

Aplicación de un software de videojuegos al análisis de porosidad de lechos empacados de arroz

Rafael Alejandro Ángel-Cuapio, María Isabel Neria-González, Yoyce Tania Obando-Galicia y Gastón Martínez-de Jesús *

División de Ingeniería Química y Bioquímica, Tecnológico Nacional de México/ TES de Ecatepec, Av. Tecnológico S/N, Colonia. Valle de Anáhuac, Ecatepec de Morelos, Estado de México. C. P. 55210. México.

* Autor de correspondencia: gmartinezj@tese.edu.mx.

Artículo de divulgación científica

Recibido: 27 de septiembre de 2024

Aceptado: 24 de octubre de 2024

Publicado: 20 de noviembre de 2024

DOI: <https://doi.org/10.56845/terys.v3i1.230>

Resumen: Los lechos empacados son fundamentales en diversas aplicaciones químicas (secado, catálisis, filtración y flujo en medios porosos) y en aplicaciones biotecnológicas como la fermentación en medio sólido. Sin embargo, presentan desafíos como la canalización, y transferencia de masa y calor limitada. La porosidad es un parámetro clave que influye en su eficiencia. Su medición experimental puede ser compleja y costosa. Por esta razón, las simulaciones de cuerpo rígido, muy utilizadas en la creación de videojuegos y animaciones, ofrecen una alternativa eficiente para determinarla localmente. En este estudio, se utilizó el software Blender para generar lechos empacados de granos de arroz. Posteriormente, se calculó la porosidad en diferentes regiones de los lechos, obteniendo sus perfiles de porosidad. Los resultados muestran la capacidad de Blender para proporcionar información detallada sobre la estructura interna de los lechos empacados. Esta herramienta puede ser útil para optimizar el diseño de procesos industriales y biotecnológicos que involucren lechos empacados, así como para comprender mejor los fenómenos de transporte y reacción que ocurren en estos sistemas.

Palabras clave: Lechos empacados, Blender, porosidad, simulaciones de cuerpo rígido.

Introducción

Los lechos empacados son sistemas ampliamente utilizados en la ingeniería para procesos de separación y reacción. Consisten en columnas llenas de materiales sólidos, que proporcionan una superficie extensa para el contacto entre fases, como líquidos y gases. Su importancia radica en su capacidad para mejorar la eficiencia de diversos procesos industriales, como la destilación, absorción, adsorción y catálisis (Hernandez-Aguirre *et al.*, 2022). En biotecnología, los lechos empacados juegan un papel crucial en procesos como la purificación de productos biológicos, la fermentación y la inmovilización de células o enzimas (Pessoa *et al.*, 2019). Estos sistemas permiten un contacto eficiente entre las biomoléculas y los reactivos, facilitando la separación y recuperación de proteínas, anticuerpos y otros compuestos de alto valor. Sin embargo, los lechos empacados presentan varias limitaciones que pueden afectar negativamente su rendimiento.

La distribución desigual del material de empaque dentro del lecho puede generar canalización, donde el fluido fluye preferentemente por ciertos caminos, dejando grandes áreas del empaque inactivas (Mitchell *et al.*, 2023). Esto reduce la eficiencia del contacto entre fases y puede disminuir significativamente la efectividad de los procesos. La transferencia de masa entre las fases (como gas-líquido o líquido-sólido) puede estar limitada por la difusión dentro de los poros de los empaques y entre los espacios del lecho. Los materiales de los empaques generalmente tienen baja conductividad térmica, lo que dificulta la transferencia de calor. Esto puede generar gradientes de temperatura internos, provocando puntos calientes o fríos que afectan la uniformidad del proceso y la estabilidad de las reacciones químicas (Hernandez-Aguirre *et al.*, 2022). En procesos catalíticos o reactores donde se generan reacciones exotérmicas, el calor producido puede no disiparse adecuadamente debido a las limitaciones del lecho. Esta acumulación de calor puede llevar a temperaturas locales elevadas, afectando negativamente la selectividad de las reacciones y, en casos extremos, dañando el empaque o el catalizador. Estas limitaciones en la transferencia de masa y calor requieren diseños optimizados del lecho, selección de empaques adecuados y el uso de estrategias de operación que minimicen los efectos negativos, como el uso de empaques con mejor conductividad térmica, la implementación de mezcladores o distribuidores de flujo, y el control preciso de las condiciones operativas.

Uno de los parámetros más importantes que caracterizan a los lechos empacados es la porosidad, definida como la relación entre el volumen de los espacios vacíos y el volumen total del lecho. Determinar la porosidad es crucial para optimizar el diseño y la operación de estos sistemas. Además, la porosidad está relacionada con el área expuesta para

la interacción del material poroso y el fluido de proceso, es decir, el área superficial disponible. Un reactor empacado con partículas pequeñas tendrá gran área superficial y puesto que las partículas llenarán mejor los espacios, la porosidad disminuirá. Por el contrario, un reactor con partículas más grandes tendrá menor área superficial y una mayor porosidad. La elección entre ambos casos dependerá de las prioridades: en el primer caso, se favorecerán los fenómenos de transferencia de masa y las reacciones químicas, pero con mayor resistencia y mayores pérdidas de presión. En el segundo caso, se mejorará la circulación del fluido y se reducirán las pérdidas de presión.

Para determinar experimentalmente la porosidad se utilizan fluidos que llenan los espacios vacíos del lecho empacado, bajo la condición que el fluido no sea humectante. También se puede utilizar microscopía para obtener una imagen de la muestra y mediante un software especializado se cuantifica el área de los poros y se calcula la porosidad (Flaishlen & Wehinger, 2019). Algunos inconvenientes de estos métodos es que pueden ser destructivos y de un alto costo económico. Además, si la muestra presenta una alta heterogeneidad, los resultados obtenidos pueden no ser representativos de todo el material. Los lechos empacados presentan una distribución compleja de partículas y un comportamiento interno que es difícil de observar y medir directamente.

En videojuegos y animaciones cinematográficas es muy común encontrar escenas muy realistas de objetos que ruedan por una rampa, que colisionan, rebotan, caen por efecto de la gravedad, edificios que se derrumban o explotan, entre otras. Este tipo de escenarios se pueden generar mediante las denominadas simulaciones de cuerpo rígido. El realismo alcanzado en ellas se debe a que resultan de la aplicación de los principios físicos derivados de las leyes del movimiento de Newton. Al considerar a los objetos como partículas sólidas, se desprecian los efectos de la deformación, se simplifican los cálculos y se reduce el tiempo de simulación. Así, con la utilización de este enfoque y mediante un software especializado se puede reproducir el llenado y la interacción que tendrían las partículas mientras se acomodan en un recipiente, alcanzando su estado de reposo. De esta manera, se cuenta con una herramienta para emular el proceso que permitiría la generación de un el lecho empacado para su posterior análisis.

Existe una amplia variedad de software que incluyen herramientas para reproducir la generación de lechos empacados como: Blender, ANSYS® Mechanical, Comsol Multiphysic®, Autodesk® Maya®, Simulink®, entre otros. No obstante, Blender 4.0 (software de código abierto, creado y mantenido por una comunidad internacional de desarrolladores), cuenta con una interfaz intuitiva, que a diferencia de los otros tiene una curva de aprendizaje relativamente suave y la amplia gama de herramientas que ofrece permite realizar simulaciones de alta calidad sin tener que invertir en software comercial (Flaishlen & Wehinger, 2019). Blender, también es ampliamente utilizado para modelado y animación 3D, ofrece potentes herramientas para la simulación de cuerpos rígidos, lo que lo hace una opción atractiva para el estudio y optimización de sistemas complejos como los lechos empacados. A través de su motor de simulación física, Blender permite crear simulaciones detalladas y visualmente precisas de cómo interactúan y se comportan los objetos rígidos en un entorno controlado (Boccardo *et al.*, 2014).

Si bien, la utilización de simulaciones de cuerpo rígido para la generación de lechos empacados no es nuevo, la mayoría de estos estudios se relaciona con aplicaciones enfocadas a procesos de catálisis química (Boccardo *et al.*, 2015; Flaishlen & Wehinger, 2019; Hernandez-Aguirre *et al.*, 2022) o para procesos de filtración (Li *et al.*, 2022). Por otro lado, la fermentación en medio sólido es una técnica biotecnológica que se utiliza para producir alimentos fermentados, ácidos orgánicos, enzimas, esporas de hongos utilizados como agentes de control biológico de plagas agrícolas, entre otras. En esta técnica se utiliza un lecho empacado formado por sustratos agrícolas (arroz, trigo, cebada, maíz, etc.), o desechos agroindustriales (bagazos de caña, café, cáscara de tuna, entre otros) (Pandey, 2003; Pessoa *et al.*, 2019) para el crecimiento de microorganismos que serán los responsables de la transformación del sustrato en los productos de interés. Hasta el mejor conocimiento de los autores, no existen trabajos previos enfocados a determinar la estructura interna de lechos empacados empleados con sustratos en procesos de fermentación en medio sólido. Comúnmente la caracterización se limita a una determinación global de la porosidad (Perpétua *et al.*, 2014), sin embargo, esta no es suficiente, pues fenómenos de canalización preferencial y efectos de pared se presentan debido a la heterogeneidad local de los sustratos (Mitchell *et al.*, 2023). El objetivo de este trabajo es ilustrar el empleo del software Blender para el análisis de la estructura interna, en términos de la porosidad, de un lecho empacado. Se toma como casos de estudio dos lechos empacados formado por granos de arroz, sustrato muy utilizado en fermentación en medio sólido. Las características geométricas clave que describen la geometría del arroz fueron tomadas de Meera *et al.* (2019) y utilizadas para reproducir la geometría de los granos de arroz.

Desarrollo

Metodología

Se empleó Blender 4.0 para generar y analizar la porosidad de un lecho empacado de granos de arroz. Un grano de arroz tiene forma fusiforme y puede ser caracterizado mediante su longitud ($L=7$ mm), su anchura ($W=2$ mm) y su espesor ($T=1.4$ mm). Por ello, el dibujo CAD de un grano de arroz fue generado con esas características geométricas. Para simular su comportamiento físico de manera realista, a la partícula se le asignaron propiedades de cuerpo rígido. Se ejecutaron dos simulaciones de cuerpo rígido, con un mil y dos mil granos de arroz, por lo que los granos se replicaron en esas cantidades. Las copias fueron colocadas a una altura inicial adecuada, de tal manera que al caer dentro de un recipiente de 50.8 mm de diámetro y 50 mm de altura se formara el lecho empacado. Se ejecutaron las simulaciones, permitiendo que las partículas cayeran debido a la gravedad y posteriormente surgieran las fuerzas de contacto y fricción debidas a las colisiones entre las partículas, hasta que finalmente alcanzaron su posición de reposo. En la Figura 1 se pueden ver diferentes etapas de la evolución de la simulación de cuerpo rígido. Los lechos generados de esta manera alcanzaron alturas de 13 y 26 mm de altura.

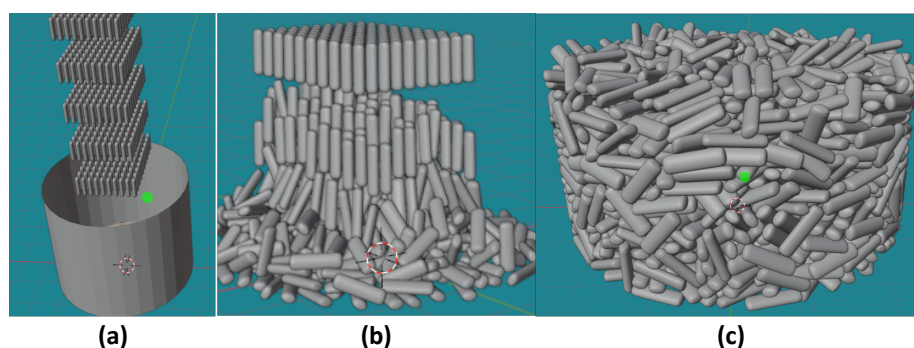


Figura 1. Diferentes etapas de la evolución de la simulación de cuerpo rígido hasta llegar a la formación del lecho empacado. a) Al inicio de la simulación de cuerpo rígido, b) cuando las partículas tocan la base del recipiente y chocan entre ellas y c) acomodo final de las partículas.

Para determinar la porosidad del lecho empacado, se utilizó el complemento BoxCutter. Esta herramienta permite generar regiones anulares. Para los radios entre 0 y 24 mm las regiones anulares tuvieron un espesor de 1 mm y para radios mayores o iguales que 24.5 mm (regiones cercanas a la pared) se utilizó un espesor de 0.5 mm; la Figura 2 muestra algunas de las regiones anulares generadas. Posteriormente, se empleó el complemento 3D-print para calcular el volumen ocupado por los trozos de partículas en cada región anular. Restando este volumen del volumen total de la región, se obtuvo el volumen de los espacios vacíos. Finalmente, se calculó la porosidad de cada región anular dividiendo el volumen vacío entre el volumen total de la región.

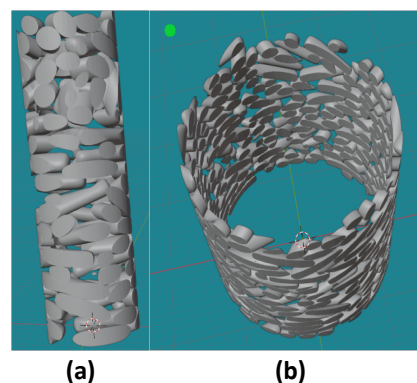


Figura 2. Dos regiones anulares utilizadas para el cálculo de la porosidad a) $r=4$ mm y b) $r=12$ mm

Resultados y discusiones

A partir del análisis de los espacios en las regiones anulares definidas se obtuvo la variación de la porosidad como una función de la distancia radial a la pared del recipiente, la Figura 3 resume estos resultados. Para los dos lechos generados, en las regiones cercanas a la pared la porosidad es significativamente alta y decrece rápidamente a poca distancia de la pared (menos de 1 mm). Cualitativamente, los resultados en la cercanía de la pared son similares a los reportados en otros trabajos para esferas (Boccardo *et al.*, 2015; Fleischlen & Wehinger, 2019; Hernandez-Aguirre *et al.*, 2022) cilindros y trilóbulos (un aglomerado de tres cilindros) (Boccardo *et al.*, 2015). En el trabajo de Boccardo *et al.*, (2015), también se presentan los datos experimentalmente de los perfiles de porosidad radial para un lecho

empacado de esferas y otro de cilindros y los compararon con los perfiles de lechos empacados obtenidos a partir de simulaciones de cuerpo rígido. Reportan una concordancia satisfactoria de los resultados obtenidos por ambos procedimientos, con lo cual validan la técnica de simulación empleada, que cabe destacar, es similar a la utilizada en este trabajo. Los dos perfiles de porosidad mostrados en la Figura 3, aunque no son iguales, en general tienen la misma tendencia, subidas y bajadas alteradas entre 0.4 y 0.5. Estas discrepancias pueden deberse a que la interacción entre los granos de arroz produce un acomodo aleatorio de las partículas en el lecho final y por lo tanto a variaciones locales entre los lechos.

Por otro lado, en análisis previos realizados en nuestro equipo de trabajo se encontró que la porosidad global de muestras de arroz fue de entre 0.38 y 0.43. La cual fue medida con un picnómetro de 25 ml y mediante el método de fluido desplazante. Otros resultados de porosidad global reportados en la literatura son 0.5 (Cenkowski & Jayas, 2006) y de entre 0.38 y 0.5 para diversas variedades de arroz (Meera *et al.*, 2019). Mientras el promedio calculado a partir de los puntos de incluidos en la Figura 3 es de 0.47, el cual es comparable a los reportados en la literatura.

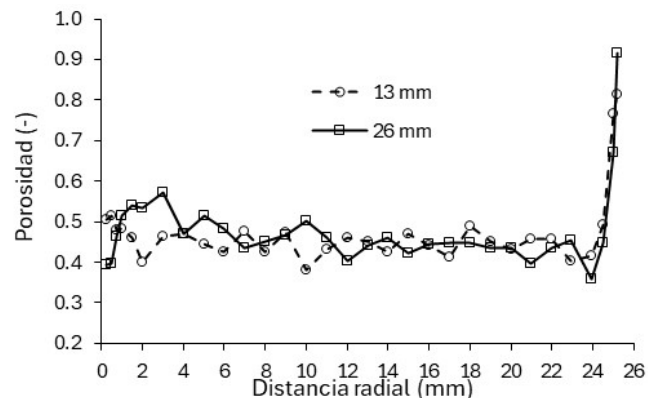


Figura 3. Variación de la porosidad en diferentes distancias radiales

Tendencias

Las estrategias para incrementar la eficiencia de los procesos que ocurren en lechos empacados se enfocan en mejorar los mecanismos de transferencia de momento, calor y masa. En este contexto, la porosidad y la estructura interna del lecho son solo unos de los aspectos a considerar. El siguiente aspecto relevante es determinar la interacción de la superficie expuesta del lecho con el fluido de proceso, este aspecto pertenece a la dinámica de fluidos. Debido a la complejidad de la estructura interna del lecho, estos estudios deben apoyarse de la técnica de dinámica de fluidos computacional. En la literatura reciente pueden encontrarse estudios que se utilizan el enfoque híbrido, simulaciones de cuerpo rígido en combinación con dinámica de fluidos computacional. Estos se han aplicado a lechos empacados formados con geometrías relativamente simples como esferas, cilindros, anillos, entre otros, las cuales son comúnmente utilizadas en el área catálisis química. Durante estos estudios hidrodinámicos un aspecto de interés es la relación del diámetro del recipiente entre el diámetro de las partículas, así en el estudio de Hernandez-Aguirre *et al.* (2022) esta relación tomó un valor de 3.048. Evaluaciones con otras relaciones son de interés y se deberían llevarse a cabo.

Si bien los perfiles de porosidad obtenidos en lechos empacados generados a partir de simulaciones de cuerpo rígido han mostrado buena concordancia con datos experimentales, estos corresponden a lechos con geometrías simples, por lo que aún falta generar datos experimentales para geometrías más complejas. Además, las simulaciones de cuerpo rígido no consideran las fuerzas de deformación y amortiguamiento y esto puede violar la ley de conservación del momento lineal y angular, así como la energía (Flaischlen & Wehinger, 2019) impidiendo la generación de lechos empacados más realistas. Por lo que la incorporación de estos efectos es algo que debería estudiarse.

En cuanto a las tendencias en aplicaciones de fermentación en medio sólido, desde luego se incluye la necesidad de maximizar la transferencia de momento, calor y masa. Y están bien documentados los problemas operacionales causados por la alta porosidad cerca de las paredes, la formación de canales que favorecen el flujo del fluido, y por tanto una mala distribución de este. También se requiere ejecutar estudios para caracterizar la porosidad local a un mayor número de sustratos. Además, estos sistemas biológicos cambiarán las características geométricas del sustrato por lo que este aspecto y a la fecha no hay estudios que aborden este aspecto (Mitchell *et al.*, 2023).

Conclusiones

Blender constituye una herramienta poderosa, versátil y accesible para el estudio de la estructura local de lechos empacados. Pues entre otras ventajas, se reducen los costos asociados a la experimentación. En comparación con los

métodos experimentales tradicionales, la metodología empleada en el presente estudio ofrece ventajas para analizar lechos empacados, proporcionando información detallada de su estructura interna. En este trabajo se evaluó la variación local de la porosidad para un lecho formado por granos de arroz. Este parámetro es muy importante ya que influye sobre los procesos de transferencia que pueden llevarse a cabo en el interior del lecho. Hasta donde se puede consultar en la literatura esa información no está disponible para los lechos empacados de arroz. Además, estas herramientas pueden utilizarse para el estudio de otros sustratos agrícolas. La literatura revisada aporta elementos que permiten validar experimentalmente la técnica utilizada. La porosidad promediada de las diferentes regiones analizadas es consistente con los resultados obtenidos experimentalmente para valores globales y con aquellos reportados en la literatura.

Bibliografía

- Boccardo, G., Augier, F., Haroun, Y., Ferré, D., & Marchisio, D. L. (2015). Validation of a novel open-source work-flow for the simulation of packed-bed reactors. *Chemical Engineering Journal*, 279, 809-820–820. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2015.05.032>.
- Boccardo, G., Di Torino, P., & Plato, L. Del. (2014). *PORE-SCALE SIMULATION OF FLUID FLOW IN PACKED-BED REACTORS VIA RIGID-BODY SIMULATIONS AND CFD*. <https://www.researchgate.net/publication/264897796>.
- Cenkowski, S., & Jayas, D. (2006). Grain Property Values and Their Measurement. In *Handbook of Industrial Drying, Third Edition*. CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9781420017618.ch24>.
- Flaischlen, S., & Wehinger, G. D. (2019). Synthetic packed-bed generation for CFD simulations: Blender vs. STAR-CCM+. *ChemEngineering*, 3(2), 1–22. <https://doi.org/10.3390/chemengineering3020052>.
- Hernandez-Aguirre, A., Hernandez-Martinez, E., López-Isunza, F., & Castillo, C. O. (2022). Framing a novel approach for pseudo continuous modeling using Direct Numerical Simulations (DNS): Fluid dynamics in a packed bed reactor. *Chemical Engineering Journal*, 429. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.132061>.
- Li, B., Zhang, H., Saranteas, K., & Henson, M. A. (2022). A rigid body dynamics model to predict the combined effects of particle size and shape on pressure filtration. *Separation and Purification Technology*, 278(December 2020), 119462. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.119462>.
- Meera, K., Smita, M., & Haripriya, S. (2019). Varietal distinctness in physical and engineering properties of paddy and brown rice from southern India. *Journal of Food Science and Technology*, 56(3), 1473–1483. <https://doi.org/10.1007/s13197-019-03631-x>.
- Mitchell, D. A., Ruiz, H. A., & Krieger, N. (2023). A Critical Evaluation of Recent Studies on Packed-Bed Bioreactors for Solid-State Fermentation. *Processes*, 11(3), 872. <https://doi.org/10.3390/pr11030872>.
- Pandey, A. (2003). Solid-state fermentation. *Biochemical Engineering Journal*, 13, 81–84.
- Perpétua, F., Lúcia, C., Roberto, S., Aparecida, P., & Cláudio, J. (2014). *Structural properties of beds packed with agro-industrial solid by-products applicable for solid-state fermentation: Experimental data and effects on process performance*. 255, 214–224. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2014.06.040>.
- Pessoa, D. R., Finkler Jung, T. A., Lopes Machado, A. V., Mitchell, D. A., & de Lima Luz, L. F. (2019). CFD simulation of a packed-bed solid-state fermentation bioreactor. *Applied Mathematical Modelling*, 70, 439–458. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2019.01.032>.