nanofibers; morphologically, it has been demonstrated that mineral particles of bone HA are arranged in a matrix embedded in the collagen fibers, due to it, is very important to note the nanoscale [5,6]; having similarity with the before mentioned structure is also important for the enhancement of cell anchorage in biomaterials. The use of templates is one the most flexible, versatile and convenient methods for HA synthesis, since it is very effective for producing particles in nanometric scale, due to the agglomeration degree is minimized and the morphology can be controlled [7]. Recent research has been focused on the use of natural templates, that do not cause environmental effects and minimal changes in the hydroxyapatite chemical composition are generated [7–10].

In this work, HA nanorods were synthesized and characterized using a hydrothermal reaction, which uses high pressures and temperatures above ambient. This method was chosen because it has demonstrated efficacy for obtaining powders in the form of HA fibers with an appropriate crystallinity and stoichiometric Ca/P. Moreover, natural templates of fruit extracts like mango, grape and tamarind were used in order to control the particle size and morphology of the powders obtained.

2. Methodology

2.1. Preparation of fruit extracts

The fruit extracts were obtained from locally grown mango, grapes and ripe tamarind. Initially, the fruits were peeled and the seeds were removed, the pulp was washed by being immersed in distilled water, then weighed and macerated in a relation of 10 (w/v) of distilled water from the initial weight. The macerated product was filtered using distillation funnels and filter paper. Then, the resulting filtrate was dried at 40 °C until any excess water had been removed and the product was triturated by hand in a mortar to a fine powder which was used as a template for the HA synthesis [7].

2.2. Hydroxyapatite nanorods synthesis

The nanorods synthesis HA was conducted using the chemical reaction shown in Equation 1:

$$10Ca(NO_3)_2 4H_2O + 6(NH_4)_2HPO_4 + 8NH_4OH \rightarrow Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2 + 20NH_4NO_3 + 46H_2 \text{ [11]} \quad (1)$$

Calcium nitrate tetrahydrate ($Ca(NO_3)_2$) with an 83% purity and ammonium phosphate dibasic ($(NH_4)_2HPO_4$) were used as precursors of the reaction, both products of Merck. Distilled water solutions $Ca(NO_3)_2$ 0.5 M and $(NH_4)_2HPO_4$ 0.3 M (in order to meet the stoichiometric Ca/P = 1.67) were prepared; subsequently the pH was adjusted between 10 to 11, with the addition of ammonium hydroxide. Each fruit extract was added at a rate of 1 wt% ammonium hydroxide to a 0.5 M solution under constant magnetic stirring at 600 rpm; subsequently, a 0.3 M solution of ammonium phosphate dibasic was added drop by drop to a 0.5 M calcium nitrate tetrahydrate solution, with care being taken to maintain an addition of 0.5 ml per minute. The final solution was left to age 12 hours under magnetic stirring at 350 rpm; after this time, it was placed in a sealed teflon autoclave where the hydrothermal reaction was carried out for 24 hours at 180 °C; the vessel was cooled to room temperature and the solution was washed with distilled water and centrifuged at 3000 rpm until reaching a pH at 7. Finally the solution was dried for 24 hours at 60 °C and the obtained powder was stored for further characterization [12–15]. The control sample was called HAC, the sample containing mango extract named HAM, the tamarind sample HAT, and the grape HAG.

2.3. Characterization of hydroxyapatite nanorods

The morphology of the obtained powder was evaluated by Scanning Electron Microscopy SEM, on a microscope JOEL-JSM 6490LV. The information about the material crystallinity and its phases present was analyzed by X-ray diffraction (XRD) using a Rigaku X-ray diffractometer equipped with a source of Cu at an angle of 2θ between 0 ° and 60 ° [16,17]. The crystallite size (D) was obtained by Scherrer-Equation (Equation 2), the percentage crystallinity ($\%X_c$) of the HA powders was calculated using Equation 3. With the objective to provide a quantitative description of the HA nanorods morphology evolution with different fruit template in hydrothermal process, a large number of measurements about length and diameter of HA nanorods were performed directly from the micrographs using the software analysis Image-Processing [7,18,19].

$$D = \frac{0{,}9\lambda}{\beta cos\theta} \quad (2)$$

Where λ=1.5418 Å is the X-ray wavelength of the Cu radiation, β is the full width at half maximum of the major XDR peak (FWHM) in the plane (2 1 1) and θ is the diffraction angle in the maximum peak [7,18,19].

$$\%X_c = \left(1 - \frac{\upsilon_{(112/300)}}{I_{300}}\right) \times 100\% \quad (3)$$

Where $\upsilon_{(112/300)}$ is the intensity of the hollow between diffraction peaks of HA in the planes (1 1 2) and (3 0 0) and I_{300} is the intensity of the peak of HA in the plane (3 0 0) [19].

The chemical composition of HA samples were analyzed by an infrared Fourier transform spectroscopy, using a computer model Perkin Elmer Spectrum One DTGS detector.

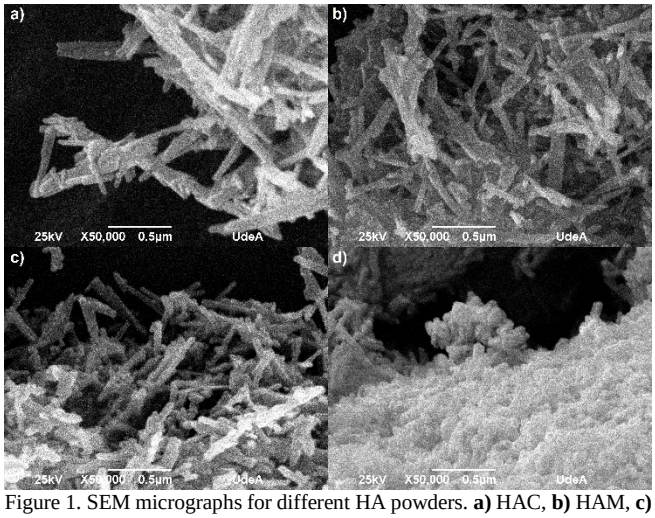


Figure 1. SEM micrographs for different HA powders. **a)** HAC, **b)** HAM, **c)** HAT and **d)** HAG
Source: The authors.

Table 1.
Average dimensions, crystallite size (D) and percentage crystallinity (%X_c)

Sample	Average Length (nm)	Average Diameter (nm)	$D_{(2\,1\,1)}$ (nm)	%X_c
HAC	254.82	43.47	6.26	57.81
HAM	265.96	45.43	5.38	60.27
HAT	222.50	48.56	5.37	55.60
HAG	148.47	43.56	5.37	65.89

Source: The authors.

3. Results and discussion

Figure 1 shows the SEM micrographs for each of the evaluated protocols. In all cases it has been seen that the powders formed agglomerates with elongated particles, common characteristic in nanomaterials due the energy generated between the particles and the superficial area, which increase with the decrease of the particle size [20,21]. The fibers are found on a nanometric scale, the average measures are register in table 1.

In the SEM images observed for all protocols, the morphology are nanorods in the nanometric scale. For HAC (Figure 1a) the obtained fibers had a diameter ranging between 28 and 60 nm and ranging length between 160 and 360 nm; for the HAM (Figure 1b) the fibers had diameters between 28 and 52 nm and lengths between 145 and 400 nm; for HAT (Figure 1c) the obtained fiber diameters ranged between 32 and 65 nm and lengths ranged between 155 and 350 nm; and for HAG (Figure 1d) fiber diameters were between 28 and 55 nm and length were between 100 and 260 nm. In fact, the fibers appear not only embedded in the agglomerate, but also the fiber ends cannot be distinguished clearly. However, while observing the SEM image, it is clear the nanorods that were synthesized with grape extract are smaller and shorter. In the table 1, it has been shown than the variation HA nanorods length is much more substantial than the diameter change with addition of fruit template. The grapes fruit addition reduced the rod length to 41.7% respect HAC, however the HA nanorods diameter remained stable. It is possible than the fruits particles inhibit the rod, so these were shorter than the control sample.

The HA particles obtained with the fibrous fruits like mango and tamarind have a length value similar to the control HA particles, the amount fiber is 1.6 g per 100 g in the mango and 5.1 g per 100 g in the tamarind, the grape have minor fiber content in the nutritional composition 0.9 g in 100 g. The grape extract, using as template, had a finer appearance, possibly the fiber content of other fruits affected the particle size in each extract obtained in the final milling. It is evident than mango fibers in the fruit have a greater length than tamarind; the mango water content is 83.46% and 31.40% to tamarind, that makes the fibers proportion lower in a specific volume. When elongated particles are milled, it is possible than they begin to slide over each other, this fact can inhibit the milled samples. It is possible than the different characteristics of each fruit extract affect the HA particle obtained, due to these materials can act as inhibitors of the particles growth during the hydrothermal synthesis [22–24].

Given the above data, it can be said that the hydrothermal process yielded the results expected, as fibers were obtained in the nanometers order with or without fruit extracts as template or mold, and this is mainly because during the hydrothermal treatment high pressures and temperatures above 1 atm and 100 °C were employed. The system is closed, inside the dissolution and recrystallization of the material occurs, promoting the formation and stabilization of crystalline phases in the elongated rods form. Nonetheless, it should be clarified that, with regard to crystal growth during hydrothermal treatment and the physico-chemical aspects that occurred during the process, there is still a need to establish complete clarity from a scientific point of view simply because the phenomena that occurred has not been fully defined. Despite this, it can be assumed that the steam generated within the container raises the pressure to the point that this pushes the particles of the reaction against the bottom and edges of the container, and somehow they undergo a type of crushing that gives them an elongated morphology [25,26].

The particles obtained increased in length but not in diameter, which is consistent with Cao et al (2010) who affirm that the formation of nanorods is due to growth of particles in one direction and nanorods may be considered as quasi-one dimensional nanoparticles. These researchers used a polymer for HA synthesis, the polymer was constituted as a growth template, this fact is similar to obtained in this research due to fruit extracts served as a template generating particles in scale nanometric [27].

The surface energy is a parameter than governs the obtained particle shape such as spherical, rod or flat. This energy must be minimal to provide the possibility of having crystals in equilibrium with the surroundings. In natural systems, growth of crystals has typically been thought to occur by atom-by atom addition to an inorganic or organic template or by dissolution of unstable phases (small particles or metastable polymorphs) and reprecipitation of the more stable phase [28]. In the nanoparticles hydrothermal synthesis is necessary to introduce energy to break bonds, to create divisions and generate new surfaces; the driving force existing in the materials during synthesis minimizes the

surface area. Smaller the surface to the volume ratio of the particles, lower the energy state of the material. In order to minimize the surface energy, the directed bonds in isotropic lattices increase crystallization, for example, in rods as it happened in this research [27].

The diffractograms of the nanorods of HA that were obtained by hydrothermal synthesis using fruit extracts as templates (Figure 2) were compared with that reported for the HA pattern (JCPDS 72-1243) [19,29] (Figure 3), in order to determine the correspondence with the main and secondary peaks that characterize the material. For the four powders obtained, that is, HAC, HAM, HAT, and HAG the major peaks are observed at about 2θ = 31.7 °, 32.2 ° and 32.9 °. While the existence of the secondary peaks are shown at 2θ = 25.9 °, 34 °, 39.7 °, 46.7 ° and 49.4 ° and the other less intense peaks at 2θ = 28.88 ° and 53.2 °, thus demonstrating that HA was obtained for the four protocols. Notwithstanding, the HAC, HAM and HAT diffractograms have major peaks of dicalcium phosphate anhydrous at about 2θ = 26.61 ° and 30.18 °, and depending on the size of the peaks, it can be estimated that the quantity of this phase is less than 5%. This result corresponds to that specified by ASTM F1185 Standard - 03 (2014), where the chemical standard composition of the hydroxyapatite used in surgical implants is set, indicating that the minimum amount of hydroxyapatite present in these materials must be reported, it is demonstrated and it is natural to be the other 95%. Corroborating this, in some peaks corresponds to other calcium phosphates peaks, as in the case of commercial HA used by Ossa et al (2006) and Gonzalez (2014), in which peaks of tricalcium phosphate appear in their diffractograms [3,30,31].

Table 1 shows the crystallite size calculated with equation 1 in the XRD peak width at half maximum, and has not varied a lot with addition of fruit extracts, however the control sample have a larger crystallite size with respect to other samples, proving that the addition of fruit extract like mango, tamarind and grape decreases in the same proportion the crystallite size.

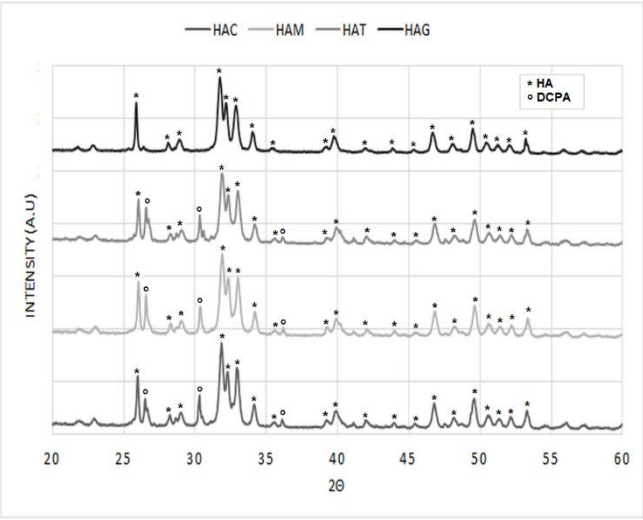


Figure 2. Diffractograms HA powders obtained by hydrothermal synthesis using extract fruits.
Source: The authors.

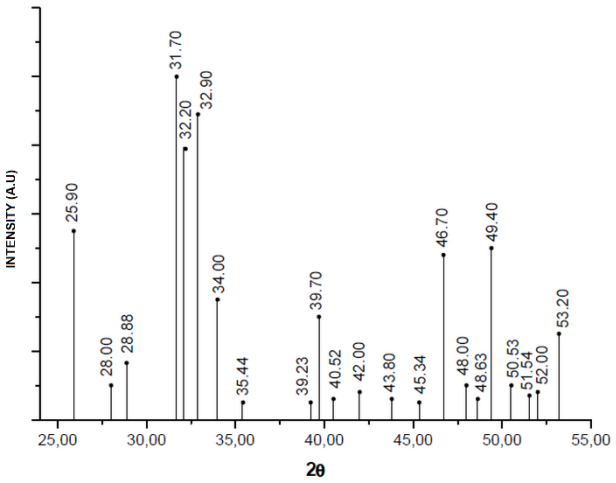


Figure 3. Diffractogram pattern of HA
Source: [29]

The hydroxyapatite percentage crystallinity obtained is presented in Table 1. The hydroxyapatite synthesized with grapes as template has the highest crystallinity percentage with 65.90%. The ASTM F1185-03 (2014) does not provide a guideline about the material crystallinity; on the other hand, some authors suggest that amorphous materials or with low crystallinity are more absorbable, because the physicochemical characteristics such crystallinity and molar ratio Ca/P affect its solubility, protein adsorption and osteoblasts attachment; these may be compromising the cellular material response [30,32,33].

Yang et al. (2015) evaluated the effect of absorption albumin and osteoblasts attachment on hydroxyapatite with different degrees of crystallinity. They found no significant differences between the initial albumin absorption and osteoblasts attachment in HA with crystallinity between 0 and 70%, although for HA with 100% crystallinity, the absorption percentage was reduced. Possibly, the ionic changes interactions that are generated in HA with different crystallinity affect the amount of chemical interactions among calcium ions, due to the fact the ions are readily available to bind electrostatically to proteins. The crystallinity of the synthesized HA in this research was less than 70%, which gives an indication that the manufactured material has optimal characteristics to bind with proteins and precursor cells for new bone formation [34].

Zhou et al (2012) used grape seed polyphenol was used as template for HA synthesis of nanoparticles. They obtained nanoparticles with a diameter of 20-50 nm and poor crystallinity; after thermal treatment at 500 °C for 2 hours the crystallinity was increased. On the other hand, Klinkaewnarong et al (2010) used *aloe vera* solution in HA synthesis, they obtained the powder particle sizes among 40–171 nm, the material should has been treated thermally at 500 °C to improve the crystallinity and eliminate the Monetite formed with the precursor materials [8,9]. The hydrothermal synthesis method evaluated in this research, provides a possibility to obtain crystalline phases without thermal treatment after synthesis.

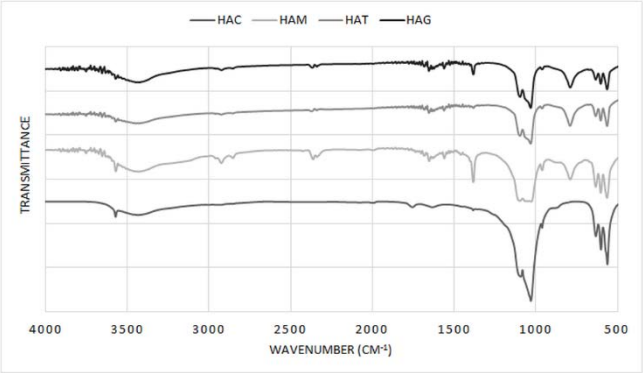


Figure 4. Infrared spectrum of HA powders obtained by hydrothermal synthesis using extract fruits.
Source: The authors.

In Figure 4, the infrared spectrum for HA obtained in the laboratory by means of hydrothermal synthesis is shown for all protocols. A typical HA shows bands at 3578, 3571, 3448 and 633 cm^{-1} characteristic of OH groups; bands at 472, 561, 574, 601, 692, 962, ≈1087 1032, 1094, 1040, 1032 cm^{-1} corresponding to bands groups $(PO_4)_3$; and bands at 870, 1416, 1465, 1480 and 1638 cm^{-1} if the sample contains groups CO_3 [35]. This figure for all protocols shows a suitable composition for HA as bands are observed between 3570.24 and 3572.51, 3427.51 and 3436.04 and 633.68 and 634.58 cm^{-1} corresponding to the OH group, bands approximately in 472.87, between 562.94 and 565.14, 602.06 and 603.72, 962.48 and 962.57, 120.06 and 1031.92 and 1091.5 and 1097.5 cm^{-1} corresponding to $(PO_4)_3$ groups and bands between 1382.96 and 1384.32 and 1634.66 and 1653 cm^{-1} corresponding to CO_3 groups. Also in the spectrums exist bands approximately in 1045 cm^{-1} corresponding to HA as reported in other studies that synthesized HA with natural agents [7,36–39]. However for the protocols with addition of fruit extract, shows bands unidentified between 2331.94 and 2926.01 cm^{-1} probably corresponding to residues of the fruit extracts used as a natural template for the formation of nanorods, but being a residue of organic and natural type does not affect the final composition of the HA, which is reflected in the XRD where observed a correct stabilization of all phases of this calcium phosphate.

The HA synthesized using the hydrothermal method, regardless of whether it contains or does not contain fruit extracts in its composition, could be an adequate calcium phosphate for use in the manufacture of bone substitutes. This is mainly because the synthesized HA is similar to the mineral component of bones and could be obtained in different-sized nanorods by hydrothermal synthesis, thus allowing a greater similarity to the crystals in the bone [40–42]. Nanosize is considered already minor to 100 nm, particles with this size are used like vector for delivering drugs, growth factors and genetic material. Importantly the size in nanoscale is decisive in the application because the smaller particles can be removed by the kidney, and the larger ones are easier to phagocytose. Recent studies have shown that sizes between 10 and 100 nm are widely distributed in body systems, have shown great impact in terms of cell compatibility, so it is important to further investigate similar biocompatible materials having the compositions and human body sizes that are within the range of nanoscale [43].

3. Conclusion

Hydroxyapatite nanorods were synthesized using hydrothermal treatment at 180 °C for 24 hours. Adding grape fruit extracts during the synthesis reaction showed that it has a positive effect in the reduction length of particles, the reduction percentage was 41.7 %. It is possible that grapes fiber and water content with relation to mango and tamarind fruit affected the template morphology, this can be done by allowing the length reduction in the nanorods. This is beneficial since it has been shown in some studies that the particle size promotes adequate contact surface to ensure good cell adhesion, especially for different types of bone cells.

Adding the fruit extracts during synthesis hydrothermal of hydroxyapatite nanorods did not affect the phases obtained in the synthesized material, because with or without fruit extract the hydroxyapatite was obtained as the principal phase. Furthermore the crystallinity percentage for all extract fruit evaluated is suitable for possible applications in bone tissue regeneration. On the other hand, the use of fruit extracts is a natural option inside in a synthetic method without affecting the final product. The fruits used are easy to get in Colombia in low cost, in addition, the quantity of fruits extracts used in the hydroxyapatite synthesis process are not much.

Acknowledges

Thanks to the Committee for Development Research, University of Antioquia -CODI- for their funding of the project. To Dayana Meza Terraza Science Laboratory of Surfaces at the University of Antioquia for her help in obtaining images by scanning electron microscopy and, last but not least, to Lina Paola Higuita for facilitating hydrothermal synthesis equipment.

References

[1] Amor-Márquez, A., Los materiales y su biocompatibilidad: Hidroxiapatita, Mater. Av., 3, pp. 44-48, 2005.
[2] Park, J. and Lakes, R.S. Biomaterials: an introduction, Thirt, Springer, 2007.
[3] González-Ocampo, J., Evaluación de las propiedades de cuerpos porosos de hidroxiapatita, obtenidos por gel-casting y su infiltración en espumas poliméricas. Tesis de Maestría, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia, 2013.
[4] Padmanabhan, S.K., Balakrishnan, A., Chu, M.-C., Lee, Y.J., Kim, T.N. and Cho, S.-J., Sol–gel synthesis and characterization of hydroxyapatite nanorods, Particuology., 7, pp. 466-470, 2009. DOI: 10.1016/j.partic.2009.06.008.
[5] Sadat-Shojai, M., Khorasani, M.-T., Dinpanah-Khoshdargi, E. and Jamshidi, A., Synthesis methods for nanosized hydroxyapatite with diverse structures., Acta Biomater., 9, pp. 7591-7621, 2013. DOI: 10.1016/j.actbio.2013.04.012.
[6] Jiang, D. and Zhang, J., Calcium phosphate with well controlled nanostructure for tissue engineering, Curr. Appl. Phys., 9, pp. 252-256, 2009. DOI: 10.1016/j.cap.2009.01.029.
[7] Gopi, D., Bhuvaneshwari, N., Indira, J., Kanimozhi, K. and Kavitha, L., A novel green template assisted synthesis of hydroxyapatite nanorods and their spectral characterization., Spectrochim. Acta. A.

Mol. Biomol. Spectrosc., 107, pp. 196-202, 2013. DOI: 10.1016/j.saa.2013.01.052.
[8] Zhou, R., Si, S. and Zhang, Q., Water-dispersible hydroxyapatite nanoparticles synthesized in aqueous solution containing grape seed extract, Appl. Surf. Sci., 258, pp. 3578-3583, 2012. DOI: 10.1016/j.apsusc.2011.11.119.
[9] Klinkaewnarong, J., Swatsitang, E., Masingboon, C., Seraphin, S. and Maensiri, S., Synthesis and characterization of nanocrystalline HAp powders prepared by using aloe vera plant extracted solution, Curr. Appl. Phys., 10, pp. 521-525, 2010. DOI: 10.1016/j.cap.2009.07.014.
[10] Zhu, A., Lu, Y., Si, Y. and Dai, S., Frabicating hydroxyapatite nanorods using a biomacromolecule template, Appl. Surf. Sci., 257, pp. 3174-3179, 2011. DOI: 10.1016/j.apsusc.2010.10.135.
[11] Sequeda, L.G., Milciades, J., Gutiérrez, S.J., Perdomo, S.J. y Gómez, O.L., Obtención de hidroxiapatita sintética por tres métodos diferentes y su caracterización para ser utilizada como sustituto óseo, Rev. Colomb. Ciencias Químico-Farmacéuticas, [en línea]. 2012. Disponible en: http://www.revistas.unal.edu.co/index.php/rccquifa/article/view/44865/46257.
[12] Zhang, X. and Vecchio, K.S., Hydrothermal synthesis of hydroxyapatite rods, J. Cryst. Growth. 308, pp. 133-140, 2007. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2007.07.059.
[13] Liu, Y., Wang, W. and Zhan, Y., A simple route to hydroxyapatite nanofibers, ELSEVIER. 56, pp. 496-501, 2002.
[14] Kamitakahara, M., Takahashi, H. and Ioku, K., Tubular hydroxyapatite formation through a hydrothermal process from α-tricalcium phosphate with anatase, J. Mater. Sci., 47, pp. 4194-4199, 2012. DOI: 10.1007/s10853-012-6274-9.
[15] Kothapalli, C.R., Wei, M., Legeros, R.Z. and Shaw, M.T., Influence of temperature and aging time on HA synthesized by the hydrothermal method., J. Mater. Sci. Mater. Med., 16, pp. 441-446, 2005. DOI: 10.1007/s10856-005-6984-5.
[16] Plevin, M., Encyclopedia of Biophysics, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2013. DOI: 10.1007/978-3-642-16712-6.
[17] Fahlman, B., Materials Chemistry, Springer, Michigan, USA, 2007.
[18] Patterson, A.L., The scherrer formula for X-ray particle size determination, Phys. Rev., 56, pp. 978-982, 1939. DOI: 10.1103/PhysRev.56.978.
[19] Wijesinghe, W.P.S.L., Mantilaka, M.M.M.G.P.G., Premalal, E.V.a., Herath, H.M.T.U., Mahalingam, S., Edirisinghe, M., et al., Facile synthesis of both needle-like and spherical hydroxyapatite nanoparticles: Effect of synthetic temperature and calcination on morphology, crystallite size and crystallinity, Mater. Sci. Eng. C., 42, pp. 83-90, 2014. DOI: 10.1016/j.msec.2014.05.032.
[20] Wan, A.C.A. and Ying, J.Y., Nanomaterials for in situ cell delivery and tissue regeneration, Adv. Drug Deliv. Rev., 62, pp. 731-740, 2010. DOI: 10.1016/j.addr.2010.02.002.
[21] Giersig, M., Nanomaterials for application in medicine and biology, 2007. DOI: 10.1007/978-1-4020-6829-4.
[22] Tamarinds, USDA Natl. Nutr. Database Stand. Ref. [online]. 2015. Available at: http://ndb.nal.usda.gov/ndb/foods/show/2436?manu=&fgcd=);
[23] Mangos, USDA Natl. Nutr. Database Stand. Ref. [online]. 2015. Available at: http://ndb.nal.usda.gov/ndb/foods/show/2318?fgcd=&manu=&lfacet=&format=&count=&max=35&offset=&sort=&qlookup=Mango.
[24] Grapes american type (slip skin), USDA Natl. Nutr. Database Stand. Ref. [online]. 2015. Available at: http://ndb.nal.usda.gov/ndb/foods/show/2287?fgcd=&manu=&lfacet=&format=&count=&max=35&offset=&sort=&qlookup=grape.
[25] Byrappa, K. and Masahiro, Y., Handbook of hydrothermal technology: A Technology for Crystal Growth and Materials Processing, Noyes, New York, 2001.
[26] Kopp-Alves, A., Bergmann, C.P. and Berutti, F.A., Novel synthesis and characterization of nanostructured materials, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2013. DOI: 10.1007/978-3-642-41275-2.
[27] Cao, H., Zhang, L., Zheng, H. and Wang, Z., Hydroxyapatite nanocrystals for biomedical applications, J. Phys. Chem. C., 114, pp. 18352-18357. 2010. DOI: 10.1021/jp106078b.
[28] Banfield, J.F., Welch, S., Zhang, H., Ebert, T.T. and Penn, R.L., Aggregation-based crystal growth and microstructure development in natural iron oxyhydroxide biomineralization products., Science, 289, pp. 751-754, 2000. DOI: 10.1126/science.289.5480.751.
[29] Medoza-Ruiz, S.C. y Delgado-Mejía, E., Propuesta y evaluación de una síntesis rápida y selectiva de algunos fosfatos de calcio por el método ácido-base, Tesis de grado, Universidad Nacional de Colombia, 2005.
[30] ASTM INTERNATIONAL, Standard Specification for Composition of Hydroxylapatite for Surgical Implants, 2014. doi: 10.1520/F1185-03R14.2.
[31] Ossa, C.P.O., Rogero, S.O. and Tschiptschin, a.P., Cytotoxicity study of plasma-sprayed hydroxyapatite coating on high nitrogen austenitic stainless steels., J. Mater. Sci. Mater. Med., 17, pp. 1095-1100, 2006. DOI: 10.1007/s10856-006-0536-5.
[32] Overgaard, S., Bromose, U., Lind, M., Bünger, C. and Søballe, K., The influence of crystallinity of the hydroxyapatite coating on the fixation of implants. Mechanical and histomorphometric results., J. Bone Joint Surg. Br., 81, pp. 725-731, 1999. DOI: 10.1302/0301-620X.81B4.9282.
[33] Lee, W.H., Zavgorodniy, A.V., Loo, C.Y. and Rohanizadeh, R., Synthesis and characterization of hydroxyapatite with different crystallinity: Effects on protein adsorption and release, J. Biomed. Mater. Res.-Part A., 100 A, pp. 1539-1549, 2012. DOI: 10.1002/jbm.a.34093.
[34] Yang, Y., Denninson, D. and Ong, J., Protein adsorption and osteoblast precursor cell attachment to hydroxyapatite of different crystallinities, Oral Maxillofac Implant., 20, pp. 187-192, 2005.
[35] Koutsopoulos, S., Synthesis and characterization of hydroxyapatite crystals: a review study on the analytical methods., J. Biomed. Mater. Res., 62, pp. 600-612, 2002. DOI: 10.1002/jbm.10280.
[36] Gopi, D., Bhuvaneshwari, N., Indira, J. and Kavitha, L., Synthesis and spectroscopic investigations of hydroxyapatite using a green chelating agent as template, Spectrochim. Acta - Part A Mol. Biomol. Spectrosc., 104, pp. 292-299, 2013. DOI: 10.1016/j.saa.2012.11.092.
[37] Gopi, D., Bhuvaneshwari, N., Kavitha, L. and Ramya, S., Novel malic acid mediated green route for the synthesis of hydroxyapatite particles and their spectral characterization, Ceram. Int., 41, pp. 3116-3127, 2015. DOI: 10.1016/j.ceramint.2014.10.156.
[38] Gopi, D., Kanimozhi, K., Bhuvaneshwari, N., Indira, J. and Kavitha, L., Novel banana peel pectin mediated green route for the synthesis of hydroxyapatite nanoparticles and their spectral characterization, Spectrochim. Acta - Part A Mol. Biomol. Spectrosc., 118, pp. 589-597, 2014. DOI: 10.1016/j.saa.2013.09.034.
[39] Gopi, D., Bhalaji, P.R., Prakash, V.C.A., Ramasamy, A.K., Kavitha, L. and Ferreira, J.M.F., An effective and facile synthesis of hydroxyapatite powders using oxalic acid-ethylene glycol mixture, Curr. Appl. Phys., 11, pp. 590-593, 2011. DOI: 10.1016/j.cap.2010.10.003.
[40] Okada, S., Ito, H., Nagai, A., Komotori, J. and Imai, H., Adhesion of osteoblast-like cells on nanostructured hydroxyapatite., Acta Biomater., 6, pp. 591-597, 2010. DOI: 10.1016/j.actbio.2009.07.037.
[41] Webster, T.J., Ergun, C., Doremus, R.H., Siegel, R.W. and Bizios, R., Enhanced functions of osteoblasts on nanophase ceramics., Biomaterials, [online]. 21, pp. 1803-1810, 2000. Available at: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/10905463.
[42] Webster, T.J., Ergun, C., Doremus, R.H., Siegel, R.W. and Bizios, R., Enhanced osteoclast-like cell functions on nanophase ceramics., Biomaterials, [online]. 22, pp. 1327-1333, 2001. Available at: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/11336305.
[43] Walmsley, G.G., McArdle, A., Tevlin, R., Momeni, A., Atashroo, D., Hu, M.S., et al., Nanotechnology in bone tissue engineering, Nanomedicine Nanotechnology, Biol. Med., 1(5), pp. 1253-1263, 2015. DOI: 10.1016/j.nano.2015.02.013.

M. Buitrago-Vásquez, received the BSc. Bioengineer in 2014 and the MSc Materials Engineering in 2017, both from Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia, she is researcher of Grupo de Investigación en Biomateriales. Her research interests include biomaterials, composite biomaterials, calcium phosphates and biopolymers.
ORCID: 0000-0002-7616-0532.

C.P Ossa-Orozco, received the BSc. Eng in Mining and Metallurgy Engineering in 2000, from Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia and the PhD degree in Materials and Metallurgy in 2005, from Universidade de São Paulo, São Paulo, Brazil. Actually is associate professor of Universidad de Antioquia and researcher of Grupo de Investigación en Biomateriales. Her research interests include synthesis and characterization of biomaterials, scaffolds, calcium phosphates and natural polymers.
ORCID: 0000-0002-0223-4113

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Evaluation of management models of rural projects of drinking water and basic sanitation implemented in the llanos de Colombia

Álvaro Luis Rivera-Contreras

CEPES (Centro Panamericano de Estudios Superiores), Morelia, México. alvaroluisrivera@hotmail.com

Received: September 06th, 2017. Received in revised form: December 13th, 2017. Accepted: January 15th, 2018.

Abstract
This research evaluated the management models of rural drinking water and basic sanitation projects. 200 projects were collected from the governorate, mayor and regional environmental authority. 42 projects formulated and executed were selected, they were used as input to carry out an integral qualitative analysis of 14 variables. According to the results, they did not take into account variables such as technological changes, sectorization and type of communities. Variables such as geographic information systems, socioeconomic evaluation, citizen participation and coverage were partially taken into account and variables that were taken into account were technological appropriation, technical regulation of the potable water sector and basic sanitation 2000, governability. The projects evaluated tend to partially comply with the minimum requirements established by law and do not comply with parameters that, although not mandatory, are important to meet the changing needs of communities in basic sanitation and potable water.

Keywords: project management; projects; drinking water; basic sanitation; rural area.

Evaluación de los modelos de gestión de proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico implementados en los llanos de Colombia

Resumen
Esta investigación evaluó los modelos de gestión de proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico. Se recolectaron 200 proyectos provenientes de la gobernación, alcaldía y autoridad ambiental regional. Se seleccionaron 42 proyectos formulados y ejecutados, se utilizaron como insumo para llevar a cabo un análisis cualitativo integral de 14 variables. De acuerdo con los resultados no tuvieron en cuenta variables como cambios tecnológicos, sectorización y tipo de comunidades. Variables como sistemas de información geográfico, evaluación socioeconómica, participación ciudadana y cobertura fueron tenidas en cuenta parcialmente y variables que se tuvieron en cuenta fueron apropiación tecnológica, reglamento técnico del sector de agua potable y saneamiento básico 2000, gobernabilidad. Los proyectos evaluados tienden a cumplir parcialmente con los requisitos mínimos establecidos por la ley y no cumplen con parámetros que, aunque no son obligatorios, si son importantes para satisfacer las necesidades cambiantes de las comunidades en saneamiento básico y agua potable.

*Palabras clave***:** gestión de proyectos; proyectos, agua potable, saneamiento básico, zona rural.

1. Introducción

El Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo [14] concluye que la crisis por el agua y el saneamiento son una amenaza directa e inmediata para las personas de escasos recursos en los países en desarrollo, por lo tanto proponen que se deben proporcionar proyectos de saneamiento básico y agua potable (SB&AP) apropiados, confiables, modernos, de buena calidad y ecológicamente viables, conforme a las necesidades socioeconómicas y valores culturales,

How to cite: Rivera-Contreras, A.L., Evaluación de los modelos de gestión de proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico implementados en los llanos de Colombia. DYNA, 85(204), pp. 289-295, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

respetando las costumbres de las comunidades beneficiarias para lograr así un desarrollo sostenible y mejorar la calidad de vida de estas familias.

No obstante la realidad es diferente, de acuerdo al Programa de Asistencia para la Gestión del Sector de la Energía [2], la mayor parte de estos proyectos han fallado debido a los deficientes procesos de gestión que se han realizado, teniendo una gran influencia sobre la sostenibilidad y desarrollo de los sistemas y por lo tanto de las comunidades beneficiarias. En diversas partes del mundo se registran desaciertos que se traducen en gastos de recursos económicos sin soluciones en las necesidades de Saneamiento Básico y Agua Potable (SB&AP), empeorando así las problemáticas de las comunidades [5,9,13,15,17], debido a que las entidades estatales o internacionales registran las inversiones realizadas como un indicador de mejoramiento de SB & AP.

Con una situación tan desoladora, emprender la tarea de establecer modelos de directrices adecuados y estandarizados en la gestión de proyectos de SB & AP constituye un proceso clave para el buen desarrollo social en áreas rurales, lo que puede traducirse en promover la adopción de tecnología, la reducción de la brecha que existe entre la prestación de los servicios de agua potable y saneamiento básico entre zonas urbanas y rurales, el aumento de producción y la nueva definición de estructuras de poder, así como los refuerzos del fortalecimiento individual y colectivo en estas zonas (zonas rurales) del mundo [7].

De lo anteriormente descrito se plantea la evaluación de los Modelos de Gestión de Proyectos en Agua Potable y Saneamiento Básico para la Orinoquía Colombiana (llanos de Colombia), en el cual se evidencien los modelos de gestión institucionales, regionales y locales, observando el esquema utilizado para la planificación y ejecución de los modelos de gestión actuales que se reflejan en los informes de ejecución de los proyectos.

Lo anterior es importante teniendo en cuenta que según [14], se debe proporcionar energía apropiada, confiable, moderna y servicios de saneamiento y agua potable de buena calidad y ecológicamente viables, conforme a las necesidades socioeconómicas y valores culturales, respetando sus costumbres para lograr un desarrollo sostenible.

Emprender una tarea de tales magnitudes, implica comprender que aunque existan numerosos modelos de gestión para proyectos, los mismos tienen características diferentes en términos de propiedad de los sistemas, el nivel de participación de usuario, responsabilidad de la operación y el mantenimiento (O&M) de sistemas, la participación de los usuarios en la construcción de infraestructura y la instalación de equipos, así como la dirección de pagos arancelarios, etc. [5].

Además, también implica entender que estableciendo un método adecuado de gestión de proyectos de agua potable y saneamiento básico y estableciendo evaluaciones apropiadas, se pueden apoyar procedimientos de toma de decisiones, realizar procesos de aprendizaje, mejorar la dirección y desarrollar capacidades que no se revelarían con los modelos actuales, esto último acentúa la evaluación de los elementos claves del modelo de gestión, por ejemplo la participación de las comunidades beneficiarias, la responsabilidad, las habilidades de coordinación y la organización [7].

En base a todo lo anterior surge esta investigación que tiene como objetivo el diagnostico de los modelos de gestión de proyectos de agua potable y saneamiento básico en la Orinoquía, enfocándolo especialmente en el departamento de Casanare; para la realización de esta evaluación se realizó investigación científica, definición y análisis de variables, comparación de proyectos en fase de formulación, ejecución y ejecutados, además se busca la consolidación de un nuevo modelo estándar de gestión de proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico.

Para aclarar los términos anteriormente mencionados se hace un desglose de estos términos a continuación:

Los Modelos de Gestión son un bosquejo que representa un conjunto real con cierto grado de precisión y en la forma más completa posible, pero sin pretender aportar una réplica de lo que existe en la realidad. Los modelos son muy útiles para describir, explicar o comprender mejor la realidad, cuando es imposible trabajar directamente en la realidad en sí. Existen diversos tipos de modelos por ello es necesario conocerlos para tener una correcta aplicación. Los modelos son el punto de partida para una gestión de proyectos adecuada y suministran un medio para analizar y sintetizar situaciones y sistemas complejos [9].

La Gestión de Proyectos se define como una disciplina de gestión que consiste en la aplicación de conocimientos, metodologías, técnicas y herramientas para la planificación, organización, seguimiento, control e informe de todos los aspectos de un proyecto y la motivación de todos aquellos que están involucrados en él para alcanzar los objetivos del proyecto [6]. De forma general, se puede considerar a la gestión de proyectos como una aproximación sistemática y estructurada de como las organizaciones gestionan sus actividades no recurrentes.

La Gestión de Proyectos es un enfoque metódico para planificar y orientar los procesos del proyecto de principio a fin. Según el Instituto de Gestión de Proyectos (PMI), los procesos se guían por cinco etapas: formulación (diseño), planificación, ejecución, control y cierre [11].

Según la Norma Internacional [6] el Proyecto se define como aquel proceso único, que consiste en un conjunto de actividades coordinadas y controladas con fechas de inicio y finalización, llevadas a cabo para lograr un objetivo conforme con requisitos y requerimientos específicos, incluyendo las limitaciones de tiempo, costo y recursos. Es decir un proyecto es un esfuerzo de carácter temporal llevado a cabo con objeto de crear un producto o servicio único, de esta manera los proyectos existen para desarrollar un producto o servicio que no existía antes, en este sentido un proyecto es siempre único.

Los Proyectos de Agua y Saneamiento en Colombia son fundamentales “dado que contribuye en forma determinante en la calidad de vida de la población, por causa del mejoramiento de las condiciones de salubridad y el desarrollo económico de las regiones” [1].

El Agua Potable es la que cumple con las características físicas, químicas y microbiológicas, de tal manera que no genera un riesgo para la salud. El agua para consumo humano debe ser transparente, sin color ni sabor, y no debe tener sólidos suspendidos [10].

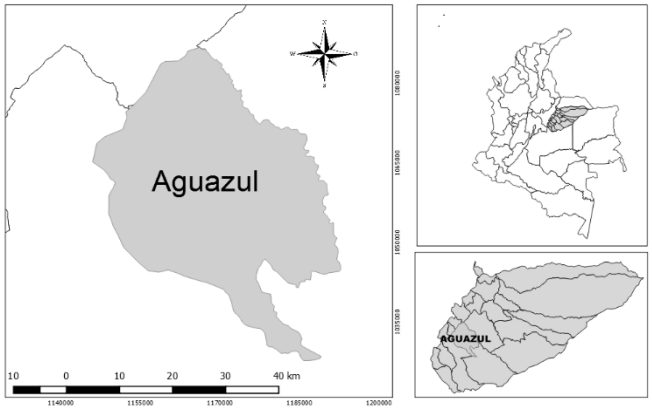


Figura 1. Ubicación del desarrollo del proyecto.
Fuente. Autor.

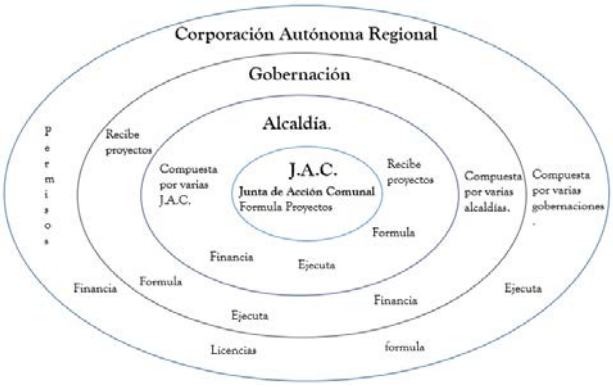


Figura 2. Entidades estudiadas.
Fuente. Autor.

Saneamiento Básico es la tecnología de más bajo costo que permite eliminar higiénicamente las excretas y aguas residuales y tener un medio ambiente limpio y sano tanto en la vivienda como en las proximidades de los usuarios. La cobertura se refiere al porcentaje de personas que utilizan mejores servicios de saneamiento, a saber: conexión a alcantarillas públicas; conexión a sistemas sépticos; letrina de sifón; letrina de pozo sencilla; letrina de pozo con ventilación mejorada [8].

2. Materiales y métodos

Esta investigación cumple con los parámetros de los proyectos de tipo social, es decir que no abarca únicamente resultados de tipo numérico y estadístico, sino que también analiza de manera global la forma como se obtienen los resultados y genera discusión teórica a su alrededor. Por otro lado, inicia desde una teoría que se encaminó a plantear objetivos que la condujeran a la obtención de evidencia [12]. De lo anterior se deriva que esta investigación contiene análisis cualitativos con el fin de generar un mayor aprovechamiento de los resultados; se utilizó el método cualitativo para realizar la metodología el cual hace énfasis mayor en las teorías sustantivas es decir conceptos teóricos que definen las variables.

2.1. Área de estudio

La investigación se desarrolló en la zona rural del municipio de aguazul Casanare, se seleccionaron de todos los proyectos formulados para el área rural de los llanos, únicamente los que fueron formulados para agua potable y saneamiento básico en la última década.

2.2. Entidades de estudio

Esta investigación está basada en proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico que fueron formulados o ejecutados en tres niveles organizacionales de la Orinoquia (Corporación autónoma regional, Gobernación y Alcaldía municipal), las cuales formulan los proyectos y reciben proyectos formulados por las comunidades las cuales están representadas por la Junta de Acción Comunal de cada vereda, en este caso las veredas del municipio de aguazul Casanare.

2.3. Diagnóstico de los modelos de gestión

2.3.1. Selección de artículos científicos

Se inició con la recopilación de artículos científicos, buscándolos en páginas de revistas científicas online, páginas de universidades online, entre otros. Solo se seleccionaron artículos sobre agua potable y saneamiento básico, de esta manera se podrá comparar los modelos utilizados en esos informes con los modelos de los proyectos formulados en los llanos.

2.3.2. Recopilación de proyectos

Se buscaron y seleccionaron proyectos formulados (diseñados) y ejecutados en el tema de agua potable y saneamiento básico en la región de los llanos Colombianos, estos proyectos fueron los insumos para esta investigación en los cuales se evidenció qué modelos de gestión se utilizaron al momento de ser formulados, de los proyectos analizados se seleccionó una muestra de 42 proyectos para evaluar las variables.

2.3.3. Selección de variable

Posteriormente a la selección de los artículos científicos se realizó una selección de variables, este proceso consistió en revisar en cada artículo qué aspectos se tuvieron en cuenta y si estos ayudaron a la optimización y obtención de buenos resultados. Los criterios que se tuvieron fueron que se pudieran medir o evaluar y entonces se seleccionaron 14 variables.

2.3.4. Revisión de las variables

Después de obtener las variables, saber su significado y aplicabilidad, se realizó una revisión en cada uno de los informes de proyectos formulados y ejecutados validando si se utilizaron estas variables al momento de su diseño, esta validación se realizó en una muestra de 42 proyectos.

2.3.5. Realizar encuestas

Finalmente se diseñó una encuesta la cual se le aplico a una muestra de comunidades rurales que se definió estadísticamente realizando un análisis descriptivo.

3. Resultados

Para la realización del diagnóstico se evaluaron artículos científicos los cuales generaron las variables que fueron evaluadas en los proyectos de este proceso se obtuvo los siguientes resultados.

Tabla 1.
Aspectos relevantes extraídos de artículos científicos revisados.

Artículo científico	Aspectos relevantes
State of the art of water and rural sanitation in Colombia	Una tercera parte de la población rural no tiene acceso a agua potable ni a saneamiento básico.
Metodología para la apropiación de tecnologías de saneamiento básico en comunidades indígenas	La mayoría de las veces no son invertidos adecuadamente los recursos de los proyectos.
Advances and limitations of the integrated water resources management in Panama	La disponibilidad de agua en calidad y cantidad adecuadas plantea problemas graves en algunas zonas del país.
A new integral management model and evaluation method to enhance sustainability of renewable energy projects for energy and sanitation services	Most of the projects fail due to managerial weaknesses.
Análisis y perspectivas de las coberturas de acueducto y alcantarillado en el Departamento del Meta	Baja cobertura de acueducto y alcantarillado en zonas rurales.
Gobernabilidad del agua en Colombia: dimensiones y contexto	El acceso y tenencia del agua en Colombia evidencian una gobernabilidad débil.
La evaluación socioeconómica de proyectos: el caso de la ampliación del Sistema de Agua Potable de Pisté, Yucatán	Las comunidades pobres tienen que pagar más por el servicio de agua potable y saneamiento básico.
Esquemas de participación público-privada en el sector del agua y saneamiento en Latinoamérica	Falta mecanismos innovadores y creativos de cofinanciación del sector de agua y saneamiento
La sectorización en redes de agua potable para mejorar su eficiencia hidráulica	Mejorar la entrega, distribución y control de caudales
Metodología para la valoración sanitaria de sistemas de acueducto y alcantarillados	no dispone de metodología que permita medir cualitativa y cuantitativamente la situación actual y futura de la infraestructura física existente y en uso de los sistemas de acueducto y alcantarillado
Modelo de priorización de proyectos de inversión pública con enfoque multicriterio	Falta de modelos de priorización de proyectos de acueducto y alcantarillado
Participación ciudadana en las colonias sin agua potable y alcantarillado de Ciudad Juárez	Participación ciudadana muy baja en la gestión del agua
Sistema para control y gestión de redes de agua potable de dos localidades de México	Falta de un sistema que permitirá gestionar, evaluar y distribuir agua de buena calidad, permitirá gestionar, evaluar y distribuir agua de buena calidad,
Tecnología extranjera en las obras de salubridad rioplatenses de los siglos XIX-XX	No hay innovación en los proyectos.

Fuente: Autor

Tabla 2.
Proyectos recopilados.

Ente Gubernamental	Número de proyectos
Corporación	12
Gobernación	66
Alcaldía	134

Fuente: Autor

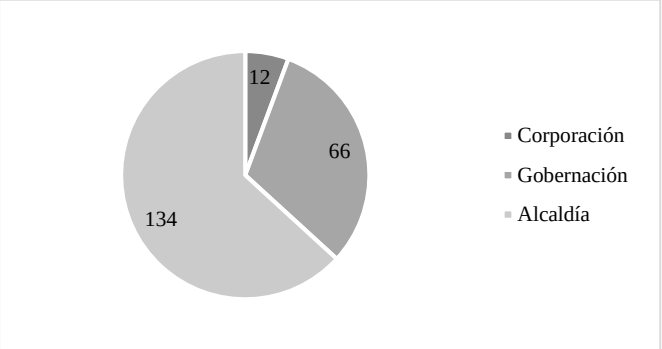


Figura 3. Proyectos recopilados.
Fuente. Autor.

Tabla 3.
Selección de variables.

Variables Seleccionadas
1. Cambios tecnológicos
2. Valoración sanitaria
3. Sistema de información geográfica
4. Gobernabilidad
5. Participación público - privada
6. Administración
7. Evaluación socioeconómica
8. Participación ciudadana
9. Análisis jurídico
10. Tipo de comunidades
11. Cobertura de agua potable y saneamiento básico
12. Priorización / mantenimiento
13. Sectorización
14. Apropiación tecnológica

Fuente: Autor

Tabla 4.
Resultados variables analizadas.

Variable	Cumple (%)	No Cumple (%)
Cambios tecnológicos	0	100
Valoración sanitaria (RAS 2000)	100	0
Valoración sanitaria (Censos)	67	33
Sistema de información geográfica	66,6	33,4
Gobernabilidad	100	0
Participación público – privada	100	0
Administración	78,57	21,43
Evaluación socioeconómica	83,34	16,66
Participación ciudadana	14,30	85,70
Análisis jurídico	99	1
Tipo de comunidades	0	100
Cobertura A.P y S.B	83,34	16,66
Priorización /manteamiento	100	0
sectorización	0	100
Apropiación tecnológica	100	0

Fuente: Autor

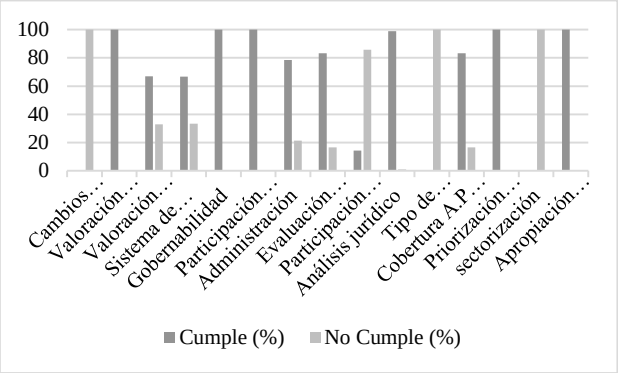


Figura 4. Resultados variables analizadas.
Fuente. Autor.

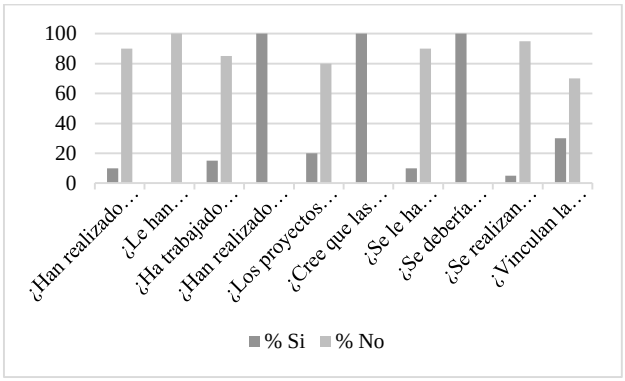


Figura 5. Resultados de la encuesta aplicada a 20 personas.
Fuente. Autor.

Tabla 5.
Resultados de la encuesta aplicada a 20 personas.

Pregunta	% Si	% No
¿Han realizado socialización de proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico antes de ser formulados o ejecutados?	10	90
¿Le han preguntado qué necesidad tiene en servicios públicos antes de formular un proyecto para su comunidad?	0	100
¿Ha trabajado en el diseño de un proyecto de agua potable y saneamiento básico para su comunidad?	15	85
¿Han realizado proyectos de agua potable y saneamiento básico en la vereda donde usted vive?	100	0
¿Los proyectos de agua potable y saneamiento básico satisfacen las necesidades de toda la comunidad?	20	80
¿Cree que las comunidades deben ser incluidas (su opinión, que trabajen en la ejecución del proyecto y en su monitoreo) al momento de formular los proyectos de agua potable y saneamiento básico?	100	0
¿Se le ha informado cuando van a realizar un nuevo proyecto en la zona donde usted tiene su lugar de residencia?	10	90
¿Se debería primero realizar recolección de datos primarios y apoyarse en la comunidad beneficiaria antes de formular cualquier proyecto de agua potable y saneamiento básico?	100	0
¿Se realizan capacitaciones antes de entregar los proyectos ejecutados?	5	95
¿Vinculan la comunidad para ejecutar los proyectos?	30	70

Fuente: Autor.

4. Discusión

De los artículos seleccionados se observó qué modelo de gestión de proyectos utilizaron, cuáles eran los aspectos relevantes de esos proyectos y que soluciones se planteaban para dar solución a la problemática que generaba dicha investigación para generar esos artículos.

Los proyectos seleccionados de los tres entes gubernamentales son proyectos formulados, ejecutados en el sector de agua potable y saneamiento básico, los cuales fueron analizados de manera específica, para seleccionar cuales de estos cumplían con los parámetros para la realización de esta investigación, de los cuales se seleccionaron 42 proyectos como insumos para realizar la validación de las variables.

En la Tabla 3 se observa las variables que fueron seleccionadas para su selección se tuvo en cuenta qué aspectos relevantes presentaron los proyectos, cuales fueron las causas para que no se obtuvieran los resultados esperados, de este modo se realizó una selección de variables que fueran medibles y verificables en los proyectos formulado o ejecutados en la Orinoquia colombiana.

Como se evidencia en la Tabla 4, las variables que implementan los proyectos en su totalidad son las que cumplen con la normativa vigente para el sector agua potable y saneamiento básico en Colombia. En la formulación de los proyectos de agua potable y saneamiento básico se debe tener en cuenta las especificaciones dadas por el Reglamento Técnico del Sector de Agua Potable y Saneamiento Básico (RAS), dando así cumplimiento a parámetros específicos de normativa.

Ante la ley todos los seres humanos son iguales y tienen los mismos derechos, por este motivo todos los proyectos deben cumplir con lo establecido por la ley al momento de formular los proyectos. Para el Instituto de Estudios Ambientales (IDEA) de la Universidad Nacional de Colombia, se concibe la Gobernabilidad del Agua como "*el proceso para la gestión integral del agua, entendida como bien común de todos los seres vivos, que promueve la participación activa e incluyente de los diferentes actores sociales en las decisiones y que articula múltiples culturas, saberes e instrumentos normativos formales y no formales, a diferentes escalas espacio-temporales, en contextos socio-políticos,* económicos *y ecológicos específicos* [16]". La variable publico privada está relacionada con la gestión integral ya que es un conjunto articulado e interrelacionado de acciones de política, normativas, operativas, financieras, de este modo la relación entre entidades públicas prestadoras del servicio de agua potable y saneamiento básico y las entidades privadas es muy estrecha ya que las entidades privadas sirven como entes financiadores para ejecutar los proyectos, por este motivo se tiene en cuenta esta variable en cada uno de los proyectos en el momento de buscar el ente financiador ya sea entidades privadas o el estado.

Se evidenció el cumplimiento de los requerimientos básicos de calidad de prestación del servicio y que cumplen satisfactoriamente con todas las obligaciones legales existentes, es decir, al momento del diseño (formulación) de estos proyectos se tuvo en cuenta las normas y el modo de prestación del servicio. El 100% de los proyectos cumplen

con la priorización de los proyectos, es decir, de los proyectos presentados para una comunidad, seleccionar el más adecuado para dicha comunidad. Los sistemas de alcantarillado están compuestos por redes, colectores, subcolectores, estaciones de bombeo, sistemas de tratamiento y estructuras de disposición final se les deben hacer mantenimiento para garantizar que el sistema funcione óptimamente.

Como se puede observar en los resultados presentados en la Tabla 1, el 65% de las variables se tiene en cuenta parcialmente o no se tienen en cuenta al momento de formular los proyectos ya que estas variables se enfocan más en la utilización de censos para tener datos reales de la cantidad de familias que viven en esa región, tener sistemas tecnológicos los cuales den en tiempo real el estado y funcionamiento de los sistemas. El agua debe ser administrada adecuadamente para no comprometer a la escases de agua a nuestra generación ni las generaciones futuras, por este motivo se debe tener en cuenta qué comunidad se va abastecer, modo de abastecimiento y evitar fugas, infiltraciones o pérdidas de agua. Estos son aspectos importantes a tener en cuenta en formulación de proyectos.

La incorporación de nuevas tecnologías, formas de uso, nuevas metodologías, nuevas reglamentaciones y nuevos productos derivados de la tecnología. Es un proceso temporal y acumulativo, que incrementa la habilidad de los grupos para resolver sus problemas sociales, económicos y cotidianos. Estos cambios tecnológicos se deben adaptar a los atributos culturales y cognitivos de los miembros de la comunidad involucrada y desde su dinámica interna, que está determinada por los atributos funcionales de la tecnología e incluir la comunidad beneficiaria para realizar estudios de su adaptabilidad a las nuevas tecnologías y si estas satisfacen las necesidades de dicha comunidad.

La participación ciudadana a través de las encuestas realizadas, la cual hace parte de una de las variables más importantes porque son las comunidades beneficiarias de dichos proyectos. En la encuesta realizada a comunidades del área rural del municipio de aguazul Casanare, se encontró que la percepción de la comunidad es que no se tienen en cuenta al momento de ser formulados los proyectos, ellos como usuarios y son los que tienen identificadas las necesidades que tienen deberían ser más vinculados ya que ellos pueden brindar una información más clara y precisa de algunas variables como lo es la cobertura.

Las personas que respondieron positivamente en la pregunta si eran tenidos en cuenta al momento de formular un proyecto es porque son propietarios del terreno donde se ejecutaría el proyecto y tienen que informarle para realizar compra de terrenos o los presidentes de las Juntas de Acción Comunal pero se les informa ya cuando van a ejecutar el proyecto, todas las comunidades en general opinan que debería ser un ítem reglamentario al formular un proyecto para una comunidad que esta se debe tener en cuenta y así se optimizaría los resultados.

De este modo se evidencia que los proyectos implementan diferentes modelos al momento de ser formulados, dependiendo del ente financiador se emplea el modelo que este ente tenga establecido para los proyectos, por este motivo se busca crear un modelo estándar de gestión de proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico en los llanos colombianos.

5. Conclusiones

De los artículos seleccionados se evidenció que en diferentes partes del mundo se tiene falencias en la gestión de los proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico y no se cuenta con un modelo de gestión estándar ya que cada país tiene sus modelos de gestión de proyectos.

Los proyectos evaluados muestran que el sector de agua potable y saneamiento se encuentra en proceso de desarrollo en zonas rurales, y que para lograr tener un sistema optimo es necesario hacer una revisión de las estrategias y modelos de gestión, para potenciar sus fortalezas y ajustar aquello que no está dando los resultados esperados. Los beneficios y costos que estos servicios producen para el desarrollo integral del país, son un factor importante a tener en cuenta al momento de dar la prioridad que este sector debe tener en el contexto de las políticas públicas.

De la verificación de variables se puede concluir que los proyectos tienden a cumplir más con los requisitos legales, sin innovar en nuevas metodologías, ni tecnología, siempre buscan cumplir los requisitos establecidos por la ley pero no se tiene en cuenta las necesidades verdades de las comunidades, mantener actualizada la información del funcionamiento y estado de los servicios.

La participación ciudadana fue muy baja en la formulación de los proyectos. Los modelos de gestión de proyectos no lo tienen como un ítem obligatorio al momento de diseñar los proyectos rurales, por lo que la opinión de la comunidad no es tenida en cuenta. Esto es un causante de que los proyectos no den los resultados esperados.

En conclusión los proyectos evaluados tienden a cumplir parcialmente con los requisitos mínimos establecidos por la ley y no cumplen con parámetros que, aunque no son obligatorios, si son importantes para suplir las necesidades cambiantes de las comunidades en los temas de saneamiento básico y agua potable.

6. Recomendaciones

Como parte de las recomendaciones de esta investigación, se requiere de un modelo estándar de gestión de proyectos rurales que tenga en cuenta tanto los requisitos legales como las necesidades específicas de agua potable y saneamiento básico de las comunidades.

La mejora del sector implica la existencia de instituciones sólidas con profesionales capacitados, innovando en metodologías, estar a la vanguardia en los procesos, instituciones que respondan a políticas públicas claramente definidas, que permitan una actuación debidamente coordinada y respondiendo a una visión estratégica respetada por los diferentes niveles organizacionales y todos los niveles de gobierno a lo largo del tiempo.

Existe gran variedad de modelos de gestión, pero se debe establecer un modelo estándar para la región de los llanos orientales en la cual se va a establecer los proyectos, el modelo debe tener en cuenta las necesidades de la comunidad, incluir la comunidad en el momento de realizar

la formulación, ejecución y mantenimiento de los proyectos. El nuevo Modelos de Gestión debe estar diseñados para zonas rurales ya que al implementar los mismos modelos de zonas urbanas no se obtendrán los mismos resultados porque las comunidades y estilos de vida son diferentes.

Bibliografía

[1] Departamento Nacional de Planeación DNP. (2016). Agua potable y saneamiento básico. [en línea]. Disponible en: https://www.dnp.gov.co/programas/vivienda-agua-y-desarrollo-urbano/Paginas/agua-potable-y-saneamiento-basico-.aspx.

[2] Energy Sector Management Programme (ESMAP). Peru: national survey of rural household energy use. Washington: The World Bank Group. 2010.

[3] Energy Sector Management Programme (ESMAP). Peru: rural electrification. Washington: TheWorld Bank Group. 2001.

[4] FAO. Análisis de Sistemas de Producción Animal. Cap. 1, Modelos y sus usos. 1997. [en línea]. Disponible en: http://www.fao.org/docrep/w7452s/w7452s01.htm#capitul modelos y su uso.

[5] Gomez, M.F and Silveira, S., Delivering off-grid electricity systems in the BrazilianAmazon. Energy Sustain Dev., 16, pp 155-167, 2012.

[6] ISO 10006. Norma Internacional, proyecto, gestión de proyectos. 2003, pp. 2-3.

[7] Lillo, P., Ferrer, L., Fernández, A. and Ramírez, B., A new integral management model and evaluation method to enhance sustainability of renewable energy projects for energy and sanitation services. Energy for Sustainable Development. (1), pp 1-3, 2015.

[8] Organización Mundial de la Salud OMS Agua saneamiento y salud. 2017. [en línea]. Disponible en: http://www.who.int/water_sanitation_health/mdg1/es/

[9] Palit, D., Solar energy programs for rural electrification: experiences and lessons from South Asia. Energy Sustain Dev., 17, pp. 270-279, 2013.

[10] Resolución 2117. Por medio de la cual se señalan características, instrumentos básicos y frecuencias del sistema de control y vigilancia para la calidad del agua para consumo humano 2007. [en línea]. Disponible en: http://www.confia.com.co/normatividad/Resolucion%202115%20de%202007%20Calidad%20del%20agua%20potable.pdf

[11] Reúse, M. Gestión de proyectos. TechTarget, 2015. [en línea]. Disponible en:: http: //searchdatacenter.techtarget.com/es/definicion/Gestion-de-proyectos-definicion, https://search.pmi.org/default.aspx?q=project+management

[12] Sautu, R., Todo es teoría: objetivos y métodos de investigación. Ediciones Lurniere S.A., Buenos Aires, 2005.

[13] Shyu, C., End-users' experiences with electricity supply from stand-alone mini-grid solar PV power stations in rural areas of western China. Energy Sustain Dev., 17, pp. 391-400, 2013.

[14] UNDP. Global partnership for development. Annual report. New York: United Nations Development Programme, 2006.

[15] Yadoo, A. and Cruickshank, H., The value of cooperatives in rural electrification. Energy Policy, 38, pp. 29-47, 2010. DOI: 10.1016/j.enpol.2010.01.031

[16] Zamudio, C., Gobernabilidad sobre el recurso hídrico en Colombia: entre avances y retos. Revista Gestión y Ambiente. 15(3). pp. 99-112, 2012. DOI: 10.1016/j.rser.2010.08.023

[17] Zhang, X. and Kumar, A., Evaluating renewable energy-based rural electrification program in western China: emerging problems and possible scenarios. Renew Sustain Energy Rev. 15, pp. 773-779, 2011.

A.L. Rivera-Contreras, es Ing. Ambiental de la Universidad Libre de Colombia en 2008, en 2015 MSc. en la Industria de los Hidrocarburos con la Universidad Viña del Mar, Chile, inició estudios en el Centro Panamericano de Estudios Superiores de México (CEPES), con el ánimo de lograr para el 2018 el título de Dr. en Proyectos. Se destacó laboralmente en consultorías relacionadas con saneamiento básico para diferentes alcaldías del Tolima, gerente de la Empresa de Aseo de Yopal y gerente del Consorcio Casanare Inclusivo, jefe de la oficina de proyectos de la Empresa de Servicios Públicos de Aguazul y director operativo, del área ambiental de la Secretaría de Desarrollo Económico y Ambiental de la Alcaldía Municipal de Aguazul. Inició en el 2013 con labores de docencia universitaria en universidades como Unitolima, Unisangil y Uniremington, docencia para posgrados con universidades con presencia en Casanare como la Universidad Unitropico y Uniboyacá.
ORCID: 0000-0003-3568-5233



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

SEDE MEDELLÍN

FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Medio Ambiente

Oferta de Posgrados

Especialización en Aprovechamiento de Recursos Hidráulicos
Especialización en Gestión Ambiental
Maestría en Ingeniería Recursos Hidráulicos
Maestría en Medio Ambiente y Desarrollo
Doctorado en Ingeniería - Recursos Hidráulicos
Doctorado Interinstitucional en Ciencias del Mar

Mayor información:

E-mail: acma_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5105

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Direct stockpile scheduling: Mathematical formulation

Felipe Souza [a], Leonardo Soares Chaves [b], Hudson Burgarelli [b], Alizeibek Nader [b], Carlos Arroyo [b] & Luiz Alberto [b]

[a] *Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá, Brasil. felipecmc@globomail.com*
[b] *Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil leosoaresc@hotmail.com, hburgarelli@gmail.com, beckn@demin.ufmg.br, carroyo@demin.ufmg.br*

Received: February 14th, 2017. Received in revised form: December 13st, 2017. Accepted: February 15th, 2018.

Abstract
In a mining context, production scheduling's main objective is to determine the best mining sequence of blocks to achieve the largest net present value and to maximize ore reserve exploitation. Stockpiling and blending procedures may represent very helpful alternatives for mine planning to ensure the ore quality and amount required by the processing plant. In order to satisfy industrial requirements of grades and tones, reducing stockpile fluctuations may represent a very important tool especially for medium and short term mine planning. Classical linear programing has been widely used to model blending problems at the mining industry, however this formulation allows only one objective formulation. The current work describes a system based on goal programing able to reach blending constraints desired by short/medium term planning. The proposed formulation achieves the best schedule scenario, ensuring cost constrains are respected. Hence, this study aims to provide support for both short and long term mine planning.

Keywords: stockpile; goal programing; blending constraints; stockpile scheduling; bulk ore blending.

Programación directa de pilas de acopio: Formulación matemática

Resumen
Según el contexto de industria minera la programación de producción es la mejor metodología para determinar la mejor secuencia de explotación y asi obtener el mejor valor presente líquido y explotar la reserva máxima. La construcción de pilas de acopio y de mezcla representa una alternativa valiosa para la planificación de minado permitiendo garantizar la calidad del concentrado y las especificaciones de la planta de tratamiento. Para satisfacer las especificaciones de leyes y tonelaje, y reducir las variaciones las pilas de acopio y mezcla cumplen un papel importante para la planificación de corto y largo plazo. La programación linear clásica viene siendo ampliamente utilizada en problemas de mezcla presentes en la industria minera entretanto esta formulación permite apenas trabajar con una sola función objetivo en su formulación. El presente trabajo describe un sistema basado en goal programing, capaz de alcanzar las restricciones requeridas en la planificación a corto y largo plazo de forma simultánea. La formulación propuesta obtiene el mejor escenario operacional garantizando que las restricciones de costos sean respetadas. Esta formulación es útil pues da soporte a la toma de decisiones en las actividades de planificación a largo y corto plazo

Palabras clave: pilas de acopio; goal programing; restricciones de mezcla; agendamiento de pilas; mezcla de concetrado.

1. Introduction

Usually, mine planning objectives are to develop a production scheduling that leads to an ore block selection that ensures the delivery of budget tones and grade quality to the processing plant according to the desired period [1]. There are minimum quality requirements for the ore delivered to the plant, and defining a mixture ratio and a technical control methodology is important to reach this quality target [20] [17]. The ideal operation should provide a uniform feed, since grade and tonnage variations are related to a trend in increasing operational costs [12]. The classic proposition, developed by Johnson [8], to calculate the net present value implies that costs affect the adequate time period to process a mining unit, and processing and rehandling costs will vary depending on mineralogy and ore type. Traditionally,

How to cite: Souza, F.R., Soares, L., Burgarelli, H., Nader, A., Arroyo, C. and Alberto, L., Direct stockpile scheduling mathematical formulation. DYNA, 85(204), pp. 296-301, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

blending algorithms only target quality and tonnage goals to provide results.

In most cases, the blending objective is the same: to ensure constant feed volume and ore quality in order to guarantee low operational costs. Each operation applies different techniques, but the main objectives are similar. The formulation of the blending scheduling problem through the classical linear approach is limited, since the objective function has only one goal. Linear programing presents difficulties on converging results with an increasing amount of constraints and variables [6]. An important characteristic of goal programing used in this formulation is related to deviations of the objective function, which is allowed but requires assigning a penalty to it. Loosening the objective function may lead to a non-optimal result, but the best possible result considering the modeled constraints [11].

The Direct Stockpile Scheduling is a mathematical formulation able to consider quality and mass constraints from the processing plant, and also the time impact required by mine planning related to costs and to proper discount factors. The relaxation of the objective function considers a possibility of a non-optimum solution to schedule the best feasible solution.

2. Ore blending and mine production scheduling

Ore blending is the process responsible for combining ore with various grades and contaminants in a systematic process. The importance of this process is directly related to the natural lithotype variability of the deposit [13]. Blending must combine different materials along time to reach an ideal product, uniform and homogeneous. The blending activity shows even more importance in cases of inhomogeneous ore deposits and rigorous quality control of the commodity [2]. Production mine planning should consider plant design, environmental factors and market demand. A brief description of these important factors is provided below:

- Processing plant design:

The processing plant is planned and built considering specific ratios between elements and mineralogy. Blending must attempt to estipulate the minimum and maximum limits to be accepted by the processing plant during the whole mine life [2]. Under or over utilization of material may lead to product losses due to this specific range.

- Environmental factors:

In some cases, there may be limited areas to be used by the stockpiles due to environmental restrictions. Thus, the environmental restrictions, mine scheduling, stockpile scheduling and plant must be aligned.

- Market demand:

Market agreements are developed based on ore quality and quantity. In order to ensure the product quality, it is important to provide a uniform feed for the processing plant, and this requires combining all productive units scheduling [12].

There is a kind of gap between the planned stockpile for long and short terms. A long term pile is scheduled based on interpolations provided by block models with less detailed information when compared to a short term one. After being mined, generally piles are sampled and apply adequate estimation techniques to provide an increase of information confidence [16]. Due to this increasing knowledge, the short term stockpile planning is more effective and hence more acceptable than long term planning.

A qualified stockpile planning must satisfy material quality, mass and operational cost targets. The main aspects considered in short term planning are:

- Predictability:

The scheduling must consider the current plant constraints and others likely to occur in the subsequent periods. The planning must attempt to ensure ore quality, the targeted mass and costs.

- Floatability:

The scheduling of ore piles based on nonlinear programing may present fluctuations when the system can't reach a desired target, due to strategies used to provide the nearest possible approximated solution [4]. If the deviations are foreseen during the mine planning, the plan may be analyzed in an attempt to overcome these fluctuations.

- Regionalization:

The block model must be the most accurate possible, since knowledge of the actual stockpile material and the run of mine are directly related to the quality of this information. Inaccurate block model estimation may lead to ore feed oscillations and thus turning unfeasible the use of stockpiles for quality control.

Stockpile control is an important tool to avoid selective mining, since blending different materials may maximize the reserve exploitation [18]. The stockpile control aims to minimize mining costs and increase ore production. Increase of ore reserves are expected as a natural consequence of stockpile blending: non-complying material with the quality standards, below the cutoff grade or with higher concentration of contaminants, which were initially considered as waste may be processed with material complying with the quality standards to blend and become acceptable to the processing plant [13].

3. Ideal stockpile formulation

One function of the mining complex is to supply ore blending to the plant according to the processing requirements. The first stage consists in mining the non-homogeneous material provided by the deposit. The second stage aims to blend different materials considering the processing plant requirements and finally process it [16]. For a given processing and operation path, it is possible to consider multiple alternatives. For example: a block can be mined and processed in the initial period or stocked to be blended later. Various processing routes may be chosen and all of them should result in material complying with the processing plant's ore quality requirements [18].

The classical blending process considers the blend opportunity after deciding whether the block should be mined or not [10]. Ideally, this decision of whether the block will be mined or not should take the blending opportunity into account, for example: A high grade block with undesirable contaminant rates is likely to not be mined, however, if the system is able to consider the blending opportunities, it can find an ideal proportion to maximize the utilization of this marginal block [12].

4. Goal programing

Goal programming, as linear programming, is a mathematical linear model but with several differences. Linear programming aims to solve problems modelled by linear one-dimensional equation. Profit maximization and cost minimization problem may sometimes be solved by linear programming. Real mine operations commonly require multiple objectives to reach an operational solution. Joining different objectives on a single objective function may be impossible. Goal programming solve this demand by allowing problem models constituted by multiples objectives [9].

Linear programming techniques regularly consider the constrains as inviolable, named hard constraints. Goal programing face this modelling limitation differently, at least one constraint is transgressed to reach a possible solution [7]. The constrains are named soft constrains.

Mining operations formulation commonly are correctly formulated on decision model by goal programming on a huge amount of problems. This operation is maximized or minimized by a group of constraints incompatible between equations [5]. The algorithm must be able to choose the constrain to be violated in order to reach a feasible solution.

Goal programming can be divided on the following components: Decision variables (real variables optimized by model), constraints (group of linear restrictions of objective functions), deviation variables (positive or negative deviation related of objective function) and objective function (mathematical relationship of decision variables representing the objective of model) [15].

5. Process description

Generally the ore blending process is executed in 2 steps. First, different stockpiles are disposed in the field according specific proprieties. In this initial stage, the different stockpiles must be homogenized and sampled to determine their proprieties [20]. This step is important to split the different lithotypes and determine proprieties. Second, a bucket-wheel excavator and transport conveyor direct the different materials to temporary silos. The silos store the materials for the ensuing blending operations. The silos feed a transportation system to supply a stacker, by which the blended ores are stacked on the blending yard for the subsequent process [18]. Each silo discharges the ore at a specific flow speed according to the blending ratio determined to reach the aimed proprieties. The process occurs simultaneously, the two steps working at same time [2]. The process starts the ore preparation during stage 1 by bucket-wheel and finishes at the stacker. The silos allow the creation of a kind of intermediate buffer of pile blending ore, due to operational restrictions such as weather, for example, that can interrupt the process. Operational problems on main equipment can still stop the process. If any silo runs out of ore and the bucket-wheel can't move to a certain pile on time to excavate or to refill it, the whole process has to pause [2,9]. Fig. 1 shows an example of blending process to build the ore stockpiles.

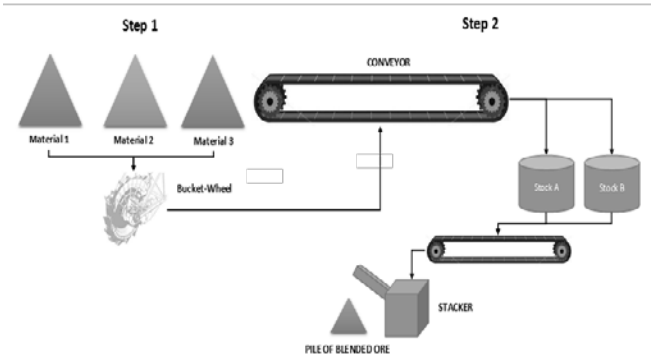


Figure 1. Scheme of Ore Blending Process.
Source: Author

6. Formulation of direct pile scheduling

The classic strategy to solve blending problems is based on linear programing, due to the facility of its implementation and formulation building. A classical formulation is able to mix a number of components according to a specific requirement group. There are several variations of the blending problem formulation using linear programing as reported by [1]. Since [4] published in 1963 one of the main books on linear programing, several formulations have been raised to solve these formulations. Johnson [8] published a formulation to solve the scheduling problem based on linear programing, but due to computational restrictions, this methodology was abandoned during the 90's. Nowadays these formulations are refined using a relaxing mechanism and heuristic techniques.

In some cases, the ore pile does not have sufficient material to fulfill a specific requirement. Then, a technique must be used that is able to determine the best scenario possible with the present material [20]. Goal programing is not a new technique, but a formulation considering minimization of the operational costs, quality requirements, correct discount factor and opportunity cost in the same formulation can be an interesting alternative.

- Objective Function: Goal programing is a kind of multi objective optimization which permits a multi-criteria goal decision. Applied in formulations with needs to attempt and satisfy more than one objective function [8] [19]. The present formulation must attempt a minimal operational cost eq. (1) and minimum quality deviation eq. (2).

$$min \sum_{Year=1}^{Y} \sum_{Piles=1}^{P} \frac{Vr_{YP}\, x\, \rho_P\, x\, Oc_{YP}\, x\, Co_{YP} + Vr_{YP} * \delta l^{+} + Vr_{YP} * \delta l^{-} + Vr_{YP} * \delta u^{+} + Vr_{YP} * \delta u^{-}}{Df^{P}} \quad (1)$$

$$\min \sum_{Year=1}^{Y} \sum_{Piles=1}^{P} \sum_{Element=1}^{E} Vr_{YPE}\, xGr_{YPE} + GO_{YE} * \theta l^{+} + GO_{YE} * \theta l^{-} GO_{YE} * \theta u^{+} + GO_{YE} * \theta u^{-} \quad (2)$$

Vr_{YP} = Material volume recovered of especific year(y) related to each feed pile(p);

ρ_P = Feed pile density;
Oc_{YP} = Operational cost of especific year(y) related to each feed pile(p);
Co_{YP} = Oportunity cost analysis factor represented by a binary variable;
Df^P = Economic discount factor for each period(p);
δl^- = Lower negative deviation for volume;
δl^+ = Lower positive deviation for volume;
δu^- = Upper negative deviation for volume;
δu^+ = Upper positive deviation for volume;

- Maximum Permitted Distance: To obtain an operational result, it is important to consider the distance between the feed piles. This distances are function of equipment and field size. This control is based on linear restriction as proposed by Romero [15]. Control distance is an alternative to blend closer material and ensure efficiency of operational activity.

$$\sum_{Year=1}^{Y}\sum_{Pile=1}^{P}\frac{D_{YP}}{NP} \leq \sum_{Year=1}^{Y} PD_y \; for\; y = 1,2,3,\dots Year; p = 1,2,3,\dots Pile \quad (3)$$

D_{YP} = Distance between the piles of the year;
NP = Number of piles used of the period;
PD_y = Maximum distance permitted in the period(y);

- Operational and Quality restrictions: Operational restrictions are related to operational plant restrictions. There are upper and lower boundary restrictions to control the capacity. Each period can present different restrictions according to the mine planning.

$$\sum_{Year=1}^{Y}\sum_{Pile=1}^{P} Vr_{PY} x\, \rho_p x\, Co_{YP} \leq \sum_{Year=1}^{Y} Mmax_Y \; for\; y = 1,2,3,\dots Year; p = 1,2,3,\dots Pile \quad (4)$$

$$\sum_{Year=1}^{Y}\sum_{Pile=1}^{P} Vr_{PY} x\, \rho_p x\, Co_{YP} \geq \sum_{Year=1}^{Y} Mmin_Y \; for\; y = 1,2,3,\dots Year; p = 1,2,3,\dots Pile \quad (5)$$

$\boldsymbol{Mmin_Y}$ = Minimum mass in year;
$\boldsymbol{Mmax_Y}$ = Maximum mass in year;

Mass must be limited by upper limit manly due a difficulty in keeping a huge, uniform pile; the lower limit is related to operational cost [11].There is an opportunity cost analyzed by the Co_{YP} binary variable. This variable permits the algorithm to determine if recovery of the pile is important to reach the quality and minimize the costs [20]. The algorithm can decide not to recover the pile due to blend options for obtaining the objectives.

$$\sum_{Year=1}^{Y}\sum_{Pile=1}^{P} Vr_{PY} x\, \rho_p x\, Co_{YP} \leq \sum_{Year=1}^{Y} Mmax_Y \; for\; y = 1,2,3,\dots Year; p = 1,2,3,\dots Pile \quad (6)$$

$$\frac{\sum_{Year=1}^{Y}\sum_{Pile=1}^{P}\sum_{Element=1}^{\omega} Vr_{py}\, x\, \rho_p\, x\, \omega}{\sum_{Year=1}^{Y}\sum_{Pile=1}^{P} Ac_{Mass}} = \sum_{Year=1}^{Y}\sum_{Ele=1}^{\omega}\tau_{Y\omega} \quad (7)$$

7. Method

To implement the theory described in items 3, 4, 5 and 6 was used the concepts of "Goal programing" applied the Python language. Was developed an algorithm based on linear optimization able to access Optimization Gurobi tools to solve the problem. The algorithm is able to access a database that represents a block model to determine the best mixture of ores in order to reach the demand of the plant. First the algorithm was tested on experimental database. After math and technical validation of the results was implemented in a real project. The operation has 10 waste supplies that should be adjusted to feed the plant. Operational constraints and characteristics of the processing plant was supplied to set the algorithm constrains. The results of this test are presented in the following items.

8. Tests and results

The proposed formulation must be tested on a real system to verify the target attempt ability of the algorithm. The database used corresponds to an iron ore deposit formed on Pre-Cambrian inside the "Quadrilátero Ferrífero". This formation is a typical amount of the greenstone belt, formed by Meta volcanic rocks and Meta sediment [3].

Cost was composed by base cost and an increment cost, due to a distance between the sources feeds. Figure 2 shows the proprieties of source with will compound the desired solution and targets shown in Table 1.

Table 1.
Feed material proprieties.

	Base Cost	Fe Grade	Si Grade	Mass (Kt)
Source 1	1.9	33.53	46.46	88.51
Source 2	1.4	20.88	59.13	53.30
Source 3	1.8	29.56	50.35	61.64
Source 4	1.2	23.95	56,00	66.6
Source 5	1.7	17.3	62.70	62.34
Source 6	1.3	21.10	58.90	74.13
Source 7	1.5	21.45	58.55	67.77
Source 8	1.4	15.13	64.90	64.88
Source 9	1.7	28.60	51.40	63.50
Source 10	1.2	14.75	65.30	62.34

Source: Author

Table 2.
Objective targets.

Fe(%)	22.65
SiO_2(%)	57.35
Mass(Kt)	66.20

Source: Author

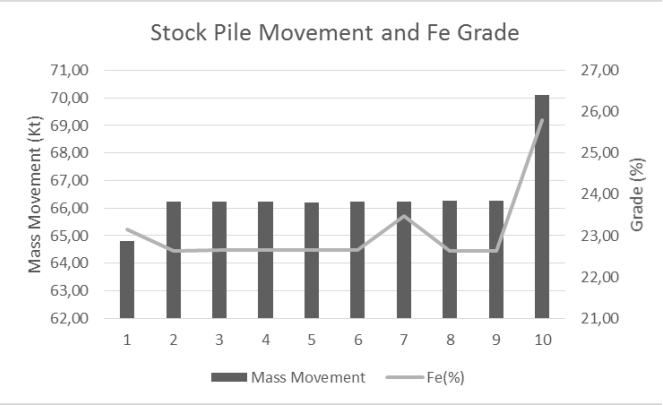


Figure 2. Stockpile Movement and Fe Grade.
Source: Author

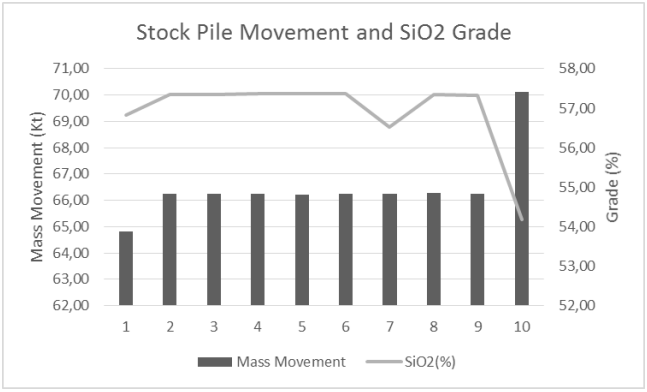


Figure 3. Stockpile Movement and SiO_2 Grade.
Source: Author

The movement of mass attempting to fulfill the restrictions is a problem of hard convergence as expected, due to a double objective function and the input restrictions. The solution strategy does not forbid a result for the objectives, due to the formulation construction applying a penalty in order to converge to desired solution, if it cannot converge exactly [6].

Table 1 shows the quality of all ore sources, there are 6 sources with quality below the plant feed requirements. According to plant restrictions these 6 sources cannot feed the process. It is possible to observe the results of stockpile optimization on Figure 2 and Figure 3. All the ore with quality below the limits was adjusted, because the overall quality in all years is greater than 22.5% Fe and smaller than 57.35% of Si. The resource was increased due to the ability to choose the restriction to be violated [9]. The ore movement restriction is out of parameter, less than 66.20 Kt on the first year one and greater than 66.20 Kt on year 12.

Initial reserves able to feed the plant was 280.25 Kt, and after goal programing optimization it increased to 665.01 Kt. This represents an increase of 237 percent of material that initially was conducted to waste dump. After the optimization the mine cut-off was decreased turning a huge amount of material profitable.

9. Conclusion

Blending is an important issue in mine planning because the quality is important to produce adequate products. Correct targets related to quality and mass can make a project to become feasible. Adequate use of information about the stock is important to keep the plant working as planned and increase the feasible reserve. The proposed formulation aims to use the feed piles to create stockpiles to be used on plant considering the targets and restrictions. The results point to violate the mass restriction because respecting the grade constraint ensures the possibility of processing this material. Material below quality requirements is taken as waste, which is a huge impact. Violating stockpile grade means the material cannot be processed, and violating the production mass constrain reflects on an opportunity cost problem related to profit. Therefore, the production mass target problem doesn't affect the reserve, and it is better to keep the grade restrictions rather than the production mass ones.

The small amount of ore on the first year is related to cost, the formulation set an objective to minimize the operational costs. On initial years the best alternative is to use the low cost and lower quality stock piles, but respecting the ore quality. Results show ability to create a feasible blending scenario when the targets cannot be reached exactly. Relaxing the problem allows the system to obtain a feasible solution to the problem. According Rendu [14] the lack or surplus of ore mass can generate an opportunity cost. A lack of ore causes equipment otiosity, a surplus of material can force the system to process the low grade ore fist. Process low grade ore first causes a an income decrease for the company. The linear programing largely used cannot find a scenario from the objective constraints. The present scenario reached the targets for a majority of the periods, demonstrating a feasible result with low cost. The algorithm was able to determine a viable solution in a difficult solution. In the future you can apply heuristic mechanisms, in order to incorporate more operational restrictions.

References

[1] Chanda, E. and Dagdelen, K., Optimal blending of mine production using goal programming and interactive graphics systems. International Journal of Surface Milling. Reclamation and Environment, 9, pp. 203-208, 1995. DOI: 10.1080/09208119508964748

[2] Chun-yue, S. (et all), Modeling and scheduling optimization for bulk ore blending process. Journal of Iron and Steel Research Inernational, 19, pp. 20-28, 2012. DOI: 10.1016/S1006-706X(13)60004-7

[3] CPRM., Geoparque Quadrilátero Ferrífero (MG). Itabira: CPRM Press,1, PP. 183-220, 2014.

[4] Dantzig, G.B., and Thapa, N.M., Linear Programming. New York: Springer-Verlag Press, 1997.

[5] Giokas, D., The use of goal programming and data envelopment analysis for estimating efficient marginal costs of outputs. The Journal of the Operation Research Society, 48, pp. 319-323, 1997. DOI: 10.1057/palgrave.jors.2600376

[6] Glover, F.E., Handbook of Metaheuristics. New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow: Kluwer Academic Publishers, 2003.

[7] Ignizio, J.P., A review of goal programming: a tool for multi objective analysis. The Journal of the Operation Research Society, 29, pp. 1109-1119, 1978. DOI: 10.1057/jors.1978.243

[8] Johnson, B.T., Optimum open pit mine production scheduling, MSc Thesis, University of California, California, Berkley, 1968.

[9] Killough, L.N. and Souders, T.L., A goal programming model for public accounting firms. The Accounting Review, [online]. 48, pp. 268-279, 1973. Available at http://www.jstor.org/stable/244917

[10] Jones, D. and Tamiz, M., Practical Goal Programming, New York: Springer Books, 2010.
[11] Leite, A.D., Production scheduling under metal uncertainty – Application of stochastic mathematical programming at an open pit copper mine and comparison to conventional scheduling. The Australasian Institute of Mining and Metallurgy, Spectrum Series, 17. Mining Technology, [online]. 116, pp. 109-118, 2010. Available at http://cgm.cs.mcgill.ca/~avis/courses/567/roussos/SR_RD.pdf
[12] Montiel, L. and Dimitrakopoulos, R., Optimizing mining complexes with multiple processing and transportation alternatives: An uncertainty-based approach. European Journal of Operational Research, 247, pp. 166-178, 2015. DOI: 10.1016/j.ejor.2015.05.002
[13] Moraes, E.F., et al., Um modelo de programação matemática para otimizar a composição de lotes deminério de ferro da mina Cauê da CVRD. REM: R. Esc. Minas, Ouro Preto, 59(3), pp. 299-306, 2006. DOI: 10.1590/S0370-44672006000300008
[14] Rendu, J.-M., An Introduction to cut-off grade estimation. littleton: Society for Mining, Metallurgy, and Exploration, Inc. (SME). 2008.
[15] Romero, C., Handbook of critical issues in goal programming. New York: Pergamon Press, ISBN -0-08-040661, 1991.
[16] SME, SME mining engineering handbook – Englewood: 3rd ed. Society for Mining, Metallurgy, and Exploration, 2001.
[17] Taylor, H.K., Rates of working of mines-a simple rule of thumb. Trans. Instn. Min Metall. (Sec.A: Min. industry), October, pp. A203–A204, 1986
[18] Tulcanaza, E., Evaluación de recursos y negocios mineros. Oficina dos Textos, 1ª Ed. 2015.
[19] Wells, H.M., Optimization of mining engineering design in mineral valuation. Mining Engineering December, [online]. pp. 1676-1684. 1978. Available at http://www.onemine.org/document/document.cfm?docid=7540
[20] Ya-lin, W., et al., Multi-objective intelligent coordinating optimization blending system based on qualitative and quantitative synthetic model. Journal Cent. South University Technology, 13(13), pp. 552-557, 2006. DOI: 10.1007/s11771-006-0086-5

F. Souza, received the BSc. Eng in Mining Engineering in 2013, the MSc. degree in Mining Engineering in 2016, and the PhD is in working progress. All of them in Federal University of Minas Gerais, Brazil. Currently he is a full professor in the Mining Department, Escola de Engenharia, Federal University of Mato Grosso, Brazil. His research interests include mine optimization, geological modeling and market behavior.
ORCID: 0000-0001-6804-9589

L.S. Chaves, received the BSc. Eng in Mining Engineering in 2014, the MSc. degree in Mining Engineering in 2017 in Federal University of Minas Gerais, Brazil. Currently, he is assistant researcher in the ITV, Instituto Tecnológico Vale. His research interests include mine planning, rock mechanics, slope stability.
ORCID: 0000-0003-1367-6520

H. Burgarelli, received the BSc. Eng in Mining Engineering in 2011, the MSc. degree in Mining Engineering in 2016 in Federal University of Minas Gerais, Brazil. Currently, he is a MSc. consultant in the HB Consultoria. His work include mine optimization, reserve estimation, resource estimation, works related to international codes as JORC.
ORCID: 0000-0002-9346-1564

A. Nader, received the BSc. Eng in Mining Engineering in 1981, the MSc. degree in Mineral Technology in 2004 in USP, University of São Paulo, Brazil. The PhD. degree in Mineral Engineering in 2014 in UFMG, Federal University of Minas Gerais, Brazil. He worked for mining and consulting companies since 1982. Currently, he is a full professor in the Mining Engineering Department, Federal University of Minas Gerais, Brazil. His research interests include: simulation, geological modeling, market analysis, mine planning, resource and reserve estimation.
ORCID: 0000-0002-7215-7379

C. Arroyo, received the BSc. Eng in Mining Engineering in 2002, the MSc. degree in Mineral Technology in 2004 in UFOP, Federal University of Ouro Preto, Brazil. The PhD degree in Geometalurgy in 2014 in UFOP, Federal University of Ouro Preto, Brazil. He concluded the PhD. in Mining Planning in Delphos -AMTC, Advanced Mining Technology Center - Universidade do Chile. He worked for mining and educationl companies since 2002. Currently, he is a full professor in the Mining Engineering Department, Federal University of Minas Gerais, Brazil. His research interests include: simulation, geological modeling, market analysis, mine planning, resource and reserve estimation, geostatistics.
ORCID: 0000-0002-4182-7827

L. Alberto, received the BSc. Eng in Mining Engineering in 2014, the MSs. degree in Mining Engineering in 2017 in Federal University of Minas Gerais, Brazil. Currently, he is doctorate candidate in University Federal of Minas Gerais, Brazil. His research interests include mine planning, rock mechanics, slope stability, geostatistics.
ORCID: 0000-0003-1100-4608



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Geológica e Ingeniería de Minas y Metalurgia

Oferta de Posgrados

Especialización en Materiales y Procesos
Maestría en Ingeniería - Materiales y Procesos
Maestría en Ingeniería - Recursos Minerales
Doctorado en Ingeniería - Ciencia y Tecnología de Materiales

Mayor información:

E-mail: acgeomin_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 53 68

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Effect of the addition of hydrocolloids and aloe vera gel (*Aloe barbadensis* Miller) on the rheological properties of a beverage of sweet corn (*Zea mays* var. saccharata)

Karen Poala Contreras-Lozano [a] Héctor José Ciro-Velásquez [b] & Carlos Julio Márquez-Cardozo [b]

[a] *Departamento de Ingeniería Agroindustrial, Universidad de Sucre, Sucre, Colombia. kpcontrerasl@unal.edu.co*
[b] *Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia. hjciro@unal.edu.co, cjmarque@unal.edu.co*

Received: March 20th, 2017. Received in revised form: October 23th, 2017. Accepted:February 19th, 2018

Abstract
The rheological properties of food suspensions can be modified by adding hydrocolloids to improve stability. In this paper, the effect of xanthan gum (XG) (0.025-0.075 %w/w), sodium carboxymethylcellulose (CMC) (0.025-0.075 %w/w), and aloe vera gel (AV) (0.5-1.5 %w/w) on the rheological properties of a beverage formulated with sweet corn was evaluated. Rotational and oscillatory tests were performed at temperatures between 10 and 50 °C. Products formulated with hydrocolloids and AV showed a pseudoplastic flow with a consistency coefficient from 0.0036 to 0.2070 Pa.s^n and a flow behavior index from 0.5 to 0.9, where the apparent viscosity decreased with the temperature. The viscoelastic behavior of the beverage was characteristic of a weak gel over a wide frequency range, wherein the storage modulus (G') predominated over the loss modulus (G"). Adding high concentrations of gum (≥0.05 %w/w) and low concentrations of AV (≤1 %w/w) were adequate to keep stability at low strain.

Keywords: viscosity; gums; stability; suspension; viscoelasticity.

Efecto de la adición de hidrocoloides y gel de aloe vera (*Aloe barbadensis* Miller) en las propiedades reológicas de una bebida de maíz dulce (*Zea mays* var. saccharata)

Resumen
Las propiedades reológicas de las suspensiones alimenticias pueden modificarse añadiendo hidrocoloides para mejorar la estabilidad. En este trabajo se evaluó el efecto de la goma xantana (XG) (0,025-0,075% p/p), carboximetilcelulosa sódica (CMC) (0,025-0,075% p/p) y gel de aloe vera (AV) (0,5-1,5% p/p) sobre las propiedades reológicas de una bebida formulada con maíz dulce. Se realizaron ensayos rotacionales y oscilatorios a temperaturas entre 10 y 50 °C. Los productos formulados con hidrocoloides y AV mostraron un flujo seudoplástico con un coeficiente de consistencia de 0,0036 a 0,2070 Pa.s^n y un índice de comportamiento de flujo de 0,5 a 0,9, donde la viscosidad aparente disminuyó con la temperatura. El comportamiento viscoelástico de la bebida fue característico de un gel débil en un amplio rango de frecuencias, en el que el módulo de almacenamiento (G') predominaba sobre el módulo de pérdida (G"). La adición de altas concentraciones de goma (≥ 0,05% p/p) y bajas concentraciones de AV (≤1% p/p) fueron adecuadas para mantener la estabilidad a baja deformación.

Palabras clave: viscosidad; gomas; estabilidad; suspensión; viscoelasticidad.

1. Introduction

Sweet corn (Zea mays L. var. Saccharata) is characterized by its high sugar content, which makes it attractive for the production of processed foods, as it is mainly consumed as a fresh vegetable or as an industrialized product in the form of a canned whole grain [1]. The few alternatives of transformation of this maize variety, generates the need for its application in the development of new products with commercial interest, such as beverages. A beverage formulated with sweet corn pulp contains

How to cite: Contreras-Lozano, K.P., Ciro-Velasquez, H.J. and Márquez-Cardozo, C.J., Effect of the addition of hydrocolloids and aloe vera gel (Aloe barbadensis Miller) on the rheological properties of a beverage of sweet corn (Zea mays var. saccharata). DYNA, 85(204), pp. 302-310, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

a large amount of sedimentable particles that can generate an unstable behavior in the food suspension.

Hydrocolloids are hydrophilic polymers widely used in food systems because of their ability to modify rheological properties, providing a viscosity modification, forming gel structures or stabilizing suspended particles, among other properties, thus prevent phase separation is generally associated with poor quality [2,3]. The addition of gums, such as CMC, xanthan gum, Arabian gum, gellan gum and guar gum, has been studied recently in the formulation of beverages [4-8].

The potential use of Aloe vera gel as ingredient in the formulation of food products, including ready-to-drink beverages, has increased, because of its therapeutic and functional properties and hence its beneficial effects on human health [9]. The gel is composed mainly of galacturonic acids and glucoronic acids attached to sugars like glucose, galactose and rabinose; Other nutrients such as vitamins, enzymes, amino acids, minerals and trace elements. Bioactive compounds include organic acids, phenolic compounds and phytosterols [10]. Like the suspensions of some hydrocolloids or food gums that form gels, aloe vera gel develops viscoelastic behavior, so its addition in food products could affect the rheological properties.

Rheological properties are important for food quality control, structure analysis and process engineering applications [11]. The flow behavior can be determined by a rotational test, and the literature reports numerous mathematical models to describe this property, including the Power Law, Herschel-Bulkley, Bingham and Casson models [3,12-14]. The viscoelastic properties of food structures have been evaluated to determinate stability in food dispersions, such as beverages, and these are influenced by chemical composition, processing conditions and the addition of some ingredients such as stabilizers [5,15-20].

Given the limited information regarding the use of sweet corn as a basis for formulating a natural drink, the present study evaluated the effect of adding xanthan gum (XG), carboxymethyl cellulose (CMC) and aloe vera gel (AV) on the rheological properties of a drink prepared from sweet corn in order to study the stability of suspended particles.

2. Materials and methods

2.1. Formulation and preparation of beverages

The drinks were formulated using sweet corn (*Zea mays* var. Saccharata). This raw material was obtained from local markets, and the following ingredients were used during beverage preparation: condensed milk added as a sweetener; aloe vera gel (AV) to enrich its nutraceutical value by adding physiologically active components; two types of hydrocolloids as stabilizers, namely, xanthan gum (XG) and sodium carboxymethyl cellulose (CMC); and preservatives such as sodium benzoate and potassium sorbate.

The preparation of the drinks began with the removal of the pulp obtained from the milling and filtering of grains. The percentage of pulp added was 20% w/w, using water as a dispersion medium and condensed milk (12.4 %w/w) for a total soluble solids concentration of 10°Brix. The mixture was heated at 72°C for 30 min and cooled to room temperature. Then, homogenization was performed with an Ultraturrax T25 homogenizer (IKA, USA) at 12,000 rpm for 5 min, and the AV and mixture of hydrocolloids was added in the amounts defined for each treatment in the experimental design. Finally, the preservatives (0.125 %w/w) were, added and the beverage was bottled.

2.2. Rotational test

Flow curves of sweet corn beverage were obtained using a viscometer DV-III Ultra (Brookfield, USA), with a geometry of coaxial cylinders, at temperatures of 10, 20, 30, 40 and 50°C, which was controlled by a thermostated bath. Three scans of shear rate (γ) in the range from 0 to 100 s^{-1} were performed – first ascending, then descending and finally ascending again – in order to eliminate possible thixotropy in the sample. The data of the last curve obtained were taken and held for every procedure in triplicate [7,21,22]. The experimental values of the different flow curves obtained were fitted to Power Law (eq. 1), Herschel-Bulkley (eq. 2) and Casson (eq. 3) models.

$$\sigma = K(\gamma)^n \tag{1}$$

$$\sigma = K(\gamma)^n + \sigma_0 \tag{2}$$

$$\sigma^{0.5} = K(\gamma)^{0.5} + \sigma_0^{0.5} \tag{3}$$

Where n is the flow behavior index, K is the consistency coefficient (Pa.s^n), and σ_0 is the "yield stress" defined as the minimum shear stress needed to start the flow.

The effect of temperature on viscosity was studied by analyzing the consistency coefficient (K) and flow index (n), using the Arrhenius equation (eq. 4 and 5) as a first approximation.

$$K = K_0 \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \tag{4}$$

$$n = n_0 \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \tag{5}$$

In this equations K_0 is the frequency factor (Pa.s^n), n_0 is the fit parameter associated with the flow index, E_a is the activation energy (J/mol), R is the gas constant (8.314 J/mol K) and T is the absolute temperature (K). The constants K_0, n_0 and E_a were obtained from an exponential fit [20, 23].

2.3. Oscillatory test

To analyze the viscoelastic behavior of sweet corn beverages, oscillatory dynamic tests were performed in an Anton Paar MCR 302 rheometer (Anton Paar GmbH, Austria), with a system of parallel plates (25 mm diameter)

and Peltier temperature control. The tests were conducted with a 1-mm gap based on the methodology defined by Mezger [24] and Augusto, Ibarz and Cristianini [16]. Initially, a sweep of amplitude between 0.01 and 100 % was carried out to establish the linear viscoelastic range (LVR), within which a constant amplitude to continue the frequency sweep of 0.01 to 100 Hz was chosen. Each procedure was conducted in triplicate at temperatures of 10, 20, 30 40 and 50°C.

For each value of oscillating frequency (ω), values for the elastic or storage modulus (G'), viscous or loss modulus (G") and the loss tangent tan (δ) were obtained. The loss tangent was evaluated at an oscillatory frequency of 0.1 Hz to study the effect of the addition of hydrocolloids and aloe vera gel on the viscoelastic behavior and stability of beverages [25]. The modules were studied as a function of frequency, fitting the experimental data to models (eq. 6 and 7) commonly used in foods and dispersions [20].

$$G' = K'(\omega)^{n'} \quad (6)$$

$$G'' = K''(\omega)^{n''} \quad (7)$$

where *K'*, *K"*, *n'* and *n"* are the coefficients of the regressions that relate elastic and viscous moduli. The effect of temperature on *G'* and *G"* was studied by analyzing *K'*, *K"*, *n'* and *n"* using the Arrhenius equation (eq. 4).

2.4. Statistical analysis

The rheological behavior of the different formulations was studied through regression analysis, and quality adjustment was established based on the coefficient of determination (R^2) and the mean square error (MSE). Furthermore, the significance of the model and parameters were calculated at a significance level of α=0.05.

For statistical analysis of the data, a central composite rotational experimental design was used, applying response surface methodology to evaluate the rheological properties of the beverage that provide stability, according to three factors studied: XG, CMC and AV concentration (tab. 1). Eighteen treatments were performed with 4 central points, and the control sample corresponds to the beverage formulated without adding hydrocolloids and AV.

The experimental design was evaluated using a multifactorial ANOVA with a level of significance of α=0.05. The response surfaces were calculated using the following second-order model (eq. 8).

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{3} \beta_i X_i + \sum_{i=1}^{3} \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i<j=1}^{3} \beta_{ij} X_i X_j \quad (8)$$

where Y is the response calculated through the model; β_0, β_i, β_{ii} and β_{ij} are the regression coefficients for the linear and quadratic intercept and interaction terms, respectively; and X is the independent variable. The relevance of the models was determined through regression analysis, a test of lack of adjustment and the coefficient of determination (R^2).

Table 1.
Experimental design of beverage formulation

Treatment	Aloe Vera (%w/w)	Xanthan gum (%w/w)	Carboxymethyl cellulose (%w/w)
1	1	0.05	0.092
2	1	0.008	0.05
3	0.159	0.05	0.05
4	0.5	0.075	0.075
5	1.5	0.025	0.075
6	1	0.05	0.05
7	1.5	0.075	0.025
8	1	0.05	0.05
9	1.5	0.025	0.025
10	1	0.05	0.008
11	1	0.092	0.05
12	1.840	0.05	0.05
13	1	0.05	0.05
14	1	0.05	0.05
15	0.5	0.025	0.075
16	1.5	0.075	0.075
17	0.5	0.025	0.025
18	0.5	0.075	0.025

Source: Elaborated by the authors

2. Results and discussion

3.1. Rotational test

The fit of the experimental data showed that the Power Law and Herschel-Bulkley model were the most suitable to explain the rheological behavior of corn beverages, as higher values of the coefficient of determination (R^2> 0.99) were achieved relative to the Casson model (R^2 between 0.94 and 0.99), and in all cases, the models were statistically significant (p value <0.05). However, when analyzing the values of the mean square error (MSE), the Power Law model has less deviation than the Herschel-Bulkley model.

Regarding the significance of the obtained adjustment rheological parameters, it was found that the "yield stress" (σ_0), which is present in the Herschel-Bulkley and Casson models, was not significant in any treatment (p value> 0.05). These results led us to select the Power Law model as the most suitable to explain the behavior of the flow in beverages formulated.

Fig. 1 shows the fit of the experimental data of some treatments and the control sample. Clearly, the flow behavior of corn beverages deviates from Newtonian character. The control sample showed values of flow index (n) between 1.07 and 1.65, typical of shear-thickening behavior, which can be attributed to the presence of corn starch in the suspension [14,20]. In contrast, beverages formulated with CMC, XG and AV showed values of flow index (n) varying from 0.5-0.9, indicating shear-thinning behavior. This shows that the addition of hydrocolloids significantly affects the rheological behavior of beverages, as demonstrated in previous studies

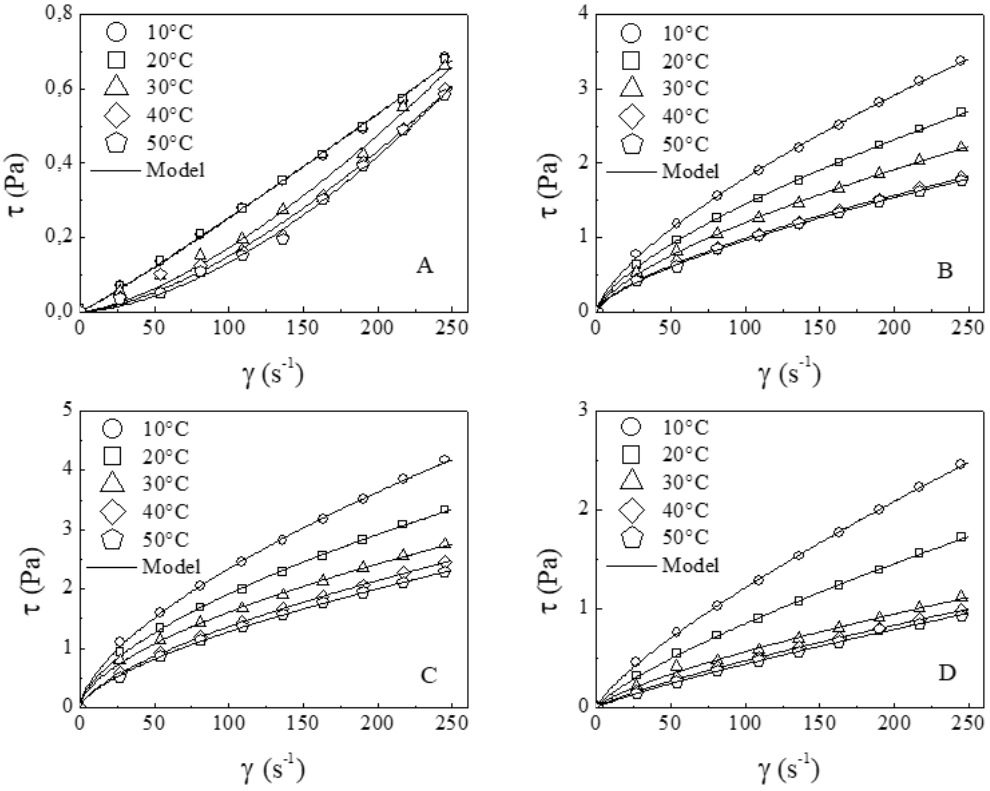


Figure 1. Flow curve of sweet corn beverages fitted to the Power Law model. A: Control, B: Central point, C: Upper axial point and D: Lower axial point. Source: Elaborated by the authors

[4,7,26-28]. Additionally, it has been found that the XG, CMC, and AV confer shear-thinning flow, and XG confers high viscosities at low rates of deformation, features that contribute to the stability of suspended particles [3,29-32].

The consistency coefficient (K) in corn beverages formulated with hydrocolloids presented values between 0.0036 and 0.2070 Pa.s^n, which are within the ranges reported in the literature [20]. The dependence of the K value on temperature was satisfactorily described by the Arrhenius equation and setting parameters shown in tab. 2. It was observed that K decreases with temperature, which indicates a behavior similar to the viscosity. These results are consistent with those found by other authors [13,22,33-36]. This could have occurred because the temperature is an indirect measure of the internal energy, that increases and the intermolecular forces are reduced, causing its detachment and facilitating movement and vibration, which leads to less consistency or resistance [37].

Due to the importance of studying the behavior of drinks during refrigerated storage, the behavior of the consistency coefficient to a temperature of 10°C was analyzed. In these conditions a significant effect of XG on the K value (p value <0.05) was found, whereas other factors did not influence the K value, indicating that a greater concentration of gum increases the consistency coefficient (fig. 2a). This is because the gum has a rigid isotropic structure of elongated rods with a random orientation relative, and its structure changes when the concentration is increased in the dispersion, resulting in formation of molecular interactions with high-molecular-weight aggregates and causing an increase in apparent viscosity [31,38-40]. Moreover, treatments 8, 11, 16, and 18, showed a higher coefficient of consistency at 10°C, which promotes suspension stability.

A significant effect of XG and AV on K_0 value (p value <0.05) was found, whereas CMC did not affect the K_0 value. Higher values of K_0 were obtained following a higher concentration of XG and a lower concentration of AV (Fig. 2b). Thus, AV concentration has an impact on the effect of gum, indicating a possible interaction between components. It has been shown that the functionality of a hydrocolloid is determined by the way it is mixed with other non-gelling ingredients [3]. XG is an anionic polysaccharide, and the presence of some components in the AV gel, such as salts and acids, affect ionic strength and load balancing in the system and thus its functionality [41].

The parameters of the consistency coefficient and frequency factor fitted to the quadratic model are shown in tab. 3. High coefficients of determination (R^2>0.90), and no significant lack of fit was obtained, indicating that the model is adequate to explain the behavior of these variables.

Table 2.
Fit parameters of the Arrhenius model

Treatment	Constants		R^2		Ea (kJ/mol)
	K0	n0	K parameter	n parameter	
1	5.90E-04	0.5190	0.9410	0.8876	11.4009
2	3.84E-07	1.6027	0.9905	0.7457	24.7166
3	4.12E-03	0.3853	0.9824	0.7793	7.1368
4	6.63E-03	0.3497	0.8412	0.5488	6.9723
5	2.69E-07	1.1592	0.9995	0.7740	28.4626
6	7.02E-04	0.5548	0.9907	0.4109	10.9654
7	1.52E-05	0.8846	0.9496	0.1959	21.5055
8	1.23E-07	0.0373	0.9627	0.6021	32.5717
9	1.87E-07	1.2782	0.9977	0.8955	27.7705
10	3.57E-06	0.9888	0.9896	0.4227	22.8265
11	2.18E-03	0.1828	0.8831	0.8058	10.6369
12	4.80E-06	0.8843	0.9985	0.2594	23.1282
13	1.49E-05	0.8415	0.9823	0.2649	20.6616
14	6.02E-06	0.8097	0.9984	0.1950	22.6898
15	1.34E-07	1.5518	0.9822	0.6503	30.6409
16	3.19E-04	0.8728	0.8764	0.1542	14.2953
17	7.17E-07	1.4094	0.9862	0.3791	25.3889
18	2.61E-03	0.4459	0.7793	0.4671	9.3439
Control	2.80E-16	52.7168	0.9015	0.8804	70.0709

Source: Elaborated by the authors

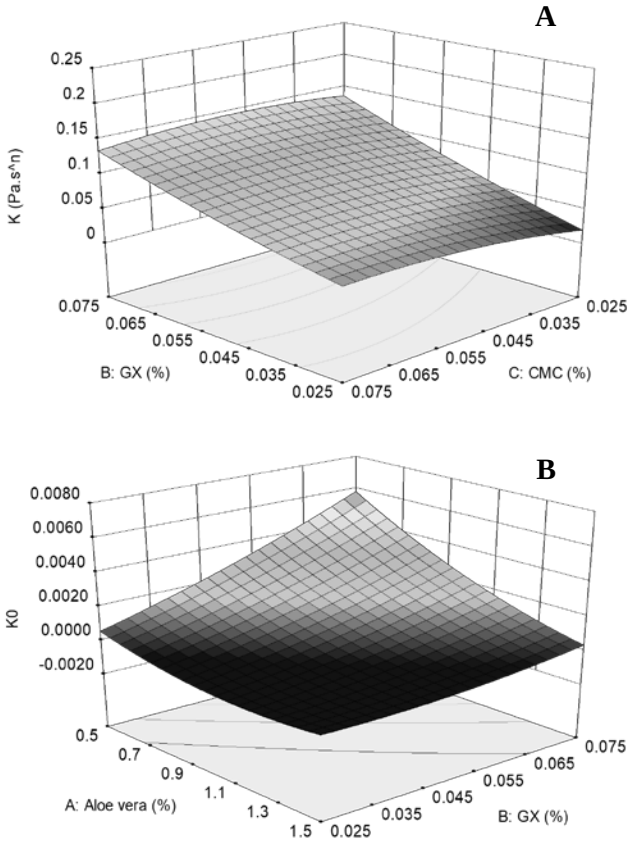


Figure 2. Response Surfaces.
A: Consistency coefficient (K) and B: frequency factor (K0) of sweet corn beverages.
Source: Elaborated by the authors

Table 3.
Coefficients of fit to the quadratic model for rheological parameters of sweet corn beverages

Coefficient	K (Pa.s^n) (10 °C)	K_0 (Pa.s^n)
β_0	-0.0624	-0.0003
β_1	0.0092*	-0.0013
β_2	1.6791	0.0335
β_3	2.2558*	0.0033*
β_{11}	-0.0122*	0.0027
β_{12}	0.0820*	-0.0891
β_{13}	0.1760*	-0.0372*
β_{22}	-0.0122*	0.5104*
β_{23}	-12.6800*	0.8649*
β_{33}	-16.1316*	0.0616*
R^2	0.9617	0.9373
Lack of fit (p value)	0.7427*	0.7199*
Model (p value)	0.0001	0.0007

Source: Elaborated by the authors. *Not significant (p>0.05)

The flow behavior index (n) of the drinks was not properly adjusted to the Arrhenius model in most of the treatments (tab. 2). Similar results have been reported in other studies [20,30]. The behavior of the flow index of corn beverages at 10 °C was not significantly affected by the factors studied (p value >0.05). Therefore, at the storage temperature, it can be assumed that the flow index (n) is constant across all concentrations of gum and AV.

In the control sample, the Ea value was higher than that in the beverages formulated with XG, CMC and AV, indicating a significant effect of temperature on viscosity [14,33,42,43]. Of the three components, only the XG concentration had a significant effect on Ea (p value<0.05), which may be caused by conformational changes that occur during heating gum affecting the viscosity of solutions [3,44].

3.2. Oscillatory test

From the amplitude sweep a value of 0.3 % was selected for frequency sweeps. The behavior of the storage modulus (G') and loss modulus (G") as a function of oscillatory frequency (ω) of 0.0628 to 628 rad/s (0.01-100Hz) at different temperatures was plotted (Fig. 3). It is noted that G' and G" tend to increase with the oscillatory frequency. The storage modulus (G') was always higher than the loss modulus (G") over a wide frequency range, approximately from 2.5 to 628 rad/s (0.4 to 100 Hz). For high frequencies of oscillation the elastic properties are predominantly viscous, indicating weak character or viscoelastic gel in corn beverages [20,24]. This behavior is confirmed by the values of loss tangent (tan (δ)), which was lower than unity (tan (δ) <1) in a large high-frequency range (Fig. 4). At low frequencies, the behaviors of some drinks have cross-over points in which G" prevails over G'. This phenomenon is typical of concentrated solutions and has been observed in beverages stabilized with similar concentrations of gums [4,17,45].

The fit to second-order models indicates that the viscoelastic behavior of drinks (G' and G") is dependent on oscillatory frequency, with R^2>0.94 and R^2>0.97, respectively. In general, the values of consistency coefficient

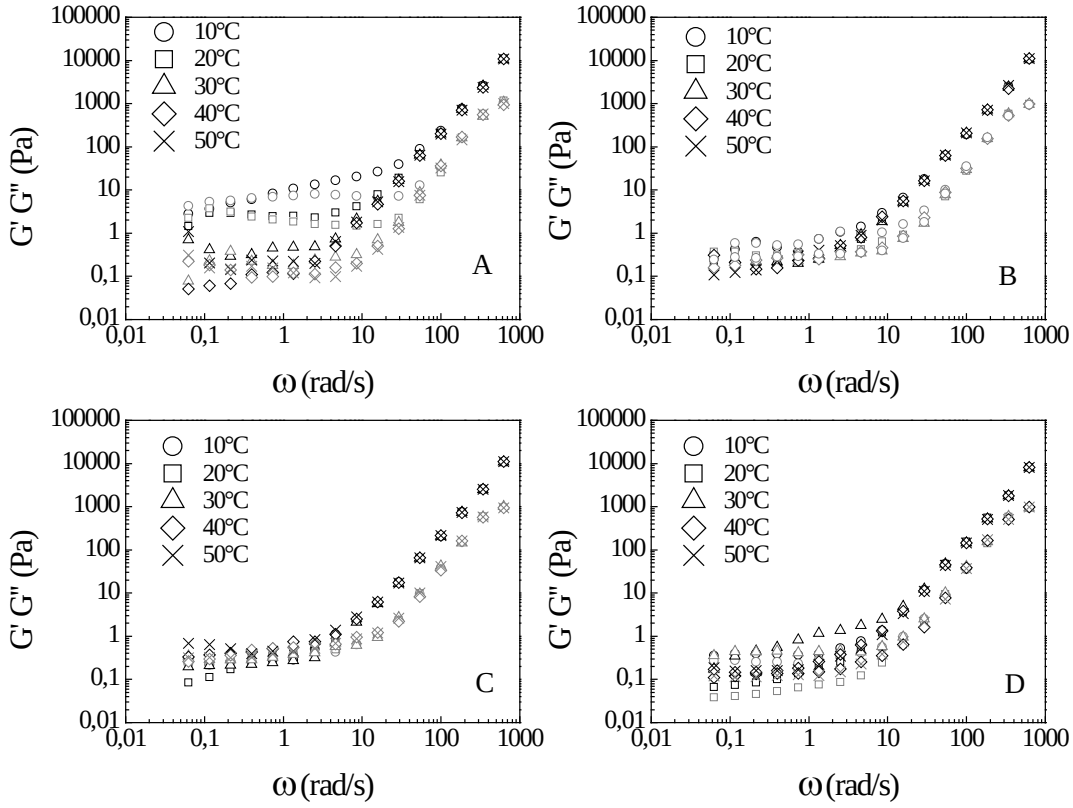


Figure 3. Storage (G') and loss (G") modules of sweet corn beverages. A: Control, B: Central point, C: Upper axial point and D: Lower axial point. Source: Elaborated by the authors

K' were higher than the values of K", confirming that the elastic component overrides the viscous component (G'> G"). This phenomenon has been observed in fruit juices and other products derived from plants [5,16,37,46]. The values for n' were higher than the values of n". This implies that G' is more dependent than G" on oscillating frequency [37]. At low frequencies (<2.5 rad/s), G' and G" modules were almost independent of oscillatory frequency and reached similar values. The effect of the concentration of XG, CMC and AV on the parameters of fit to second-order models, K', K", n' y n", was not statistically significant.

The adjustment of K', K", n' and n" (eq. 6 and 7) to the Arrhenius equation showed that the viscoelastic behavior is not satisfactorily described by this model (R^2<0.5), then there is no linear dependence between the viscoelastic parameters studied and the temperature.

The loss tangent tan (δ) has been considered as a relevant measure of physical stability, with tan(δ)<1 behavior indicating some form of stable dispersion [24]. It has also been shown that when tan (δ) <0.5, dispersions stabilized with gums are less susceptible to phase separation [25]. Consequently, this parameter was evaluated at a frequency of 0.1 Hz to study the effect of the concentration of hydrocolloids and aloe vera gel, as well as the effect of the temperature, on the viscoelastic properties of corn beverages. The frequency value (0.1 Hz) was selected because that point produces low deformation conditions of the product or rest, such as during storage and sedimentation of suspended particles [37].

Tan (δ) at 0.1 Hz is not statistically significant affected by temperature (p value >0.05), as shows treatments studied (Fig. 4), even this behavior is more evident at higher frequencies. Additionally, the loss tangent is not affected by the concentration of gums and AV (p value >0.05) at storage conditions of 0.1 Hz and temperature of 10°C. It is possible to establish that the average value of tan (δ) in beverages formulated with hydrocolloids was 0.94, slightly higher than the control beverage with a value of 0.85; however, in both cases, some stability was observed (tab. 4).

Values of tan (δ) under the established frequency and temperature conditions were in the range of 0.5-0.7 and were achieved with treatments 3, 4, 6, 8, 13 and 14. Treatments 6, 8, 13 and 15 correspond to the central point of the experimental design, that is, XG and CMC concentrations of 0.05 %w/w and 1 %w/w AV. Treatments 3 and 4 correspond to equal concentrations of gum (0.05 %w/w and 0.075% w/w, respectively), and lower AV concentrations (<0.5 %w/w). Therefore, it is evident that the desirable viscoelastic properties (tan (δ) <1) are achieved at gum concentrations ≥ 0.05% w/w in the same proportion and a maximum concentration of 1% w/w AV.

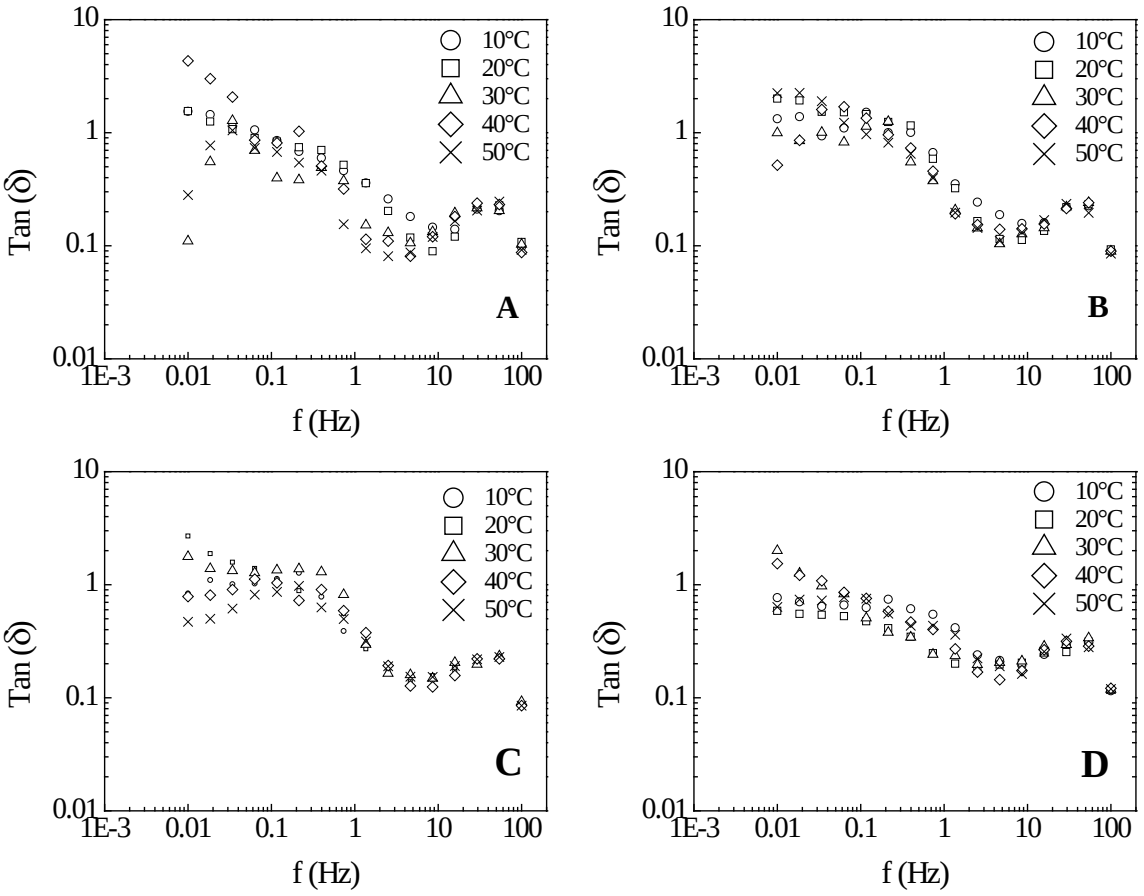


Figure 4. Loss tangent of sweet corn beverages.
A: Control, B: Central point, C: Upper axial point and D: Lower axial point.
Source: Elaborated by the authors

Table 4.
Loss tangent values of the experimental design

Treatment	Tan (δ) evaluated at 0.1Hz
1	0.72 ± 0.24
2	1.14 ± 0.51
3	0.68 ± 0.25
4	0.63 ± 0.15
5	0.51 ± 0.08
6	0.62 ± 0.23
7	1.24 ± 0.45
8	0.68 ± 0.36
9	1.35 ± 0.61
10	1.33 ± 0.27
11	1.16 ± 0.06
12	1.05 ± 0.71
13	0.70 ± 0.12
14	0.60 ± 0.53
15	1.30 ± 0.11
16	1.00 ± 0.17
17	1.00 ± 0.13
18	1.08 ± 0.17
Control	0.85 ± 0.19

Source: Elaborated by the authors

4. Conclusions

The addition of hydrocolloids and aloe vera gel to formulated beverages with sweet corn induced significant changes in flow behavior, from a shear-thickening to shear-thinning character. In general, the behavior of drinks was satisfactorily described by the Power Law model. The parameters associated with the viscosity exhibited temperature dependence by an appropriate fit to the Arrhenius equation. The activation energy results indicate that the addition of aloe vera and hydrocolloids increased stability of the beverages when temperature variation is produced since its viscosity is less affected than the viscosity of the beverage without stabilizers. The viscoelastic profile of beverages formulated with gums and aloe vera gel was found to have weak gel predominance of the elastic component compared to the viscous component on a wide range of frequencies, which demonstrates good stability of the suspension. However, these properties were most suitable when high concentrations of hydrocolloid (≥ 0.05% w/w) and low concentrations of aloe vera (≤ 1% w/w) were added, and the stability was retained at conditions of low strain.

Acknowledgments

Thanks to Dirección de Investigación y Extensión (DIME) -Universidad Nacional de Colombia-Sede Medellín for partially funding this research. We would also like to show our gratitude to the research group "Procesos Agroindustriales y Desarrollo Sostenible (PADES)" of the Universidad de Sucre (Colombia/South America) for facilitating the use of equipment during the experimental phase.

References

[1] Luchsinger, A. y Camilo, F., Rendimiento de maíz dulce y contenido de sólidos solubles. IDESIA, 26(3), pp. 21-29, 2008.

[2] Genovese, D.B., Lozano, J.E. and Rao, M.A., The rheology of colloidal and non colloidal food dispersions. Journal of Food Science, 72(2), pp. 11-20, 2007. DOI: 10.1111/j.1750-3841.2006.00253.x

[3] Norton, I., Spyropoulos, F. and Cox, P., Practical food rheology - an interpretive approach, 1st ed., Oxford, John Wiley & Sons, Ltd., 2011, pp. 61-110.

[4] Abbasi, S. and Mohammadi, S., Stabilization of milk-orange juice mixture using Persian gum: Efficiency and mechanism. Food Bioscience, 2 (1), pp. 53-60, 2017. DOI: 10.1016/j.fbio.2013.04.002

[5] Ahmed, J., Ramaswamy, H.S. and Sashidhar, K.C., Rheological characteristics of tamarind (*Tamarindus indica* L.) juice concentrates. LWT, 40(2), pp. 225-231, 2007. DOI: 10.1016/j.lwt.2005.11.002

[6] Astolfi, Z., Telis, V., Oliveira, E., Coimbrac, J. and Telis, J., Rheology and fluid dynamics properties of sugarcane juice. Biochemical Engineering Journal, 53(3), pp. 260-265, 2011. DOI: 10.1016/j.bej.2010.11.004

[7] Ibrahim, G., Hassan, I., Abd-Elrashid, A., El-Massry, K., Eh-Ghorab, A., Ramadan, M. and Osman, F., Effect of clouding agents on the quality of apple juice during storage. Food Hydrocolloids, 25(1), pp. 91-97, 2011. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2010.05.009

[8] Liang, C., Xiaosong, H., Yuanying, N., Jihong, W., Fang, C. and Xiaojun, L., Effect of hydrocolloids on pulp sediment, white sediment, turbidity and viscosity of reconstituted carrot juice. Food Hydrocolloids, 20(8), pp. 1190-1197, 2006. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2006.01.010

[9] Eshun, K. and He, Q., Aloe vera: a valuable ingredient for the food, pharmaceutical and cosmetic industries - A review. Journal of Food Science and Nutrition, 4(44), pp. 91-96, 2004. DOI: 10.1080/10408690490424694

[10] Javed, S. and Rahman, A., Aloe vera gel in food, health products, and cosmetics industry, in Rahman, A. Studies in Natural Products Chemistry, 41, Pakistan, H.E.J. Research Institute of Chemistry - University of Karachi, Elsevier, 2014, pp. 261-285.

[11] Rao, M.A., Rheological properties of fluid foods, in Rao, M.A., Rizvi, S.S.H. and Datta, A.K., Engineering Properties of Foods, 3th ed., Boca Raton FL, CRC Press, 2005, pp. 41-91.

[12] Peker, S., Helvacı, Ş., Yener, H B., Alparslan, A. and İkizler, B., Non-Newtonian behavior of solid-liquid suspensions, in Solid-Liquid Two Phase Flow, Amsterdam, Elsevier, 2008, pp. 71-166.

[13] Quek, M.C., Chin, N.L. and Yusof, Y.A., Modelling of rheological behaviour of soursop juice concentrates using shear rate-temperature-concentration superposition. Journal of Food Engineering, 118(4), pp. 380-386, 2013. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2013.04.025

[14] Steffe, J.F. Rheological methods in food process engineering, 2nd ed., East Lansing MI, Freeman Press, 1996, pp. 158-250.

[15] Augusto, P., Falguera, V., Cristianini, M. and Ibarz, A., Viscoelastic properties of tomato juice. Procedia Food Science, 1(1), pp. 589-593, 2011. DOI: 10.1016/j.profoo.2011.09.089

[16] Augusto, P., Ibarz, A. and Cristianini, M., Effect of high pressure homogenization (HPH) on the rheological properties of tomato juice: creep and recovery behaviours. Food Research International, 54(1), pp. 169-176, 2013. DOI: 10.1016/j.foodres.2013.06.027

[17] Chaikham, P. and Apichartsrangkoon, A., Comparison of dynamic viscoelastic and physicochemical properties of pressurised and pasteurised longan juices with xanthan addition. Food Chemistry, 134(4), pp. 2194-2200, 2012. DOI: 10.1016/j.foodchem.2012.04.056

[18] McCann, T.H., Fabre, F. and Day, L., Microstructure, rheology and storage stability of low-fat yoghurt structured by carrot cell wall particles. Food Research International, 44(4), pp. 884-892, 2011. DOI: 10.1016/j.foodres.2011.01.045

[19] Moelants, K.R.N., Cardinaels, R., Jolie, R., Verrijssen, T.A.J., Van Buggenhout, S., Zumalacarregui, L.M., Hendrickx, M.E., Relation between particle properties and rheological characteristics of carrot-derived suspensions. Food and Bioprocess Technology, 6(5), pp. 1127-1143, 2013. DOI: 10.1007/s11947-011-0718-0

[20] Rao, M.A., Rheology of fluid and semisolid foods: principles and applications, 1st ed., Gaithersburg, Aspen Publishers, Inc., 1999, pp. 25-356.

[21] Meng, Y. and Rao, M., Rheological and structural properties of cold-water-swelling and heated cross-linked waxy maize starch dispersions prepared in apple juice and water. Carbohydrate Polymers, 60(3), pp. 291-300, 2005. DOI: 10.1016/j.carbpol.2005.01.012

[22] Vandresen, S., Quadri, M.G.N., de Souza, J.A.R. and Hotza, D., Temperature effect on the rheological behavior of carrot juices. Journal of Food Engineering, 92(3), pp. 269-274, 2009. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2008.11.010

[23] Chin, N.L., Chan, S.M., Yusof, Y.A., Chuah, T.G. and Talib, R.A., Modelling of rheological behaviour of pummelo juice concentrates using master-curve. Journal of Food Engineering, 93(2), pp. 134-140, 2009. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2009.01.005

[24] Mezger, T.G. The rheology handbook, 2nd ed., Hanover, Vicentz Network GmbH & Co KG, 2006, pp. 135-174.

[25] Kuentz, M. and Röthlisberger, D., Rapid assessment of sedimentation stability in dispersions using near infrared transmission measurements during centrifugation and oscillatory rheology. European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics, 56(3), pp. 355-361, 2003. DOI: 10.1016/S0939-6411(03)00108-5

[26] Cho, H.M. and Yoo, B., Rheological characteristics of cold thickened beverages containing xanthan gum based food thickeners used for dysphagia diets. Journal of the Academy of Nutrition and Dietetics, 115(1), pp. 106-111, 2015. DOI: 10.1016/j.jand.2014.08.028

[27] Genovese, D.B. and Lozano, J.E., The effect of hydrocolloids on the stability and viscosity of cloudy apple juices. Food Hydrocolloids, 15(1), pp. 1-7, 2001. DOI: 10.1016/S0268-005X(00)00053-9

[28] Janhøj, T., Frøst, M.B. and Ipsen, R., Sensory and rheological characterization of acidified milk drinks. Food Hydrocolloids, 22(5), pp. 798-806, 2008. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2007.03.006

[29] Benchabane, A. and Bekkour, K., Rheological properties of carboxymethyl cellulose (CMC) solutions. Colloid and Polymer Science, 286 (10), pp. 1173-1180, 2008. DOI: 10.1007/s00396-008-1882-2

[30] Dark, M., Verma, R.C. and Sharma, G.P., Flow characteristics of juice of “Totapuri” mangoes. Journal of Food Engineering, 76(4), pp. 557-561, 2006. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2005.06.002

[31] García, F., Santos, V.E., Casas, J.A. and Gómez, E., Xanthan gum: production, recovery, and properties. Biotechnology Advances, 18(7), pp. 549-579, 2010. DOI: 10.1016/S0734-9750(00)00050-1

[32] Opazo, M., Tabilo, G., Vega, A., Miranda, M. and Pérez, M., Effects of high hydrostatic pressure (HHP) on the rheological properties of Aloe vera suspensions (*Aloe barbadensis* Miller). Innovative Food Science and Emerging Technologies, 16(1), pp. 243-250, 2012. DOI: 10.1016/j.ifset.2012.06.006

[33] Bezerra, C., da Silva, L., da Costa, R., Mattietto, R. and Rodriguez, A., Comportamento reológico de suco misto elaborado com frutas tropicais. Brazilian Journal of Food Technology, 16(2), pp. 155-162, 2013. DOI: 10.1590/S1981-67232013005000020

[34] Braga, A., Rodrigues, A., da Silva, L. and Araújo, L., Avaliação da influência da temperatura e do tratamento enzimático no comportamento reológico do suco de abacaxi pérola (*Ananas comosus* L. Merr.). Revista Brasileira de Fruticultura, 35(1), pp. 226-237, 2013.

[35] Magerramov, M., Abdulagatov, A., Azizov, N.D. and Abdulagatov, I.M., Effect of temperature, concentration, and pressure on the viscosity of pomegranate and pear juice concentrates. Journal of Food Engineering, 80(2), pp. 476-489, 2007. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2006.05.030

[36] Shamsudin, R., Su, C., Mohd, N. and Wan, W., Rheological properties of ultraviolet-irradiated and thermally pasteurized Yankee pineapple juice. Journal of Food Engineering, 116(2), pp. 548-553, 2013. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2012.12.031
[37] Falguera, V. and Ibarz, A., Juice processing: quality, safety and value-added opportunities, 1s ed. Boca Raton, FL., CRC Press, 2014, pp. 83-136.
[38] Lee, H.C. and Brant, D.A., Rheology of concentrated isotropic and anisotropic xanthan solutions. 1.A rod like low molecular weight sample. Macromolecules, 35(6), pp. 2212-2222, 2002. DOI: 10.1021/ma011526m
[39] Yaseen, E., Herald, T.J., Aramouni, F M. and Alavi, S., Rheological properties of selected gum solutions. Food Research International, 38(2), pp. 111-119, 2005. DOI: 10.1016/j.foodres.2004.01.013
[40] Xu, L., Xu, G., Liu, T., Chen, Y. and Gong, H., The comparison of rheological properties of aqueous welan gum and xanthan gum solutions. Carbohydrate Polymers, 92(1), pp. 516- 522, 2013. DOI: 10.1016/j.carbpol.2012.09.082
[41] Lad, V.N. and Murthy, Z.V., Rheology of Aloe barbadensis Miller: a naturally available material of high therapeutic and nutrient value for food applications. Journal of Food Engineering, 115(3), pp. 279-284, 2013. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2012.10.036
[42] Da Silva, J.A.L., Goncalves, M.P. and Rao, M.A., Rheological properties of high methoxyl pectin and locust bean gum solutions in steady shear. Journal of Food Science, 57(2), pp. 443-448, 1992. DOI: 10.1111/j.1365-2621.1992.tb05513.x
[43] Haminuik, C.W.I., Sierakowski, M.R., Vidal, J.R.M.B. and Masson, M.L., Influence of temperature on the rheological behaviour of whole araca pulp (*Psidium cattleianum* sabine). Food Science and Technology, 39(4), pp. 426-430, 2006. DOI: 10.1016/j.lwt.2005.02.011
[44] Tako, K. and Nakamura, S., Evidence for intramolecular associations in xanthan molecules in aqueous media. Agricultural and Biological Chemistry, 53(7), pp. 1941-1946, 1989. DOI: 10.1080/00021369.1989.10869569
[45] Zhong, Q. and Daubert, C.R., Food rheology, in M. Kutz Handbook of farm, dairy, and food machinery, 2nd ed., New York, Academic Press, 2013, pp. 391-414.
[46] Sesmero, R., Mitchell, J.R., Mercado, J.A. and Quesada, M.A., Rheological characterisation of juices obtained from transgenic pectate lyase-silenced strawberry fruits. Food Chemistry, 116 (2), pp. 426-432, 2009. 10.1016/j.foodchem.2009.02.058

K.P. Contreras-Lozano, is BSc. in Agroindustrial Eng. from the Universidad de Sucre, Colombia, graduated in 2010, received the MSc. degree in Agroindustrial Engineering in 2016 from Universidad Nacional de Colombia. She is a researcher and professor in Universidad de Sucre, Colombia. Her research interests include: natural polymers, mainly starch and its food and biotechnological applications, biomaterials, agroindustrial residues, and food rheology.
ORCID: 0000-0002-5237-1490.

H.J. Ciro-Velásquez, received the BSc. Eng in Mechanical Engineering in 1995 from the Universidad Nacional de Colombia, the MSc. degree in Mechanical Engineering in 1998 from the University of Puerto Rico-Mayaguez Campus, and the PhD degree in Food Engineering in 2010 from the Universidade Estadual de Campinas-Brazil. Currently, he is an associate professor in the Agricultural and Food Engineering Department, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Colombia. His research interests include: simulation, modeling and food processing; food rheology; and food drying.
ORCID: 0000-0002-4398-0470

C.J. Márquez-Cardozo, received the BSc. Eng in Agricultural Engineering in 1993 from the Universidad Nacional de Colombia, the MSc. degree in Food Science and Technology in 2003 from the Universidad de La Habana, Cuba, and the PhD degree in Agricultural Sciences in 2010 from the Universidad Nacional de Colombia. Currently, he is an associate professor in the Agricultural and Food Engineering Department, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Colombia. His research interests include: agroindustry, post-harvest and industrialization of fruit and vegetables.
ORCID: 0000-0002-0106-6875.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Medio Ambiente

Oferta de Posgrados

Especialización en Aprovechamiento de Recursos Hidráulicos
Especialización en Gestión Ambiental
Maestría en Ingeniería Recursos Hidráulicos
Maestría en Medio Ambiente y Desarrollo
Doctorado en Ingeniería - Recursos Hidráulicos
Doctorado Interinstitucional en Ciencias del Mar

Mayor información:

E-mail: acma_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5105

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

M2M system for efficient water consumption in sanitary services, based on intelligent environment

Carlos González-Amarillo, Cristian Cárdenas-García & Miguel Mendoza-Moreno

TelemaTics Research Group, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia. caagonzalezam@unal.edu.co, cristianleonardo.cardenas@uptc.edu.co, miguel.mendoza@uptc.edu.co

Received: October 12th, de 2017. Received in revised form: January 16th, 2018. Accepted: January 30th, 2018

Abstract
This paper describes the fulfilled research process for the development of an intelligent system for the efficient use of water in sanitary units in the domestic environment. Fundamentally, the research focused on two processes, firstly, the development of a high reliability system to monitor the actual consumption of sanitary units and secondly the development of an enhanced system for the intelligent control of consumption of the same sanitary unit. The research highlights the constitution of an M2M technological solution, with high precision that impacts environmental sustainability, through the generation of awareness regarding the rational use of water resources in daily actions of personal hygiene.

Keywords: Internet of things (IoT); smart buildings; smart water; sustainability and eco-innovation; M2M (machine to machine); electronic instrumentation; smart bathroom.

Sistema M2M para el consumo eficiente de agua en servicios sanitarios, basado en ambientes inteligentes

Resumen
Este documento describe el proceso investigativo cumplido para el desarrollo de un sistema inteligente para el uso eficiente del agua en unidades sanitarias del entorno doméstico. Fundamentalmente la investigación se centró en dos procesos, en primer lugar, el desarrollo de un sistema de alta confiabilidad para monitorear los consumos reales de las unidades sanitarias y en segundo lugar el desarrollo de un sistema realzado para el control inteligente de los consumos de la misma unidad sanitaria. La investigación destaca la constitución de una solución tecnológica M2M, de alta precisión que impacta la sostenibilidad ambiental, por medio de la generación de conciencia respecto al uso racional del recurso hídrico en las acciones cotidianas de higiene personal.

Palabras clave: Internet de las cosas (IoT); edificios inteligentes; gestión agua inteligente; sostenibilidad y eco-innovación; máquina a máquina (M2M); instrumentación electrónica; baño inteligente.

1. Introduction

A residential sanitary unit is a space dedicated to the care of personal hygiene and the satisfaction of the physiological needs of the human being, these units are designed under universal standards of functionality and service for the welfare and basic health of each person.

Under limited conditions in the cultural and social sphere, a sanitary unit is equipped with basic furniture including toilet, sink and shower. The advances made by the furniture industry in countries like Colombia are subject to the management of materials and mechanical techniques of operation (hydraulic), rudimentary in relation to the world. The design, technological innovation, technique and structure of the furniture are inefficient if the environmental impact and the rational consumption of water are evaluated as a parameter of evaluation, this priority being in line with basic sanitation and universal guidelines, with the Millennium Development Goals, as defined by the United Nations.

How to cite: González-Amarillo, C., Cárdenas-García, C. and Mendoza-Moreno, M., M2M System for efficient water consumption in sanitary services, based on intelligent environment. DYNA, 85(204), pp. 311-318, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

The reasons why it is possible to integrate technologies from different areas of engineering in the area of electronics and information systems go through a series of historical highs where it has been possible to achieve improvements in design, affordability, communication and instrumental intelligence in the development of tasks related to the security of user consumption information [1].

Hydraulic mechanics has always governed the systems in charge of guaranteeing the operation of the sanitary units. For this reason, a technological solution is based on electronic instrumentation, variable tracking, real-time communication and universalization of data via the Internet [2,3].

Given the conditions of relationship and operation of sensor and actuator systems (orchestration), protocols and techniques of communication, resource control and real-time monitoring, the basis of an IoT (Internet of Things-paradigm that allows designing technological schemes with a certain level of automation in the interconnected world) to positively impact the adequate consumption of essential natural resources [4]. This orchestration gives the system a new dimension to be enhanced by its functional increase in terms of hardware as an element and software as logic.

Regarding the logic designed in the development of the proposed system, Smart Water is a concept that promotes rational consumption and intelligence in the management of water resources. From this, the researchers identify that the sanitary units may well optimize their operation as IoT systems, making their main operating resource, water, enriched as Smart Water.

Due to the above, the value of this project is determined by: 1) innovation in the application of electronic instrumentation to promote environmentally friendly and rational use of water. 2) Application of the IoT paradigm for orchestrate a solution that enhances the basic elements of a sanitary unit to treat the data that will result in proactive actions on the user. 3) Obtaining real results from a case study, demonstrating the feasibility and relevance of that which was proposed and implemented.

2. Research implications

The research that derived from this product was based on the design and implementation of a system of monitoring and control of water consumption in sanitary units of domestic use. The system measures the variable flow rate through the YF-S2011 sensor, which is fitted in conventional equipment that provides the service of water supply in a bathroom (sink, shower and toilet tank). The flow time and the amount of water consumed per person are measured, these data are initially stored in an external memory in order to be subjected to a comparative historical analysis before and after the system implementation.

This development aimed to intervene in the conventional sanitary system of a bathroom with accessories and technological resources, based on the IoT paradigm, so that the interventions give the space a character of a controlled, intelligent environment.

The research progress has made it possible to establish that in general the initiatives of innovation and technological implementation for the home deal weakly with functions of adaptive control, which clearly highlights the need to promote the rational use of resources and the way of managing them, tending to stimulate the user's awareness for their home and environment.

In the deployment phase which was implemented, the adaptation of a sanitary unit (bathroom) for domestic use in a residence in the city of Tunja, Colombia, which has five (5) residents, tests were done under normal conditions of daily consumption. The control system required adaptations of infrastructure (furniture and bathroom sanitary networks), with the purpose of adjusting the devices (sensors and actuators) to the requirements of the design, this being a daily process when "things" increase their functionality to become "intelligent things" (Internet of Things). At no time during the execution of the project did the normal use of the sanitary unit cease to exist, that is, the control data were acquired on the spot and improvements were always made in relation to the needs of the users, who provided their consent to participate in the study, preserving their privacy.

Interventions range from storing information with a digital calendar system to user access, mediated by a graphical environment for both interaction and visualization of water consumption in the sanitary unit. In addition, the open-loop control systems of electromechanical actuators are responsible for executing the control action of the water supply to the user. The control system implemented with actuators refers to the operation of solenoid valves, motor pumps and servomotors, which results in the development of an electronic platform corresponding to each of the stages that make up the system, namely: power stage, control stage, digital stage, stage of analysis and data tracking, and user interface stage.

The data stored in the digital calendar allow the establishment of monitoring and comparison actions in the consumption and management of the water resource in a timeline. According to the cost of m^3 of water in the location under study, it was concluded that in economic terms the difference is substantial and in terms of environmental impact the contribution is outstanding. It also allows considering this system as generating alternatives in the way of managing water consumption through an intelligent environment in the domestic bathroom.

The technological development achieved allows the design of the intelligent environment design technique to be used for any activity that generates water consumption, it increases the capacity of control in the consumption and mitigates waste. Also, it promotes water management and it intervenes in environmental sustainability with its rational use, by means of technologically adapted environments.

From the environmental perspective, water management through technological alternatives is relevant provided it generates information that promotes behavioral changes in the user [5-7].

The vital relationships that are created from the use of water and translated into electrical energy, define the planet's environmental future, framed in the areas of human performance such as economics, politics and all those that influence human well-being [8-10].

The technological alternatives developed with the approach of intelligent environments, are an opportunity to

attend spaces of high energy and water cost [11,12], therefore, management and efficiency in the consumption of water, generating the resource and its cycle, something intelligent from which derives the avant-garde concept of "intelligent water" [13-15].

The M2M (Machine to Machine) concept suggests format adaptations in computer and technologically adapted scenarios, which is why the intelligent environment developed guarantees access to information in real time, in addition to determining a degree of adaptability of the user with the system, impacting the behavior of water consumption and the rational ways of managing it.

3. System design

The development and implementation of the electronic control system for the administration and management of water in a domestic sanitary unit has four (4) stages: 1) the design of the system and the determination of the variables to be measured and controlled. 2) Electronic instrumentation, mainly in the technological intervention of furniture and sanitary networks of the domestic bathroom. 3) Hardware platform design for access, monitoring and control of the system. 4) Software development for the interoperability of sensors, actuators, digital calendar and operating logic according to the strategic order presented in the design. The four stages are linked to the real-time visualization of the system, in the interface platform.

The devices used in the development of the system can be defined based on three design criteria: 1) the sensors are an external peripheral input to the system, through which signals are obtained for further processing, analysis and treatment in software on a Microcontroller PIC18F46202. 2) these resulting signals will act on the set of external output peripherals, corresponding to the actuators, such as solenoid valves and motor pumps. 3) The system has the implementation of a Real Time Clock (RTC) module, which guarantees a digital calendar to assure the storage of data and information on the behavior of the system. The user interface was developed with a five-key logic keypad and a GLCD (Graphic Liquid Crystal Display) display.

A. Description of the implemented system

The control system for the use of water in domestic sanitary units consists of the interaction of a series of devices that orchestrated will form an intelligent environment. The water cycle in this controlled environment begins in the shower, where the supplied flow is used post-consumption as waste water or gray, for subsequent reuse in the toilet tank (first contribution regarding the efficiency of consumption). The general diagram of the elements arranged for said control process is shown in Fig. 1.

Returning the water cycle in the intelligent environment, so that the gray water of the shower is stored in the tank of the toilet. It is necessary to describe the logical sequence and action of the devices of the system. It was necessary to develop a structure that captures the gray water of the shower,

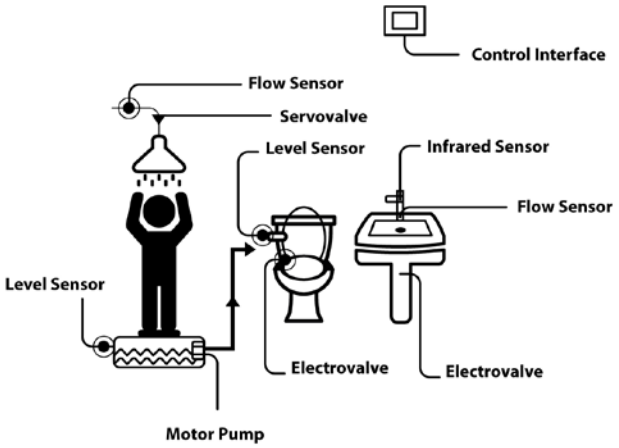


Figure 1. Abstraction of the system in the sanitary unit.
Source: The authors.

consisting of a container equipped with level sensors with greater storage capacity than that of the toilet tank. The water will flow in the path by the action of a low-power motor pump, which will act in accordance with the logic design of the condition of the container level sensors and the toilet tank. The toilet tank is equipped with an electro-valve installed in the potable water passage so that, according to the logic of the system, it allows the flow of drinking water as long as the gray water container does not have the capacity to fill it (second outstanding contribution).

The potable water supplied by the shower is always monitored and the amount consumed is stored in memory. The water supply control of the shower consists of a servomotor that has two types of control. One of constant and progressive regulation, and one of instantaneous cut, both controls are pre-programmed from the interface. In addition, the shower has a flow sensor that keeps the main system informed of the amount of water supplied.

The system cycle continues in the sink, which was technologically enhanced with a proximity sensor that allows the activation of an electro-valve that allows the passage of drinking water for use, while the hands are at a previously calibrated distance, which activate the system. This control of supply is regulated by activating or canceling the passage of drinking water. In addition, it has a flow sensor that measures the amount of water supplied and keeps the main system and the interface platform informed (third outstanding contribution, based on quantification and enabling control actions such as dosing and personalization).

Electrical power devices such as solenoid valves and the motor pump are devices that operate with a single-phase 120VAC grid, which means that the system has a power module based on a decoupling of energy sources of different natures (Continuous-Alternate) through a MOC3021 insulation device and a 12 Amp TRIAC 4020L.

B. Considerations in system design

The system is designed to process and respond to logic states of sensors and actuators in the order of the intelligent

environment, and the function each of them fulfills in the general system. One of the most important options in the structure of the system is to record the consumption of drinking water in the different elements of the bathroom (shower, washbasin and toilet). This function is one of the fundamental criteria for research towards quantification and pricing); this parameter allows comparing and evaluating both the consumption and the costs involved in the management of the water resource in the home, particularly the bathroom sanitary unit, a strategic place for this evaluation.

The adaptation of the digital calendar is a very important tool, because it allows the creation of a database to keep records of consumption and behavior in the management and analysis of both the expenditure and the saving of water resources. This part of the system is of great relevance, since it is absolutely necessary to have information to validate the system as an intelligent environment, which is able to analyze data and conditions under which water is consumed, and which also promotes inferences to behavior with respect to consumption/expenditure.

The articulation of the stages with the development of the computer system (software and hardware) correspond to the criteria centered on the design of an intelligent environment.

4. Electronic design of the system

The physical layout of the intervening elements was made in correspondence with the functions of supervision, control and performance. The logical and electronic design responds to the configuration of the sanitary unit as an intelligent environment according to the block diagram presented in Fig. 2.

The electrical and electronic circuits include analog elements and digital integrated circuits involved in the design, configured to + 5V energizing references. The microcontroller used executes tasks at a working frequency of 8 Mhz. The PWM (Pulse-Width Modulation) module, with which the shower actuator (servomotor) is operated, is detailed, which acts according to the references and limits established to guarantee the dextrorotatory and to achieve the closing of the shower valve.

In the screens presented in Fig. 3, the interaction sequences from the physical interface are observed to enable the control of water supply in the shower and subsequent monitoring of the entire system.

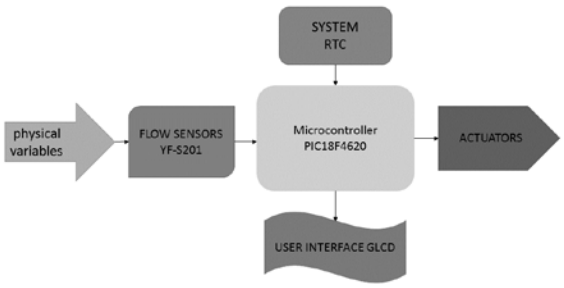


Figure 2. Block diagram for the control system in the sanitary unit.
Source: The authors.

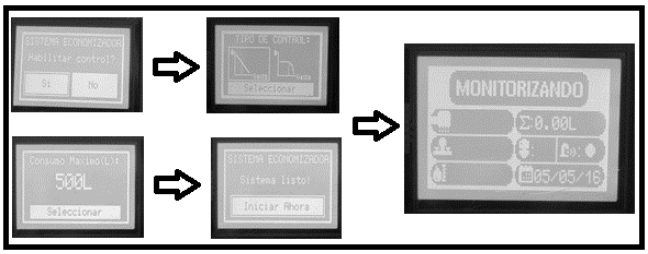


Figure 3. Navigation in the physical interface for the control of water supply.
Source: The authors.



Figure 4. Navigation in the interface platform to consult historical consumption.
Source: The authors.

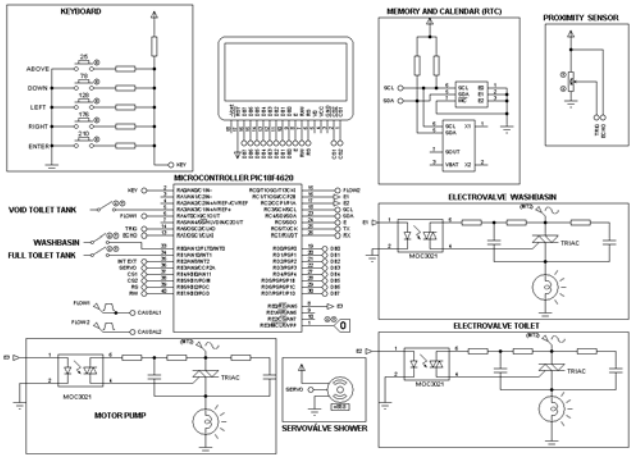


Figure 5. Electronic circuit and arrangement of elements for the control system.
Source: The authors.

The screens presented in Fig. 4 show the navigation in the system to consult the historical consumption of water by the users.

Fig. 5 shows the electronic assembly of the elements that make up the platform of the system. Some microcontroller inputs include sensors and signals from the peripheral elements of the system.

The charts that frame the different stages (digital and power) of the system correspond to the implementation necessary to ensure the orchestration of sensors and actuators within the framework of an intelligent environment elaborated from digital open-source or micro-controlled electronic platforms.

The digital flow sensor supplies signals in the form of pulses, received and processed for action in accordance with the equation calculated mathematically and characterizing its behavior. The data analysis process during the calibration

allowed us to determine that 395 pulses are required to fill a liter of water and takes approximately 16 seconds. Then, several tests are performed to determine an average factor of about 785 pulses, which take 34 seconds.

The mathematical expression of the previous test results in the characteristic equation referenced in (1).

$$y = 0.002564 * Pulsos - 0.02128 \quad (1)$$

The equation represents the behavior of the flow of water in the shower, while the flow of water in the sink is different, due to pressure, which produces substantial variations in the equation.

The source code programmed in language C determines the actions of the microcontroller that governs the behavior of the system. It is designed with a structure of libraries that allow to execute actions in parallel form, according to the state of the variables and their relationship with the intervening actuators in the development of tasks.

The flow diagram of Fig. 6 represents the algorithmic design of the monitoring and control system developed.

Fig. 7 shows photographs that represent the system fully implemented in the sanitary unit of the case study. The orchestrated devices (sensors and actuators network) are highlighted to guarantee an intelligent system of water consumption control.

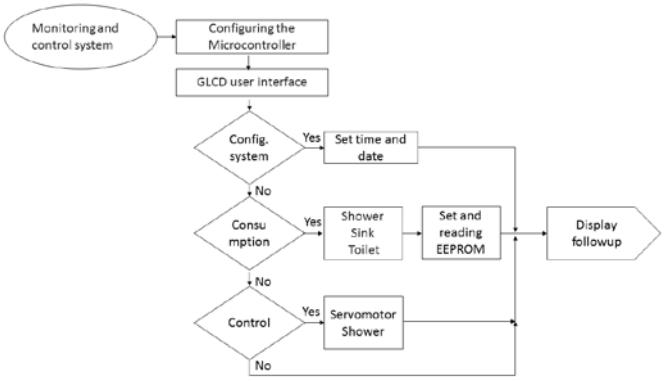


Figure 6. Flow chart for the control system algorithm.
Source: The authors.

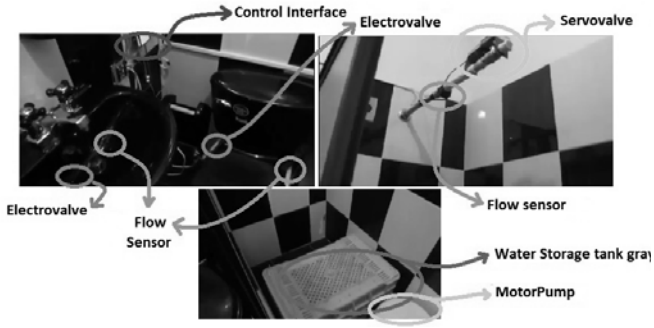


Figure 7. Implementation of the intelligent water consumption control system in a domestic bathroom.
Source: The authors.

5. Analysis of results

According to studies by the WHO (World Health Organization), the amount of water that is spent in a shower, according to the time of use is: 100 liters in 10 minutes and the average in a 5 minutes shower corresponds to 85 liters. These data show a high degree of waste, which is why this information will determine the control of water consumed in the shower by users.

Table 1.
Consumption of water without control system (phase of monitoring sink).

Water consumption in sink (without control system)	
Date	**Consumption (Liters / Day)**
20/05/2017	27
21/05/2017	38
22/05/2017	34
23/05/2017	22
24/05/2017	32
25/05/2017	26
26/05/2017	23
27/05/2017	37
28/05/2017	30
29/05/2017	26
30/05/2017	29
31/05/2017	24
01/06/2017	30
02/06/2017	29
03/06/2017	25
04/06/2017	22

Source: The authors.

Table 2.
Consumption of water without control system (phase of monitoring shower).

Water consumption in shower (without control system)	
Date	**Consumption (Liters / Day)**
20/05/2017	350
21/05/2017	323
22/05/2017	325
23/05/2017	388
24/05/2017	315
25/05/2017	311
26/05/2017	375
27/05/2017	327
28/05/2017	319
29/05/2017	339
30/05/2017	361
31/05/2017	371
01/06/2017	332
02/06/2017	317
03/06/2017	340
04/06/2017	310

Source: The authors.

Table 3.
Water consumption with control system implemented in sink.

Water consumption in sink (with control system)	
Date	**Consumption Liters / Day)**
05/06/2017	16
06/06/2017	26
07/06/2017	20
08/06/2017	29
09/06/2017	28
10/06/2017	21
11/06/2017	19
12/06/2017	17
13/06/2017	30
14/06/2017	17
15/06/2017	29
16/06/2017	23
17/06/2017	29
18/06/2017	26
19/06/2017	25
20/06/2017	23

Source: The authors.

Table 4.
Water consumption with control system implemented in shower.

Water consumption in shower (with control system)	
Date	Consumption (Liters / Day)
05/06/2017	215
06/06/2017	250
07/06/2017	244
08/06/2017	235
09/06/2017	250
10/06/2017	212
11/06/2017	242
12/06/2017	247
13/06/2017	236
14/06/2017	249
15/06/2017	241
16/06/2017	245
17/06/2017	215
18/06/2017	239
19/06/2017	217
20/06/2017	249

Source: The authors.

Due to the above, once the pipelines in the sanitary unit are fitted with the necessary electronic instrumentation, with measurement and visualization elements, the data corresponding to water consumption (monitoring phase) are recorded. The control system is subsequently implemented and data are recorded for water consumption (see Tables 1, 2, 3 and 4).

With the information collected by the system, with adaptation to the control and without adaptation to the control, regarding the biweekly consumption of water in the sink and shower, the information acquired is stored in the external memory EEPROM (Electrically Erasable Programmable Read-Only Memory), to be later plotted daily, weekly or monthly (interface phase).

Fig. 8 shows the graphical representation of the data corresponding to the consumption of water in the sink and shower for two weeks (from May 20, 2017 to June 4, 2017), this is done with the system without electronic control. Likewise, Fig. 9 shows the data corresponding to the consumption of water in the sink and shower for two weeks (from June 5, 2017 to June 20, 2017), these, with the implemented control system.

Fig. 10 shows a graphical representation of the amount of total water consumed in liters, in the 15 days that the test was implemented with the relevant variations, and the comparison of water consumption before and after the system implementation. This numerical relationship is generated by virtue of data stored in the system memory and graphically represented in the user interface platform.

The data obtained from the measurements allow to determine the amount of water that is possible to save in the bathroom, under conditions of technological adaptation. The amount of liters of water saved in the fifteen days of inspection of the implemented system is 1693 liters, with respect to the normal consumption of the family. These data suggest that in approximately one month of use of the technologically adapted sanitary unit, it is possible to save more than 3 cubic meters of water.

The information storage and interface capacity to graph historical consumption data represent a high value component in the adaptation of this type of system in the sanitary infrastructure of a household, to achieve efficiency in the consumption of water resources.

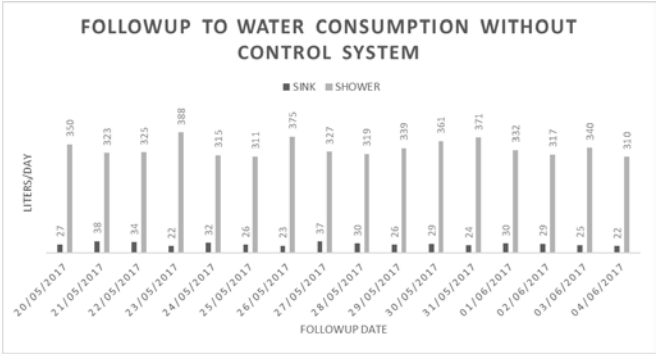


Figure 8. Monitoring of consumption without control system.
Source: The authors.

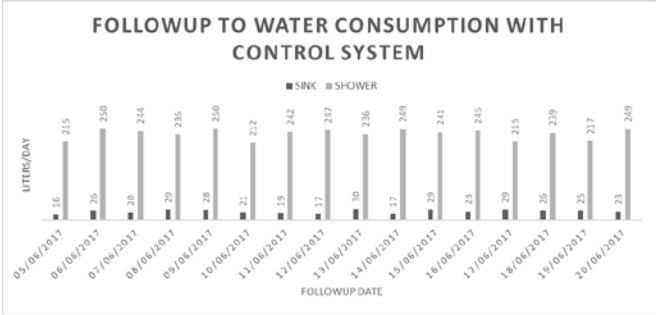


Figure 9. Monitoring of consumption with control system.
Source: The authors.

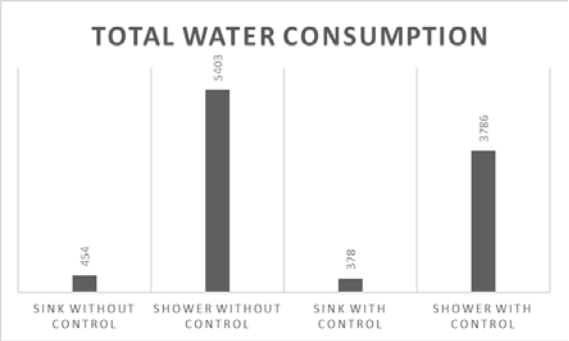


Figure 10. Comparison of water consumption in the bath.
Source: The authors.

With the implementation of the system, a critical point of the household was impacted: the irrational consumption of water. Event that allows visualizing this technological application in homes and establishments where it is necessary to use sanitary units with complete services. This service is executed from the perspective of intelligent environments designed to be environmentally-friendly.

A very important functional aspect of the system is to know its energy expenditure. To determine the consumption of electrical energy necessary for the system to operate, it is important to assess the type of energy, its nature and the consumption generated. Taking into account these factors, some electronic devices used are digital in nature, energy consumption with a permanent connection does not represent significant values, they are in the range of mW / h. The power stage of the designed system consists of two solenoid valves and a motor pump, these devices operate with electrical energy of alternating nature to 120V. The solenoid valves consume around 20W / h and the motor pump consumes around 200W / h, these data are determined per unit of time, i.e., this power consumed is per hour, so the motor pump takes 45 seconds to fill the toilet tank (2.5W per activation) and solenoid valves not more than two minutes each (300mW per activation).

The costs of implementation of the system do not exceed one hundred dollars (US$100), reason enough to become an economic system, taking into account the resources that were necessary for its execution. Electromechanical devices such as solenoid valves and the motor pump were recycled from a conventional washer, being sufficient for the required function, while the necessary electronic devices are common and easily acquired.

6. Conclusions

Enabling factors can be identified for the future use of the system, promoting the implementation of energy technologies that contribute to non-contamination and degradation. This approach enables smart grid implementations, smart cities, technology integration and sustainability of intelligent electrical-electronic systems to reduce the demand for electricity and make efficient use of water. The system implemented in this research is framed within the purposes sought by state policies, aimed at a generalized environmental sustainability.

The domestic sanitary unit to be converted into an intelligent environment directly intervenes in the behavior of the user in regards to water management and affects the environmental awareness of those who make use of an adapted space, capable of providing information about historical consumption in real time. This research has demonstrated that the system is feasible, low cost and high utility, viable for a daily household, able to save approximately 3.2 cubic meters of water monthly with just one sanitary unit, an amount that allows thinking about the impact that would be generated by the technology applied to other scenarios or environments.

An intelligent environment radically modifies the behavior of the user against certain customs that may prove inadequate for the preservation of water resources and the environment. Therefore, the technology encourages adjustment in the user's habits in light of the precarious conditions in which the planet is in terms of efficiency and regulation in energy consumption, so that it is possible to use sanitary services properly, with lower consumption of means.

A system such as the one developed in the current research proposes the reuse of electrical and electromechanical elements or functional parts of appliances that are usually discarded, with the purpose of positively impacting the environment from as many fronts as possible: i) electromechanical elements. ii) Reuse of water. iii) The implementation of technologies in the control of water consumption in the home.

As applications derive from the developed system, alternatives can be proposed for use in the same household, for example the kitchen, and globally in sectors such as hotels, hospitals and commercial or educational centers.

References

[1] Adi, W., Mulhem, S. and Mars, A., Secured remote sensing by deploying clone-resistant Secret Unknown Ciphers, 2017 IEEE International Conference on Consumer Electronics - Taiwan (ICCE-TW), 2017, pp. 133-134. DOI: 10.1109/ICCE-China.2017.7991031

[2] Hosek, J., Masek, P. and Kovac, D., M2M Gateway: The centerpiece of future home. 2014 6th International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems and Workshops (ICUMT) pp. 190-197, 2014. DOI:10.1109/ICUMT.2014.7002101

[3] Karan, K., Bhardwaj, S. and Venkataraman, H., Different network coding techniques for multihop machine - to - machine (M2M) Communication in next generation smart environment. 2017 IEEE International Conference on Advanced Intelligent Mechatronics (AIM), 2017. DOI: 10.1109/AIM.2017.8014009

[4] Garofalaki, Z., Kallergis, D., Katsikogiannis, G., Ellinas, I. and Douligeris, C., Transport services within the IoT ecosystem using localisation parameters. 2016 IEEE International Symposium on Signal Processing and Information Technology (ISSPIT), 2016. DOI: 10.1109/ISSPIT.2016.7886014

[5] Magiera, E. and Froelich, W., Integrated support system for efficient water usage and resources management (ISS-EWATUS), Procedia Eng., 89, pp. 1066-1072, 2014. DOI: 10.1016/j.proeng.2014.11.226

[6] Vieira, P., Jorge, C. and Covas, D., Novel performance assessment indices for domestic water use, Procedia Eng., 119, pp. 813-819, 2015. DOI: 10.1016/j.proeng.2015.08.943

[7] Helmbrecht, J., Pastor, J. and Moya, C., Smart solution to improve water-energy nexus for water supply systems, Procedia Eng., 186, pp. 101-109, 2017. DOI: 10.1016/j.proeng.2017.03.215

[8] Ntuli, N. and Abu-mahfouz, A., A simple security architecture for smart water management system, Procedia - Procedia Comput. Sci., 83, pp. 1164-1169, 2016. DOI: 10.1016/j.procs.2016.04.239

[9] Pérez-Urdiales, M. and García-Valiñas, M.Á., Efficient water-using technologies and habits: A disaggregated analysis in the water sector, Ecol. Econ., 128, pp. 117-129, 2016. DOI: 10.1016/j.ecolecon.2016.04.011
[10] Ye, Y., Liang, L., Zhao, H. and Jiang, Y., The system architecture of smart water grid for water security, Procedia Eng., 154, pp. 361-368, 2016. DOI: 10.1016/j.proeng.2016.07.492
[11] Yuanyuan, W., Ping, L., Wenze, S. and Xinchun, Y., A new framework on regional smart water, Procedia - Procedia Comput. Sci., 107(Icict), pp. 122-128, 2017. DOI: 10.1016/j.procs.2017.03.067
[12] Walker, D., Creaco, E., Vamvakeridou-lyroudia, L., Farmani, R., Kapelan, Z., and Savi, D., Forecasting domestic water consumption from smart meter readings using statistical methods and artificial neural networks. Procedia Engineering, 119, pp. 1419-1428, 2015. DOI: 10.1016/j.proeng.2015.08.1002
[13] Stec, A., Kordana, S. and Daniel, S. Analysing the financial efficiency of use of water and energy saving systems in single-family homes. Journal of Cleaner Production, 151, 2017. DOI: 10.1016/j.jclepro.2017.03.071
[14] Shahanas, K.M. and Sivakumar, P.B., Framework for a smart water management system in the context of smart city initiatives in India, Procedia - Procedia Comput. Sci., 92, pp. 142-147, 2016. DOI: 10.1016/j.procs.2016.07.337
[15] Gourbesville, P., Key challenges for smart water, Procedia Eng., 154, pp. 11-18, 2016. DOI: 10.1016/j.proeng.2016.07.412

C.A. González-Amarillo, is BSc. in Electronic Eng., from the Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia UPTC, Tunja, Colombia. He is a researcher of the TelemaTics Research Group of the UPTC. He is engaged in work related to electronic process automation and control engineering applied for the design of adaptive systems under the IoT (Internet of Things) paradigm.
ORCID: 0000-0002-2910-4239

C.L. Cárdenas-García, is BSc. in Electronic Eng., from the Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia UPTC, Tunja, Colombia. He is a researcher of the Telematics Research Group of the UPTC and works in the development of software for electronic systems, electronic instrumentation and control engineering for the design of adaptive systems under the IoT (Internet of Things) paradigm.
ORCID: 0000-0002-2375-330X

M.A. Mendoza-Moreno, is a PhD in Ciencias de la Electrónica at the Universidad del Cauca, Colombia, Systems and Computer Engineer at the Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia UPTC, Tunja, Colombia, MSc. of Science in Ciencias de la Información y las Comunicaciones at the Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia, Sp. in Redes y Servicios Telemáticos at the Universidad del Cauca, Colombia, Sp. in Pedagogía para el Desarrollo del Aprendizaje Autónomo en la Universidad Nacional Abierta y a Distancia, Colombia. The work topics in which professor Mendoza-Moreno works are related to adaptive systems, personalization of learning, IoT (Intenet of things) and telematics in general.
ORCID: 0000-0001-9000-5881

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
de Sistemas e Informática

Oferta de Posgrados

Especialización en Sistemas
Especialización en Mercados de Energía
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Sistemas
Doctorado en Ingeniería- Sistemas e Informática

Mayor información:

E-mail: acsei_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5365

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Connectivity to the Internet in rural areas using DTT (DVB-RCT2) technologies, or mobile telephony (4G-LTE)

Ciro Diego Radicelli-García, Margarita Pomboza-Floril & Lexinton Cepeda-Astudillo

Facultad de Ciencias de la Educación, Humanas y Tecnologías, Universidad Nacional de Chimborazo, Riobamba, Ecuador. cradicelli@unach.edu.ec, margaritapomboza@unach.edu.ec, lcepeda@unach.edu.ec

Received: February 15th, 2017. Received in revised form: November 1th, 2017. Accepted: December 20th, 2017.

Abstract
This article reviews the features and architecture of the DTT technology with wireless return channel called DVB-RCT2 versus 4G LTE cellular technology, and compares them in terms of bandwith, modulation schemes, speed used in downlink (DL) and uplink (UL), Guar Interval used, access methodology, carriers used, IP content transmission, forward error correction, among others, with the aim of verifying which of these two technologies could be the most appropriate to provide Internet connectivity in rural areas of Latin America.

Keywords: TDT; DVB-RCT2; 4G-LTE.

Conectividad a Internet en zonas rurales mediante tecnologías de TDT (DVB-RCT2), o telefonía móvil (4G-LTE)

Resumen
Este artículo revisa las características y arquitectura de la tecnología de TDT con canal de retorno inalámbrico DVB-RCT2 versus la tecnología celular 4G LTE, y las compara en términos de ancho de banda, esquemas de modulación, velocidad usada en bajada y subida, intervalo de guarda usado, metodología de acceso, portadoras usadas, transmisión de contenidos IP, técnicas de corrección de errores, entre otros, con el objetivo de verificar cuál de estas dos tecnologías podría ser la más apropiada para brindar conectividad a Internet en zonas rurales de Latinoamérica.

Palabras clave: TDT; DVB-RCT2; 4G-LTE.

1. Introducción

Según el informe sobre el estado de la banda ancha en América Latina y el Caribe 2016, difundido por la Comisión Económica para América Latina y el Caribe (CEPAL), la cantidad de usuarios de internet creció del año 2000 al año 2015 en un 10,6%, sin embargo los problemas en lo referente a velocidades de conexión y acceso del servicio entre zonas urbanas y rurales tiene todavía una gran diferencia, lo que no ocurre por ejemplo con el uso de la televisión, la cual según se enuncia en [1], es más popular y accesible que el Internet.

La elección de la tecnología para proveer de servicios de conectividad a Internet en general es variada, pero si se enfoca la misma a zonas rurales, la perspectiva varía debido a los múltiples factores que se deben considerar para poder brindar conectividad a este tipo de zonas, así se tiene por ejemplo que responder a ciertas preguntas tales como: ¿Qué área desea cubrir?, ¿Cuánto costaría implementar la solución?, ¿Qué topología de red sería la adecuada?, entre otras. Es por esto de que de todas las tecnologías conocidas, muy pocas o casi ninguna es aplicable para proveer de servicios de conectividad a Internet en zonas rurales, razón por la cual en la investigación que ha dado como fruto este artículo científico, se ha pensado en utilizar otras opciones de conexión como las tecnologías de televisión digital terrestre (TDT) y las tecnologías de telefonía móvil de cuarta generación (4G).

Las primeras debido a que este tipo de redes pueden ofrecer una mayor penetración y un costo de implementación relativamente bajo comparado con otras tecnologías ya sea

How to cite: Radicelli-García, C.D., Pomboza-Floril, M. and Cepeda-Astudillo, L., Conectividad a Internet en zonas rurales mediante tecnologías de TDT (DVB-RCT2), o telefonía móvil (4G-LTE). DYNA, 85(204), pp. 319-324, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

de acceso alámbrico o inalámbrico, debido a que para implementar una red de TDT, se puede reutilizar la infraestructura existente de la TV analógica (estaciones base), aspecto que es una ventaja si se pretende montar una red de acceso en zonas rurales. Y las segundas debido a que pueden ser desplegadas en una porción del espectro radioeléctrico que posee propiedades de penetración y propagación mayores que las bandas más altas utilizadas actualmente en la transmisión de comunicaciones móviles.

Es importante mencionar que para la provisión de internet con cualquiera de las tecnologías antes mencionadas, es imprescindible que se lleve a cabo en su totalidad el proceso de apagón analógico, mediante el cual se liberará el espectro necesario para la inclusión de estas nuevas tecnologías con servicios de valor agregado, y que además ocupen eficientemente el espectro [2], con el objetivo de en un corto plazo reducir la brecha digital existente en todavía la gran mayoría de los países de América Latina y el Caribe.

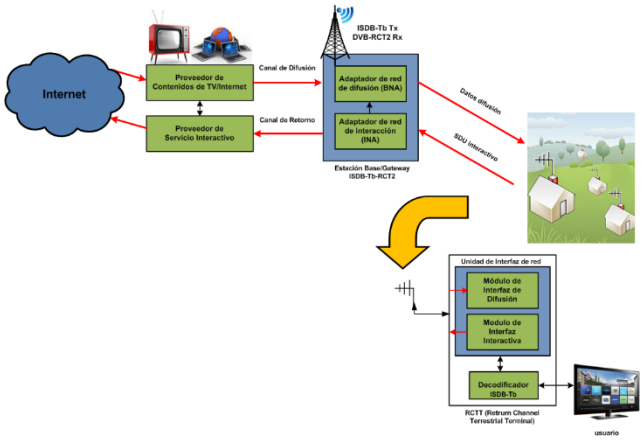


Figura 1. Arquitectura de DVB-RCT2.
Fuente: Elaboración propia.

2. Tecnología DVB-RCT2

Para la difusión de la televisión digital terrestre (TDT), en Latinoamérica se ha adoptado en la gran mayoría de sus países la tecnología ISDB-Tb (*Integrated Services Digital Broadcasting* – Terrestrial Brasil), a excepción de Panamá que utiliza la norma europea DVB-T (*Digital Video Broadcasting Terrestrial*), y Colombia que utiliza la norma mejorada DVB-T2 (*Digital Video Broadcasting Terrestrial 2*), que permite la difusión de televisión en alta definición [3]. Así como México y algunos países de América Central que usan la norma americana ATSC (*Advanced Television System Committee*). Dichos estándares fueron concebidos para la transmisión de señales digitales en difusión, es decir únicamente desde la torre de transmisión hacia el equipo de usuario, sin embargo tres años después de la creación del primer estándar de difusión de TDT, se crea DVB-RCT (*Digital Video Broadcasting – Return Channel Terrestrial*), estándar que proponía un canal de retorno inalámbrico para la transmisión desde el equipo de usuario hacia la torre de TV, utilizando para esto técnicas de multiplexación en tiempo y frecuencia. Sin embargo dicha propuesta no pudo ser utilizada debido a que por problemas con los operadores de telefonía móvil, nunca llegó a desplegarse de forma comercial.

Vista la importancia de poder brindar servicios de conectividad a Internet a zonas rurales, utilizando los sistemas de TDT, se ha pensado en la creación de una nueva tecnología con canal de retorno inalámbrico, utilizando básicamente la norma mejorada de DVB-T, es decir DVB-T2 y la primera generación del estándar con canal de retorno DVB-RCT, proponiendo así en [4] la creación de DVB-RCT2 (*Digital Video Broadcasting - Return Channel Terrestrial 2nd Generation)*, estándar que podría utilizar en su enlace de difusión (DL) cualquiera de las tecnologías usadas en Latinoamérica, mientras que para su enlace de retorno (UL), utilizaría la arquitectura propuesta para dicha tecnología. En la Fig. 1 se ilustra dicho concepto.

DVB-RCT2, utiliza lo mejor de las tecnologías DVB-RCT y especialmente de DVB-T2, tal como se detalla en [5]; el uso de códigos mejorados para la corrección de errores tales como la comprobación de paridad de baja densidad (LDPC) y *Bose-Chaudhuri-Hochquenghem* (BCH), múltiples tuberías de capa física (MPLPs), entrelazado temporal (TI), un esquema de modulación de mayor jerarquía utilizando modulación de amplitud en cuadratura (256-QAM), el uso de constelaciones rotadas para mejorar la robustez de la señal, uso de la técnica de múltiples entradas y única salida (MISO), utilizando codificación Alamouti para control de flujo, el uso de ocho patrones de portadoras piloto para componer la señal en el aire, minimizando la sobrecarga en función del tipo de recepción a la que se orienta el servicio, nuevos tamaños extendidos relacionados con la transformada rápida de Fourier (16K, 16K extendido, 32K, 32K extendido), mecanismos de reducción de la potencia de pico de la señal transmitida (PAPR), que junto con las técnicas de extensión activa de la constelación (ACE) y de tonos reservados (TR), permiten limitar la distorsión en el receptor, el uso de tramas de extensión futura (FEF), usadas para la transmisión de nuevos servicios, eliminación de paquetes nulos, y sobre todo para la compartición de un mismo canal tanto para DL como para UL, así como para la transmisión de contenidos IP y la recepción en movilidad [6]. Dichas características ofrecen ventajas indiscutibles a DVB-RCT2 como: (i) la configuración de redes de frecuencia única de tamaño considerablemente grande, (ii) difusión de servicios variados en un mismo canal, (iii) reducción de costos de despliegue, debido a la reutilización de infraestructura de televisión analógica y digital, (iv) capacidad de transmisión en aumento, (v) ahorro de energía, y (vi) protección eficiente frente a interferencias existentes.

3. Tecnología 4G LTE

4G LTE (*4th Generation Long Term Evolution*) es la cuarta generación de tecnologías de telefonía móvil, misma que es la evolución de las tecnologías 2G (GSM/EDGE) y 3G (UMTS/HSPA/HSDPA), que fueron desarrolladas por la organización 3GPP (*3erd Generation Partnership Project*), para permitir a los usuarios más calidad y mayor rapidez de servicio [7]. LTE está basado en el protocolo IP, soportando tanto IPv4 e IPv6, la principal diferencia con la tecnología 3G se aprecia en los siguientes aspectos: (i) uso de la tecnología OFDM, (ii) uso

de la técnica MIMO, (iii) definición de una Evolución de la Arquitectura del Sistema (SAE) [8]. En donde, MIMO permite tener una alta eficiencia espectral, SAE mejora la capacidad de datos, reduciendo la latencia experimentada por el usuario, además utiliza duplexación por división de tiempo y frecuencia TDD y FDD respectivamente, con lo cual se mejora el uso del espectro, haciendo una gestión más eficiente del mismo [9], incluyendo servicios unicast y broadcast; y por último el uso de codificación de canal, brinda seguridad y reduce la probabilidad de error en la transmisión.

Para el enlace descendente (DL), 4G LTE utiliza OFDMA (*Orthogonal Frequency Division Multiple Access*), mientras que en el enlace ascendente (UL) usa SC-FDMA (*Single Carrier-Frequency Division Multiple Access*), o también conocida como DFTS-OFDM. Por su parte el uso de más antenas provee diversidad de señal, y transmisiones multicapa a través del uso de la técnica MIMO. Existe además una flexibilidad considerable en el uso del espectro por parte de LTE. Esta tecnología puede trabajar sobre bandas nuevas y existentes, y sobre FDD y TDD. En términos de adaptación de enlace, LTE puede usar esquemas de modulación QPSK, 16QAM o 64 QAM, a más de ejecutar codificación de canal para proveer de robustez contra las condiciones adversas que pueden afectar dicho canal. También el uso de tonos de 15 KHz provee un tiempo de símbolo largo, lo que mejora la robustez contra la propagación multicamino y la dispersión de la señal en el tiempo. Así mismo LTE provee un ancho de banda adaptativo que inicia en 1.4 MHz, seguido por 3, 5, 10, 15 y 20 MHz, y una velocidades de pico que en bajada tienen 326,5 Mbits/s para MIMO 4x4 y de 172,8 Mbits/s para MIMO 2x2, mientras que en subida alcanzan los 86,5 Mbits/s [9], considerando un esquema de modulación 64QAM tanto para DL como para UL.

Por otro lado la Evolución de la Arquitectura del Sistema (SAE) de LTE, mueve algunas de las funciones del núcleo de la red hacia la periferia de la misma, con el objetivo de reducir la latencia en la red. SAE en la estación base provee diferentes ventajas sobre las arquitecturas 3G, como: (i) capacidad de datos mejorada, (ii) arquitecturas basadas totalmente en IP, (iii) reducción de la latencia, y (iv) reducción de la operación y por ende de costos.

Con los principios descritos anteriormente, se ha desarrollado una nueva tecnología 4G llamada LTE Avanzada (*Advanced*), la cual provee mayor velocidad que LTE tanto en DL como en UL, con una latencia menor. En la Tabla 1, se muestran características de las tecnologías 3G y 4G. Cabe destacar que la tecnología HSPA+ sirvió de punto medio para pasar de la tecnología 3G a la LTE.

El despliegue 4G se puede realizar en diferentes bandas de acuerdo con la necesidad de cada país, y según cómo se haya aprovechado el espectro radioeléctrico por parte de los gobiernos y las empresas de telecomunicaciones. Por ejemplo en Ecuador se otorgó la banda 1.700 MHz, conocida también como servicios inalámbricos avanzados (*AWS - Advanced Wireless Service*), o banda 4 para el despliegue de la red 4G a las telefónicas Claro y Movistar [10], mientras que en el caso de la Corporación Nacional de Telecomunicaciones (CNT), el Consejo Nacional de Telecomunicaciones (CONATEL) le otorgó a la telefónica estatal 30 MHz de espectro en la banda de 700 MHz, y 40 MHz de espectro en la banda AWS.

Tabla 1.
Comparativa entre tecnologías 3G y 4G.

	WCDMA (UMTS)	**HSPA HSDPA/ HSUPA**	**HSPA+**	**LTE**	**LTE Avanzado**
Máx, velocidad en UL	384 Kbps	14 Mbps	28 Mbps	100 Mbps	1 Gbps
Máx. velocidad en DL	128 Kbps	5.7 Mbps	11 Mbps	50 Mbps	500 Mbps
Latencia	150 ms	100 ms	50 ms (max)	~10 ms	Menor que 5 ms
Versiones 3GPP	99/4	5 / 6	7	8	10
Metodología de acceso	CDMA	CDMA	CDMA	OFDMA / SC-FDMA	OFDMA /SC-FDMA

Fuente: Elaboración propia con base en [8].

3.1. Evolución de la arquitectura del sistema (System Architecture Evolution – SAE)

SAE es definida como la evolución del núcleo de la red permitida por la tecnología LTE, en referencia a otras tecnologías de comunicación móvil. Así uno de los objetivos primordiales de SAE es la compatibilidad con la tecnología LTE Avanzada, de tal modo que cuando esta sea introducida, la red será capaz de manejar los aumentos en la transmisión de datos, con pocos cambios en la infraestructura. SAE ofrece muchas ventajas sobre topologías y sistemas previos usados en núcleos de redes celulares, entre las cuales se tiene:

- **Mejora la capacidad de datos.-** LTE ofrece una velocidad de descarga de 100 Mbps, pero se espera que maneje muchos mayores niveles de datos, para lo cual SAE permite mejorar sustancialmente la transferencia de datos.
- **Arquitectura basada en IP.-** la arquitectura propuesta para redes 3G y anteriores, permitía el transporte de voz mediante una conmutación basada en circuitos, pero la nueva tendencia es la utilización de datos IP, razón por la cual SAE permite la transmisión de la información mediante la conmutación basada en paquetes.
- **Reducción de la latencia.-** con el incremento de los niveles de interacción y de respuesta requeridos, SAE asegura que los niveles de latencia son reducidos alrededor de 10 ms [11], lo cual permite mejorar los tiempos de respuesta en las comunicaciones con LTE.
- **Reducción de gasto operacional (*Operational Expenditure* – OPEX) y gasto en capital (*Capital Expenditure* – CAPEX).-** un elemento primordial para cualquier operador es la reducción de costos. Es importante por lo cual que cualquier diseño reduzca el CAPEX y el OPEX, y esto es justamente lo que SAE logra debido a su alto nivel de configuración automática.

3.2. Principios básicos de SAE y arquitectura LTE

SAE propone la utilización de un nodo común como puerta de enlace (Gateway), sistemas basados totalmente en protocolos IP, el uso de una entidad de manejo de movilidad (*MME – Mobility Management Entity*), y un divisor funcional para el acceso a la red de radio (*RAN – Radio Access*

Network) y a la red de núcleo (*Core Network*). El principal elemento del LTE SAE es el núcleo de paquete evolucionado (*EPC – Evolved Packet Core*), el mismo que contiene a muchas estaciones base.

Dentro de EPC, existen 4 elementos. MME maneja los traspasos intra-LTE, la activación y desactivación de la portadora, e interactúa con el servidor de suscriptor de casa (*HSS – Home Suscriber Server*) para autenticar al usuario. Así mismo, MME provee funciones de control. El servidor de puerta de enlace (*SGW – Serving Gateway*) elemento que maneja la movilidad de los nodos y actúa como puerta de enlace entre la RAN y la red de núcleo. Cuando la estación móvil se mueve a través de las áreas servidas por los diferentes nodos de la estación base (Nodo A, Nodo B), el SGW sirve como punto de anclaje, asegurando la continuidad del traspaso de datos. El tercer elemento es la puerta de enlace PDN (*PGW - PDN Gateway*), la cual provee conectividad de la estación móvil a la red externa o conocida como red de paquetes de datos (*PDN – Packet Data Network*). Por último las políticas y función de reglas de carga (*PCRF – Policy - & Charging Rules Function*), detecta el flujo de servicios y asegura la política de carga. Para elementos que requieren políticas dinámicas o control de carga, existe un elemento de red llamado función de aplicaciones (*AF - Applications Function*) es provisto.

En cuanto a la arquitectura de LTE, la misma es muy compleja, en un diagrama completo se considerarían toda la Internet y otros aspectos de la conectividad de la red de apoyo, sin embargo en la Fig. 2, se muestra la parte que interactúa más estrechamente con el equipo de usuario, en concreto se muestran las estaciones base y la interfaces entre estas y el EPC.

4. Análisis de DVB-RCT2 vs 4G LTE para brindar conectividad a Internet a zonas rurales de Latinoamérica

En Latinoamérica uno de los principales inconvenientes de las bandas de transmisión de TV, radica en la saturación de señales que se emiten en dichas bandas, lo que es un problema si se desea incluir nuevos servicios. Por esta razón en Latinoamérica se está llevando a cabo el proceso de transición desde la televisión analógica hacia la televisión digital terrestre, comúnmente conocido como el apagón analógico, el mismo que comenzó en 2015 y se espera termine en 2021.

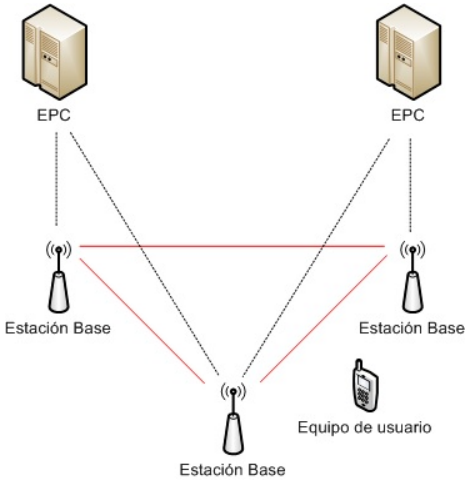


Figura 2. Arquitectura LTE.
Fuente: Elaboración propia.

Dicho apagón analógico, *"permitirá transmitir varios canales de televisión digital normales (hasta seis, según las técnicas de codificación y modulación empleadas) de calidad aceptable en el espacio de frecuencias radioeléctricas utilizado anteriormente por un solo canal analógico"* [2], además de poder usar servicios auxiliares como corrección de errores, sintonización automática, configuración de redes de frecuencia única, entre otros.

Pero para que este apagón pueda realizarse, es necesario que el espectro superior de frecuencias de la banda UHF sea liberado para poder utilizar los servicios de televisión digital terrestre así como los de telefonía móvil de cuarta generación (dividendo digital).

El tamaño de dicho dividendo varía de una región a otra, es por esto que existe un ente de control (Unión Internacional de Telecomunicaciones) quién vigila la distribución de las frecuencias en el mundo, dividiendo al mismo en tres regiones principales; Región 1: Europa, África y el Norte de Asia, Región 2: América del Norte, América del Sur y Groenlandia, Región 3: Pacífico y sur de Asia.

En la Región 1, según se decidió en la conferencia mundial de radiocomunicaciones de 2007, los canales del 21 al 69, banda de 790 a 862 MHz, espectro de 800 MHz, sería la utilizada para la transmisión de la TDT así como para los servicios 4G. Sin embargo la Unión Europea decidió utilizar toda la banda para los servicios de telefonía de cuarta generación, y desplazó las emisiones de televisión digital a la parte inferior de la banda UHF, conociéndose a este proceso como el primer dividendo digital.

Tiempo después en la conferencia mundial de radiocomunicaciones de 2012, se normó que la TDT utilice la banda de 470 a 698 MHz, espectro de 700 MHz, mientras que los servicios de telefonía 4G, utilizarían el espectro de 698 a 790 MHz, espectro de 700 MHz, denominándose a este proceso como el segundo dividendo digital.

En la Región 2 se normo el uso de la banda de 470 a 698 MHz, canales del 14 al 51 para servicios de televisión digital terrestre, y además se utilizó la recomendación definida para Europa por la conferencia mundial de radiocomunicaciones de 2007, dejando la banda de 698 a 862 MHz, canales del 52 al 69; espectro de 700 MHz para servicios de telefonía móvil 4G.

Al igual que la solución de TDT propuesta, la tecnología 4G LTE se utilizará para mejorar la cobertura en las zonas rurales, sin embargo DVB-RCT2 podría ofrecer costos de despliegue baratos y gran porcentaje de penetración, comparado con la tecnología 4G LTE, debido a la reutilización de la ya existente infraestructura de televisión analógica y digital, con lo cual se podría aumentar tanto la cobertura como la eficiencia de transmisión en condiciones hostiles, considerando además que el costo de hardware para DVB-RCT2 es mucho más barato que el utilizado por la tecnología LT. En lo que se refiere a características técnicas, en la Tabla 2 se presenta una comparativa entre las dos tecnologías estudiadas.

Tabla 2.
Comparativa entre DVB-RCT2 y 4G LTE.

Parámetros	DVB-RCT2	4G LTE
Ancho de banda	6, 7 y 8 MHz	1.4, 3, 5, 10, 15, 20 MHz
Esquemas de modulación	QPSK, 16QAM, 64QAM, **256QAM**	QPSK, 16QAM, 64QAM
Velocidad máxima en DL	37,88 Mbps (256 QAM)	Valores teóricos 326,5 Mbps, con MIMO 4x4 (64 QAM) 172,8 Mbps con MIMO 2x2 (64 QAM)
Velocidad utilizada en DL	25,52 Mbps (64 QAM ¾)	20 Mbps (en el caso de Ecuador, utilizando 64 QAM)
Velocidad máxima en UL (64 QAM)	25,52 Mbps	86,5 Mbps
Velocidad utilizada en UL	5,64 Mbps (QPSK ½)	4 Mbps (en el caso de Ecuador, utilizando QPSK)
Intervalo de guarda (GI)	1/4, 19/128, 1/8, 19/256, 1/16, 1/32, 1/128	El tamaño del prefijo cíclico (CP) adecuadamente seleccionado sirve como GI. Para LTE el CP dura 4,69 us.
Metodología de acceso en DL	OFDM	OFDMA
Metodología de acceso en UL	OFDMA	SC-FDMA
Portadoras	BS1 con 1, BS2 con 4 y BS3 con 29 portadoras, con 1708, 427 y 59 subcanales respectivamente.	2048 portadoras
Distancia entre portadoras	CS1, CS2 y CS3 con 1, 2 y 4 kHz de separación respectivamente	15kHz
Transmisión de contenido IP	IP → GSE	Soporte de IPv4 e IPv6
FEC	LDPC y BCH 1/2, 3/5, 2/3,3/4, 4/5, 5/6	Códigos concatenados

Fuente: Elaboración propia.

Al analizar la tabla anterior, se puede notar que DVB-RCT2 utiliza un esquema de modulación de mayor jerarquía (256-QAM) comparado con el máximo utilizado en 4G LTE (64-QAM), lo que teóricamente representa que las velocidades de transmisión de 4G LTE sean superiores a las de la tecnología de TDT propuesta. Sin embargo, las velocidades de transmisión utilizadas realmente, demuestran que DVB-RCT2 es más rápido que el estándar 4G LTE tanto en DL como en UL, presentando un aumento de 5,52 Mbps y de 1,64 Mbps respectivamente, con respecto a la tecnología celular. Por otro lado, para proveer inmunidad contra ISI, tanto DVB-RCT2 como 4G LTE utilizan GI, en donde para la primera tecnología se tienen algunos valores que depende del modo de operación elegido en TDT, mientras que para redes 4G el valor es fijo, lo que tiene relación además con el número de portadoras y la separación entre estas que se utiliza en cada tecnología.

Con respecto a la metodología de acceso tanto para DL como para UL, cabe destacar que tanto para DVB-RCT2 como para 4G LTE, se utilizan técnicas basadas en OFDM, en donde para la tecnología 4G el uso del modo de transmisión SC-FDMA, el mismo mantiene constante el nivel de potencia de operación de los equipos móviles, con lo cual el rendimiento de la batería no se ve afectado, permitiendo que dichos equipos operen tan eficientemente como sea posible. Sin embargo para DVB-RCT2 esto no es una limitante debido a que el equipo de usuario es este caso es un decodificador (set-top-box), que permanecerá estático en el hogar del usuario, por lo que el mismo no presenta problemas con respecto a la batería, con lo cual el uso de OFDMA es adecuado. Es importante recalcar además, que ambas tecnologías soportan transmisión de contenidos IP. Aunque en lo que respecta a esquemas de corrección de errores (FEC), DVB-RCT2 utiliza esquemas más robustos como el de comprobación de paridad de baja densidad (LDPC) y Bose-Chaudhuri-Hocquengham (BCH) que proveen una importante mejora comparado con la codificación convolucional utilizada en la tecnología 4G.

5. Conclusiones

La nueva tecnología DVB-RCT2, utilizará las características de DVB-T2 y las combinará con las de DVB-RCT, para aumentar su capacidad de transmisión, utilizando una menor relación portadora a ruido (CNR).

DVB-RCT2, podrá utilizar en el canal de difusión (DL), cualquiera de las tecnologías de TDT existentes actualmente en Latinoamérica como: ISDB-Tb, DVB-T o DVB-T2, lo que la convertiría en una tecnología muy versátil e interesante a la hora de brindar acceso a internet en zonas rurales; mientras que para el canal de retorno (UL) utilizaría la propia arquitectura de RCT2 propuesta.

Por lo expuesto en este artículo, se escogerá la solución de TDT propuesta para la provisión de Internet a zonas rurales de Latinoamérica, considerando en primer lugar que el estándar DVB-RCT2 propuesto es más rápido que la tecnología 4G LTE, y en segundo lugar que el equipamiento que el usuario necesita, en el caso de la tecnología celular de cuarta generación, es más costoso, mientras que en el caso de la tecnología DVB-RCT2, bastaría con tener una televisión que tenga incorporado el decodificador de TDT con canal de retorno, o en su defecto que a un televisor convencional se le conecte a dicho decodificador, con lo cual el manejo del equipo no supondría problema alguno para los usuarios, además que en una televisión se minimizan o eliminar problemas en cuanto al desgaste de componentes, como por ejemplo la batería en un teléfono móvil.

El objetivo de la investigación de la cual se desprende este artículo, es proponer una tecnología de TDT de mejores prestaciones que tecnologías precedentes de su misma clase, misma que permita implementar una solución de conectividad a Internet en zonas rurales minimizando los costes de conexión por usuario, a más de reducir la implementación de infraestructura de telecomunicaciones para tal efecto, debido a la reutilización de la infraestructura existente de la TV analógica y/o digital.

Referencias

[1] UIT., Informe sobre el Desarrollo Mundial de las Telecomunicaciones/TIC de 2010, verificación de los objetivos de la CMSI, examen intermedio. Resumen Ejecutivo, Suiza, 2010, 28 P.

[2] Kholod, A. and Lewis, J., El dividendo digital: oportunidades y retos. Actualidades de la UIT [en línea]. 2010. [fecha de referencia 17 de junio de 2015]. Disponible en: http://www.itu.int/net/itunews/issues/2010/01/27-es.aspx
[3] Eizmendi, L. et al., DVB-T2: the second generation of terrestrial digital video broadcasting system, IEEE Trans. on Broadcasting, 60(2), pp 6-13, 2014.
[4] Radicelli C., Cardona, N. y Gomez, D., A second-generation digital terrestrial television wireless return channel standard for providing Internet connectivity in rural areas in Latin America, IEEE Latin American Transactions, 13(9), pp 2837-2844, 2015.
[5] ETSI, TS 102 831 v1.2.1, Digital Video Broadcasting (DVB); Implementation guidelines for a second generation digital terrestrial television broadcasting system (DVB-T2), Agosto 2012.
[6] ETSI, EN 301 958 v1.1.1, Digital Video Broadcasting (DVB); Interaction Channel for Digital Terrestrial Television (RCT) incorporating Multiple Access OFDM, Marzo 2002.
[7] Área tecnología, LTE y LTE Advanced. [En línea]. Disponible en: http://www.areatecnologia.com/tecnologia/lte.html
[8] Toh, C.K., 4G LTE Technologies: System Concepts. ALICO Systems Inc, Estados Unidos de América, 2011.
[9] Garro, E., Estudios de convivencia de servicios de TDT con servicios 4G LTE en las bandas de 450 MHz, 700 MHz y 800 MHz, Tesis de grado, Universidad Politécnica de Valencia, España, 2014.
[10] CONATEL, Resolución TEL-804-29-CONATEL-2012, Ecuador, 2012.
[11] Radio-electronics LTE tutorial, 2014. [en línea]. Disponible en: http://www.radio-electronics.com/info/cellulartelecomms/lte-long-term-evolution/lte-ofdm-ofdma-scfdma.php

C.D. Radicelli-García, es Ing. en Sistemas Informáticos y MSc. en Interconectividad de Redes por la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), Ecuador. MSc. en Tecnologías, Sistemas y Redes de Comunicación y Dr. (PHD) en Telecomunicación por la Universidad Politécnica de Valencia (UPV), España. Actualmente es profesor de la Facultad de Ciencias de la Educación, Humanas y Tecnologías de la Universidad Nacional de Chimborazo (UNACH), Ecuador. Sus intereses de investigación están centrados en TDT.
ORCID: /0000-0001-9188-0514

M. Pomboza-Floril, es Lic. en Diseño Gráfico y MSc. en Planificación, Evaluación y Acreditación de la Educación Superior por la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), Ecuador. MSc. en Ingeniería del Diseño y Dra. (PHD) en Diseño, Fabricación y Gestión de Proyectos Industriales por la Universidad Politécnica de Valencia (UPV), España. Profesora titular de la Facultad de Ciencias de la Educación Humanas y Tecnologías de la Universidad Nacional de Chimborazo (UNACH), Ecuador.
ORCID: 0000-0002-4820-493X

L. Cepeda-Astudillo, se graduó de Lic. y posteriormente de Dr. en Ciencias de la Educación mención Informática Educativa y MSc. en Docencia Universitaria e Investigación Educativa, obteniendo ambos títulos en la Universidad Nacional de Chimborazo (UNACH). PhD en Educación por la Universidad de San Marcos, Perú. Actualmente es Vicerrector de Posgrado e Investigación de la UNACH.
ORCID: 0000-0001-5175-4062

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
de Sistemas e Informática

Oferta de Posgrados

Especialización en Sistemas
Especialización en Mercados de Energía
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Sistemas
Doctorado en Ingeniería- Sistemas e Informática

Mayor información:

E-mail: acsei_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5365

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Mobile learning on higher educational institutions: how to encourage it?. Simulation approach

Luisa Díez-Echavarría, Alejandro Valencia & Lorena Cadavid

Instituto Tecnológico Metropolitano, Medellín, Colombia. *luisadiez@itm.edu.co, jhoanyvalencia@itm.edu.co, dlcadavi@unal.edu.co*

Received: March 10th, 2017. Received in revised form: December 19th, 2017. Accepted: January 25th, 2018.

Abstract
Mobile learning is a learning process based on mobile devices use, that allows knowledge acquisition in an interactive and collaborative way. The aim of this article is to understand the mobile learning adoption phenomenon in high education student's community, and to assess different policies that can be implemented in institutions in order to favor the penetration of this practice. We develop a simulation model that is based on agents who represent students, which should decide if they want to attend a class in a virtual or face-to-face way, through a decision rule based on Theory of Planned Behavior. We found that the most effective short-term strategies are those that favor the practice of mobile learning during an early learning phase, no matters if this early practice is volunteer or forced. We also found a temporal nature on mobile learning adoption, so it requires permanent strategies over time.

Keywords: mobile learning; agent-based simulation; planned behavior theory; practice adoption.

Mobile learning en instituciones de educación superior: ¿cómo abordarlo? Una aproximación desde la simulación

Resumen
Mobile learning es un proceso de aprendizaje basado en el uso de dispositivos móviles que permite adquirir conocimiento de manera interactiva y colaborativa. El objetivo de este artículo es comprender el fenómeno de la adopción del mobile learning entre estudiantes de educación superior, y evaluar políticas que pueden ser implementadas en instituciones, para favorecer la penetración de esta práctica. Desarrollamos un modelo de simulación basado en agentes que representan estudiantes, quienes deben decidir si asisten a una clase de manera presencial o virtual, a través de una regla de decisión basada en la Teoría del Comportamiento Planeado. Encontramos que las estrategias a corto plazo más eficaces son aquellas que favorecen la práctica del aprendizaje móvil durante fases de aprendizaje temprano, sin importar si es voluntaria o forzada. Asimismo, evidencian una naturaleza temporal de la adopción de esta práctica, entonces es necesaria la implementación de estrategias permanentes en el tiempo.

Palabras clave: mobile learning; simulación basada en agentes; teoría del comportamiento planeado; adopción de prácticas.

1. Introduction

There is increased interest in the learning processes that is accompanied by new technological tools, such as found in mobile learning (onwards, m-learning). Nowadays, for every one person who accesses the internet from a computer two do so from a mobile device [1,2].

Mobile technology is changing the way we live and it is beginning to change the way we learn. Mobile learning (M-learning) is a way of acquiring knowledge in a more interactive and collaborative way, at any time and space [3,4]. Due to its advantages, it is expected that higher educational institutions would implement strategies to promote this practice, in order to increase its coverage, and to improve its methodology and its relevance in the educational process [5,6]. Indeed, m-learning has been used around the world to support learning experiences, both in a formal and informal context [7−9]. In developing countries,

How to cite: Díez-Echavarría, L.F., Valencia, A. and Cadavid, L., Mobile learning on higher educational institutions: how to encourage it? Simulation approach. DYNA, 85(204), pp. 325-333, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

mobile technologies potentially deliver education without dependence on an extensive traditional communications infrastructure [10,11]. In fact, it's been used for UNESCO like a tool for promote education at the poorest countries around the world [1].

However, those efforts will be useless if people do not adopt this practice in a full way. Literature shows that we have a width knowledge about the individual factors that influence the m-learning adoption decision, but what do we know about how those factors interact and affect the final adoption decision? [12] What is the impact of the social pressure during this process? What are the most effective policies to focus the efforts on? Do the policies interact among them? What happen with the adoption process continuity when current students finish their academic life and new students come into the system?

The aim of this article is to understand the dynamics of the m-learning adoption phenomenon among students, in contexts where learning through mobile devices is not an obligation. To achieve this, we developed an agent-based model that represents a university that allows students (agents) can decide whether to attend a virtual or a face-to-face course. This decision process is modeled according to the Theory of Planned Behavior guidelines, where social contagion dynamics are explicitly represented. We run the results under different conditions in order to evaluate the impact of several policies through simulation techniques.

The theoretical framework associated with m-learning has been previously presented in literature, and the factors presented influence students' decision to carry out this practice. The factors presented in the behavioral theory are then formalized, and different models that contribute to this purpose are presented. Simulation model design and case analysis are the methods used in this research and are presented in details below. The findings have been analyzed then, and the conclusions and recommendations are also presented.

Since we develop a general model, results can help to support the policy design of any institution interested in proposing policies to promote the inclusion of mobile technology among students.

This research is based on well-established adoption theories, whose applications have been oriented mainly to students. Therefore, we focus on student's decision-making process, and instructor and teacher's adoption process are not included.

2. Related factors of m-learning adoption

M-learning is a set of behaviors and practices that result in the acquisition of knowledge and skills through the use of mobile technology [13]. The mobile devices have the potential of improving the way students interact with each other and their attitudes towards learning [14,15], this is mainly due to the fact that they are not limited by space and time [16,17]. In addition, m-learning supports collaborative experiences and interactions with the diversities and opportunities that exist beyond the classroom [18,19].

The key element of success for mobile education is to understand the factors that lead individuals to execute their own m-learning practices [20]. Although a wide number of variables have been included into the analysis of adoption behaviors, psico-sociological characteristics have proof to be best explicators of the variance in the adopter behavior of individuals than demographic factors [21−25]. Because of that, adoption models have emerged from sociology and psychology field, better than from the econometrics field.

Traditionally, the decision to adopt a new technology or a new behavior has been studied by behavioral models, such as the Theory of Reasoned Action (TRA) [26], the Theory of Planned Behavior (TPB) [27,28], and the Technology Adoption Model (TAM) [29], among others. However, these three models are by excellence, the most commonly used models for describing individuals' behavior. Hence, it is necessary to use these models and their main conceptual contributions to understand the factors that influence the individual's behavior in the adoption of m-learning.

However, these generic models require appropriate modifications and are being adapted from its original structure to a particular social context [30,31]. The models have highlighted different factors that affect or describe the adoption of m-learning [32], such as: (a) the context or learning environment, (b) the tools used for the learning process, (c) the learning control (which is usually done by a teacher), (d) communication with others, (e) the learning knowledge field, and (f) the learning objective. The authors concluded that the decision to adopt and improve learning is itself a synergy between the existing factors [16].

[33] used the extended version of TAM to analyze the factors that affect the use of technological devices associated with m-learning. The authors found that the perceived usefulness is the factor that has the greatest impact on attitudes towards the use of technological tools in the context of mobile learning.

In an attempt to structure isolated initiatives so as to explain the performance of m-learning, [34] proposed a m-learning intent adoption model, shown in Fig. 1, which is framed within the TPB [27]. As the model suggests, it is assumed that the individual's intention of practicing m-learning depends on the individual's interaction with other individuals and their environment, through three fundamental factors: attitude, subjective norm, and perceived behavioral control.

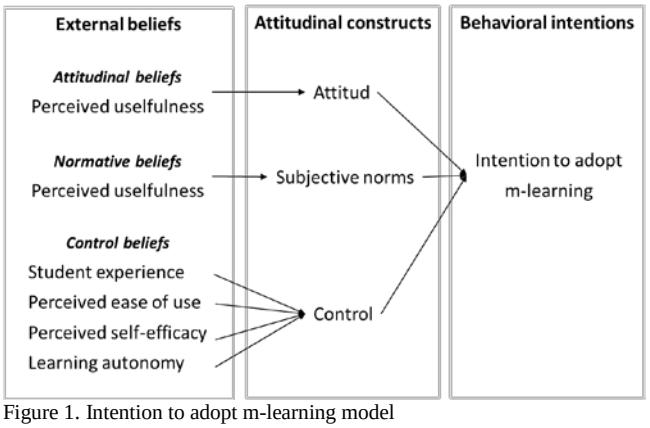


Figure 1. Intention to adopt m-learning model
Source: Adapted from [34]

In general, attitude is associated with the degree of an individual's feelings, whether favorable or unfavorable, on the performance of a specific behavior [34,35]. The attitude of an individual is the result of the feeling he or she has about the usefulness of carrying out a behavior [29,34,36]. In this regard, perceived usefulness refers to the degree of trust of an individual that in performing a behavior will improve his performance and generate increase in important activities and responsibilities.

The subjective norm is related to other important opinions of closely surrounding individuals [37-38]. For the case of m-learning, it is considered that the individuals with the greatest influence on students are the instructors [31,39] and colleagues or other close students [7].

Finally, the perceived behavioral control is related to the perception on adequacy of resources and confidence to perform any behavior [27,40]. For the case of m-learning, this factor is composed by four elements: (a) the self-efficacy [34], (b) the students' autonomy for learning [41], (c) the student experience in the use of virtual learning tools [34] and (d) the perceived easiness of use [42].

3. Methodology

In order to explore the results that different policies implemented by educational institutions may have and the prevalence of m-learning behaviors, a simulation model was developed at the individual level. For this purpose, agent-based modeling is a methodology that allows the study of several strategies at a macro level, according to the decision-making rules of each agent [43].

In the model, students are represented as agents who were accepted into the institution at first semester. In this sense, the system is composed of students who belong to any academic semester and chose either the face-to-face course or the m-learning based course. After a student finishes his academic cycle, a new student comes into the system at his first semester, so we can simulate a long-run behavior by considering this "birth and death" population dynamic. The model was developed in Netlogo®, and every step of the simulation represents an academic semester.

3.1. Operationalization of the simulation model

Once students have been accepted at the first semester, they form relations (connections) between themselves, each student having an average number of friends and occasionally forming connections with students from other semesters, depending on the gap between their own semester and the semester of other students. This idea is represented in eq. (1), where $\mathbf{Prob_{1j}}$ is the probability that an individual of semester 1 relates to an individual of semester j, $\mathbf{P_A}$ is the probability that an individual of semester 1 relates to another individual of semester 1 (parameter model), and S is the total number of semesters that make up the academic curriculum of a student.

$$\mathrm{Prob}_{1j} = \mathrm{P}_A\left(1 - \frac{1}{S}j\right), \qquad j = 2, 3 \ldots S \tag{1}$$

As a result, the social structure among students has characteristics of a small world, in which the probability that two individuals' connection depends on the distance (in this case, intellectual distance) between them, therefore, causing many connections between close individuals and fewer connections between distant individuals. In these networks (connections), which are of great use in diffusion models because of their topological similarities to real social networks, the probabilities exist that two nodes are not connected or are not independent, thereby, showing a smaller diameter and a higher association [39−40].

In each step of the simulation, students advance through a semester and can choose the way they will attend each of their subjects per semester, considering two modalities offered by the academic institution: (a) 100% face-to-face course, and (b) 100% m-learning based course. Although in real contexts there could be courses with a mix of both of those, we decided to include the two extremes of the range to enable wider conclusions about the phenomenon and the behavior of students. It should be noted that the choice of m-learning at the first semester corresponds to the policy of the institution (i.e., the institution makes this decision for students in the first semester).

The choice made by the individual about the typology of each subject that shall course during this semester, depends on his intention towards the performance of the activities associated with m-learning. This was represented while considering the model proposed by [34], and it was operated as follows.

3.1.1. Perceived ease of use

This refers to how easy an individual perceives studying the subjects based on m-learning practices, which is determined by the parameters that model this ease of use. In real contexts, m-learning practices can be easier to performance if, for example, institution supports the device's acquisition or use, instructors are more skilled about the new practices, or course's methodologies are more adequate to the new devices.

Because it was considered interesting evaluating the impact of this variable at different moments of the scholar's course, ease of use distinguishes between the basic cycle (semester 1-5) and the advanced cycle (6-10 semester). Thus, ease of use fallows a normal distribution among the subjects at each level, following the indicated parameters of mean and standard deviation in the model. This concept is shown in eq. (2), where $\mathbf{EU_i}$ is the ease of use of a virtual subject in a cycle, i ($\mathbf{EU_i \epsilon\, [0, 1]}$), $\boldsymbol{\mu_{Fi}}$ is the average ease of use of a virtual subject in a cycle, i ($\boldsymbol{\mu_i \epsilon\, [0, 1]}$), and $\boldsymbol{\sigma_A}$ is the standard deviation ease of virtual subjects($\boldsymbol{\sigma_A \epsilon\, [0, 1]}$).

$$\mathrm{EU}_i \sim \mathrm{N}(\mu_{\mathrm{EU}i}, \sigma_A) \qquad i = 1, 2 \tag{2}$$

Normal distributions are wildly used for representing heterogeneity among individuals in agent-based modeling field (for example, see [46–49]).

3.1.2. Perceived usefulness

According to diffusion theory [50,51], a particular behavior is not just useful by itself, but becomes more useful

for a particular individual when more individuals around him adopt the same behavior. This is especially important for the m-learning context, since the collaborative learning promise.

We modeled the utility that an individual find in m-learning like a function of the experience that all individuals connected with him have had with m-learning. Thus, if none of his friends has taken a virtual subject throughout their academic life, the perceived usefulness by that individual of m-learning will be zero. Furthermore, if all his friends have virtually taken all their subjects throughout their entire academic experience, the perceived usefulness by each individual will be 1. This concept is deduced in eq. (3):

$$U_{it} = \sum_{j=1}^{m_i} \sum_{k=1}^{t*Ss} \frac{MLS_{js_k}}{Ss} \quad i = 1, 2 \dots n \quad j = 1, 2 \dots m_i \quad k = 1, 2, \dots S \tag{3}$$

Where U_{it} is the usefulness that the individual i finds with m-learning in the semester t, m_i is the number of connected individuals with the individual i, MLS_{jk} is the number of m-learning subjects studied by individual j (which is connected with the individual i) in his k semester, As is the number of courses per semester, S is the total number of semesters of the academic curriculum, and n is the number of individuals in the system.

3.1.3. Subjective norms

For simplicity of the model, we have involved only individuals connected with him. In this regard, the individual takes into account the decisions made by his closest connections in the previous and current semester of each of them. According to eq. (4):

$$SN_{it} = \sum_{j=1}^{m_i} \frac{MLS_{j,s_j-1}}{As}, i = 1, 2 \dots n, \; j = 1, 2 \dots m_i \tag{4}$$

Where SN_{it} is the subjective norm on the individual i in the semester t to make use of m-learning, m_i is the number of individuals connected with the individual i, $MLS_{j,t-1}$ is the number of m-learning subjects studied by the individual j (which is connected with the individual i) in the previous semester (s_j-1), and As is the number of courses per semester. Thus, the higher the number of virtual subjects taken by close connections over the total subjects taken, the higher will the social pressure exerted on the individual be for adopting m-learning.

3.1.4. Perceived self-efficacy

It is represented as the efficacy of each student as a function of their experience. Thus, a student with more experience in m-learning will feel more self-efficient than the one with less experience. Experience is given by two factors: (a) the number of courses taken in the past under this modality, in proportion to the total number of courses; and (b) the individual's experience related to m-learning before being accepted into first semester in the institution as shown in eq. (5).

$$E_{it} = pE_i + \sum_{k=1}^{t} \frac{MLS_{ik}}{Ss} \qquad i = 1, 2 \dots n \tag{5}$$

Where E_{it} is the experience of individual i in the semester t, pE_i is the previous experience of individual i in m-learning activities before being accepted into semester 1, MLS_{ik-1} is the amount of subjects studied by the individual i through m-learning in k semester, and Ss is the number of courses per semester.

At each step of the simulation, each individual calculates the value attained and groups these assessments as an indicator of intention, according to what was presented by [34]. 1(6). These weights are normally distributed among the population, with a mean and standard deviation defined by parameters.

$$wA_i + wSN_i + wC_i = 1 \tag{6}$$

Where wA_i is the weight of the attitude construct for individual i in the calculation of his intention ($wA_i \sim N(\mu_A, \sigma_s)$), wSN_i is the weight of the social norm construct for the individual i in calculation of his intention ($wSN_i \sim N(\mu_{NS}, \sigma_s)$), wC_i is the weight of the control construct for individual i in the calculation of his intention ($wC_i \sim N(\mu_C, \sigma_s)$), μ_A, μ_{SN} y μ_C are the average weight of the attitude factor, the weight of the social norm factor, and the weight control factor in the indicator of intention of students, and σ_s is the standard deviation of students (diversity of students in terms of weight and experience).

Finally, the intention of the individual i to carry out associated practices with m-learning in a period t is presented in eq. (7), and it is calculated as a linear combination of attitude, subjective norm and control as previously exposed.

$$I_{it} = wA_i \left[\frac{F_i + U_{it}}{2}\right] + wSN_i(SN_{it}) + wC_i(E_{it}) \tag{7}$$

Where I_{it} is the intention of the individual i to carry out practices associated with m-learning at the period t. Notice that $I_{it} \in [0,1]$, hence, the individual will choose a m-learning subject with a probability of I_{it} (otherwise, the choice will be a subject received face-to-face).

3.2. Parameterization

The parameterization of the model considered a theoretical case. Theoretical studies have been widely used in the agent-base modeling field, especially in those cases where there is a low simulation background in the field. This kind of models is useful to understand a particular phenomenon instead of predict the behavior of a particular system (for example, see [49,52−54]).

In our model, the academic cycle is composed of 10 semesters. Each semester contains five subjects to be studied by 30 students (i.e., under normal operating conditions, the system is composed of 300 students over 10 academic semesters). The parameters of baseline simulation are presented in Table 1.

Table 1.
Parameterization of model for the basis case.

Environment parameters	Value	Students parameter	Value
Semester	10	Average weight of attitude factor	0.33
Subjects per semester	5	Average weight of social norm factor	0.33
Students per subject	30	Average weight of control factor	0.34
Average ease of use of devices in basic level subjects	0.5	Previous average experience	0.1
Average ease advance level subjects	0.5	Diversity of students in terms of weights and experience	0.1
Diversity of subjects in terms of easiness	0.1	Average percentage of same semester friends	10%

Source: The authors

The average ease of use of devices in all virtual courses, both basic cycle and those of the middle and advanced cycles, were 0.5 (intermediate easiness). The diversity of these subjects (defined as the standard deviation of ease alongside the subjects of each cycle) was 0.1 (low diversity) (recall that the ease of each subject is given by a certain normal distribution of these parameters).

On the average, students assigned the same weight to the factors surrounding their decision adoption rule concerning m-learning, and had low diversity among them (remember that the weight that each student gives to each factor is given by a normal distribution determined by these parameters). The previous experience in m-learning was assumed to be as low as (10%), and it was considered that, on the average, a student forms strong connections with 10% of students in the same semester. It was also found that the institution has a policy of assigning face-to-face administration of subjects to students in their first semester.

3.3. Scenario's design

The execution model under these parameters results in a baseline scenario. Note that some of the parameters are outside institutional control, since the weight is given by each one of the factors that make its decision rule or diversity among individuals. However, some of these parameters can be influenced by the institution, particularly those associated with the ease of subjects in m-learning.

Among others, the easiness to use the devices in these subjects is affected by the degree of training that teachers have in order to lead the activities within m-learning, the presence of a suitable technology platform for the needs of the subject and the institution, and the support offered by institution to students enabling access to mobile devices that facilitate learning under this new paradigm. Therefore, it was considered convenient to design and add four additional scenarios to the baseline scenario to reflect this, as shown in Fig. 2.

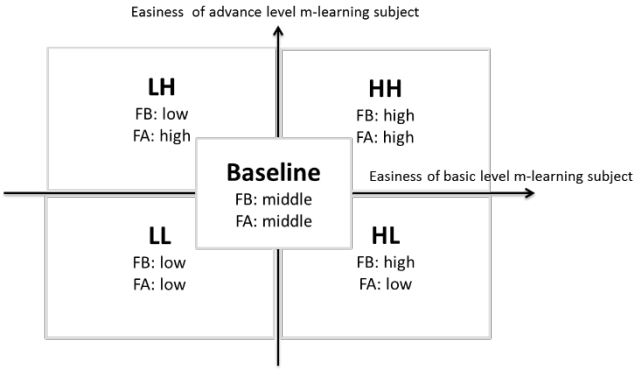


Figure 1. Scenario design
Source: The authors

The scenarios are extended below:

Scenario HH: high easiness level of courses in m-learning, in both the basic cycles and advanced cycles ($\mu_{EU1} = 1, \mu_{EU2} = 1$).

Scenario HL: high easiness level of subjects in m-learning in the basic cycle, and a low level in the advanced cycle($\mu_{EU1} = 1, \mu_{EU2} = 0$).

Stage LH: low easiness level of courses in m-learning in the basic cycle and a high level in the advanced cycle($\mu_{EU1} = 0, \mu_{EU2} = 1$).

Scenario LL: low easiness level of courses in m-learning, in both the basic cycles and advanced cycles ($\mu_{EU1} = 0, \mu_{EU2} = 0$).

Furthermore, consider that the baseline scenario can be treated as a middle easiness level of courses in m-learning, in both the basic and advanced cycle ($\mu_{EU1} = 0.5, \mu_{EU2} = 0.5$).

4. Results and discussion

4.1. Results

Even if the model represents a general case, it is possible to obtain some results and conclude from them in a general way. The results are based on two indicators: (1) evolution of the adopters over time, and (2) evolution of the average intention over time. Note that the adopter number is calculated as the proportion of the total choices made for m-learning subjects, with regards to the total number of choices made during the whole simulation.

Since the probabilistic representation of the population heterogeneity, each scenario (including base scenario) was simulated 100 times. As result, we had a set of 600 simulations.

Fig. 3a presents the percentage of adoption decisions for each scenario over time (semesters), considering a free initial choice (students at first semester randomly decides whether to attend a face-to-face or an m-learning course). Fig. 3b presents the same results but considering a mandatory initial choice (students are forced to attend all their first courses based on m-learning methodology).

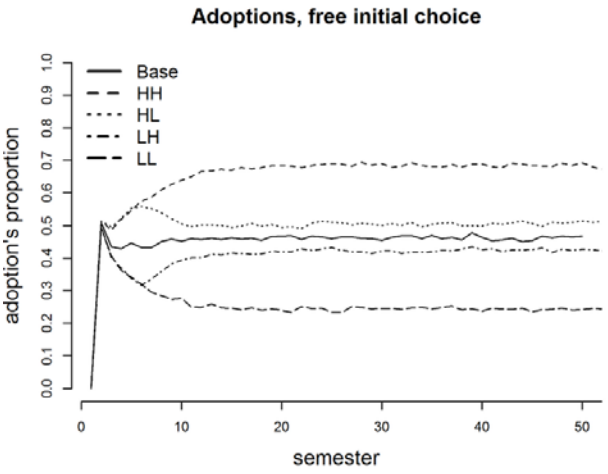


Figure 3a. Percentage of adoptions, free initial choice
Source: The authors

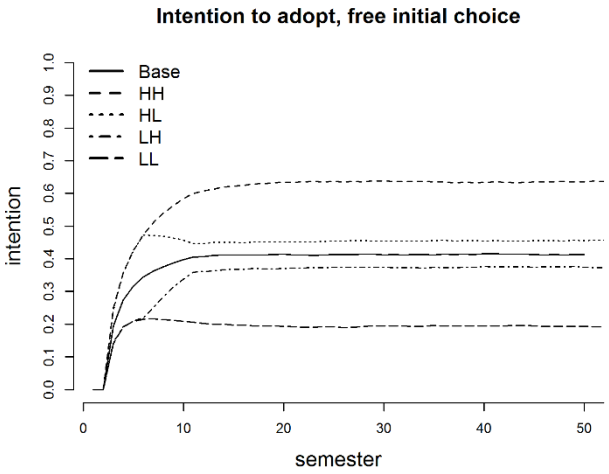


Figure 4a. Average intention, free initial choice
Source: The authors

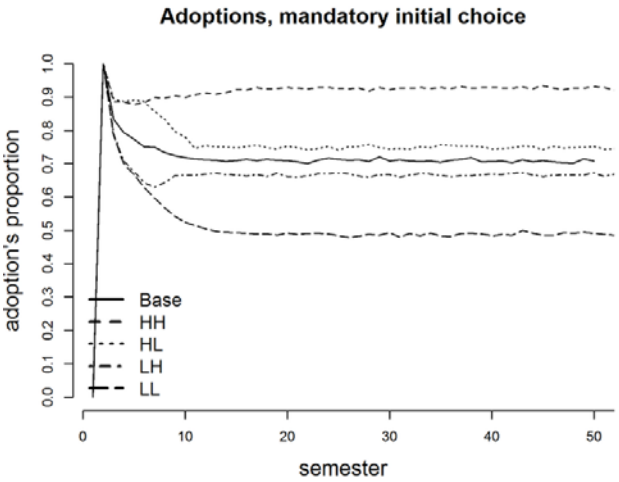


Figure 3b. Percentage of adoptions, mandatory initial choice
Source: The authors

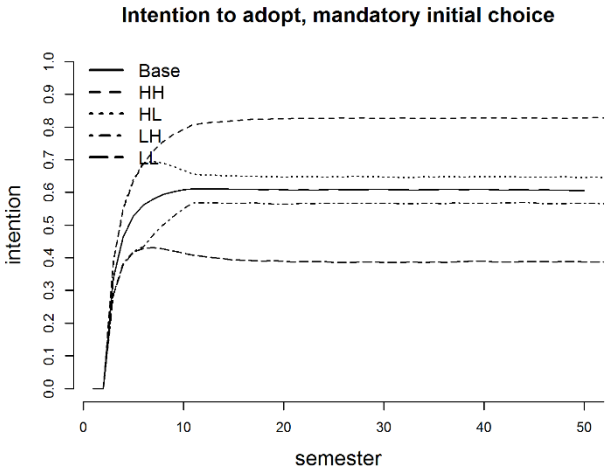


Figure 4b. Average intention, mandatory initial choice
Source: The authors

It is noticed that when institutional policy enables free choice (and assuming that students take the decision randomly), the adoptions start at 50% for all the scenarios. But, the adoptions reduce by half over time if the ease of use for both the basic and advanced cycles is low, and increases by half it easiness is high for both cycles. The curve's behavior reaches an equilibrium around these values about the semester 15. For the other scenarios, the adoptions get close to the base scenario (average ease of use); however, they are higher (about 10%) for the scenario with a high ease of use for the basic cycle. It means, efforts to increase the ease of use in the basic cycle seem to be more effective than efforts to increase this easiness in the advanced cycle.

Initial behavior of the curves (before semester 10) presents a distortion caused by the filling phenomenon of the system (there are no people in advanced levels at the first steps of simulation). It is important to note that this distortion does not make part of the phenomenon, and must be ignored in the analysis.

Meanwhile, if students attend all their first courses according to the m-learning methodology, the m-learning adoptions start in 1 for all the scenarios, as it is expected. However, adoptions reduce by half over time if the ease of use for both the basic and advanced cycles is low (reaching 50%), and sustains its value close to 1 if easiness is high for both c When easiness is average, adoptions establish about 75%, and the behavior of the other scenarios is similar to the previous analysis.

Following the same logic, Fig. 4a and 4b show the average intention (explainer for the adoption decisions).

When institutional policy enables free choice, the average intention for m-learning practice starts from 0.2 when ease of use is low throughout the academic cycle, and reaches 0.6 when this easiness is high (with an intermediate value of 0.4 when the easiness is average). Meanwhile, if students attend all their first courses according to the m-learning methodology, the intention of adopting m-learning practices

exceeds 0.4 if the ease of use for both the basic and advanced cycles is low. However, the intention becomes a maximum of 0.8, if the easiness is high for both cycles.

In all the cases, the behavior described above is preserved. The effect of the initial choice policy is to push the curves up or down according to the policy. It can be not so clear for the adoption curves since the starting point, but intention curves reflect this fact very well. However, the easiness of use changes the behavior of the curves, showing that it causes a structural change in the system, more than a scaling change.

It can be noticed that the adoption behavior matches with the behavior of the intention, which contributes to the validity of the model. However, average intention seems to be higher than adoptions, but it is only the effect of the cumulative decisions in the adoption's indicator (intention's indicator considers only the intention of the people into the system in a given moment, while adoption's indicator considers the cumulative decisions of all individuals in the system).

It is surprising not to find S behavior, as it would point to the Diffusion Theory [50]. The reason for this lies in the temporary nature of the population subject to the interested behavior. That is, despite the fact that a particular student completes his curriculum with high intention of adoption, newly accepted students in the institution can have an intention for initial adoption that will depend almost entirely on their previous experience. Thus, the nature of the phenomenon prevents a collective memory that does retain the intentions through the population, unless some policies are implemented (such as strengthen the contact among students of advanced and basic cycles or make diffusion about the performance of the last semesters).

To reflect this fact, a modification was made to the calculation of the intention of adoption that considered an additional defined variable, which is the collective experience generated through cultural change that is reflected in the intention of students who leave the university after graduation. This intention of adoption is "inherited" by newly accepted students in the institution, together with an associated weight that affects their intention to adopt m-learning. This is described in equation (8).

$$I_{it} = wII_i \times II_i + wA_i \left[\frac{F_i + U_{it}}{2}\right] + wSN_i(SN_{it}) + wC_i(E_{it}) \quad (8)$$

Where I_{it} is the intention of the individual i to carry out practices associated with m-learning during a period t, II_i is the intention inherited by the individual i at the time of acceptance into the institution (inherited from those individuals who left the institution at the end of their academic studies). For each individual, $II_i \sim N(I_{10}, \sigma_s)$, where I_{10} is the average intention of individuals in semester 10 and wII_i is the weight given to the inherited intention (parameter model). The model was parameterized in this case to consider a free choice policy for the first semester. Adoption results of this new case are presented in Fig. 5.

Because the starting point of the curves, which is caused by the policy, it is not possible to see a perfect S-shape behavior. However, it is possible to see increasing curves over time, a behavior not found without the inheritance consideration.

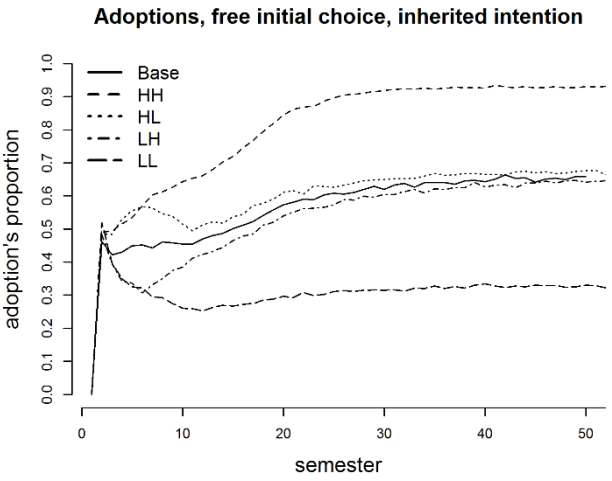


Figure 5. Percentage of adoptions considering inherited intention
Source: The authors

Inheritanced intention makes stronger the curve's behavior. Therefore, adoptions could be very high for the HH scenario (about 90%), but remain low for the LL scenario (about 30%, a similar value for the not inherited intention case, as it was shown in Figure 3a). Scenarios in the middle will be close to the base scenario (average easiness) over time.

4.2. Discussion

"Higher education institutions should implement strategic efforts to build m-learning implementation plans, such as design guidelines, development phases and articulating norms, while considering the current level of students' readiness" [34, p. 1062]. The results of this paper show the best moment of the educational process to implement any plan and some of its characteristics.

We found evidence that suggests that students will adopt the technology more easily if they are introduced to it from the beginning of their educational process (even by imposition). It is also important that the devices are easy to use (consistent with [7]) and are implemented from the basic cycle (consistent with [55]), so that students can become familiar with the devices and their contents, allowing that in the advanced cycles, the students can evolve increasingly, taking advantage of the potentials of m-learning. It is necessary to consider that the perceived ease of use of a learning tool is not only related to the interface and its content, but also to the pedagogical strategies to be developed by the teacher.

Another important element is the social influence or pressure [55−57], which in this case was modeled through a network. It was found that this network becomes more effective when the strategy is implemented in the early stage of the process, as it was stated by [56]. Although they argued that this effect decreases over time, we found here that the collective improvement of adoption is preserved over time, even with the fact that convinced students abandon the system and leave no memory of their intention to adopt m-learning practices.

Even more interesting, we have found that policies interact among them to cause some effects. Accordingly, policies oriented to preserve the institutional adoption memory enhance the effect of individual easiness of use policies, but are useless if these individual policies are not implemented. If this easiness of use is guaranteed for both basic and advanced cycles, adoption rates will increase over time in the institution and reach levels about 90% on the long run. If this easiness of use is guaranteed for only one of the cycles (not matters if it is the basic or advanced cycle), the adoption rate will be about 60%. It there is not easiness of use, the adoption rate will be about 30%, no matter if there is also a memory policy or not.

In an absence of any memory preserve policy, adoption rates will be between 0.3 and 0.7, with an average value of 0.5 for the basis scenario, 0.45 if the easiness of use is guaranteed for the advanced cycle and 0.55 if it is guaranteed for the basic cycle.

5. Conclusions

In this article, we developed an agent-based model where the decision rules were based on the Planned Behavior Theory to analyze different policies aimed at promoting m-learning in higher education institutions. The results indicate that an effective strategy to promote this practice is to increase the ease of use during the first semesters of students, rather than in the last. This is explained by the presence of cycles of social pressure reinforcement among students, and improved attitude through the accumulated experience. Whereas, if strategies of ease of use are carried out in advanced semesters, the level of students' intention will not increase with equal intensity, because there will not be enough time in the academic institution to achieve this effect. In this regard, it is recommended that institutions invest their resources in facilitating the practice of m-learning in the subjects, prioritizing the basic cycle.

We have also found that policies aimed at introducing the students to m-learning practices at very early stages of their academic life are favorable for later voluntary adoption of those practices, even if the institution (and not students) makes the first choices.

Similarly, it was observed that policies aimed to preserve the institutional m-learning memory can enlarge the effect of individual easiness policies. This kind of policies is, at the same time, useless if these individual policies are not implemented. While the culture of practicing m-learning is temporal in an institution, every student who achieves a high intention of practice will eventually be replaced by another student without that intention, and collective memory will disappear. Therefore, it is necessary that institutions implement permanent strategies over time in order to preserve the institutional m-learning memory.

Results also suggest that the efforts of educational institutions should transcend the institution itself and should cover first stages of the academic life of students, in order to promote the penetration of m-learning into higher educational institutions.

In the future, further research should be conducted to model the effect of the support from an external entity on the culture of using m-learning on a long-term, in order to start from an initial intention to adopt the m-learning practices at high educational levels.

Furthermore, a deeper analysis of the instructor and teacher's decision process could help to enrich the knowledge of the dynamics in the m-learning adoption. More psico-sociological research in this direction could be useful in this aim.

This model and the results we got must be considered as a starting point. Further research in calibrating our model for particular cases could enrich and make wider our conclusions. Incorporating more and more cases would enable the model for a predictive use, besides its current understanding scope.

References

[1] S. and C.O., United Nations Educational, Mobile Learning, Unesco online, 2017.

[2] María, E., Enciso, V., Jácome, E.P., Valencia-Arias, A., Nelcy, C. and Hernández, J., Analysis of university management of emerging technologies and recommendations for developing countries, Turkish Online J. Educ. Technol., 16(2), pp. 1-10, 2017.

[3] Rivera, P., Sánchez, P., Romo, E., Jaramillo, A. and Valencia-Arias, A., Percepciones de los estudiantes universitarios frente al aprendizaje por medio de dispositivos móviles, Rev. Educ. y Desarro. Soc., 7(2), pp. 152-165, 2013.

[4] Ally, M. and Prieto-Blázquez, J., What is the future of mobile learning in education?, Rev. Univ. y Soc. del Conoc., 11(1), pp. 142-151, 2014.

[5] Gaviria, D., Arango, J. and Valencia, A., Reflections about the use of information and communication technologies in accounting education, Procedia - Soc. Behav. Sci., 176, pp. 992-997, 2015.

[6] Villa, E., Valencia, J., y Valencia, A., El papel de las narrativas digitales como nueva estrategia educativa: resultados desde un análisis bibliométrico, Kepes, 13(enero-junio), pp. 197-231, 2016.

[7] Wang, Y.-S., Wu, M.-C. and Wang, H.-Y., Investigating the determinants and age and gender differences in the acceptance of mobile learning, Br. J. Educ. Technol., 40(1), pp. 92-118, 2009.

[8] Ahmed, S. and Parsons, D., Abductive science inquiry using mobile devices in the classroom, Comput. Educ., 63, pp. 62-72, 2013.

[9] Jones, A.C., Scanlon, E. and Clough, G., Mobile learning: Two case studies of supporting inquiry learning in informal and semiformal settings, Comput. Educ., 61, pp. 21-32, 2013.

[10] Traxler, J. and Kukulska-Julme, A., Mobile learning in developing countries, Common Wealth Learn., 2005.

[11] Benjumea-Arias, M.L., Villa-Enciso, E.M. y Valencia-Arias, J., Beneficios e impactos del teletrabajo en el talento humano. Resultados desde una revisión de literatura, Rev. CEA, 2(4), pp. 59-73, 2016.

[12] Díez-Echavarría, L., Valencia, A. and Bermúdez, J., Agent-based model for the analysis of technological acceptance of mobile learning, IEEE Lat. Am. Trans., 15(6), pp. 1121-1127, 2017.

[13] Hill, T.R. and Roldan, M., Toward third generation threaded discussions for mobile learning: opportunities and challenges for ubiquitous collaborative environments, Inf. Syst. Front., 7(1), pp. 55-70, 2005.

[14] Homan, S. and Wood, K., Taming the mega-lecture: wireless quizzing, Syllabus Mag., 2003.

[15] Hernández, J.B., Chalela, S., Arias, J.V. and Arias, A.V., Research trends in the study of ICT based learning communities: a bibliometric analysis, EURASIA J. Math. Sci. Technol. Educ., 13(5), pp. 1539-1562, 2016.

[16] Sharples, M., Taylor, J. and Vavoula, G., A theory of learning for the mobile age, Sage Handb. Elearning Res., pp. 221-247, 2007.

[17] Villa, E., Ruiz, L., Valencia, A. and Picón, E., Electronic commerce: factors involved in its adoption from a bibliometric analysis, J. Theor. Appl. Electron. Commer. Res., 13(1), pp. 39-70, 2018.

[18] Attewell, J., From research and development to mobile learning: tools for education and training providers and their learners, in 4th World Conference on mLearning, 2005, 16 P.

[19] Corbeil, J.R. and Valdes-Corbeil, M.E., Are you ready for mobile learning?, Educ. Q., 30(2), 51 P, 2007.

[20] Liu, Y., Han, S. and Li, H., Understanding the factors driving m-learning adoption: a literature review, Campus-Wide Inf. Syst., 27(4), pp. 210-226, 2010.
[21] Kalafatis, S.P., Pollard, M., East, R. and Tsogas, M.H., Green marketing and Ajzen's theory of planned behaviour: a cross-market examination, J. Consum. Mark., 16(5), pp. 441-460, 1999.
[22] Rex, E. and Baumann, H., Beyond ecolabels: what green marketing can learn from conventional marketing, J. Clean. Prod., 15(6), pp. 567-576, 2007.
[23] Jansson, J., Consumer eco-innovation adoption: assessing attitudinal factors and perceived product characteristics, Bus. Strateg. Environ., 20(3), pp. 192-210, 2011.
[24] Arts, J.W.C., Frambach, R.T. and Bijmolt, T.H.A., Generalizations on consumer innovation adoption: A meta-analysis on drivers of intention and behavior, Int. J. Res. Mark., 28(2), pp. 134-144, 2011.
[25] Laroche, M., Bergeron, J. and Barbaro-Forleo, G., Targeting consumers who are willing to pay more for environmentally friendly products, J. Consum. Mark., 18(6), pp. 503-520, 2001.
[26] Fishbein, M. and Ajzen, I., Belief, attitude, intention and behavior: An introduction to theory and research, 1975.
[27] Ajzen, I., From intentions to action: a theory of planned behavior, Will; performance; Control (psychology); Motiv., pp. 11-39, 1985.
[28] Ajzen, I., The theory of planned behavior, Organ. Behav. Hum. Decis. Process., 50, pp. 179-211, 1991.
[29] Davis, F.D., Perceived usefulness, perceived ease of use, and user acceptance of information technology, MIS Q., 13(3), pp. 319-340, 1989.
[30] Carlsson, C., Carlsson, K., Hyvönen, J., Puhakainen, and P. Walden, Adoption of mobile devices/services: searching for answers with the UTAUT, in Proceedings of the 39th Annual Hawaii International Conference on System Sciences (HICSS'06), 2006, pp. 1-10.
[31] Liu, Y., An adoption model for mobile learning, in IADIS e-commerce 2008 conference, Amsterdam, The Netherlands, 2008.
[32] Mac Callum, K. and Jeffrey, L., The influence of students' ICT skills and their adoption of mobile learning, Australas. J. Educ. Technol., 29(3), 2013.
[33] Huang, J.H., Lin, Y.R. and Chuang, S.T., Elucidating user behavior of mobile learning: a perspective of the extended technology acceptance model, Electron. Libr., 25(5), pp. 585-598, 2007.
[34] Cheon, J., Lee, S., Crooks, S.M. and Song, J., An investigation of mobile learning readiness in higher education based on the theory of planned behavior, Comput. Educ., 59(3), pp. 1054-1064, 2012.
[35] Chalela-Naffah, S., Valencia-Arias, A., Bermúdez-Hernández, J. y Ortega-Rojas, C.M., Percepciones estudiantiles acerca del uso de nuevas tecnologías en instituciones de educación superior en Medellín, Rev. Lasallista Investig., 13(2), pp. 151-162, 2016.
[36] Valencia, A. and González, M. and Castañeda, G., Structural equation model for studying the mobile-learning acceptance, IEEE Lat. Am. Trans., 14(4), pp. 1988-1992, 2016.
[37] Shah, P., Who are employees' social referents? Using a network perspective to determine referent others, Acad. Manag. J., 41(3), pp. 249-268, 1998.
[38] Venkatesh, V. and Davis, F.D., A theoretical extension of the technology acceptance model: four longitudinalfield studies, Manage. Sci., 46(2), pp. 186-204, 2000.
[39] Taylor, S. and Todd, P., Decomposition and crossover effects in the theory of planned behavior: a study of consumer adoption intentions, Int. J. Res. Mark., 12(2), pp. 137-156, 1995.
[40] Lee, Y. and Kozar, K., Investigating factors affecting the anti-spyware system adoption, Commun. ACM, 48(8), pp. 72-77, 2005.
[41] Agarwal, R. and Karahanna, E., Time flies when you're having fun: cognitive absorption and beliefs about information technology usage, MIS Q., 24(4), pp. 665-694, 2000.
[42] Valencia, A., Benjumea, M. y Rodríguez-Lora, V., Intención de uso del e-learning en el programa de administración tecnológica desde la perspectiva del modelo de aceptación tecnológica, Rev. Electrónica Educ., 18(2), pp. 247-264, 2014.
[43] Bonabeau, E., Agent-based modeling: methods and techniques for simulating human systems, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 99(3), pp. 7280-7287, 2002.
[44] Barabási, A.-L., Emergence of Scaling in Random Networks, Science 286(5439), pp. 509-512, 1999.
[45] Barabási, A.-L., Mean-field theory for scale-free random netowork, Phys. A Stat. Mech. its Appl., 272, pp. 173-187, 1999.
[46] Kovanis, M., Porcher, R., Ravaud, P. and Trinquart, L., Complex systems approach to scientific publication and peer-review system: development of an agent-based model calibrated with empirical journal data, Scientometrics, 106(2), pp. 695-715, 2016.
[47] Chen, X. and Zhan, F.B., Agent-based modelling and simulation of urban evacuation: relative effectiveness of simultaneous and staged evacuation strategies, J. Oper. Res. Soc., 59(1), pp. 25-33, 2008.
[48] Kinsella, S., Greiff, M. and Nell, E.J., Income distribution in a stock-flow consistent model with education and technological change, East. Econ. J., 37(1), pp. 134-149, 2011.
[49] Squazzoni, F. and Takaacutecs, K., Social simulation that 'peers into peer review,' J. Artif. Soc. Soc. Simul., 14(4), p. 3, 2011.
[50] Rogers, E.M., Diffusion of innovations, Third Edit., 11. London: Collier Macmillan Publishers, 1983.
[51] Jager, W. and Janssen, M., An updated conceptual framework for integrated modeling of human decision making: The Consumat II, 2012.
[52] Squazzoni, F. and Gandelli, C., Saint Matthew strikes again: an agent-based model of peer review and the scientific community structure, J. Informetr., 6(2), pp. 265-275, 2012.
[53] Macy, M.W. and Willer, R., From factors to actors: computational sociology and agent-based modeling, Annu. Rev. Sociol., 28(1), pp. 143-166, Aug. 2002.
[54] Laurie, A. and Jaggi, N., Role of 'vision' in neighbourhood racial segregation: A variant of the Schelling Segregation Model, Urban Stud., 40(13), pp. 2687-2704, 2003.
[55] Abu-al-aish, A. and Love, S., Factors influencing students' Acceptance of M- Learning: an investigation in higher education, Int. Rev. Res. Open Distance Learn., 14(5), pp. 1-11, 2013.
[56] Venkatesh, V., Morris, M.G., Davis, G.B., Davis, F.D. and Walton, S.M., User acceptance of information technology: Toward a unified view, MIS Q., 27(3), pp. 425-478, 2003.
[57] Iqbal, S. and Qureshi, I.A., M-learning adoption: a perspective from a developing country, Int. Rev. Res. Open Distance Learn., 13(3), pp. 147-164, 2012.

L. Díez-Echavarría, is a BSc. in Management Eng. and she has a MSc. degree in System Engineering from the Universidad Nacional de Colombia. She is a professor in the Instituto Tecnológico Metropolitano ITM, Medellín, Colombia. Her research interests include agent-based modeling, discrete event simulation and system dynamics simulation in ecological and social areas.
ORCID: 0000-0001-6022-6595

A. Valencia, is a BSc. in Management Eng. from Universidad Nacional de Colombia, he has a MSc. in System Engineering from the same University. He is a professor in the Department of Administration Science in Instituto Tecnológico Metropolitano ITM, Medellín, Colombia. His research includes simulation, marketing research, and statistic science. He has also experience in the area of agent-based modeling and system dynamics, specializing in the development of social and economic models.
ORCID: 0000-0001-9434-6923

L. Cadavid, received the Bs. in Eng in Management Engineering in 2006, the MSc. degree in Systems Engineering in 2010, and the PhD degree in Systems Engeneering in 2015, all of them from the Universidad Nacional de Colombia. Medellin, Colombia. Currently, she is a professor in the Engineering Department at several universities in Medellín. Her research interests include Innovations Diffusion, Agent-Based Modeling and simulation and system dynamics simulation, as well as cleaner technologies.
ORCID: 0000-0002-6025-5940

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Maps of Intrinsic Cost (IC) in reliability problems of medium voltage power distribution systems through a Fuzzy multi-objective model

Federico G. Camargo, Gustavo A. Schweickardt & Carlos A. Casanova

CONICET, Facultad Regional Concepción del Uruguay, Universidad Tecnológica Nacional, Entre Ríos, Argentina, camargof@frcu.utn.edu.ar, schweickardtg@frcu.utn.edu.ar, casanovac@frcu.utn.edu.ar

Received: June 22th, 2017. Received in revised form: February 12th, 2018. Accepted: February 28th, 2018.

Resumen
En este trabajo se analizó la fiabilidad de un Sistema de Distribución de Potencia de Media Tensión (SDMT) con la aplicación del Dispositivo de Seccionamiento/Protección (SP). La solución más satisfactoria se obtuvo a través de la metaheurística X-PSO con extensión al dominio difuso. La principal contribución fue la simplificación del índice denominado Costo Intrínseco (IC) y el análisis de los criterios de fiabilidad del coste del dispositivo y de la energía no suministrada. El IC permite obtener la valoración económica de cada uno de los criterios a optimizar y se basa en la cláusula 'Ceteris Paribus'. Se describen el problema, el modelo y el método de resolución utilizado. Se realizó un extenso análisis a través de gráficos bidimensionales (mapas) de la valoración económica de los criterios optimizados de sus respectivos Costos Intrínsecos. Finalmente, se analiza el caso real del problema de la optimización de la confiabilidad y los resultados obtenidos.

Palabras clave: Costo intrínseco (IC); dominio multi-objetivo; optimización del enjambre de partículas con Factor de Constricción (CF PSO); Sistema de distribución de Potencia (DPS); confiabilidad de sistemas de media tensión.

Mapas de Costo Intrínseco (IC) en problemas de confiabilidad de sistemas de distribución de potencia en media tensión a través de un modelo difuso multiobjetivo

Abstract
In this work the reliability of a real Medium Voltage Power Distribution Systems (MVPDS) with the application of Sectionalizing/Protection (SP) Devices is analyzed. The most satisfactory solution is obtained through a metaheuristic X-PSO with extension to the fuzzy domain. The main contribution of this work is the simplification of the index called Intrinsic Cost (IC) and the analysis of the criteria of reliability of Device cost and Energy Not supplied. The IC enables to obtain the economic valuation of each one of the criteria to be optimized, and it is based on the clause 'Ceteris Paribus'. The problem, the model and the solving method used are described. An extensive analysis is performed through two-dimensional graphs (maps) of the economic valuation of the criteria optimized from their respective Intrinsic Costs. Finally, the real case study of the problem of the reliability optimization and the results obtained are analyzed.

Keywords: Intrinsic Cost (IC); multiobjective domain; particle swarm optimization with Constriction Factor (CF PSO); Distribution Power System (DPS); medium voltage system reliability.

1. Introducción

In the next few years after the reform resulting from the segmentation of the Argentine electricity market, a discussion and regulation of the technical criteria to be applied in order to obtain an 'acceptable' quality of service was urgently required. Among the discussion criteria, which is actually regulated and penalized in the Medium Voltage Power Distribution Systems

How to cite: Camargo, F.G., Schweickardt, G.A. and Casanova, C.A., Maps of Intrinsic Cost (IC) in reliability problems of medium voltage power distribution systems through a Fuzzy multi-objective model. DYNA, 85(204), pp. 334-343, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

(MVPDS), is the reliability index known as Energy Not Supplied (ENS), which refers to the unavailability of electricity service due to contingencies. In most cases, this may be due to failures in the constructive elements, climatic factors, overloads, etc. In this context there are different reasons for discussion regarding the criteria to be applied by a regulator. In the first place, the network service constitutes a natural monopoly that is not contestable and, consequently, subject to regulation. Second, there is no agreement of criteria to determine whether a decision unit is efficient based on its reliability and technical efficiency indexes. These attributes are "not monetizable", since they are not subject to conventional market equilibrium laws, and therefore there is no agreement on their economic value. Thirdly, the methods used today are based on simplifying assumptions such as linearization of objective function and constraints, use of stochastic models, and so on. The objective of the present work is to establish a formal procedure in order to determine a short-term investment plan, the optimal scenario in terms of the MVPDS Quality of Service. It also aims at reducing investment costs and ENS by Faults in the Medium Voltage lines, guaranteeing the satisfaction of the greatest possible energy demand.

This work is organized as follows: in section 2, the problem of reliability in medium-voltage electrical distribution systems is presented. Secondly, the principles of the Particle Swarm Optimization with Constriction Factor (CF PSO) metaheuristic is described. In third place, the extension to fuzzy domain is proposed for solving multi-objective optimization problems, by means of a fuzzy fitness function. In section 3, a simulation on a real distribution system and the results are presented. The conclusions are described in section 4.

2. Materials and methods

2.1. State of the art: problem, mathematical modeling and solution

The objective of engineering is to solve problems in a technically feasible manner and at a minimum cost. One of the problems in electrical engineering is the problem called reliability. The reliability problem of Medium Voltage Power Distribution Systems (MVPDS) is highly complex to study, model and solve.

MVPDS are vulnerable to being affected by various faults: technical defects in their components, climatic factors, variation in the consumption of users, etc., which produce different types of short circuits or overloads.

In the state of the art, to study the effect of a failure in some node of the electric network, stochastic models such as the Markov chain are used. In probability theory, a Markov model is a stochastic model used to model randomly changing systems. It is assumed that future states depend only on the current state, not on the events that occurred before it [1-2]. For reasons of space and complexity, this topic does not develop more deeply.

The present article continues a research line followed by the authors, in the area of MVPDS, Soft Computing and Artificial Intelligence. Then, different aspects would be considered: the problem studied, its mathematical modeling, its extension to the fuzzy domain and the solution method.

The problem: the Sectioning/Protection (SP) Devices considered in this work were: Interrupters, Disconnectors, and Fuses which have different technical characteristics and costs. The combination of these devices has a different effect on the network and an associated cost. This effect is related to the maneuvers of repair and reestablishment of the service. Using the 'what if' clause, four predominant cases were obtained.

Mathematical modeling: a multiobjective model was extended to the fuzzy domain, by means of the convergence of the different optimization criteria by the t-norm called Einstein Product, according to the 'Fuzzy Decision Making in Fuzzy Environments', is proposed. Fuzzy models are based on the reasoning and perception of the human being and allow change of domain to the variables or functions studied. Within the 'Decision Making Theory', the uncertainty associated with the desired result obtained is called as 'Fundamental Uncertainty'. In this way there are degrees of acceptance of a certain variable to a given set. This mean, the certainty or risk of accepting a given alternative is possible to be modeled using fuzzy sets [3-6]. Based on this, an index called Intrinsic Cost Index is proposed, which models the penalty cost for non-compliance with quality standards.

Regarding the solution method, the metaheuristics qualities are exploited as flexible methods of problem solving. In this aspect, the Particle Swarm Optimization with Constriction Factor (CF PSO) metaheuristic was applied [7].

Then, these three aspects define the methodology named as CF PSO with extension to the Fuzzy multiobjective domain or CF FPSO [8].

The objective of this methodology is to propose a regulation model of the MVPDS, to establish the penalties for breach of quality of supply.

2.2. *Model scope*

The optimization model was applied to a case of MVPDS taken from real data and studied in the state of the art using Mono and Multi-criteria models.

The objective is to determine the optimal location of SP devices of different types, optimizing four criteria: Investment Cost$\left[\frac{\text{USD}}{\text{year}}\right]$s, ENS $\left[\frac{\text{kWh}}{\text{year}}\right]$, SAIFI $\left[\frac{1}{\text{year}}\right]$and SAIDI $\left[\frac{\text{hs}}{\text{year}}\right]$.

The main characteristics of the operation of each device are:

- Fuses (F) operate only in the event of an active fault, disconnecting the entire network segment downstream and leaving it unplugged. They do not allow maneuvers and must be replaced in the event of any failure of their drive.
- Disconnectors (D) do not operate automatically in the event of an active fault. Their function is to disconnect the entire network segment downstream to enable safe maneuvering, taking into account that they are not designed to be operated when they are under load.
- Interrupters (I) operate when an active fault occurs and allow the network segment downstream to be disconnected or connected under load. Associated with the reconnection, a waiting time is required for the cooling of the oil that extinguishes the arc generated during the cutting process before being able to reconnect it. They can be remote controlled.

The considerer planning horizon is a single year. Also, all the SP devices are supposed correctly installed, so, there are no failures because of installation defects.

Among the hypotheses and simplifying assumptions of the problem, a network that complies with the restrictions of radiality is considered; both the ideal SP devices and the ideal Distribution Transformer Station (DTS) do not have failure rates associated with their operation. The device which operates in case of a fault is the one closest to the fault upstream.

The operating restrictions of the network are supposed satisfied, regardless of the selected alternative: there are no operational limits for SP and substation transformer distribution. No distinction was made between the fault types and the problem was simplified taking into account three phase faults (the three of them failing simultaneously).

The parameters are considered fixed, and independent of the state of operation of the network.

No distinction or logistic analysis that takes the reparation team from one point of the network to another is made.

It is assumed that there are action plans (repairs and maneuvers) that comply with the corresponding safety standards, in order to ensure the integrity of personnel and devices in case of electric risk.

2.3. Model parameters

λ_j: Failure Rate per Year per Kilometer of Section j [Failure /km-year].
C_i: Device i Cost [USD].
UL_i: Device i durability [Year].
t_d: Discount Rate.
T_c: Failure detection time, it is the interval between the moment when the fault occurs and the moment when the operators of the electrical system take notice of it [hs]. Automation plays an important role here, since if there is signaling of the state of the protections (for example in a panel), the magnitude of this time is very small, so that theoretically it can be considered zero.
T_p: Prepair Time, which corresponds to the time required to obtain the material resources needed to start the location of the fault [hs].
$\mathrm{T_l}$: time of fault location [hs], which corresponds to the transfer to the vicinity of the fault and the execution of tests in order to accurately locate the failure point.
T_r: repair time, which is the interval that delays the execution of the repairs and/or replacement of failed device [hs].
T_{CD}: dielectric Oil Cooling Time of the interrupter, since the arc extinction heats up the oil during the cutting process [hs].

In addition, the network data on which the model is defined are required. These are the lengths of stretches [km], the power required [kVA] and the number of users.

2.4. Definition of decision variables and resulting search space

Xj: represents the decision to place (or not) an SP devices on the j-th section of the network. The 3 types of devices are coded: Fuse (F), Disconnector (D), Interrupter (I). This definition of variables considers that in each section only one SP of the 3 types (or no devices) can be placed. That is why the quantity of solutions for this problem is given by the permutations with repetition of 4 elements, taken from to nT, where nT is the number of sections of the network.

This search space therefore has 4^{nT} solutions.

2.5. Definition of objective functions

Energy Not Supplied (ENS) due to service interruption:

$$\mathrm{ENS}\left[\frac{\mathrm{kWh}}{\mathrm{year}}\right] = \sum_{\mathrm{k=1}}^{\mathrm{N_T}} \mathrm{P_k} \cdot \mathrm{t_k} \tag{1}$$

Where $\mathrm{P_k}$ is the demanded power of node k, and $\mathrm{t_k}$ is the time that the node is interrupted in the period considered.

System Average Interruption Frequency Index (SAIFI):

$$\mathrm{SAIFI}\left[\frac{1}{\mathrm{year}}\right] = \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{N_T}} \frac{\mathrm{N_i}}{\mathrm{N_T}} \tag{2}$$

Where $\mathrm{N_i}$ is the number of clients affected by the i cut, and $\mathrm{N_T}$ is the total number of clients.

System Average Interruption Duration Index (SAIDI):

$$\mathrm{SAIDI}\left[\frac{\mathrm{hs}}{\mathrm{year}}\right] = \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{N_T}} \frac{\mathrm{N_i} \cdot \mathrm{T_i}}{\mathrm{N_T}} \tag{3}$$

Where $\mathrm{T_i}$ is the time duration of the cut i.

Devices Acquisition and Maintenance Cost:

In the case of Interrupters and disconnectors, it is the investment cost affected by the capital recovery factor.

$$\mathrm{CA}\left[\frac{\mathrm{USD}}{\mathrm{year}}\right] = \mathrm{CRF} \cdot \mathrm{E_P} \tag{4}$$

Where $\mathrm{E_P}$ is the price of the SP devices and CRF is calculated as:

$$\mathrm{CRF} = \frac{\mathrm{t_d} \cdot (1 + \mathrm{t_d})^{\mathrm{UL_i}}}{(1 + \mathrm{t_d})^{\mathrm{UL_i}} - 1} \tag{5}$$

In the case of fuses, the cost associated with each one is that of acquiring and locating it, plus replacing it for each fault affecting it.

2.6. Fuzzy multi-objective optimization model

2.6.1. Mathematical model

The location of Devices of different types in the network determines different effects on the loads connected to it. This is according to which device is closer (upstream) to these loads. The interrupter devices segment the network and have two functionalities: reaction to failures and maneuver under

Table 1
Times without supply and quantity of interruptions per case.

Case	Time without supply	Number of interruptions
I	$C: Tc + Tp + Tl + Tr$	1
ID	$C1: Tc + Tp + Tl + TCD$	2
	$C2: Tc + Tp + Tl + Tr + TCD$	1
I[D]F	$C1: TCD$	1
	$C2: Tc + Tp + Tl + Tr + TCD$	1
I[D]FD	$C1: 2 \cdot TCD$	2
	$C2: Tc + Tp + Tl + 2 \cdot TCD$	2
	$C3: Tc + Tp + Tl + Tr + 2 \cdot TCD$	1

Source: The authors.

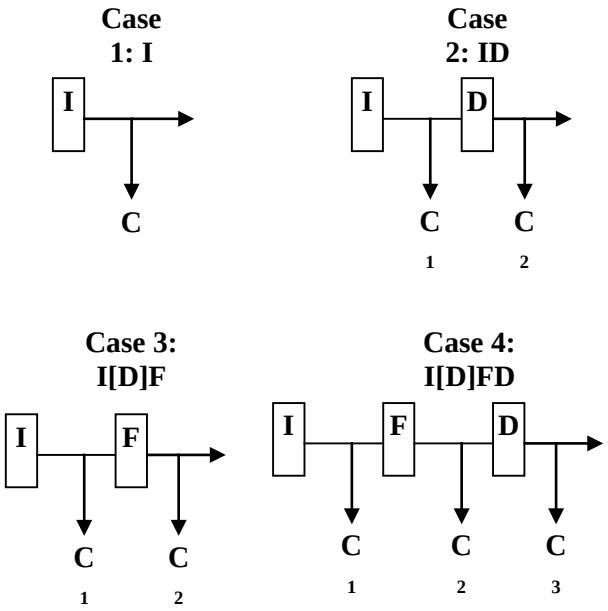


Figure 1 - Device combination cases
Source: The authors.

load. Within a segment, that is, in the part of the network between two Interrupters, there can be many combinations of lines, loads (users), fuses and disconnectors.

The different combinations determine which of the users are left without supply and for how long (see Table 1).

The following four cases summarize all the configuration possibilities of a segment for these three types of device, illustrated in Fig. 1. All other combinations are redundant with respect to these four types.

Case 1: Interrupter (I)

In this case, which is the most basic, there is only a combination of lines and loads between two Interrupters. If there is a failure in any of the sections, the entire network downstream of the switch is left without supply and cannot be restored to any of them until the fault is repaired. It is assumed that in the root node of the network there is an interrupter properly located.

Case 2: Interrupter Disconnector (ID)

In this case, before a fault in a section between I and D, proceed as in case 1. For a fault after D, I is actuated and left without supply downstream. However, the supply for the sections between I and D can be restored by opening D, thereby disconnecting the entire network downstream from D and by actuating I to restore the service to users between I and D. Once a fail occurs, D must be actuated to restore the downstream service, but first I must be pressed to interrupt the supply again. Once the cooling time of Iis over, the service is restored throughout the network.

Case 3: Interrupter Disconnector Fuse (I[D]F)

In this case, for a fault in a section between I and F, proceed as in case 2 or 1, depending on whether D is located. For a fault after F, this is triggered and left without supply downstream. Users between I and F are not affected by the cut.

Note that there may be devices of typeD between I and F which are of no use in this case. Once the fault has been repaired, F must be replaced, for which the supply downstream of I must be interrupted. Assuming that the cooling time of I is greater than the fuse replacement time, and after t_{CD} is over, the network service is restored.

Case 4: Interrupter Disconnector Fuse Disconnector (I[D]FD).

In this case, when a fault occurs before D, proceed as in the previous case. For a fault after D, F is operated leaving no downstream supply. The fault does not affect the upstream of F. However, considering $t_r > t_{CD}$, the supply to users can be restored between F and D, opening D and replacing the corresponding fuse.

For the latter, it is necessary to cut off the supply from I, replace F and wait for the cooling time to re-start I, taking into account that D must be opened before completing the process. Once this first maneuver is performed, the fault is repaired and I must be restarted, cutting the supply, pressing D and waiting t_{CD} to restore the supply downstream of D.

2.6.2. PSO Metaheuristic

The use of Metaheuristics makes it possible to obtain algorithms of general purpose, offering solutions which are generally satisfactory for a vast number of problems. This method is easy to implement and can be used with parallel processing. Within the set of metaheuristics available in the state of the art, the PSO metaheuristic is used due to its wide versatility, ease of implementation and good performance. The set of variants of the PSO metaheuristic is known as X-PSO forms.

In the Classic PSO model there is a set of alternatives called population or swarm (whose feasibility exhibits degrees of aptitude), which are called particles. From one iteration to the next, each particle moves in the search space, according to a certain rule of motion that depends on three factors, which are explained below. Vector $b_i^{[k]}$ represents the best positions that the particles have reached individually in the previous iterations (an aspect referred to in the model as past life of the particle); Then it will correspond to the individual optimum of the particle i in its past life. In the same way, the global optimum achieved by the particle system will be indicated by $b_G^{[k]}$ until the present iteration, according to the rule of motion in eq. (6) [7]:

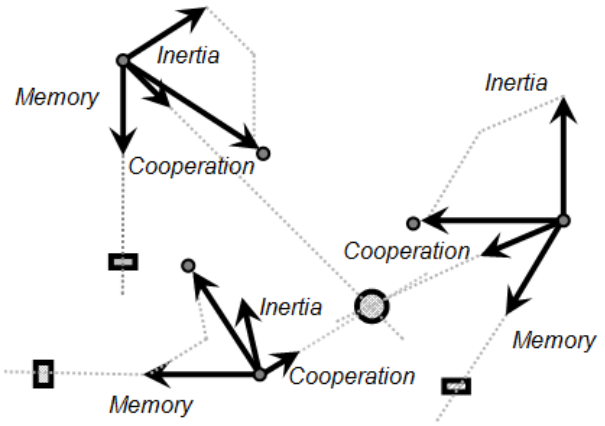


Figure 2. Movement Rule of PSO in two dimensions.
Source: The authors.

$$X_i^{[k+1]} = X_i^{[k]} + V_i^{[k+1]} \tag{6}$$

The velocity vector for the i-th particle is expressed in eq. (7):

$$V_i^{[k+1]} = V_i^{[k]} + w_C \cdot r_1^{[k]} \cdot \left[b_i^{[k]} - X_i^{[k]}\right] + w_S \cdot r_2^{[k]} \cdot \left[b_G^{[k]} - X_i^{[k]}\right] \tag{7}$$

This rule of movement was represented in Fig. 2.

The term $V_i^{[k]}$ represents the inertia or habit of the particle i: tends to maintain its motion in the direction in which it moved in the previous iteration.

The term $w_C \cdot r_1^{[k]} \cdot \left[b_i^{[k]} - X_i^{[k]}\right]$ represents the memory or cognitive ability of the particle: it is attracted to the best point in the search space achieved individually in its past life.

And the third term $w_S \cdot r_2^{[k]} \cdot \left[b_G^{[k]} - X_i^{[k]}\right]$ represents the cooperation between the whole swarm, or social capacity of the particle with respect to the swarm: the particles share information on the best overall position reached by the swarm.

The incidence of these factors on each particle is given by the constants or parameters of the model, w_c and w_s. The parameter w_c is called cognitive constant and the parameter w_s is called the social constant of the swarm.

The random numbers $r_1^{[k]}$ and $r_2^{[k]}$ are uniformly distributed in [0,1], U[0,1], and their objective is to emulate the stochastic behavior exhibited by the population or swarm in each iteration (somewhat unpredictable).

2.6.3. Particle swarm optimization metaheuristic with constriction factor

With this modification of the Classic PSO model a better convergence of the particles in time is promoted, by the constriction or reduction of the particle oscillation amplitude as they are focused on a certain focal point. In this case, the classical speed operator is modified as follows:

$$V_i^{[k+1]} = \chi \cdot \{V_i^{[k]} + \varphi_M \cdot r_1^{[k]} \cdot \left[b_i^{[k]} - X_i^{[k]}\right] + \varphi_C \cdot r_2^{[k]} \cdot \left[b_G^{[k]} - X_i^{[k]}\right]\} \tag{8}$$

Where χ is called the Constriction Factor, and is obtained by the following expression:

$$\chi = \frac{2.k}{\left|2 - \Phi - \sqrt{\Phi^2 - 4.\Phi}\right|} \tag{9}$$

With: $\varphi_M + \varphi_C = \varphi$; $\Phi > 4$ and $0 < \kappa \leq 1$

A commonly used parameter configuration is $\varphi = 4.1$, $\varphi_M = \varphi_C = 2.05$. This results in a value of $\chi \approx 0.73$.

When $\kappa = 1$, the convergence is slow enough to allow detailed exploration before the search stabilizes at the point of maximum fitness found [7].

2.6.4. Extension to Multiobjective Domain according to decision theory in Fuzzy environment

Bellman Zadeh's principle:

Although the approach originally adopted by the PSO metaheuristic was Mono-Objective, in reference [7] an extension to the Multi-Objective domain of the EPSO is proposed. This method is referred to as FPSO (Fuzzy PSO), for the use of Fuzzy Sets. As detailed in the above mentioned reference, they are able to capture non-stochastic value uncertainties.

To formalize the multiobjective extension, the application of the principle of decision making in fuzzy environments formulated by Bellman and Zadeh is proposed [3-6]. This extension, applicable to any variant strategy of the classical PSO metaheuristic, is the one used in this work.

Consider a set of fuzzy objectives $\{O\} = \{O_1, O_2, \ldots, O_n\}$ whose membership functions are μ_{Oj}, with $j = 1..n$, and a set of fuzzy constraints $\{R\} = \{R_1, R_2, \ldots, R_h\}$ whose membership functions are μ_{Ri} with $i = 1..h$.

The Decision fuzzy set, results:

$$D = O_1 \langle C \rangle O_2 \langle C \rangle \ldots \langle C \rangle O_n \langle C \rangle R_1 \langle C \rangle R_2 \langle C \rangle \ldots \langle C \rangle R_h \tag{10}$$

Where $\langle C \rangle$ is a fuzzy sets operator called “confluence”.

The most common confluence, is the intersection.

Then, the membership function of D is expressed as:

$$\mu_{Ó} = \mu_{Ó1} C \ldots C \mu_{Óń} C \mu_{Ŕ1} C \ldots C \mu_{Ŕh} \tag{11}$$

Where C is an operator (called, in general, t-norm) between values of membership functions.

For example, if the confluence for certain instance is $\langle C \rangle \equiv \cap$ (intersection), then C is the $t-norm \equiv \min$ (minimum value of all membership function in eq. (11)).

If $t(x,y): [0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$ is a t-norm, then: a) $t(0,0) = 0; t(x,1) = x$; b) $t(x,y) = t(y,x)$; c) if $x \leq \alpha$ and $y \leq \beta t(x,y) \leq t(\alpha,\beta)$; and d) $t(t(x,y),z) = t\big(x,t(y,z)\big)$.

Notice that all fuzzy sets (Objectives and Constraints) are "mapping" in the same fuzzy set of decision, D, and are treated the same way.

The crisp set S of "optimal" solutions or alternatives x^* is:

$$S = \left\{x^* \middle| \mu_{\acute{D}}(x^*) = \mathrm{Max}\left(\mu_{\acute{D}}(x)\right)\right\} \tag{12}$$

Fuzzy membership functions used:

For each objective (or restriction), the fuzzy functions associated to their objective or restriction are defined as follows: consider an upper and a lower limit in the possible values of the variable corresponding to a certain objective or constraint m, v_m. These limits are referred to as v_m^{Sup} y v_m^{Inf}, respectively.

When $v_m \leq v_m^{Inf}$ the fuzzy function $\mu_m = 1$, since v_m is required to be minimized. Farther, when $v_m \leq v_m^{Sup}$, $\mu_m = 0$ for the same reason. The fuzzy bounds of v_m in $[v_m^{Inf}, v_m^{Sup}]$ are calculated by the equation of the line passing through the points (v_m^{Inf}, 1) and (v_m^{Sup}, 0). In this way, the degree of satisfaction of the objective decays as it moves away from the value v_m^{Inf} and is not accepted from the value v_m^{Sup}.

In addition, let EW_m be its exponential weight, whose effect on the fuzzy function is its contraction ($EW_m > 1$) or dilation ($EW_m < 1$). In this way, there is greater or minor importance of the criteria analyzed in the total fitness function. For the case $EW_m = 1$, the assumed membership function is linear. The lower and upper bounds of the fuzzy functions were obtained by simulations for the extreme scenarios. The upper boundaries correspond to the network without inversion in devices (except investment cost). The lower boundaries correspond to the network with Interrupters in all the sections.

The aptitude function $\mu_{\acute{D}}$ was obtained with the t-norm called Einstein Product, whose arguments are the membership functions of fuzzy functions associated to each objective. All the values used are shown in the results section.

The fuzzy functions of CE and ENS were presented in eq. (13) and (14).

$$\mu_{ENS} = \begin{cases} 1, & ENS^{Inf} \geq ENS \\ \left(\dfrac{ENS^{Sup} - ENS}{ENS^{Sup} - ENS^{Inf}}\right)^{EW_{CA}}, & ENS^{Inf} \leq ENS \leq ENS^{Sup} \\ 0, & ENS^{Sup} \leq ENS \end{cases} \tag{13}$$

$$\mu_{CE} = \begin{cases} 1, & CE^{Inf} \geq CE \\ \left(\dfrac{CE^{Sup} - CE}{CE^{Sup} - CE^{Inf}}\right)^{EW_{CE}}, & CE^{Inf} \leq CE \leq CE^{Sup} \\ 0, & CE^{Sup} \leq CE \end{cases} \tag{14}$$

Definition of the t-norm used:

The confluence operator must be established between the fuzzy sets in order to obtain the maximizing decision that will define the value of the fuzzy fitness function at each iteration of the F-PSO. For this, a t-norm is used, which is a function t defined in the interval [0, 1]×[0, 1] also applied in [0, 1]. In the state of the art the Einstein Product was adopted:

$$t_{PE}(x, y) = \frac{x \cdot y}{2 - (x + y - x \cdot y)} \tag{15}$$

Where x and y are generic membership functions. Then the fuzzy maximizing fitness function for the reliability problem is:

$$\mu_{\acute{D}} = t_{PE}\left(\mu_{ENS}, \mu_{SAIFI}, \mu_{SAIDI}, \mu_{CA}\right) \tag{16}$$

Intrinsic Cost (IC):

In the present research line, the economic valuation of the optimized criteria was made through the 'Intrinsic Cost' index (IC). This was defined by the derivative of the variable related to the criterion to be optimized, with respect to the variable generally related to the cost:

$$IC = \frac{\partial \mu_{CE}}{\partial \mu_{ENS}} = \frac{\partial CE}{\partial \mu_{CE}} \cdot \frac{\partial \mu_{CE}}{\partial \mu_{ENS}} \cdot \frac{\partial \mu_{ENS}}{\partial ENS} \tag{17}$$

Where $\frac{\partial \mu_{CE}}{\partial CE}$ and $\frac{\partial \mu_{ENS}}{\partial ENS}$ are the derivative of the criteria analyzed with respect to their fuzzy functions (see eq. (13) and (14)).

$$\frac{\partial \mu_{CE}}{\partial CE} = \frac{-EW_{CE}}{CE^{Sup} - CE^{Inf}} \cdot \mu_{CE}^{\,1 - \frac{1}{EW_{CE}}} \tag{18}$$

$$\frac{\partial \mu_{ENS}}{\partial ENS} = \frac{-EW_{CA}}{ENS^{Sup} - ENS^{Inf}} \cdot \mu_{ENS}^{\,1 - \frac{1}{EW_{ENS}}} \tag{19}$$

Then the expression of the IC is:

$$IC_{ENS} = \frac{EW_{ENS}}{EW_{CE}} \cdot \frac{CE^{Sup} - ENS^{Inf}}{ENS^{Sup} - ENS^{Inf}} \cdot \frac{\mu_{CE}^{\,1 - \frac{1}{EW_{CE}}}}{\mu_{ENS}^{\,1 - \frac{1}{EW_{ENS}}}} \cdot \frac{\partial \mu_{CE}}{\partial \mu_{ENS}} \tag{20}$$

In these works, the mathematical expression to determinate $\frac{\partial \mu_{CE}}{\partial \mu_{ENS}}$ was obtained from the aptitude function applying the clause 'Ceteris Paribus'. This clause, which is generally used in economy, stands for 'all other things being unchanged or constant'. Then, the other variables associated with the optimization criteria were considered constant. From this assumption, by expressing the membership functions of these criteria and the t-norm used, the cost criterion was expressed as a function of the variable associated with the desired variable. This approach leads to extensive mathematical expressions when the number of objectives to be maximized or minimized is large. Therefore, another expression of intrinsic cost is proposed, by changing the development of one of its components. It starts from

the membership function obtained from the fuzzy relationship between the investment cost criterion and ENS criterion as follows:

$$\mu = \frac{\mu_{CE}.\mu_{ENS}}{2-(\mu_{CE}+\mu_{ENS}-\mu_{CE}.\mu_{ENS})} \quad (21)$$

The logarithmic function and the properties associated to the product and division was applied to the eq. (21).

$$\log\mu = \log\mu_{CE} + \log\mu_{ENS} - \log[2-(\mu_{CE}+\mu_{ENS}-\mu_{CE}.\mu_{ENS})] \quad (22)$$

Differentiating the eq. (22) with respect to the fuzzy function μ_{CE}.

$$\frac{\partial(\log\mu)}{\partial\mu_{CE}} = \frac{1}{\mu_{CE}} + \frac{1}{\mu_{ENS}}\cdot\frac{\partial\mu_{ENS}}{\partial\mu_{CE}} + f(\mu_{ENS},\mu_{CE}) \quad (23)$$

Where $f(\mu_{ENS},\mu_{CE})$ is the derivative of the third term of eq. (22).

$$f(\mu_{ENS},\mu_{CE}) = \frac{-\left[\mu_{CE}-1+(\mu_{CE}-1)\cdot\frac{\partial\mu_{ENS}}{\partial\mu_{CE}}\right]}{2-(\mu_{CE}+\mu_{ENS}-\mu_{CE}.\mu_{ENS})} \quad (24)$$

Given that $\frac{\partial(\log\mu)}{\partial\mu_{CE}} = 0$, then the following is obtained:

$$\frac{\partial\mu_{CE}}{\partial\mu_{ENS}} = -\frac{\mu_{CE}}{\mu_{ENS}}\cdot\frac{\mu_{CE}-2}{\mu_{ENS}-2} \quad (25)$$

Economic Penalty:

From the intrinsic cost of the ENS, the economic penalty is defined (see eq. (20)), and this refers to the resulting cost because the optimal alternative has not been selected.

$$Ep_{ENS} = IC^{*}_{ENS}.(ENS' - ENS^{*}) \quad (26)$$

Where ENS^{*} refers to the optimal (most satisfactory) Energy Not supplied and ENS' refers to the non-optimal alternative. IC^{*}_{ENS}, is obtained from (17).

Multi-objective analysis for each node of the studied system:

An analysis of each node of the MVPDS was proposed through the application of the fuzzy multiobjective extension for the analyzed criteria: ENS and CE. Following this proposal, the eq. (20) can be expressed for each node in the system, obtaining the intrinsic cost and the economic penalty per node. This progress makes it possible to distinguish penalties according to the importance and impact of each node.

The ENS at each node was obtained through an extensive and deep analysis of the impact that each load has on the total Energy Not Supplied. Due to the depth and complexity of this analysis, the algorithm and computational model required has not been described in detail in this work. Device Acquisition Costs for each node were obtained simply by observing the type and cost of the device installed.

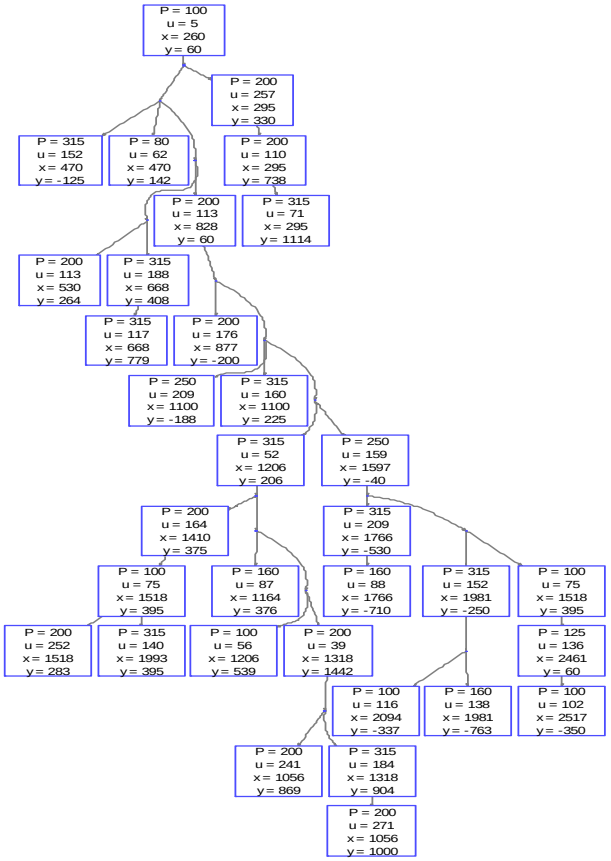


Figure 3. Feeder Simulation.
Source: The authors.

3. Results and discussion

3.1. Electric power distribution system studied

The system considered represents the Electric Power Distribution System (MVPDS) of Concepción del Uruguay, Argentina, and the information used in this work was estimated by means of surveys done to similar MVPDS.

The system considered corresponds to the output of a Transformer Station (TS) 132 / 13.2 [kV] and it has 35 loads and 47 sections.

In Fig. 3, the technical characteristics of the distribution system analyzed are presented. The parameter 'P' is the installed power of the TS, 'u' is the number of connected users, 'x' and 'y' are the respective TS coordinates.

The values used for all the parameters were: $\lambda_j = 0.32$, $C_I = 12000$, CD = 4000, CF = 50, ULI = 15, ULD = 5, $t_d = 0.12$, $T_c = 0$, $T_p = 0$, $T_l = 0.5$, $T_r = 2.5$, $T_{CD} = 0.5$. Where j is the section of the network.

3.2. Analysis of the obtained results

The criterion values and the results of the fuzzy functions are shown in Table 2, where v, v^{Inf}, v^{Sup}, EW_i, μ refer to obtained value, lower limit, upper limit, exponential weight and degree of membership, respectively.

Table 2
Reference values of the Electric Power System solved.

Criterion	v	v^{Inf}	v^{Max}	*EW*	μ
$SAIFI\left[\frac{1}{year}\right]$	1.03	0.59	3.1	0.75	0.87
$SAIDI\left[\frac{hs}{year}\right]$	2.16	1.76	9.29	0.92	0.95
$ENS\left[\frac{kWh}{year}\right]$	8346	6815	36702	1	0.95
$CA\left[\frac{USD}{year}\right]$	13831	0	82809	1.46	0.77

Source: The authors.

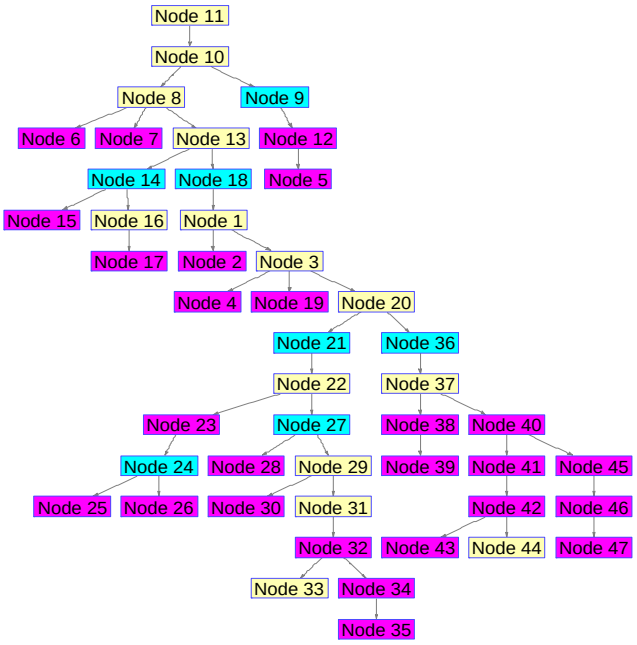


Figure 4. Optimal SP location obtained using the metaheuristic Fuzzy Particle Swarm Optimization with Constriction Factor (CF FPSO).
Source: The authors.

The solution found by CF FPSO shown in Fig. 4. helps to locate the interrupters in the magenta nodes, and fuses are located in the cyan nodes. A 64-particle CF FPSO swarm was used in the resolution, finding the solution described in approximately 800ms. This is explained by the fact that the search space is relatively small ($4^{47} = 1.98 \cdot 10^{28}$). The solution obtained helps to find a strategy to locate fuses in the nodes {2 4 5 6 7 12 15 17 19 23 25 26 28 30 32 34 35 38 39 40 41 42 43 45 46 47}, and interrupters are located in the nodes {9 14 18 21 24 27 36}. No disconnectors are used.

The final fitness obtained by Einstein's Product was $u_{EP} = 0.55$. The values of each criterion and the configuration of the associated fuzzy sets are shown in Table 2, where U_m, U_{min}, U_{max}, EW_m, u_m refer to obtained value, lower limit, upper limit, exponential weight and degree of membership, respectively.

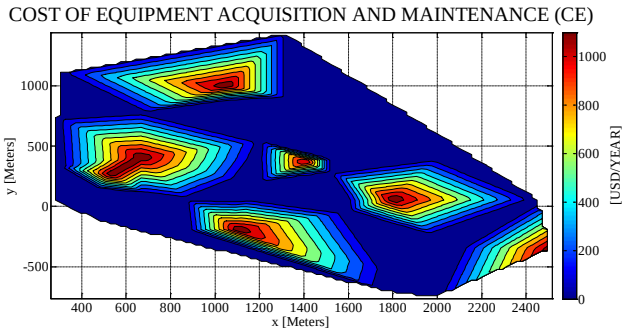


Figure 5. Map of the cost of Device acquisition and maintenance of the studied system.
Source: The authors.

Annualized investment in protection devices resulted in 13831 $\left[\frac{\text{USD}}{\text{year}}\right]$, which is well below to place interrupters at all nodes (82809 $\left[\frac{\text{USD}}{\text{year}}\right]$).

The Energy Not Supplied was 8346 $\left[\frac{\text{MWh}}{\text{year}}\right]$ (1.8 of the total demanded energy), very close to the minimum scenario ($1.4 \leq \text{ENS} \leq 7.8$). Therefore the results obtained by the proposed method are satisfactory.

Annualized investment in protection devices resulted in 13831 $\left[\frac{\text{USD}}{\text{year}}\right]$, which is well below to place interrupters at all nodes (82809 $\left[\frac{\text{USD}}{\text{year}}\right]$).

The Energy Not Supplied was 8346 $\left[\frac{\text{MWh}}{\text{year}}\right]$ (1.8 % of the total demanded energy), very close to the minimum scenario ($1.4 \leq \text{ENS} \leq 7.8$).

If the penalty is done according to the results in Table 2, a result of 38112 USD per year is obtained. If the total investment is 85300 USD, the difference when the penalty is not paid is that the investment can be recovered in about two years.

3.3. Map of the energy not supplied, intrinsic cost and economic penalty

The term map refers in this paper to the use of two-dimensional figures where the values of the indices studied in a scale of colors. The coordinate axes 'x' and 'y' are the distance with respect to a point of reference, towards the east and towards the north respectively. This color scale is associated with a three-dimensional curve (z-axis), which represents the variable studied. The origin of coordinates $(0,0)$ represents the main feeder node of the distribution system studied. Performing interpolation calculations between nodes were used to improve their visualization and understanding.

A map for the most satisfactory solution is presented in Fig. 5 to 7.

The Fig. 5 shows the areas where the greatest investment was made in equipment. The costs associated with the installed Device (F, D or I) are represented in the color bar. The red color indicates the extreme case that a Device SP was installed in the node, while the blue color indicates the extreme case in which no device was installed.

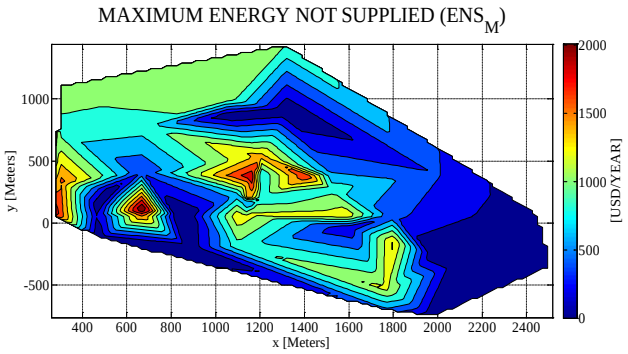


Figure 6. Map of the Energy Not Supplied Maximum (ENS_M) of the studied system.
Source: The authors.

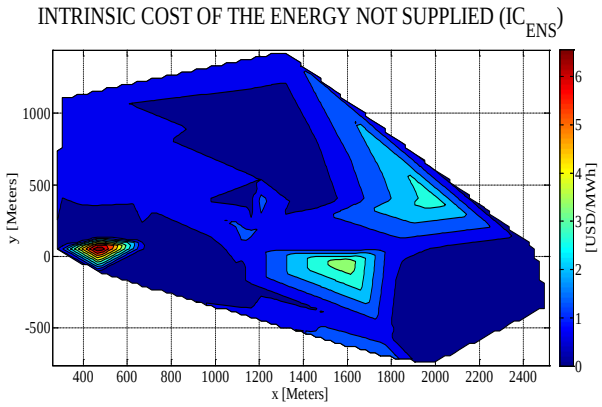


Figure 7. Map of the Intrinsic Cost of the ENS (IC_{ENS}).
Source: The authors.

The Fig. 6 shows the map of Energy Not Supplied for the worst alternative (no SP device installed). In this case, the most expensive nodes are those that have transformation centers of higher demanded power, which corresponds to the red color.

The Fig. 7 shows the map of Energy Not Supplied for the most satisfactory alternative.

The installation of the interrupters considerably lowered the ENS in the high demand nodes. Moreover, there were peaks of ENS in those nodes without investment, as shown in Fig. 6 and 7. The Fig. 6 shows the Intrinsic Cost Index of the Energy Not Supplied (ENS), where it is also observed that those nodes where no investments were made have a higher cost than the others. Therefore, the analysis of the maps for the CE and ENS criteria shows that the most satisfactory solution obtained by the fuzzy multiobjective model responds satisfactorily (see Fig. 6 and 7).

The expression obtained for the intrinsic cost index is congruent with these analyzes and the values are in accordance with the penalties applied to the provincial regulators of Argentina.

4. Conclusions

The conclusions of this article are presented in this section. There are different aspects to take into account: *the problem* to solve, the *mathematical model* proposed for it and the *solution method*.

1) The problem corresponds to the reliability of the distribution systems, where in the state of the art multiple modeling and resolution mechanisms were applied. The present paper applied a novel modeling method based on the 'what if' clause. In this way the effect of each device used is obtained (Disconnector, fuse and Interrupter).

2) As a result of this approach, the effect of the placement of each SP device on each studied node could be analyzed, grouping it only in 4 cases. The modeling by this means did not require complex studies and allowed to obtain reliability indices according to the regulations in force.

3) Concerning the resolution method, a fuzzy multi-objective model based on the works of Bellman and Zadeh, the theory of fuzzy decision, was proposed. Comparatively with the previous version of this problem, the use of different SP devices prevents the use of dynamic programming to solve this problem. Then, to obtain the optimal alternative that maximizes the fuzzy fitness function, the metaheuristic Fuzzy PSO with Constriction Factor was applied. This metaheuristic is relatively simple to implement and produced very good results in less than a second. It would not be possible to easily solve this problem with mathematical programming techniques.

4) A contribution was made in the state of the art of the theory of fuzzy decision making and other areas, the Intrinsic Cost (IC) index. This index allowed us to obtain cost indicators associated with Energy not supplied reliability index through its preference value. In this way, maps were obtained with this index, which allow to study the efficiency of the network in a geographical way and to know which nodes of the electrical network are inefficient or vulnerable.

5) The results obtained were in accordance with the current regulations of the Argentine distribution electricity market.

5. Acronyms

DTS: Distribution Transformer Station.
MVPDS: Medium Voltage Power Distribution Systems.
ENS: Energy Not Supplied.
IC: Intrinsic Cost.
SAIDI: System Average Interruption Duration Index.
SAIFI: System Average Interruption Frequency Index.
SP: Sectioning/Protection.
I: Interrupters.
F: Fuses.
D: Disconnectors.
PSO: Particle Swarm Optimization.
FPSO: Fuzzy Particle Swarm Optimization.
FC PSO: Particle Swarm Optimization with Constriction Factor.
CF FPSO: Fuzzy Particle Swarm Optimization with Constriction Factor.

References

[1] Du, S., Zeng, Z., Cui, L. and Kang, R., Reliability analysis of Markov history-dependent repairable systems with neglected failures.

Reliability Engineering & System Safety, 159, pp. 134-142, 2017. DOI: 10.1016/j.ress.2016.10.030
[2] Stojkov, M., Nikolovski, S. and Mikulicic, V., Estimation of electrical energy not supplied in reliability analysis of distribution networks. In Electrotechnical Conference, 2004. MELECON 2004. Proceedings of the 12th IEEE Mediterranean. IEEE, 2004, pp. 967-970. DOI: 10.1109/MELCON.2004.1348214
[3] Bellman, R.E. and Zadeh, L.A., Decision-making in a fuzzy environment. Management Science, 17(4), pp. B-141-B-164, 1970.
[4] Luhandjula, M.K., Fuzzy optimization: Milestones and perspectives. Fuzzy Sets and Systems, 274, pp. 4-11, 2015, DOI: 10.1016/j.fss.2014.01.004
[5] Dubois, D.J., Prade, H. and Yager, R.R., eds., Readings in fuzzy sets for intelligent systems. Morgan Kaufmann, 2014.
[6] Zadeh, L.A., Fu, K.-S. and Tanaka, K., eds., Fuzzy sets and their applications to cognitive and decision processes: Proceedings of the US–Japan seminar on fuzzy sets and their applications, held at the University of California, Berkeley, California, USA, July 1-4, 1974. Academic press, 2014.
[7] Clerc, M. and Kennedy, J., The particle swarm-explosion, stability, and convergence in a multidimensional complex space. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 6(1), pp. 58-73, 2002. DOI: 10.1109/4235.985692
[8] Schweickardt, G., Gimenez, J.M. and Casanova, C., Metaheuristics approaches to solve combinatorial optimization problems in distribution power systems. An application to Phase Balancing in low voltage three-phase networks. International Journal of Electrical Power & Energy Systems, 76, pp. 1-10, 2016. DOI: 10.1016/j.ijepes.2015.09.023

F.G. Camargo, is BSc. Eng. in Electromechanical Engineer in the Universidad Nacional de San Juan, Argentina, in 2011; PhD aspirant in Engineering with mention in industrial and doctoral fellow of CONICET in the Universidad Tecnológica Nacional, Argentina. His research interests include: energy economics, artificial intelligence, metaheuristics, fuzzy multi-objective models, renewable energies and electric power distribution systems. He holds category D of the program of researchers of the Universidad Tecnológica Nacional and he is member of the Research Group of Computational Economics of Regulation and Renewable Energies GIECRER.
ORCID: 0000-0002-8685-1900.

G.A. Schweickardt, is PhD in Engineering with mention in Energy Economics, Msc. in Energy Economics and Environmental Energy Policy, Sp. in Environmental Impact Assessment and Energy Economics. Senior researcher of CONICET. His research interests include: energy economics, artificial intelligence, metaheuristics, fuzzy multi-objective models, renewable energies and electric power distribution systems. He is research director of the Research Group of Computational Economics of Regulation and Renewable Energies GIECRER.
ORCID: 0000-0002-0843-2946

C.A. Casanova, is PhD in Engineering with mention in Information Systems at the Universidad Tecnológica Nacional, Argentina. His research interests include: artificial intelligence, metaheuristics, fuzzy multi-objective models, renewable energies and electric power distribution systems. He holds category E of the program of researchers of the Universidad Tecnológica Nacional and he is member of the Research Group of Computational Economics of Regulation and Renewable Energies GIECRER.
ORCID: 0000-0002-2142-2187.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
de Sistemas e Informática

Oferta de Posgrados

Especialización en Sistemas
Especialización en Mercados de Energía
Maestría en Ingeniería - Ingeniería de Sistemas
Doctorado en Ingeniería- Sistemas e Informática

Mayor información:

E-mail: acsei_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 5365

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Conservation of "Paluma" guavas coated with cassava starch and pectin

Anny Karoline Rocha Quirino [a], Josenara Daiane de Souza Costa [a], Acácio Figueiredo Neto [a], Marylia de Sousa Costa [b] & Carolina María Sánchez-Sáenz [c]

[a] *Faculty of Agricultural Engineering. Universidade Federal do Vale de São Francisco, Petrolina-PE, Brasil. karoline_rochaquirino@hotmail.com, josenara.costa@gmail.com, acacio.figueiredo@univasf.edu.br*
[b] *Instituto Federal de Educação Tecnológica, Petrolina-PE, Brasil. marylia.sousacosta@gmail.com*
[c] *Faculty of Engineering, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C., Colombia. cmsanchezs@unal.edu.co*

Received: March 22th, 2017. Received in revised form: October 13st, 2017. Accepted: January 31th, 2018.

Abstract
This study was to evaluate the post-harvest conservation of "Paluma" guavas coated with cassava starch and pectin. The selected and disinfected fruit samples were coated with cassava starch or pectin at concentrations of 0 (control), 2, 4 and 6%. Then, fruits were stored at room temperature (25 ± 1.0°C) for 12 days. Every three days, evaluations of mass loss, length, diameter, color of peel and pulp, pulp firmness, total soluble solids, pH and vitamin C content were held. The experiment was completely randomized in a 4 x 5 factorial design with four concentrations of the solutions and five storage periods with three replications. The results showed that cassava starch and pectin-based coatings can be an alternative for maintaining the post-harvest quality of "Paluma" guavas. Concentrations of 4 and 6% of both types of coating provided good results regarding the retention of some attributes. The cassava starch kept the fruits brighter compared to fruits coated with pectin.

Keywords: edible coatings; fruits properties; Psidium guajava L.; ripening; storage.

Conservación de las guayabas “Paluma” recubiertas con almidón de yuca y pectina

Resumen
Este estudio evaluó la conservación post-cosecha de guayabas "Paluma" recubiertas con almidón de yuca y pectina. Las muestras de frutos seleccionadas y desinfectadas, fueron recubiertas con almidón de yuca o pectina a concentraciones de 0 (control), 2, 4 y 6%. Los frutos se almacenaron a 25 ± 1,0 ° C durante 12 días. Cada tres días se realizaron evaluaciones de pérdida de masa, longitud, diámetro, color de piel y pulpa, firmeza de pulpa, sólidos solubles totales, pH y contenido de vitamina C. El experimento fue completamente al azar en un diseño factorial 4 x 5 con cuatro concentraciones de las soluciones y cinco periodos de almacenamiento con tres repeticiones. Los resultados mostraron que los revestimientos a base de almidón de yuca y pectina pueden ser una alternativa para mantener la calidad post-cosecha de las guayabas "Paluma". Las concentraciones de 4 y 6% de ambos tipos de revestimiento proporcionaron buenos resultados con respecto a la retención de algunos atributos. El almidón de yuca mantuvo las frutas más brillantes en comparación con las frutas cubiertas con pectina.

Palabras clave: recubrimientos comestibles; propiedades de las frutas; Psidium guajava L.; madurez; almacenamiento.

1. Introduction

Guava (*Psidium guajava L.*) is one of the most popular tropical fruits grown and consumed in the world [1]. The guava tree is distributed in tropical and sub-tropical regions because of its adaptation to different climates and its easy propagation [2]. Brazil is the third largest producer of guava in the world, with a yield of 316,363 tonnes in 2012, surpassed only by India and Pakistan [3]. 70% of guava trees grown in Brazil are "Paluma" [4]. Guava is among the leading fruit tree species commercially exploited in irrigated areas of the Brazilian Northeastern region. The fruit can be eaten in *natura* and used for the production of juices, jams and conserves.

How to cite: Quirino, A.K., Costa, J.D.deS., Neto, A.F., Costa, M.deS. and Sánchez-Sáenz, C.M., Conservation of "Paluma" guavas coated with cassava starch and pectin. DYNA, 85(204), pp. 344-351, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

Guava is a climacteric fruit with an increased respiration and ethylene synthesis associated with ripening [5]. It tends to increase the rate of transpiration and weight loss, reducing its lifespan after harvest. It is important to use techniques to reduce this accelerated metabolism in order to extend its shelf period. Post-harvest techniques have been advancing in recent years. Such progress has been very important since there is a 35% loss of fruits in Brazil [6].

In recent years, researchers have tried to develop coatings and edible film formulations that are applied to the surface of fruits and vegetables. Such coatings have a great potential to improve and maintain the quality of food, allowing a safe food and increasing their post-harvest lifespan [7]. The application coating in fruits has been growing in the market as an alternative to plastic packaging, helping to reduce environmental impacts [8]. In their review [9], noted that the use of edible coatings slowed the deterioration of fruits and vegetables due to the reduction of the metabolic activity, providing a better appearance and brightness, which are important parameters for the consumer.

According to [2], the compounds most used in the preparation of edible coatings are polysaccharides (starch, cellulose and its derivatives, pectin, carrageenan and alginate), proteins (myofibrillar proteins, gelatin, casein, gluten wheat, zein and ovalbumin) and lipids (acetylated monoglycerides, stearic acid, waxes and fatty acid esters).

Several types of coatings have been used in guava to reduce weight loss and increase fruit shelf life. Among them, there are cassava starch [10], chitosan [11] and carnauba wax [12]. Cassava starch presents characteristics which are satisfactory for its use as a coating. It is biodegradable, edible, easy to use and low cost. However, there is little information on coating application in guavas based on pectin [13]. The objective of this study was to evaluate the post-harvest conservation of "Paluma" guavas using coating based on cassava starch and pectin.

2. Material and Methods

The fruits samples were harvested at an experimental orchard of the *Fazenda Special Fruit Importação e Exportação Ltda*., located in the city of Juazeiro, Bahia State. The climate of the region is BSwh, according to the Köppen classification. The geographical coordinates are 9º24'45.85" S and 40º30'53.51" W. The altitude is 374 m. The location is part of the Lower Basin of the São Francisco Valley. The study evaluated the production phase from July to December 2015.

Data relating to climate variables were collected at the meteorological station of Embrapa during the experiment. This results are shown in Table 1.

The fruits samples were taken to the Agricultural Products Storage Laboratory of the Federal University of São Francisco Valley. They were selected according to peel color, absence of mechanical and physiological injuries and size uniformity. Then, they were washed under running water, sanitized with a sodium hypochlorite solution at 1% for 10 min and placed for drying at room temperature at 25 ± 3°C.

Table 1.
Average temperature, relative humidity, monthly rainfall (Rf), solar radiation and sunshine hours from July to December 2015.

Months	Temperature (°C)	Relative Humidity (%)	Monthly Rainfall (mm)	Solar Radiation (Iy/day)	Sunshine hours (hours)
July	24.6	64.93	2	461	7
August	24.3	63.98	2	501	8.1
September	26.4	57.11	0	558	9.5
October	27.7	56.36	0	623	9.7
November	28.4	60.57	10	531	6.7
December	28.3	54.59	12	594	7.6
Average	26.6	59.5	-	544,6	8.1

Source: Authors

Batches with twenty fruits were separated per treatment. They were immersed in the solutions for one minute and then placed in trays to dry at room temperature at 25 ± 3°C. Cassava starch solutions were obtained by gelation of starch in water heated at 70°C under constant stirring for 15 min, according to [14]. Pectin solutions were homogenized in a blender for 30 seconds until gelation as was proposed by [15].

Physical and physical-chemical evaluations of the fruits were performed every three days over a period of twelve days of storage at 25 ± 3°C and 68 ± 4% RH (environmental conditions). The characteristics of weight loss, fruit firmness, peel color, total soluble solids (TSS), hydrogen potential (pH) and vitamin content C were analyzed.

Mass loss (%) was determined with a semi-analytic balance with a precision of 0.01 g. Fruit firmness was determined with a digital penetrometer (PTR 300) with a tip diameter of 8 mm, with a penetration of 6 mm. One reading was performed per fruit in the middle region and the results were expressed in Newtons (N).

To evaluate the color of the peel, a portable digital colorimeter Konica Minolta DP-400 was used, and the changes were quantified according to the three-dimensional system Cielab using three coordinates: L*, a* and b*, which indicates brightness (L*) and red (a*), green (-a*), yellow (b*) and blue hues (-b*) respectively,

Total soluble solids (TSS) were determined with direct reading by using a digital refractometer (Invert Sugar Refractometer HI 96804) and the results were expressed in °Brix. The hydrogenionic potential (pH) was determined with a benchtop pH meter (Hanna HI 221) according to techniques recommended by [16]. The vitamin C content was determined by titration with a Tillmans solution [16] and the results were expressed in mg of ascorbic acid.100 g-1 present in its pulp.

The experimental design was completely randomized arranged in a 4 x 5 factorial design consisting of four starch solution or pectin concentrations (0, 2, 4 and 6%) and five storage periods (0, 3, 6, 9 and 12 days), with four replications, each consisting of one different fruit. The results were submitted to analysis of variance and the means were compared by Tukey test at 5% probability, using the statistical software Assistat version 7.7 beta [17].

3. Results and Discussion

During the 12 experiment days there was an increasing loss of mass during storage periods in all treatments, for fruits coated with both cassava starch and pectin solutions (Fig. 1). These results also were observed by [18] for guavas stored under an atmosphere modified by chitosan, gelatin or PVC.

Mass losses were higher in fruits with control treatment (30%). Fruits coated with pectin showed less weight loss compared to those coated with cassava starch. Among the concentrations that were more effective in retarding weight loss during storage, the best concentrations were 2 and 6% for fruits coated with starch and 4 and 6% for fruits coated with pectin. The starch was more efficient in a lower percentage, and there was no difference for the percentage of 6%. It was observed that the loss of water presented a similar behavior between the treatments.

According to [19], fruits coated with polysaccharide-based films tend to retard the loss of mass because the gel applied on the fruit loses moisture before the coated food is dried. [20] also observed that increased coating concentration in the case of chitosan provided an additional benefit in controlling the loss of mass of 'Paluma' guava fruits, with the lowest values for 3% of chitosan, suggesting an advantageous effect of coating as a barrier to slow the loss of fruit water by perspiration.

Cassava starch coating at 1, 2 and 3% on papayas, did not observe significant decreases in mass loss [21]. In accordance with this work, [22] reported that the use of hydrophilic coatings, such as starch, has limitations due to water vapor barrier properties.

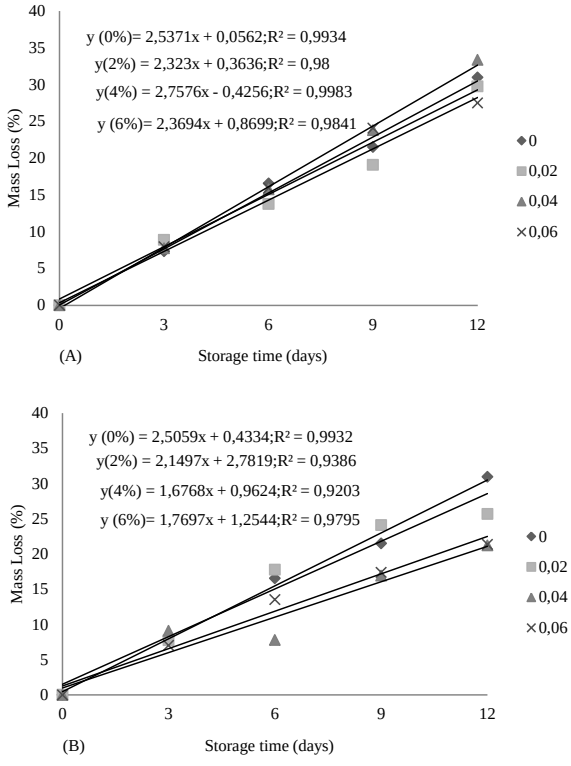


Figure 1. Mass loss (%) of "Paluma" guavas coated with cassava starch (A) and pectin (B) at concentrations of 0 (control), 2, 4 and 6% in function of storage time at room temperature at 25 ± 3ºC.
Source: Authors

Table 2.
Influence of the interaction coating (cassava starch and pectin) x concentration (0, 2, 4 and 6%) on brightness (L*), intensity of red/green (a*) and intensity of yellow (b*) of peels of "Paluma" guavas stored at room temperature.

Treatments	Parameter	Concentration (%)			
		0	2	4	6
Cassava starch	(L*)	56,52 aA	55,25 aA	54,21aAB	52,51 aB
Pectin		57,09 aA	52,53 bB	52,85 aB	54,27 aB
C.V.= 5,65%		SMDcolumns = 1,923		SMDlines = 2,5347	
Treatments	**Parameter**	**Concentration (%)**			
		0	**2**	**4**	**6**
Cassava starch	(a*)	-4,54 aA	-6,97 aB	-11,5 aC	-11,94 bC
Pectin		-4,4 aA	-12,01 bB	-12,95 bB	-5,7 aA
C.V.= 11,69%		SMDcolumns = 1,12		SMDlines =1,47	
Treatments	**Parameter**	**Concentration (%)**			
		0	**2**	**4**	**6**
Cassava starch	(b*)	37,82 aA	36,75 aA	33,98 aB	33,10aB
Pectin		37,80 aA	33,83 bB	32,17bBC	31,70bC
C.V.= 5,81%		SMDcolumns = 1,25		SMDlines =1,66	

CV: Coefficient of variation; SMD: Significant minimum deviation. Means followed by the same lowercase letter in columns and upper case letter in lines do not differ by Tukey test at 5% probability.
Source: Authors

According to the mean comparison test (Table 2), the use of cassava starch coating at concentrations of 2, 4 and 6% was not able to increase brightness values (L*) compared to the control (0%). For fruits coated with pectin, the control (0%) also maintained the highest L* value and fruits coated at concentrations of 2, 4 and 6% of pectin were not statistically different from each other. Comparing the types of coating, cassava starch kept the fruits brighter compared to fruits coated with pectin.

For the a* factor (intensity of green), it was observed that fruits coated with cassava starch at higher concentrations (4 and 6%) kept the color of peels greener than the control (0%) and starch at 2%. Fruits coated with pectin at concentrations of 2 and 4% had greener peels than the control (0%) and pectin at 6%. A similar result was found by [15], who noted that tomatoes coated with 2% pectin kept the a* values lower for longer. Among the coatings, pectin proved to be better than starch to conserve the intensity of the green color of "Paluma" guava peels.

For the factor b* (+b*, intensity of yellow), it could be observed that there was a decrease in b* values with the increase in the concentration of starch coating, indicating that fruits coated at 4 and 6% had less yellowing. However, as fruits did not differ statistically among themselves, the concentration of 4% of starch would be most appropriate. On the other hand, for fruits coated with pectin at higher concentrations also promoted a delay of peel yellowing compared to the control (0%), 4% was the best concentration among pectin concentrations.

Between coatings, pectin proved to be better than starch to conserve the intensity of the green color of

"Paluma" guava peels regarding the b* factor. It can be said that, in coated fruits, the variation of color was less marked. A similar result was observed by [23], who stated that the change of color of guavas was less marked compared to the control, when fruits were coated with cassava starch.

According to the interaction between coating and storage period (Table 3), it was observed that coatings based on starch and pectin showed an increase in the factor L* of peels with small fluctuations during storage. According to [24], coating causes a higher gloss on the surface of fruit peels. The results in this experiment are in accordance with researched by [25], who studied cucumber coated with cassava starch, and contrary [26], who studied okra coated with gelatin and chloride, and tomatoes coated with pectin.

The values for green intensity (-a*) of "Paluma" guava peels showed a steady increase for cassava starch and pectin coatings up to 12 days of storage. Fruits coated with pectin had a small oscillation from the 6th day of storage.

There was a variation of chromaticity of a* from -14.85 to -2.95 for fruits coated with starch, and from -14.85 to -7.64 for fruits coated with pectin. The same was reported by [27] upon analyzing guava cv. Cortibel. The increase in the values of this parameter shows a loss of the color green of peels over the ripening of fruits.

Table 3.
Influence of the interaction coating (cassava starch and pectin) x storage time on brightness (L*), intensity of red/green (a*) and intensity of yellow (b*) of peels of "Paluma" guavas stored at room temperature.

Treatments		Storage time (days)				
		0	3	6	9	12
Cassava starch	(L*)	48,38aC	55,88aA	53,55aB	57,91aA	57,39aA
Pectin		48,38aC	57,85aB	53,53aB	55,26bA B	55,90aA B
C.V.= 5,65%		SMDcolumns = 2,15		SMDlines = 3,01		
Treatments		**Storage time (days)**				
		0	**3**	**6**	**9**	**12**
Cassava starch	(a*)	-14,85aE	-11,86aD	-8,70bC	-5,33aB	-2,95aA
Pectin		-14,85aD	-12,14aC	-0,65aA	-8,55bB	-7,64bB
C.V.= 11,69		SMDcolumns = 1,25		SMDlines = 1,75		
Treatments		**Storage time (days)**				
		0	**3**	**6**	**9**	**12**
Cassava starch	(b*)	31,22aC	36,80aA	34,60aB	36,62aA	37,89aA
Pectin		31,22aC	35,95aAB	29,85bC	35,08bB	37,29aA
C.V.= 5,81%		SMDcolumns = 4,01		SMDlines = 4,26		

CV: Coefficient of variation; SMD: Significant minimum deviation. Means followed by the same lowercase letter in columns and upper case letter in lines do not differ by Tukey test at 5% probability.
Source: Authors

Table 4.
Influence of the interaction concentration of coatings (0, 2, 4 and 6%) x storage time on brightness (L*), intensity of red/green (a*) and intensity of yellow (b*) of peels of "Paluma" guavas stored at room temperature.

Treatments		Storage time (days)				
		0	3	6	9	12
0%	(L*)	48,38aD	58,39 aB	63,18aA	60,51aAB	53,54b C
2%		48,38aC	56,02aAB	51,79bBC	55,85bAB	57,40ab A
4%		48,38aC	55,71aAB	51,74bBC	53,52bB	58,32a A
6%		48,38aB	57,33aA	47,47cB	56,44bA	57,31ab A
C.V.= 5,65% = 4,26		SMDcolumns = 4,01		SMDlines		
Treatments		**Storage time (days)**				
		0	**3**	**6**	**9**	**12**
0%	(a*)	-14,85aD	-9,79aC	-4,48bB	3,11aA	3,65aA
2%		-14,85aC	-10,4aC	-10,36cB	-8,42bB	-3,43bA
4%		-14,85aC	-13,22bBC	-11,07cAB	-11,65cAB	-10,35c A
6%		-14,85aC	-14,59bC	7,19aA	-10,81cB	-11,05c B
C.V.= 11,69% 4,260		SMDcolumns = 4,01		SMDlines =		
Treatments		**Storage time (days)**				
		0	**3**	**6**	**9**	**12**
0%	(b*)	31,22aC	40,06aA	40,66aA	36,69abB	40,47a A
2%		31,22aC	36,11bAB	33,71bBC	37,00aA	38,43ab A
4%		31,22aB	33,6bAB	31,22bB	34,17bA	35,18c A
6%		31,22aB	35,77bA	23,32cC	35,53abA	36,17bc A
C.V.= 5,81% = 2,788		SMDcolumns = 2,624		SMDlines		

CV: Coefficient of variation; SMD: Significant minimum deviation. Means followed by the same lowercase letter in columns and upper case letter in lines do not differ by Tukey test at 5% probability.
Source: Authors

The values for intensity of yellow (+b*) of guava peels showed an increase in the yellow coloration during storage. As the fruit ripens, it is normal for the color to change.

It is an indication of ripeness. [14] also observed an increase of +b* values in tomatoes coated with pectin during storage. According to [28], this increase in yellow coloration may associated to changes in L* and -a* values.

The mean comparison test (Table 4) indicates that there was an increase in L*, a* and b* factors for all concentrations (0, 2, 4 and 6%), over 12 days of storage of "Paluma" guavas at room temperature. However, until the 9th day the control kept the highest L* values. The concentrations 4 and 6% kept the green color (-a*) of guava peels for longer.

For the factor b*, the concentration which slowed the yellowing of peels was 4%. [29] also noted in his experiment with guavas a color change of peels from green to yellow. He attributed this fact to the breakdown of the chlorophyll molecule structure by the activity of the enzyme chlorophyllase, confirming what [30] describes the process of fruiting caused by the activity of the enzyme chlorophyllase in the breakdown of the chlorophyll molecule. His results were in agreement with our results for the parameters a* and b*. [31] stored "Pedro Sato" guavas at 25 + 1°C and 85 ± 5% RH and reported that the peel color changed from green to yellow. [28] also observed this same behavior during storage period for peppers coated with cassava starch.

Fruit firmness decreased over storage for all the treatments (Fig. 2). [32] also observed a decrease in the firmness of "Kumagai" guavas, when were stored at room temperature. This decrease is associated with enzyme activity in the metabolism of carbohydrates of the cell wall and loss of water during the maturation process [33] regardless of the treatment used.

Fruits coated with pectin kept a firmness higher than fruits coated with starch. Similar results were found by [34] for "Dominador" tomatoes coated with pectin, which kept the firmness better until the 11th day of storage. According to [22], this may be because pectinate-based films have a good barrier to oxygen and carbon dioxide in fresh products.

The concentrations 4 and 6% kept fruit firmness in both coatings for longer.

The total soluble solids (TSS) of fruits increased during storage regardless of the type of coating (Fig. 3). This can be attributed to the natural process of fruit ripening [14]. As guava does not have enough concentration of reserve carbohydrates, there is the degradation of cell wall carbohydrates that cause an increase in soluble solids [35, 36].

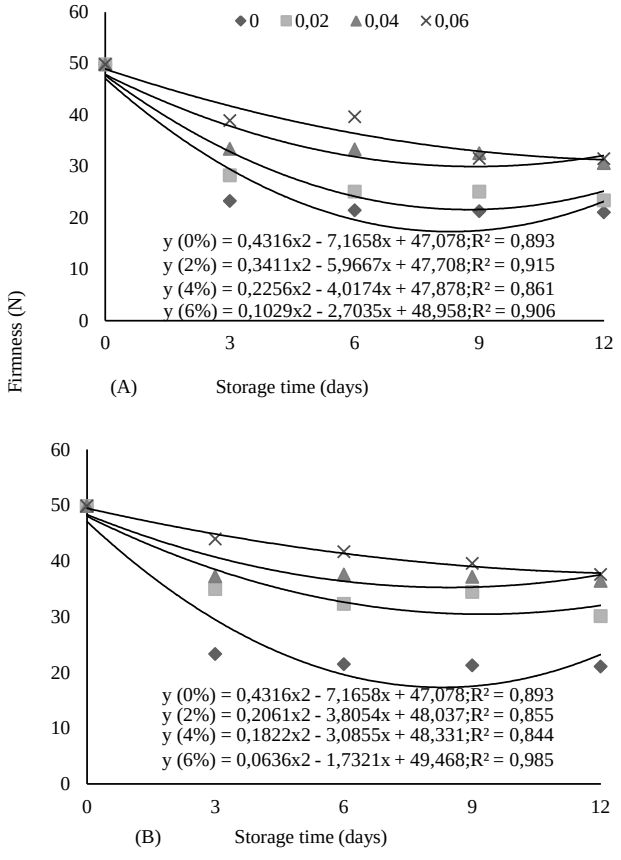


Figure 2. Firmness (N) of "Paluma" guavas coated with cassava starch (A) and pectin (B) at concentrations of 0 (control), 2, 4 and 6% in function of storage time at room temperature.
Source: Authors

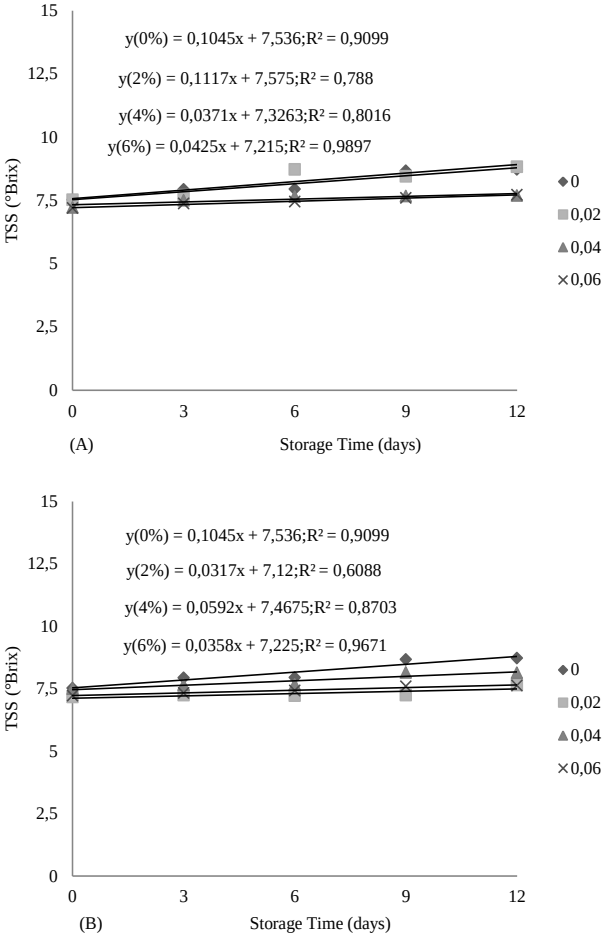


Figure 3. Total soluble solids (TSS) of "Paluma" guavas coated with cassava starch (A) and pectin (B) at concentrations of 0 (control), 2, 4 and 6% in function of storage time at room temperature.
Source: Authors

Guavas coated with starch at concentrations 4 and 6% were able to slow the accumulation of soluble solids compared to fruits coated at 0 and 2%, which presents a greater evolution of this attribute. The same result was described by [10] for "*Pedro Sato*" guavas coated with cassava starch (0, 2, 3 and 4%), in which fruits coated with cassava starch at concentrations of 3 and 4% had a lower evolution of soluble solids. [12], in their experiment with "Paluma" guavas stored at room temperature with and without carnauba wax coating, also observed a higher concentration in sugar contents at lower concentrations.

There were no statistical differences between the concentrations 2, 4 and 6% of pectin regarding TSS. However, there was an increase in the control (0% of pectin). This increase may have occurred because of the degradation or the polysaccharide biosynthetic process that causes an increase in ºBrix [22]. As soluble solids are water-soluble compounds important in determining the taste quality of fruits, it is important to use a technology that assist in this control [37].

The vitamin C content of fruits coated with cassava starch and pectin decreased throughout the study period (Fig. 5).

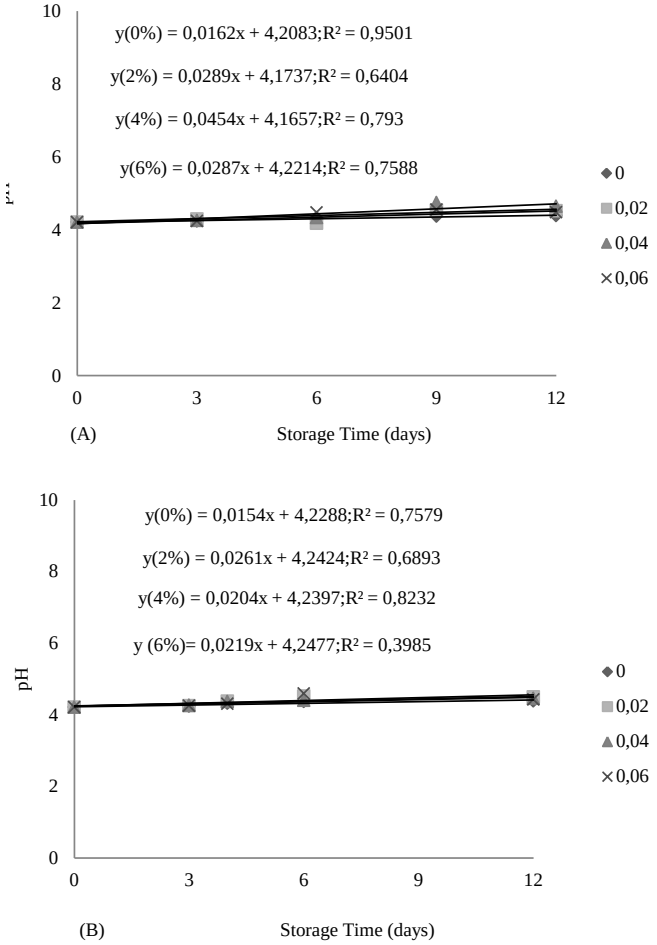


Figure 4. Hydrogenionic potential (pH) of "Paluma" guavas coated with cassava starch (A) and pectin (B) at concentrations of 0 (control), 2, 4 and 6% in function of storage time at room temperature.
Source: Authors

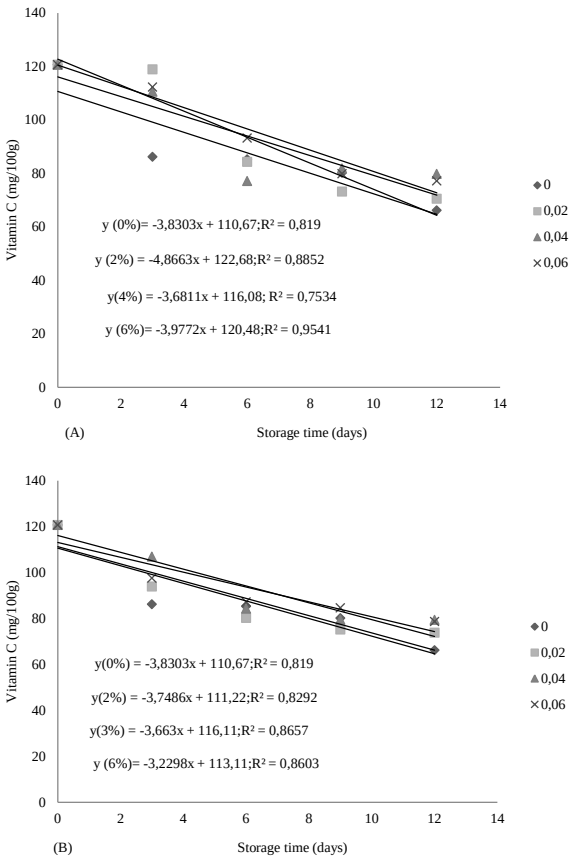


Figure 5. Vitamin C content of "Paluma" guavas coated with cassava starch (A) and pectin (B) at concentrations of 0 (control), 2, 4 and 6% in function of storage time at room temperature.
Source: Authors

Over the storage time, there was a slight increase in the pH in all treatments (Fig. 4). This can be related to the decrease in organic acids during maturation and ripening of fruits, verified by [38] in studies with "Paluma" guavas. According to [39], satisfactorily pH indexes should be between 3.6 and 4.10. However, this work contradicts these indexes because, from the first day of analysis, the values were around 4.20.

This was considered a natural process by [40] after fruits are harvested. This decrease is attributed to oxidative processes and enzymatic activities, such as L-ascorbate oxidase, which occur in fruits during the ripening process [41].

However, fruits coated with 4 and 6% of cassava starch and pectin kept the highest ascorbic acid rate over storage time. Considering that the use of the coatings can maintain a lower concentration of oxygen around the fruits, reducing the susceptibility of ascorbic acid to oxygen and reducing losses of antioxidant properties during storage [42]. A similar result was observed by [10] for "*Pedro Sato*" guavas. The authors observed that the concentrations 3 and 4% of cassava starch minimized the loss of vitamin C satisfactorily.

4. Conclusion

The coatings based on cassava starch and pectin were characterized as potential alternatives to increase the lifespan

of "Paluma" guavas. The concentrations 4 and 6% of both coatings analyzed stood out in the preservation of some fruit quality attributes such as weight loss, color, firmness, soluble solids and vitamin C content.

Acknowledgments

The authors acknowledge the support of State of São Paulo Research Foundation (FAPESP), and The Department of Civil and Agricultural Engineering, Faculty of Engineering, Universidad Nacional de Colombia.

References

[1] Oliveira, N.N.S., Viana, A.P., Quintal, S.S.R., Paiva, C.L. and Marinho, C.S., Análise de distância genética entre acessos do gênero Psidium via marcadores ISSR. Revista Brasileira de Fruticultura, 36(4), pp. 917-923, 2014. DOI: 10.1590/0100-2945-413/13.

[2] Luvielmo, M.M. and Lamas, S.V., Revestimentos comestíveis em frutas. Estudos Tecnológicos em Engenharia, 8(1), pp. 8-15, 2012. DOI: 10.4013/ete.2012.81.02

[3] AGRIANUAL. São Paulo: Agra FNP Consultoria e Comércio, 334 P. 2015.

[4] Pereira, F.M. and Kavati, R., Contribuição da pesquisa científica brasileira no desenvolvimento de algumas frutíferas de clima subtropical. Revista Brasileira de Fruticultura, 33(1), pp. 92-108. 2011. [date of reference February 24th of 2015] Available at: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_nlinks&pid=S0100-204X201400040028100019&lng=en

[5] Velho. A.C., Amarante, C.V.T., Argenta, L.C. and Steffens, C.A., Influência da temperatura de armazenamento na qualidade pós-colheita de goiabas serranas. Revista Brasileira de Fruticultura, 33(1), pp. 014-020. 2011. [date of reference February 24th of 2015] Available at: http://www.scielo.br/pdf/rbf/v33n1/aop00111.

[6] Reetz, E.R., Kist, B.B., Santos, C.E. Carvalho, C. and Drum, M., Anuário Brasileiro da Fruticultura 2014. Santa Cruz do Sul: Gazeta Santa Cruz, pp 108. 2015. [date of reference February 24th of 2015] Available at: http://www.editoragazeta.com.br/produto/anuario-brasileiro-da-fruticultura-2014/

[7] Farias, M.G., Fakhouri, F.M., Carvalho, C.W.P. and Ascheri, J.L.R., Caracterização físico-química de filmes comestíveis de amido adicionado de acerola (Malphigia emarginata D.C.). Química Nova, 35(3), pp. 546-552, 2012. [date of reference May 12th of 2015] Available at: http://quimicanova.sbq.org.br/default.asp?ed=135

[8] Pimentel, J.D.R., Souza, D.S., Oliveira, T.V. Oliveira, M.C. Bastos, V.S. and Castro, A.A., Estudo da conservação de mamão Havaí utilizando películas comestíveis a diferentes temperaturas. Scientia Plena, 7(10), pp. 101501, 2011. [date of reference May 13th of 2015] Available at: https://www.scientiaplena.org.br/sp/article/view/195

[9] Silva, D.F.P., Siqueira, D.L., Santos, D., Machado, D.L.M. and Salomão, L.C.C., Recobrimentos comestíveis na conservação pós-"colheita de 'Mexerica-do-Rio'. Revista Brasileira de Fruticultura, 33(1), pp. 357-362. 2011. [date of reference May 22th of 2015] Available at: http://www.scielo.br/pdf/rbf/v33nspe1/a45v33nspe1.pdf.

[10] Vila, M.T.R., Lima, L.C O., Boas, E.V.B.V., Hojo, E.T.D., Rodrigues, L.J. and Paula, N.R.F., Caracterização química e bioquímica de goiaba armazenada sob refrigeração e atmosfera modificada. Ciência e Agrotecnologia, 31(5), pp. 1435-1442, 2007. DOI: 10.1590/S1413-70542007000500025

[11] Cerqueira, T.S., Jacomino, A.P., Sasaki, F.F.E. and Alleoni, A.C C., Recobrimento de goiabas com filmes proteicos e de quitosana. Bragantia, 70(1), pp. 216-221, 2011. DOI: 10.1590/S0006-87052011000100028.

[12] Ribeiro, V.G., Assis, J.S., Silva, F.F., Siqueira, P.P.X. and Vilaronga, C.P.P., Armazenamento de goiabas 'Paluma' sob refrigeração e em condição ambiente, com e sem tratamento com cera de carnaúba. Revista Brasileira de Fruticultura, 27(2), pp. 203-206, 2005. DOI: 10.1590/S0100-29452005000200005.

[13] Rodrigues, M.Z., Obetenção de revestimentos comestíveis a base de pectina como veículo para microorganismos probioticos e aplicação em cenoura e goiaba minimamente processadas. 119f, MSc. Tese, Universidade Federal de Viçosa, Brazil, 2017.

[14] Santos, A.E.O., Assis, J.S., Berbert, P.A., Santos, O.O., Batista, P.F. and Gravina, G.A., Influência de biofilme de fécula de mandioca e amido de milho na qualidade pós-colheita de mangas 'Tommy Atkins'. Revista Brasileira de Ciências Agrárias, 6(3), pp. 508-551, 2011. DOI: 10.5039/agraria.v6i3a755

[15] Oliveira, N.A., Martins, J.N., Santos, D.C., Gomes, J.P. and Almeida, F.A.C., Armazenamento de tomates revestidos com pectina: avaliação colorimétrica. Revista Caatinga, 25(4), pp. 19-25, 2012. [date of reference May 22th of 2015] Available at: http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=237125883003

[16] Instituto Adolfo Lutz. Normas Analíticas do Instituto Adolfo Lutz: Métodos Químicos e Físicos para Análise de Alimentos. 4ed. São Paulo: IAL, pp 1020, 2008. Available at: www.crq4.org.br/sms/files/file/analisedealimentosial_2008.pdf

[17] Silva FAS. ASSISTAT Software: Assistência Estatística. Versão 7.7 beta. 2014.

[18] Oshiro, A.M., Dresch, D.M. and Scalon, S.P.Q., Preservação de goiaba "Pedro Sato" armazenadas sob atmosfera modificada em refrigeração. Revista de Ciências Agrárias, 35(1), pp. 213-221, 2012. [date of reference May 20th of 2015] Available at: https://doaj.org/article/384fb1e796f045e1b025158af468d9d9

[19] Kester, R. and Fennema, O.R., Edible films and coatings: a review. Food Technology, 40, pp. 47-59, 1986.

[20] Silva, W.B., Silva, G.M.C., Santana, D.B., Salvador, A.R., Medeiros, D.B., Belghith, I., Silva, N.M., Cordeiro, M.H.M., Misobutsi, G.P., Chitosan delays ripening and ROS production in guava (Psidium guajava L.) fruit. Food Chemistry, 242(99), pp. 232-238, 2018. DOI: 10.1016/j.foodchem.2017.09.052

[21] Pereira, M.E.C., Silva, A.S., Bispo, A.S.R., Santos, D.B.S., Santos, S.B. and Santos, V.J., Amadurecimento de mamão formosa com revestimento comestível à base de fécula de mandioca. Ciência e Agrotecnologia, 30(6), pp. 1116-1119, 2006. DOI: 10.1590/S1413-70542006000600011

[22] Chitarra, M.I.F. and Chitarra, A.B., Pós-colheita de frutos e hortaliças: fisiologia e manuseio. 2. Ed. Lavras: UFLA, pp 785. 2005. [date of reference April 17th of 2015] Available at: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_nlinks&ref=000082&pid=S0103-84782014000600028000007&lng=en

[23] Coelho, C.C.S., Fonseca, M. J.O., Campos, R.S., Oliveira, A.H., Soares, A.G. and Bastos, L.A.T., Qualidade pós colheita de goiabas 'Pedro Sato', revestidas Com filmes à base de amido de mandioca e óleo de cravo da índia. 2013. [date of reference February 20th of 2015]. Available at: http://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/88123/1/2013-036.pdf.

[24] Ribeiro, T.P., Lima, M.A.C., Trindade, D.C.G., Santos, A.C.N. and Amariz, A., Uso de revestimentos à base de dextrina na conservação pós-colheita de manga 'Tommy Atkins'. Revista Brasileira de Fruticultura, 31(2), pp. 343-351, 2009. DOI: 10.1590/S0100-29452009000200008.

[25] Reis, K.C., Elias, H.H.S., Lima, L.C.O., Silva, J.D. and Pereira, J., Pepino japonês (Cucumis sativus L.) submetido ao tratamento com fécula de mandioca. Ciência e Agrotecnologia, 30(3), pp. 487-493, 2006. DOI: 10.1590/S1413-70542006000300015.

[26] Oliveira, T.A., Aroucha, E.M.M., Souza, M.S.M., Leite, R.H.L. and Santos, F.K.G., Efeito do biofilme de gelatina e cloreto de cálcio na coloração de quiabo armazenado sob refrigeração. Agropecuária Científica no Semiárido, 8(2), pp. 7-11, 2012. [date of reference February 21th of 2015]. Available at: http://revistas.ufcg.edu.br/acsa/index.php/ACSA/article/view/167/pdf

[27] Pereira, T., Carlos, L.A., Oliveira, J.G. and Monteiro, A.R., Características físicas e químicas de goiabas cv Cortibel (Psidium guajava) estocadas sob refrigeração em filmes X-Tend. Alimentos e Nutrição, 16(1), pp. 11-16, 2005. [date of reference February 21th of 2015]. Available at: http://serv-bib.fcfar.unesp.br/seer/index.php/alimentos/article/viewFile/94/107.

[28] Hojo, E.T.D., Cardoso, A.D., Hojo, R.H., Vilas Boas, E.V.B. and Alvarenga, M.A.R., Uso de películas de fécula de mandioca e PVC na conservação pós-colheita de pimentão. Ciência e Agrotecnologia,

31(1), pp. 184-190, 2007. DOI: 10.1590/S1413-70542007000100027.
[29] Gonçalves, B.J., Monitoração por termografia infravermelho da qualidade pós-colheita de goiabas armazenadas sob refrigeração. 125f, MSc. Dissertation, Universidade Federal de Lavras, Brazil, 2014.
[30] Matile, P., Hortensteiner, S., Thomas, H., Chlorophyll degradation. annual, Review Plant Physiology and Plant Molecular Biology. 50, pp. 67-95, 1999. DOI: 10.1146/qnnurev.arplant.50.1.67.
[31] Azzolini, M., Jacomino, A.P. and Spoto, M.H.F., Estádios de maturação e qualidade pós-colheita de goiabas 'Pedro Sato'. Revista Brasileira de Fruticultura, 26(1), pp. 29-31, 2004. [date of reference May 20th of 2015] Available at: www.scielo.br/pdf/rbf/v26n1/a09v26n1.pdf
[32] Morgado, C.M.A., Durigan, J.F., Lopes, V.G. and Santos, L.O., Conservação pós-colheita de goiabas 'Kumagai': efeito do estádio de maturação e da temperatura de armazenamento. Revista Brasileira de Fruticultura, 32(4), pp. 1001-1008, 2010. [date of reference May 20th of 2015] Available at: http://www.scielo.br/pdf/rbf/v32n4/v32n4a08.pdf.
[33] Vilas-Boas, B.M., Nunes, E.E., Fiorini, F.V.A., Lima, L.C.O., Vilas-Boas, E.V.B. and Coelho, A.H.R., Avaliação da qualidade de mangas 'Tommy Atkins' minimamente processadas. Revista Brasileira de Fruticultura, 26(3), pp. 540-543, 2004. DOI: 10.1590/S0100-29452004000300040.
[34] Bolzan, R.P., Biofilmes comestíveis para conservação pós-colheita de tomate 'Dominador'. 167f, MSc. Dissertation, Universidade Federal do Paraná, Brazil, 2008.
[35] Linhares, L.A., Santos, C.D., Abreu, C.M.P. and Corrêa, A.D., Transformações químicas, físicas e enzimáticas de goiabas 'Pedro Sato' tratadas na pós-colheita com cloreto de cálcio e 1-metilciclopropeno e armazenadas sob refrigeração. Ciência e Agrotecnologia, 31(3), pp. 829-841, 2007. DOI: 10.1590/S1413-70542007000300033.
[36] Cerqueira, T.S., Jacomino, A.P., Sasaki, F.F.E. and Amorim, L., Controle do amadurecimento de goiabas 'Kumagai' tratadas com 1metilcloropropeno. Revista Brasileira de Fruticultura, 31(3), pp. 687-692, 2009. [date of reference May 20th of 2015] Available at: http://www.producao.usp.br/bitstream/handle/BDPI/5360/art_JACOMINO_Controle_do_amadurecimento_de_goiabas_e39Kumagaie39_tratadas_2009.pdf?sequence=1.
[37] Kluge, R.A., Natchtigal, J.C., Fachinello, J.C. and Bilhalva, A.B., Fisiologia e manejo pós-colheita de frutas de clima temperado. 2 ed. Campinas: Livraria e Editora Rural Ltda., pp 214, 2002.
[38] Souza, M.E., Silva, A.C., Souza, A.P., Tanaka, A.A. and Leonel, S., Influência das precipitações pluviométricas em atributos físico-químicos de frutos da goiabeira 'Paluma' em diferentes estádios de maturação. Revista Brasileira de Fruticultura, 32(2), pp. 637-646, 2010. DOI: 10.1590/S0100-29452010005000060.
[39] Manica, I., Icuma, I.M., Junqueira, N.T.V., Salvador, J.O., Moreira, A. and Malavolta, E., Goiaba: do plantio ao consumidor. Porto Alegre: Cinco Continentes, pp 32, 2001.
[40] Severo, J., Galarça, S.P., Aires, R.F., Cantillano, R.F.F., Rombaldi, C.V. and Silva, J.A., Avaliação e compostos fenólicos, antocianinas, vitamina C e capacidade antioxidante em mirtilo armazenado em atmosfera controlada. Brazilian Journal of Food Technology, 12(1), pp. 65-70, 2009. [date of reference May 20th of 2015] Available at: http://bjft.ital.sp.gov.br/artigos/especiais/especial_2009/v11_edesp_12.pdf.
[41] García-Betanzos, C.I., Hernández-Sánchez, H., Bernal-Couoh, T.F., Quintanar-Guerrero, D., Zambrano-Zaragoza, M.L., Physicochemical, total phenols and pectin methylesterase changes on quality maintenance on guava fruit (Psidium guajava L.) coated with candeuba wax solid lipid nanoparticles-xanthan gum. Food Research International, 101, pp. 218-227, 2017. DOI: 10.1016/j.foodres.2017.08.065
[42] Murmo, S.B., Mishra, H.N., The effect of edible coating based on Arabic gum, sodium caseinate and essential oil of cinnamon and lemon grass on guava. Food Chemistry, 245, pp. (820-828), 2018. DOI: 10.1016/j.foodchem.2017.11.104

A.K.R. Quirino, she holds a BSc. degree in Occupational Safety from the University of Santo Amaro (2011). She is currently a student of Agronomic Engineering at the Federal University of the São Francisco Valley. Has experience in the field of Agronomy, with emphasis on Rural Extension.
ORCID: 0000-0002-1915-7871

J.D.deS. Costa, is a BSc. in Agricultural and Environmental Engineer (2014) graduated from the Federal University of the São Francisco Valley (UNIVASF), with a sandwich degree at the Faculty of Sciences of the University of Lisbon - PT. MSc. in Agricultural Engineering from the Federal University of Campina Grande (2016), area of concentration in processing and storage of agricultural products. Currently holds a doctorate in Agricultural Engineering from the Federal University of Campina Grande.
ORCID: 0000-0002-8706-7405

A.F.Neto, he holds a BSc. degree in Agricultural Engineering from the Federal University of Paraíba (2000), a MSc. degree in Agricultural Engineering from the Federal University of Campina Grande (2003) and a PhD in Agricultural Engineering from UFV / UFCG (2012). He is currently associate professor at the Federal University of the São Francisco Valley - UNIVASF. Has experience in the field of agricultural engineering, with emphasis on good agricultural practices (BPA) and Logistics for Storage of Agricultural Products.
ORCID 0000-0002-0326-9123

M.deS. Costa, is a BSc. graduated in Food Technology, with Sp. in Processing of Fruit and Vegetable Derivatives area. Currently a MSc. degree in the Agricultural Engineering Department of the UFCG. Has experience in food science and technology area.
ORCID: 0000-0001-9593-4233

C.M. Sánchez-Sáenz, received the Bs. Eng in Agricultural Engineering from Universidad Nacional de Colombia in 2004, the MS degree in Agricultural Engineering from Universidade Estadual de Campinas in 2008 and the PhD degree in Agricultural Engineering from Universidade Estadual de Campinas in 2014. Currently, she is assistant professor in the Civil and Agricultural Engineering Department, Engineering Faculty, Universidad Nacional de Colombia – Bogotá D.C. Has experience in the Post-Harvest Technology area, with emphasis on drying, Near-infrared spectroscopy (NIRS), physical properties of biological materials and experimental design and process optimization.
ORCID: 0000-0002-2746-7714

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Methodology to support decision-making in prioritization improvement plans aimed at agricultural sector: Case study

Nelson Javier Tovar-Perilla [a,b], Helga Patricia Bermeo-Andrade [b], José Fidel Torres-Delgado [a] & Miguel Ignacio Gómez [c]

[a] *Departamento de Ingeniería Industrial, Facultad de Ingeniería, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia. nj.tovar10@uniandes.edu.co, ftorres@uniandes.edu.co*
[b] *Facultad de Ingeniería, Programa de Ingeniería Industrial, Universidad de Ibagué, Ibagué, Colombia. nelson.tovar@unibague.edu.co, helga.bermeo@unibague.edu.co*
[c] *Charles H. Dyson School of Applied Economics and Management, Cornell University, Ithaca, EEUU. mig7@cornell.edu*

Received: March 30th, 2017. Received in revised form: October 13st, 2017. Accepted: February 15th, 2018.

Abstract
Developing countries and those with agricultural tradition have, among their government priorities, the design and implementation of improvement plans to increase productivity in this sector. Prioritization of those plans tends to be based on assessment of production indicators, leaving aside key logistic aspects such as transportation, handling, packing among others. Due to this reason, this work proposes a multi-criteria methodology, based on experts' method and planning method of technological development in agro-industrial chains proposed by ISNAR, which estimate logistic potential index (LPi) and level of competitiveness index (LCi). Joint analysis of both indicators allowed to prioritize products in an array called the prioritization matrix. Methodology was validated in a case study through prioritizing horticultural and fruit products in five zones of Tolima – Colombia to allocate resources in order to implement logistics strategies.

Keywords: multi-criteria methodology; agricultural sector; product selection.

Metodología para soportar el proceso de toma de decisiones en la priorización de planes de mejora en el sector agrícola: Caso de estudio

Resumen
Los países en desarrollo y aquellos con tradición agrícola tienen entre sus prioridades gubernamentales el diseño e implementación de planes de mejora para aumentar la productividad en este sector. La priorización de esos planes tiende a basarse en la evaluación de indicadores de producción, dejando de lado aspectos logísticos clave como transporte, manipulación, embalaje, entre otros. Por esta razón, este trabajo propone una metodología multicriterio, basada en el método de expertos y el método de planificación del desarrollo tecnológico en cadenas agroindustriales propuesto por ISNAR, que estiman el índice de potencial logístico (LPi) y el índice de nivel de competitividad (LCi). El análisis conjunto de ambos indicadores permitió priorizar los productos en una matriz denominada matriz de priorización. La metodología fue validada en un caso de estudio a través de la priorización de productos hortícolas y frutales en cinco zonas del Tolima - Colombia para asignar recursos con el fin de implementar estrategias logísticas.

Palabras clave: metodología multicriterio; sector agrícola; selección de productos.

1. Introduction

Direct contributions from agricultural and livestock sectors (crops, cattle raising, forestry, and fishing) in the development of the economy are reflected by their participation in the total GDP, their monetary earnings, and their important role in the use of workforce [1-3]. Moreover, agriculture represents a significant fraction of the economic activity in the developed world, with 25% of the added value coming from this sector [3,4]. Thereby, it seems reasonable

How to cite: Tovar-Perilla, N.J., Bermeo-Andrade, H.P., Torres-Delgado, J.F. and Gómez, M.I., Methodology to support decision-making in prioritization improvement plans aimed at agricultural sector: Case study. DYNA, 85(204), pp. 356-363, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

that growth of agricultural productivity and management of food systems have significant effects upon economic variables [5] and on the life quality of the people [6,7].

Agricultural sector continues to play a fundamental role for development, especially in low-income countries, where this sector bears relevance, both in terms of added income as in the workforce in rural zones [8]. Particularly, the horticultural and fruit sector has been the food sector with the greatest growth in the world, evidencing the need to expand and identify adequate technological solutions, innovate in market agreements, link small farmers with the market to ensure efficient supply systems [9].

The importance of agriculture in the economic development of countries shown in the 2008 report on global development: Agriculture for Development [4] and Agriculture at the Crossroads [10] has, to a large extent, renovated interests for issues of the sector.

Although the agricultural economy has a proud tradition of developing practical tools that can quantify earnings and losses due to changes in policies or programs, as stated by [11]. It is evidenced that the formation of associations for the development of agricultural innovation in Latin America is often achieved without clear perceptions of the costs involved in the benefits that will be obtained. As a result, decision-making to prioritize resources and products becomes a challenge for local governments within the agricultural sector.

It is well-known that applying multi-criteria and hierarchical analysis techniques have become into useful tools for the decision-making process in any setting [12,13]. Globally, multi-criteria analysis techniques within the agricultural sector have focused on the analysis of risk aversion among producers, productivity improvement, decision-making, and the implications in water management in agricultural irrigation systems [14-17].

Multiple attribute assessment, combined with the analytical hierarchical process (AHP) have been used to evaluate optimal locations of new agricultural food warehouses, selection and adoption of products to cultivate, land preservation, and management of wetlands, among others [18-21]. On the other hand, in Colombia, this type of work has been developed to identify governmental difficulties for economic development, to evaluate of environmental impact, to locate of facilities, and to select of power generation systems to improve life quality of life in rural zones [22-25].

Regarding hierarchy products, several matrix models exist [26-31] that allow to classify them according to a set of criteria to establish priorities in the distribution of resources. In Latin America, countries, such as Argentina, Brazil, Mexico, Colombia, Venezuela, and Chile have conducted research aimed at characterizing the forest and agro-industrial subsectors to help decision-makers on how to direct financial resources to increase productivity. These studies have been based on two factors: socioeconomic importance and competitiveness, recommended by the method from the International Service for National Agricultural Research (ISNAR) and adapted to the specific conditions of each region [32-35]. However, as it relates to the ranking of agricultural products, the aforementioned studies have not considered the feasibility of the product for its national and international commercialization, the ease of distribution, and the feasibility of industrialization; variables that are not directly linked to productivity, which are fundamental to increase the competitiveness of the chain.

In recent years in Colombia, a fund for science and technology has been implemented with resources coming from the exploitation of natural resources (royalties). This fund seeks to fund projects in science, technology, and innovation (ST+i) aimed to applied research programs and programmed to guarantee an impact upon the production sector. Given the need to develop strategies that allow to improve the agricultural sector in the state Tolima, Colombia [36,37], the state government has approved a project to design and implement a logistics model, as the basis for the integration of value on the horticultural and fruit chains. During the first phase of the project, the researchers are faced with the decision to determine which horticultural and fruit chains need to be intervened, so that logistics strategies can be implemented. The aim of this paper is to propose a methodology based on multi-criteria techniques for decision-making, bearing in mind quantitative and qualitative criteria that allow to prioritize the agricultural products.

2. Prioritization methodology

The principal methodological aspects considered during this first phase of the Project are simplified in the following four steps:

Step 1. Selection of zones and products to evaluate by zone. To select the zones in the region, the region's geographic distribution must be considered, along with its agricultural tradition and presence of the crops object of study. Also, to select the agricultural products to prioritize it is necessary to review reports on statistical production to establish the region's most representative products.

Step 2. Quantitative analysis. After preselecting the products (variable i) from each zone, it must be establish the quantitative criteria (variable j) to be analyzed in each product according to the Planning method of technological development in agro-industrial chains from ISNAR [34]. Thereafter, information is gathered on the criteria in each zone and per product (Xij). Upon obtaining the information, it is normalized and the level of competitiveness index (LCi) is calculated per product, which is within a range from 1 to N (N = Number of products to prioritize). To calculate the LCi, eq. (1)-(2) were used:

$$LC_{ij} = \left\{ \left[\frac{X_{ij} - X_{ijmin}}{X_{ijmax} - X_{ijmin}} \right] \times (N-1) \right\} + 1 \quad (1)$$

$$LC_i = \frac{\sum_{j=1}^{J} LC_{ij}}{j} \; \forall \; i \quad (2)$$

Step 3. Qualitative analysis. This analysis applies the DELPHI method [38], which suggests gathering a number (variable k) of no less than 10 experts on the topic of analysis, who according to their knowledge and expertise will score the logistic potential of the products (variable i) preselected from each zone in the previous step, bearing in mind the viability of each product for its national and international commercialization, ease of transportation and handling, possibility to obtain derived products, and its feasibility for

industrialization. Additionally, this index is evaluated within a range from (1) to (N), with (N) being the best score, with the excluding valuation restriction (without repetitions). With the assessments obtained in each round of the method of experts, a descriptive statistical analysis must be performed to evaluate the experts' consensus from the calculation of Kendall's level of concordance (W) [39,40]. It is necessary to validate the level of concordance by applying the chi-squared (χ^2) test at a 95% confidence interval (α=5%) from the evaluation of the following hypotheses:

Ho: W=0; no concordance exists in responses of experts

Ho: W>0; concordance exists in responses of experts

In case of not reaching a concordance level above 0.70 with the experts, a new valuation round must be carried out. Evaluators must are given the statistical results from the previous round. It is convenient to perform no more than three rounds per zone. If the concordance coefficient calculated during the third round is below the minimum recommended (W < 0.70), an alternative would be to perform the cluster analysis by grouping the responses via hierarchical clustering to identify atypical data. Furthermore, recognize the experts that converge in their scores. The logistic potential index (LPi) of each product is calculated based on the scores by the experts. To calculate the LPi, eq. (3) was used:

$$LP_i = \frac{\sum_{k=1}^{k} LP_{ik}}{k} \; \forall i \qquad (3)$$

Step 4. Prioritizing of products. In order to prioritize the products, data on the indices calculated (LCi) and (LPi) must be consolidated in the prioritization matrix and then these results are mapped on an XY plane ($1 \leq X \leq N$; $1 \leq Y \leq N$). The graphic must be included as a third variable of annual production analysis of each product, represented by the diameter of the bubble from the figure. To facilitate interpretation of the graphic, the prioritizing matrix is divided into four quadrants limited by the mean values of each indicator, as shown in Fig.1.

3. Results

3.1. Selection of zones and products to evaluate per zone

The zones (epicenters) selected to carry out the work are geographically distributed throughout the state of Tolima. It is recognized for their agricultural tradition and its large areas cultivated with fruits and vegetables. Fig. 2 shows the distribution of the zones selected within the State.

After reviewing the statistical figures for the State in the horticultural and fruit sector available from the State Secretary of Agriculture [41-44], five products were preselected with the highest production in each of the zones selected. Results of the pre-selection are shown in Table 1.

3.2. Quantitative analysis

Taking as base the variables established within the agricultural and livestock research policies developed by ISNAR [34], the following criteria are shown in Table 2

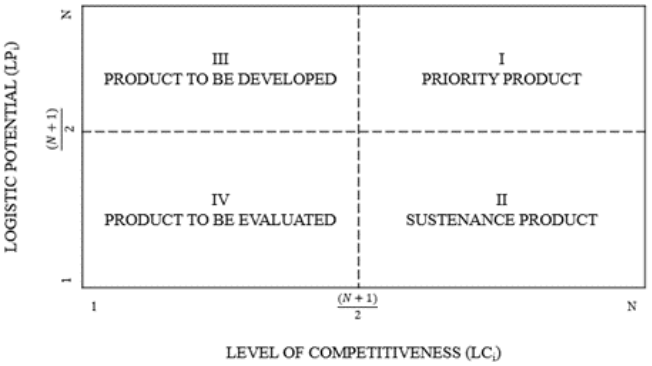


Figure 1. Product prioritization matrix
Source: The authors

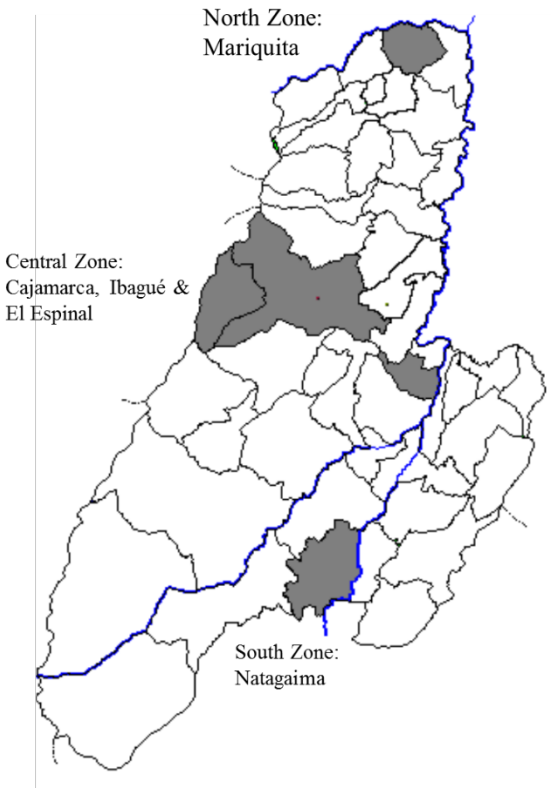


Figure 2. Epicenters of zones selected to apply the methodology
Source: The authors

Table 1.
Products preselected to prioritize per zone evaluated

	Evaluated zones				
Product – Production [t/year]	***Mariquita***	***Ibagué***	***Cajamarca***	***El Espinal***	***Natagaima***
	Avocado	Plantain	Tomato	Mango	Plantain
	43,465	18,595	40,636	60,597	14,970
	Yucca	Banana	Arracacha	Lemon	Cachaco*
	28,664	7,662	39,271	15,920	4,591
	Plantain	Tomato	Plantain	Plantain	Orange
	7,478	4,843	23,922	7,340	2,022
	Banana	Yucca	Beans	Papaya	Guava
	6,818	4,720	12,933	3,031	1,631
	Pumpkin	Mulberry	Mango	Guava	Lemon
	993	2,353	8,749	3,342	1,327

* Musa paradisiaca L
Source: Corporación Colombiana Internacional (CCI) – national agricultural base 2007-2012

Table 2.
Criteria to evaluate per product preselected

Criterion to evaluate per product	Unit of measurement
Municipal area harvested, Year 2012	[ha]
Yield	[t/ha]
Yield index (Yield / National average yield)	[%]
National participation	[%]
Participation of Municipal production in State	[%]
Participation of Municipal planted area in State	[%]
Area planted, Year 2012	[ha]
Growth index (Area planted 2012 / Area planted 2007)	[%]

Source: The authors based ISNAR [34]

Table 3.
Information of the quantitative criteria evaluated for the Mariquita zone

Crop or Product	Municipal area harvested 2012 (ha)	Yield (t/ha)	Yield index (%)	National Participation (%)	Participation of the Municipal production in the State (%)	Participation of the Municipal area in the State (%)	Area planted Year 2012 (ha)	Growth index (%)
Avocado	4,950	8.78	101.24	19.51	74.09	72.28	6,922	137.02
Yucca	2,866	10.00	176.9	1.00	20.51	15.04	3,134	60.27
Plantain	427	17.51	138.91	2.46	32.01	18.83	469	213.18
Banana	323	21.11	205.33	0.36	22.52	12.80	372	92.54
Pumpkin	80	12.41	95.19	1.34	22.08	29.09	80	72.73

Source: Corporación Colombiana Internacional (CCI) – national agricultural base 2007-2012

Table 4.
Values of competitiveness indices of each product evaluated in each of the epicenters selected

	Evaluated zones									
	Mariquita		*Ibagué*		*Cajamarca*		*El Espinal*		*Natagaima*	
Product – LC_i Index	Avocado	3.78	Plantain	2.57	Arracacha	3.05	Mango	4.62	Plantain	2.98
	Plantain	2.50	Banana	3.12	Plantain	1.36	Lemon	2.79	Lemon	1.54
	Yucca	1.79	Yucca	2.10	Tomato	2.87	Plantain	1.47	Cachaco	3.69
	Banana	2.17	Tomato	2.33	Beans	3.01	Guava	1.66	Orange	2.51
	Pumpkin	1.37	Mulberry	2.96	Mango	1.58	Papaya	2.42	Guava	1.96

Source: The authors

Information from each of the criteria was collected per product and zone, thus, obtaining the necessary information to calculate the product's competitiveness index LCi (eq. 1). Table 3 shows, as an example, the information obtained through criterion for each product in the Mariquita zone. Table 4 shows the competitiveness indices obtained for each product in each of the five zones analyzed. It can be noted that LCi is not directly related to annual production values (Table 1).

3.3. Qualitative analysis

After applying the DELPHI method with the participation of 15 experts, Table 5 shows Kendall's level of concordance obtained in the responses from experts, the p value for the chi squared test, and the number of rounds conducted in each of evaluated zones.

Table 5.
Values for Kendall's coefficient in each of the rounds conducted per evaluated zone

Zone	Round 1		Round 2		Round 3	
	W	p value	W	p value	W	p value
Mariquita	0.778	0.000	**0.861**	0.000		
Ibagué	0.131	0.096	0.119	0.153	0.180	0.038
Cajamarca	0.242	0.004	0.270	0.003	0.325	0.001
El Espinal	0.685	0.000	0.745	0.00	**0.762**	0.000
Natagaima	0.198	0.018	0.307	0.001	0.282	0.002

Source: The authors

According to the methodology proposed, in zones where the minimum desired level of concordance was not achieved, Ibagué, Cajamarca, and Natagaima, cluster analysis was performed [45] grouping by conglomerate the responses by the experts on the third round and discarding atypical valuations. Fig. 3 shows, as an example, the dendogram carried out through hierarchical cluster analysis in Ibagué zone.

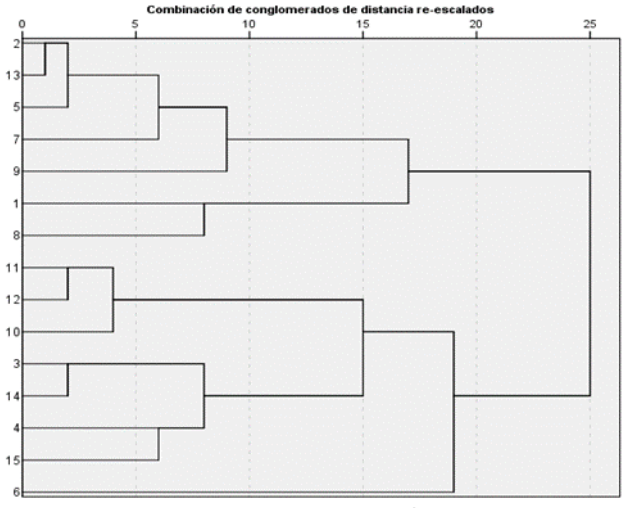


Figure 3. Dendogram per cluster analysis – Ibagué zone
Source: The authors

Table 6.
Values for Kendall's coefficient after the cluster analysis

Zone	Final Number of Experts	(W)
Ibagué	5	0,784
Cajamarca	10	0,610
Natagaima	9	0,575

Source: The authors

Table 7.
Values of logistic potential indices of each product evaluated in each of the epicenters selected

	Evaluated zones									
	Mariquita		*Ibagué*		*Cajamarca*		*El Espinal*		*Natagaima*	
Product – LP_i Index	Avocado	5.00	Plantain	4.40	Arracacha	4.60	Mango	4.87	Plantain	2.33
	Plantain	3.87	Banana	4.00	Plantain	1.80	Lemon	4.07	Lemon	3.39
	Yucca	2.60	Yucca	3.60	Tomato	3.40	Plantain	2.20	Cachaco	4.89
	Banana	2.53	Tomato	1.60	Beans	3.50	Guava	1.73	Orange	1.83
	Pumpkin	1.13	Mulberry	1.40	Mango	1.70	Papaya	2.27	Guava	2.56

Source: The authors

With results from the hierarchical classifications, the number of expert responses was determined to analyze the third round. With the number of adjusted valuations, Kendall's concordance coefficient was again calculated (Table 6).

For the Cajamarca and Natagaima zones, it was decided to work with a concordance coefficient below the recommended value (0.75), given that the values obtained gathered the responses of a significant number of experts and these were significantly higher than those obtained during the third round.

Upon defining the concordance levels and the number of experts (K) in each zone, LPi was calculated through eq. 2. Results are shown in Table 7.

It can be noted that in most of the zones the product with the highest logistic potential index is directly related to the product with the highest production volume. However, this behavior is not noted in the Natagaima zone, which is partly explained because the Cachaco leaf has commercial potential as wrapping material for typical foods [46,47], which is not reflected in the results of production volumes (Table 1).

3.4. Prioritizing of products

The results obtained for the competitiveness level index (LCi) and logistic potential index (LPi) for each of the horticultural and fruit products from the five zones studied were located on the product prioritizing matrix. The results obtained in each of the zones are shown in Fig. 4-8.

According to Figs. 4-5, in the Mariquita and El Espinal zones, the indicators of the level of competitiveness and logistic potential show a direct relationship, clearly evidencing the priority products in the zone. This behavior is related to the results found through the method of experts, which yielded high concordance coefficients as the first rounds, and its final value was above the accepted minimum. Additionally, it can be seen that in the Mariquita zone, yucca in spite of having the second production volume, was placed in the quadrant of products with low competitiveness level and low logistic potential (products to be evaluated).

Also, the Ibagué, Natagaima, and Cajamarca zones do not show a defined tendency in the prioritizing matrix; this behavior agrees with that reflected in the results of the method of experts. The prioritizing matrix in the Ibagué zone placed plantains in the quadrant of products to be developed, suggesting their selection for productivity improvement programs of this chain. It is also important to highlight that in the Ibagué and Cajamarca zones, no product was found clearly placed in the first quadrant (priority products); this was due in part to the lack of products with outstanding competitive levels (LCi) in these zones.

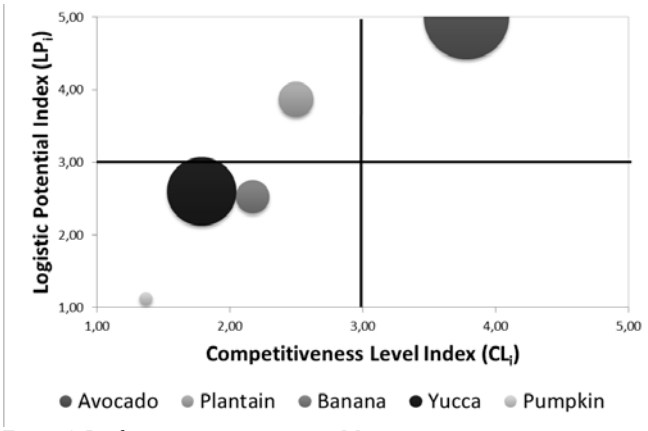


Figure 4. Product prioritizing matrix in Mariquita zone
Source: The authors

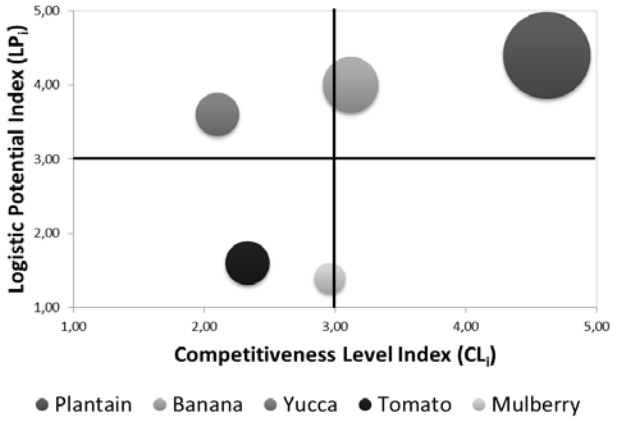


Figure 5. Product prioritizing matrix in Ibagué zone
Source: The authors

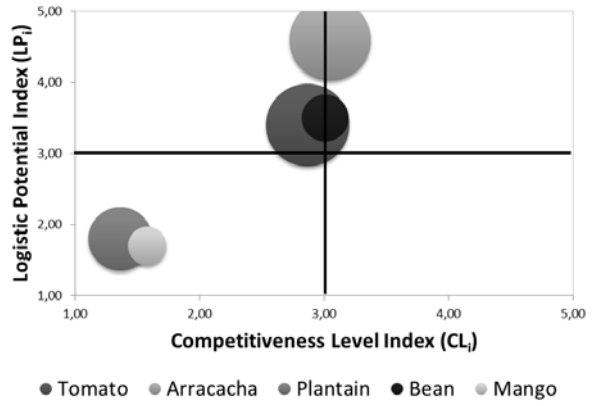


Figure 6. Product prioritizing matrix in Cajamarca zone
Source: The authors

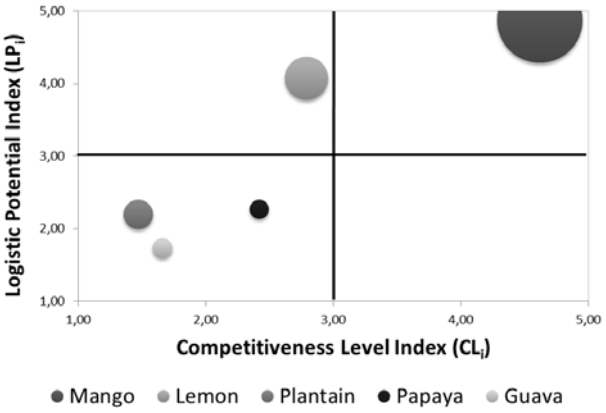


Figure 7. Product prioritizing matrix in El Espinal zone
Source: The authors

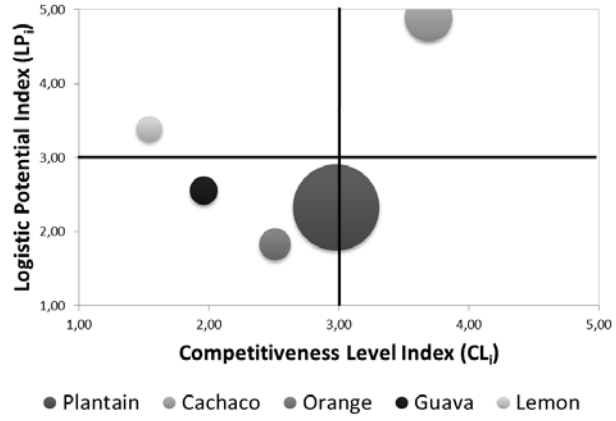


Figure 8. Product prioritizing matrix in Natagaima zone
Source: The authors

Table 8 summarizes the prioritizing of products and the location of the quadrant within the prioritizing matrix per zone

Table 8. Location of products within the prioritizing matrix per evaluated zone

Quadrant	Mariquita	Ibagué	Cajamarca	El Espinal	Natagaima
I. Priority products	Avocado	Banana	Arracacha Beans	Mango	Cachaco
II. **Sustenance** products					
III. Products to be developed	Plantain	Plantain Yucca	Tomato	Lemon	Lemon
IV. Products to be evaluated	Banana Yucca Pumpkin	Mulberry Tomato	Mango Plantain	Papaya Plantain Guava	Plantain Guava Orange

Source: The authors

4. Conclusions

The proposed methodology allows to prioritize products and serves as support in decision-making processes to implement logistic development plans in the agricultural sector. By dividing the prioritizing matrix into four quadrants, it allows to classify the production chains in the study zone, placing them into four categories defined as: 'Priority, 'To be developed', 'Sustenance' and 'To be evaluated', classification that allows to define the importance of the chain in evaluated zone.

Also, the methodology proposed establishes the concept and opinion of experts from the sector, as well as indices of agricultural production of the products, combining quantitative and qualitative criteria, which leads to a broader and more reliable analysis for the decision-making process and allocation of resources.

For the conducted case study, no products were found in the sustenance quadrant; this may be because most of the products analyzed have a competitiveness level below the mean and those products above this level have high logistic potential, placing them in priority products. Additionally, in zones where the Kendall concordance coefficient yielded high values as of the first rounds, the values of the indices of competitiveness and logistic potential show direct relation. Lastly, it is worth highlighting that although some products have a significant production level, after applying the prioritizing methodology these were placed in the lowest quadrant (products to evaluate), which indicates that a high production volume does not ensure a relevant position in logistic and competitive terms (priority products).

Acknowledgments

The authors wish to thank the Government of Tolima and the General Royalty System's Fund for Science, Technology, and Innovation for the financial support received under project: "*Design and implementation of a logistics model as base of the integration of value of the horticultural and fruit chain in Tolima*" through Special Cooperation Agreement N° 1032, 08 November 2013, ratified between Universidad de Ibagué and the Government of Tolima. Gratitude is also expressed to the Master's fellows who contributed to the consultation of information and preparation of data within the framework of this project.

References

[1] Johnston, B. and Mellor, J., The role of agriculture in economic development. American Economic Review [Online]. 51(4), 1961. [date of reference Jan 15 of 2015]. Avalaible at https://www.jstor.org/stable/pdf/1812786.pdf?refreqid=excelsior%3A5084710c74cbac840ec7dff452730866.

[2] Renza, J., Millán, N., Mora, M., Cifuentes, M., Osorio, J., Frasser, C. and Ramírez, D., Análisis de la estructura económica del Tolima y del mercado laboral en Ibagué (2005-2011). Colombia, Red de Observatorios Regionales del Mercado de Trabajo, Universidad del Tolima, 2011, 85P.

[3] The World Bank. Agriculture, value added (% of GDP) [en línea], Washintong DC, 2015 [Consulta: 1/15 enero 2015]. Avalaible at: http://data.worldbank.org/indicator/NV.AGR.TOTL.ZS

[4] The International Bank for Reconstruction and Development / The World Bank, World development report 2008: Agriculture for development, The World Bank, Washington DC, 2007.

[5] Gollin, D., Agricultural productivity and economic growth, in: Arrow, K.J. and Intriligator, M.D., Handbook of Agricultural Economics, Vol 1., Netherlands, Elsevier, 2010. pp. 3825-3866.

[6] Gómez, M.I., Barrett, C., Raney, T., Pinstrup-Andersen, P., Meerman, J., Croppenstedt, A., Carisma, B. and Thompson, B., Post-green revolution food systems and the triple burden of malnutrition. Food Policy, 42, pp. 129-138, 2013. DOI: 10.1016/j.foodpol.2013.06.009

[7] Gómez, M.I. and Ricketts, K.D., Food value chain transformations in developing countries: Selected hypotheses on nutritional implications. Food Policy, 42, pp. 139-150, 2013. DOI: 10.1016/j.foodpol.2013.06.010.

[8] Dethier, J. and Effenberger, A. Agriculture and development: A brief review of the literature. Economic Systems, 36 (2), pp. 175-205, 2012. DOI: 10.1016/j.ecosys.2011.09.003

[9] Mubarik, A. Horticulture revolution for the poor: Nature, Challenges and Opportunities, International Assessment for Agriculture Science and Technology (IAAST), Tainan, 2006, 43 P.

[10] McIntyre, B. D., Herren, H., Wakhungu, J., and Watson, R. T. Agriculture at a Croossroads, Washington DC, International assessment of agricultural knowledge, science and technology for development (IAASTD), 2009, 577 P.

[11] Hartwich, F. and Tola, J. Public-private partnerships for agricultural innovation: Concepts and experiences from 124 cases in Latin America. International Journal of Agricultural Resources, Governance and Ecology, 6(2), pp. 240-255, 2007. DOI: 10.1504/IJARGE.2007.012706.

[12] Walleniuns, J., Dyer, J., Fishburn, P., Zionts, S. and Deb, K. Multiple Criteria Decision Making, Multiattribute Utility Theory: Recent Accomplishments and What Lies Ahead. Management Science [Online], 54(7), 2008. [date of reference October 7th of 2015]. Available at: https://www.jstor.org/stable/pdf/20122479.pdf?refreqid=excelsior%3A14ff8ecd06afb1442dc1797336f5bda3.

[13] Turkis, Z. and Zavadskas, E. Multiple Criteria Decision Making (MCDM) Methods in Economics: An Overview. Technological and Economic Development of Economy, 17(2), pp. 397-427, 2011. DOI: 10.3846/20294913.2011.593291

[14] Gomez-Limon, J.A. and Berbel, J., Multicriteria analysis of derived water demand functions: a Spanish case study. Agricultural Systems, 63(1), pp. 49-72, 2000. DOI: 10.1016/S0308-521X(99)00075-X

[15] Gomez-Limon, J.A, Arriaza, M. and Riesgo, L., An MCDM analysis of agricultural risk aversion. European Journal of Operational Research, 151(3), pp. 569-585, 2003. DOI: 10.1016/S0377-2217(02)00625-2

[16] Riesgo, L. and Gómez-Limón, J.A., Multi-criteria policy scenario analysis for public regulation of irrigated agriculture. Agricultural Systems, 91(1-2), pp. 1-28, 2006. DOI: 10.1016/j.agsy.2006.01.005

[17] Zardari, N., Cordery, I. and Sharma, A., An objective multiattribute analysis Approach for allocation of scarce irrigation water resources. Journal of the American Water Resources Association (JAWRA), 46(2), pp. 412-428, 2010. DOI: 10.1111/j.1752-1688.2009.00410.x

[18] Duke, J. and Aull-Hyde, R., Identifying public preferences for land preservation using the analytic hierarchy process. Ecological Economics, 42(1-2), pp. 131-145, 2002. DOI: 10.1016/S0921-8009(02)00053-8

[19] Herath, G., Incorporating community objectives in improved wetland management: The use of the analytic hierarchy process. Journal of Environmental Management, 70(3), pp. 263-273, 2004. DOI: 10.1016/j.jenvman.2003.12.011

[20] García, J.L., Alvarado, A., Blanco, J., Jiménez, E. Maldonado, A.A. and Cortés, G., Multi-attribute evaluation and selection of sites for agricultural product warehouses based on an Analytic Hierarchy Process. Computers and Electronics in Agriculture, 100, pp. 60-69, 2014. DOI: 10.1016/j.compag.2013.10.009

[21] Reed, B., Chan-Halbrendt, C., Tamang, B.B., Chaudhary, N., Analysis of conservation agriculture preferences for researchers, extension agents, and tribal farmers in Nepal using Analytic Hierarchy Process, Agricultural Systems, 127, pp. 90-96, 2014. DOI: 10.1016/j.agsy.2014.01.007

[22] Cherni, J.A., Dyner, I., Henao, F., Jaramillo, P., Smith, R. and Font, R.O. Energy supply for sustainable rural livelihoods. A multi-criteria decision-support system. Energy Policy, 35(3), pp. 1493-1504, 2007. DOI: 10.1016/j.enpol.2006.03.026

[23] Henao, F., Cherni, J., Jaramillo, P., Dyner, I., A multicriteria approach to sustainable energy supply for the rural poor. European Journal of Operational Research, 218(3), pp. 801-809, 2012. DOI: 10.1016/j.ejor.2011.11.033

[24] Toro, J., Requena, I., Duarte, O. and Zamorano, M., A qualitative method proposal to improve environmental impact assessment. Environmental Impact Assessment Review, 43, pp. 9-20, 2013. DOI: 10.1016/j.eiar.2013.04.004

[25] Duarte, A.E., Sarache, W.A. and Matallana, L.G., Incident factors in facility location: An application in the Colombian biofuel sector. Ingeniería e investigación [Online]. 33(3), 2013. [date of reference November 2015]. Avalaible at: http://www.scielo.org.co/pdf/iei/v33n3/v33n3a13.pdf

[26] Robinson, S.J.Q., Hichens, R.E. and Wade, D.P., The directional policy matrix - tool for strategic planning. Longe Range Planning, 2(3), pp. 8-15, 1978. DOI: 10.1016/0024-6301(78)90045-6

[27] Kraljic, P., Purchasing must become supply management. Harvard Business Review [Online], pp. 1-13, 1983. [date of reference November 2015]. Avalaible at: https://hbr.org/1983/09/purchasing-must-become-supply-management

[28] McKinsey & Company., Enduring Ideas: The GE–McKinsey nine-box matrix. McKinsey & Company, [Online], 2008 [date of reference January 10 of 2015]. Available at: http://www.mckinsey.com/insights/strategy/enduring_ideas_the_ge_and_mckinsey_nine-box_matrix

[29] Udo-Imeh, P.T., Edet, W.E. and Anani, R.B., Portfolio analysis models: A review. European Journal of Business and Management, [Online], 4(18), 2012. [date of reference November 2015]. Avalaible at: http://iiste.org/Journals/index.php/EJBM/search/advancedResults

[30] Team FME. Ansoff Matrix: Strategy skills [Online], Free Management eBooks, [date of reference October of 2015]. Available at: http://www.free-management-ebooks.com/dldebk-pdf/fme-ansoff-matrix.pdf

[31] Michalopoulos, T., Hogeveen, H., Heuvelink, E. and Oude-Lansink, A., Public multi-criteria assessment for societal concerns and gradual labeling. Food Policy, 40, pp. 97-108, 2013. DOI: 10.1016/j.foodpol.2012.12.010

[32] Velásquez, F., Plaza, J., Gutiérrez, B., Pulido, J., Rodríguez, G., Romero, M. y Carranza, J., Método de planificación del desarrollo tecnológico en cadenas agroindustriales que integra principios de sostenibilidad y competitividad, Países Bajos, Servicio Internacional para la Investigación Agrícola Nacional (ISNAR), 1999.

[33] Rey, J., Trujillo, V., Sánchez, A., Mazzani, E., Carreño, F., Salazar, R. y González, J., Evaluación del contexto institucional para definir el rol de los INIAs en la investigación y gestión de los recursos naturales, Países Bajos, Servicio Internacional para la Investigación Agrícola Nacional (ISNAR), 1999.

[34] Lima, S., Gomes de Castro, A., Mengo, O., Medina, M., Maestrey, A., Trujillo, V. y Alfaro, O. La dimensión de entorno en la construcción de la sostenibilidad institucional, Costa Rica, Servicio Internacional para la Investigación Agrícola Nacional (ISNAR), 2001, 135 P.

[35] Moctezuma, G., Jolapa, J.L., Perez, M.M., Gonzalez, A., Moreno, F. and Perez, R., Hierarchization of forest chains in the face of the vulnerability to climate change in the state of Mexico. Revista Mexicana de Ciencias Forestales, [Online], 5(21), 2014. [date of reference September 2015]. Avalaible at: <http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2007-11322014000100002&lng=es&nrm=iso>.
[36] Gobernación del Tolima, Plan de desarrollo 2012-2015: Unidos por la grandeza del Tolima, Ibagué, Tolima: Gobernación del Tolima, 2012. 396 P.
[37] Banco de la República – Colombia and Departamento Administrativo Nacional de Estadística (DANE). Informe de Coyuntura Económica Regional (ICER) 2012 –Departamento del Tolima. Bogotá, 2013. 100 P.
[38] Linstone, H. and Turoff, M., The Delphi method techniques and applications. United States: Addison-Wesley Educational Publishers Inc, 2002.
[39] Kendall, M., Rank correlation methods. New York: Hafner Publishing Co., 1955.
[40] Stuart, A., Rank correlation methods. By M.G. Kendall. British Journal of Statistical Psychology, 9(1), 68 P, 1956. DOI: 10.1111/j.2044-8317.1956.tb00172.x
[41] Departamento Administrativo Nacional de Estadística-DANE. Oferta agropecuaria: Cifras 2010, Bogotá, Ministerio de Agricultura y Desarrollo Rural – Colombia, 2010.
[42] Departamento Administrativo Nacional de Estadística-DANE. Metodología cuentas departamentales: Base 2005, Departamento Administrativo Nacional de Estadística, Bogotá, 2011.
[43] Gobernación del Tolima. Tolima en cifras 2011. Secretaría de Planeación y Tic - Dirección Gestión Pública Territorial, Ibagué, 2011.
[44] Corporación Colombiana Internacional, Base agrícola nacional 2007-2012, Corporación Colombiana Internacional, Bogotá, 2014.
[45] Romesburg, C., Cluster analysis for researchers, North Carolina: LULU PRESS, 2004.
[46] Echeverry-Navarro, E., Gomez-Caicedo, L.E. y Guzmán, J.A., Validación y ajuste de tecnología para el cultivo de plátano en el Tolima centro, Corporación Colombiana de Investigación Agropecuaria (CORPOICA), Bogotá, 1999.
[47] Echeverry-Navarro, E., Producción de hoja de plátano soasada con destino a la agroindustria de alimentos procesados. Infomusa, 10(1), pp. 9-12, 2011.

N.J. Tovar-Perilla, received the BSc. in Industrial Engineering in 1999, the Sp degree in Production Engineering in 2002, and the MSc. degree in Industrial Management in 2010 all of Universidad de Ibagué, Ibagué, Colombia. Actually he is PhD candidate in Engineering of Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia. Currently, he is full time associate professor at Industrial Engineering Program of Universidad de Ibagué, Ibagué, Colombia. His research interests include: operation management, food logistics and supply chain management and simulation.
ORCID: 0000-0001-6330-4181

H. Bermeo-Andrade, received the BSc. in Industrial Engineering of Universidad de Ibagué, Ibagué, Colombia in 1994; the MSc degree in Industrial Engineering of Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia in 1997; the MSc degree in Operation and Technology Management of Universidad de Ibague, Ibagué, Colombia in alliance with Katholic University of Leuven, Leuven, Belgium in 2000; and the PhD degree in Engineering and Innovation Projects of Polithecnic University of Valencia, Valencia, Spain in 2007. Currently, she is full time associate professor at Industrial Engineering Program of Universidad de Ibagué, Ibagué, Colombia. Her research interests include: innovation management, logistics and supply chain management and business productivity.
ORCID: 0000-0001-6346-1128

J.F. Torres-Delgado, received the BSc. in Electric Engineering and Mathematics in 1987 and the MSc. degree in Electric Engineering in 1989 all of Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia, the MSc. degree in Industrial Automatic and Computing in 1991 and the PhD. degree in Industrial Automatic and Computing in 1995 both of Universite de Toulouse. Currently, he is associate professor at Industrial Engineering Department of Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia. His research interests include: production scheduling, logistics and supply chain management and simulation.
ORCID: 0000-0001-7379-6212

M.I. Gómez, received the BSc. in Industrial Engineering in 1990 of Universidad de Los Andes, Bogotá, Colombia, the MSc. degree in Agricultural and Consumer Economics in 1999, and the PhD. degree in Agricultural and Consumer Economics in 1999 both of University of Illinois at Urbana Champaign. Currently, he is ASSOCIATE PROFESSOR at the Charles H. Dyson School of Applied Economics and Management and he is a Fellow of the David R. Atkinson Center for a Sustainable Future at Cornell University. His research interests include: food distribution and marketing, sustainability of food supply chains, pricing and price analysis, and quantitative methods.
ORCID: 0000-0002-3591-5249

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería Administrativa e Ingeniería Industrial

Oferta de Posgrados

Especialización en Gestión Empresarial
Especialización en Ingeniería Financiera
Maestría en Ingeniería Administrativa
Maestría en Ingeniería Industrial
Doctorado en Ingeniería - Industria y Organizaciones

Mayor información:

E-mail: acia_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 52 02

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS



DYNA
http://dyna.medellin.unal.edu.co/

Modeling leakage current of ceramic insulators subject to high pollution levels for improving maintenance activities

Rafael Castillo-Sierra [a], Oscar Oviedo-Trespalacios [b, c], John E. Candelo [d] & Jose Daniel Soto-Ortiz [a]

[a] *Department of Electrical and Electronics Engineering, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia. rcastilloj@uninorte.edu.co, jsoto@uninorte.edu.co*
[b] *Department of Industrial Engineering, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia. ooviedo@uninorte.edu.co*
[c] *Centre for Accident Research and Road Safety-Queensland (CARRS-Q), Queensland University of Technology (QUT), Australia*
[d] *Facultad de Minas, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín, Colombia. jecandelob@unal.edu.co*

Received: December 7th, 2016. Received in revised form: January 6th, 2018. Accepted: February 21th, 2018

Abstract
This paper presents a useful model to determine the washing periods and to indicate the pollution levels of electrical insulators. The behavior of leakage current, which is one indicator of the presence of pollutants on the insulator surfaces, was characterized through a regression model. We quantitatively examine the behavior of leakage current and the way electrical components are polluted. The data for environmental variables and leakage current in an electrical substation are analyzed and a model is identified that well represents the leakage current behavior on the insulators. Through this model, some predictions of the pollution effect can be made using analysis tools that enable the identification of the effects of leakage current on the entire network. This method can be used to obtain leakage current models on electrical substations located in highly polluted zones.

Keywords: leakage current; electrical insulators; electrical substations; maintenance plans; pollution

Modelo de corriente de fuga de aisladores cerámicos sometidos a altos niveles de polución para mejorar las actividades de mantenimiento

Resumen
Este documento presenta un modelo útil para determinar los períodos de lavado e indicar los niveles de contaminación de aisladores eléctricos. El comportamiento de la corriente de fuga, como indicador de la presencia de contaminantes en las superficies de los aisladores, se caracterizó a través de un modelo de regresión. Se examina cuantitativamente el comportamiento de la corriente de fuga y la contaminación de los componentes eléctricos. Se analizan los datos de las variables ambientales y la corriente de fuga en una subestación eléctrica y se identifica un modelo que representa bien el comportamiento de la corriente de fuga en los aisladores. Con este modelo, se pueden realizar predicciones del efecto de contaminación utilizando herramientas de análisis para identificar los efectos de la corriente de fuga en toda la red. Este método se puede usar para obtener modelos de corriente de fuga en subestaciones eléctricas ubicadas en zonas altamente contaminadas.

Palabras clave: corriente de fuga; aisladores eléctricos; subestaciones eléctricas; planes de mantenimiento; polución

1. Introduction

Electrical insulators used in outdoor electrical substations are continually exposed to the environment and are subject to pollution coming from vehicle emissions, sea salt, dust, chemical compounds released from nearby industries, and other sources. Over time, layers of these pollutants can accumulate on the surfaces of electrical network components. As long as these layers are dry, this event will not bring further consequences to the insulation [1]. Nonetheless, high humidity exists due to mist or light rain, a conductive path is created on the dirty surface of the insulator, which decreases the dielectric properties and may

How to cite: Castillo-Sierra, R., Oviedo-Trespalacios, O., Candelo, J.E. and Soto-Ortiz, J.D., Modeling leakage current of ceramic insulators subject to high pollution levels for improving maintenance activities. DYNA, 85(204), pp. 364-371, March, 2018.

© The author; licensee Universidad Nacional de Colombia.

cause network failures [2,3].

Power system reliability is continually affected by the pollution of insulators [3]. This kind of problem is one of the most common of the electrical network [4]; thus, several solutions should be considered in order to prevent blackouts. Some studies have focused mainly on preventing flashover due to pollution on the insulation of electrical networks [5-8].

The effects of washing electrical insulators have been studied previously [9-13]. The studies presented by [56,14] established that the best method for washing insulators, from a technical and economical point of view, is by using water under pressure. Furthermore, as a way to avoid failures on electrical substations near coastal areas, an automatic pressurized water system for the washing of polluted insulators has been proposed [7]. Moreover, other researchers have studied the effect of washing insulators with pressurized water on leakage current that flows on their surface, identifying that during the insulator cleaning, the leakage current increases up to peak values [8,15]. In [16], the authors studied the risk of failure of a high-voltage substation, considering the relation between climatic periods in tropical zones and the leakage current of electrical insulators. The authors identified that there is a higher probability of circuit failures when the leakage current increase occurs during the dry period from December to Mars. Furthermore, during wet seasons or rainy periods, electrical insulators are cleaned naturally, keeping the pollutant layer at a low level.

Previous research has proven helpful in decreasing the impact of pollution on electrical networks. Some of these studies have shown how the washings need to be done in order to mitigate the effects of environmental pollution on the electrical insulators' performance. However, without practical support, it is not possible to determine an effective application for reducing the overall costs, predicting the pollution behavior, or identifying the risk of failure.

More studies related to leakage current are required to model the pollution of electrical insulators and the effects of different environmental variables. These models can be useful to identify how frequently washing must be done and how to predict high pollution levels that affect electrical insulation. All these issues must be solved in order to plan the maintenance of the insulators and improve the operation of distribution and transmission networks and electrical substations. With this sole purpose in mind, the main goal of this research is to obtain a model to identify the electrical insulators' pollution process through the leakage current that flows over the surface of the insulators and its relation to environmental variables.

The rest of this paper is organized as follows: Section II includes materials and methods used in the research; Section III contains the theory and calculation; Section IV shows the results of the investigation; Section V shows the discussion; and Section VI contains the general conclusions of the research, including its implications for future studies.

2. Materials and methods

To obtain the model, the leakage current and weather variables were taken into account, considering their existing correlations [17]. The created model is based on simple regressions with the purpose of determining the optimal washing times for the electrical insulators of outdoor substations.



Figure 1. Location of Nueva Barranquilla Substation.
Source: Adapted from Google Maps®

2.1. Case location

Fig. 1 shows the location of the Nueva Barranquilla substation in the city of Barranquilla, capital of the Atlántico Department, Colombia. This substation is located 7 km from the Caribbean Sea and 6 km from the Magdalena River. This location has atmospheric conditions with naturally high pollution levels and with a high concentration of sea salt. Moreover, because it is a seaport of first order, there is a high level of industrial activity and vehicular and maritime traffic. All these factors enhance the creation of pollutant particles in the air that affect the different components of the electrical network.

Previous studies have shown that the electrical substation is located in a high pollution zone, according to the scale established on the norm IEC 60071-2, with a salt deposit of 0.45 mg/cm^2 [18]. The effect of pollution on the electrical insulators and their behavior during the non-washing days, as well as the effects of the rain, have been exposed in [19].

2.2. Data collection

To develop the models in time series and regressions, measurement of the leakage current on the insulators is required. Fig. 2 shows the connections for measuring variables and gathering data on a computer. The data were measured from March to April 2014, with a lapse of one minute, transmitted wirelessly, and stored in a data logger.

To measure the leakage current, a copper collar was used to surround a cross-sectional area of a 220 kV electrical insulator located inside the outdoor substation. The current inducted on the spire of the collar was measured through a milliamp clamp (ETCR brand model 6300), with a connection to a computer through an RS232 port. The resolution of the clamp was 0.001 mA, with a precision of ±1.5% and a measuring range from 0–60 A.

Relative humidity and temperature were measured by a Davis Instruments Vantage Pro2 Weather Station. This station has the capacity to measure solar radiation, relative humidity, room temperature, wind speed and direction, precipitation, and more.

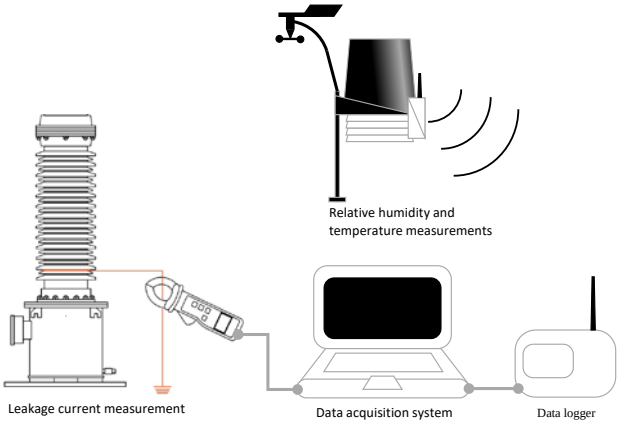


Figure 2. Setup to measure leakage current in Nueva Barranquilla substation.
Source: The authors

3. Theory and calculation

3.1. Leakage current forecasting model

The leakage current forecasting model was created using regression techniques [20-22]. These types of regression models are useful to obtain a mathematical expression that that identifies the relationship between a dependent variable and one or more independent variables. The final model has the form presented in eq. (1). The *y* variable represents the dependent variable. "x_1, x_2 to x_k" represent the independent *k* variables. "β_0, β_1 to β_k" represent the partial regression coefficients, which are calculated by minimizing the square difference between the actual data and the forecasted data. Finally, the term ϵ represents the random error:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_k x_k + \epsilon. \quad (1)$$

The estimated values of the regression coefficients are calculated as in eq. (2), where $[\hat{\beta}]$ is the matrix with the partial regression coefficients, $[X]$ is the matrix with values of the independent *k* variables, and $[y]$ is the matrix with the values of the dependent variables [23,24]:

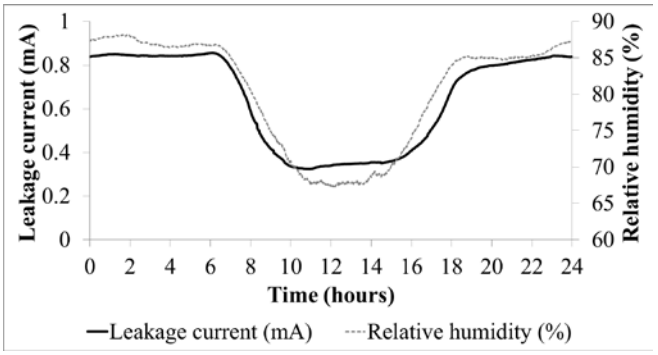
$$[\hat{\beta}] = ([X^T][X])^{-1}[X^T][y]. \quad (2)$$

4. Results

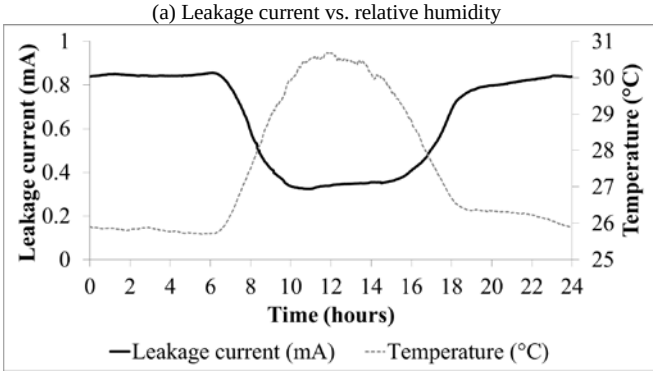
4.1. Leakage current behavior

The leakage current has no constant magnitude during the day. Fig. 3 shows how the leakage current oscillates between high values during the day and night and low values near midday. Figs. 3a and 3b show the average magnitudes of the leakage current, the relative humidity, and the temperature measured in the electrical substation per hour.

During the morning hours (between 0000 and 0700 hours) and night hours (between 1800 and 2300 hours), the leakage current has average magnitudes of 0.840 and 0.800 mA, respectively. Conversely, near midday (between 0900 and 1600 hours), the leakage current drops drastically to an average magnitude of 0.351 mA. This particular behavior of the leakage current is tied to the weather conditions of the area where the electrical insulators have been established.



(a) Leakage current vs. relative humidity



(b) Leakage current vs. temperature

Figure 3. Daily behavior of the leakage current and its correlation to the weather.
Source: The authors

Fig. 3a shows a clear correspondence between the leakage current and relative humidity, which is supported with a high coefficient of correlation (ρ = 0.97). In contrast, Fig. 3b shows a high relation between the leakage current and temperature, but inversely proportional. The coefficient of correlation supports the statement, giving a value of −0.98. Several authors worldwide have investigated the high correlation between the magnitude of the leakage current and the weather [17, 25-30]. Once more, this relationship is confirmed.

4.2. Leakage current increasing trend

Fig. 4 shows the behavior of the leakage current during a month of continuous measuring, between March 18, 2014 and April 18, 2014.

During the first day of measuring, the electrical insulators of the outdoor substation were washed and a small reduction (23%) was observed between the first and second critical peaks of the plot. For the next 14 days (hours 24 to 336) no washing was performed, although an interesting behavior can be appreciated. The leakage current progressively increased its value, which is expected as dirt gradually accumulated over the insulators' surface. Despite all this, the leakage current during the morning and afternoon hours (valleys of the plot) always kept an average of 0.351 mA and a very low variability of 0.080 mA. This means that as the insulators became dirty over the days and, with the presence of high

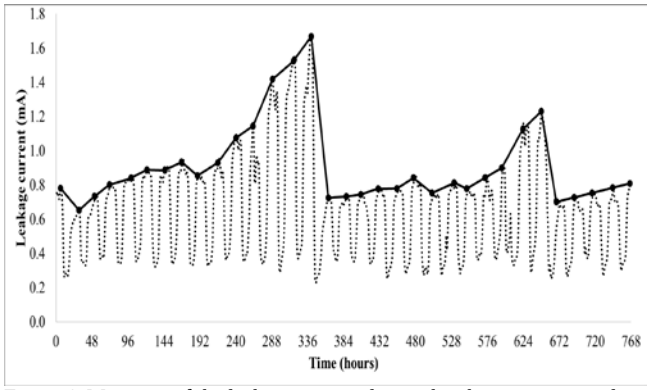


Figure 4. Measures of the leakage current during the observation period. Source: The authors

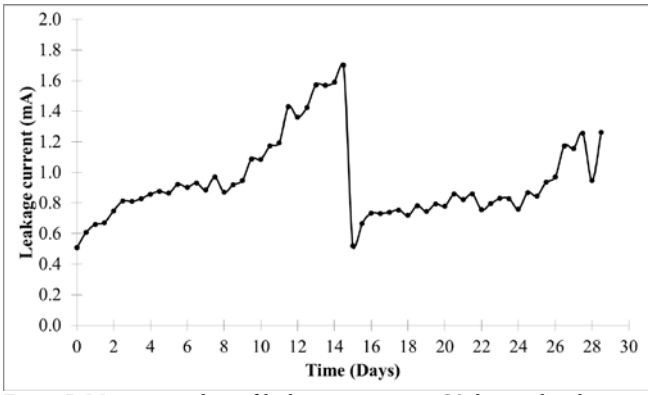


Figure 5. Maximum values of leakage current over 30 days and nights. Source: The authors

humidity values, the leakage current increased. In contrast, during the hours that the leakage current was at its maximum (morning and nighttime), the increase is marked and clearly not linear; for example, between days 11 and 14 (from hour 264 to hour 336) the current increased drastically.

On approximately the 347th hour (April 1, 2014), a new washing activity was performed on the electrical insulators. Unlike the first washing, this one is clearly marked by a 63% decrease of the leakage current magnitude. Comparing the results obtained from the first and second washings, we note that despite the percentage drop of the leakage current magnitude, the magnitudes are different in both cases, but the valley value oscillated around 0.3 mA and the peak value of the current around 0.65 mA. No matter how clean the insulator was before being washed, after the washing is done the magnitude does not drop from the previously described level.

The third washing activity is shown for hour 661, with a magnitude reduction of 45%. As with the previous washings, the peak value of the leakage current was 0.687 mA and the valley value was 0.265 mA, supporting the previously stated conclusion.

4.3. Leakage current model

Fig. 5 shows the maximum values of leakage current with data measured during the day and night for one month. The daytime period in the zone was defined from 0601 to 1800 hours. Meanwhile, the night hours were defined from 1801 to 0600 hours. The maximum value is set in each category and used for modeling of the leakage current. The model is developed with the first washing period (shown in Fig. 5) between days 0 and 14. Model validation is performed with the second washing period between days 15 and 29.

4.4. Model development

The proposed leakage current model is shown in Fig. 6. The graph defines the time from the first day after washing the insulators. This means that the day with the numerical value of zero will be the first day after washing the substation. Additionally, because we collected date twice daily (morning and evening), the time values equal to 0.0, 1.0, 2.0, etc. were considered to represent the maximum value of leakage current

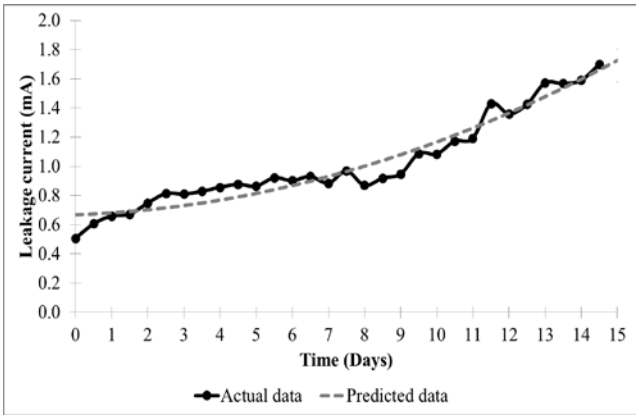


Figure 6. Leakage current model: quadratic trend. Source: The authors

measured in the morning hours. Likewise, the time values equal to 0.5, 1.5, 2.5, etc. were considered to represent the maximum value of leakage current measured at night.

The parameters of the model gave as a result $B_0 = 0.692$ and $B_2 = 0.005$, being the linear component (B_1) less important. The mean absolute percentage error (MAPE) during the creation of the model was 6.14%, the standard deviation error (σ_{error}) was 0.078 mA, and the adjusted determination coefficient (R_2 ajust) was 93.8%.

4.5. Checking the model adequacy

Through statistical validation, we established the adequacy of the proposed model. The first test done was the signification of the regression. This procedure determines whether a linear relation exists between the response variable (leakage current) and the regression variables (time and time2) [23]. The appropriate assumptions are:

$$H_0: \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_k = 0,$$
$$H_1: \beta_j \neq 0 \text{ at least for one } j. \quad (3)$$

Rejecting H_0 eq. (3) implies that at least one of the

regression variables is significant in the model. The *P*-value for this test was 1.113 x 10^{-18}. Because it is much less than the alpha value used in the test ($\alpha = 0.05$), the null hypothesis that all coefficients are zero is rejected and it concludes that at least one of the coefficients is nonzero. The second test, to identify which coefficient is zero, is individualized.

The second test performed is the Student's t-test for individual regression coefficients. This test determines the value of each model regression. The test is performed for each regression coefficient model; for the case of the proposed model, the t-test for the coefficients B_0 and B_2 must be performed. Appropriate assumptions are:

$$H_0: \beta_j = 0, \qquad H_1: \beta_j \neq 0. \tag{4}$$

The test returned *P*-values of 1.085 x 10^{-23} and 1.113 x 10^{-18} for B_0 and B_2, respectively. This result shows that both coefficients are statistically different from zero and valid for the model.

Finally, using the data measured from the second washing period and applying the Kruskal–Wallis test to verify whether there exists a statistically significant difference between the actual data and the forecasted data, the leakage current models were validated. The statistical test used in the Kruskal–Wallis test is shown in eq. (5):

$$H = \frac{1}{S^2}\left[\sum_{i=1}^{a}\frac{R_{i.}^2}{n_i} - \frac{N(N+1)^2}{4}\right], \tag{5}$$

where n_i is the number of samples of level *i-nth*, *N* is the total number of samples, R_i is the sum of the ranges of level *i-nth*, and S_2 is expressed in eq. (6):

$$S^2 = \frac{1}{N-1}\left[\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i} R_{ij}^2 - \frac{N(N+1)^2}{4}\right]. \tag{6}$$

The condition of rejecting the null hypothesis is achieved when the test statistic *H* is greater than the chi-square critical ($H > \chi^2_{\alpha,a-1}$) value or the *P*-value is less than the value of alpha (*P*-value < α). Validation of the model by forecasting the values of the second washing period resulted in a *P*-value of 0.570, which was higher than the alpha used in the test. Therefore, the null hypothesis is rejected and we can conclude that there are some significant differences between the actual and forecasted data.

4.6. Compliance with model assumptions

The analysis of variance is valid if and only if three assumptions are met in the residual: the normality assumption, the homoscedasticity assumption, and the independence assumption. Using the previous analysis, we can verify compliance with these three assumptions and obtain some valuable conclusions.

The normality assumption was verified by the chi-square test. The null hypothesis for this test says that the residual is distributed under a normal distribution and the alternative hypothesis is the negation of the null hypothesis. The *P*-value of normality test gave a value of 0.615. Because it is greater than the value of alpha used, there is insufficient evidence to reject the null hypothesis; therefore, it can be concluded that the residuals are distributed normally.

The homoscedasticity assumption was verified by the Levene test. Because the noncompliance of the assumption supposes an increase or decrease of the variance as the design factor grows in magnitude, for this test, a 30-sample residual data was divided into six groups, each with five data points. This was done to identify whether there was a growth or a significant decrease in the variance of residuals as perceived from one group to another. Therefore, the null hypothesis of this test indicates that the variances of the groups are equal to each other and the alternative hypothesis indicates that at least one of the variances of the groups is different from the rest. The *P*-value of the homoscedasticity test gave a value of 0.497. Because it is bigger than the value of alpha used, there is insufficient evidence to reject the null hypothesis; consequently, we can conclude that the residuals have constant variance.

The independence assumption was verified by the Durbin–Watson statistic. The null hypothesis for this test says that the residual values are independent and the alternative hypothesis is the negation of the null hypothesis. This analysis resulted in noncompliance of the assumption on all models, indicating an autocorrelation of the residual, which is common when data taken in time [31] are used. To meet this assumption, [32,33] suggest that the autocorrelation of the residual can be obtained by an autoregressive model of order 1 (AR(1)). The autoregressive model formulation is presented in eq. (7):

$$\varepsilon_t = \Phi\varepsilon_{t-1} + a_t, \tag{7}$$

where εt is the error on time *t*, Φ is the correlation coefficient, $\varepsilon t\text{-}1$ is the error on time *t-1*, and *at* is a random shock distributed normally with a mean of zero and variance σ2. The new adjustment in the models, adding the error model, slightly modifies the regression coefficients (*B*0, *B1*, and *B2*) of the model. Nonetheless, the validation test of the adequacy of the models is still valid. The readjustment of the model gives as results *B0* = 0.688, *B2* = 0.005, and Φ = 0.494.

4.7. Forecast limits: leakage current model

On the development of the model, the standard deviation error was 0.078 mA. This parameter is important to establish the limits in the future. The smaller the value of the standard deviation, the lower the forecast error would be, which constitutes a narrow range in which the real value of the leakage current can be established. These forecast limits can be calculated using the following equations:

$$LimSUP = \hat{y}(x_0) + t_{n-k}^{\alpha/2} \times \sigma_{error} \times \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \underline{x})^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \underline{x})}}, \quad (8)$$

$$LimINF = \hat{y}(x_0) - t_{n-k}^{\frac{\alpha}{2}} \times \sigma_{error} \times \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \underline{x})^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \underline{x})}}, \quad (9)$$

where $\hat{y}(x_0)$ represents the forecast on the point x_0, $t_{n-k}^{\alpha/2}$ is the value of the statistical Student's t-test with a probability of $\alpha/2$ and n-k degrees of freedom, $\alpha = 0.05$, n is the number of data used to do the model, and k represents the number of independent variables, which for the particular case of the quadratic model is $k = 1$. Finally, σ_{error} is the standard deviation of the residuals of the quadratic model. Two new expressions can be obtained as represented in eqs. (10) and (11):

$$LimSUP = 0.0048t^2 - 0.0023t + 0.8905, \quad (10)$$

$$LimINF = 0.0045t^2 + 0.0023t + 0.4944. \quad (11)$$

5. Discussion

This research focused on the development of a leakage current model for forecasting and monitoring the accumulation of contaminants on the surfaces of ceramic electrical insulators used in high-voltage outdoor substations. The aim of this model is to determine the most appropriate days for washing the ceramic insulators of electrical substations.

The results of the investigation show that leakage current has a daily behavior that is governed by daily fluctuations in relative humidity. In the early hours of the morning and at night, humidity has a magnitude of about 87%; meanwhile, the late morning and afternoon humidity levels are around 62%. The leakage current, similar to the relative humidity, has high values early in the morning, at dawn, and at night and low values in the late morning and afternoon. The high correlation between the leakage current and relative humidity shows once again what has been studied by other authors such as [25,26,28–30,34], who verify the close relationship between these two variables.

Analyzing the measured leakage current, we observed a clear increase in magnitude that is due to the interaction between the relative humidity and pollution accumulation on the insulator surface after a few days. Although the leakage current increases, the current values in the final hours of the morning and afternoon remain approximately constant at a value close to 0.3 mA. Furthermore, as the insulators become dirty, the interaction with moisture causes the leakage current to increase. When the relative humidity increases, the leakage current is marked and clearly nonlinear.

The leakage current increases when the moisture content is high; therefore, it was possible to develop tendency models of the leakage current with the maximum values. We tested the adjustability of a quadratic regression model and demonstrated a low mean absolute error, a high coefficient of adjusted determination, and a low forecasting error in the validation process. The model presented in this paper fits in the nonlinear behavior of the increasing leakage current measured over different days.

6. Conclusion

The main objective of this work was to develop an electrical insulator leakage current model to detect and predict pollution levels on electrical insulators. This leakage current and environmental variables model was determined by quadratic regression functions. The model linked the behavior of the leakage current to different weather conditions in the area in which testing was done. This model can be used to predict the behavior of insulator pollution by continuously measuring environmental variables.

In future work, we will consider using forecasting models and assessment tools for characterizing insulator pollution and identifying the risks of failure. We will use the model for real-time monitoring to determine high risks of pollution during operation of the power grid. We expect to design a control system for electrical substations that will maintain the leakage current within acceptable values by using a water spray system.

Acknowledgment

The authors would like to thank the Power System Research Group GISEL of the Universidad del Norte - Barranquilla and the Applied Technologies Research Group GITA of the Universidad Nacional de Colombia - Medellín, for their financial support to conduct this research. We also want to thank the company TRANSELCA S.A. E.S.P. for allowing us to carry out research in one of its electrical substations. I want to give special recognition to engineers Hector Santodomingo, Julio Pombo, and Omar Diaz for supporting the whole process of taking measurements and testing, and who also took time off work to support this research with their expertise and knowledge.

References

[1] Gamma. Guía para la limpieza de aisladores según Norma IEEE STD 957-1995. 1995.

[2] Zhou, J., Gao, B., Wang, Q. and Zhang, Q., Leakage current pattern for diagnosing the contaminated degree of ceramic insulators under different humidity. Asia-Pacific Power and Energy Engineering Conference, IEEE, 2009. pp. 1-4. DOI: 10.1109/APPEEC.2009.4918459

[3] Li, J., Sima, W., Sun, C. and Sebo, S., Use of leakage currents of insulators to determine the stage characteristics of the flashover process and contamination level prediction. IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, IEEE. 17 (2), pp. 490-501, 2010. DOI: 10.1109/TDEI.2010.5448105

[4] Gorur, R.S., Shaffner, D. and Wayne, C. Utilities Share Their Insulator Field Experience [Internet]. Transm. Distrib. World, 2005.

[5] Fujimura, T., Okayama, M. and Isozaki, T. Hot-Line Washing of Substation Insulators. IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems, 89 (5), pp. 770-774, 1970. DOI: 10.1109/TPAS.1970.292632

[6] Yasuda, M. and Fujimura, T., A study and development of high water pressure hot-line insulator washing equipment for 500-kV substation.

IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems, 95(6), pp. 1919-1928, 1976. DOI: 10.1109/T-PAS.1976.32293
[7] Cakebread, R.J., Brown, H.J. and Dawkins, R.B., Automatic insulator-washing system to prevent flashover due to pollution. Proceedings of the Institution of Electrical Engineers, 125(12), pp. 1363-1366, 1978. DOI: 10.1049/piee.1978.0289
[8] Oliveira, S.C., Fontana, E. and do Monte de Melo-Cavalcanti, F.J., Real-time monitoring of the leakage current of 230-kV glass-type insulators during washing. IEEE Transactions on Power Delivery, 24(4), pp. 2257-2260, 2009. DOI: 10.1109/TPWRD.2009.2016814
[9] Talebi, M.A., Gholami, A., Shariati, M.R. and Hasanzadeh, M., Technical & economical evaluation of using silicone rubber RTV coating for H.V. substation in polluted area. 18th International Conference and Exhibition on Electricity Distribution (CIRED), IEE, 2005, pp. v1-19-v1-19. DOI: 10.1049/cp:20050895
[10] Hu, Y., The research of the automatic washing-brushing robot of 500 kV DC insulator string. Proceedings of ESMO '93 IEEE 6th International Conference on Transmission and Distribution Construction and Live-Line Maintenance, IEEE, 1993. pp. 411-424. DOI: 10.1109/TDCLLM.1993.316230
[11] Burnham, J.T., Frank, J. and Eby, M.R., High-pressure washing tests on polymer insulators. Proceedings of ESMO'95 - 1995 IEEE 7th International Conference on Transmission and Distribution Construction, Operation and Live-Line Maintenance, IEEE, 1995. pp. 101-106. DOI: 10.1109/TDCLLM.1995.485043
[12] Perin, D., Pigini, A., Visintainer, I. and Ramamoorty, C.M., Live-line insulator washing: experimental investigation to assess safety and efficiency requirements. IEEE Transactions on Power Delivery, 10(1), pp. 518-525, 1995. DOI: 10.1109/61.368359
[13] MacChiaroli, B., Artificial evaluation of the self-washing performance of contaminated insulators. Proceedings of the Institution of Electrical Engineers, 118(9), 1971, 1314 P. DOI: 10.1049/piee.1971.0240
[14] Johnson, J.C., Insulator hot washing with deionized water. IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems, 95(3), pp. 864-869, 1976.
[15] Oliveira, S.C., Fontana, E. and Cavalcanti, F.J.M.M., Real time monitoring of the leakage current of 230 kV insulator strings under washing. IEEE/PES Transmission and Distribution Conference and Exposition, IEEE, 2008. pp. 1-4. DOI: 10.1109/TDC.2008.4517247
[16] Castillo-Sierra, R., Oviedo-Trespalacios, O., Candelo, J.E. and Soto, J.D., Assessment of the risk of failure of high voltage substations due to environmental conditions and pollution on insulators. Environmental Science and Pollution Research, 22(13), pp. 9749-9758, 2015. DOI: 10.1007/s11356-015-4153-z
[17] Castillo-Sierra, R., Oviedo-Trespalacios, O., Candelo, J.E. and Soto, J.D., The influence of atmospheric conditions on the leakage current of ceramic insulators on the Colombian Caribbean coast. Environmental Science and Pollution Research, 22(4), pp. 2526-2536, 2015. DOI: 10.1007/s11356-014-3729-3
[18] Aponte, G., Castro, J.C., Sanchez, V.H., Espinoza, A., Rosales, N. and Castro, M., Contamination level evaluation on Colombian north cost. IEEE Latin America Transactions, 7(2), pp. 190-195, 2009. DOI: 10.1109/TLA.2009.5256828
[19] Diaz, R., Candelo, J.E. and Betancur, J., Software tool to detect hot spots on electrical insulators. 12th International Conference on Environment and Electrical Engineering, IEEE, 2013. pp. 7-12. DOI: 10.1109/EEEIC.2013.6549596
[20] Wu, U.-I., Wang, J.-T., Chang, S.-C., Chuang, Y.-C., Lin, W.-R., Lu, M.-C. et al., Impacts of a mass vaccination campaign against pandemic H1N1 2009 influenza in Taiwan: a time-series regression analysis. International Journal of Infectious Diseases: IJID: Official Publication of the International Society for Infectious Diseases, 23, pp. 82-89, 2014. DOI: 10.1016/j.ijid.2014.02.016
[21] Evrendilek, F. and Karakaya, N., Regression model-based predictions of diel, diurnal and nocturnal dissolved oxygen dynamics after wavelet denoising of noisy time series. Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications, 404, pp. 8-15, 2014. DOI: 10.1016/j.physa.2014.02.062
[22] Behnamian, J. and Fatemi-Ghomi, S.M.T., Development of a PSO-SA hybrid metaheuristic for a new comprehensive regression model to time-series forecasting. Expert Systems with Applications, 37(2), pp. 974-984, 2010. DOI: 10.1016/j.eswa.2009.05.079
[23] Montgomery, D.C., Diseño y análisis de experimentos. 2da Edición. LIMUSA WILEY, 2005.
[24] Montgomery, D.C. and Runger, G.C., Probabilidad y estadística aplicadas a la ingeniería. 2da Edición. MCGRAW-HIL, 2000.
[25] Ahmad, A.S., Ghosh, P.S., Aljunid, S.A.K. and Ahmad, S., Estimation of leakage current level on the transformer bushing using regression technique. Proceedings of the 7th International Conference on Properties and Applications of Dielectric Materials (Cat No03CH37417), IEEE, 2003, pp. 1174-1177. DOI: 10.1109/ICPADM.2003.1218633
[26] Zhao, L., Jiang, J., Duan, S., Fang, C., Wang, J., Wang, K. et al., The prediction of post insulators leakage current from environmental data. 2011 International Conference on Electrical and Control Engineering, IEEE, 2011, pp. 5103-5106. DOI: 10.1109/ICECENG.2011.6057235
[27] Sorqvist, T. and Vlastos, A.E., Hydrophobicity and leakage current statistics of polymeric insulators long-term exposed, to coastal contamination. Conference Record of the 1996 IEEE International Symposium on Electrical Insulation, IEEE, 1996, pp. 335-340. DOI: 10.1109/ELINSL.1996.549350
[28] Guan, Z. and Cui, G., A study on the leakage current along the surface of polluted insulator. 4th International Conference on Properties and Applications of Dielectric Materials (ICPADM), IEEE, 1994, pp. 495-498. DOI: 10.1109/ICPADM.1994.414055
[29] Meyer, L.H., Oliboni, C.R.P., Graziano, G.C., Mustafa, T.I.A.H., Almaguer, H.A.D., Molina, F.H. et al., A study of the correlation of leakage current, humidity and temperature of 25 kV insulators in urban and rural areas. Annual Report Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena, IEEE, 2011, pp. 398-402. DOI: 10.1109/CEIDP.2011.6232679
[30] Yingke, M., Zhicheng, G., Liming, W., Xin, W. and Bo, Y., Frequency characters of leakage current on the surface of outdoor insulators in different relative humidity. IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena, 2006, pp. 692-695. DOI: 10.1109/CEIDP.2006.312026
[31] Aznarte, J.L., Arauzo, A. and Benítez, J.M., Testing for serial independence of the residuals in the framework of Fuzzy rule-based time series modeling. Ninth International Conference on Intelligent Systems Design and Applications, IEEE, 2009, pp. 1383-1387. DOI: 10.1109/ISDA.2009.249
[32] Franses, P.H., Testing for residual autocorrelation in growth curve models. Technological Forecasting and Social Change, 69(2), pp. 195-204, 2002. DOI: 10.1016/S0040-1625(01)00148-2
[33] Davidson, R. and MacKinnon, J.G., Estimation and Inference in Econometrics. OUP Cat. Oxford University Press, 1993.
[34] Sorqvist, T. and Vlastos, A.E., Hydrophobicity and leakage current statistics of polymeric insulators long-term exposed, to coastal contamination. Conference Record of the 1996 IEEE International Symposium on Electrical Insulation, IEEE, Montreal, Quebec, Canada, 1996, pp. 335-340. DOI: 10.1109/ELINSL.1996.549350

R. Castillo-Sierra, received his BSc. in Electrical Engineering in 2012 and MSc. in Electrical Engineering in 2015 from Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia. He is currently a professor at the Universidad del Norte. His research interests include high-voltage insulation and renewable energy.
ORCID: 0000-0002-2648-4096.

O. Oviedo-Trespalacios, received his BSc. in Industrial Engineering in 2012 and MSc. in Industrial Engineering from Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia. He is now a PhD candidate in Queensland University of Technology, Australia. His interests include safety in critical systems, human performance and adaptation, cognitive ergonomics, human-machine interfaces, and population health statistics and modeling.
ORCID: 0000-0001-5916-3996.

J.E. Candelo, received his BSc. in Electrical Engineering in 2002 and his PhD in Engineering with emphasis in Electrical Engineering in 2009 from Universidad del Valle, Cali, Colombia. His employment experience includes the Empresa de Energía del Pacífico EPSA, Universidad del Norte, and Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín. He is now an assistant professor at the Universidad Nacional de Colombia, sede Medellín, Colombia. His research interests include: engineering education; planning,

operation and control of power systems; artificial intelligence; and smart grids.
ORCID: 0000-0002-9784-9494.

J.D. Soto, received his BSc. and MSc. in Electrical Engineering from Georgian Technical University. He is currently a professor at the Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia. He is with the Power System Research Group GISEL, the Engineering Division, and the Electrical and Electronics Department of Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia. His interests include academic administration, energy efficiency, renewable energy, and influence of environmental variables in the operation of electrical systems.
ORCID: 0000-0002-1143-7844.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS

Área Curricular de Ingeniería
Eléctrica e Ingeniería de Control

Oferta de Posgrados

Maestría en Ingeniería - Ingeniería Eléctrica

Mayor información:

E-mail: ingelcontro_med@unal.edu.co
Teléfono: (57-4) 425 52 64

Entregando
lo mejor de los
colombianos

Línea de atención al Cliente Nacional: **01 8000 111 210**
Línea de atención al Cliente Bogotá: **(57-1) 472 2000**
www.4-72.com.co

DYNA
85 (204), March, 2018
is an edition consisting of 150 printed issues
which was finished printing in the month of March of 2018
in Todograficas Ltda. Medellín - Colombia

The cover was printed on Propalcote C1S 250 g,
the interior pages on Propal Beige 90 g.
The fonts used are Times New Roman, Imprint MT Shadow

- Development of a virtual earthquake engineering lab and its impact on education
- Evaluation of different methods for efficient extraction of hemicelluloses leaves and tops of sugarcane
- A new approach to multispectral image classification based on abstract complex cells
- Performance of drip emitters for different pressures and application of cashew nuts wastewater
- Analysis of pressure and pressure derivative interference tests under linear and spherical flow conditions
- Comparative study of fire resistance and acoustic performance of ceramic brick walls in concern to NBR 15575 in residential buildings in Brazil
- Gaussian processes in ball bearing prognostics
- Sway reduction in tower-cranes through discrete-time resonant active disturbance rejection control
- Study of the plasma behavior produced by a vacuum arc discharge for different cathode materials
- Evaluation of post-graduate programs using a network data envelopment analysis model
- Position analysis of a mechanism Stephenson type I using natural coordinates
- Calculation method for the determination of stresses in right-wing flywheels
- DNA fragment assembling using a novel GPU firefly algorithm
- Evaluation of spectral similarity indices in unsupervised change detection approaches
- Glulam beams reinforced with punched metal plates
- Efficiency of cement-admixture systems in mortars with binary and ternary Portland cements
- Thermal analysis and mass spectrometry in protonic conductors (PVDF/H3PO2) for implementation in fuel cells
- LTA and FAU zeolites from coal combustion and residue by-products for Chromium removal application
- Fast estimation of earthquake epicenter distance using a single seismological station with machine learning techniques
- CFD simulation of sugarcane bagasse combustion in an industrial grate boiler
- Dynamic consumption representation of electric vehicles based on battery capacity
- Development of a fortified drink from the mixture of small colombian native fruits
- Construction of index with artificial intelligence to evaluate vulnerability to climate change in Andean tropical micro-watersheds. Study case in Colombia
- Water quality modeling of the Aguas Claras stream, canton Quevedo, Ecuador
- Adoption's problems of information technology service management models. A systematic literature review
- Enzymatic modification of cassava starch (Corpoica M-Tai) around the pasting temperature
- Study of different routes of renewable synthesis for Caprolactam production
- Sensitivity analysis of engine warm-up performance at idle conditions to the changes in compression ratio, ethanol content in gasoline fuel and cylinder head material
- Evaluation of coupled porewater pressure and stress-strain constitutive model in granular soils
- A GIS approach based on user location to evaluate a bike-sharing program
- Swash excursion patterns at two contrasting beaches: Hollywood and Costa Verde beach, Colombia
- Viability of probiotic bacteria Bacillus Polymyxa, Bacillus Megaterium and Lactobacillus Delbruekii subsp. bulgaricus microencapsulated under the spray-drying technique
- Production of bioabsorbible nanoparticles of polycaprolactone by using a tubular recirculating system
- Hydrothermal synthesis of hydroxyapatite nanorods using a fruit extract template
- Evaluation of management models of rural projects of drinking water and basic sanitation implemented in the llanos de Colombia
- Direct stockpile scheduling: Mathematical formulation
- Effect of the addition of hydrocolloids and aloe vera gel (Aloe barbadensis Miller) on the rheological properties of a beverage of sweet corn (Zea mays var. saccharata)
- M2M system for efficient water consumption in sanitary services, based on intelligent environment
- Connectivity to the Internet in rural areas using DTT (DVB-RCT2) technologies, or mobile telephony (4G-LTE)
- Mobile learning on higher educational institutions: how to encourage it?. Simulation approach
- Maps of Intrinsic Cost (IC) in reliability problems of medium voltage power distribution systems through a Fuzzy multi-objective model
- Conservation of "Paluma" guavas coated with cassava starch and pectin
- Methodology to support decision-making in prioritization improvement plans aimed at agricultural sector: Case study
- Modeling Leakage Current of Ceramic Insulators Subject to High Pollution Levels for Improving Maintenance Activities
- Development of an information system for teleoperated physical rehab care service via internet. Pilot case: patients with mild knee injury who live in geographically vulnerable zones

- Desarrollo de un laboratorio virtual de ingeniería sísmica y su impacto en la educación
- Evaluación de diferentes métodos para la extracción eficiente de hemicelulosas de las hojas y cogollos de la caña de azúcar
- Un nuevo enfoque para la clasificación de imágenes multiespectrales basado en complejos cartesianos
- Desempeño de goteros para diferentes presiones y aplicación de agua residual de castaña de cajú
- Análisis de presión y derivada de presión en pruebas de interferencia en condiciones de flujos lineal y esférico
- Estudio comparativo de resistencia al fuego y desempeño acústico de paredes en bloques cerámicos en cuestión de NBR 15575 en edificios residenciales de Brasil
- Procesos gaussianos en el pronóstico de vida útil en rodamientos de bolas
- Atenuación de efectos pendulares en grúas-torre usando control por rechazo activo de perturbaciones en tiempo discreto con observador resonante
- Estudio del comportamiento del plasma producido en una descarga de arco en vacío para diferentes materiales del cátodo
- Evaluación de los programas de post-grado usando un modelo de análisis envolvente de datos en red
- Análisis de posición de un mecanismo de Stephenson tipo I utilizando coordenadas naturales
- Método de cálculo para la determinación de las tensiones en volantes de rayos rectos
- Ensamblado de fragmentos de ADN utilizando un novedoso algoritmo de luciérnaga en GPU
- Evaluación de índices de similitud espectral en esquemas de detección de cambios no supervisados
- Vigas de madera laminada Glulam reforzadas con pletinas metálicas dentadas
- Eficiencia de sistemas cemento-aditivo en morteros con cementos Portland binarios y ternarios
- Análisis térmico y espectrometría de masas en conductores protónicos (PVDF/H3PO2) para implementación en celdas de combustible
- Zeolitas LTA y FAU obtenidas a partir de cenizas volantes y su aplicación en remoción de Cromo
- Estimación rápida de la distancia epicentral de un terremoto utilizando registros de una sola estación sismológica, mediante técnicas de aprendizaje de máquinas
- Simulación en CFD de la combustión de bagazo de caña en una caldera industrial con parrilla
- Representación del consumo dinámico de los vehículos eléctricos en función de las capacidades de las baterías
- Desarrollo de un refresco fortificado con hierro a partir de la mezcla de frutas pequeñas nativas colombianas
- Construcción de índice con inteligencia artificial para evaluar vulnerabilidad al cambio climático en microcuencas andinas tropicales. Caso de estudio en Colombia
- Modelización de la calidad del agua del estero aguas Claras, cantón Quevedo, Ecuador
- Problemas en la adopción de modelos de gestión de servicios de tecnologías de información. Una revisión sistemática de la literatura
- Modificación enzimática de almidón de yuca (Corpoica M-Tai) alrededor de la temperatura de pasta
- Estudio de las diferentes rutas de síntesis renovables para la producción de Caprolactama
- Estudio de sensibilidad del desempeño durante el calentamiento en vacío de un motor de combustión interna a cambios en su relación de compresión, el contenido de etanol en la mezcla combustible con gasolina y el material de la culata
- Evaluación de modelos constitutivos esfuerzo-deformación acoplados con presión de poros en suelos granulares
- Aproximación GIS para la evaluación de programa para compartir bicicleta basado en la localización de los usuarios
- Patrones en las excursiones de swash en dos playas contrastantes: Playas Hollywood y Costa Verde, Colombia
- Viabilidad de las bacterias probióticas Bacillus polymyxa, Bacillus megaterium y Lactobacillus delbruekii subsp. bulgaricus microencapsuladas bajo la técnica de secado por aspersión
- Producción de nanopartículas bioabsorbibles de policaprolactona empleando un sistema de recirculación tubular
- Síntesis hidrotermal de nanobarras de hidroxiapatita usando plantillas de extractos de fruta
- Evaluación de los modelos de gestión de proyectos rurales de agua potable y saneamiento básico implementados en los llanos de Colombia
- Programación directa de pilas de acopio: Formulación matemática
- Efecto de la adición de hidrocoloides y gel de aloe vera (Aloe barbadensis Miller) en las propiedades reológicas de una bebida de maíz dulce (Zea mays var. saccharata)
- Sistema M2M para el consumo eficiente de agua en servicios sanitarios, basado en ambientes inteligentes
- Conectividad a Internet en zonas rurales mediante tecnologías de TDT (DVB-RCT2), o telefonía móvil (4G-LTE)
- Mobile learning en instituciones de educación superior: ¿cómo abordarlo? Una aproximación desde la simulación
- Mapas de Costo Intrínseco (IC) en problemas de confiabilidad de sistemas de distribución de potencia en media tensión a través de un modelo difuso multiobjetivo
- Conservación de las guayabas "Paluma" recubiertas con almidón de yuca y pectina
- Metodología para soportar el proceso de toma de decisiones en la priorización de planes de mejora en el sector agrícola: Caso de estudio
- Modelo de Corriente de Fuga de Aisladores Cerámicos Sometidos a Altos Niveles de Polución para Mejorar las Actividades de Mantenimiento
- Desarrollo de un sistema de información para el servicio de atención tele-operado de rehabilitación física, vía internet. Caso piloto: Pacientes con lesiones leves de rodilla que viven en zonas de vulnerabilidad geográfica

DYNA
Publication admitted to the
Sistema Nacional de Indexación y Homologación de
Revistas Especializadas CT+I - PUBLINDEX, Category A1

Red Colombiana de Revistas de Ingeniería

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS