



PERSPECTIVAS DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA

13

ISSN: 2683-3107



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE QUERÉTARO
FACULTAD DE INGENIERÍA

VOLUMEN 7, NÚMERO 13

JULIO - DICIEMBRE 2024

DIRECTORIO



Dra. Silvia Amaya Llano

RECTORA

Dra. Olivia Solís Hernández

SECRETARIA ACADÉMICA

Dr. Manuel Toledano Ayala

SECRETARIO DE INVESTIGACIÓN, INNOVACIÓN Y POSGRADO

Lic. Diana Rodríguez Sánchez

DIRECTORA DEL FONDO EDITORIAL UNIVERSITARIO

Dra. María de la Luz Pérez Rea

DIRECTORA DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA

Dr. Juan Carlos Jáuregui Correa

JEFE DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA

Mtro. Jorge Javier Cruz Florín

COORDINADOR DEL DESPACHO DE PUBLICACIONES DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA



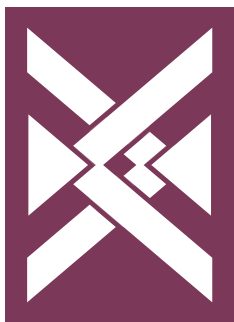
Perspectivas de la Ciencia y la Tecnología, Vol. 7, Núm. 13, julio-diciembre 2024, es una publicación semestral editada por la Universidad Autónoma de Querétaro, Cerro de las Campanas, s/n, Col. Las Campanas, Querétaro, Qro., C.P. 76010, Tel. (442)1921200 ext. 6023, <http://revistas.uaq.mx/index.php/perspectivas>, perspectivasci@uaq.mx. Editores responsables: Stephanie Virginia Camacho Gutiérrez, Christopher Alexis Cedillo Jiménez. Reserva de Derechos al Uso Exclusivo No. 04-2021-81011485000-102, ISSN: 2683-3107, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsable de la última actualización de este Número: Christopher Alexis Cedillo Jiménez, Cerro de las Campanas s/n, Col. Las Campanas, Querétaro, Qro., C.P. 76010. Fecha de última modificación: 31 de julio de 2024.

Las opiniones expresadas por los autores no necesariamente reflejan la postura del editor de la publicación. Se autoriza la reproducción total o parcial del contenido, siempre y cuando se atribuya la fuente y se proporcione un enlace al original. Esta obra está bajo Licencia Creative Commons Reconocimiento-No Comercial-CompartirIgual 4.0 Internacional (CC BY-NC-SA 4.0).

Esta revista está actualmente registrada en el Directorio de Latindex. Los trabajos publicados pasaron por un proceso de revisión entre pares doble ciego.



latindex



PERSPECTIVAS DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA



COMITÉ EDITORIAL

Dr. Juan Carlos Jáuregui Correa

Universidad Autónoma de Querétaro, México

DIRECTOR

Dr. Christopher Alexis Cedillo Jiménez

Universidad Autónoma de Querétaro, México

Dra. Stephanie Virginia Camacho Gutiérrez

Investigadora independiente, Estados Unidos

EDITORES RESPONSABLES

COMITÉ ASESOR CIENTÍFICO

Dr. Manuel Toledano Ayala

Universidad Autónoma de Querétaro, México

ÁREA: SISTEMAS EMBEBIDOS

Dra. Marcela Vargas Hernández

Universidad Autónoma de Querétaro, México

ÁREA: BIOSISTEMAS Y BIOTECNOLOGÍA AGRÍCOLA

Dra. Mónica Ledesma Motolinía

Universidad Autónoma de Puebla, México

ÁREA: FÍSICA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Dra. Angélica Godínez Oviedo

Universidad Autónoma de Querétaro, México

ÁREA: MICROBIOLOGÍA E INOCUIDAD ALIMENTARIA

Dr. Saúl Tovar Arriaga

Universidad Autónoma de Querétaro, México

ÁREA: INTELIGENCIA ARTIFICIAL

The logo consists of the letters 'F1' in a bold, white, sans-serif font. The '1' is positioned to the right of the 'F' and is slightly smaller in height. The background is a solid dark purple color.

EQUIPO EDITORIAL

Lic. Mariana Cano León

Amaury Lagunas Corona

Universidad Autónoma de Querétaro, México

DISEÑO EDITORIAL

Sarahí Velasco Hernández

Universidad Autónoma de Querétaro, México

DISEÑO DE PORTADAS

Ing. Soid Ruiz Ramírez

Universidad Autónoma de Querétaro, México

Andrea Cristina Garza Sandoval

Universidad Autónoma de Querétaro, México

Julia Valeria Chávez Aguado

Universidad Autónoma de Querétaro, México

Miriam Hernández Ramírez

Universidad Autónoma de Querétaro, México

Mariana González Montiel

Universidad Autónoma de Querétaro, México

CORRECCIÓN DE ESTILO

Natalia Margarita Rendón Caballero


Universidad Autónoma de Querétaro, México

AUXILIAR DEL PROCESO EDITORIAL

The logo consists of the letters 'F1' in a bold, white, sans-serif font. The '1' is positioned to the right of the 'F' and is slightly smaller in height. The logo is set against a dark maroon background that occupies the right side of the page.



CONTENIDO

- 8** **A REVIEW ON THE LIFE CYCLE ASSESSMENT OF BIODIESEL PRODUCTION FROM WASTE FEEDSTOCKS**
Angelica Avila Anguis
Valeria Caltzontzin Rabell
Sergio Iván Martínez Guido
Claudia Gutiérrez Antonio
- 26** **UNA REVISIÓN SOBRE EL PAPEL DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL EN EL ANÁLISIS DE LA DISPERSIÓN DE GASES TÓXICOS EN PLANTAS QUÍMICAS**
Efraín Quiroz Pérez
Julio Armando de Lira Flores
- 62** **EFFECTO DE LA MIGRACIÓN EN LA AUTOEFICACIA DE ESTUDIANTES LATINOAMERICANOS CON EVIDENCIA EN PISA 2018**
Carolina Anguiano Almejo
Eric Leonardo Huerta Manzanilla
- 73** **CONFIGURACIÓN ÓPTIMA DE LA RED DE PRODUCCIÓN SOSTENIBLE DE BIODIÉSEL A PARTIR DE ACEITE DE BSFL**
Dulce María Aguilar Murguía
Claudia Gutiérrez Antonio
Óscar Daniel Lara Montaña
Sergio Iván Martínez Guido
- 89** **CARACTERÍSTICAS ANATÓMICAS DE LA LARVA DE MOSCA SOLDADO NEGRO (HERMETIA ILLUCENS) ALIMENTADA CON RESIDUOS DE JITOMATE**
Juan Fernando García Trejo
Benito Parra Pacheco
Humberto Aguirre Becerra
Mark Schoor
Ana Angélica Feregrino Pérez
Alonso Ortiz Luviano
Hugo Gonzáles Lara
- 

103 RELACIÓN ENTRE LA RESISTENCIA AL CORTE Y LA CURVA DE RETENCIÓN AGUA-SUELO DISPERSO DE LA CIUDAD DE RIOVERDE, S. L. P., MÉXICO

César Augusto García Ezquivel
Eduardo Rojas González
Gustavo Gallegos Fonseca
María de la Luz Pérez Rea
Genoveva Hernández Padrón

118 ANÁLISIS NUMÉRICO DE LAS CARACTERÍSTICAS ESTÁTICAS DE COJINETES DE GAS POROSO MEDIANTE EL MODELO DARCY-FORCHHEIMER

Azael Sadi Durán Castillo
Juan Carlos Jáuregui Correa

137 SÍNTESIS DE UNA PEROVSKITA DE ZIRCONATO DE ESTRONCIO ASISTIDA CON RADIACIÓN ULTRASONICA

Oscar Eduardo Ortiz Contreras
Rufino Nava Mendoza
María de los Ángeles Cuán Hernández
Ricardo Antonio Escalona Villalpando
Alejandra Martínez Lázaro

154 MECANISMO DE ACCIÓN DE TRATAMIENTOS PRECOSECHA CON ÁCIDO SALICÍLICO PARA REDUCIR LA REVERSIÓN EN EL FRUTO DE ZARZAMORA

Joel Ernesto Martínez Camacho
Noelia Isabel Ferrusquía Jiménez
Irineo Torres Pacheco

166 LA BASE DE LA AUTONOMÍA VEHICULAR: LOS SISTEMAS ADAS

Jose Eduardo Barnica Muñoz
José Antonio Álvarez Castillo
Abraham Gastélum Barrios



A REVIEW ON THE LIFE CYCLE ASSESSMENT OF BIODIESEL PRODUCTION FROM WASTE FEEDSTOCKS

UNA REVISIÓN SOBRE EL ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA DE LA PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL A PARTIR DE MATERIAS PRIMAS RESIDUALES

Angelica Avila Anguis
Valeria Caltzontzin Rabell
Sergio Iván Martínez Guido
Claudia Gutiérrez Antonio*

Universidad Autónoma de Querétaro,
Santiago de Querétaro, México.

*claudia.gutierrez@uaq.mx

Abstract

Humanity is currently facing challenges such as climate change, water scarcity, inequality and hunger. In 2015, The United Nations established the 2030 Sustainable Development Goals (SDGs), with the purpose of protecting the planet and guaranteeing humanity's well-being. Among these objectives is Goal 7: affordable and non-polluting energy. One way to achieve this objective is substituting fossil diesel for biodiesel, which can be produced from various raw materials. Waste biomass is an attractive feedstock for biodiesel production due to its abundance and availability, constant generation and low price.

In recent years, the environmental impact of biofuels production has been studied through life cycle assessments (LCA), a methodological analysis that allows to objectively estimate and assess the potential environmental impacts of a service or product across its life stages. Thus, the purpose of this work is to conduct a review of the previous studies on LCAs in biodiesel production from biological waste. Thus, the benefit resulting from obtaining biodiesel from a residual raw material encompasses environmental and economic points of view.

Keywords: animal fat, biodiesel production, life cycle assessment, waste feedstocks, waste oil.

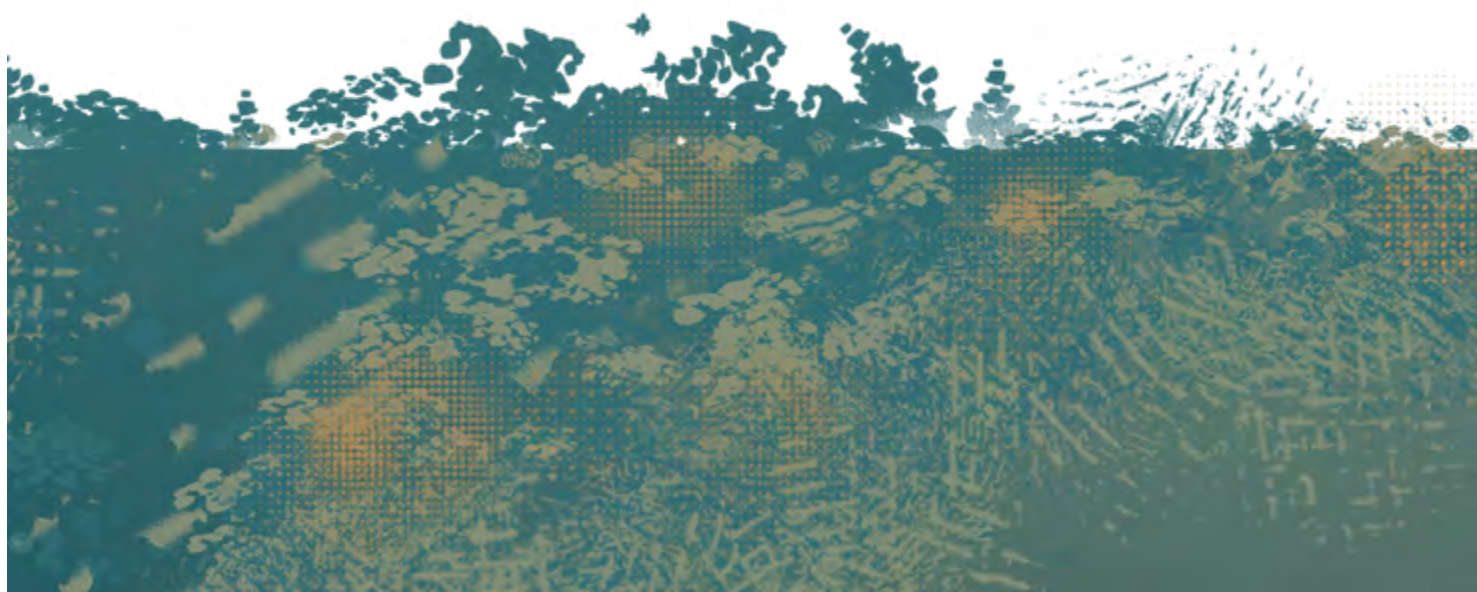


Resumen

Actualmente, la humanidad se enfrenta a diversos retos, tales como el cambio climático, la escasez de agua, la desigualdad, el hambre, entre otros. Debido a esto, la Organización de las Naciones Unidas en el 2015 aceptó la agenda 2030, que contiene los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), con el propósito de proteger el planeta y garantizar el bienestar de todos. Dentro de estos objetivos se encuentra el ODS7, el cual tiene como meta para el 2030 disponer de energía asequible y no contaminante. Una alternativa para alcanzar este objetivo es el reemplazo del diésel fósil por biodiésel, el cual puede producirse a partir de diversas materias primas. En particular, para la producción de biodiésel, la biomasa residual es una materia prima atractiva debido a su abundancia y elevada disponibilidad, constante generación y bajo costo.

Actualmente, se ha estudiado el impacto ambiental de la producción de biocombustibles mediante el análisis del ciclo de vida, el cual es una metodología que permite, de manera objetiva, cuantificar los impactos que puede tener un producto o servicio en el medio ambiente en todas las etapas de su vida. Por lo tanto, el objetivo del presente trabajo es llevar a cabo una revisión de la literatura existente acerca de la evaluación del análisis de ciclo de vida para la producción de biodiésel utilizando materia prima residual. Así, el beneficio resultante de obtener biodiésel a partir de esta puede abarcar aspectos económicos y medioambientales.

Palabras clave: grasa animal, producción de biodiésel, análisis de ciclo de vida, materias primas residuales, aceite residual.





Introduction

In 2015, the United Nations authorized the 2030 Agenda on Sustainable Development, that contains 17 Sustainable Development Goals (SDGs); they represent a global call to action to address the social, economic and environmental challenges facing the world. The 17 SDGs are: no poverty, zero hunger, good health and well-being, quality education, gender equality, clean water and sanitation, affordable and clean energy, decent work and economic growth, industry innovation and infrastructure, reduced inequality, sustainable cities and communities, responsible consumption and production, climate action, life below water, life on land, strong institutions and partnerships for the goals [1]. Altogether, these goals seek to improve people's quality of life, promote equity, safeguard the environment and ensure economic development that is sustainable and beneficial for all people and the planet.

Figure 1 shows all the 17 sustainable development goals; specifically, SDG 7 includes the generation of affordable and clean energy; the purpose is to guarantee access to affordable, high quality, sustainable and modern energy for all [2]. One target for 2030 is to achieve a considerable increase in the proportion of renewable and sustainable energy in the repertoire of energy sources. One strategy to achieve this contemplates the production and consumption of biofuels, especially for this work, biodiesel.



FIGURE 1. Sustainable development goals.

Own elaboration based on [3].



Petroleum derived fuels currently dominate over the transportation sector around the world [2]. However, this type of fuels are produced from a non-renewable source. Another problem is that they release toxic and greenhouse gases (GHG) into the atmosphere when burned, contributing to global warming, climate change and environmental pollution [4], [5].

In order to mitigate the difficulties mentioned above, biofuels are considered a cleaner and renewable replacement for fossil fuels. Among the most ecological ones developed to date is biodiesel, a liquid obtained from oils of organic materials [6]. There are four generations of feedstocks for biodiesel production [7]:

- Food crops.
- Non-edible feedstock, for example: waste cooking oil, animal fat residues and vegetable oils.
- Algae biomass.
- Genetically modified algae, electrofuels and photobiological solar fuels.

Biodiesel is obtained through transesterification, a catalyzed chemical reaction involving a vegetable oil or fat and an alcohol that produces alkyl esters of fatty acids (or biodiesel) and glycerol [8]. With the potential to decrease emissions of GHG [10], it is useful not only in the transportation sector, but also in the generation of energy and heat, either as a full or partial replacement of fossil diesel [9]. In addition, it is biodegradable, renewable, non-toxic and has a high cetane rating, and flash point, which favors immediate combustion [11].



... As the risk of climate change, water scarcity and hunger increase, life cycle assessments become more and more important for the industrial sectors. This work provides an insight on the research done so far respecting LCA in order to remark their importance for the sustainable development of humanity towards the future.

In the last few years, several studies have been carried out to evaluate the environmental impacts of the biodiesel production from different feedstocks [10]. One methodology to evaluate the environmental impact attributed to the biodiesel production process is the life cycle assessment (LCA), which provides insight for decision making towards sustainable options [5].

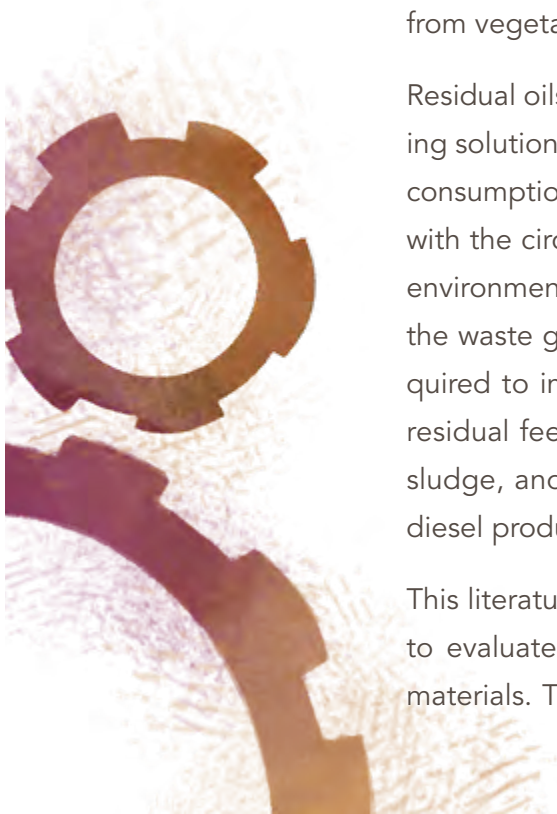
LCA is a global systematic methodology to evaluate the environmental aspects and potential impacts associated with a service or product. In LCA the relevant inputs and outputs of the product system are collected, and the potential environmental effects attached to those inputs and outputs are evaluated; finally, the results of the inventory analysis as well as impact assessment phases are interpreted [12]. This methodology effectively captures the diverse impacts on natural resources, human health and ecosystem quality [6].



In 2016, Mu [13] used LCA to assess the environmental impacts for the transformation of scum (generated at a sewage treatment plant) into biodiesel. The results indicated that all reviewed impacts were below zero; thus, significant environmental benefits can be attained. The study highlights the feasibility and advantages of implementing scum-to-biodiesel technology in sewage treatment facilities. Also in 2016, Tu [14] presented an LCA to estimate the energy expenditure and GHG emission of biodiesel production from fats and oils contained in a grease trap. The outcomes demonstrated that the waste contained in the grease trap is potentially a more energy-efficient raw material with lower GHG emissions, compared to other feedstocks, such as soybean and algae oil. Later, Foteinis [15] examined through LCA the sustainability of biodiesel produced from waste cooking oil (WCO); then, results were compared with first-generation biodiesel. It was found that the total environmental and carbon footprint of biodiesel production from residual cooking oil were 40% less than the impacts generated by the production of first generation biodiesel. Additionally, a three-fold decrease in environmental impacts compared to petroleum diesel was observed. In the same year, Vargas-Ibáñez [11] carried out an LCA to estimate the potential environmental impacts of ternary blends of diesel and biodiesel from beef tallow with additives as a biofuel used in diesel engines. In 2022, Corral-Bobadilla [16] carried out an LCA to evaluate different input process parameters that generate the greatest environmental WCO derived biodiesel impact; these studied parameters included reaction temperature, methanol to oil molar ratio, reaction time, catalyst dosage and agitation rate. Recently, Kiehadrouinezhad [17] evaluated the environmental sustainability of the biodiesel production process from fish waste using LCA. The results showed that biodiesel from fish oil has approximately 76% lower environmental impact, compared to biodiesel from vegetable oils.

Residual oils as raw material for the production of biodiesel are a promising solution, not only because they do not compete with food for human consumption [18], but also because the use of this type of feedstock aligns with the circular economy approach [19]; this model seeks to reduce the environmental impact of a process by reusing, recycling and recovering the waste generated in the process [17]. However, further research is required to improve the visualization of inventory data, investigate other residual feedstocks such as animal fats, agricultural waste and sewage sludge, and compare the environmental performance of different biodiesel production systems [12].

This literature review analyzes the LCA studies that have been carried out to evaluate the production of biodiesel using exclusively residual raw materials. The aim is to understand in depth the various types of waste





that have been evaluated for biodiesel production, as well as to identify and analyze the main findings and methodologies used in those studies. Furthermore, this study is intended to highlight the importance of knowing the types of waste evaluated, since this significantly influences the environmental performance and sustainability of the biodiesel production process. As a consequence, possible areas of opportunity are shown as a guide for future studies.

Methodology

To accomplish the purpose of this work, a review of the literature was carried out using Google Scholar, which is a tool that enables the search of academic documents. Indexed scientific articles were located firstly using the following keywords: "life cycle assessment" and "biodiesel production" and "animal fat" and "waste feedstocks". Subsequently, the word "animal fat" was replaced with "waste oil." In addition, the Elsevier platform named ScienceDirect was also used with the following keywords: "life cycle assessment" and "biodiesel" and "waste biomass." Another search was conducted replacing "waste biomass" with "waste feedstock," "waste triglyceride." The aforementioned terms were defined in order to find all the works that have been done using LCA regarding the production of biodiesel solely from residual raw materials.

Based on the results of the search process, three inclusion criteria were used for the selection of the relevant literature:

- Search period, where only articles published from 2010 to the current year were selected.
- Only articles published in indexed journals were considered, which means that they are high-quality journals and are listed in a global consultation database. In this case, to verify this inclusion criterion, the Web of Science database was used.

Finally, there were additional criteria for the removal of articles, which are presented next:

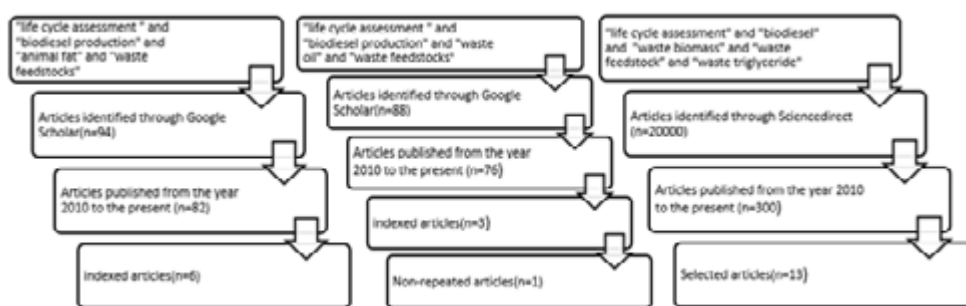
- Removal of repeated articles: Repeated articles were found several times in the search engines.
- Removal due to content: The articles do not include an LCA focused on biodiesel production from waste feedstock.
- Removal of items that were not available.

Selection of literature

The keywords: "life cycle assessment" and "biodiesel production" and "animal fat" and "waste feedstocks" were entered in the Google Scholar search engine; 94 documents were obtained. After criterion 1 was applied, the number of articles decreased to 82, while the application of criteria 2 and 3 reduced the number to 6. Later, the same procedure was carried out with the following keywords: "life cycle assessment" and "biodiesel production" and "waste oil" and "waste feedstocks;" 88 documents were obtained. When inclusion criterion 1 was applied, the number of articles decreased to 76; then, criteria 2 and 3 were applied and the number of articles was reduced to 3. It was observed that from the results, two articles were already included when using the keywords in the previous paragraph, so, they were removed. A similar procedure was carried out with the search in Elsevier Platform: 20000 articles were identified. When inclusion criterion 1 was applied, the number of articles was reduced to 300; then, criteria 2 and 3 were applied and the number of articles was reduced to 13. It was observed that from the results, two articles were already included when using the keywords in the previous paragraph, so, they were removed. A similar procedure was carried out with the search in Elsevier Platform: 13 more references after applying all the criteria previously described were found.

Finally, the articles selected in both search engines amounted to a total of 20. Figure 2 presents a flowchart that shows the process for the search and selection of the literature present in this study.

FIGURE 2. Flowchart of literature selection process



Results and discussion

This section presents the literature analysis regarding the LCA for the production of biodiesel from waste feedstocks.

First, waste cooking oil emerges as the most extensively researched waste feedstock, constituting 41.7% of the selected studies. Following wco, research focuses on animal fats as residual raw material, comprising 20.83% of the reviewed studies. Finally, a variety of other residual raw materials are explored in less proportion. These include agricultural waste, waste oil obtained from wastewater treatment, fats and oils contained in grease traps, ground coffee residues and insect oil, which correspond to 16.66%, 8.33%, 4.16%, 4.16% and 4.16%, respectively. Table 1 lists the residual raw materials used in the reviewed literature.



As for the LCA type, it can be seen from Table 1 that the total of the reviewed literature mentions the system boundaries, which are divided into five categories. The most widely used boundary system in the literature is the limit called *from the cradle to the gate*, which represents 50%; this boundary covers the process of extraction of the feedstock until the production of biodiesel to assess its environmental impact, but the use and disposal of the product is excluded [20]. The other four boundaries mentioned are *from gate to gate*, *from the well to the wheels*, *from the cradle to the grave* and *from waste to electricity*, which represent 30%, 10%, 5% and 5%, respectively.

TABLE 1. Feedstocks, system boundaries and software used in life cycle assessment.

With respect to the software used to calculate the environmental impact assessment, it was observed that 60% of the works relied on SimaPro; also, other softwares were used, such as Aspen Plus, GREET, GaBi, which represent 10% each one, as well as Python and NR, which represent 5% each one. Table 2 displays the type of biodiesel production process and the operating conditions that were carried out in each study reviewed.

AUTHOR	WASTE FEEDSTOCK	SYSTEM BOUNDARY	SOFTWARE
[8]	Residual vegetable oil	Cradle to grave	Aspen Plus
[13]	Scum	Gate to gate	GREET
[6]	wco		SimaPro
[21]	wco		SimaPro
[16]	wco		SimaPro
[14]	Oils and fats contained in grease traps		Python 2.7
[9]	wco		GaBi Software
[5]	wco		Green Delta
[15]	wco		SimaPro
[18]	Waste date seed oil		NR
[19]	Waste Prunus Armeniaca seeds		SimaPro
[17]	Fish waste	Cradle to gate	SimaPro
[11]	Beef tallow		SimaPro
[4]	Loquat kernel oil residues		SimaPro
[10]	wco		SimaPro and Aspen Plus
[24]	Spent ground coffee		GaBi Software
[25]	BSFL		SimaPro
[12]	wco, beef tallow, poultry fat and sewage sludge	Well to the wheels	SimaPro
[23]	wco and pork tallow		GREET
[22]	wco	Waste to electricity	NR



In 80% of the studies, biodiesel is obtained from conventional transesterification. Moreover, esterification process is reported in 5% of the articles for biodiesel production, while 15% of the studies reported new techniques in the transesterification process. Morais [8], for instance, obtained biodiesel from residual vegetable oils through the transesterification process with supercritical methanol using propane as co-solvent; this process was carried out at a temperature of 280 °C for 12.6 minutes. The data were compared to those obtained via a transesterification process utilizing alkaline and acid catalysts. The results demonstrated that the supercritical methanol process is the most favorable alternative for the environment, contrary to the acid catalyzed process that shows the highest potential environmental impacts.

In order to address the problems of mechanical agitation in the transesterification process, Aghbashlo [6] analyzed an ultrasound-assisted system; in this study, the objective was to provide the initial reaction energy and decrease the conversion time of wco into biodiesel. The results showed that the most environmentally friendly transesterification conditions were a methanol to oil molar ratio of 6, temperature of 60 °C and a reaction time of 10 minutes; the yield under these conditions was 97.12%. The environmental impacts of biodiesel produced under the conditions mentioned above, such as damage to human health, ecosystem quality, climate change and resource categories were significantly lower than those of conventional diesel fuel.

Bhonsle [21] produced biodiesel from wco via two approaches: transesterification by conventional method and transesterification at room temperature. Regarding the second process, no heating was required; in order to achieve this reaction a novel solvent was added to the reaction mixture of wco with alkaline catalyst potassium hydroxide in methanol. No significant differences in biodiesel yield were observed in both cases, and a yield of about 85% was achieved. The results showed that biodiesel at ambient temperature produced about 425 kg CO₂eq, while conventional

TABLE 2. Type of biodiesel production process and operating conditions.

AUTHOR	WASTE FEEDSTOCK	PRODUCTION PROCESS	ALCOHOL	CATALYST	TEMPERATURE	TIME
[8]	Residual vegetable oil	Transesterification with supercritical methanol	Propane as co-solvent		280 °C	12.6 min
	wco	Transesterification	Methanol	Naoh	nr	nr
[12]	Beef tallow	Transesterification	Methanol	Naoh	nr	nr
	Poultry fat	Transesterification	Methanol	Naoh	nr	nr
	Waste water sludge	Transesterification	Methanol	H ₂ SO ₄	nr	nr
[13]	Scum	Transesterification	Methanol	CH ₃ KO	60 °C	1 h
[5]	wco	Transesterification	Methanol	CaO derived from chicken eggs shells	65 °C	2 h
[6]	wco	Ultrasound-assisted Transesterification	Methanol	koh	60 °C	10 min
[15]	wco	Transesterification	Methanol	CH ₃ KO	nr	nr



AUTHOR	WASTE FEEDSTOCK	PRODUCTION PROCESS	ALCOHOL	CATALYST	TEMPERATURE	TIME
[18]	Waste date seed oil	Transesterification	Methanol	Magnetic catalyst	55 °C	47 min
[19]	Waste <i>Prunus Armeniaca</i> seeds	Transesterification	Methanol	SrO-La ₂ O ₃	70 °C	90 min
[21]	wco	Transesterification at room temperature	Methanol	koh	nr	nr
[16]	wco	Transesterification	Methanol	Naoh	nr	nr
[17]	Fish waste	Transesterification	Methanol	koh	nr	25 min
[11]	Beef tallow	Transesterification	Methanol	Naoh	nr	nr
[4]	Loquat kernel oil residues	Transesterification	Methanol	Bifunctional catalytic system based on CaO loaded on ceria oxide support	70 °C	90 min
[14]	Oils and fats contained in grease traps	Transesterification	Methanol	NaOCH ₃	65 °C	nr
[10]	wco	Transesterification	Methanol	Naoh	66 °C	nr
[22]	wco	Transesterification	Methanol	koh	NR	13 h
[23]	wco	Transesterification	NR	NR	NR	NR
	Pig tallow	Transesterification	NR	NR	NR	NR
[9]	wco	Transesterification	Methanol	Naoh	NR	NR
[24]	Spent ground coffee	Transesterification	Methanol	Naoh	NR	NR
[25]	BSFL	Transesterification	Methanol	H ₂ SO ₄	NR	NR

In the literature review, it was found that 70% of the studies used a basic catalyst in the transesterification process, while only 10% used an acid catalyst; this may be due to the fact that acid catalysis needs a higher molar ratio of methanol to oil, which in turn causes high energy requirements associated with methanol recovery operations. The remaining 20% of the studies carried out the transesterification process making use of novel catalysts. Chung [5] performed an LCA of biodiesel production from wco using CaO derived from chicken eggshell as catalyst. The results obtained were compared using potassium hydroxide (KOH) as catalyst. It was found that the CaO catalyst derived from chicken eggshell has a lower contribution to climate change impact, with 27.2 kg CO₂eq, while KOH obtained a value of 300 kg CO₂eq.

Al-Mawali [18] synthesized a novel magnetic solid acid catalyst that can be reused five consecutive times, without significant degradation in its catalytic activity, for the esterification of residual date seed oil. The magnetic catalyst demonstrated high catalytic performance with a biodiesel yield of 91.4% with optimum residence time, catalyst loading and temperature conditions of 47 min, 1.5 wt% and 55 °C, respectively. An LCA was carried out, and a global warming potential value of 1114 kg CO₂eq and human health toxicity as 633 kg 1.4-DBeq were obtained.



Al-Muhtaseb [19] developed a novel SrO-La₂O₃ catalyst for biodiesel production from *Prunus Armeniaca* seed oil waste. The analysis showed an optimal yield of biodiesel of 97.28%, with a reaction temperature of 65 °C, a residence time of 75 min, a catalyst charge of 3% by weight, and a molar ratio of methanol to oil of 9. LCA showed that the global warming potential during the entire biodiesel production process reached 1150 kg CO₂eq.

Al-Muhtaseb [4] used loquat seed oil as a waste feedstock to produce biodiesel on a new CaO-based bifunctional catalyst system, loaded on a ceria oxide support. The optimal yield of biodiesel obtained through the parametric study was 90.14%. The optimal parameters of the process were established at a reaction temperature of 70 °C, methanol to oil ratio of 9, reaction time of 90 minutes, and 4 wt% of catalyst. The LCA estimated a global warming potential during the entire biodiesel production process of 1129 kg CO₂eq to produce 1000 kg of biodiesel.

It is important to mention that 10% of the literature reviewed corresponds to studies in which combinations of biodiesel with conventional diesel are analyzed. In this type of research, Viornery-Portillo [9], through LCA, evaluated the environmental impacts related to the use of the biodiesel B25 mixture and ultra-low sulfur diesel in a power generator; the feedstock used was wco. Significant impact reductions were found for the categories of abiotic depletion, human toxicity potential, eutrophication potential, acidification potential and global warming potential.

Finally, 25% of the literature compares biodiesel produced from residual feedstock with different types of feedstocks; such is the case of the study of Dufour [12], who performed a comparison between the biodiesel production process from 4 residual oils (wco, beef tallow, poultry fat and sludge from wastewater treatment) with 2 vegetable oils (soybean oil, rapeseed oil) and low sulfur diesel. The results showed that biodiesel from residual vegetable oils potentially presents the most favorable environmental performance. Sajid [10] studied and compared the environmental impacts of biodiesel from *Jatropha* oil and wco through LCA. The results showed a 74% lower total environmental impact in case of using wco as feedstock compared to *Jatropha* oil. In addition, Xu [23] compared the LCA of GHG emissions from biodiesel production from corn oil distilleries, oilseed crops, wco and pig tallow. The results showed that the GHG emissions from residual feedstocks are lower than those of first-generation biodiesel.

Perspectives

The revision of the literature shows that there is scarce research regarding the LCA using residual feedstock for biodiesel production. WCO is the residual raw material that has been most evaluated in LCAs in the biodiesel production process. Moreover, there is a wide field of research on other types of waste feedstocks, such as bio-oil derived from agricultural waste, animal fats, fats and oils contained in grease traps and wastes generated in wastewater treatment. Indeed, recently the conversion of organic residues through microorganisms and insects to generate oil and then biodiesel has been reported.

Bathia carried out and published some studies related to the aforementioned [26], where lipids were obtained by *Rhodococcus* sp. YHY0 using WCO as a carbon source to subsequently produce biodiesel; the results showed that the biodiesel produced met international standards. Carmona-Cabello [27] produced microbial oil using the oleaginous yeast *Rhodospiridium toruloides* Y-27012 and residues from the food industry of the hospitality sector as an organic residue for the production of biodiesel, obtaining favorable results. Sitepu [28] carried out a direct transesterification assisted by a controlled crushing device of black soldier larvae. The biodiesel obtained complied with the international standard regulations except for the ester content and viscosity. Feng [29] used insect shells to synthesize a biocarbon-based heterogeneous catalyst for the conversion of insect lipid into biodiesel. The outcomes showed that a high-yield biodiesel can be obtained from insect oil.

These recent advances must also be studied considering the complete supply chain and also the LCA. As previous studies suggest, the use of waste biomass for biodiesel production significantly reduces the environmental impact; however, the recollection of this waste biomass must also be considered, since the carbon dioxide emissions associated with this task can limit the benefits.

Also, it was observed that the most used type of boundary in LCA found in the literature review is the *cradle to gate*, which does not evaluate the effects of the use and disposal of biodiesel. In the literature reviewed, very few studies were found that used the *cradle to grave* limit, which would be favorable to implement in the LCA. This limit takes into account the environmental impact from the extraction of the raw material, transportation, processing of materials, biodiesel production, distribution, use and final disposal. An important aspect in this context is also the use and disposal of glycerol, which is a sub-product of the biodiesel production.





Conclusions

In this work, a review of the literature pertaining to the LCA of biodiesel generation from waste triglyceride feedstock has been presented. The production cost as well as the environmental impact of the distillation and use of this biofuel depends on many factors, among which the choice of raw material stands out. In this context, the use of waste feedstock is attractive due to its high availability and abundance.

The literature review has shown that from all LCA works reported for biodiesel production from waste feedstocks, the conversion of waste cooking oil to biodiesel is the most studied. Derived from the life cycle assessment, it was found that the use of this residue presents many benefits, which include reducing the amount of arable land required, lowering the price of biodiesel production and mitigating waste management challenges. This finding reinforces the relevance of LCA studies focused on evaluating the sustainability of biodiesel production using exclusively residual raw materials.

A lower proportion of research was found in the literature on the environmental impact of biodiesel production from other residual feedstocks, such as animal fats, agro-industrial wastes, grease trap wastes and wastewater treatment material. Because these feedstocks are wastes, they can reduce biodiesel production costs. Also, the use of microbial and insect oil was found to be a promising alternative for biodiesel production; in particular, microbial oils exhibit many advantages, such as less dependency on weather and season, and less labor required. The use of insect oil also has many advantages, such as the availability of insects and higher production of fat content, which can range between 2 and 50%. The use of microorganisms and insects to produce biodiesel shares the advantage that they can use a variety of organic residue such as food waste, animal manure, agricultural waste, thus assuming the role of waste management. In this context, these insects and microorganisms can be used as pretreatment in order to employ organic residue for biodiesel production. However, these biological methods have not been studied comprehensively; therefore, there is a large area of opportunity to evaluate the environmental impact through LCA, and the performance of the conversion of waste feedstocks into biodiesel through the transesterification process.



Acknowledgments

We express our gratitude to CONAHCYT for the financial support through the maintenance grant (835894) for Angelica Avila Anguis' graduate studies.

Data availability

Data is available upon request.

References

- [1] United Nations, "Sustainable Development Goals." [Online]. Available: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/> [Accessed: May 4, 2023]
- [2] United Nations, "Energy." [Online]. Available: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/energy/> [Accessed: May 18, 2023]
- [3] United Nations. "Sustainable Development Goals." [Online]. Available: <https://sdgs.un.org/goals>
- [4] A. H. Al-Muhtaseb et al., "Circular economy approach of enhanced bifunctional catalytic system of CaO/CeO₂ for biodiesel production from waste loquat seed oil with life cycle assessment study," *Energy Conversion and Management*, vol. 236, p. 114040, 2021, DOI: 10.1016/j.enconman.2021.114040
- [5] Z. L. Chung et al., "Life cycle assessment of waste cooking oil for biodiesel production using waste chicken eggshell derived CaO as catalyst via transesterification," *Biocatalysis and Agricultural Biotechnology*, vol. 21, p. 101317, 2019, DOI: 10.1016/j.bcab.2019.101317
- [6] M. Aghbashlo, M. Tabatabaei, S. Amid, H. Hosseinzadeh-Bandbafha, B. Khoshnevisan, and G. Kianian, "Life cycle assessment analysis of an ultrasound-assisted system converting waste cooking oil into biodiesel," *Renewable Energy*, vol. 151, pp. 1352-1364, 2020, DOI: 10.1016/j.renene.2019.11.144
- [7] M. N. B. Mohiddin et al., "Evaluation on feedstock, technologies, catalyst and reactor for sustainable biodiesel production: A review," *Engineering Chemistry*, vol. 98, pp. 60-81, 2021, DOI: 10.1016/j.jiec.2021.03.036
- [8] S. Morais, T. M. Mata, A. A. Martins, G. A. Pinto, and C. A. V. Costa, "Simulation and life cycle assessment of process design alternatives for bio-



- diesel production from waste vegetable oils," *Journal of Cleaner Production*, vol. 18, n.º 13, pp. 1251-1259, 2010, DOI: 10.1016/j.jclepro.2010.04.014
- [9] E. A. Viornerly-Portillo, B. Bravo-Díaz, and V. Y. Mena-Cervantes, "Life cycle assessment and emission analysis of waste cooking oil biodiesel blend and fossil diesel used in a power generator," *Fuel*, vol. 281, p. 118739, 2020, DOI: 10.1016/j.fuel.2020.118739
- [10] Z. Sajid, F. Khan, and Y. Zhang, "Process simulation and life cycle analysis of biodiesel production," *Renewable Energy*, vol. 85, pp. 945-952, 2016, DOI: 10.1016/j.renene.2015.07.046
- [11] L. T. Vargas-Ibáñez, J. J. Cano-Gómez, P. Zwolinski, and D. Evrard, "Environmental assessment of an animal fat based biodiesel: Defining goal, scope and life cycle inventory," *Procedia cirp*, vol. 90, pp. 215-219, 2020, DOI: 10.1016/j.procir.2020.02.053
- [12] J. Dufour y D. Iribarren, "Life cycle assessment of biodiesel production from free fatty acid-rich wastes," *Renewable Energy*, vol. 38, n.º 1, pp. 155-162, 2012, DOI: 10.1016/j.renene.2011.07.016
- [13] D. Mu, M. Addy, E. Anderson, P. Chen, and R. Ruan, "A life cycle assessment and economic analysis of the Scum-to-Biodiesel technology in wastewater treatment plants," *Biore-source Technology*, vol. 204, pp. 89-97, 2016, DOI: 10.1016/j.biortech.2015.12.063.
- [14] Q. Tu y B. E. McDonnell, "Monte Carlo analysis of life cycle energy consumption and greenhouse gas (GHG) emission for biodiesel production from trap grease," *Journal of Cleaner Production*, vol. 112, pp. 2674-2683, 2016, DOI: 10.1016/j.jclepro.2015.10.028
- [15] S. Foteinis, E. Chatzisymeon, A. Litinas, and T. Tsoutsos, "Used-cooking-oil biodiesel: Life cycle assessment and comparison with first- and third-generation biofuel," *Renewable Energy*, vol. 153, pp. 588-600, 2020, DOI: 10.1016/j.renene.2020.02.022
- [16] M. Corral-Bobadilla, R. Lostado-Lorza, F. Somovilla-Gómez, and S. Íñiguez-Macedo, "Life cycle assessment multi-objective optimization for eco-efficient biodiesel production using waste cooking oil," *Journal of Cleaner Production*, vol. 359, p. 132113, 2022, DOI: 10.1016/j.jclepro.2022.132113
- [17] M. Kiehadrouinezhad, A. Merabet, and H. Hosseinzadeh-Bandbafha, "A life cycle assessment perspective on biodiesel production from



- fish wastes for green microgrids in a circular bioeconomy," *Bioresource Technology Reports*, vol. 21, p. 101303, 2023, DOI: 10.1016/j.biteb.2022.101303
- [18] K. S. Al-Mawali et al., "Life cycle assessment of biodiesel production utilising waste date seed oil and a novel magnetic catalyst: A circular bioeconomy approach," *Renewable Energy*, vol. 170, pp. 832-846, 2021, DOI: 10.1016/j.renene.2021.02.027
- [19] A. H. Al-Muhtaseb et al., "Integrating life cycle assessment and characterisation techniques: A case study of biodiesel production utilising waste Prunus Armeniaca seeds (PAS) and a novel catalyst," *Journal of Environmental Management*, vol. 304, p. 114319, 2022, DOI: 10.1016/j.jenvman.2021.114319.
- [20] K. K. C. Cárdenas, A. G. Romero-Izquierdo, S. I. Martínez-Guido, and C. Gutiérrez-Antonio, "Análisis de ciclo de vida: una herramienta para contribuir a la producción sustentable de biocombustibles de aviación," *Naturaleza y Tecnología*, Sep. 2022, Available: <http://quimica.ugto.mx/index.php/nyt/article/view/427>
- [21] A. K. Bhonsle, J. Singh, J. Trivedi, and N. Atray, "Comparative LCA studies of biodiesel produced from used cooking oil using conventional and novel room temperature processes," *Bioresource Technology Reports*, vol. 18, p. 101072, 2022, DOI: 10.1016/j.biteb.2022.101072
- [22] J. Lin, C. W. Babbitt, and T. A. Trabold, "Life cycle assessment integrated with thermodynamic analysis of bio-fuel options for solid oxide fuel cells," *Bioresource Technology*, vol. 128, pp. 495-504, 2013, DOI: 10.1016/j.biortech.2012.10.074
- [23] H. Xu, L. Ou, Y. Li, T. R. Hawkins, and M. Wang, "Life Cycle Greenhouse Gas Emissions of Biodiesel and Renewable Diesel Production in the United States," *Environ. Sci. Technol.*, vol. 56, n.º 12, pp. 7512-7521, 2022, DOI: 10.1021/acs.est.2c00289
- [24] A. Forcina, A. Petrillo, M. Travaglioni, S. di Chiara, and F. De Felice, "A comparative life cycle assessment of different spent coffee ground reuse strategies and a sensitivity analysis for verifying the environmental convenience based on the location of sites," *Journal of Cleaner Production*, vol. 385, p. 135727, 2023, DOI: 10.1016/j.jclepro.2022.135727
- [25] C. Seng Liew et al., "Life cycle assessment: Sustainability of biodiesel production from black soldier fly larvae feed-



- ing on thermally pre-treated sewage sludge under a tropical country setting," *Waste Management*, vol. 164, pp. 238-249, 2023, DOI: 10.1016/j.wasman.2023.04.013
- [26] S. K. Bhatia et al., "Rhodococcus sp. yhy01 a microbial cell factory for the valorization of waste cooking oil into lipids a feedstock for biodiesel production," *Fuel*, vol. 301, p. 121070, 2021, DOI: 10.1016/j.fuel.2021.121070
- [27] M. Carmona-Cabello, I. L. García, A. Papadaki, E. Tsouko, A. Koutinas, and M. P. Dorado, "Biodiesel production using microbial lipids derived from food waste discarded by catering services," *Biore-source Technology*, vol. 323, p. 124597, 2021, DOI: 10.1016/j.biortech.2020.124597
- [28] E. K. Sitepu, S. Perangin-angin, G. J. Ginting, S. Machmudah, R. N. Sari, and J. B. Tarigan, "Controlled crushing device-intensified direct biodiesel production of Black Soldier Fly larvae," *Heliyon*, vol. 9, n.º 6, 2023, DOI: 10.1016/j.heliyon.2023.e16402
- [29] W. Feng et al., "Polymer functionalization of biochar-based heterogeneous catalyst with acid-base bifunctional catalytic activity for conversion of the insect lipid into biodiesel," *Arabian Journal of Chemistry*, vol. 16, n.º 7, p. 104814, 2023, DOI: 10.1016/j.arabjc.2023.104814
- [30] G. M. Mathew et al., "Recent advances in biodiesel production: Challenges and solutions," *Science of The Total Environment*, vol. 794, p. 148751, 2021, DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.148751
- [31] F. Akram et al., "Current trends in biodiesel production technologies and future progressions: A possible displacement of the petro-diesel," *Journal of Cleaner Production*, vol. 370, p. 133479, 2022, DOI: 10.1016/j.jclepro.2022.133479



UNA REVISIÓN SOBRE EL PAPEL DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL EN EL ANÁLISIS DE LA DISPERSIÓN DE GASES TÓXICOS EN PLANTAS QUÍMICAS

A REVIEW ON THE ROLE OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS ON THE ANALYSIS OF THE DISPERSION OF TOXIC GASES IN CHEMICAL PLANTS

Efraín Quiroz Pérez*
Julio Armando de Lira Flores

Universidad Autónoma de Querétaro,
Santiago de Querétaro, México

*efrain.quiroz@uaq.mx

Resumen

La seguridad de procesos desempeña un papel crucial en el diseño y la operación de las plantas químicas. Actualmente, los escenarios que suponen un riesgo en los procesos químicos se deben comprender desde el punto de vista de los fenómenos de transporte de los fluidos involucrados; en específico, la dispersión de gases tóxicos, que ponen en riesgo la salud de los trabajadores. En este sentido, el avance tecnológico y el incremento exponencial de la capacidad de cómputo en las últimas décadas han favorecido las técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD en inglés) por encima de los modelos convencionales de dispersión. Este trabajo describe los fundamentos de las técnicas de CFD complementados con una revisión de estudios sobre esta herramienta computacional en el modelado y la simulación de dispersión de gases tóxicos en plantas químicas. Además, se incluye un caso de estudio demostrativo y una discusión sobre las perspectivas de este enfoque: su estado actual, ventajas, limitaciones y áreas de oportunidad. Estos puntos permiten enfatizar el papel y la importancia de las técnicas de CFD en los análisis de riesgo llevados a cabo en las plantas químicas, especialmente aquellas donde puede ocurrir la fuga y dispersión de gases tóxicos.

Palabras clave: CFD, dispersión, gases tóxicos, plantas químicas, seguridad de procesos, simulación.





Abstract

Process safety plays a crucial role in the proper design and operation of chemical plants. Currently, the scenarios that pose a risk in chemical processes must be understood from the point of view of the transport phenomena of the fluids involved; specifically, the dispersion of toxic gases, which endanger the health of workers. In this sense, technological advances and the exponential increase in computing power in the last decades have favored computational fluid dynamics (CFD) techniques over conventional dispersion models. This paper describes the fundamentals of CFD techniques complemented with a review of studies on this computational tool in the modeling and simulation of toxic gas dispersion in chemical plants. In addition, a demonstrative case study and a discussion on the perspectives of this approach are included: its current status, advantages, limitations and areas of opportunity. These points allow emphasizing the role and importance of CFD techniques in the risk analysis carried out in chemical plants, especially those where leakage and dispersion of toxic gases can occur.

Keywords: CFD, dispersion, toxic gases, chemical plants, process safety, simulation.





Introducción

Debido a la creciente complejidad involucrada en las tecnologías de producción actuales y emergentes, la seguridad de procesos continúa jugando un papel crucial en el diseño y la operación de las plantas de procesamiento. A pesar del progreso logrado para que las industrias químicas se consideren entre los lugares de trabajo más seguros, prevalece una inmanente necesidad de comprender a cabalidad los mecanismos de los fenómenos incidentes en la seguridad; el objetivo es generar predicciones más confiables de los escenarios que pueden existir bajo distintas condiciones [1], [2].

A nivel mundial, en las plantas químicas se manejan diversos tipos de gases con diferentes propiedades físicas y químicas, muchos de los cuales se consideran dañinos tanto para la salud como para el medio ambiente. En consecuencia, existe un riesgo principalmente porque se producen y transportan a gran escala, están fácilmente disponibles y poseen una toxicidad aguda [3].

Por ejemplo, el cloro (Cl_2) es un gas común en la producción de plásticos, solventes, productos de papel y agua potable [4]; es altamente reactivo y cuando se inhala en bajas concentraciones (3-15 ppm) se puede presentar irritación ocular y de las membranas mucosas, así como lesiones de las vías respiratorias. Las consecuencias agudas asociadas a la exposición a mayores concentraciones de cloro incluyen obstrucción de las vías respiratorias, disnea, tos, cianosis, náuseas, vómito y pérdida del conocimiento [3]-[6].

Por otro lado, la exposición prolongada a bajas concentraciones (50-700 ppm) de amoníaco gaseoso (NH_3 , común en aplicaciones farmacéuticas, textiles y de refrigeración industrial [7]) se asocia a padecimientos como la sinusitis, el síndrome de inflamación de membranas mucosas, la bronquitis crónica y síntomas similares al asma [8], [9]. En el peor de los casos, la exposición a grandes volúmenes de amoníaco provoca irritación en el tracto respiratorio, piel y ojos, e inclusive puede causar la muerte debido al daño pulmonar [3], [8], [10], [11].

El fluoruro de hidrógeno (HF) se aprovecha como catalizador en las industrias del petróleo y gas; en la industria química, como agente reactivo en la síntesis de fluoropolímeros y fluorocarbonos. La exposición a una concentración promedio de 3 ppm causa irritación ocular y de las vías respiratorias superiores, mientras que 5 ppm pueden producir eritemas [12], [13]. Concentraciones más altas causan perjuicios serios a la salud huma-



na, incluyendo el daño a las vías respiratorias, edema pulmonar, hipocalcemia, quemaduras cutáneas, e inclusive una incidencia creciente de diversos tipos de cáncer [14], [15].

Históricamente, la industria química ha mantenido su enfoque en reducir el riesgo de daño debido a accidentes, tanto al personal como al ambiente. En este sentido, la higiene industrial es una disciplina dedicada a la identificación, evaluación y control de aquellas condiciones que pueden causar heridas y enfermedades. Involucra el monitoreo de la concentración de gases tóxicos y su reducción mediante sistemas eficientes de ventilación y el desarrollo de procedimientos para el manejo de materiales y sustancias peligrosas [1], [16], [17].

Respecto al monitoreo de los niveles de gases tóxicos, la higiene industrial se apoya en leyes y regulaciones gubernamentales para la evaluación de riesgos a la salud humana. En los Estados Unidos de América, por ejemplo, la Conferencia Americana de Higienistas Industriales Gubernamentales (ACGIH, *American Conference of Governmental Industrial Hygienists*), establece los valores umbrales límite (TLV, *threshold limit values*) para una gama de agentes químicos [18]; el TLV para una sustancia química se refiere a la concentración máxima en el aire bajo la cual no se esperan efectos adversos para un trabajador [1]. Por otro lado, la Administración de Seguridad y Salud Ocupacional (OSHA, *Occupational Safety and Health Administration*) ha definido sus propios valores umbrales, los cuales son identificados como límites de exposición permisible (PEL, *permissible exposure level*) [1], [19]. Estos valores límite han fungido como referentes en las regulaciones técnicas de otros países; por ejemplo, la Norma Oficial Mexicana NOM-010-STPS-2014, centrada en las condiciones de seguridad e higiene en los centros de trabajo y almacenamiento donde se manejen, transporten, procesen o depositen sustancias químicas capaces de generar contaminación en el ambiente laboral [20].

A su vez, los TLV son un parámetro de referencia en las etapas de los análisis de riesgo que se efectúan en las plantas químicas. Típicamente, este tipo de análisis comienza por considerar un incidente hipotético pero probable, como la liberación accidental de una sustancia tóxica y/o inflamable en una planta química. Es posible predecir con mayor certeza que ocurra o no un escenario así si se cuenta con el historial de accidentes *in situ* y el personal involucrado posee una experiencia amplia en seguridad industrial [1], [2], [21].



... Este trabajo describe los fundamentos de las técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD) complementados con una revisión de estudios sobre esta herramienta computacional en el modelado y simulación de dispersión de gases tóxicos en plantas químicas.



El siguiente paso consiste en determinar un valor numérico que represente las consecuencias indeseables del incidente en cuestión, con base en las propiedades de la sustancia: tasas de liberación (flujo másico o volumétrico) y evaporación, así como su transporte y dispersión bajo condiciones meteorológicas específicas (velocidad del viento, temperatura ambiente, presión, etcétera) [1], [2], [21]. El modelado matemático de este conjunto de fenómenos físicos se vuelve esencial en los procedimientos de cuantificación del riesgo. Para este propósito, se han desarrollado los llamados modelos de dispersión, tales como los gaussianos [22], [23], [24] y los integrales [25], [26], [27]. A pesar de que este tipo de modelos son ampliamente populares, y presentan importantes desventajas. En primer lugar, no ofrecen una representación fidedigna de la fenomenología relacionada con las interacciones de los gases con los obstáculos comunes en las plantas químicas (equipos de proceso, edificios, cuartos de control y de servicios, etcétera) [2], [28], [29]. Además, la unidimensionalidad de estos modelos impone un límite severo a la predicción de la dispersión gaseosa, pues el movimiento y las propiedades de estos fluidos exhiben cambios a través de las tres dimensiones espaciales [28], [30], [31]. Finalmente, es importante mencionar que las turbulencias originadas cuando los gases fluyen alrededor de los obstáculos producen variaciones locales en las concentraciones y la difusión de los gases [30], [32], [33], [34]; en este sentido, se ha reportado que los modelos de dispersión convencionales producen estimaciones de estas variables que difieren de manera abismal del comportamiento real [28], [35], [36].

El creciente avance tecnológico y el incremento exponencial de la capacidad computacional en las últimas décadas han favorecido la aplicación de técnicas especiales para el estudio de la fenomenología relacionada con los escenarios que suponen un riesgo en los procesos químicos. Una de estas técnicas es la dinámica de fluidos computacional (*CFD*, *Computational Fluid Dynamics*). *CFD* se apoya de procesos informáticos para predecir cuantitativamente los fenómenos relacionados con la dinámica de fluidos y la transferencia de energía y masa, a partir de la aplicación de las llamadas leyes de conservación [37], [38]. Constituye una herramienta numérica invaluable en el análisis y la estimación paramétrica de la seguridad de los procesos químicos, tales como la distribución de gases tóxicos, los niveles de radiación y los perfiles de sobrepresión [2].

La liberación o fuga de gases tóxicos en plantas químicas pueden darse de forma rápida y en cantidades suficientes para esparcirse, formar nubes densas y originar consecuencias catastróficas tanto en el sitio donde ocurren como en los alrededores. En estos casos, el modelado *CFD* proporcio-



na información valiosa sobre la velocidad, la temperatura, los perfiles de concentración, la evolución y la dirección del flujo, así como las dimensiones de su área de impacto. Este enfoque ha gozado de popularidad en la última década en diversos estudios en plantas químicas con múltiples obstáculos y edificios, lo cual supone un ambiente con direcciones de flujo complejas. Además, los modelos basados en CFD poseen ventajas sobre los modelos de dispersión convencionales; para empezar, ofrecen una óptima capacidad de predicción de los perfiles reales de concentración, velocidad y temperatura, sobre todo en sistemas tridimensionales donde hay obstáculos con geometrías complejas. Cuando se implementan de forma correcta, despliegan una alta precisión en la estimación de estas variables en aquellos espacios que exhiben fluctuaciones turbulentas (remolinos, recirculaciones, etcétera) [2].

Otra ventaja de CFD es que sus resultados repercuten positivamente en la toma de decisiones de emergencia, así como en las estrategias de planificación en incidentes relacionados con el escape de materiales peligrosos [39], [40]. Por ejemplo, los perfiles de concentración de los gases tóxicos permiten generar estimaciones iniciales para determinar las condiciones o escenarios bajo los cuales se alcancen concentraciones límite; asimismo, esta información proporciona un marco de referencia sobre las ubicaciones clave donde colocar sensores de detección de gases en una planta química.

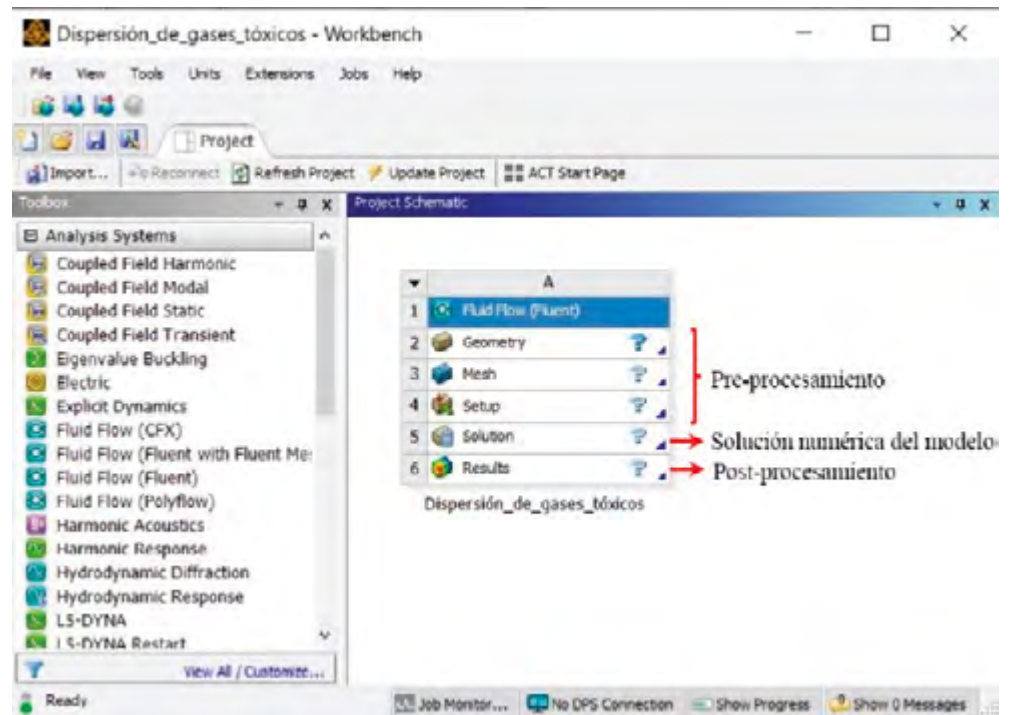
De lo anterior dicho, este trabajo describe los principios técnicos de CFD y presenta una revisión de estudios enfocados en su uso en el modelado y la simulación de dispersión de gases tóxicos dentro de plantas químicas. Se agrega un caso de estudio demostrativo, así como una discusión sobre las perspectivas respecto a este enfoque, incluyendo su estado actual, ventajas, limitaciones y áreas de oportunidad.

Metodología

Las etapas que conforman el desarrollo de un modelo CFD son preprocesamiento, solución numérica del modelo y posprocesamiento. Hoy en día existe una gran variedad de programas de CFD (tanto comerciales como de uso libre), los cuales poseen una interfaz gráfica que permite acceder de forma secuencial a cada etapa por medio de programas o aplicaciones secundarias; las tareas relacionadas se facilitan con la creación y manipulación de los modelos computacionales.

Por ejemplo, en la Figura 1 se presenta la interfaz ANSYS® Workbench™ 2023 R2 [41], donde se puede apreciar cada una de las etapas mencionadas en la plantilla de un modelo computacional (denominada Dispersión_de_gases_tóxicos) por desarrollar.

FIGURA 1. Interfaz gráfica de ANSYS® Workbench™ 2023 R2.



A continuación, se describen los aspectos que conforman cada etapa del desarrollo y la simulación de modelos basados en CFD, enfatizando su aplicación en la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas.

Preprocesamiento

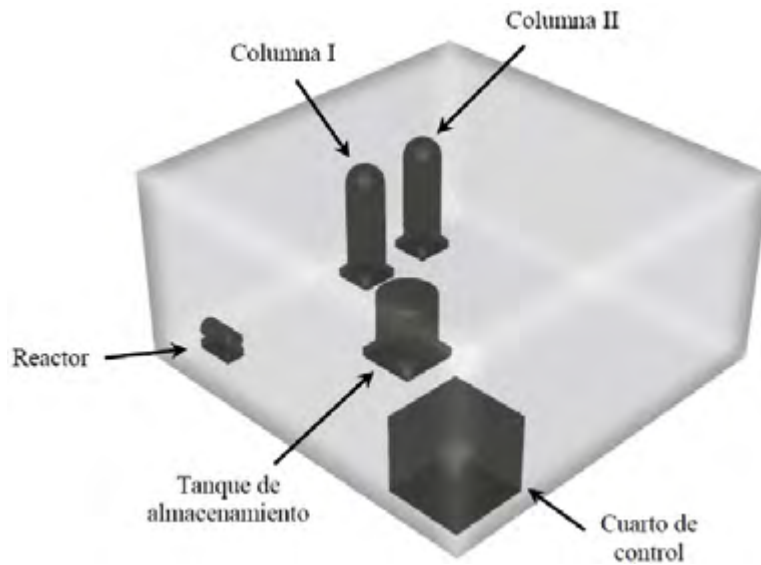
El preprocesamiento debe llevarse a cabo antes de implementar el procedimiento de solución numérica de un modelo computacional basado en CFD. En las siguientes subsecciones se describe cada una de estas tareas.

Generación del dominio computacional

Esta etapa consiste en la construcción de la geometría computacional que representará el sistema de estudio. Esta labor se lleva a cabo por medio un software de diseño asistido por computadora (CAD, *Computer-Aided Design*). En este sentido, el dominio computacional del sistema de estudio debe contener todos los elementos geométricos que puedan alterar el comportamiento de los fluidos y/o influir en la transferencia tanto de masa como de energía; por ejemplo, entradas, salidas, muros, zonas porosas, deflectores y otros componentes internos.

El fenómeno de dispersión de gases se puede simular considerando un dominio computacional (la planta química) con o sin elementos internos como equipos de proceso, cuartos de control, tuberías, escaleras, barreras físicas de protección y/o mitigación. La Figura 2 muestra el dominio computacional de una planta química que procesa metano gaseoso y cuenta con un reactor químico, dos columnas de destilación, un tanque de almacenamiento y un cuarto de control. En este caso, el dominio fue generado en el programa ANSYS® DesignModeler™ 2023 R2 [42], al cual puede accederse en el apartado Geometry de la plantilla en ANSYS® Workbench™.

FIGURA 2. Dominio computacional de una planta química con elementos internos generado en ANSYS® DesignModeler™ 2023 R2.



Aquellos estudios que consideran un dominio computacional sin elementos internos pueden tener como objetivo un análisis preliminar de la dispersión de los gases tóxicos en la planta, incluyendo perfiles de concentración, velocidades o temperaturas. Así, los resultados obtenidos en esta etapa son comparables con aquellos que se tendrán una vez considerados uno o varios elementos internos. Por ejemplo, en [43] se obviaron los elementos internos, pues el propósito fue analizar el efecto de una cortina de agua en forma de *spray* para mitigar una corriente gaseosa tóxica en una planta; en este caso, los componentes tóxicos considerados fueron fluoruro de hidrógeno (HF) y amoníaco (NH_3). En resumen, las razones por las cuales se omiten los elementos internos dentro del dominio computacional de la planta es que estos no forman parte del sistema de interés.

Por otro lado, numerosos trabajos han estudiado el efecto de los elementos internos de una planta química en la dispersión de gases tóxicos: barreras físicas de protección (paredes) de diferentes dimensiones [44] o diseños



geométricos [45], equipos de proceso, tales como tanques de almacenamiento y reactores químicos, así como cuartos de control, oficinas y otros edificios [31], [46], [47], [48].

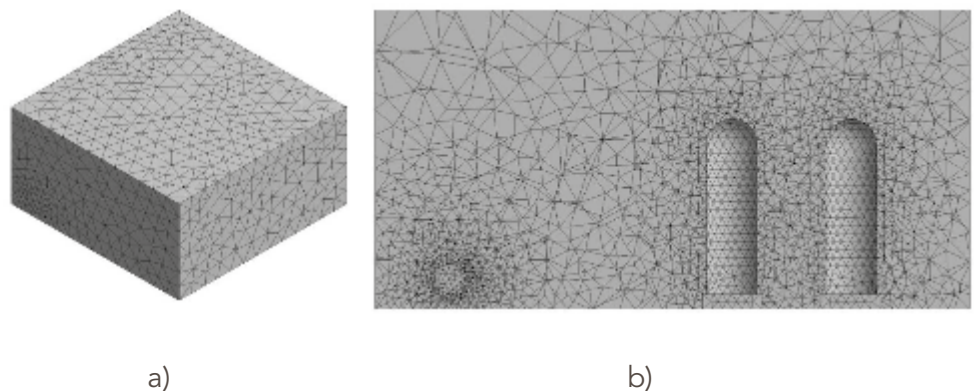
Discretización del dominio computacional

En CFD la fenomenología es representada mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales integradas sobre elementos diferenciales de volumen; *a posteriori*, se aproximan para obtener un conjunto de ecuaciones algebraicas, cuya solución puede encontrarse, por ejemplo, a través de métodos matriciales.

Mediante un procedimiento denominado *mallado* se efectúa la división del dominio computacional en elementos diferenciales de volumen [49], [50], [51]. En el caso de mallas bidimensionales dichas fracciones pueden ser cuadriláteros, triángulos u otros polígonos; en cambio, cuando se trata de mallas tridimensionales, pueden ser hexaedros, tetraedros u otros prismas. A su vez, si las mallas compuestas de elementos de tipo cuadrilátero (2D) o hexaedro (3D) ostentan un arreglo ordenado y uniforme se designan como *mallas estructuradas*.

A este respecto se suman las *mallas no estructuradas* (Figura 3), compuestas de elementos cuadriláteros o hexaedros, así como de elementos triangulares (2D), tetraédricos, entre otros prismas (3D). En particular, la Figura 3 corresponde a la discretización del dominio computacional (Figura 2) generada en el programa ANSYS® Meshing™ 2023 R2 [52], accesible en el apartado Mesh de la plantilla del modelo computacional (Figura 1).

FIGURA 3. Malla no estructurada del dominio computacional de una planta química generada en ANSYS® Meshing™ 2023 R2:
a) vista externa
b) vista interna.



Es menester mencionar que la generación de mallas estructuradas para sistemas con geometrías complejas puede consumir mucho tiempo, e incluso llegar a ser una labor imposible; la dificultad se debe a que algunas regiones o zonas poseen formas geométricas que es complicado representar por medio de cuadriláteros y hexaedros (zonas con curvaturas, de-



flectores u otros componentes internos). Como consecuencia, surge la necesidad de generar mallas no estructuradas, puesto que las formas de tetraedros y triángulos se adaptan mejor a las regiones con formas geométricas complejas [38], [53].

Como se mencionó anteriormente, al definir el dominio computacional de la planta química donde se desea analizar la dispersión de gases tóxicos, es de suma importancia considerar la presencia de elementos internos u obstáculos en la misma. Tales cuerpos influirán directamente en la estrategia de discretización espacial o mallado de dicho dominio. Algunos trabajos proponen mallas tridimensionales estructuradas, que consisten principalmente de hexaedros, para el mallado del dominio computacional de una planta química con diferentes unidades de proceso con formas geométricas convencionales [48], [54]. Ambos estudios establecen que, en las zonas correspondientes a la fuente de emisión del gas y alrededores de las unidades de proceso, los elementos de la malla deben poseer menor tamaño respecto a otras zonas. Esta estrategia es conocida como *refinamiento* y ofrece una mejor representación de los fenómenos más relevantes en las zonas donde las variables involucradas (velocidad, concentración, temperatura, entre otras) exhiben cambios drásticos o muy pronunciados. El refinamiento permite un mejor control del tamaño de la malla, referido al número de elementos que la conforman. La estrategia ha sido aplicada en estudios donde se han generado mallas tridimensionales no estructuradas, unas conformadas mayormente por tetraedros [31], otras por combinaciones de tetraedros y poliedros [55], [56].

Ecuaciones gobernantes

CFD involucra el análisis del comportamiento de fluidos, así como de los fenómenos relacionados con la transferencia de calor y/o masa; es decir, está cimentada en las leyes de conservación de masa, momento y energía. A continuación, se explica el fundamento teórico de las ecuaciones que representan estas leyes.

Conservación de la masa y conservación de la cantidad de movimiento

Las ecuaciones de conservación para sistemas monofásicos que involucran un flujo laminar están bien establecidas. En este sentido, la conservación de la masa y el momento (cantidad de movimiento) está dada, respectivamente, por las Ecuaciones (1) y (2) [57]:



$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + (\nabla \cdot \rho \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \vec{v} + (\nabla \cdot \rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p - (\nabla \cdot \tau) + \rho \vec{g} \quad (2)$$

Donde:

t denota el tiempo,

ρ corresponde a la densidad,

\vec{v} representa el vector de velocidad,

p es la presión,

τ respecta al tensor de esfuerzos viscosos.

En este caso, el gradiente ∇ representa el cambio de las variables con respecto a las dimensiones en un plano; por ejemplo, en un plano cartesiano tridimensional, estas dimensiones estarían dadas por las coordenadas (x, y, z) . Al desarrollar un modelo basado en CFD, se deben definir cuáles de estas variables tienen influencia en los fenómenos de interés; por ejemplo, si los efectos gravitacionales son importantes o si se abordará un enfoque transitorio o estacionario (es decir, sistemas cuyo comportamiento cambia con el tiempo o no).

Conservación de energía

Los sistemas no-isotérmicos (es decir, aquellos en los que existen cambios considerables en la temperatura) requieren tomar en cuenta la Ley de conservación de energía además de las Ecuaciones (1) y (2). El propósito es ponderar la energía interna total del sistema, es decir, la suma de las energías térmica y mecánica; en particular, las fluctuaciones de energía térmica durante la dispersión de gases ejercen un efecto más significativo. Por esta razón, la expresión matemática que las describe se suele incluir al evaluar la mitigación de los accidentes y dispersión de contaminantes [43], [46], [58]; por ejemplo, ha sido considerada en el modelado de cortinas de fluidos como agua, aire y vapor, sobre la concentración de los componentes tóxicos en emisiones gaseosas [43], [59]; la intención es tomar en cuenta los fenómenos de enfriamiento o calentamiento que experimentan las nubes de gases tóxicos al entrar en contacto con las cortinas de fluidos a una diferente temperatura.

En este caso, la conservación de la energía térmica está dada por [57]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho e + (\nabla \cdot \rho e \vec{v}) = - (\nabla \cdot \vec{q}) - p(\nabla \cdot \vec{v}) + (-\tau : \nabla \vec{v}) + S_h$$

Donde:

e representa la energía interna por unidad de masa,

\vec{q} expresa el vector de flujo de calor debido al transporte molecular,

S_h es la tasa volumétrica de producción de calor.

El término de disipación viscosa $(-\tau : \nabla \vec{v})$ a menudo se desprecia en el modelado de aplicaciones de ingeniería química [60].

Transporte de especies químicas

Además de las Ecuaciones (1) a (3), la ecuación de transporte para cada una de las especies químicas i , que componen las emisiones gaseosas tóxicas, debe ser añadida con el fin de representar el flujo o transporte de la forma más realista posible. Diferentes estudios han abordado tal enfoque para analizar la dispersión aérea de gases tóxicos en plantas químicas, tales como fluoruro de hidrógeno (hf) [43], [44], [61], cloro (Cl₂) [31], [47], [62], [63], [64], amoníaco (nh₃) [56], [65], [66], ácido sulfhídrico (H₂S) [55], cloruro de vinilo (C₂H₃Cl) [58], etanol (C₂H₆O) [67] y dióxido de carbono (co₂) [68].

La ecuación de conservación de cada una de las especies químicas está dada por la siguiente expresión general [57]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \omega_i + (\nabla \cdot \rho \vec{v} \omega_i) = - (\nabla \cdot \vec{J}_i) + S_i$$

Donde:

ω_i es la fracción másica de la especie i ,

\vec{J}_i corresponde al vector de flujo de masa de la especie i asociado al transporte molecular,

S_i denota la tasa neta de producción de la especie i por unidad de volumen. Este último término es omisible para los sistemas en los cuales las especies en la emisión gaseosa no interactúan para llevar a cabo reacciones químicas de formación ni consumo.





Con el fin de que las Ecuaciones (1) a (4) tengan solución, es necesario añadir una ecuación de estado para el cálculo de la densidad (ρ), así como ecuaciones constitutivas para el tensor de esfuerzos viscosos ($\boldsymbol{\tau}$), el vector de flujo de calor (\vec{q}) y el de flujo de masa (\vec{J}_i). Como consideración inicial, a falta de un conocimiento detallado de la reología del fluido a través de un sistema, puede asumirse un comportamiento newtoniano para el mismo. De este modo, resulta útil la siguiente expresión para $\boldsymbol{\tau}$:

$$\boldsymbol{\tau} = - \left\{ \left(\lambda - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \vec{v}) \mathbf{I} + \mu [(\nabla \vec{v}) + (\nabla \vec{v})^T] \right\}$$

Donde:

λ y μ son, respectivamente, la viscosidad a granel y la viscosidad de corte,

\mathbf{I} es el tensor identidad, y el superíndice T indica la traspuesta,

La viscosidad a granel puede despreciarse para gases densos y líquidos [57].

Por otro lado, las leyes de Fick y de Fourier se utilizan con frecuencia para modelar los vectores de flujo de calor y de masa, respectivamente. De esta forma, las ecuaciones para estos términos son [57]:

$$\vec{q} = -k \nabla T$$

$$\vec{J}_i = -D_i \rho \nabla \omega_i$$

Donde:

k representa la conductividad térmica,

T indica la temperatura,

D_i corresponde al coeficiente de difusión de Fick de la especie i .

Hay que destacar que los programas comerciales y de uso libre de CFD cuentan con bibliotecas de modelos matemáticos para representar las ecuaciones gobernantes hasta aquí descritas, sumados a otros submodelos destinados a aplicaciones específicas. Concretamente, se observa en las Figuras 4 y 5 la interfaz de selección de modelos matemáticos disponibles en el programa ANSYS® Fluent® 2023 R2 [69]; en específico, las ecuaciones de energía (Figura 4) y transporte de especies químicas (Figura 5). En primera instancia debe accederse al apartado "Setup" de la plantilla del modelo computacional en ANSYS® Workbench™ (Figura 1). Después se selecciona la pestaña Models, con lo cual se desplegarán los modelos disponibles para describir la fenomenología involucrada en un sistema de interés. Cabe señalar que las Ecuaciones (1) y (2) son los modelos pre-

determinados para describir, respectivamente, la conservación de la masa y de la cantidad de movimiento en la mayoría de los programas de CFD.

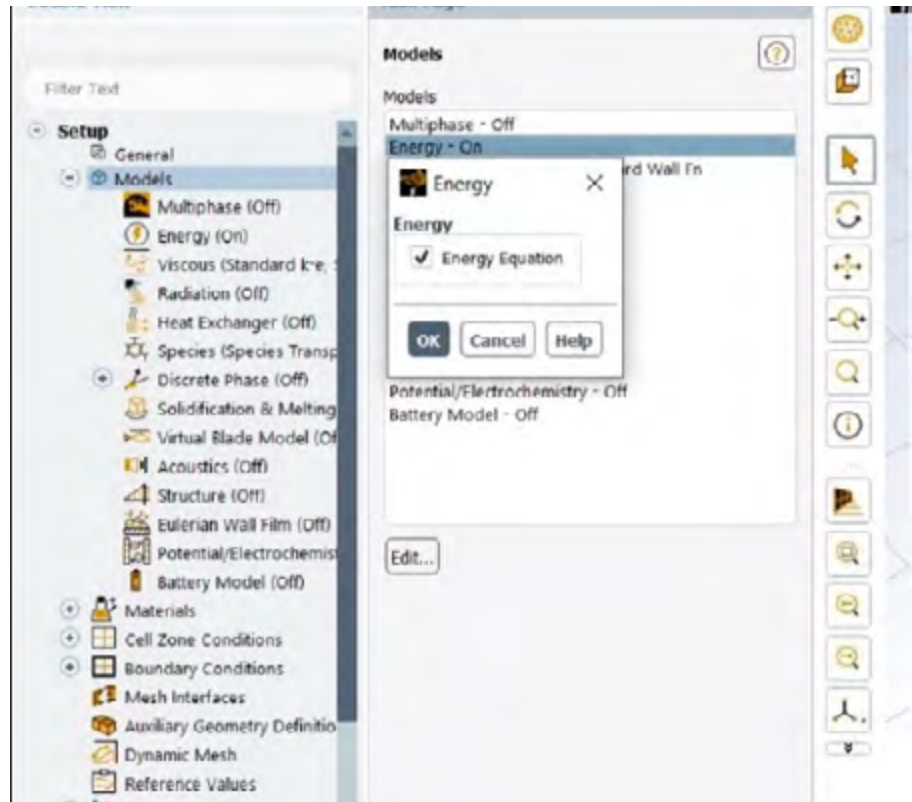


FIGURA 4. Interfaz de selección de la ecuación de conservación de energía en la biblioteca de modelos de ANSYS® Fluent™ 2023 R2.

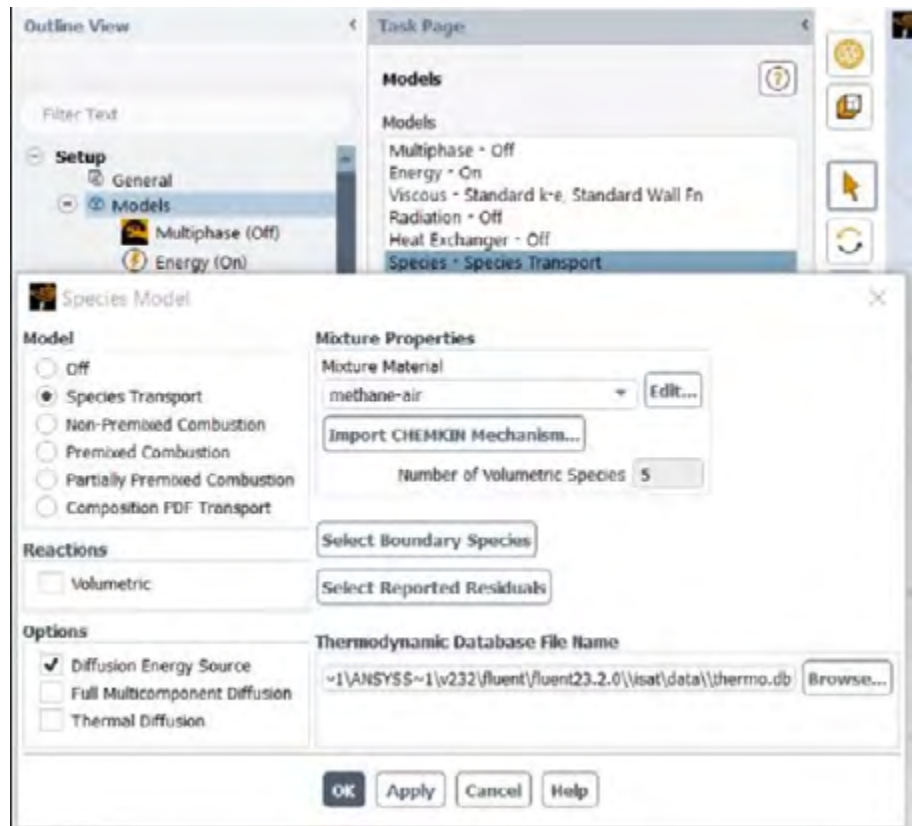


FIGURA 5. Interfaz de selección de la ecuación de transporte de especies químicas en la biblioteca de modelos de ANSYS® Fluent™ 2023 R2.

Como puede verse en la Figura 5, además de la selección de la ecuación de transporte de especies químicas, ANSYS® Fluent® 2023 R2 permite





especificar algunos submodelos para refinar la representación de esta fenomenología. Por ejemplo, es posible elegir el mecanismo de difusión que se desea representar (*Diffusion Energy Source*, *Full Multicomponent Diffusion*, o *Thermal Diffusion*), incluir o no reacciones químicas de tipo volumétrico (*Volumetric*), así como especificar el modelo de combustión (*Non-Premixed Combustion*, *Premixed Combustion*, *Partially Premixed Combustion*, etcétera). Además de la bibliografía especializada, ANSYS® Fluent® 2023 R2 proporciona una guía práctica con recomendaciones sobre el uso, ventajas y limitaciones de cada uno de los modelos y submodelos [70].

Modelado de la turbulencia

Las Ecuaciones (1) a (4) son válidas para flujos laminares, aunque también pueden aplicarse para el modelado de flujos turbulentos o caóticos, tal como se indicó al inicio de la descripción. En este sentido, los cambios abruptos en la presión y la velocidad propios de este tipo de flujos suelen tratarse mediante la descomposición de Reynolds [71], [72]; dicho método posibilita representar el valor instantáneo de cada una de las variables (X) que aparecen en las ecuaciones de conservación como la suma de sus valores promediados en el tiempo (\bar{X}) y un componente fluctuante (X'):

$$X = \bar{X} + X'$$

Cuando se sustituyen los valores instantáneos de las variables en las Ecuaciones (1) a (4), se obtienen las ecuaciones de conservación para flujos turbulentos; es decir, la presión y la velocidad instantáneas son reemplazadas por sus correspondientes cantidades promediadas en el tiempo. Por otro lado, el tensor de esfuerzos viscosos ($\boldsymbol{\tau}$) es reemplazado por la suma de los esfuerzos que toman en cuenta una velocidad promediada con el tiempo y el llamado tensor de esfuerzos de Reynolds ($\boldsymbol{\tau}^{(t)}$). El significado físico de los esfuerzos de Reynolds se relaciona con la interacción entre el movimiento fluctuante y el movimiento promediado en el tiempo de un fluido [72].

La principal dificultad al modelar flujos turbulentos es describir los esfuerzos de Reynolds, los cuales deben especificarse en términos de las variables promediadas en el tiempo; para tal fin puede recurrirse a los modelos de turbulencia: un conjunto de ecuaciones de tipo algebraico o



diferencial que permiten calcular los términos de transporte turbulento de momento en las ecuaciones de flujo promediadas en el tiempo [72].

La mayoría de los modelos de turbulencia se fundamentan en el concepto de la viscosidad de remolino de Boussinesq, el cual asume que los esfuerzos de Reynolds son proporcionales a los gradientes de las componentes de la velocidad promediada en el tiempo:

$$\tau_{ij}^{(t)} = \mu^{(t)} \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right] + \delta_{ij} \frac{2}{3} \rho \kappa$$

Donde:

$\mu^{(t)}$ representa la viscosidad turbulenta, una propiedad de los flujos de este tipo.

U_i y U_j son las componentes de la velocidad promediada en el tiempo en las direcciones x_j y x_i , respectivamente,

δ_{ij} denota la función delta de Kronecker.

El objetivo de un modelo de turbulencia consiste en proporcionar expresiones matemáticas para determinar la viscosidad turbulenta [72]. De este modo, los llamados *modelos de dos ecuaciones* ofrecen un buen equilibrio entre factores como poder de procesamiento, precisión y capacidad de aplicación para una amplia variedad de problemas de flujo [60], [72]. Este tipo de modelos incorporan dos ecuaciones de transporte que determinan el valor de dos variables turbulentas. Por ejemplo, en el modelo $\kappa - \epsilon$ (Kappa-Épsilon) se resuelven dos ecuaciones de transporte, una de ellas para determinar la energía cinética turbulenta (κ) asociada a los remolinos en el flujo, y la otra para calcular la tasa de disipación viscosa de dicha energía (ϵ). En este caso, la viscosidad turbulenta está dada por la siguiente expresión:

$$\mu^{(t)} = C_\mu \rho \frac{\kappa^2}{\epsilon}$$

Donde C_μ es una constante empírica.

Otros modelos de turbulencia de dos ecuaciones son el *RNG* $\kappa - \epsilon$ y el *realizable* $\kappa - \epsilon$, los cuales son variantes del Kappa-Épsilon, así como el modelo $\kappa - \omega$ (léase Kappa-Omega) y su variante, *SST* $\kappa - \omega$. La principal diferencia entre los modelos Kappa-Épsilon y Kappa-Omega es que estos últimos incorporan modificaciones para considerar los efectos asociados a bajas velocidades y compresibilidad de los fluidos, así como variaciones



en los esfuerzos de corte en los flujos [72], [73]. El modelo Kappa-Épsilon ha sido elegido en varios estudios para representar la dispersión turbulenta de gases tóxicos en plantas químicas con obstáculos (edificios, equipos de proceso, etcétera) [45], [46], [56] y sin ellos [43].

Otros modelos de dos ecuaciones han sido considerados en algunos estudios sobre dispersiones de gases tóxicos en espacios confinados. Por ejemplo, en uno de estos estudios se probaron diferentes modelos de turbulencia de dos ecuaciones para determinar cuál representa mejor la dispersión de una corriente de amoníaco en una planta de procesamiento de alimentos [74]. En este caso, se determinó que el modelo **RNG $k - \epsilon$** proporciona resultados más fieles a los datos experimentales en comparación con los otros modelos.

Aunados a las ecuaciones de conservación energética y transporte de especies químicas, los softwares CFD cuentan con acervos de modelos de turbulencia. Por ejemplo, en la Figura 6 se observa la interfaz de selección de modelos con que cuenta el programa ANSYS® Fluent® 2023 R2 [69]. En este caso, es posible acceder a estos modelos por medio de la pestaña Models, la cual está incluida en el apartado Setup de ANSYS® Workbench™, tal como se indicó previamente para las ecuaciones de conservación de energía y de transporte de especies químicas. Como puede verse en la Figura 6, además de la selección de los modelos de turbulencia, ANSYS® Fluent® 2023 R2 permite especificar algunos sub-modelos y características especiales para una representación más precisa de las fluctuaciones turbulentas. En concreto, es posible elegir el tipo de tratamiento matemático que se establecerá en la cercanía de las paredes sólidas en el dominio computacional (*Near-Wall Treatment*), modificar los valores pre-establecidos para las constantes de los modelos de turbulencia (*Model Constants*) e incluir sub-modelos especiales relacionados con la producción de turbulencia (*Viscous Heating*, *Curvature Correction*, *Production Kato-Launder* y *Production Limiter*). En este caso, ANSYS® Fluent® 2023 R2 proporciona una guía práctica con recomendaciones sobre el uso, ventajas y limitaciones de cada uno de estos modelos y sub-modelos de turbulencia [70].

FIGURA 6. Interfaz de selección de modelos de turbulencia en la biblioteca de modelos de ANSYS® Fluentm 2023 R2.



Definición de las propiedades de transporte

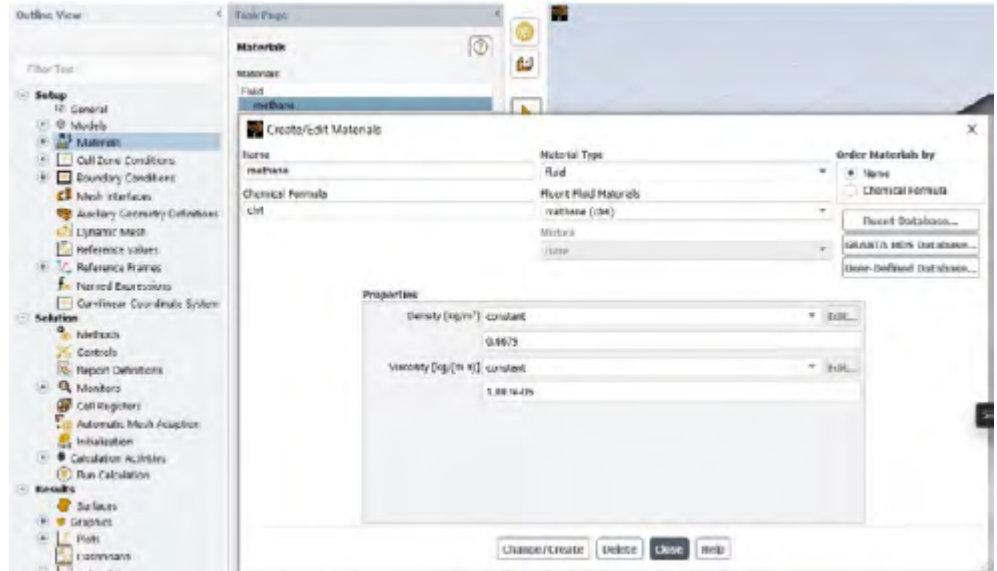
La viscosidad, densidad, conductividad térmica y difusividad molecular (conocidas como propiedades de transporte) son parteaguas en la representación de los fenómenos involucrados, y para cualquier sistema en particular deben especificarse al desarrollar un modelo basado en CFD. Asimismo, debe definirse si el valor para cada una será constante durante la simulación numérica del modelo, o bien si tendrán dependencia con alguna variable de interés, como la temperatura o la presión [38], [49].

En el caso de los modelos computacionales que se proponen representar la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas, es necesario especificar las propiedades de transporte para el aire y para los componentes principales de las emisiones de gases tóxicos, incluyendo algunos de los mencionados previamente.

Una característica primordial de los programas de CFD es que cuentan con inventarios de componentes químicos y sus propiedades de transporte. Por ejemplo, en la Figura 7 se aprecia la interfaz de selección de componentes, así como de sus propiedades, de ANSYS® Fluent™ 2023 R2 [69]. Ahora bien, es posible desplegar la lista por medio de la pestaña Materials, la cual está incluida en el apartado Setup de ANSYS® Workbench™. En este caso se ha hecho la selección del metano (CH₄); aparecen en la interfaz el identificador (Name), la fórmula química (ChemicalFormula), la densidad (Density) y la viscosidad (Viscosity). Si el usuario lo desea, puede modificar a conveniencia los valores de éstas y otras propiedades.



FIGURA 7. Interfaz de selección de componentes químicos en la librería de materiales de ANSYS® Fluent™ 2023 R2.



Especificación de las condiciones de frontera

El desarrollo de un modelo CFD requiere especificar las condiciones en las fronteras del dominio computacional, es decir, entradas, salidas, paredes, entre otras. Dichas condiciones pueden ser velocidades, flujos mássicos, presiones, temperaturas, fracción mássica de los componentes, y variables turbulentas [38], [49].

En los estudios del modelado de la dispersión de gases en plantas químicas, la condición que por lo general se establece en las entradas del sistema es la velocidad del viento. Tal condición puede adoptar un valor constante [44], [47] o representarse mediante un perfil de valores en función de, por ejemplo, la altitud con respecto al nivel del suelo [31], [48], [54]. En este último caso con frecuencia se utiliza la siguiente expresión:

$$u = u_{\text{ref}} \left(\frac{z}{z_{\text{ref}}} \right)^{\gamma}$$

Donde:

u es la velocidad del viento;

z es la altura;

u_{ref} es la velocidad del viento que corresponde a una altura de referencia (z_{ref});

γ es un parámetro que depende de la estabilidad atmosférica [75].

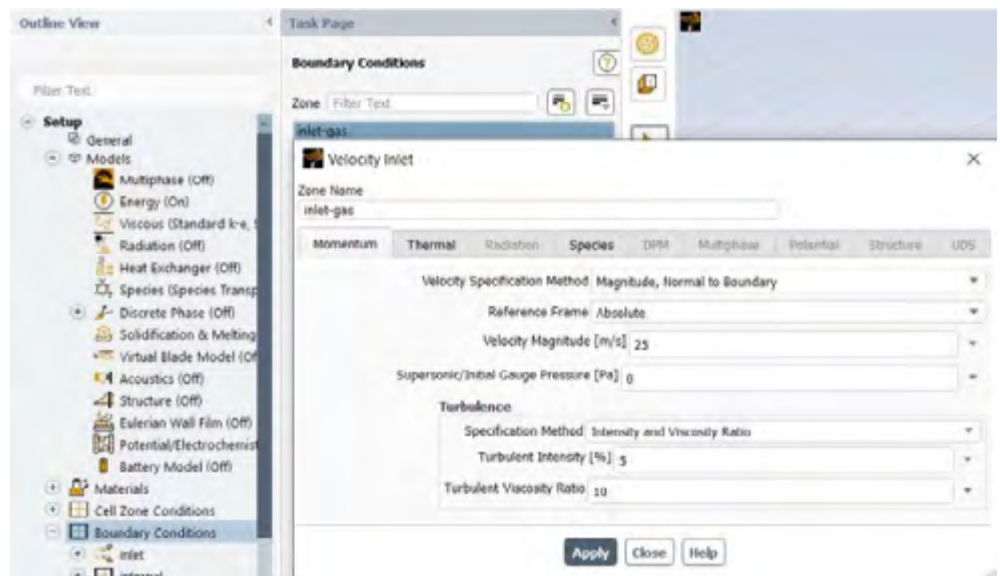
Además de las condiciones de flujo, es posible definir los valores de la temperatura (en los casos no-isotérmicos), la humedad y las variables turbulentas.



Otras fronteras a considerar en las plantas químicas son los puntos donde se origina la emisión de gases tóxicos; allí puede establecerse cierta cantidad de gases que fluye durante un lapso concreto (el flujo másico de la emisión). También es posible especificar la temperatura y las variables turbulentas.

En la Figura 8 se muestra la interfaz de especificación de condiciones frontera del programa ANSYS®Fluent™ 2023 R2 [69]. Es posible acceder a esta interfaz por medio de la pestaña Boundary Conditions en el apartado Setup de ANSYS® Workbench™.

FIGURA 8. Interfaz de selección de componentes químicos en la librería de materiales de ANSYS® Fluent™ 2023 R2.



En la Figura 8, la frontera de ejemplo corresponde a la entrada del gas tóxico en el dominio computacional de una planta química. Dado que en dicha frontera se especificará la velocidad, los valores incluyen la dirección del flujo de gas tóxico respecto a la entrada (*Velocity Specification Method*), la magnitud de la velocidad (*Velocity Magnitude*) y las variables turbulentas, como la intensidad de la turbulencia (*Turbulent Intensity*) y proporción de viscosidad turbulenta (*Turbulent Viscosity Ratio*). Cabe mencionar que es posible especificar otras variables en las fronteras de un dominio computacional, como el flujo másico y la presión. ANSYS® Fluent™ 2023 R2 proporciona una guía con recomendaciones sobre la elección y especificaciones de cada condición de frontera disponible en función de las aplicaciones a llevar a cabo [69].

Respecto a las salidas en las plantas químicas, pueden definirse desde dos diferentes enfoques: valor fijo o flujo saliente (en inglés, *outflow*). En el primero de estos enfoques, se establece una presión constante que normalmente corresponde a la presión de la ubicación de la planta química



TABLA 1. Condiciones de frontera en algunos estudios recientes sobre dispersiones de gases tóxicos en plantas químicas.

SISTEMA	CONDICIONES DE ENTRADA	CONDICIÓN DE SALIDA	REFERENCIA
Emisión de Cl ₂ en una planta química	Perfil de velocidad del viento: $v_{\text{ref}} = 1.9, 5.6$ m/s $z_{\text{ref}} = 10$ m $\gamma = 0.07, 0.15$ Flujo de Cl ₂ = 1.15 kg/s	Presión atmosférica	[30]
Emisión de NH ₃ en una planta química	Velocidad del viento: $U = 3, 5$ m/s Flujo de NH ₃ = 4.2, 3 kg/s Temperatura = 12.5, 24 °C	Flujo saliente	[43]
Emisión de HF en una planta química	Velocidad del viento: $U = 56, 4.2, 5.4$ m/s. Flujo de HF = 469.2, 175.1, 171.6 gal/min	Presión atmosférica	[44]
Emisión de gases pesados en una planta química	Perfil de velocidad del viento: $v_{\text{ref}} = 0.2$ m/s $z_{\text{ref}} = 3$ m $\gamma = 0.35$ Flujo de gases pesados = no especificado	Flujo saliente	[54]
Emisión de HF en una planta química	Velocidad del viento: $U = 4.2, 5.4$ m/s. Flujo de HF = 0.011 m ³ /s Temperatura = 36, 26.5 °C	Presión atmosférica	[61]
Emisión de Cl ₂ en una planta química	Velocidad del viento: $U = 5$ m/s. Velocidad equivalente al flujo de Cl ₂ = 5 m/s	Presión atmosférica	[62]
Emisión de Cl ₂ en una planta química	Velocidad del viento: $U = 0.1, 1$ m/s Flujo de Cl ₂ = 20 kg/h	Presión atmosférica	[64]

[31], [47], [58], [61], [62], [64], [66], [67]. En el segundo de estos enfoques, se extrapolan los valores de las variables en las entradas (velocidades, presiones), con el fin de estimar sus contrapartes en las salidas [43], [54], [65]. Las fronteras de salida en el programa comercial ANSYS® Fluent® 2023 R2 [69] se especifican de forma similar a las de entrada (Figura 8).

Los obstáculos (equipos, cuartos de control, etcétera) y superficies sólidas en la planta química se tratan como muros en el dominio computacional y se les asigna la condición de *no-deslizamiento*, en la cual la velocidad de la corriente de gases será nula.

En la Tabla 1 se presentan las condiciones de frontera reportadas en algunos estudios recientes sobre la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas.



SISTEMA	CONDICIONES DE ENTRADA	CONDICIÓN DE SALIDA	REFERENCIA
Emisión de NH_3 en una planta química	Perfil de velocidad del viento: $u_{\text{ref}} = 1.5 \text{ m/s}$ $z_{\text{ref}} = 2 \text{ m}$ $\gamma = 0.4$ Velocidad equivalente al flujo de $\text{NH}_3 = 209.2 \text{ m/s}$	Presión atmosférica	[66]
Emisión de $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ en una planta química	Velocidad del viento: $U = 0.1, 0.5 \text{ m/s}$ Flujo de $\text{HF} = 0.234 \text{ m}^3/\text{s}$	Presión atmosférica	[67]

Solución numérica de un modelo basado en *cfd*

Una vez definidas las ecuaciones que representarán los fenómenos relevantes, así como las propiedades de los fluidos y las condiciones de frontera e iniciales en el sistema, se procede con la solución numérica del modelo. Los programas de *CFD* se fundamentan en el *método del volumen finito*.

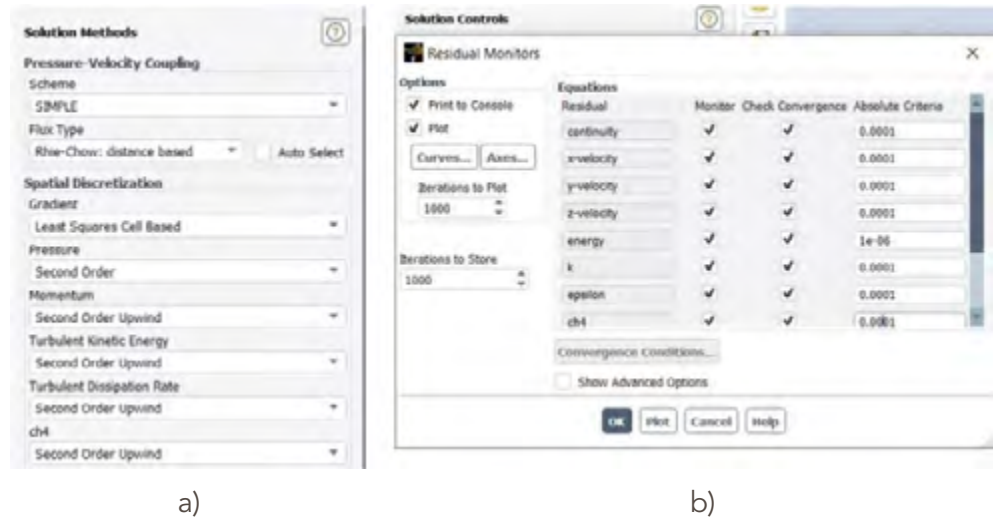
El algoritmo de solución en dichos programas consta de los siguientes pasos [38]:

- Integración de las ecuaciones gobernantes a través de los volúmenes de control que constituyen la malla del dominio computacional.
- Transformación de las ecuaciones integrales resultantes en un sistema de ecuaciones algebraicas.
- Solución del sistema de ecuaciones algebraicas por medio de un método numérico.

Los fenómenos físicos en el sistema pueden llegar a ser complejos y poseer un comportamiento matemático no lineal, por lo que es necesario contar con un enfoque basado en un procedimiento de solución iterativo. El método por antonomasia en *CFD* es el algoritmo *SIMPLE* (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) [66], el cual establece el acoplamiento entre las variables de presión y de velocidad [31], [43], [44].

Dada la naturaleza iterativa del procedimiento, otro de los parámetros esenciales que deben especificarse en la etapa de solución numérica del modelo en *CFD* son los criterios de convergencia numérica; es decir, la tolerancia cuantitativa de la diferencia entre los resultados de una iteración con respecto a la anterior: una vez que se satisfacen los criterios, las iteraciones terminan, y los resultados obtenidos en la última iteración se consideran definitivos. Por lo general, los criterios de convergencia en *CFD* se determinan a partir de los residuales (en inglés, *residuals*) de las variables en las

FIGURA 9. Interfaz de especificación de los controles de solución numérica del modelo computacional en ANSYS® Fluent™ 2023 R2: a) métodos de solución, y b) residuales.



Adicionalmente, además de las condiciones de frontera, se deben detallar las condiciones iniciales del proceso bajo análisis en el caso de los sistemas no estacionarios; en estado estacionario, debe formularse una suposición inicial para comenzar los cálculos iterativos en la solución de las simulaciones.

Posprocesamiento

La etapa de posprocesamiento consiste en analizar la calidad de la solución numérica obtenida. En este sentido, las herramientas de posprocesamiento CFD han experimentado un importante desarrollo en años recientes. La mayoría de los softwares CFD poseen la capacidad de exportar datos para procesarlos *a posteriori* [53].

Los programas de CFD cuentan con instrumentos para la visualización de resultados debido a la creciente popularidad de las estaciones de trabajo o *workstations*, gracias a que cuentan con excepcionales capacidades gráficas; por ejemplo, gráficos vectoriales, gráficos de contorno, gráficas de superficie en 2D y 3D, líneas de flujo y rastreo de partículas. También es posible visualizar resultados dinámicos mediante el uso de herramientas de animación. El análisis de los resultados ofrece información de las variaciones



locales en el flujo, la presión, la temperatura, las concentraciones, etcétera. Las herramientas de visualización y análisis recurrentes en los estudios sobre dispersión de gases tóxicos en plantas químicas comprenden mayormente sus perfiles de concentración; estos datos pueden visualizarse como planos, contornos y superficies de valores constantes, también llamadas *isosuperficies* [69].

Con el fin de ejemplificar este último aspecto, así como la aplicación de un programa de CFD en el modelado y la simulación de dispersión de gases tóxicos en plantas químicas, en la siguiente sección se presenta un caso de aplicación de esta herramienta computacional.

Caso de estudio

En esta sección se presentan generalidades de un modelo en CFD para la dispersión de metano (CH_4) a través de una planta química. En primer lugar, se establece como dominio computacional la planta química expuesta en la Figura 2, cuyas dimensiones son 20 x 20 x 10 m. Se proporciona también el área superficial ocupada por cada uno de los elementos internos: cuarto de control, 16 m²; tanque de almacenamiento, 9 m²; reactor químico, 2 m²; cada columna de destilación, 4 m².

En concordancia con la metodología, debe procederse con el mallado del dominio computacional: se generó una *malla no estructurada* conformada por elementos tetraédricos (Figura 3). Especialmente, se aplicó un refinamiento en las cercanías de las paredes de los elementos internos previamente descritos, con el fin de tener una representación óptima de los fenómenos relacionados con la dispersión del CH_4 . De este modo, la totalidad de elementos que conformaron la malla fue de 82 566 celdas.

Posteriormente, es necesario definir los modelos que deben representar la dispersión de CH_4 en la planta química. A tal efecto, se adoptó el enfoque basado en las ecuaciones de conservación de masa y de cantidad de movimiento (Ecuaciones (1) y (2)). En este caso de estudio, se consideró la ecuación para el transporte de especies químicas, siendo estas el aire y el CH_4 (Ecuación (4)). Por otro lado, el modelo Kappa-Épsilon sirvió de base para representar los efectos turbulentos. Se consideró un sistema a temperatura constante, por lo que se omitió la ecuación de energía (Ecuación (3)).



Tabla 2. Propiedades de transporte del aire y del CH₄ utilizadas en el caso de estudio.

PROPIEDAD	CH ₄	AIRE
Viscosidad [kg/(m s)]	1.087 X 10 ⁻⁵	1.7894 X 10 ⁻⁵
Densidad [kg/m ³]	0.6679	1.225

Tabla 3. Condiciones de frontera en el caso de estudio.

VARIABLE	ENTRADA DE CH ₄	ENTRADA DEL VIENTO
Velocidad (m/s)	25	1.5
Intensidad de la turbulencia (%)	5	5
Proporción de la viscosidad turbulenta (-)	10	10
Temperatura (K)	300	300

La etapa siguiente consiste en definir las propiedades de los fluidos involucrados, así como las condiciones de frontera del dominio computacional de la planta química. Los parámetros de transporte del aire y del CH₄ fueron obtenidos directamente del inventario de materiales de ANSYSFluent® 2023 R2 (Tabla 2); el coeficiente de difusión entre el ch₄ y el aire proporcionado por dicho programa fue de 2.88 X 10⁻⁵ m²/s.

Respecto a las fronteras de entrada, se estableció que el ch₄ proviene de una fuga en el reactor de la planta química; se impuso que dentro de la planta el viento tiende a moverse hacia las columnas I y II, arrastrando el CH₄ en esa dirección. En la Tabla 3 se presenta la especificación de las condiciones en las fronteras de entrada de la planta química.

En este caso, se especificó como condición de salida que la presión tuviera un valor de 101 325 Pa, es decir, 1 atmósfera.

Después de que se han establecido los últimos detalles de la etapa de preprocesamiento, se continúa con la definición de los parámetros de la solución numérica del modelo computacional. En esta aplicación, se especificó que el acoplamiento entre la presión y la velocidad se llevara a cabo por medio del algoritmo SIMPLE. En cuanto a los criterios de convergencia numérica, se estableció que los residuales alcanzaran un valor del orden de 10⁻⁴ para las variables de todas las ecuaciones del modelo computacional.

Una vez satisfechos los criterios de convergencia, se procede al análisis de resultados en la etapa de posprocesamiento. En la Figura 10 se muestran las isosuperficies en color cobrizo, obtenidas de la simulación de la dispersión de CH₄ a través de la planta química; éstas fueron generadas en el apartado Results del programa ANSYS® Fluent™ 2023 R2.

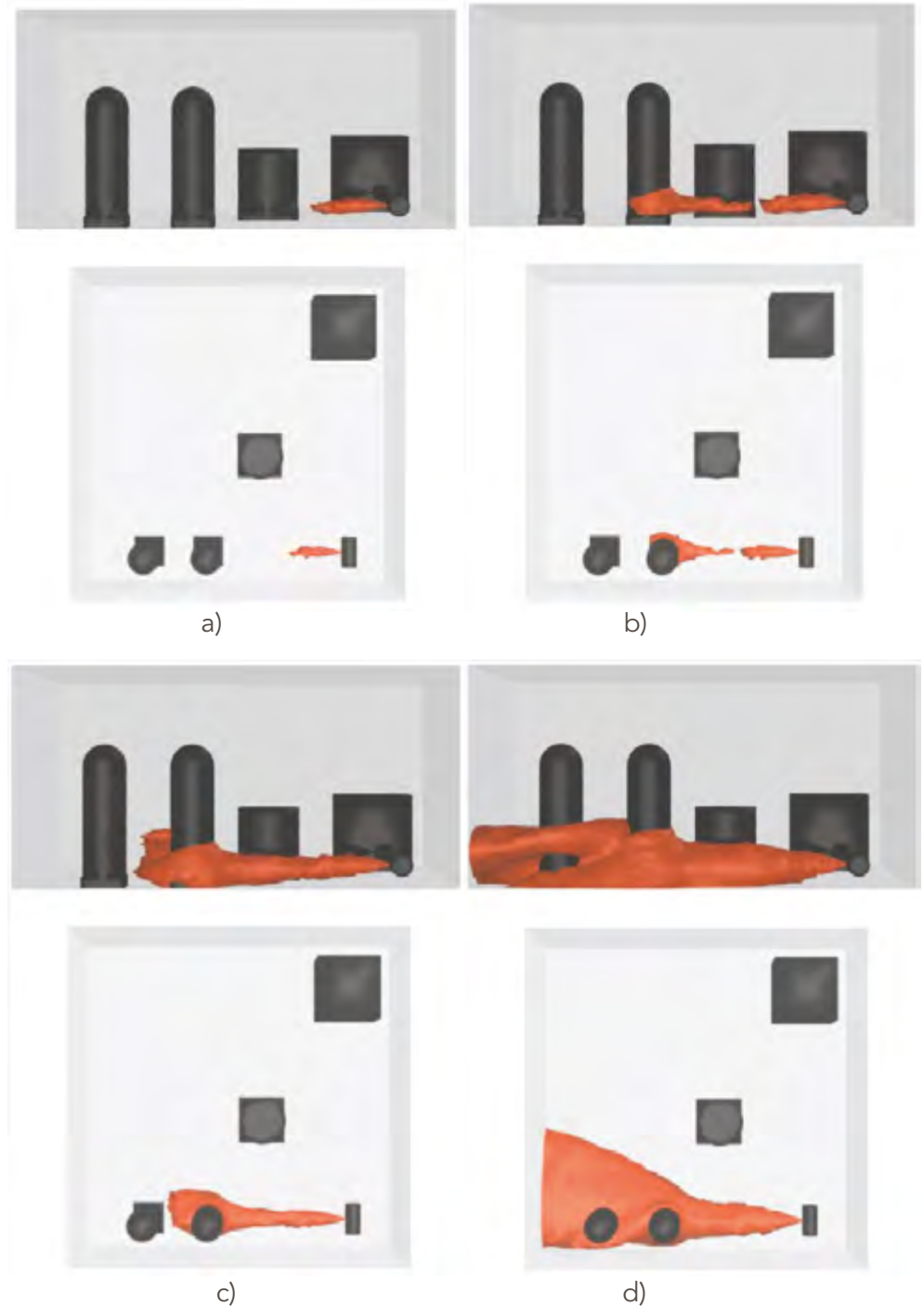


FIGURA 10. Isosuperficies para distintos valores de la fracción másica de CH_4 en una planta química (vista lateral y vista superior):
a) 0.020, b) 0.015,
c) 0.011, d) 0.004.

Cada isosuperficie mostrada en la Figura 10 representa la unión de las caras de todos los elementos de volumen de la malla que comparten un mismo valor de la fracción másica de CH_4 . Así, por ejemplo, la isosuperficie mostrada en la Figura 10a se compone de pocos elementos, cada uno con una fracción másica de 0.02; dado que dichos elementos son los más cercanos al reactor químico, puede considerarse que esta superficie marca el inicio de la fuga del CH_4 hacia el resto de la planta química. Por otro lado, la Figura 10d muestra la superficie compuesta por elementos con una fracción másica de 0.004. Se observa que el CH_4 alcanza esta concentración a una mayor distancia respecto al reactor, trascendiendo incluso la columna de destilación más lejana (columna II). Esta superficie evidencia el alcance de la nube de CH_4 en la planta.



Es importante obtener este tipo de perfiles para las especies tóxicas, como el CH_4 , porque permiten determinar si en algún punto específico de la planta las concentraciones superarán los umbrales estandarizados; tal como se indicó previamente, una situación así supondría un escenario de riesgo tanto para el personal de la planta como el medio ambiente. A partir de esta información, se trazan estrategias de prevención (mantenimiento preventivo, análisis de las condiciones de operación de los equipos, etcétera), o bien de mitigación (reubicación de las rutas de evacuación, realización de simulacros que consideren estas condiciones, entre otras). Estos puntos enfatizan cuán imprescindibles son las técnicas de CFD en los análisis de riesgo que se llevan a cabo en las plantas químicas, especialmente en aquellas donde existe el riesgo de fuga de gases tóxicos.

Conclusiones y perspectivas

Tras la revisión del estado del arte presentada en este trabajo, se deduce que los estudios que utilizan CFD son fundamentales en el modelado y análisis de la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas; dicha labor sirve como referente principal en las tareas de análisis de consecuencia, la revisión de estrategias de mitigación y la evaluación del riesgo.

En comparación con los modelos de dispersión convencionales, la ventaja de los modelos CFD es su capacidad para predecir las interacciones entre las obstrucciones y el flujo gaseoso, especialmente cuando se dispersa en entornos geométricos complejos. Los resultados de la simulación CFD, los modelos de exposición y límites de toxicidad ayudan a identificar áreas peligrosas en las plantas químicas durante la planificación y evaluación de decisiones ante escenarios de riesgo. Asimismo, el modelado CFD se puede utilizar para evaluar el desempeño de los sistemas de mitigación para controlar el impacto de la liberación y dispersión de sustancias químicas tóxicas. Además de la concentración tóxica, el tiempo de exposición es otro parámetro importante para evaluar cuándo una exposición aguda a gases tóxicos supone una amenaza a los individuos en los modelos de dosis-respuesta.

El modelado CFD también proporciona información sobre el historial de concentración de los gases tóxicos en cualquier ubicación dentro y en los alrededores de la planta química. Junto con algunas funciones estadísticas, como las *probit*, este enfoque permite en principio calcular la probabilidad de daño y muerte por exposición a una sustancia tóxica. Es decir, re-



sulta factible realizar análisis de riesgo cuantitativos para una liberación accidental de gases tóxicos. Por otra parte, la generación del área geométrica de interés en un código CFD es un paso esencial para la estimación de resultados realistas. Sin embargo, la dispersión de gases tóxicos a menudo afecta un área relativamente grande en una planta química; en este caso, puede suponer un desafío representar de manera detallada la ubicación y la geometría de cada obstáculo.

Es importante mencionar que, incluso si se pueden generar geometrías complejas con alta calidad en los modelos CFD, la capacidad de cómputo disponible para los cálculos numéricos es una limitación severa en el monitoreo de la dispersión de gases en tiempo real; no obstante, existen estrategias que permiten superar estos inconvenientes. Respecto a la discretización de los dominios computacionales representativos de las plantas químicas, se simulan casos sencillos, ensayando varias mallas con diferentes números de elementos; la finalidad de este ejercicio es determinar qué tanto cambia la solución obtenida para cada una de las mallas. Si el cambio no es significativo, puede elegirse la malla con menor número de elementos, ya que supondrá menor tiempo de cómputo y costo de recursos computacionales para la solución del modelo.

En cuanto a la selección de las ecuaciones que representen el fenómeno de dispersión, una alternativa para tener un manejo eficiente de los recursos de cómputo disponibles, consiste en realizar las simulaciones añadiendo una por una las ecuaciones gobernantes. Por ejemplo, se puede empezar por efectuar una simulación sin considerar el modelo de turbulencia, y obtener así una solución primaria. Posteriormente, se puede incorporar el modelo de turbulencia y continuar la simulación desde esta solución primaria hasta obtener una solución final. Este enfoque posee la ventaja adicional de asegurar una mejor convergencia numérica. La implementación de estas estrategias puede contribuir al desarrollo a corto plazo del modelado de la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas mediante técnicas de CFD; a modo de ejemplo, se puede pensar en sistemas hasta ahora poco explorados, como las biorrefinerías, donde se propiciaría el análisis del comportamiento de los gases tóxicos propios de ese tipo de industrias.





Agradecimientos

Los autores agradecen al Fondo para el Desarrollo del Conocimiento UAQ 2021, con el registro de proyecto FCQ-2021-16, por el apoyo financiero otorgado para el desarrollo de este trabajo.

Referencias

- [1] D. A. Crowl y J. F. Louvar, *Chemical Process Safety: Fundamentals with Applications*, 2nd. ed. Upper Saddle River, NJ, USA: Prentice Hall PTR, 2002.
- [2] R. Shen, Z. Jiao, T. Parker, Y. Sun y Q. Wang, "Recent application of Computational Fluid Dynamics (CFD) in process safety and loss prevention: A review", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 67, no. 104252, 2020.
- [3] S. Bathrinath, J. Devaganesh, B. Santhi y S. Saravanasankar, "The adverse human health effects due to ammonia, hydrogen sulphide and chlorine in process industry: A review", *IJMPERD*, vol. 8, pp. 394-402, 2018.
- [4] G. W. Hoyle y E. R. Svendsen, "Persistent effects of chlorine inhalation on respiratory health", *Ann. NY Acad. Sci.*, vol. 1378, no. 1, pp. 33-40, 2016.
- [5] J. A. Kim, S. Y. Yoon, S. Y. Cho, J. H. Yu, H. S. Kim, G. I. Lim y J. S. Kim, "Acute health effects of accidental chlorine gas exposure", *Ann. Occup. Env. Med.*, vol. 26, no. 29, pp. 1-11, 2014.
- [6] S. Achanta y S. E. Jordt, "Toxic effects of chlorine gas and potential treatments: A literature review", *Toxicol. Mech. Method.*, vol. 31, no. 4, pp. 244-256, 2019.
- [7] Z. Salamonowicz, M. Majder-Lopatka, A. Dmochowska, W. Rogula-Kozłowska, A. Piechota-Polanczyk y A. Polanczyk, "Ammonia dispersion in the closed space of an ammonia engine room with forced ventilation in an industrial plant", *Atmosphere (Basel)*, vol. 13, no. 7, pp. 1062-1089, 2022.
- [8] B. M. Sundblad, B. M. Larsson, F. Acevedo, L. Ernstgård, G. Johanson, K. Larsson y L. Palmberg, "Acute respiratory effects of exposure to ammonia on healthy persons", *Scand. J. Work Env. Hea.*, vol. 30, no. 4, pp. 313-321, 2004.
- [9] M. S. Yarandi, M. Mahdinia, J. Barazandeh y A. Soltanza-



- deh, "Evaluation of the toxic effects of ammonia dispersion: Consequence analysis of ammonia leakage in an industrial slaughterhouse", *Med. Gas Res.*, vol. 11, no. 1, pp. 24-29, Feb. 2021.
- [10] D. Leduc, P. Gris, P. Lheureux, P. A. Gevenois, P. De Vuyst y J. C. Yernault, "Acute and long term respiratory damage following inhalation of ammonia", *Thorax*, vol. 47, no. 9, pp. 755-757, 1992.
- [11] R. E. de la Hoz, D. P. Schlueter y W. N. Rom, "Chronic lung disease secondary to ammonia inhalation injury: a report on three cases", *Am. J. Ind. Med.*, vol. 29, no. 2, pp. 209-214, 1996.
- [12] D. P. Kelly, "A review of the inhalation toxicity of hydrogen fluoride", *HOTWC*, pp. 12-14, 1998.
- [13] W. J. Brock, "Hydrogen fluoride: How toxic is toxic? (A hazard and risk analysis)", *HOTWC*, pp. 559-566, 1999.
- [14] J. Y. Na, K. H. Woo, S. Y. Yoon, S. Y. Cho, I. U. Song, J. A. Kim y J. S. Kim, "Acute symptoms after a community hydrogen fluoride spill", *Ann. Occup. Env. Med.*, vol. 25, pp. 1-12, 2013.
- [15] S. Dugheri, A. Bonari, I. Pompilio, A. Monti, N. Mucci y G. Arcangeli, "Innovative monitoring of atmospheric gaseous hydrogen fluoride", *Int. J. Anal. Chem.*, vol. 2016, no. 2129053, 2016.
- [16] B. A. Plog y P. Quinlan, *Fundamentals of Industrial Hygiene*, 5th. ed. Itasca, IL, USA: NSC Press, 2002.
- [17] C. R. Roelofs, E. M. Barbeau, M. J. Ellenbecker y R. Moure-Eraso, "Prevention strategies in industrial hygiene: A critical literature review", *Am. Ind. Hyg. Assoc. J.*, vol. 64, no. 1, pp. 62-67, 2003.
- [18] American Conference of Governmental Industrial Hygienists (ACGIH), *Threshold Limit Values for Chemical Substances and Physical Agents and Biological Exposure Indices*, Cincinnati, OH, USA: ACGIH Signature Publications, 2023.
- [19] *Permissible Exposure Limits - Annotated Tables*, Occupational Safety and Health Administration (OSHA). [En línea]. Disponible: <https://www.osha.gov/annotated-pels/>. Feb. 14, 2024.
- [20] Secretaría del Trabajo y Previsión Social, Abr., 2024, *NOM-010-STPS-2014*, "Agentes químicos contaminantes del ambiente laboral - Reconocimiento, evaluación y control", *Diario Oficial de la Federación*. [En línea]. Disponible: https://dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5342372&fecha=28/04/2014



- [21] R. K. Goyal y N.M. Al-Jurashi, "Gas dispersion models", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 4, no. 3, pp. 151-160, 1991.
- [22] F. Pasquill, "The estimation of the dispersion of wind-borne material", *Meteoro. Mag.*, vol. 90, pp. 20-49, 1961.
- [23] F. A. Gifford, "Use of routine meteorological observations for estimating atmospheric dispersion", *Nucl. Safety*, vol. 2, pp. 47-51, 1961.
- [24] C. S. Borrego, M. S. Coutinho y M. J. Costa, "Introduction of terrain roughness effects into a Gaussian dispersion model", *Sci. Total Environ.*, vol. 99, no. 1-2, pp. 153-161, 1990.
- [25] T. O. Spicer y J. A. Havens, "Field test validation of the DEGADIS model", *J. Hazard. Mater.*, vol. 16, pp. 231-245, 1987.
- [26] J. P. Kunsch y T. K. Fanneløp, "Unsteady heat-transfer effects on the spreading and dilution of dense cold clouds", *J. Hazard. Mater.*, vol. 43, no. 3, pp. 169-193, 1995.
- [27] A. Kumar, A. Mahurkar y A. Joshi, "Study of the spread of a cold instantaneous heavy gas release with surface heat transfer and variable entrainment", *J. Hazard. Mater.*, vol. 101, no. 2, pp. 157-177, 2003.
- [28] S. R. Hanna, S. Tehranian, B. Carissimo, R. W. Macdonald y R. Lohner, "Comparisons of model simulations with observations of mean flow and turbulence within simple obstacle arrays", *Atmos. Environ.*, vol. 36, no. 32, pp. 5067-5079, 2002.
- [29] J. Xing, Z. Liu, P. Huang, C. Feng, Y. Zhou, D. Zhang y F. Wang, "Experimental and numerical study of the dispersion of carbon dioxide plume", *J. Hazard. Mater.*, vol. 256, pp. 40-48, 2013.
- [30] P. Dawson, D. E. Stock y B. Lamb, "The numerical simulation of airflow and dispersion in three-dimensional atmospheric recirculation zones", *J. Appl. Meteorol. Clim.*, vol. 30, no. 7, pp. 1005-1024, 1991.
- [31] J. Wang, X. Yu y R. Zong, "A dynamic approach for evaluating the consequences of toxic gas dispersion in the chemical plants using CFD and evacuation modelling", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 65, no. 3, 2020 DOI: 10.1016/j.jlp.2020.104156
- [32] M. A. McBride, A. B. Reeves, M. D. Vanderheyden, C. J. Lea y X. X. Zhou, "Use of advanced techniques to model the dispersion of chlorine in complex terrain", *Process Saf. Environ.*, vol. 79, no. 2, pp 89-102, 2001.
- [33] S. E. Gant y G. T. Atkinson, "Dispersion of the vapour cloud in the Buncefield inci-



- dent", *Process Saf. Environ.*, vol. 89, no. 6, pp. 391-403, 2011.
- [34] P. Joshi, P. Bikkina y Q. Wang, "Consequence analysis of accidental release of supercritical carbon dioxide from high pressure pipelines", *Int. J. Greenh. Gas Con.*, vol. 55, pp. 166-176, 2016.
- [35] S. Sklavounos y F. Rigas, "Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles", *J. Hazard. Mater.*, vol. 108, no. 1-2, pp. 9-20, Apr. 2004.
- [36] G. Li, J. Wang, M. Wang, Y. Lin, X. Yu y R. Zong, "Experimental and numerical study of heavy gas dispersion in presence of obstacle motion", *Process Saf. Environ.*, vol. 177, pp. 1494-1505, 2023.
- [37] P. K. Kundu y I. M. Cohen, *Fluid Mechanics*, 2nd. ed., Orlando, FL, USA: Academic Press, 2002.
- [38] H. K. Versteeg y W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, 2nd. ed., Essex, UK: Pearson Education Limited, 2007.
- [39] A. Chakrabarty, S. Mannan y T. Cagin, *Multiscale Modeling for Process Safety Applications*, Oxford, UK: Butterworth-Heinemann, 2015.
- [40] M. Pontiggia, M. Derudi, M. Alba, M. Scaioni y R. Rota, "Hazardous gas releases in urban areas: Assessment of consequences through CFD modelling", *J. Hazard. Mater.*, vol. 176, no. 1-3, pp. 589-596, 2010.
- [41] ANSYS, *Workbench User's Guide*, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.
- [42] ANSYS, *DesignModeler User's Guide*, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.
- [43] D. S. Min, S. Choi, E-Y. Oh, J. Lee, C. G. Lee, K-Y. Choi y S. Jung, "Numerical modelling for effect of water curtain in mitigating toxic gas release", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 63, no. 103972, 2020.
- [44] H. Lim, K. Um y S. Jung, "A study on effective mitigation system for accidental toxic gas releases", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 49, part. B, pp. 636-644, 2017.
- [45] V. Busini, V y R. Rota, "Influence of the shape of mitigation barriers on heavy gas dispersion", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 29, pp. 13-21, 2014.
- [46] V. Busini, M. Lino y R. Rota, "Influence of large obstacles and mitigation barriers on heavy gas cloud dispersion: a liquefied natural gas case-study", *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 51, no. 22, pp. 7643-7650, 2012.



- [47] M. Siddiqui, S. Jayanti y T. Swaminathan, "CFD analysis of dense gas dispersion in indoor environment for risk assessment and risk mitigation", *J. Hazard. Mater.*, vol. 209, pp. 177-185, 2012.
- [48] R. Vázquez Román, C. Díaz Ovalle, E. Quiroz Pérez y M. S. Mannan, "A CFD-based approach for gas detectors allocation", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 44, pp. 633-641, Nov. 2016.
- [49] B. Andersson, R. Andersson, L. Hakansson, M. Mortensen, R. Sudiyo, B. Van Wachem, *Computational Fluid Dynamics for Engineers*, New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2011.
- [50] R. Eymard, T. Gallouët y R. Herbin, "Finite Volume Methods" en *Handbook of Numerical Analysis*, P. G. Ciarlet y J. L. Lions, Eds., Amsterdam, Netherlands: North Holland Publishing, 2000, pp. 713-1018.
- [51] G. Raithby, P. Galpin y J. van Doormaal, "Prediction of heat and fluid flow in complex geometries using general orthogonal coordinate", *Numerical Heat Transfer*, vol. 9, no. 2, pp. 125-142, 1986.
- [52] ANSYS, *Meshing User's Guide*, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.
- [53] J. Tu, G. H. Yeoh y C. Liu, *Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach*, Oxford, UK: Butterworth-Heinemann, 2018.
- [54] L. Dong, H. Zuo, L. Hu, B. Yang, L. Li y L. Wu, "Simulation of heavy gas dispersion in a large indoor space using CFD model", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 46, pp. 1-12, 2017.
- [55] B. Zhang y G. M. Chen, "Quantitative risk analysis of toxic gas release caused poisoning - A CFD and dose-response model combined approach", *Process Saf. Environ.*, vol. 88, no. 4, pp. 253-262, 2010.
- [56] B. Zhang, Y. Liu y S. Qiao, "A quantitative individual risk assessment method in process facilities with toxic gas release hazards: a combined scenario set and CFD approach", *Process Saf. Prog.*, vol. 38, no. 1, pp. 52-60, 2019.
- [57] R. B. Bird, W. E. Stewart y E. N. Lightfoot, *Fenómenos de Transporte*, 2nd. ed., México D. F., México: Limusa Wiley, 2006.
- [58] P. Kassomenos, A. Karayannis, I. Panagopoulos, S. Karakitsios y M. Petrakis, "Modelling the dispersion of a toxic substance at a workplace", *Environmental Modelling & Software*, vol. 23, no. 1, pp. 82-89, 2008.



- [59] C. Diaz Ovalle, R. Vazquez Roman, R. Lesso Arroyo y S. Mannan, "A simplified steady-state model for air, water and steam curtains", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 25, no 6, pp. 974-981, Nov. 2012.
- [60] J. Kuipers y W. P. M. van Swaaij, "Computational fluid dynamics applied to chemical reaction engineering", in *Advances in Chemical Engineering*, New York, NY, USA: Academic Press, 1998.
- [61] S. Chen, Z. Zhou, Y. Ma, L. Zhang, T. Wang, S. Wang y Y. Zhang, "Study on hazardous areas of hydrogen fluoride diffusion based on CFD simulation", *Processes*, vol. 9, no. [62] W. Wang, D. Mou, B. Sun, C. Zhu y H. Mi, "Characteristics of leakage and diffusion for a chlorine storage tank based on simulation", *ACS Chem. Health Saf.*, vol. 28, no. 6, pp. 436-443, Aug. 2021.
- [63] J. Wang, X. Yu, R. Zong y S. Lu, "Evacuation route optimization under real-time toxic gas dispersion through CFD simulation and Dijkstra algorithm", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 76, 2022 DOI: 10.1016/j.jlp.2022.104733.
- [64] M. Muscetta, M. Portarapillo, A. Di Benedetto y R. Andreozzi, "Risk analysis of the sodium hypochlorite production process: Focus on the chlorine line", *Chemical Engineering Journal Advances*, vol. 12, no. 100381, 2022.
- [65] W. Tan, D. Lv, X. Guo, H. Du, L. Liu y Y. Wang, "Accident consequence calculation of ammonia dispersion in factory area", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 67, 2020 DOI: 10.1016/j.jlp.2020.104271.
- [66] S. Yuan, J. Cai, G. Reniers, M. Yang, C. Chen, J. Wu, "Safety barrier performance assessment by integrating computational fluid dynamics and evacuation modeling for toxic gas leakage scenarios", *Reliability Engineering & System Safety*, vol. 226, 2022 DOI: 10.1016/j.ress.2022.108719.
- [67] A. Horiguchi y S. Numazawa, "Simulation-based risk assessment for the leakage of toxic substances in a chemical plant and the effects on the human body: ethanol as a working model", *J. Toxicol. Sci.*, vol. 48, no. 5, pp. 285-298, 2023.
- [68] G. Li, J. Wang, M. Wang y R. Zong, "Experimental and numerical study of CO₂ plume diffusion in a confined space." *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 81, no. 104949, 2023.
- [69] ANSYS, *Fluent User's Guide*, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.



- [70] ANSYS, Fluent Theory Guide, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.
- [71] Z. U. A. Warsi, Fluid Dynamics: Theoretical and Computational Approaches, Boca Raton, FL: CRC Press, 2005.
- [72] D. C. Wilcox, Turbulence Modeling for CFD, La Cañada, CA, USA: DCW Industries, Inc., 1994.
- [73] B. E. Launder y D. B. Spalding, Mathematical Models of Turbulence, Orlando, FL, USA: Academic Press, 1972.
- [74] W. Tan, H. Du, L. Liu, T. Su y X. Liu, "Experimental and numerical study of ammonia leakage and dispersion in a food factory", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 47, pp. 129-139, 2017.
- [75] CCPS, *Guidelines for Consequence Analysis of Chemical Releases*, Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, 1999.
- [76] S. V. Patankar y D. B. Spalding, "A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows" in *Numerical Prediction of Flow, Heat Transfer, Turbulence and Combustion*, S. V. Patankar, A. Pollard, A. K. Singhal y S. P. Vanka, Eds., Elmsford, NY, USA: Pergamon Press, 1983, pp. 54-73.



EFECTO DE LA MIGRACIÓN **03** EN LA AUTOEFICACIA DE ESTUDIANTES LATINOAMERICANOS CON EVIDENCIA EN PISA 2018

EFFECT OF MIGRATION ON THE SELF-EFFICACY
OF LATIN AMERICAN STUDENTS WITH
EVIDENCE FROM PISA 2018



Carolina Anguiano Almejo
Eric Leonardo Huerta Manzanilla*

Universidad Autónoma de Querétaro,
Santiago de Querétaro, México

*eric.huerta@uaq.mx



Abstract

The purpose of the present paper is to expose whether there is a significant relationship between immigration status and self-efficacy for school reinsertion of Mexican and other Latin American students in Mexico. Since self-efficacy is the personal perception of one's ability to perform an activity, it is a factor closely involved in the learning process, which is reflected in academic achievement and emotional development. Data were collected from the PISA 2018 database, which measures academic achievement and student well-being; it was then analyzed whether the statistics supported or disproved the relevance of these factors.

Keywords: self-efficacy, Latin American students, ICP, immigrants, PISA 2018, resilience.

Resumen

El propósito del presente trabajo es exponer si existe una relación significativa entre el estatus migratorio y la autoeficacia para la reinsertión escolar de estudiantes mexicanos y de otras partes de Latinoamérica en México. Puesto que la autoeficacia es la percepción personal de la capacidad para desempeñar una actividad, es un factor estrechamente involucrado en el proceso de aprendizaje, que se refleja en el aprovechamiento académico y el desarrollo emocional. Los datos se recolectaron de la base de datos de PISA 2018, que mide el rendimiento académico y bienestar estudiantil; después se analizó si las estadísticas avalaban o desmentían la relevancia de dichos factores.

Palabras clave: autoeficacia, estudiantes latinoamericanos, ICP, inmigrantes, PISA 2018, resiliencia.





Introducción

El Fondo de las Naciones Unidas para la Infancia (UNICEF) conviene que a todo ser humano menor de 18 años se le considera como niño. Bajo este criterio, se aprecia que en los últimos veinte años la población infantil migrante aumentó de 24 millones a 33 millones de personas, equivalente al 12 % de la población migrante total. La proporción de niños emigrantes es mayor en regiones con bajos y medianos ingresos en comparación con los países de altos ingresos; de hecho, en 2020 los números de América Latina y el Caribe se mantuvieron en ascenso [1].

En 2017, una afluencia de familias mexicanas y de Latinoamérica llegó a México debido a crisis económicas y políticas migratorias restrictivas en países receptores. Tal movimiento provocó un reto de reincorporación escolar para los menores debido a los escasos programas educativos que les permiten adaptarse al español y adecuar sin problemáticas sus códigos culturales y modelos pedagógicos previos [2], [3].

Existen varios factores para la integración escolar; por ejemplo, las desigualdades sociodemográficas y económicas, junto con la carencia de vivienda, obstaculizan la apropiada reinserción de los alumnos; por otro lado, el respaldo emocional y sociocultural ayuda a los estudiantes a enfrentar los cambios de un sistema educativo a otro [2], [4].

El desempeño académico que los estudiantes perciben de ellos mismos y que se evalúa a través de calificaciones es un indicador de su adaptación al entorno educativo [5]; además, el rendimiento de los estudiantes inmigrantes difiere en gran medida en comparación con el de estudiantes nativos. Sin embargo, para distinguir exclusivamente la integración a

nivel psicológico, toma precedencia el bienestar del estudiante, que distingue cuatro dimensiones: satisfacción de vida, afectación positiva, sentido de pertenencia a la escuela y autoeficacia [6], [7].

La autoeficacia es la convicción en las habilidades individuales para ejecutar de manera exitosa una labor y surge de experiencias vicarias, persuasión social, condiciones fisiológicas y emocionales y, principalmente, del cumplimiento de tareas [8], [9]. Pese a que las experiencias de otros influyen en la autoeficacia, el éxito o fracaso en previas actividades propias afecta la certidumbre de los individuos en su capacidad para alcanzar un objetivo [10].

...En este trabajo se utilizó la base de datos de PISA 2018, mediante análisis estadísticos para revelar el efecto del estado de inmigración de los estudiantes latinoamericanos en su nivel de autoeficacia.



Para lograr una autorregulación óptima y desarrollar la autoeficacia, los estudiantes deben distinguir qué objetivos son capaces de lograr, la cantidad de esfuerzo requerida para tal fin y su fuente de motivación [11]. Los estudiantes con niveles altos de autoeficacia aplican estrategias cognitivas que les ayudan a aprender, organizar su tiempo y regular su esfuerzo de una manera más eficaz. De este modo mejoran sus calificaciones y presentan un aumento de confianza a la hora de abordar áreas que presentan dificultad, como las ciencias e ingenierías [12].

En un estudio en España se realizó un análisis múltiple de covarianza con el estado de inmigración (nativos, primera generación y segunda generación) como variable independiente, y los indicadores de bienestar y desempeño académico de los estudiantes en matemáticas y ciencias como variables dependientes; además se consideraron aspectos de género, edad y tipo de escuela. Aunque no se encontró una relación significativa entre el país de origen y el nivel de autoeficacia de los estudiantes, los nativos mostraron valores más altos. Asimismo, en un estudio realizado por [14], se ocupó una muestra de 11 582 estudiantes de veinte países, quienes respondieron el índice IMMIG de PISA 2018. Se identificaron un 50.4 % como estudiantes de segunda generación y un 49.6 % de primera generación, y tampoco hubo relación entre el país y la autoeficacia.

Por consiguiente, se establecieron las siguientes preguntas de investigación:

- ¿En México, el nivel de autoeficacia de los estudiantes tiene una relación substancial con su país de origen?
- ¿Los estudiantes nativos tienen un mayor nivel de autoeficacia que los estudiantes inmigrantes?
- ¿La generación de inmigrantes a la que pertenecen los estudiantes influye en su nivel de autoeficacia?

Metodología

Base de datos

La muestra se tomó de la base datos del Programa para la Evaluación Internacional de Estudiantes (PISA, por sus siglas en inglés) de 2018, llevada



a cabo por la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE). Este programa se pone en práctica cada tres años y tiene como finalidad evaluar los conocimientos, habilidades y el bienestar de estudiantes de nivel secundaria. Además, los cuestionarios aplicados en PISA están diseñados con rigor científico y han pasado por minuciosos procesos de validación, lo que garantiza la fiabilidad de los datos recopilados para la cuantificación de la presente prueba [13].

Población muestra

La información procede de las evaluaciones de 69 352 estudiantes latinoamericanos de quince años en último grado de secundaria, categorizadas por país: Argentina (11 975), Brasil (10 691), Chile (7 621), Colombia (7 522), Costa Rica (7 221), México (7 299), Perú (6 086), República Dominicana (5 674) y Uruguay (5 263).

Variable independiente

Se manejó la definición de estudiantes inmigrantes proporcionada por PISA "IMMIG": estudiantes inmigrantes de primera generación, nacidos en el extranjero de padres también extranjeros; estudiantes inmigrantes de segunda generación, nacidos en el país donde realizaron la prueba y cuyos padres son ambos nacidos en el extranjero. Asimismo, se agregó un tercer grupo para propósitos de la presente: estudiantes nativos nacidos en el país de la prueba y cuyos padres también son del mismo país. Así, la variable independiente puede asumir los valores nominales de "nativo", "primera generación" y "segunda generación".

Estado de inmigración

El grupo poblacional con mayor presencia en todos los países, con respecto a la Tabla 1, es el de los estudiantes nativos. Perú (97.19 %), Colombia (93.65 %) y Chile (92.43 %) componen los países con mayores porcentajes, mientras que México, Costa Rica y Argentina presentan los menores, con 85.74, 88 y 88.91 % respectivamente. El país que presentó un mayor porcentaje de estudiantes sin contestar el índice fue México, con un 13.15 %.



Tabla 1. Estado de inmigración de estudiantes latinoamericanos registrados en PISA 2018.

Respecto al grupo poblacional de inmigrantes de primera generación, se apreció que Costa Rica, Argentina y República Dominicana presentaron los mayores porcentajes, con 6.83, 2.87 y 1.5 % respectivamente. En cambio, para el grupo de segunda generación, Costa Rica (3.05 %), Argentina (2.48 %) y Chile (2.4 %) mostraron los mayores porcentajes.

PAÍS	NATIVOS (%)	GENERACIÓN (%)	GENERACIÓN (%)	SIN CONTESTAR (%)
Argentina	88.91	2.87	2.48	5.74
Brasil	92.00	0.35	0.16	7.49
Chile	92.43	0.84	2.40	4.33
Colombia	93.65	0.24	0.29	5.82
Costa Rica	88.00	6.83	3.05	2.12
México	85.74	0.64	0.47	13.15
Perú	97.19	0.33	0.13	2.35
República Dominicana	89.69	1.50	1.09	7.72
Uruguay	91.30	0.57	0.59	7.54

Variable dependiente

Se recurrió al índice de autoeficacia de PISA conocido como “RESILIENCE”, que hace referencia al nivel de confianza de los estudiantes en sus habilidades para participar en diversas actividades y cumplir tareas complejas. El índice se evalúa con cinco reactivos y demuestra una sólida coherencia interna, con un coeficiente alfa de Cronbach de 0.76 [10].

De acuerdo con la teoría de respuesta al reactivo y los valores del índice RESILIENCE, se calculó una métrica que indica la afinidad a presentar niveles altos de autoeficacia por medio de valores negativos y positivos [11].

Herramientas

Se empleó el software R studio, el cual es una herramienta informática que permite llevar a cabo estudios de estadística a la vez que organiza y evalúa la información de la base de datos.

Análisis

Se tomaron en cuenta las columnas referentes a las variables de interés de la base de datos, que son las correspondientes al estado de inmigración (índice IMMIG) y el nivel de autoeficacia (índice RESILIENCE). Asimismo se con-



sideraron las filas correspondientes a los países: Argentina (ARG), Brasil (BRA), Chile (CHL), Colombia (COL), Costa Rica (CRI), México (MEX), Perú (PER), República Dominicana (DOM) y Uruguay (URY).

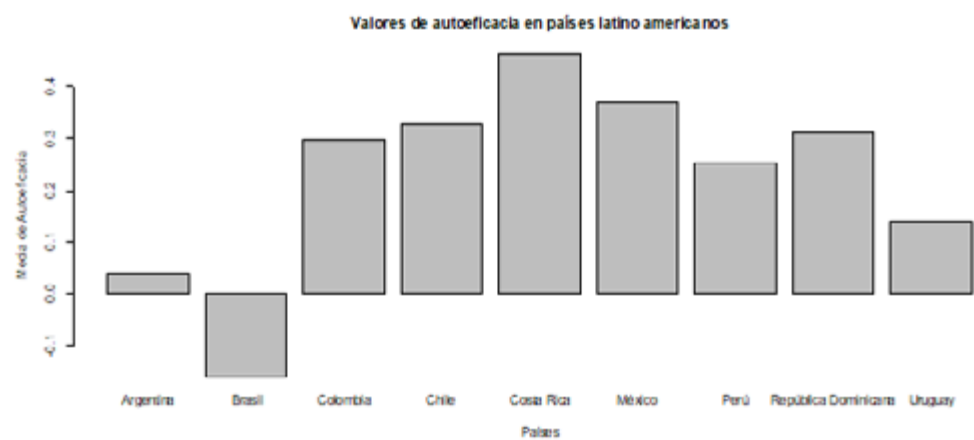
Se calculó la media del nivel de autoeficacia para cada país y el porcentaje de estudiantes de cada generación inmigrante; el cálculo de la relación entre autoeficacia y estado de inmigración se hizo por separado para cada país a través de regresión lineal, evaluando cada modelo con las siguientes métricas: valor P, R^2 , R ajustada, coeficiente de correlación de Pearson, y los valores de intercepción y coeficientes de cada grupo de estado de inmigración.

Resultados y discusión

Autoeficacia

La evaluación de la autoeficacia consistió en la comparación de la media del índice de autoeficacia de cada país (Figura 1); para efectuar el cálculo se eliminaron los datos vacantes. La mayoría de los países presentaron valores positivos, a excepción de Brasil, que obtuvo una media de -0.16. Estudios en ese país relacionan el clima con que el 68 % de sus estudiantes habitan en un ambiente escolar de indisciplina, lo que a su vez afecta el nivel de autoeficacia [15]. Hasta el 2015, los reportes de PISA señalaron que los valores de estudiantes resilientes eran demasiado limitados para hacer un análisis (<5 %), lo que provocó que no se pudiera notar una variación entre PISA 2012 y PISA 2015, tanto para Argentina como para Uruguay [16].

FIGURA 1. Medias de autoeficacia de países latinoamericanos en PISA 2018.



Argentina, con una media de 0.041, y Uruguay, con una de 0.14, constituyen los Estados con menor peso en esta métrica. Por otro lado, Costa Rica, México y Chile presentaron los valores más altos de autoeficacia con 0.462, 0.369 y 0.327 respectivamente. No obstante, México y Costa Rica demos-

traron que la resiliencia académica de sus estudiantes inmigrantes es baja, con porcentajes de 9 y 33 % respectivamente, en comparación con los porcentajes de otros países en 2018 [17].

Relación entre nivel de autoeficacia y estado de inmigración

En la Tabla 2 se observan los análisis de correlación y regresión lineal entre estado de inmigración y autoeficacia por país.

Tabla 2. Métricas de los modelos de regresión lineal.

PAÍS	INTERCEPTO	ERROR ESTÁNDAR MÚLTIPLE	VALOR P	R	R-AJUSTADA	CORRELACIÓN PEARSON	COEFICIENTE "NATIVO"	COEFICIENTE "GEN 1"	COEFICIENTE "GEN 2"
Argentina	0.0476	1.0100	0.0570	0.0006	0.000382	0.0242	0.04757	-0.13304	-0.06125
Brasil	-0.15794	0.9694	0.6469	0.000106	-0.00014	0.0103	-0.1579	0.17304	-0.07419
Chile	0.32101	1.111	0.9335	2.16E-05	-0.00029	0.0046	0.3210	-0.0127	0.03318
Colombia	0.30098	0.9833	0.7656	8.26E-05	-0.0002	0.0091	0.3010	0.1904	0.917
Costa Rica	0.4764	1.061	0.001279	0.002097	0.001782	0.0458	0.4764	-0.16007	-0.16393
México	0.37158	1.019	0.9206	2.50E-07	-0.00034	0.0005	0.3716	-0.03637	-0.07756
Perú	0.2567	0.9413	0.7621	0.000126	-0.00034	0.0113	0.2567	-0.02012	-0.346
República Dominicana	0.33104	1.205	0.05497	0.001952	0.00128	0.0442	0.3310	-0.17582	-0.4693
Uruguay	0.1375	1.054	0.1542	0.000955	0.000445	0.0309	0.1375	-0.10132	0.44268

Los valores para las intercepciones de los modelos corresponden a los coeficientes de autoeficacia del grupo nativo, siendo Costa Rica el mayor con 0.4764 y Brasil el menor con -0.15794. Para los coeficientes de la primera generación, el mayor valor lo obtuvo Colombia con 0.1904 y el menor República Dominicana con -0.17582. En cambio, para los coeficientes de segunda generación, el mayor fue Colombia con 0.917 y el menor República Dominicana con -0.4693. El error estándar de los modelos de regresión lineal se encontró entre los rangos de 1.205 de República Dominicana y 0.9413 de Perú. El nivel de resiliencia académica de los estudiantes inmigrantes mostró una estrecha relación con los resultados reportados en Canadá, Australia, Hungría, Nueva Zelanda y Estonia [17].

Los valores P de los modelos reflejaron que el estado de inmigración no es una variable significativa en el nivel de autoeficacia de los estudiantes de Latinoamérica en su mayoría, a excepción de Costa Rica, donde éste fue

menor a 0.05. Valores similares se reportaron en resiliencia emocional para Costa Rica, Holanda y Colombia entre su población de inmigrantes [17].

Los coeficientes de determinación de R^2 demostraron que los modelos no se ajustan a los valores de autoeficacia presentados; además, el hecho de que los valores de R ajustada sean negativos explican por qué los grupos no contribuyen a la predicción del valor de autoeficacia, en relación con el tamaño del conjunto de datos. El coeficiente de Pearson indica correlaciones muy débiles entre el estado de inmigración y el nivel de autoeficacia. Es así que se demuestra que las relaciones entre las variables son casi insignificantes y no tienen un impacto fuerte en conjunto.

Conclusiones

De acuerdo con las preguntas de investigación establecidas al inicio del estudio, se determinó que:

- El país de origen de los estudiantes no tiene relación significativa con el nivel de autoeficacia percibida por los estudiantes, lo que sugiere que son otras las variables que afectan la autoeficacia;
- Los modelos de regresión lineal mostraron que los estudiantes nativos presentan un mayor nivel de autoeficacia.
- Los coeficientes referentes a la primera y segunda generación de inmigrantes no son un factor predictivo que afecte en el nivel de autoeficacia.

Con la base de datos de PISA 2018 no fue posible encontrar relevancia entre el estado de inmigración de los estudiantes y su nivel de autoeficacia, por lo que se propone utilizar bases de datos donde los reactivos de interés sean completos y expresen de mejor manera la relación entre las variables. Es necesario utilizar otros métodos de evaluación para encontrar los valores de correlación apropiados para el tipo de variable. Además, hace falta encontrar otros factores decisivos en el nivel de autoeficacia de los estudiantes latinoamericanos.

Agradecimientos

La autora agradece al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencia y Tecnología, a la Universidad Autónoma de Querétaro y su Facultad de Ingeniería, y al posgrado de maestría en Ingeniería de Calidad y Productividad por los recursos otorgados.



Referencias

- [1] “Niños y jóvenes migrantes”. Portal de datos sobre migración. <https://www.migration-dataportal.org/es/themes/ninos-migrantes> (consultado el 25 de abril de 2023).
- [2] M. Jacobo-Suárez, “De regreso a ‘casa’ y sin apostilla: estudiantes mexicano-americanos en México/Back home without apostille: Mexican-American students in Mexico”, *Sinéctica*, no. 48, mar. 2017. [En línea]. Disponible: <https://sinectica.iteso.mx/index.php/SINECTICA/article/view/712>.
- [3] V. Zuniga y M. Vivas Romero, “Divided families, fractured schooling, in Mexico: educational consequences of children exposition to international migration”. *Centre d’Études Mexicaines et Centraméricaines*, 2014. [En línea]. Disponible: <https://orbi.uliege.be/handle/2268/166110>
- [4] Y. Bedoya Rangel y J. G. González Becerril, “Obstáculos de incorporación educativa de migrantes retornados al Estado de México y Nuevo León”, *Economía Sociedad y Territorio*, vol. 21, no. 66, pp. 413-439, abr. 2021.
- [5] S. Rodríguez, A. Valle, L. M. Gironelli, E. Guerrero, B. Regueiro e I. Estévez, “Performance and well-being of native and immigrant students. Comparative analysis based on PISA 2018”, *Journal of Adolescence*, vol. 85, pp. 96-105, dic. 2020, DOI: 10.1016/j.adolescence.2020.10.001.
- [6] A. A. Alegre, “Autoeficacia académica, autorregulación del aprendizaje y rendimiento académico en estudiantes universitarios iniciales”, *Revista de Psicología Educativa - Propósitos y Representaciones*, vol. 2, no. 1, pp. 101-120, 2014, DOI: 10.20511/pyr2014.v2n1.54
- [7] E. M. Azila-Gbetteor, C. Mensah, M. K. Abiemo, y M. Bokor, “Predicting student engagement from self-efficacy and autonomous motivation: A cross-sectional study”, *Cogent Education*, vol. 8, no. 1, p. 1942638, 2021, DOI: 10.1080/2331186X.2021.1942638.
- [8] “Self-efficacy in educational settings: Recent research and emerging directions”, *Emerald Insight*, vol. 16 pp. 1-33, 2010, DOI: 10.1108/S0749-7423(2010)000016A004.
- [9] D. H. Schunk y M. K. DiBenedetto, “Self-efficacy and human motivation”, en *Advances in Motivation Science*, A. J. Elliot, Ed., 2021, cap. 4, pp. 153-179, DOI: 10.1016/bs.adms.2020.10.001



- [10] J. E. Maddux y M. A. Stanley, "Self-Efficacy Theory in Contemporary Psychology: An Overview", *Guilford Press Periodicals*, 2011, doi: 10.1521/jscp.1986.4.3.249
- [11] R. Cera, M. Mancini, y A. Antonietti, "Relationships between Metacognition, Self-efficacy and Self-regulation in Learning", *Journal of Educational, Cultural and Psychological Studies*, vol. 4, no. 7, 2013, DOI: 10.7358/ecps-2013-007-cera
- [12] F. Pajares y D. H. Schunk, "Self-beliefs and school success: Self-efficacy, self-concept, and school achievement", en *International Perspectives on Individual Differences*, vol. 2, Westport, ct, us: Ablex Publishing, 2001, cap. 11, pp. 239-265.
- [13] "PISA 2018 Assessment and Analytical Framework", OECD. <https://www.oecd.org/education/pisa-2018-assessment-and-analytical-framework-b25efab8-en.htm> (Consultado el 8 de septiembre de 2022).
- [14] M. Karakus, M. Courtney y H. Aydin, "Understanding the academic achievement of the first- and second-generation immigrant students: a multi-level analysis of PISA 2018 data", *Educational Assessment, Evaluation and Accountability*, vol. 35, pp. 233-278, 2022, DOI: 10.1007/s11092-022-09395-x
- [15] J. S. Rizzotto y M. T. A. França, "Indiscipline: The school climate of Brazilian schools and the impact on student performance", *International Journal of Educational Development*, vol. 94, p. 102657, 2022, DOI: 10.1016/j.ijedudev.2022.102657
- [16] T. Agasisti, F. Avvisati, F. Borgonovi, y S. Longobardi, "Academic resilience: What schools and countries do to help disadvantaged students succeed in PISA", *OECD iLibrary*, 2018, DOI: 10.1787/e22490ac-en
- [17] L. Cerna, O. Brussino, y C. Mezzanotte, "The resilience of students with an immigrant background: An update with PISA 2018", *OECD iLibrary*, 2021, DOI: 10.1787/e119e91a-en





CONFIGURACIÓN ÓPTIMA DE LA RED DE PRODUCCIÓN SOSTENIBLE DE BIODIÉSEL A PARTIR DE ACEITE DE BSFL

OPTIMAL CONFIGURATION OF THE SUSTAINABLE
BIODIESEL PRODUCTION NETWORK FROM BSFL



Dulce María Aguilar Murguía
Claudia Gutiérrez Antonio
Oscar Daniel Lara Montaña
Sergio Iván Martínez Guido*

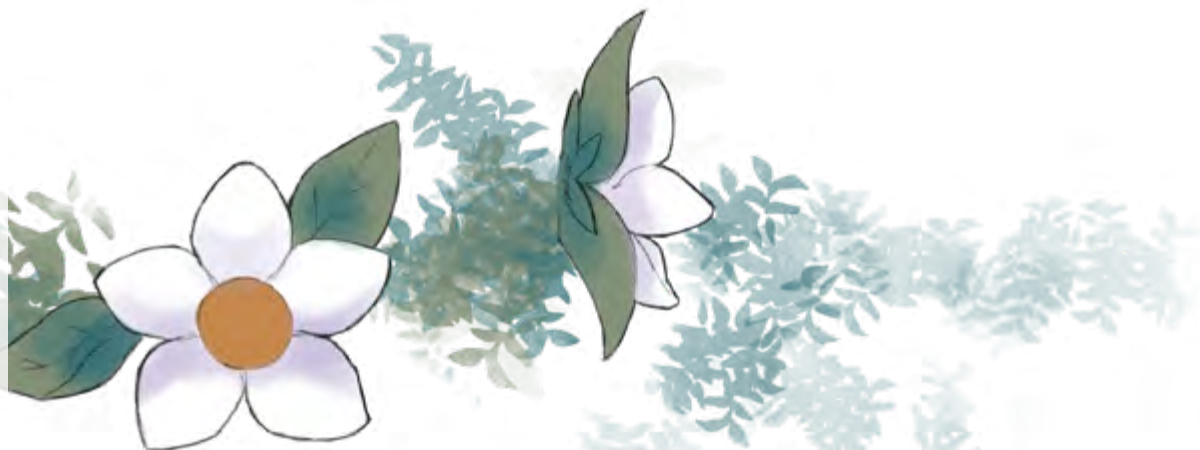
Universidad Autónoma de Querétaro,
Santiago de Querétaro, México

*sergio.martinezg@uaq.mx

Resumen

En la última década, se han propuesto alternativas de descarbonización en el sector del transporte, incluidos los biocombustibles en motores de combustión interna y el uso de vehículos eléctricos. Cabe señalar que el biodiésel ha demostrado ser una de las alternativas principales, ya que se puede utilizar en mezclas con su homólogo fósil. Sin embargo, las plantas de producción instaladas utilizan aceites animales y vegetales como materia prima; estos insumos afectan el costo total de producción, que puede ser hasta 1.5 veces el costo del diésel convencional. Como consecuencia, se ha propuesto el uso de aceite de larvas de mosca soldado negra; estos insectos pueden alimentarse de diversos tipos de residuos orgánicos que son transformados en biomasa con alto contenido de lípidos (35-40 %). El presente trabajo propone el diseño y la configuración de una cadena de suministro capaz de responder a la demanda de combustible a nivel nacional. Para lograr el propósito, se elaboró un modelo de optimización matemática que considera aspectos del suministro, el transporte, la distribución, el almacenamiento, así como la ubicación de los nodos de producción. Se establecieron como funciones objetivo la maximización del rendimiento y la minimización de las emisiones.

Palabras clave: biocombustibles, biodiésel, cadena de suministro, economía circular, optimización matemática, residuos orgánicos.



Abstract

Over the past decade, decarbonization alternatives have been proposed for the transport sector, including biofuels in internal combustion engines and the use of electric vehicles. Biodiesel has proved to be one of the principal alternative biofuels since it can be used in mixtures with its fossil counterpart. However, all production plants installed use animal and vegetable oils as raw materials; these inputs rise the total production cost, up to 1.5 times the cost of conventional diesel. As a consequence, the use of black soldier fly larvae oil has been proposed; these insects can feed on diverse types of organic waste, which are transformed into biomass with a high lipid content (35-40%). This paper proposes the design and configuration of a supply chain capable of responding to the demand for fuel at the national level. To achieve the purpose, a mathematical optimization model was elaborated that considers aspects such as the location of production supply nodes, transportation, distribution, and storage. Performance maximization and emission minimization were established as target functions.

Keywords: biofuels, biodiesel, supply chain, circular economy, mathematical optimization, organic waste.





Introducción

A nivel mundial, los dos factores principales de la transformación del sistema energético actual son la seguridad energética y la mitigación del cambio climático; la cual consiste en la transición de una economía basada en energías fósiles a una en energías renovables que permita disminuir los efectos del calentamiento global. Como respuesta a la creciente demanda energética, la sustitución de los combustibles fósiles por fuentes alternas como eólica, solar y biomasa han recibido mayor atención [1].

Los biocombustibles generados a partir de biomasa se han destacado como soluciones energéticas alternativas para el sector transporte. La principal fuente de biocombustibles es la materia orgánica (biomasa), que conduce a generar procesos capaces de añadir valor a los sistemas de producción primaria y que promueve la economía circular. La biomasa puede transformarse mediante diferentes procesos de conversión para generar energía térmica, eléctrica o biocombustibles dependiendo de su naturaleza química [2].

Se ha introducido el biodiésel como una alternativa para reducir aproximadamente el 40 % de las emisiones generadas por la quema de diésel convencional y el 78 % de dióxido de carbono (CO_2) emitido [3]. El biodiésel es un biocombustible producido principalmente a partir de aceites vegetales o grasas animales [4], que puede ser usado en automotores con modificaciones mínimas. Este combustible renovable está constituido por una mezcla de ésteres monoalquílicos de ácidos grasos, obtenidos a partir de reacciones de transesterificación de aceites o grasas.

La producción de biodiésel se clasifica en cuatro generaciones, las cuales están ligadas al tipo de materia prima y a la tecnología usada [3]. Hoy en día la mayor cantidad de biodiésel producido mundialmente es de primera y segunda generación, sus principales desventajas son altos costos de producción y competitividad con el uso del suelo. Algunas investigaciones relacionadas con la producción de biodiésel a partir de aceites no comestibles, como los obtenidos a partir de la *Jatropha curcas*, microalgas y aceites residuales, han sido el centro de atención; sin embargo, todas estas rutas presentan barreras de viabilidad económica, de sostenibilidad, técnicas, o la falta de una economía circular, en menor o mayor medida para cada materia prima estudiada [5]. Ante las desventajas de las materias primas en la producción de biodiésel, algunos autores proponen el uso de aceites generados por insectos, particularmente el aceite extraído de larvas de mosca soldado negra (BSFL por sus siglas en inglés).

“...El presente trabajo propone el diseño y configuración de una cadena de suministro capaz de responder a la demanda de combustible a nivel nacional a través del uso de aceite de larvas de mosca soldado negra.



Existen muchas ventajas vinculadas al uso de aceite de BSFL, debido a su alto contenido de grasa, alta velocidad reproductiva y ciclos de vida cortos [6], [7]. Aunado a la habilidad de consumir diversos tipos de componentes orgánicos, en su mayoría desechos o residuos sin ninguna aplicación de valor. Asimismo, para la utilización de aceite de BSFL son innecesarios el uso de tierras fértiles, la competencia con otros procesos de producción alimenticia y no contribuye con la huella hídrica generada por otras materias primas (producción de algas o cultivos) [8]; además es posible generar altos volúmenes de aceite en pequeños espacios reproductivos, resultando en la producción de biomasa con un 35-40 % de contenido de grasa a través de la eliminación de diversos residuos [9].

TABLA 1. Trabajos reportados sobre la viabilidad de producción de biodiésel a partir de BSFL.

AUTOR	[8]	[10]	[11]	[12]	
PAÍS	COREA	TAIWÁN	CHINA	MALASIA	
STANDARD	CUMPLE MAYORÍA	CUMPLE MAYORÍA	CUMPLE	^a	
FAME Yield (%)	94.10 % 93.80 %	96.20 %	95.40 %	97.00 %	98.00 %
UFA b (%)	24.70 % 25.00 %	29.00 %	44.05 %	13.00 %	13.90 %
SFA a (%)	75.20 % 74.90 %	71.00 %	55.95 %	87.00 %	86.10 %
Lípidos Content (dw c %)	84.50 %	24.97 %	31.80 %	34.23 %	25.88 %
Densidad del inoculo	3,000 larva/300 g substrate	1,200 larva/kg substrate	200 larvae/200 g substrate	20 larva/10 g	
Tipo de reacción	T. d N.T. e g(KOH)	T. (CH ₃ OH, DBU)	T. (KOH)	E. (HCL) - T. (KOH)	
Métodos de extracción de lípidos	n-hexano Soxhlet	n-hexano Extracción solvente	Petróleo éter Soxhlet	Petróleo éter Extracción solvente	
Tipo de comida	Residuos comida	Salvado de trigo	Paja de colza	Endospermo de coco	
Especie de insecto	BSFL	BSFL	BSFL	BSFL	BSFL

El presente trabajo propone analizar la configuración óptima de la cadena de suministro de producción y distribución de biodiésel, mediante la integración de biorrefinerías a base de aceite de BSFL. Se elaboró un modelo matemático, integrando las ecuaciones que representan cada una de las etapas en la red de producción y distribución, desarrollando un estudio general del sistema real. Los datos integrados al modelo se obtuvieron de parámetros actuales de México, siendo éste el caso de estudio evaluado. El sistema analizado consideró en primera estancia la biotransformación de los residuos orgánicos generados a nivel nacional a través de la integra-



ción de larvas de mosca soldado negra. Posteriormente, el aceite obtenido de dichos insectos es usado como materia prima para la producción de biodiésel de segunda generación. Una vez obtenido el biodiésel, es integrado a la cadena convencional de distribución como mezcla B20.

Planteamiento del problema

De acuerdo con el Atlas Nacional de Biomasa [13], México genera 278 millones de toneladas de residuos orgánicos al año, con un potencial energético estimado de 2980 PJ. En los países en desarrollo, los residuos se queman o se depositan en vertederos, lo que tiene consecuencias negativas para el medio ambiente [14]. La Secretaría de Energía [15] espera una demanda nacional de diésel de 405 millones de barriles diarios (Mbd) en 2021, con un crecimiento anual de 1.57 %; el 30 % de la demanda total de diésel se produce en México, mientras que el 70 % es importado. México se encuentra posicionado en el decimotercer lugar de los países emisores de CO_2 , con casi 737 millones de toneladas; 64 % proviene del sector de transporte, 7 % es generado por la gestión de residuos y 3.9 % por los sitios de disposición final [16]. En consecuencia, en la COP26, México se propone reducir el 25 % de las emisiones de gases de efecto invernadero y del sector industrial mediante la generación del 35 % de energía limpia para 2024 y el 43 % para 2030; estas acciones buscan alcanzar el objetivo de mantener el aumento de la temperatura por debajo de 1.5 °C.

Frente a este problema, han surgido alternativas para cubrir la demanda de biocombustibles, como el biodiésel y reducir las emisiones que generan. Sin embargo, la materia prima utilizada a escala industrial proviene de cultivos alimentarios y/o residuos de aceite, por lo que, el uso de este tipo de materia prima genera un aumento de costos. De tal modo, se planea implementar alternativas de materias primas para la producción de biodiésel, como es el caso del aceite generado a partir de la biotransformación de las larvas BSFL.

Se expuso una cadena de suministro que atiende la demanda de diésel a través del aceite de larva. Revaloriza los residuos orgánicos generados por la población y la reducción de emisiones de CO_2 provocadas por estos en los vertederos o rellenos sanitarios. Se plantea que la materia prima para la obtención final de biodiésel parta de dar uso a dichos residuos; ayudando a la crianza de las larvas para su transformación a biodiésel mediante procesos industriales.

Se diseñó una superestructura de cadena de suministro para la producción de biodiésel a partir de larvas de mosca soldado negra. Se consideró la recolección de materias primas (residuos orgánicos), centros de recolección, distancias, ubicación de centros de biotransformación y líneas de distribución. En primera instancia, se contemplan los lugares donde se recogen los desechos orgánicos, los cuales son los 32 estados de México. Si el flujo de residuos es representativo en un sitio, una planta de biotransformación (PB) de larvas de mosca soldado negra se instalará allí y servirá como centro de gestión biológico de residuos, por lo cual, solo se tienen en cuenta los residuos de pérdida alimenticia (aproximadamente 1 840 853 ton/año).

Luego, en cada PB instalada se extrae todo el aceite de las larvas cultivadas y con él se produce biodiésel puro a través del proceso de transesterificación. El sector de transporte mexicano es el consumidor final de biodiésel; para suministrar estos biocombustibles, se considera una mezcla B20 para evitar costos adicionales por modificaciones a los motores. En la Figura 1 los subíndices i , j , k y l tienen la posibilidad de tomar valores del 1 al 32, mientras que s sólo puede tomar valores del 1 al 6 (considerando las refinerías convencionales actuales).

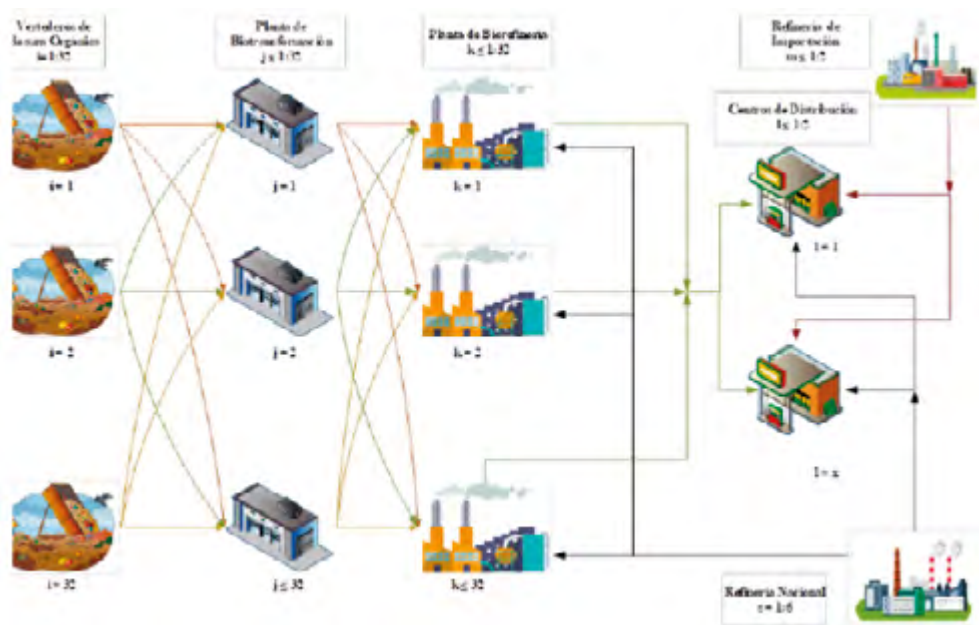


FIGURA 1.
Superestructura de
biodiésel de BSFL.

Se elaboró el modelo de optimización matemática para la cadena de suministro de biodiésel de acuerdo con la superestructura generada. Luego se investigaron los parámetros necesarios para generar las bases de datos que se requerirán en el modelado del programa. A continuación, se codificó el modelo propuesto en la plataforma del Sistema General de Modelado Algebraico (GAMS). La codificación previamente descrita se utilizó



para analizar diferentes escenarios propuestos y se evaluaron los impactos ambientales y económicos en cada una de las prueba. Finalmente, se llevó a cabo el análisis y la elaboración del reporte de resultados obtenidos a través de diagramas de flujo de la cadena de suministro.

Modelo Matemático

El enfoque propuesto considera la situación actual de los residuos orgánicos en México y la demanda de diésel. El flujo de residuos orgánicos en cada sitio ($FRO_{i,t}$) tiene posibilidad de ser desechado en un sitio de eliminación final ($RF^{dump}_{i,j,t}$) o ser utilizado como alimento en las plantas de producción de larvas de mosca soldado negra ($RFS^{oil}_{i,j,t}$). En la Ecuación (1), se describe que la suma de ambos flujos, flujo desechado y flujo como alimento, es igual al flujo total de residuos orgánicos producidos en cada sitio (i) por semana (t). En la Ecuación (2), se calcula el flujo de aceite extraído ($OF^{Ext}_{j,t}$) por cada tonelada de larvas producidas (β), utilizando los residuos orgánicos recibidos ($RFR_{j,t}$) como alimento para la mosca soldado negra en cada planta de producción instalada.

$$FR^0_{j,t} = \sum_j RFS^{oil}_{i,j,t} + \sum_j RF^{dump}_{i,j,t}, \forall i \in I, t \in T \quad (1)$$

$$OF^{Ext}_{j,t} = RFR^0_{j,t} * \beta, \forall j \in J, t \in T \quad (2)$$

Después, el flujo recolectado de aceite de larvas ($OF^{sent}_{j,k,t}$) es enviado a la biorrefinería (k) como se muestra en la Ecuación (3). En la Ecuación (4), el flujo de biodiésel producido ($FP^{Bio}_{k,t}$) semanalmente en cada biorrefinería se calcula mediante la multiplicación del flujo de aceite de larva recibido ($LO^{rece}_{k,t}$) por un respectivo factor de conversión (μ), dado en toneladas de biodiésel puro producido por toneladas de aceite de larva.

$$LO^{rece}_{k,t} = S_j OF^{sent}_{j,k,t}, \forall k \in K, t \in T. \quad (3)$$

$$FP^{Bio}_{k,t} = LO^{rece}_{k,t} * \mu, \forall k \in K, t \in T \quad (4)$$

Asimismo, con el biodiésel puro producido en cada planta es posible obtener la mezcla B20 (20 % biodiésel puro [$FP^{Bio}_{k,t}$] y 80 % diésel convencional [$FD^{Conv}_{k,t}$]). Con la Ecuación (5), se calcula el flujo esperado de B20 ($BIO^{Mix}_{k,t}$), en toneladas de cada planta instalada. Ahora bien, con la Ecuación (6) se calcula el flujo B20 transportado ($BIO^{Mix-s}_{k,l,t}$) al sitio de consumo (l). La Ecuación (7) describe que la demanda actual de combustible ($FD^F_{l,t}$) en cada sitio es menor a la suma del flujo B20 ($BIO^{Mix-al,t}$) disponible más



el flujo de diésel convencional ($CD^{use}_{l,t}$). El consumo de éste último se considera cuando no es posible satisfacer con B20 la demanda de combustible.

$$Bio^{Mix}_{k,t} = FP^{Bio}_{k,t} + FD^{Conv}_{k,t}, \forall k \in K, t \in T \quad (5)$$

$$Bio^{Mix-d}_{l,t} = \sum_k Bio^{Mix-s}_{k,l,t}, \forall l \in L, t \in T \quad (6)$$

$$FD^F_{l,t} \leq Bio^{Mix-d}_{l,t} + CD^{use}_{l,t}, \forall l \in L, t \in T \quad (7)$$

La Ecuación (8) calcula el costo total, se suman todos los correspondientes al transporte generados (C^{Tra}), el costo por el consumo de diésel convencional ($C^{uso_{dc}}$), el costo por la gestión de residuos (C^{wm}) y la producción de B20 (cpb^{20}). La gestión de residuos y el coste de producción B20 incluye costos fijos y variables para cada planta instalada. La Ecuación (9) muestra las emisiones de CO_2 (t^e), se suman las emisiones del transporte (e^{tra}), el uso de diésel convencional ($E^{uso_{dc}}$), el uso de B20 (e^{usoB20}), la producción B20 (e^{pb20}) y las liberadas por las estrategias de gestión de residuos (E^{wm}).

$$TC = C^{Tra} + C^{usoDC} + C^{wm} + C^{PB20} \quad (8)$$

$$TE = E^{Tra} + E^{usoDC} + E^{UsoB20} + E^{wm} + E^{PB20} \quad (9)$$

La Ecuación (10) muestra el balance de rendimiento, se suman las ventas generadas por B20 ($Sales$) más la ganancia económica por la gestión de residuos de alimentos (Pr^{wast}) y los costos totales se restan. Esta última ganancia toma en consideración los residuos enviados a la planta de biotransformación; por lo tanto, se elimina el costo actual del sitio de disposición final. Por último, la Ecuación (11) da como resultado una función multiobjetivo (O.F) para la maximización del rendimiento económico (Max profit) y la minimización de emisiones (Min CO_2).

$$Profit = Sales + Pr^{wast} - tc \quad (10)$$

$$O.F. = Max profit; Min co2 \quad (11)$$

Resultados y discusión

Mediante la plataforma de GAMS® se codificó el modelo matemático propuesto, incluyendo 47 558 restricciones, 272 069 variables libres y 192 variables discretas. La resolución fue el Modelo Mixto Entero Lineal usando CPLEX como resolvidor. Cada ensayo se ejecutó en una AMD® A10 con 2.60 ghz de CPU y 8 GB de RAM y el tiempo de resolución entre cada ejecución fue de 2.360 segundos.



Posterior al análisis sobre la maximización del rendimiento económico y la minimización del impacto ambiental, se obtuvieron los extremos del sistema (rendimiento máximo e impacto ambiental mínimo). Se generaron dos escenarios más, que representan soluciones de compromiso entre ambas funciones objetivas, puntos que son los escenarios analizados en el presente trabajo.

Aunque no es posible cubrir el 100 % de la demanda interna de diésel convencional con la mezcla propuesta, se puede observar una disminución en la generación de CO_2 . En los escenarios reportados disminuye la cantidad de emisiones producidas; sin embargo, hay un impacto en el rendimiento económico debido a la diferencia en el beneficio económico que conlleva la menor cantidad de plantas instaladas. En ambos escenarios se produce la misma cantidad de biodiésel puro (561 976 ton/año) y de B20 (2 809 878 ton/año); esto se debe a que se utilizan todos los residuos producidos en los 32 estados, independientemente del número de plantas instaladas en cada escenario.

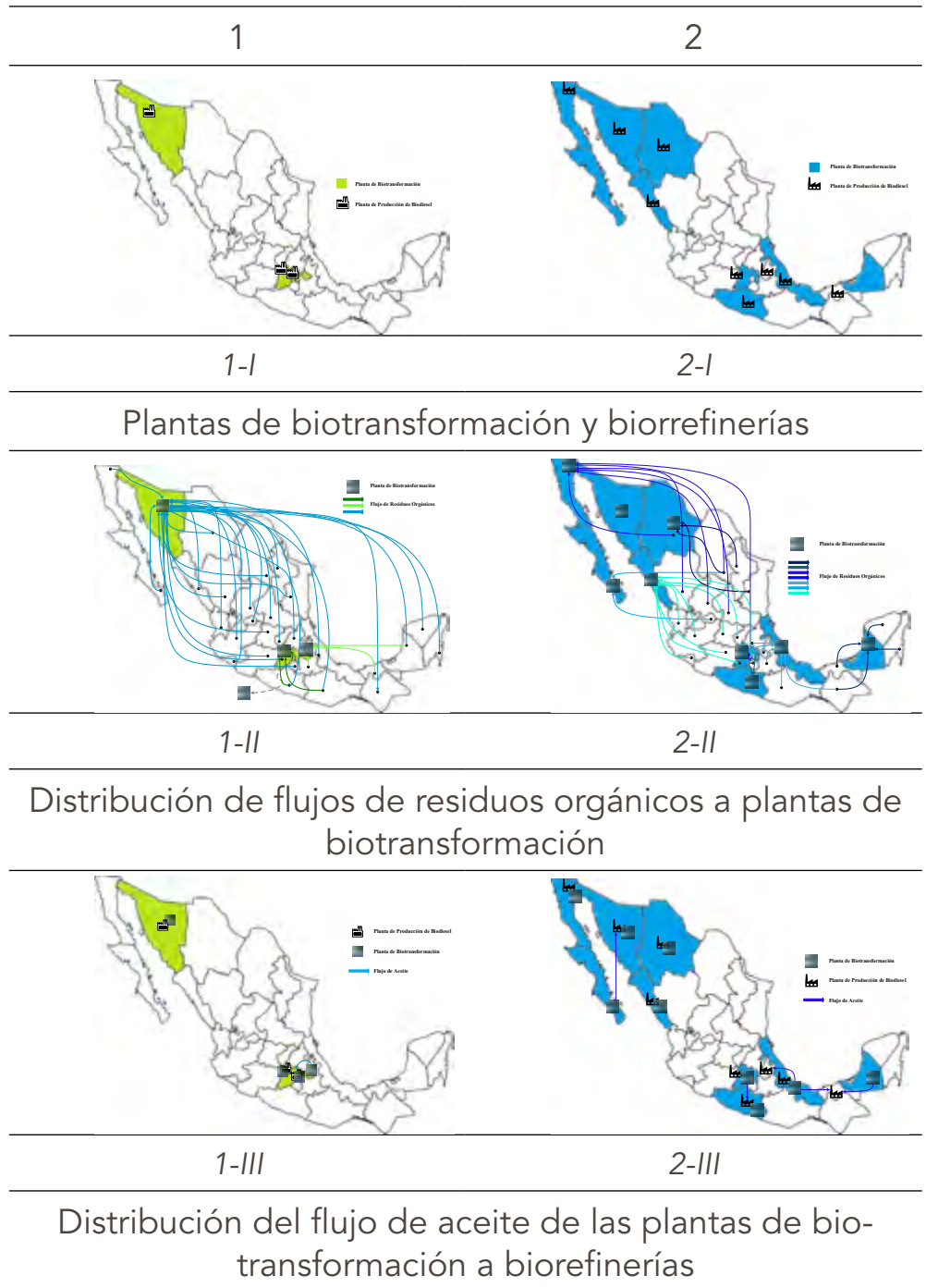
La primera solución genera aproximadamente 15 millones 397 mil 449 toneladas/año de CO_2 y un rendimiento económico de 3 272 millones 605 mil USD/año. En este punto se instaló una planta de biotransformación en los estados de CDMX, Estados de México, Sonora y Tlaxcala. Estas plantas reciben los residuos orgánicos producidos por los otros estados como se muestra en la Tabla 2, figura 1-I. Por otro lado, la instalación de plantas de producción de biodiésel (biorrefinerías) sólo ocurre en los estados de CDMX, Estado de México y Sonora (Tabla 2, figura 1-II), mientras que otros estados tienen que cubrir la demanda con diésel convencional. Según los beneficios generados por las ventas, el estado con mayor remuneración económica es CDMX, seguido por el Estado de México y Sonora, siendo el mismo orden para el número de empleos generados.

Por otra parte, el rendimiento económico obtenido en la segunda solución alcanza los 3 175 480 793 USD/año, y generando aproximadamente 15 395 686 toneladas/año de CO_2 . En este escenario, se instalaron nueve plantas de biotransformación (Tabla 2.2-I) en los estados de Baja California, Baja California Sur, Campeche, Chihuahua, Estado de México, Guerrero, Sinaloa, Sonora y Veracruz. Éstas tienen como alimento los desechos orgánicos que producen los 32 estados (Tabla 2, figura 2-II). Sólo ocho de los cuáles fueron seleccionados para la instalación de plantas de producción de biodiésel: Baja California, Chihuahua, Estado de México, Guerrero, Sinaloa, Sonora, Tabasco, Tlaxcala y Veracruz (Tabla 2, figura 2-III); el resto



TABLA 2.
Figuras representativas de cada escenario.

cubren su demanda con diésel convencional. El estado con mayor tasa de ganancias por ventas y generación de mano de obra es el Estado de México.



Impacto Ambiental

Se consideraron únicamente las emisiones de dióxido de carbono (CO_2), que intervienen desde la recolección de materias primas (residuos orgánicos) hasta el uso del producto final (biodiésel) para este fin, se empleó la herramienta computacional “Modelo de gases de efecto invernadero, emisiones reguladas y uso de energía en tecnologías por el laboratorio nacional Argonne” (GREET) versión 2020 [17], se consultaron datos para



cada fase contemplada del modelo, además de la misma base de datos proporcionada por el estado. De acuerdo con el cálculo de emisiones de CO_2 , realizado en GREET, el 39 % representa la producción de materias primas y su conversión al biodiésel para cultivos energéticos y el 8 % se refiere a los materiales de desecho de las emisiones totales de CO_2 generadas en la cadena de suministro de biodiésel.

La transformación de cada tonelada de residuos alimentarios genera aproximadamente 0.88 kg de CO_2 [17]. La Tabla 3 muestra la comparación de las cantidades de emisiones de CO_2 generadas para cada caso; por cada tonelada generada de aceite de BSFL se producen 12 kg de CO_2 , teniendo un valor inferior de 98.8 % en comparación con la generación de emisiones de cada tonelada de cultivo energético. Al distinguir las emisiones de cada tonelada de aceite de larvas son 83.3 % menores en comparación con las emisiones generadas por cada tonelada de aceite u otras grasas de desecho.

TABLA 3.
Comparación de emisiones de CO_2 .

TIPOS DE RESIDUOS		PRODUCCIÓN DE MATERIA PRIMA (KG ₂ /TON MATERIA PRIMA)	EMISIONES TOTALES (KG ₂ /TON BIODIESEL)
Residuos	Manteca de cerdo + grasa de pollo	72	956 ^o
	Aceite de cocina	72	956 ^o
	Sebo	72	956 ^o
Producción anual	Aceite de ricino	1,031	2,654 ^o
Producción mecanizada	Aceite de soya	1,031	2,654 ^o
Cultivos perenes	Aceite de palma	1,031	2,654 ^o
Uso de larva BSFL	Aceite de larva	12	562 ^e

^oValores reportados en [18]

^eValores calculados en greet[®] [19]

El tratamiento de una proporción de residuos orgánicos, que representan alrededor del 33 % de los residuos totales en México, ayuda a reducir una gran cantidad de emisiones causadas por su acumulación; por otro lado, si los residuos de alimentos se desecharan en su sitio de disposición final, generarían aproximadamente 11 497 200 toneladas de CO_2 /año, calculadas a partir de las propuestas de [18]. Sin embargo, si en lugar de enviar estos residuos a vertederos se transforman en biodiésel mediante el uso de la mosca soldado negra, las emisiones resultantes mostrarían que es posible reducir anualmente un 86 % dichas emisiones.

La Tabla 3 muestra la cantidad de emisiones de CO_2 generadas por tonelada de biodiésel puro producido. Al hacer uso de aceite de larvas como materia prima se emite un 41 % menos de emisiones que cuando se utiliza aceite residual de cocina, y un 78 % menos que cuando el aceite de soya se utiliza como materia prima para la producción de biocombustible.



Impacto económico

Se consideró el costo de capital de cada planta de biotransformación, el costo de capital de cada biorrefinería, el costo por diésel convencional utilizado, el generado por el transporte de petróleo, por el transporte de biodiésel mezclado, de transporte de biodiésel puro, de residuos orgánicos y el generado por la eliminación de residuos orgánicos en vertederos.

El valor predominante se obtuvo generando diésel convencional, cuyo valor se sitúa entre el 81.8 y el 86.69 % del total de costos de cada escenario; dentro de los costos en el análisis, sólo el de capital para las plantas de biotransformación continúa en magnitud. Conforme se reduce la cantidad de emisiones de CO_2 , aumenta el costo del diésel convencional utilizado, ya que conforme cambia el escenario, el número de plantas instaladas aumenta, teniendo un impacto directo en el valor. En cada estado se utiliza la misma cantidad de biodiésel, pero se requieren cantidades iguales de diésel para generar la mezcla; considerando el transporte, los costos varían del valor debido al aumento de la distancia entre los estados, ya que se eleva la tarifa de viaje.

Conclusiones

El presente trabajo ilustra un panorama general sobre la revalorización de los residuos orgánicos, que puede aportar no sólo beneficios económicos, sino también sociales y ambientales, a través de herramientas biológicas. Todos los beneficios que se registraron se muestran en cada una de las soluciones de compromiso evaluadas y presentadas. Los biocombustibles son una solución atractiva a problemáticas económicas y ambientales que puede ayudar a lograr la transición a la energía renovable que tanto se busca.

Se observó que es necesario invertir para lograr la revalorización de los residuos que hoy se desechan en vertederos, causando un problema medioambiental más grave. Esta estrategia también puede ser beneficiosa para entorno, evita emisiones por el vertido de residuos que dejan atrás y coadyuva a crear productos que se integran en la generación de energía sostenible. Por otro lado, es posible identificar que las cadenas de suministro evaluadas a nivel nacional contribuyen al aumento de las emisiones ambientales, por lo que proponer cadenas estatales, ayuda a evitar el impacto ambiental.



El modelo generado puede aplicarse a diferentes estudios de caso, sean municipales, estatales o nacionales, que pueden ser una herramienta capaz de generar soluciones atractivas para las personas responsables de tomar este tipo de decisiones.

Agradecimientos

Se agradece al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencia y Tecnología por los recursos de la beca postdoctoral otorgada a Sergio Iván Martínez Guido.

Referencias

- [1] K. Im-orb, A. Arpornwichanop y L. Simasatitkul, "Process intensification approach for design and optimization of biodiesel production from palm fatty acid distillate", *Biotechnology Reports*, vol. 30, 2021, DOI: 10.1016/j.btre.2021.e00622
- [2] D. M. Matos-Ríos, J. M. Ponce-Ortega y C. Gutiérrez-Antonio, "Cadena de suministro para la producción de biocombustibles", *Ciencia*, vol. 72, pp. 10-17, 2021.
- [3] A. Syafiuddin, J. H. Chong, A. Yuniarto y T. Hadibarata, "The current scenario and challenges of biodiesel production in Asian countries: A review", *Bioresource Technology Reports*, vol. 12, p. 100608, 2020, DOI:10.1016/j.biteb.2020.100608
- [4] J. M. Fonseca, J. G. Teleken, V. de Cinque Almeida y C. da Silva, "Biodiesel from waste frying oils: Methods of production and purification", *Energy Conversion Management*, vol. 184, pp. 205-218, 2019, DOI:10.1016/j.enconman.2019.01.061
- [5] H. C. Nguyen, S. Liang, T. Doan, C. Su y P. Yang, "Lipase-catalyzed synthesis of biodiesel from black soldier fly (*Hermetica illucens*): Optimization by using response surface methodology", *Energy Conversion Management*, vol. 145, pp. 335-342, 2017, DOI: 10.1016/j.enconman.2017.05.010
- [6] K. C. Surendra, R. Olivier, J. K. Tomberlin, R. Jha y S. K. Khanal, "Bioconversion of organic wastes into biodiesel and animal feed via insect farming", *Renewable Energy*, vol. 98, pp. 197-202, 2016, DOI: 10.1016/j.renene.2016.03.022.
- [7] H. C. Nguyen, S.-H. Liang, S.-S. Chen, C.-H. Su, J.-H. Lin y C.-C. Chien, "Enzymatic production of biodiesel from insect fat using methyl aceta-



- te as an acyl acceptor: Optimization by using response surface methodology," *Energy Conversion Management*, vol. 158, pp. 168-175, 2018, DOI: 10.1016/j.enconman.2017.12.068.
- [8] S. Jung, J.-M Jung, Y. F. Tsang, A. Bhatnagar, W.-H. Chen, K.-Y. Andrew Lin y E. E. Kwon, "Biodiesel production from black soldier fly larvae derived from food waste by non-catalytic transesterification", *Energy*, vol. 238, p. 121700, 2022, DOI: 10.1016/j.energy.2021.121700
- [9] C. Wang, L. Qian, W. Wang, T. Wang, Z. Deng, F. Yang, J. Xiong y W. Feng, "Exploring the potential of lipids from black soldier fly: New paradigm for biodiesel production (ii)–Extraction kinetics and thermodynamic", *Renewable Energy*, vol. 119, pp. 12-18, 2018, DOI: 10.1016/j.renene.2017.04.063.
- [10] H. C. Nguyen, M. L. Nguyen, S. Liang, C. Su y F. Wang, "Switchable Solvent-Catalyzed Direct Transesterification of Insect Biomass for Biodiesel Production", *Bio-Energy Research*, vol. 13, no. 2, pp. 563-570, 2020, DOI: 10.1007/s12155-019-10085-8
- [11] M. Elsayed, Y. Ran, P. Ai, M. Azab, A. Mansour, K. Jin, Y. Zhang y A. Abomohra, "Innovative integrated approach of biofuel production from agricultural wastes by anaerobic digestion and black soldier fly larvae", *Journal of Cleaner Production*, vol. 263, p. 121495, 2020, DOI: 10.1016/j.jclepro.2020.121495.
- [12] C. Wong, S. Rosli, Y. Uemura, Y. C. Ho, A. Leejeerajumnean, W. Kiatkittipong, C. Cheng, M. Lam y J. Lei, "Potential Protein and Biodiesel Sources from Black Soldier Fly Larvae: Insights of Larval Harvesting Instar and Fermented Feeding Medium", *Energies (Basel)*, vol. 12, no. 8, p. 1570, 2019, DOI: 10.3390/en12081570
- [13] Secretaría de Energía. "Atlas Nacional de Biomasa". Gobierno de México. <https://www.gob.mx/sener/articulos/atlas-nacional-de-biomasa> (consultado el 29 de abril de 2023).
- [14] P. Pradhan, P. Gadkari, A. Arora y S. M. Mahajani, "Economic feasibility of agro waste pelletization as an energy option in rural India", *Energy Procedia*, vol. 158, pp. 3405-3410, 2019, DOI: 10.1016/j.egypro.2019.01.936
- [15] Secretaría de Energía. "Prospectiva de Energías Renovables 2016-2030," https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/177622/Prospectiva_de_Energias_Renovables_2016-2030.pdf. (Consultado el 29 de abril de 2023).
- [16] Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. "Inventa-

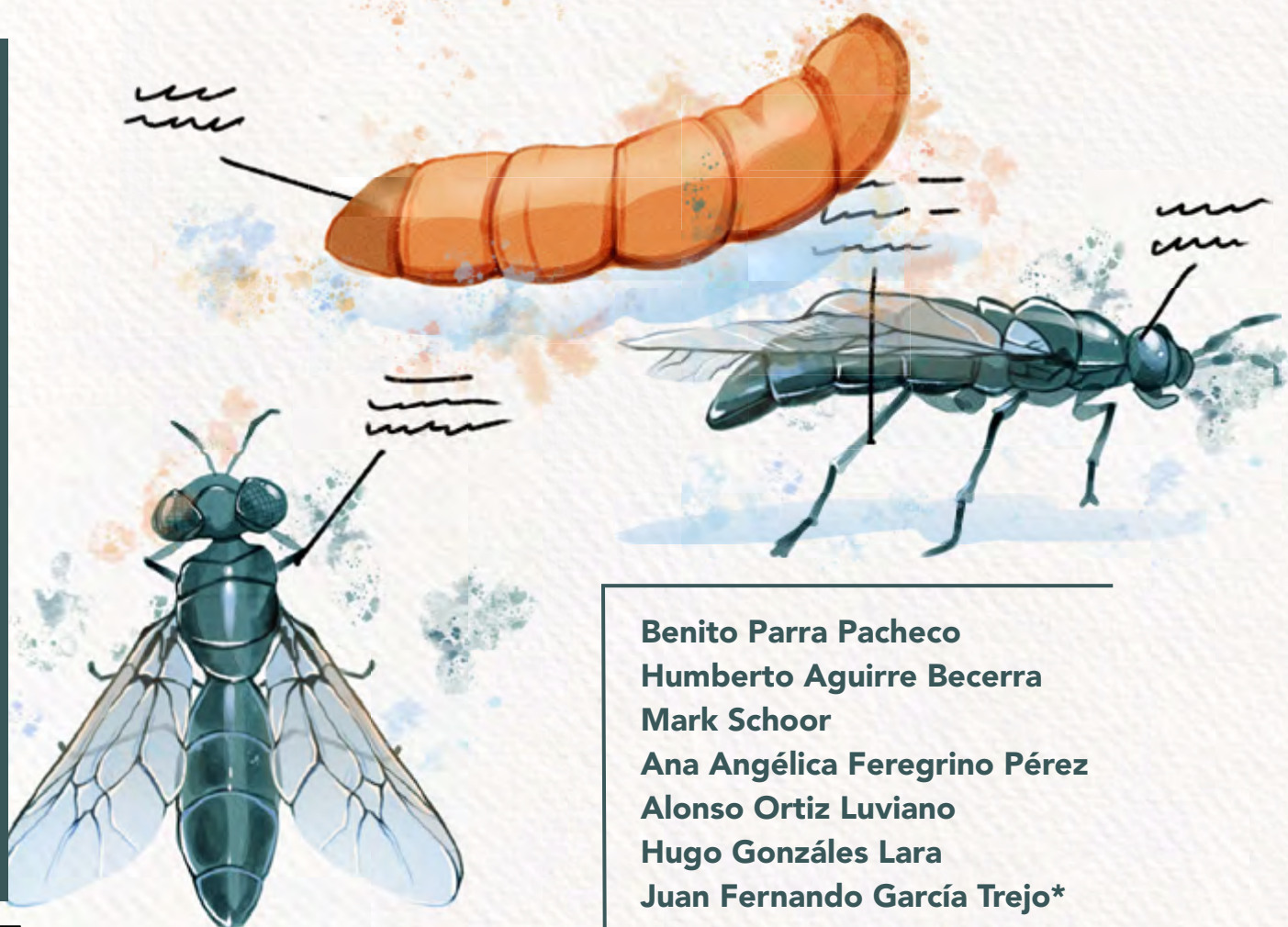


- rio Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero". Gobierno de México. <https://www.gob.mx/inecc/acciones-y-programas/inventario-nacional-de-emisiones-de-gases-y-compuestos-de-efecto-invernadero> (consultado el 28 de abril de 2023).
- [17] W. Pang, D. Hou, J. Ke, J. Chen, M. T. Holtzapple, J. K. Tomberlin, H. Chen, J. Zhang y Q. Li, "Production of biodiesel from CO_2 and organic wastes by fermentation and black soldier fly", *Renewable Energy*, vol. 149, pp. 1174-1181, 2020, DOI: 10.1016/j.renene.2019.10.099
- [18] J. Suckling, A. Druckman, R. Small, F. Cecelja y M. Busse-
- maker, "Supply chain optimization and analysis of *Hermetia illucens* (black soldier fly) bioconversion of surplus foodstuffs", *Journals of Cleaner Production*, vol. 321, p. 128711, 2021, DOI: 10.1016/j.jclepro.2021.128711.
- [19] Bioenergy Technologies Office. "GREET: The Greenhouse Gases, Regulated Emissions, and Energy Use in Transportation Model | Department of Energy", <https://www.energy.gov/eere/bioenergy/articles/greet-greenhouse-gases-regulated-emissions-and-energy-use-transportation> (consultado el 29 de abril de 2023).



CARACTERÍSTICAS ANATÓMICAS DE LA LARVA DE MOSCA SOLDADO NEGRO (*HERMETIA ILLUCENS*) ALIMENTADA CON RESIDUOS DE JITOMATE

ANATOMICAL CHARACTERISTICS OF BLACK
SOLDIER FLY LARVAE (*HERMETIA ILLUCENS*) FED
WITH TOMATO RESIDUES



Benito Parra Pacheco
Humberto Aguirre Becerra
Mark Schoor
Ana Angélica Feregrino Pérez
Alonso Ortiz Luviano
Hugo Gonzáles Lara
Juan Fernando García Trejo*

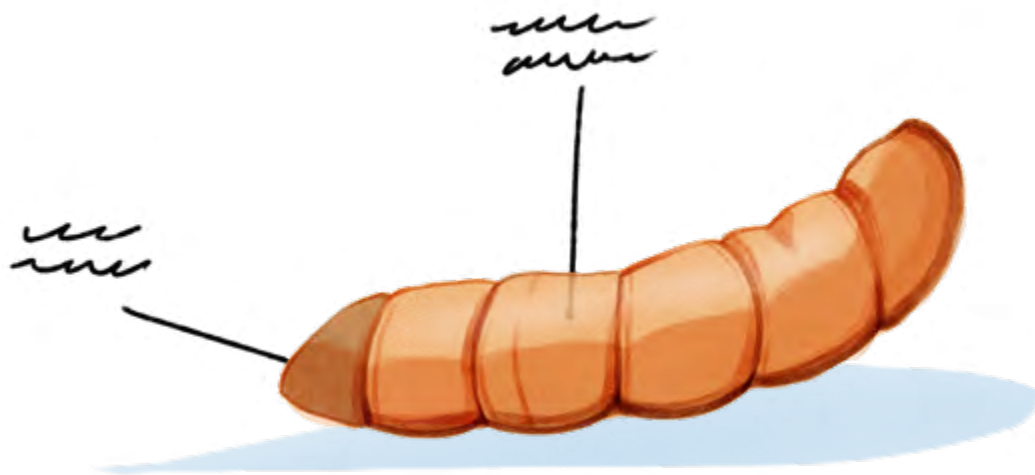
Universidad Autónoma de Querétaro,
Santiago de Querétaro, México

*fernando.garcia@uaq.mx

Resumen

En este estudio se evalúa la eficacia de los residuos de plantas de jitomate como fuente de alimentación para la larva de mosca soldado negra. Se suministraron dietas a base de frutos, tallos y hojas a estos organismos (además de una dieta estándar como control) y se cuantificaron peso, dimensiones y mortalidad de los especímenes al final del proceso. El mayor peso se obtuvo de los residuos de fruto, mientras que los más bajos se presentaron en las larvas alimentadas con tallos; dicha dieta, además, presentó el mayor porcentaje de mortalidad, seguida de las hojas y por último el fruto. Por otro lado, la longitud larval mostró un gradiente de tamaño: las más pequeñas se presentaron en tallo, seguido de hoja y finalmente fruto; sin embargo, las más grandes fueron obtenidas del control. En cuanto al ancho de las larvas, el valor más alto alcanzado en todos los alimentos y dosis fue de 4 mm, mientras que el control presentó valores cercanos a los 5 mm. Se concluye que, aunque el residuo de jitomate expone un desempeño inferior a la dieta estandarizada, su potencial podría explotarse mediante métodos de pretratamiento.

Palabras clave: agroindustria, características anatómicas, *Hermetia illucens*, residuos de jitomate.



Abstract

In this study, the efficacy of tomato plant residues as a food source for black soldier fly larvae is evaluated. Diets based on fruits, stems and leaves were fed to these organisms and weights and dimensions of the specimens at the end of the process were quantified. The highest weights were obtained from fruit residues, while the lowest weights were obtained from larvae fed with stems; this diet also presented the highest mortality interval, followed by leaves and finally fruit. On the other hand, larval length presented a size gradient: the smallest larvae were found in stems, followed by leaves and finally fruit; however, the largest larvae were obtained from the control. As for the larval width, the larval width was 4 mm for all foods and doses, while the control presented values close to 5 mm. It is concluded that, although the tomato residue presents a lower performance than the standardized diet, its potential could be exploited by pretreatment methods.

Keywords: agroindustry, anatomical characteristics, *Hermetia illucens*, tomato residues.





Introducción

La larva de mosca soldado negra (*Hermetia illucens*) es un díptero perteneciente a la familia *Stratiomyidae*; numerosos estudios se han centrado en este organismo debido a su eficiencia en la conversión de residuos orgánicos de origen vegetal y animal en comparación con otras especies [1]. La generación de residuos orgánicos en la industria va en aumento debido a la demanda de alimentos para animales y humanos, como resultado del incremento de la población mundial [2], lo cual implica un desafío para la humanidad. Los métodos existentes para el tratamiento de restos orgánicos (rellenos sanitarios, sitios de disposición a cielo abierto, compostaje o incineración [3]) en ocasiones resultan insuficientes a causa de la ingente cantidad desechada diariamente; así, la resultante contaminación de suelo, agua y aire pone en riesgo la salud de las comunidades y la integridad de ecosistemas completos [4]. Otro aspecto a considerar en la disposición de residuos orgánicos es el tiempo de descomposición, que depende de la constitución bioquímica mayoritaria del desecho orgánico; cuando la descomposición requiere lapsos extendidos, se crean focos de infección, alojamiento de plagas [5] y emisiones de gases de efecto invernadero [6].

Por otro lado, la agricultura es uno de los sectores donde abundan los residuos orgánicos: se estiman 1300 millones de toneladas durante la cadena de producción, manejo, almacenamiento, procesamiento, distribución y consumo [7]. Parte de esta masa se reaprovecha como alimento para ganado, principalmente la procedente del cultivo de cereales y leguminosas [8]. Existen dos categorías de estos desechos: fibrosos y salvados; la digestibilidad puede ser alta (como la cáscara de soya y pulpa de cítricos), o baja en el caso del bagazo de caña de azúcar, cáscara de cacahuate y harina de cacao [9]; algunas funciones de tales despojos son aportar proteína cruda, energía y antioxidantes [10]. En función de su tipo, los residuos generados en la agroindustria son procesados como ingrediente principal o suplementario en la formulación de alimentos. Por otro lado, existen residuos orgánicos sin valor comercial e inaprovechables en otras cadenas productivas; es decir, difíciles de incorporar a la economía circular, dados su contenido de componentes antinutricionales y baja digestibilidad [11].

Algunos estudios se han enfocado en los residuos alimenticios no aptos para el consumo animal; por ejemplo, en [12] se evaluó la pasta de jitomate para la alimentación de ganado caprino a inclusión máxima del 40 % de la dieta en peso seco; el resultado fue un aumento en la producción



y contenido lipídico en la leche. En contraparte, otro estudio revela que la ingesta del jitomate mayor a 1.5 kg (100 g materia seca) por día puede causar heces blandas en las cabras; a su vez, el contenido nutricional de la planta de tomate presentó una baja disponibilidad ruminal de proteína bruta [13]. Aquí cabe añadir que hay tecnologías alternativas cuyo objetivo es el aprovechamiento holístico de los residuos de tomate: para la generación de carbohidratos [14], procesamiento de los tallos como material de construcción [15], elaboración de compostas [16], producción de celulosa [17], vermicomposta [18], extracción de compuestos bioactivos [19], entre otras.

Como se mencionó al inicio, la larva de mosca soldado negro (LMSN) exhibe potencial como herramienta biológica para el tratamiento de residuos orgánicos [1]; se han llevado a cabo pruebas en lodos fecales, heces, estiércol vacuno, cadáveres de aves, desechos frutales, vegetales y restaurantes [20], [21], [22]. Otros autores han intentado sin éxito alimentar la larva con hojas de la planta de jitomate: hallaron una mortalidad del 100 % [23]. Por tanto, el presente trabajo se propone reivindicar la planta de jitomate como dieta eficaz para la LMSN mediante la caracterización anatómica (longitud, anchura y peso) y tasación de mortalidad de la LMSN alimentada con dicha materia.

Metodología

Obtención de la LMSN

Las larvas de mosca soldado negra se recolectaron de la planta de reproducción del laboratorio de bioingeniería de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Querétaro. Contaban con seis días de vida y habían sido alimentadas con una dieta estandarizada hasta ese punto.

Obtención de residuos de la planta de jitomate

Los residuos de la planta de jitomate se rescataron de los invernaderos de la Universidad Autónoma de Querétaro; la variedad utilizada fue *Saladette* (portainjerto: multifort; injerto: variedad "macizo"). Las hojas se recogieron tras la poda de las plantas de tomate; se eligieron los frutos no aptos para la venta debido a su color, forma, integridad o por deficiencia nutritiva. Los tallos se colectaron durante la etapa final de la producción del cultivo de tomate.



...La larva de mosca soldado negra es un díptero eficaz en la conversión de residuos orgánicos de origen vegetal y animal. En este estudio, se evalúa la eficacia de los residuos de plantas de jitomate como fuente de alimentación para la larva.



En lo sucesivo, el material se almacenó a $-12\text{ }^{\circ}\text{C}$ en un congelador Torrey CHTC16QW; posteriormente se descongelaron a temperatura ambiente y se introdujeron en una trituradora de ensilaje de 12 hp (Azteca) para obtener fragmentos pequeños.

Dosis de alimento

Las seis dietas seleccionadas se clasifican con base en la parte de la planta: hojas, frutos y tallos; y la cantidad de alimento brindado a las larvas: 100, 150, 200, 250, 300 y 350 mg/larva/día. Se colocó cada tipo de residuo por triplicado en un recipiente plástico circular de 500 ml cubierto con una tapa perforada con 35 agujeros de $3/8''$. Se implantaron 30 larvas en cada contenedor y se introdujeron en una incubadora microbiológica Thermo Scientific IGS100 a $30\text{ }^{\circ}\text{C}$ durante 10 días con un fotoperiodo de 0:24 horas (luz:oscuridad) sin regulación de humedad relativa.

Como control se adoptó la dieta Gainesville, popular para el cultivo de este organismo en procesos industriales. La cantidad utilizada fue 200 mg alimento/larva/día. Tanto el control como las dosis de residuos de jitomate se reportan en peso húmedo.

Cálculo de mortalidad y medición de características anatómicas

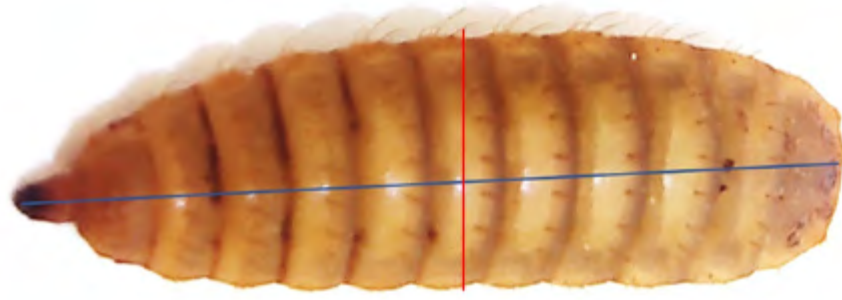
El porcentaje de mortalidad se calculó mediante la Ecuación 1 después de los 10 días que duró el experimento. Se entiende como la proporción de larvas que no sobrevivieron al tratamiento respecto a la totalidad de individuos que lo iniciaron.

$$\%M = \frac{\text{numero de larvas iniciales} - \text{numero de larvas cosechadas}}{\text{numero de larvas iniciales}} \times 100$$

Por su parte, la longitud se tomó desde la cabeza hasta la cola de la larva con ayuda de un vernier digital. La anchura se graduó en la parte media del cuerpo larval (Figura 1).



FIGURA 1. Representación de toma de medidas de la LMSN: largo (línea azul) y ancho (línea roja).



Resultados y discusión

Porcentaje de mortalidad

TABLA 1. Mortalidad en los residuos utilizados como alimento a diferentes dosis.

La mortalidad más elevada se presentó en la dosis de 100 mg/larva/día de tallo, con un 33 %, debido a que uno de los triplicados para esta dosis murió entre los días 9 y 10, justo en la etapa final de la experimentación. Respecto a la dieta basada en hojas, la única dosis que mostró un porcentaje nulo fue la de 200 mg. Por otro lado, el fruto presentó los porcentajes más bajos del experimento con un 1 y 3 % respectivamente en las dosis de 300 y 350 mg, y valores nulos en las demás. Por último, el control exhibió un 6 % (Tabla 1).

ALIMENTO	DOSIS (MG ALIMENTO/LARVA/DÍA)	PORCENTAJE DE MORTALIDAD (%)
Hoja	100	2
	150	6
	200	0
	250	2
	300	12
	350	6
Tallo	100	33
	150	0
	200	0
	250	0
	300	2
	350	0
Fruto	100	0
	150	0
	200	0
	250	0
	300	1
	350	3
Control	200	6

Longitud y anchura de la LMSN

La longitud individual de las larvas fue diferente para todas las dosis en cada tratamiento. La menor medida se mostró en el alimento a base de tallos, con un rango de 10 a 17 mm (se considera que toma los valores más pequeños debido a la mortalidad de uno de los triplicados en la dosis de 100 mg). Le siguen las longitudes de la larva alimentada con hojas, cuyo rango va de 13 a 16 mm, y las alimentadas con el fruto con medidas de 15 a 18 mm. Sin embargo, el control mostró la magnitud más elevada, con 20 mm, valor que no se presentó en ningún otro grupo.

Con respecto a la anchura larval, el valor se mantuvo alrededor de 4 mm, con excepción de las dosis de 100 mg en tallo y hoja, donde se midieron 3 mm aproximadamente. Por otro lado, las larvas más anchas se vieron en el control y la dosis de 350 mg en fruto, con 5 mm aproximadamente (Tabla 2).

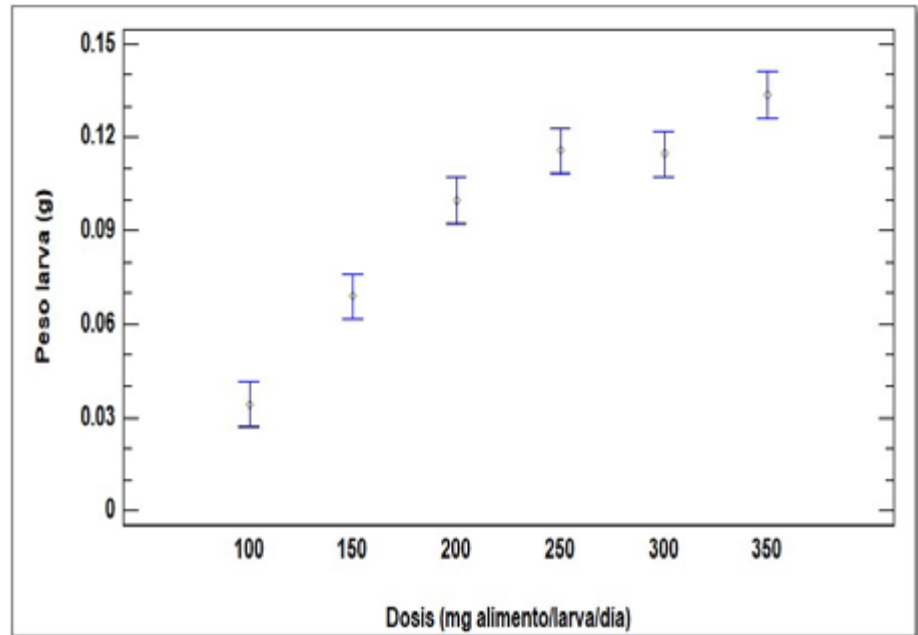
TABLA 2. Largo y ancho de LMSN cultivada con diferentes alimentos y dosis.

ALIMENTO	DOSIS (MG ALIMENTO/LARVA/DÍA)	LONGITUD (MM)	ANCHURA (MM)
Tallo	100	10.82 ± 2.60	3.46 ± 0.27
	150	14.47 ± 1.61	4.04 ± 0.43
	200	15.35 ± 1.50	4.08 ± 0.38
	250	15.54 ± 1.40	4.52 ± 0.33
	300	15.97 ± 1.80	4.77 ± 0.27
	350	17.23 ± 1.10	4.84 ± 0.18
Hoja	100	13.02 ± 2.13	3.64 ± 0.47
	150	15.77 ± 2.11	4.02 ± 0.64
	200	16.37 ± 1.87	4.19 ± 0.42
	250	16.55 ± 1.71	4.19 ± 0.33
	300	16.60 ± 1.76	4.05 ± 0.35
	350	16.86 ± 1.45	4.23 ± 0.34
Fruto	100	15.43 ± 2.21	4.10 ± 0.55
	150	16.33 ± 1.25	4.43 ± 0.35
	200	17.32 ± 1.09	4.72 ± 0.38
	250	18.01 ± 1.91	4.75 ± 0.49
	300	18.76 ± 1.43	4.76 ± 0.41
	350	18.39 ± 1.60	5.02 ± 0.36
Control	200	20.62 ± 1.47	5.58 ± 0.46

Peso acumulado de LMSN en diferentes alimentos

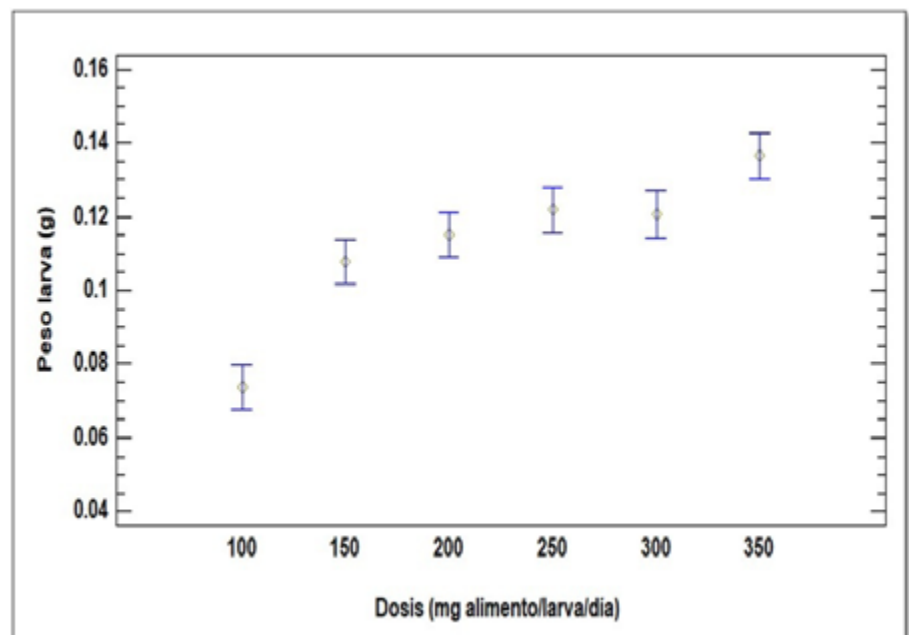
La acumulación del peso fue distinta entre tratamientos a base de residuos de jitomate, aunque en todos predomina una tendencia positiva; no obs-

FIGURA 2. Peso acumulado de *LMSN* después de 10 días de su alimentación con tallos de planta de jitomate. Datos presentados con una prueba estadística de Fisher al 95 % de confianza.



Por otra parte, los pesos acumulados en las dosis de dieta de hojas no mostraron diferencias significativas entre los tratamientos, excepto las de 100 y 350 mg (Figura 3).

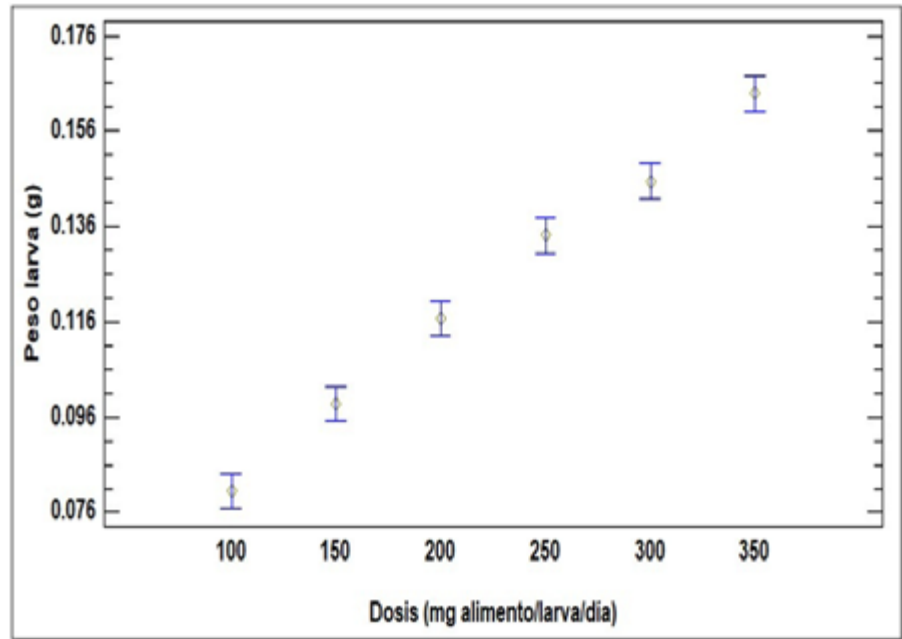
FIGURA 3. Peso acumulado de *LMSN* después de 10 días de su alimentación con hoja de planta de jitomate. Datos presentados con una prueba estadística de Fisher al 95 % de confianza.



La dieta a base de fruto resultó en los pesos más elevados entre los tres tipos de alimentación derivada de las plantas de jitomate. El peso de la *LMSN*, al igual que en los otros dos tratamientos experimentales, fue acumulativo en función de la dosis (seguramente debido a la composición nutricional del fruto de jitomate, donde destacan los azúcares totales, proteínas y fibra) [24] (Figura 4).

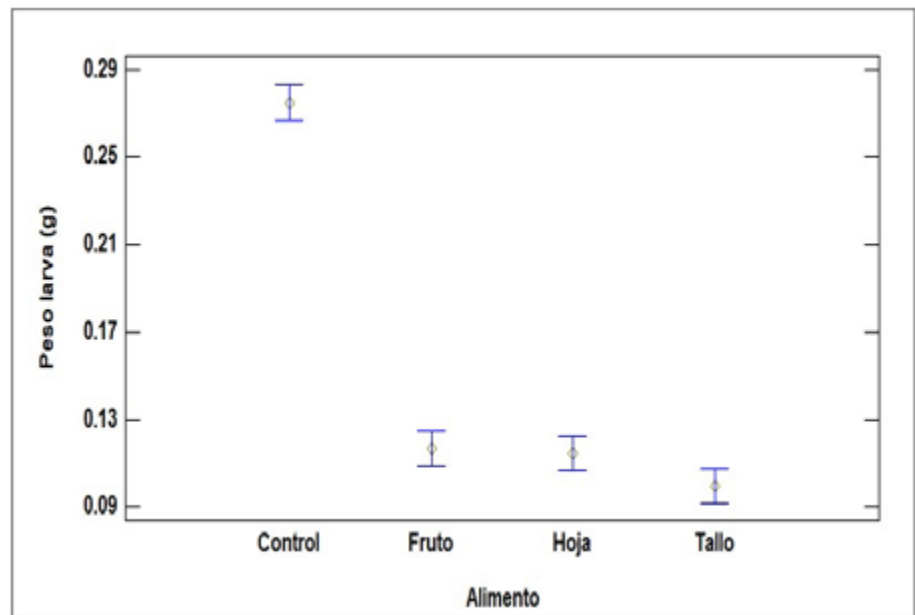


FIGURA 4. Peso acumulado de LMSN alimentada con frutos de jitomate en un periodo de 10 días. Datos presentados con una prueba estadística de Fisher al 95 % de confianza.



La mortalidad se mantuvo por debajo de los índices publicados por otros autores [23]; asimismo, el peso y tamaño (específicamente la longitud) fueron más altos entre los residuos de jitomate, pero similares a otros datos reportados para dietas basadas en residuos vegetales [22] y vegetales íntegros [25].

FIGURA 5. Comparación de pesos de larva en las dosis de 200 mg de alimento.



Conclusiones

El ancho de las larvas se mantuvo constante entre los tipos de residuos y dosis de alimentación; por otro lado, las longitudes y pesos mostraron diferencias entre los tratamientos; el fruto a dosis de 300 y 350 mg ofreció la mejor productividad en este sentido. En otras palabras, estas características demuestran que la planta de jitomate puede constituir un recurso valioso en la crianza de LMSN para la reconversión de desechos orgánicos.



No obstante, las dimensiones y pesos obtenidos son inferiores en comparación con una larva alimentada con una dieta estandarizada (Figura 5). El siguiente paso para esta línea de investigación es encontrar un balance nutricional mediante la implementación de pretratamientos para aprovechar los residuos al máximo y lograr una mayor acumulación de biomasa larval.

Agradecimientos

Al CONAHCYT por el otorgamiento de la beca de posgrado de los autores.

Al laboratorio de Bioingeniería de la Universidad Autónoma de Querétaro por brindar los especímenes sometidos al presente experimento, así como a los invernaderos productores de jitomate del campus Amazcala de esta misma institución por facilitar el recurso empleado para la formulación de las dietas.

Referencias

- [1] S. Siddiqui, B. Ristow, T. Rahayu, N. Susetya, N. Widya, K. Nisa, B. Mategoko, S. Smetana, M. Saki, A. Nawaz, y A. Nagdalian, "Black soldier fly larvae (BSFL) and their affinity for organic waste processing", *Waste Management*, vol. 140, pp. 1-13, 2022, DOI: 10.1016/j.wasman.2021.12.044
- [2] Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura, "La agricultura mundial en la perspectiva del año 2050", presentado en Foro de Expertos de Alto Nivel, Roma, Ita., 12-13 Oct., 2009.
- [3] I. Kinasih, Y. Suryani, E. Paujiah, R. Arba, S. Afiyati, Y. Adawiyah, y R. Eka, "Performance of Black Soldier Fly, *Hermetia illucens*, Larvae during valorization of organic wastes with changing quality", *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, vol. 593, no. 1, 2020, DOI: 10.1088/1755-1315/593/1/012040
- [4] B. Pastor, Y. Velasquez, P. Gobbi, y S. Rojo, "Conversion of organic wastes into fly larval biomass: bottlenecks and challenges" *Journal of Insects as Food and Feed*, vol. 1, no. 3, pp. 179-193, 2015, DOI: 10.3920/JIFF2014.0024
- [5] C. Yik, L. Siew, L. Po, L. Tey, y L. Joo, "Comparison of *Hermetia illucens* larvae and pre-pupae as potential aqua feed derived from the biotransformation of organic waste", presentado en International Symposium on Green and Sustaina-



- ble Technology, 2019, DOI: 10.1063/1.5126543
- [6] R. Bian, T. Zhang, F. Zhao, J. Chen, C. Liang, W. Li, X. Chai, X. Fang, y L. Yuan, "Greenhouse gas emissions from waste sectors in China during 2006–2019: Implications for carbon mitigation", *Process Safety and Environmental Protection*, vol. 161, pp. 488-497, 2022, DOI: 10.1016/j.psep.2022.03.050
- [7] S. Dahiya, A. Kumar, J. Shanthi, S. Chatterjee, O. Sarkar, y S. Mohan, "Food waste biorefinery: Sustainable strategy for circular bioeconomy", *Bioresource Technology*, vol. 248, pp. 2-12, 2018, DOI: 10.1016/j.biortech.2017.07.176
- [8] M. Rakkar y H. Blanco, "Grazing of crop residues: Impacts on soils and crop production", *Agriculture, Ecosystems & Environment*, vol. 258, pp. 71-90, 2018, DOI: 10.1016/j.agee.2017.11.018
- [9] E. Graminha, A. Gonçalves, R. Pirota, M. Balsalobre, R. Da Silva, y E. Gomes, "Enzyme production by solid-state fermentation: Application to animal nutrition", *Animal Feed Science and Technology*, vol. 144, no. 1, pp. 1-22, 2008, DOI: 10.1016/j.anifeedsci.2007.09.029
- [10] E. Kasapidou, E. Sossidou, y P. Mitlianga, "Fruit and Vegetable Co-Products as Functional Feed Ingredients in Farm Animal Nutrition for Improved Product Quality", *Agriculture*, vol. 5, no. 4, pp. 1020-1034, 2015, DOI: 10.3390/agriculture5041020
- [11] M. Godoy, G. Amorim, M. Barreto, y D. Freire, "Agricultural residues as animal feed: protein enrichment and detoxification using solid-state fermentation", en *Current developments in biotechnology and Bioengineering*, A. Pandey, C. Larroche, y C. Soccol, Eds., Elsevier, 2018, pp. 235-256, 2018, DOI: 10.1016/B978-0-444-63990-5.00012-8.
- [12] W. Mizael, R. Costa, G. Beltrão, F. Ramos, N. Ribeiro, A. Lima, R. Domínguez, y J. Lorenzo, "Effect of the Use of Tomato Pomace on Feeding and Performance of Lactating Goats", *Animals (Basel)*, vol. 10, no. 9, 2020, DOI: 10.3390/ani10091574
- [13] M. Ventura, M. Pieltain, y J. Castanon, "Evaluation of tomato crop by-products as feed for goats", *Animal Feed Science and Technology*, vol. 154, no. 3, pp. 271-275, 2009, DOI: 10.1016/j.anifeedsci.2009.09.004
- [14] A. Moreno, A. Duque, A. González, I. Ballesteros, y M. Negro, "Valorization of Greenhouse Horticulture Waste from a Biorefinery Perspective", *Foods*, vol. 10, no. 4, 2021, DOI: 10.3390/foods10040814
- [15] A. Manríquez, J. Sierra, P. Muñoz, y X. Gabarrell, "Iden-



- tifying potential applications for residual biomass from urban agriculture through eco-ideation: Tomato stems from rooftop greenhouses", *Journal of Cleaner Production*, vol. 295, 2021, DOI: 10.1016/j.jclepro.2021.126360
- [16] I. Tabrika, K. Azim, E. Mayad, y M. Zaafrani, "Composting of tomato plant residues: Improvement of composting process and compost quality by integration of sheep manure", *Organic Agriculture*, vol. 10, no. 2, 2020, DOI: 10.1007/s13165-019-00268-0
- [17] Z. Kassab, I. Kassem, H. Hanache, R. Bouhfid, A. Qaiss, y M. Achaby, "Tomato plant residue as new renewable source for cellulose production: extraction of cellulose nanocrystals with different surface functionalities", *Cellulose*, vol. 27, no. 8, 2020, DOI: 10.1007/s10570-020-03097-7
- [18] M. Soriano, A. Zorpas, J. Navarro, y I. Gómez, "Vermicomposting of tomato wastes", en *Tomato Processing By-Products*, M. Jeguirim y A. Zorpas, Eds. Elsevier, 2021, pp. 201-230, DOI: 10.1016/B978-0-12-822866-1.00010-7
- [19] J. Méndez, K. Ramírez, J. Sandoval, J. Ascacio, D. Boone, M. Govea, y C. Aguilar, "Valorization of Tomato Fruit Processing Residues", en *Agricultural Waste: Environmental Impact, Useful Metabolites and Energy Production*, K. Ramawat, J. Mérillon, y J. Arora, Eds. Springer Singapore, 2023, pp. 215-243, DOI: 10.1007/978-981-19-8774-8_10
- [20] C. Lalander, S. Diener, M. Magri, C. Zurbrügg, A. Lindström, y B. Vinnerås, "Faecal sludge management with the larvae of the black soldier fly (*Hermetia illucens*) - from a hygiene aspect", *The Science of the Total Environment*, vol. 458, pp. 312-318, may. 2013, DOI: 10.1016/j.scitotenv.2013.04.033
- [21] M. Gold, C. Cassar, C. Zurbrügg, M. Kreuzer, S. Boulos, S. Diener, y A. Mathys, "Biowaste treatment with black soldier fly larvae: Increasing performance through the formulation of biowastes based on protein and carbohydrates", *Waste Management*, vol. 102, pp. 319-329, 2020, DOI: 10.1016/j.wasman.2019.10.036
- [22] P. Borel, F. Hammaz, L. Morand, B. Creton, C. Halimi, D. Sabatier, y C. Demarchelier, "Using black soldier fly larvae reared on fruits and vegetables waste as a sustainable dietary source of provitamin A carotenoids", *Food Chemistry*, vol. 359, 2021, DOI: 10.1016/j.foodchem.2021.129911
- [23] L. Broeckx, L. Frooninckx, L. Slegers, S. Berrens, I. Noyens, S. Goossens, G. Ver-



heyen, A. Wuyts, y S. Van, "Growth of Black Soldier Fly Larvae Reared on Organic Side-Streams", *Sustainability*, vol. 13, no. 23, 2021, DOI: [10.3390/su132312953](https://doi.org/10.3390/su132312953)

[24] Y. Ali, A. Sina, S. Khandker, L. Nessa, E. Tanvir, A. Kabir. I. Khalil, y S. Hua, "Nutritional Composition and Bioactive Compounds in Tomatoes and Their Impact on Human Health and Disease: A review", *Foods*, vol. 10, no. 1, 2020, DOI: [10.3390/foods10010045](https://doi.org/10.3390/foods10010045)

[25] N. Addeo, S. Vozzo, G. Secci, V. Mastellone, G. Piccolo, P. Lombardi, G. Parisi, K. Asiry, Y. Attia, y F. Bovera, "Different combinations of butchery and vegetable wastes on growth performance, chemical-nutritional characteristics and oxidative status of black soldier fly growing larvae", *Animals*, vol. 11, no. 12, 2021, DOI: [10.3390/ani11123515](https://doi.org/10.3390/ani11123515)





RELACIÓN ENTRE LA RESISTENCIA AL CORTE Y LA CURVA DE RETENCIÓN AGUA-SUELO DISPERSO DE LA CIUDAD DE RIOVERDE, S. L. P., MÉXICO

RELATIONSHIP BETWEEN SHEAR STRENGTH
AND SOIL WATER CHARACTERISTIC CURVE OF THE
DISPERSIVE SOIL OF RIOVERDE CITY, S. L. P., MEXICO

César Augusto García Ezquivel^{1*}
Eduardo Rojas González¹
Gustavo Gallegos Fonseca²
María de la Luz Pérez Rea¹
Genoveva Hernández Padrón³

¹Universidad Autónoma de Querétaro,
Santiago de Querétaro, México

²Universidad Autónoma de San Luis Potosí,
San Luis Potosí, México

³Universidad Nacional Autónoma de México,
Ciudad de México, México

*jordan_cesar23@hotmail.com

Resumen

La mecánica de suelos clásica se desarrolla con el estudio de los suelos saturados. Consustancial a esta disertación se establecen modelos constitutivos que explican el comportamiento mecánico y volumétrico de estos sistemas bifásicos, basándose en el principio de esfuerzos efectivos de Terzaghi. Sin embargo, gran parte de la superficie terrestre presenta suelos en estado no saturado que exhiben comportamientos inusuales. Los parámetros de resistencia al cortante que definen la envolvente de falla de los suelos no saturados son: cohesión efectiva (c'), ángulo de fricción efectivo (φ') y efecto de la succión matricial (φ_u) en la cohesión. Estos parámetros son importantes para el análisis de estabilidad de taludes y diseño de cimentaciones. En el presente artículo se exponen series de pruebas triaxiales consolidadas-drenadas a distintos grados de saturación realizadas en trayectoria de humedecimiento en un suelo con características dispersivas en la ciudad de Rioverde, San Luis Potosí; la curva de retención agua-suelo se determina para ambas trayectorias de secado y humedecimiento con la técnica de papel filtro. Los resultados se presentan en diagramas de esfuerzo efectivo contra esfuerzo desviador ($p' - q'$), esfuerzo desviador contra succión ($q' - S$), grado de saturación contra ángulo de fricción efectivo ($S_w - \varphi'$) y grado de saturación contra cohesión efectiva ($S_w - c'$). Se vislumbra que el suelo en estudio alcanza una resistencia máxima para una succión de 2000 kPa y se reduce en 60 % para valores mayores de succión.

Palabras clave: curva de retención agua-suelo, esfuerzos efectivos, GEO, pruebas triaxiales CD, succión matricial, suelos no saturados.





Abstract

Classical soil mechanics is developed with the study of saturated soils. With it, constitutive models are established that can explain the mechanical and volumetric behavior of these two-phase systems based on Terzaghi's effective stress principle. However, in a large part of the earth's surface there are soils in an unsaturated state that present unusual behaviors. The shear strength parameters that define the failure envelope of unsaturated soils are: effective cohesion (c'), effective friction angle (φ') and change in shear resistance generated by change in matric suction. (φ_b). These parameters are important for slope stability analysis and foundation design. This article presents a series of Consolidated-Drained triaxial tests at different degrees of saturation, which were carried out in a wetting trajectory in a soil with dispersive characteristics in the city of Rioverde, S.L.P., México. The water-soil retention curve is determined for both drying and wetting trajectories with the filter paper technique. The results are presented in diagrams of effective stress vs deviator stress ($p' - q'$), deviator stress vs suction ($q' - S$), degree of saturation vs effective friction angle ($S_w - \varphi'$) and degree of saturation vs effective cohesion ($S_w - c'$). It is observed that the soil under study reaches a maximum resistance for a suction of 2000 kPa and is reduced by 60% for higher suction values.

Keywords: soil-water retention curve, effective stress, GEO, triaxial test CD, matric suction, unsaturated soils.

Introducción

El desarrollo de la mecánica de suelos clásica se ha concentrado en el estudio de los suelos saturados, debido al estado saturado que constituye el estado crítico en cuanto a resistencia y asentamientos para los suelos. Otra causa es la practicidad de estudio de la condición bifásica en comparación con la trifásica.

Los suelos saturados son considerados sistemas bifásicos en los cuales los vacíos entre las partículas están ocupados por líquido, por lo que las fases que constituyen este sistema son: líquida (agua) y sólida (partículas de suelo) como muestra la Figura 1.

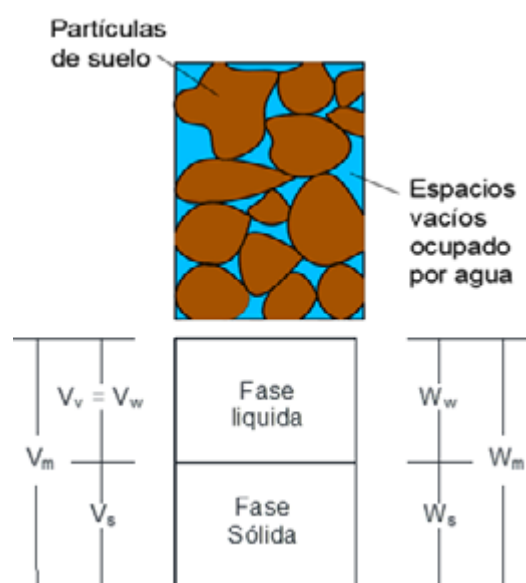


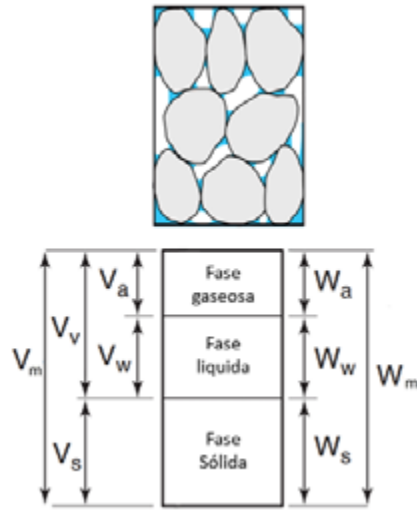
FIGURA 1.
Fases de un suelo saturado.

En 1923, Terzaghi formuló el principio de esfuerzos efectivos para este tipo de suelos, estos controlan el comportamiento mecánico de los mismos, como la resistencia al cortante y los cambios de volumen que se presentan durante procesos de consolidación [1]. La ecuación de esfuerzos efectivos para suelos saturados se escribe en (1), donde el esfuerzo efectivo (σ') es definido como el exceso de esfuerzo total aplicado (σ) sobre la presión de agua en los poros (u_w). Dicho en otras palabras, el esfuerzo efectivo es aquel que actúa solamente en la fase sólida del suelo.

$$\sigma' = \sigma - u_w \quad (1)$$

Empero, gran parte de la población mundial habita centros urbanos donde predominan suelos con niveles freáticos profundos y los vacíos del suelo no se encuentran totalmente ocupados por agua [2]. A estos suelos se les denomina suelos no saturados o parcialmente saturados, los cuales cuentan con tres fases: sólida, líquida y gaseosa (aire y vapor de agua) como se muestra en la Figura 2.

FIGURA 2. Fases de un suelo no saturado [3].



En términos de resistencia al esfuerzo cortante en suelos no saturados, existen tres parámetros necesarios para definir su envolvente de falla: cohesión efectiva (c'), ángulo de fricción efectivo (ϕ') y cambio de la resistencia al corte generado por cambio en la succión matricial (ϕ_b). Los parámetros de resistencia al corte son importantes para el análisis de estabilidad de taludes y diseño de cimentaciones [4].

El análisis de esfuerzo efectivo para un suelo no saturado es presentado en (2) como una extensión de la teoría de suelos saturados por Bishop (1959). Abarca un parámetro χ relacionado al grado de saturación del suelo y también incluye la presión en la fase gaseosa del suelo (u_a) [5].

$$\sigma' = (\sigma - u_a) + \chi (u_a - u_w) \quad (2)$$

En la ecuación anterior, el parámetro χ asume valores de 0 a 1, siendo nulo para suelos secos y 1 para suelos saturados, en cuyo caso la expresión equivale a la ecuación de Terzaghi. La diferencia $u_a - u_w$ corresponde a la succión matricial en los poros, que contribuye al incremento de la resistencia al esfuerzo cortante de suelos finos [6]. En suelos saturados la succión es igual a 0, y varía conforme a la sequedad del suelo en un rango de 0 a 1 GPa [7]. Esta variación afecta el comportamiento mecánico y volumétrico de los suelos no saturados.

La curva de retención agua-suelo (CRAS), también conocida como la curva característica agua-suelo, describe la cantidad de agua retenida en el suelo bajo equilibrio para una succión matricial dada [8]. Generalmente se usa el contenido volumétrico de agua (θ), no obstante, en la práctica de ingeniería geotécnica se utiliza el grado de saturación (S_w), el cual indica el porcentaje de espacios que están ocupados por agua.

La succión actúa un papel complejo en los suelos, ya que para un mismo grado de saturación se presentan valores distintos durante condiciones



de secado o humedecimiento, esto se debe al fenómeno de histéresis [9]. Este fenómeno puede atribuirse a la irregularidad de la geometría de los poros, el efecto del ángulo de contacto de los meniscos de agua, el aire atrapado y la expansión o contracción [10].

En este artículo se presentan resultados experimentales de laboratorio, en los que se observa la resistencia al esfuerzo cortante a distintos grados de saturación. Como objeto de estudio fue seleccionada la ciudad de Rioverde, ubicada en San Luis Potosí, dado que su suelo presenta características dispersivas. El objetivo es determinar la relación que ostenta la succión en la resistencia de este tipo de material.

Materiales y métodos

El suelo de Rioverde (S.L.P.) ofrece un limo inorgánico de alta plasticidad (MH) con características dispersivas, cuyas propiedades índices han sido determinadas en [11]. La mineralogía establecida por difracción de rayos X (DRX) indica la presencia de yeso y sodio.

La experimentación se realizó en dos etapas. La primera estipula el comportamiento hidráulico del suelo por medio del CRAS; para expresar la curva se midió la succión (S) del suelo mediante la técnica del papel filtro [12]. Esta prueba se realiza para la trayectoria de humedecimiento y secado, con la finalidad de obtener valores de succión para el fenómeno de histéresis en el suelo dispersivo. La segunda etapa calcula la resistencia al esfuerzo cortante por medio de pruebas triaxiales consolidadas-drenadas (CD), de acuerdo con la norma ASTM D7181 [13]. Estas pruebas resultan pertinentes debido a que los esfuerzos totales son iguales a los efectivos, ya que la velocidad de aplicación de carga es lenta respecto a la capacidad de drenaje del suelo, por tanto, no se genera presión de poro ($\delta_u = 0$).

Las probetas para la prueba triaxial se fabricaron en un molde cilíndrico de 3.71 cm de diámetro y 7.42 cm de altura. Se compactaron en una prensa manual en tres capas hasta lograr replicar el peso volumétrico seco del material en campo; el anclaje entre capas es viable mediante el método de escarificación. Los instrumentos se prepararon a grados de saturación de 0, 30, 50, 65, 80 y 100 % siguiendo una trayectoria de humedecimiento. En cada experimento se ensayaron tres probetas se aplicaron esfuerzos de confinamiento de 10.00, 20.00 y 30.00 Ton/m². Se realizan dos réplicas de cada prueba.

“...En el presente artículo se exponen series de pruebas triaxiales consolidadas-drenadas a distintos grados de saturación realizadas en trayectoria de humedecimiento en un suelo con características dispersivas en la ciudad de Rioverde, San Luis Potosí.



Los resultados se presentan en diagramas de esfuerzo efectivo contra esfuerzo desviador ($p' - q'$), esfuerzo desviador contra succión ($q' - S$), grado de saturación contra ángulo de fricción efectivo ($S_w - \phi'$) y grado de saturación contra cohesión efectiva ($S_w - c'$).

Resultados y discusión

TABLA 1. Propiedades geotécnicas del suelo de la ciudad de Rioverde S.L.P. [11].

Las propiedades geotécnicas y dispersivas del suelo de la ciudad de Rioverde se muestran en las Tablas 1 y 2 respectivamente. Se puede observar que el suelo corresponde a un limo inorgánico de alta compresibilidad (MH) y presenta un grado de dispersión intermedio, con un peso volumétrico de 1.62 g/cm^3 a un contenido de humedad de 33.21% , densidad seca de 1.21 g/cm^3 y gravedad específica de 3.25 .

Si el suelo cuenta con características dispersivas, es susceptible de presentar colapso por la inestabilidad estructural que adquiere al entrar en contacto con el agua, ya que las partículas de suelo se repelen entre sí debido a la presencia del sodio intercambiable en su estructura.

PROPIEDADES	SÍMBOLO	UNIDAD	VALOR
Gravas	G	%	0.00
Arenas	S	%	2.62
Limos	M	%	87.44
Arcillas	C	%	9.94
Limite líquido (cono inglés)	ll	%	60.55
Limite líquido (copa de Casagrande)	ll	%	55.30
Limite plástico	lp	%	48.98
Índice de plasticidad (cono inglés)	pi	%	11.57
Índice de plasticidad (copa de Casagrande)	pi	%	6.32
Contracción lineal	ls	%	3.71
Contracción volumétrica	vs	%	11.62
Clasificación del suelo			mh
Contenido de humedad natural	ω	%	33.21
Peso volumétrico	γ_m	g/cm^3	1.62
Peso volumétrico seco	γ_d	g/cm^3	1.21
Gravedad específica	S_s		3.25

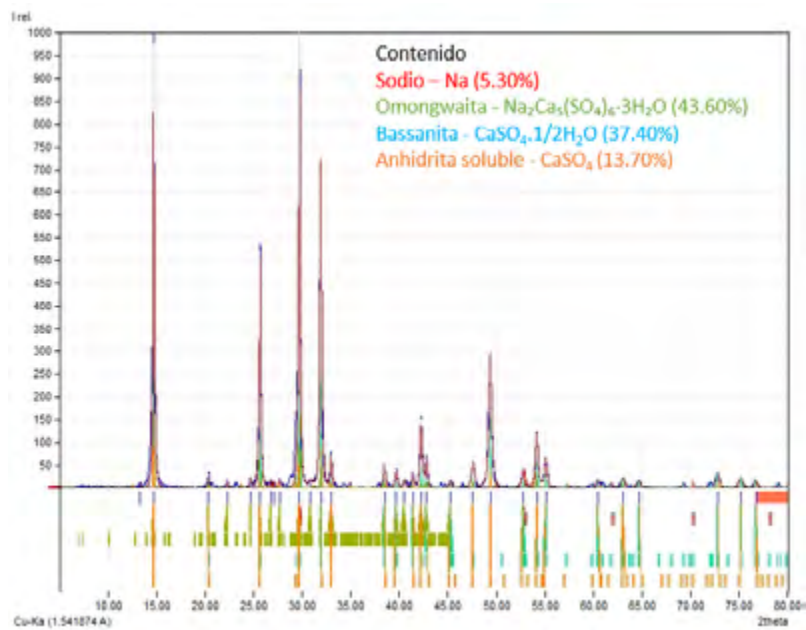


TABLA 2.
Propiedades geotécnicas del suelo de la ciudad de Rioverde, S. L. P. Obtenido de pruebas físicas especiales [11].

FIGURA 3. Análisis mineralógico por difracción de rayos X del suelo dispersivo de la ciudad de Rioverde, S.L.P., México.

PRUEBA	GRADO DE DISPERSIÓN
Crumb	Intermedio
Doble Hidrómetro	Dispersivo
Pinhole	Intermedio
Dictamen Final	Intermedio

En la Figura 3 se muestra el difractograma resultante del análisis de DRX, se observa que el suelo se compone de 43.60 % omongwaita, 37.40 % bassanita, 13.70 % anhidrita soluble y 5.30 % sodio. La anhidrita es un mineral común en depósitos de sal que, junto con la bassanita, al hidratarse se transforman en yeso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). Por otro lado, la omongwaita es un mineral con una estructura similar a la bassanita que se puede encontrar como pequeñas inclusiones en el yeso.



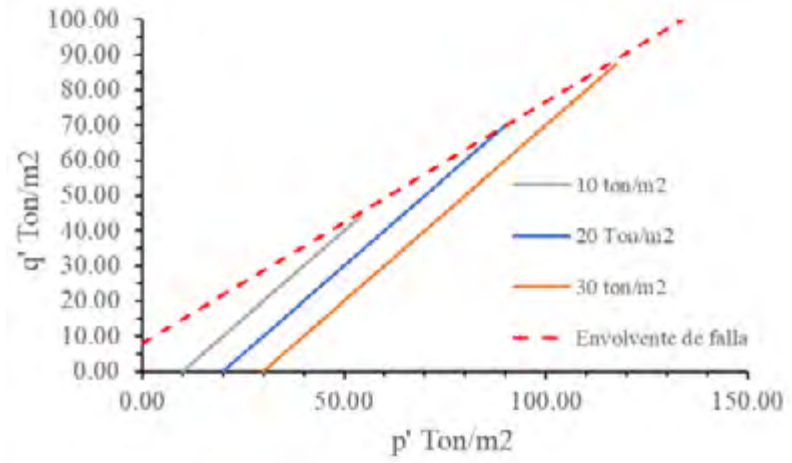
El método del papel filtro es una técnica económica que permite medir la succión en un rango de 0.01 a 100 mpa. Sin embargo, la precisión de los resultados dependerá de la adecuada medición de la humedad del papel filtro. No se debe dejar expuesto demasiado tiempo durante la medición, dado que se pueden presentar pérdidas de humedad, lo cual hace que la succión varíe drásticamente.

Las curvas de retención de agua del suelo estudiado se obtuvieron en trayectoria de secado y humedecimiento (Figura 4). Se observa:

1. La succión aumenta de manera no lineal hasta presentar valores de 208 mpa a un grado de saturación de 0 %.
2. El suelo presenta valores mayores de succión para la trayectoria de secado a comparación del humedecimiento.

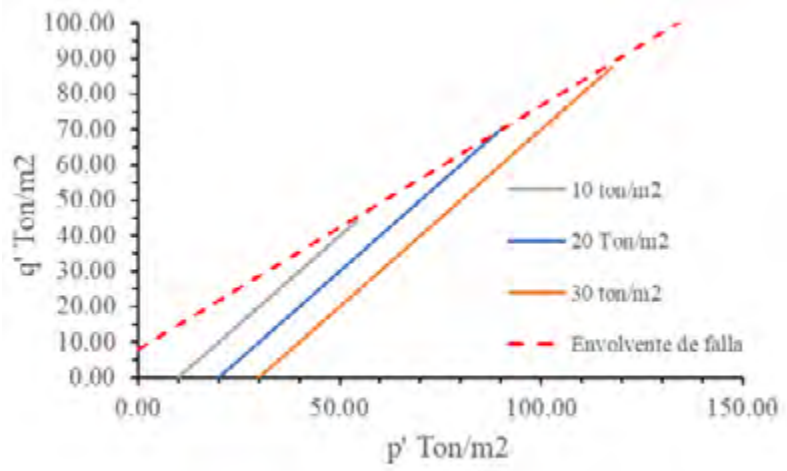


FIGURA 4. CRAS para la trayectoria de secado y humedecimiento del suelo dispersivo de la ciudad de Rioverde, S.L.P.

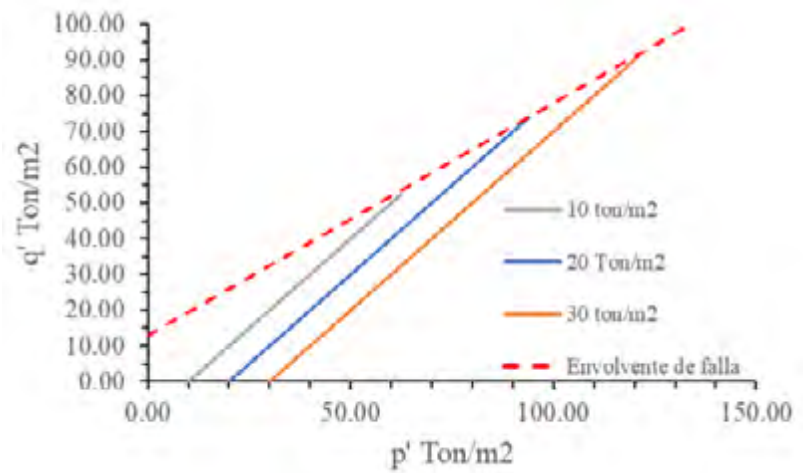


Los diagramas de esfuerzo efectivo contra esfuerzo desviador ($p' - q'$), obtenidos de las pruebas triaxiales CD a grados de saturación de 0, 30, 50, 65, 80 y 100 %, se muestran en las Figuras 5 a 10.

FIGURA 5. Diagramas $p' - q'$ de pruebas triaxiales CD ensayadas a $S_w = 0\%$.
a) Réplica 1,
b) Réplica 2.



a)



a)



FIGURA 6. Diagramas p' - q' de pruebas triaxiales CD ensayadas a $S_w = 30\%$.
a) Réplica 1,
b) Réplica 2.

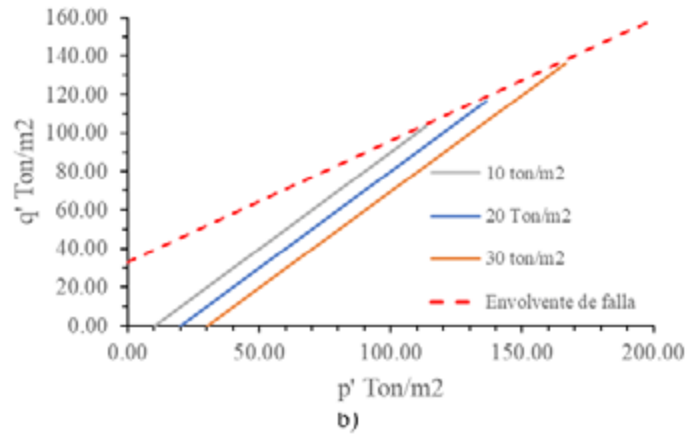
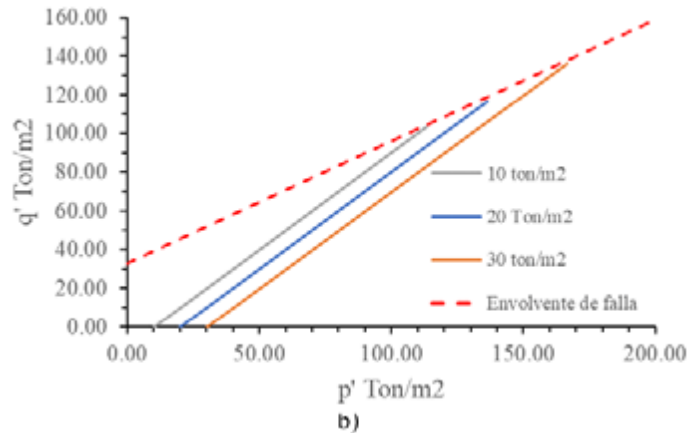
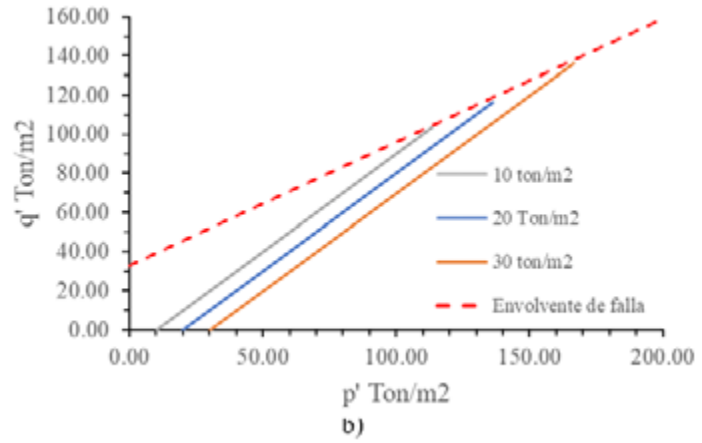
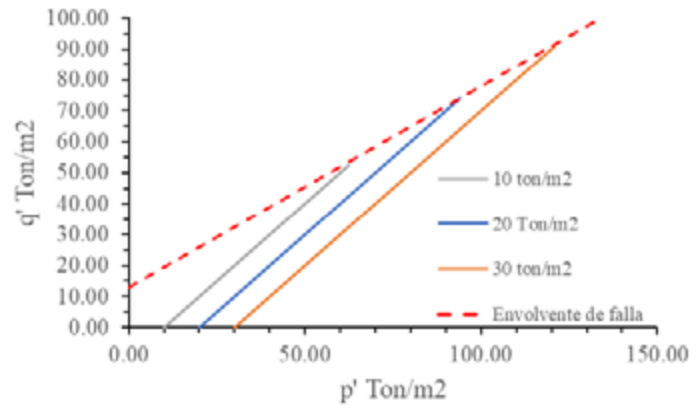


FIGURA 7. Diagramas p' - q' de pruebas triaxiales CD ensayadas a $S_w = 50\%$.
a) Réplica 1
b) Réplica 2.



FIGURA 8. Diagramas p' - q' de pruebas triaxiales CD ensayadas a $S_w = 65\%$.

- a) Réplica 1
- b) Réplica 2.

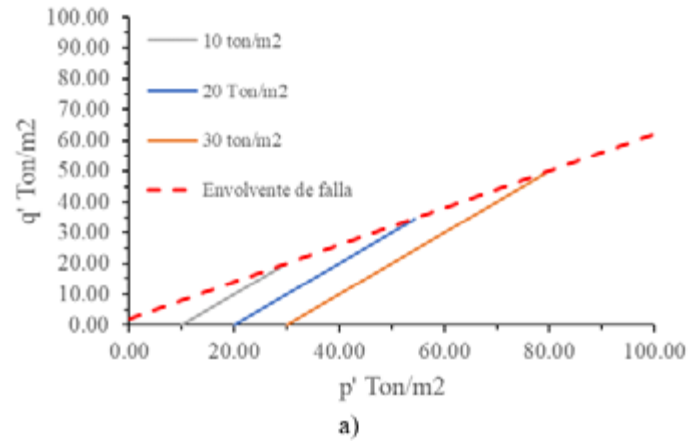
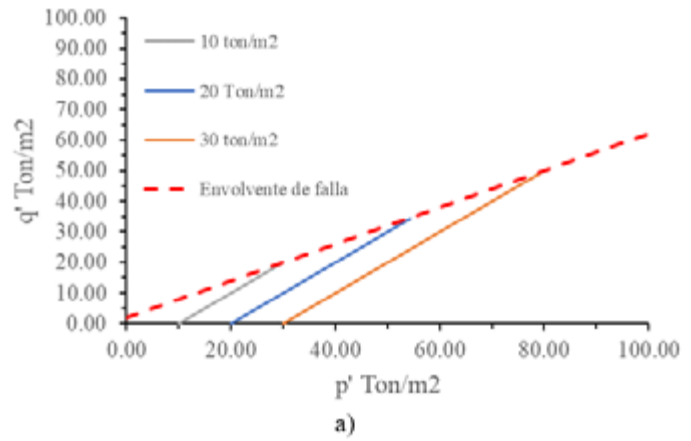
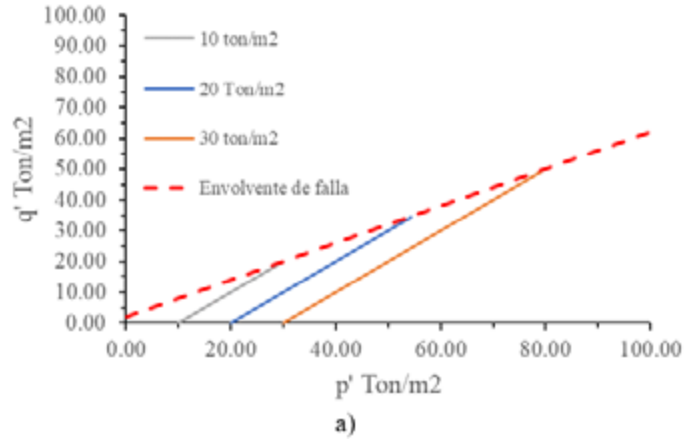


FIGURA 9. Diagramas p' - q' de pruebas triaxiales CD ensayadas a $S_w = 80\%$.

- a) Réplica 1,
- b) Réplica 2.

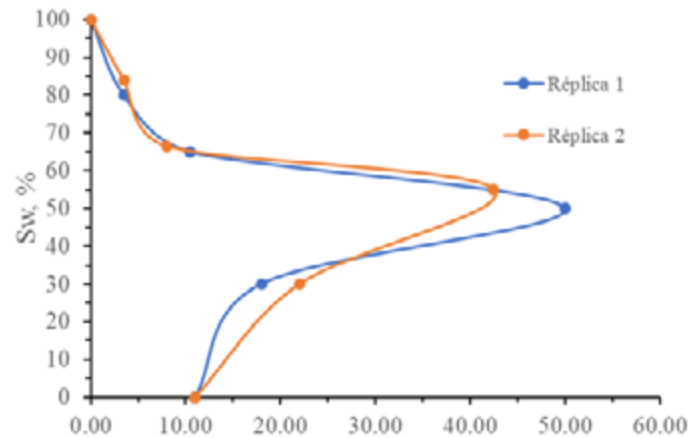
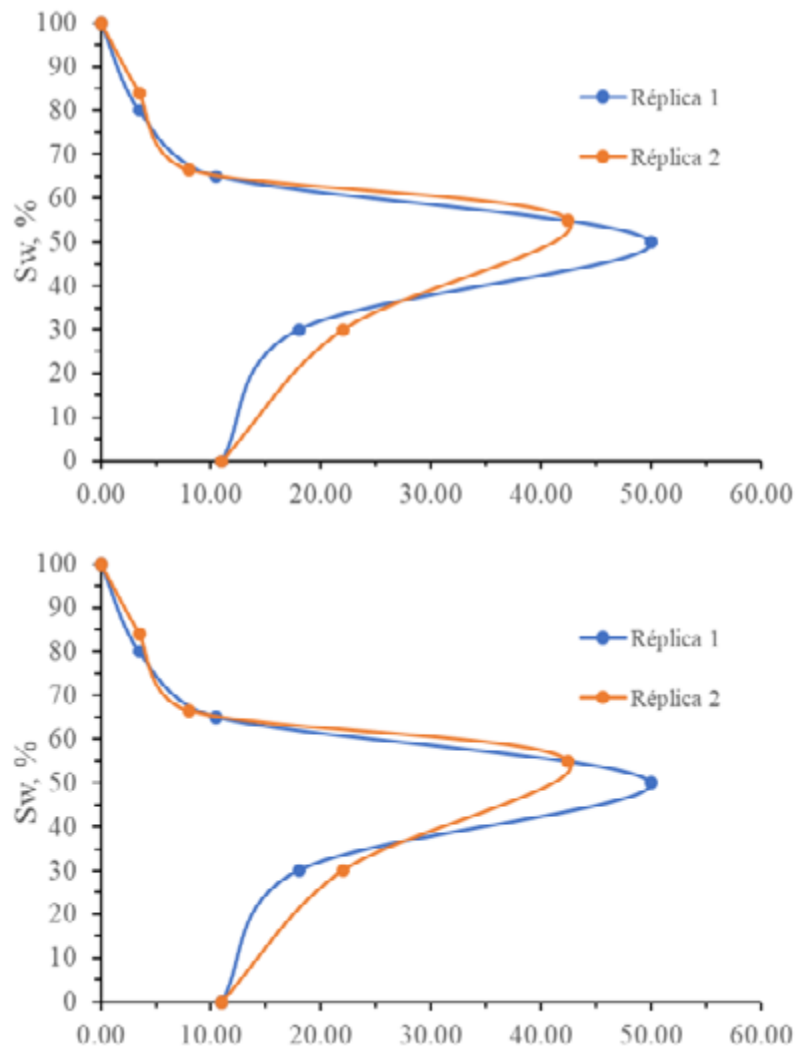


FIGURA 10. Diagramas p' - q' de pruebas triaxiales CD ensayadas a $S_w = 100\%$.
 a) Réplica 1,
 b) Réplica 2.



El análisis de los resultados de las pruebas triaxiales CD se basa en la suposición de que no se presentan cambios significativos de succión en las probetas ensayadas durante la etapa de falla. De los diagramas p' - q' (Figuras 5-10) se calcula el ángulo de fricción efectiva y la cohesión efectiva, y posteriormente se grafican contra el grado de saturación. Los diagramas $S_w - \phi'$ y $S_w - c'$ se muestran en las Figuras 11A y 11B respectivamente. En A se observa que ϕ' se reduce de manera prácticamente lineal conforme el suelo se va saturando, teniendo valores en un rango de 33 a 42°. Este efecto puede estar ligado a la presencia del sodio y al correspondiente comportamiento dispersivo del suelo. En B se observa que la cohesión se reduce de 50 Ton/m² a 10.50 Ton/m² cuando pasa de un grado de saturación de 55 a 65%. Este comportamiento es típico de los limos, que, al igual que las arenas, presentan un máximo de cohesión. No obstante, en este caso la presencia de arcillas impide que la cohesión llegue a cero durante el secado.

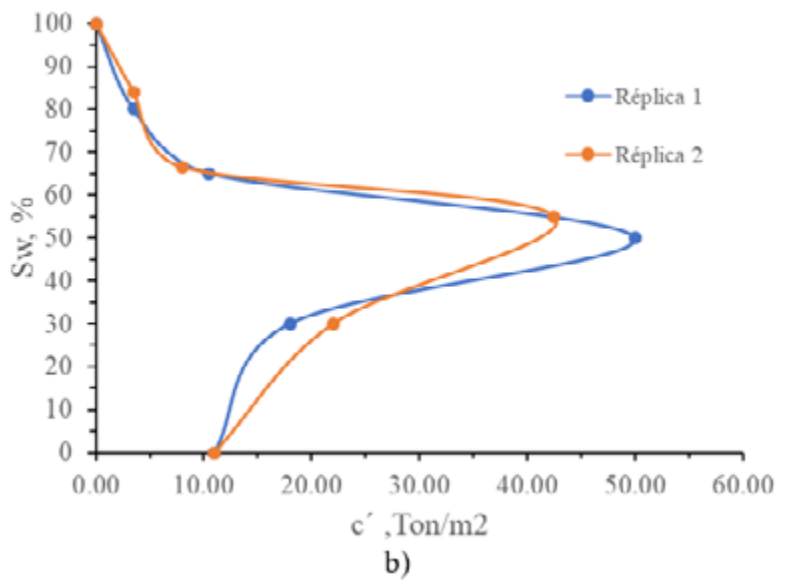
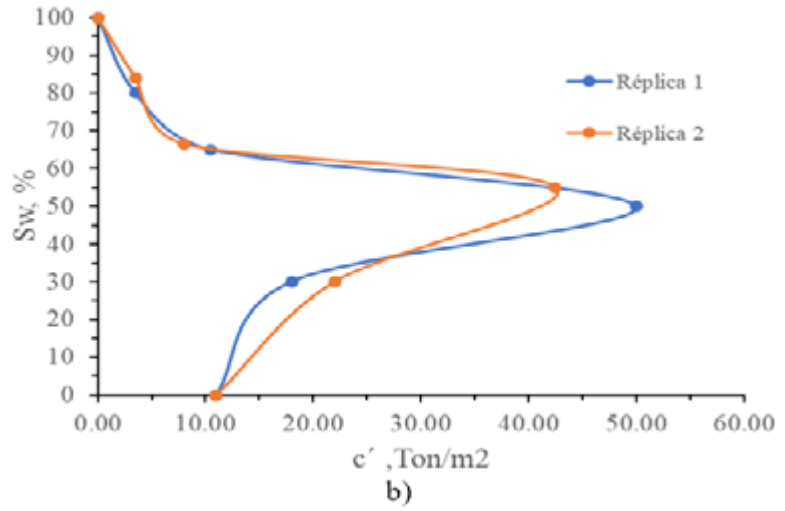


FIGURA 11.

- a) Diagrama S_w - φ'
- b) Diagrama S_w - c'.

Se determina el valor máximo de q' en cada prueba y se grafica contra la succión correspondiente al grado de saturación, tal como se muestra en la Figura 12. Se observa que la resistencia al cortante se mantiene aproximadamente constante hasta succiones de 100 kPa. Posteriormente, la resistencia se incrementa con rapidez hasta llegar a un valor máximo con una succión de 2000 kPa. Por último, la resistencia se reduce en un 60 % para succiones mayores a 10 000 kPa.

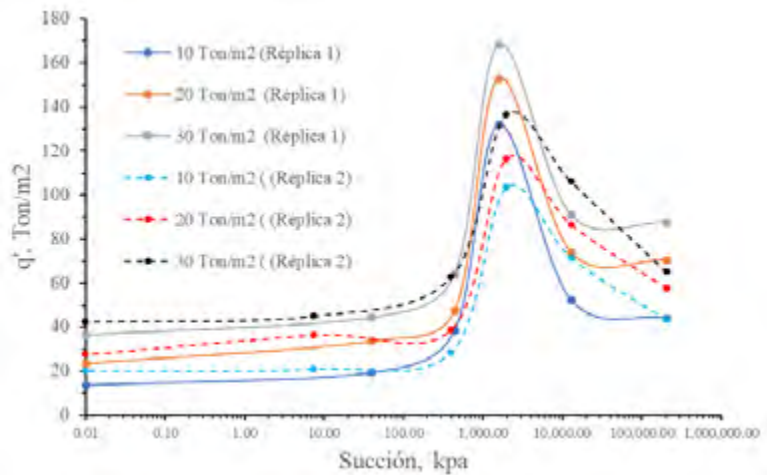
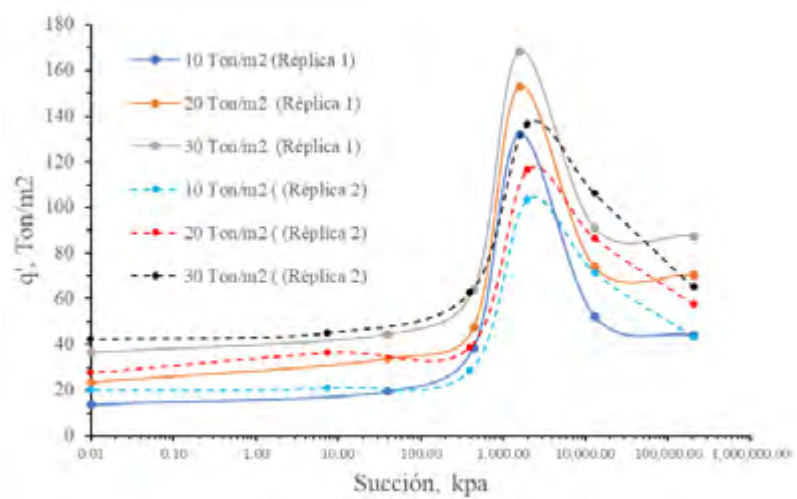


FIGURA 12. Diagrama q' - S para la trayectoria de humedecimiento del suelo dispersivo de la ciudad de Rioverde, S. L. P.



FIGURA 12. Diagrama q' - S para la trayectoria de humedecimiento del suelo dispersivo de la ciudad de Rioverde, S.L.P.



Conclusiones

La dispersividad del suelo de la ciudad de Rioverde, S.L.P., México se ve reflejada en una disminución prácticamente lineal del ángulo de fricción del suelo al aumentar el grado de saturación de 0 a 100 %.

El suelo dispersivo en estudio alcanza un valor de resistencia máximo para cierta succión y posteriormente se reduce para succiones mayores, lo cual se debe a la combinación de la reducción del ángulo de fricción y de un máximo de cohesión conforme se incrementa el grado de saturación. Estos casos no han sido completamente documentados y analizados en la literatura, ya que, en general, la succión incrementa la resistencia al corte de un suelo no saturado. En el caso del suelo estudiado la presencia de sodio y yeso, además de un porcentaje reducido de arcilla (10 %), puede estar detrás de este comportamiento. Actualmente se planean algunos ensayos adicionales que permitan dilucidar este fenómeno.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencia y Tecnología y a la Universidad Autónoma de Querétaro por el apoyo económico brindado en concepto de beca de Maestría.

Referencias

- [1] J. Leal Vaca, G. Gallegos Fonseca, y E. Rojas González, "Estimación de esfuerzos efectivos a partir del parámetro χ de Bishop en una arena limosa", *Ingeniería, Investigación y Tecnología*, vol. 14, pp. 139-151, 2013. DOI: 10.1016/S1405-7743(13)72232-7.



- [2] M. A. Alfaro Soto, "Geotecnia en suelos no saturados", *Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, vol. 32, no. 125, pp. 471-481, 2008.
- [3] J. L. Briaud, "Geotechnical Engineering: Unsaturated and Saturated Soils", Hoboken, Nueva Jersey, Estados Unidos: John Wiley & Sons, 2013.
- [4] T. Mohammad, B. Huat, F. Ali, y H. S, "Relationship Between Shear Strength and Soil Water Characteristic Curve of an Unsaturated Granitic Residual Soil", *American Journal Environmental Sciences*, vol. 2, no. 4, 2006. DOI: 10.3844/ajes-sp.2006.142.145.
- [5] J. Burland y J. Jennings, "Limitations to the Use of Effective Stresses in Partly Saturated Soils", *Géotechnique*, vol. 12, no. 2, pp. 125-144, 1962. DOI: 10.1680/geot.1962.12.2.125.
- [6] N. Lu y W. Likos, "Suction Stress Characteristic Curve for Unsaturated Soil", *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, vol. 132, no. 2, 2006. DOI: 10.1061/(ASCE)1090-0241(2006)132:2(131).
- [7] C. I. Verdin Montes, "Modelación de Suelos Expansivos Mediante Esfuerzos Efectivos", Tesis de maestría, Fac. Ing., UAQ, Querétaro, 2018.
- [8] M. Tuller y D. Or, "Retention of Water in Soil and the Soil Water Characteristic Curve", *Encyclopedia of Soils in the Environment*, vol. 4. pp. 278-289, 2004.
- [9] W. Albadri, M. J. Noor, y I. Alhani, "The Relationship Between the Shear Strength and Water Retention Curve of Unsaturated Sand at Different Hydraulic Phases", *Acta Geotechnica*, vol. 16, no. 4, pp. 1-15, 2021. DOI: 10.1007/s11440-021-01189-7.
- [10] J. Ramírez Jiménez, "Influencia de los Ciclos de Histéresis en el Comportamiento Mecánico de un Suelo No Saturado", Tesis de maestría, Fac. Ing., UAQ, Querétaro, 2020.
- [11] C. A. Garcia Ezquivel, E. Rojas González, y G. Gallejos Fonseca, "Determination of the dispersive properties of the soil of Rioverde city, Mexico", *Memorias del XIX Congreso Internacional de Ingeniería*, 2023.
- [12] *Standard Test Method for Measurement of Soil Potential (Suction) Using Filter Paper*, ASTM D5298-10, ASTM International, 2010. [En línea] Disponible en: <https://www.astm.org/d5298-10.html>
- [13] *Standard Test Method for Consolidated Drained Triaxial Compression Test for Soils*, ASTM D7181-11, ASTM International, 2011. [En línea]. Disponible en: <https://cdn.standards.iteh.ai/samples/77789/ec3d78304f8d44219a9620acad-d522ee/ASTM-D7181-11.pdf>

ANÁLISIS NUMÉRICO DE LAS CARACTERÍSTICAS ESTÁTICAS DE COJINETES DE GAS POROSO MEDIANTE EL MODELO DARCY-FORCHHEIMER

NUMERICAL ANALYSIS OF THE STATIC
CHARACTERISTICS OF POROUS GAS BEARINGS
USING THE DARCY-FORCHHEIMER MODEL

Azael Sadi Durán Castillo*
Juan Carlos Jáuregui Correa

Universidad Autónoma de Querétaro,
Santiago de Querétaro, México.

*aduranyps@gmail.com



Abstract

This work shows the numerical analysis of the static characteristics of a porous gas bearing by solving the modified Reynolds equation with the nonlinear Darcy-Forchheimer model to describe the flow through the porous medium. The finite difference method, with difference at the center, and the Newton-Raphson iterative algorithm were used for its solution because of the nonlinearity of the problem. The ratio of the steps between the circumferential and longitudinal dimensions and the initial assumption are the main conditions for the model to converge to a solution. The maximum number of nodes accepted by the algorithm was 36 000. The accuracy of the results was acceptable in comparison with published works, which contributes to the development of porous gas bearing technology.

Keywords: load capacity, stiffness coefficient, aerostatic bearing, gas bearings, porous medium.

Resumen

Este trabajo muestra el análisis numérico de las características estáticas de un cojinete de gas poroso mediante la solución de la ecuación de Reynolds modificada con el modelo no lineal de Darcy-Forchheimer para describir el flujo a través del medio poroso. Se utilizó el método de diferencias finitas, con diferencia en el centro, y el algoritmo iterativo de Newton-Raphson como solución debido a la naturaleza no lineal del problema. La relación de los pasos entre las dimensiones circunferencial y longitudinal y la suposición inicial son las condiciones principales para que el modelo converja en una solución. La cantidad máxima de nodos aceptados por el algoritmo fue 36 000. El nivel de precisión de los resultados fue aceptable en comparación con trabajos publicados, lo cual aporta un esfuerzo más en el desarrollo de la tecnología de los cojinetes de gas poroso.

Palabras clave: capacidad de carga, coeficiente de rigidez, cojinete aerostático, cojinetes de gas, medio poroso.



Introducción

La palabra *cojinete* designa la superficie de contacto sobre los cuales se transmite una carga [1]; su función principal es soportarla mientras permite el movimiento relativo entre el rotor y estator de una máquina. Los cojinetes se clasifican en deslizantes (o de superficie lisa) y rodantes (de bolas o rodamientos) [2]. Para su funcionamiento, es necesaria una lubricación que reduzca el calentamiento y desgaste de elementos que tienen un movimiento relativo entre sus superficies de contacto [3]. Los lubricantes líquidos son comunes, pero pueden también ser sólidos o gaseosos [1].

En la actualidad, los aceites derivados del petróleo son los lubricantes por antonomasia; por desgracia, la disposición final de dicho material supone un desafío ecológico, por lo que es necesario buscar otras alternativas. Una propuesta son los cojinetes de gas, los cuales emplean gas como fluido lubricante, usualmente dióxido de carbono, hidrógeno, helio o vapor de agua y, en mucho mayor medida dada su disponibilidad, aire. Los beneficios que ofrece este sistema son la reducción de la fricción y el desgaste, así como el manejo de condiciones extremas de temperatura y la irradiación [4].

Por su funcionamiento, los cojinetes de gas se clasifican en:

- **Aerostáticos o externamente presurizados:** emplean una película de aire a presión con espesor micrométrico para soportar piezas móviles y resistir cargas externas.
- **Aerodinámicos o autoactivados:** la presión en el claro del cojinete se genera por el movimiento relativo (puede ser un deslizamiento tangencial, movimiento normal o de presión o una combinación de estos) de las superficies que lo contienen [5].

...los cojinetes de gas requieren dispositivos controladores de flujo. Existen cuatro tipos principales de estos limitadores: de orificio, de ranura, de estría y de poro.

Los cojinetes de gas requieren dispositivos controladores de flujo (o limitadores), los cuales garantizan que una película estable de fluido exista entre las superficies del cojinete y el rotor, y también proveen rigidez a la capa lubricante [1]. Existen cuatro tipos principales de limitadores de flujo: de orificio, de ranura, de estría y de poro. El de tipo poroso, debido a su constitución material de pasajes diminutos y sinuosos, puede lograr un perfil de presión uniforme dentro de la holgura del rodamiento; por lo tanto, ofrece rigidez, amortiguación y estabilidad neumática sustancialmente altas en comparación con otros tipos de limitadores [5].



El estudio de los cojinetes de gas poroso (PGB, *porous gas bearing*) comenzó a principios de los años sesenta. De 1965 a 1967, Sneck et al. publicaron tres artículos [6], [7] y [8], los cuales fundamentan el marco teórico para el análisis de PGB. Los autores formularon soluciones analíticas para la tasa de flujo y la capacidad de carga del PGB en condiciones aerostáticas y produjeron una verificación experimental tanto para la capacidad de carga como para los coeficientes de flujo. Asimismo, señalaron la importancia de la rugosidad de la superficie que modifica la holgura nominal del PGB para producir concordancia con la carga y el flujo medidos.

Más tarde, [8] señalaron que la velocidad superficial del eje contribuye a la capacidad de carga de los PGB y presentó soluciones definitivas para el funcionamiento con números de velocidad muy grandes ($\Lambda_\Omega \gg 1$). Sneck y colaboradores [6], [7], [8] no estudiaron el efecto de la frecuencia sobre los coeficientes de rigidez del rodamiento, e ignoraron los coeficientes de amortiguación. Mori et al. [9], [10] desarrollaron una solución similar, aunque para un fluido incompresible, y produjeron fórmulas predictivas para la capacidad de carga y el flujo de gas que coincidían con los resultados experimentales para PGB de longitud finita $L/D \sim 1/2$. Tanto Sneck et al. como Mori et al. encontraron que la capacidad de carga del PGB era una fracción de $W^* = ((p_s - p_a) \times (A_d))$; es decir, el producto de la diferencia de presión ($p_s - p_a$) menos el área proyectada del rodamiento. Habiendo introducido una holgura equivalente a la capa del material poroso, $c_K = (12kt_p)^{1/3}$, Mori et al. [10] informaron una capacidad máxima de carga aerostática $\sim (0.7 W^*)$ para el rango $\left(\frac{c_K}{c}\right) \sim 0.6 - 1.0$. Por lo tanto, el número de flujo de alimentación práctico es mucho menor que uno.

$$\Lambda_k \sim (R/t_p)^2 \gg 1$$

En 1979, Gargiulo [11] presentó un estudio integral que incluía tanto los parámetros de rendimiento en estado estacionario como los coeficientes de fuerza dinámica. Se basó en un análisis de perturbación que produce expresiones analíticas en función de Λ_Ω , Λ_ω y Λ_k , e incluye el efecto del volumen de porosidad del material. Para volúmenes porosos muy pequeños, reportó el incremento de la rigidez del rodamiento a medida que aumenta la frecuencia, mientras que el coeficiente de amortiguación disminuye de manera constante. Sus hallazgos respaldan los publicados por Lund [12] en 1968 respecto a los cojinetes de gas aerostático compensados por orificio.



Grandes volúmenes porosos podrían conducir a una rigidez directa negativa, pero no a una amortiguación negativa, en oposición a los reportes de Rao y Majumdar [13]. No fue sino hasta la década de 2000 que PGB encontró su aplicación comercial [14]; en 2006, Miyatake et al. [15] evaluaron la estabilidad de un rotor apoyado en PGB recubierto con una capa superficial ~300 veces más restrictiva que la del propio medio poroso. Belforte et al. [16] tasaron la permeabilidad y el coeficiente inercial de un material poroso para un sistema de alimentación de una almohadilla de empuje aerostática cilíndrica. De este modo, la fabricación de materiales porosos cargados en la superficie fue un gran avance para los PGB, ya que prácticamente eliminaron el potencial de martillo neumático [17].

Actualmente se continúan estudiando a detalle los cojinetes gaseosos, por ejemplo, Li et al. [18] presentaron un análisis teórico, numérico y experimental del comportamiento híbrido de los PGB mediante el método de diferencias finitas en tres dimensiones con un volumen pequeño de control cuyos resultados se corroboraron de manera experimental. San Andrés et al. [19] desarrollaron un modelo analítico y otro de elementos finitos para predecir el comportamiento de dos PGB comerciales; sus resultados fueron exitosos. Gu et al. [20] investigaron las características estáticas de un cojinete externamente presurizado con inserto poroso, basándose en el método de diferencias finitas con un esquema para mallas no uniformes y las técnicas de relajación y de nodo virtual; las conclusiones a las que llegaron concuerdan con la literatura. Nicolletti et al. [21] propusieron la ecuación de Reynolds modificada con el modelo de Darcy-Forchheimer para mostrar que el parámetro adimensional Φ afecta la capacidad de carga definida por la no linealidad del sistema, considerando la velocidad de inyección de aire. La mayoría de estos estudios recae en el modelo de Darcy para describir el comportamiento del flujo a través del medio poroso y, aunque los modelos predictivos son aceptables respecto a los resultados experimentales, la precisión todavía es perfectible. En este artículo se evalúa la capacidad del modelo extendido de Darcy-Forchheimer para determinar el comportamiento estático de un PGB.



Teoría de cojinetes de gas poroso

Cojinete de gas poroso

- Dimensiones del PGB:
 - Diámetro del cojinete ($D = 2R$)
 - Diámetro del eje ($d = 2r$)
 - Longitud (l)
 - Claro ($c = R - r$)
 - Espesor de la película lubricante ($h = c + e_x \cos\theta + e_y \sin\theta$), donde e_x y e_y son las componentes de la excentricidad (e) del eje
- Parámetros del medio poroso:
 - Permeabilidad (k)
 - Coeficiente de inercia (β)
 - Espesor (t_h)
- Condiciones de operación:
 - Presión de suministro del fluido (p)
 - Presión atmosférica (p_a)
 - Velocidad de rotación (Ω)
- Características físicas del fluido de trabajo:
 - Densidad (ρ)
 - Viscosidad (μ)

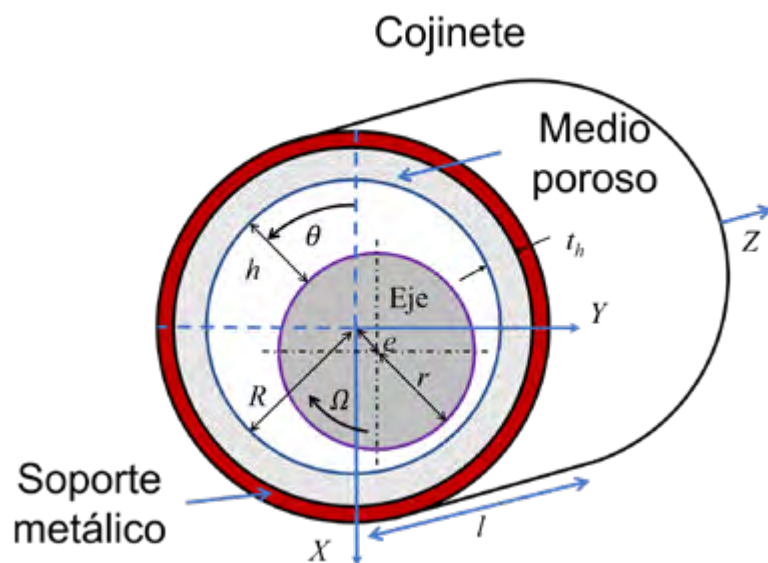


FIGURA 1.
Diagrama esquemático de un cojinete de gas poroso.

Ecuación de Reynolds de lubricación

La ecuación de Reynolds de lubricación, Ecuación (1), describe el comportamiento de la película de gas lubricante en un cojinete de gas [22].

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\rho h^3}{12\mu} \vec{\nabla} p \right) = \frac{\Omega r}{2} \frac{\delta(\rho h)}{\delta x} + \frac{\delta(\rho h)}{\delta t} + f(\phi) \quad (1)$$

Donde:

$\vec{\nabla}$ denota el operador nabla.

$f(\phi)$ es la función que determina el comportamiento del flujo a través del medio poroso.

En nuestro caso, se presupone que el flujo a través del medio poroso está gobernado por la Ley de Darcy-Forchheimer: se atribuye una relación lineal entre el flujo y la diferencia de presión a la entrada y la salida del medio poroso (Ley de Darcy). Sin embargo, el comportamiento de la inercia del fluido se considera no lineal. La Ecuación (2) ofrece la representación matemática del modelo [23].

$$\frac{\Delta P}{\Delta x} = \frac{\mu}{k} v + \beta \rho v^2 \quad (2)$$

Se asume el problema de forma bidimensional y que el flujo en la película lubricante del cojinete es isotérmico, compresible, laminar y estable. Además, se considera un gas ideal con densidad $\rho = p/(R_g T)$, donde R_g es la constante universal de los gases ideales y T es la temperatura del gas. Entonces, el perfil de presión (p) está dado por la Ecuación (3):

$$\frac{\delta}{\delta x} \left(\frac{p h^3}{12} \frac{\delta p}{\delta x} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left(\frac{p h^3}{12} \frac{\delta p}{\delta z} \right) = \frac{\Omega r}{2} \frac{\delta(\rho h)}{\delta x} + \frac{\mu}{2\beta k} \mp \sqrt{\left(\frac{\mu}{2\beta k} \right)^2 + \frac{(p_s^2 - p^2)}{2\beta R T t_h}} \quad (3)$$

Donde:

x y z son las coordenadas circunferencial y axial, respectivamente;

k , es el coeficiente de permeabilidad;

t_h expresa el espesor del medio poroso;

p_s es la presión de suministro;





Debido a que el perfil de presión es periódico alrededor de la circunferencia del cojinete, la presión $p(\theta, z) = p(\theta + 2\pi, z)$, y sobre los extremos axiales del cojinete la presión, $p(\theta, 0) = p(\theta, 1) = p_a$. La expresión de la Ecuación (3) en su forma adimensional resulta:

$$\frac{\delta}{\delta\theta} \left(PH^3 \frac{\delta P}{\delta\theta} \right) + \frac{r^2}{l^2} \frac{\delta}{\delta z} \left(PH^3 \frac{\delta P}{\delta z} \right) = \Lambda_\Omega \frac{\delta(PH)}{\delta\theta} + \Lambda_{k\beta} (1 \mp \sqrt{1 + \Lambda_R(\alpha^2 - P^2)}) \quad (4)$$

Donde:

$$x = r\theta$$

$$z = Zl$$

$$p = Pp_a$$

$$h = Hc$$

$$\alpha = p_s / p_a \text{ (} p_a \text{ es la presión atmosférica)}$$

$$\Lambda_\Omega = 6\mu\Omega r^2 / p_a c^2$$

$$\Lambda_{kb} = 6\mu^2 r^2 R_g T / k\beta p_a c^3$$

$$\Lambda_r = 2p_a^2 k^2 \beta / \mu^2 R_g T t_h$$

Tras desarrollar las derivadas parciales, la ecuación de Reynolds adimensional para un **PGB** se convierte en:

$$3H^2 \frac{\partial H}{\partial\theta} P \frac{\partial P}{\partial\theta} + PH^3 \frac{\partial^2 P}{\partial\theta^2} + H^3 \left(\frac{\partial P}{\partial\theta} \right)^2 + \frac{r^2}{l^2} \left(PH^3 \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} + H^3 \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)^2 \right) = \Lambda_\Omega \left(P \frac{\partial H}{\partial\theta} + H \frac{\partial P}{\partial\theta} \right) + \Lambda_{k\beta} \left(1 \mp \sqrt{1 + \Lambda_R(\alpha^2 - P^2)} \right) \quad (5)$$

A diferencia de los cojinetes hidrodinámicos lubricados con aceite, donde se adopta el parámetro adimensional de Sommerfeld como referencia para estimar la capacidad de carga, los **PGB** carecen de un parámetro homólogo debido a la no linealidad de su sistema y su dependencia del flujo. Por lo tanto, la capacidad de carga en un cojinete de gas se obtiene a partir del perfil de presiones calculados con las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} F_x &= \int_0^1 \int_0^{2\pi} p \sin \theta \, dx \, dz \\ F_y &= \int_0^1 \int_0^{2\pi} p \cos \theta \, dx \, dz \\ F &= \sqrt{F_x^2 + F_y^2} \end{aligned} \quad (6)$$

El coeficiente de rigidez estática se calcula a partir de la ecuación:

$$K_s = \frac{F}{\Delta x} \quad (7)$$

Solución numérica del modelo

La solución numérica de la ecuación adimensional de Reynolds modificada (5) se realiza por medio del método de las diferencias finitas. Las derivadas parciales son reemplazadas por diferencias finitas centradas en tres puntos con una precisión de segundo orden, cuyas aproximaciones se muestran a continuación:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{i,j} &\approx \frac{P_{i+1,j}-P_{i-1,j}}{2\Delta\theta} \\ \left(\frac{\partial P}{\partial Z}\right)_{i,j} &\approx \frac{P_{i,j+1}-P_{i,j-1}}{2\Delta Z} \\ \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \theta^2}\right)_{i,j} &\approx \frac{P_{i+1,j}-2P_{i,j}+P_{i-1,j}}{\Delta\theta^2} \\ \left(\frac{\partial^2 P}{\partial Z^2}\right)_{i,j} &\approx \frac{P_{i,j+1}-2P_{i,j}+P_{i,j-1}}{\Delta Z^2} \end{aligned} \quad (8)$$

Sustituyendo la Ecuación (8) dentro de la Ecuación (5), resulta:

$$\begin{aligned} 3H^2 \frac{\partial H}{\partial \theta} P_{i,j} \left(\frac{P_{i+1,j}-P_{i-1,j}}{2\Delta\theta}\right) + H^3 P_{i,j} \left(\frac{P_{i+1,j}-2P_{i,j}+P_{i-1,j}}{\Delta\theta^2}\right) + H^3 \left(\frac{P_{i+1,j}-P_{i-1,j}}{2\Delta\theta}\right)^2 + \frac{r^2}{l^2} \left[H^3 P_{i,j} \left(\frac{P_{i,j+1}-2P_{i,j}+P_{i,j-1}}{\Delta Z^2}\right) + \right. \\ \left. H^3 \left(\frac{P_{i,j+1}-P_{i,j-1}}{2\Delta Z}\right)^2 \right] = \Lambda_\Omega \left[P_{i,j} \frac{\partial H}{\partial \theta} + H \left(\frac{P_{i+1,j}-P_{i-1,j}}{2\Delta\theta}\right) \right] + \Lambda_{k\beta} \left(1 \mp \sqrt{1 + \Lambda_R(\alpha^2 - P_{i,j}^2)} \right) \end{aligned} \quad (9)$$

Después de multiplicar toda la ecuación por $(\Delta\theta^2\Delta Z^2) / H^3$ y ordenar los términos:

$$\begin{aligned} a_1 P_{i-1,j}^2 + a_2 P_{i,j-1}^2 + a_3 P_{i,j}^2 + a_4 P_{i+1,j}^2 + a_5 P_{i,j+1}^2 + a_6 P_{i,j} P_{i-1,j} + a_7 P_{i,j} P_{i,j-1} + a_8 P_{i,j} P_{i+1,j} + a_9 P_{i,j} P_{i,j+1} \\ + a_{10} P_{i-1,j} P_{i+1,j} + a_{11} P_{i,j-1} P_{i,j+1} + a_{12} P_{i-1,j} + a_{13} P_{i,j} + a_{14} P_{i+1,j} + a_{15} = a_{15} \sqrt{1 - \Lambda_R(\alpha^2 - P_{i,j}^2)} \end{aligned} \quad (10)$$

Donde:

$$\begin{aligned} a_1 = a_4 = -\frac{\Delta Z^2}{4}; \quad a_3 = 2\Delta Z^2 + \frac{2r^2}{l^2} \Delta\theta^2; \\ a_2 = a_5 = -\frac{r^2 \Delta\theta^2}{4l^2}; \quad a_6 = -\Delta Z^2 + \frac{3\Delta\theta \Delta Z^2}{2} \frac{\partial H}{\partial \theta} \\ a_7 = a_9 = -\frac{r^2 \Delta\theta^2}{l^2}; \quad a_8 = -\Delta Z^2 - \frac{3\Delta\theta \Delta Z^2}{2} \frac{\partial H}{\partial \theta} \\ a_{10} = \frac{\Delta Z^2}{2}; \quad a_{11} = \frac{r^2 \Delta\theta^2}{2l^2}; \quad a_{13} = -\frac{\Lambda_\Omega \Delta\theta^2 \Delta Z^2}{H^3} \frac{\partial H}{\partial \theta} \\ a_{12} = -a_{14} = -\frac{\Lambda_\Omega \Delta\theta \Delta Z^2}{2H^2}; \quad a_{15} = \frac{\Lambda_{k\beta} \Delta\theta^2 \Delta Z^2}{H^3} \end{aligned} \quad (11)$$

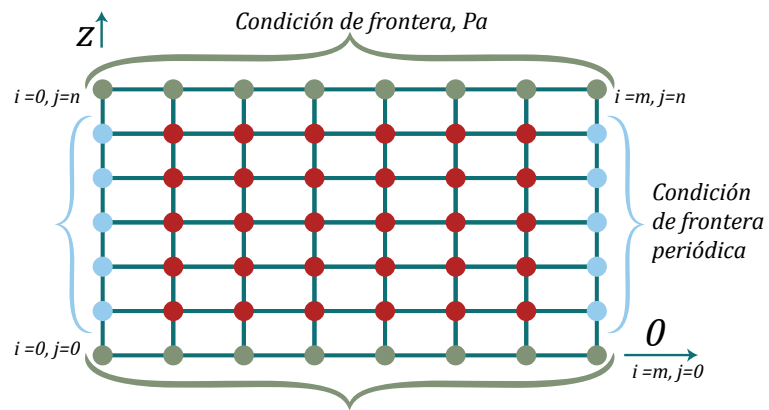




El dominio se divide en una malla bidimensional como se muestra en la Figura 2. Se aplica la Ecuación (10) a cada uno de los puntos rojos y azules para articular un sistema de ecuaciones cuadráticas. Este conjunto se puede resolver a través del algoritmo iterativo de Newton-Raphson, el cual requiere calcular el Jacobiano para cada ecuación. Esto se obtiene mediante la siguiente matriz:

$$J_f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x) \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x) \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_m}{\partial x_2}(x) \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix} \quad (12)$$

FIGURA 2.
Representación
de la malla
de la solución
numérica.



Para los nodos verdes $j = 0$ y $j = n$, la presión es preestablecida por la condición de frontera adimensional, $p_{i,0} = p_{i,n} = 1$, mientras que la condición de frontera periódica se impone en los nodos azules con $i = 0$ e $i = m$, $p_{0,j} = p_{m,j}$.

El diagrama de flujo de solución para la ecuación de Reynolds se muestra en la Figura 3 modificada con la ecuación de Darcy-Forchheimer mediante el método de diferencias finitas. Ahora bien, se inicia ingresando las características geométricas del cojinete de gas, las características del medio poroso y las condiciones de operación, así como el número de pasos en los que se dividirá el dominio. Se calculan las constantes de la Ecuación (11) ($a_1 - a_{15}$). Se indican la tolerancia y la cantidad de iteraciones máximas en caso de que el algoritmo no converja en una solución. Se ingresa una solución inicial y se evalúa dicha solución dentro del sistema de ecuaciones cuadráticas obtenidas, así como su Jacobiano. A partir de ello, se determina una nueva solución y se evalúa su exactitud con respecto a la solución anterior.



Debido a la no linealidad del problema, es esencial para el algoritmo tener una proporción balanceada entre la cantidad de nodos a lo largo de las dos dimensiones y determinar una solución inicial adecuada para alcanzar la convergencia. El proceso iterativo se detiene una vez que la diferencia entre la nueva solución y la anterior sea menor que la tolerancia establecida o cuando se alcanza el número máximo de iteraciones. En este trabajo, la solución convergió en menos de 40 iteraciones.

Resultados y discusión

Se programó en Octave el código del algoritmo descrito en la sección anterior para determinar el perfil de presión del cojinete de gas poroso. En la Tabla 1 se muestran los parámetros extraídos de [19] para el análisis del modelo numérico. Los coeficientes de permeabilidad y de inercia fueron tomados de [24].

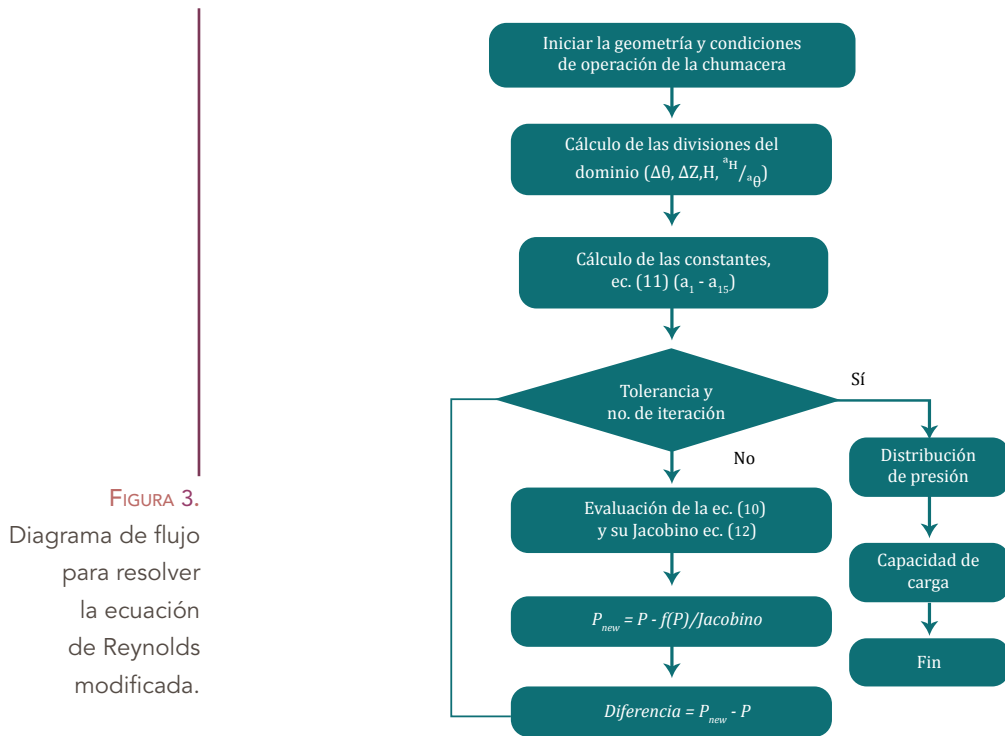


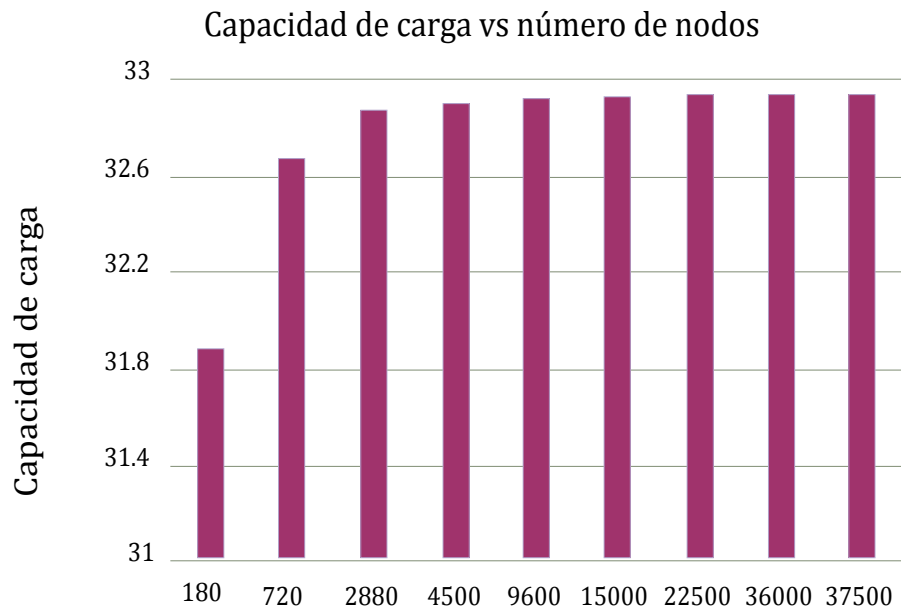
TABLA 1. Parámetros del cojinete de gas poroso [19].

CARACTERÍSTICA	DIMENSIÓN	UNIDAD
Longitud	88.8	mm
Diámetro interno del cojinete	76.2	mm
Espesor del medio poroso	2.71	mm
Claro	10	μm
Presión de suministro	6	bar
Permeabilidad del medio poroso	1.86×10^{-15}	m ²



La Figura 4 muestra la capacidad de carga versus el número de nodos; los cálculos se computaron tomando un claro de $10\ \mu\text{m}$ y una excentricidad de $1\ \mu\text{m}$. Se observa que la capacidad de carga incrementa a medida que el número de nodos aumenta, hasta llegar a un valor estable de $32.9\ \text{N}$ en una malla de 4500 nodos. A tamaños mayores de malla, el aumento en el cálculo de capacidad de carga es despreciable. La cantidad máxima de nodos que el hardware aceptó fue de $36\ 000$, con una dimensión de malla de 225 y 160 , de manera circunferencial y axial respectivamente.

FIGURA 4.
Análisis de sensibilidad del tamaño de malla. Presión de suministro $6\ \text{bar}$, claro $10\ \mu\text{m}$ y excentricidad $1\ \mu\text{m}$.



La Figura 5(a) muestra la presión máxima en el plano medio del cojinete en $p_{(z=1/2)}/p_a$, considerando una relación de excentricidad $\varepsilon = 0.1$. Se observa cómo la presión máxima disminuye a medida que el claro aumenta. En la Figura 5(b), el coeficiente de rigidez estática (K_s) alcanza un valor máximo ($147.87\ \text{mn/m}$) a $c = 14\ \mu\text{m}$, y decrece rápidamente cuando c tiende a 0. Por otro lado, para $c > 60\ \mu\text{m}$ la relación de presión máxima en $p_{(z=1/2)}/p_a$ tiende a 1 y el coeficiente de rigidez estática tiende a 0; esto es, el cojinete pierde capacidad de carga. En la Figura 5(c) se muestra un aumento casi lineal del flujo hasta $c < 20\ \mu\text{m}$, llegando a una región no lineal en $20 < c < 60\ \mu\text{m}$; para valores $c > 60\ \mu\text{m}$, el flujo se mantiene prácticamente constante hasta alcanzar un valor máximo de $0.9\ \text{g/s}$. Aunque no se pueden comparar directamente estos resultados con los publicados en [19] debido a la diferencia de los modelos de flujo a través del medio poroso, las tendencias de las gráficas concuerdan con las detalladas en dicha referencia.

En la Tabla 2 se muestran las características dimensionales de un cojinete de gas poroso extraídas de [20] para comparar las superficies de presión



obtenidas a un claro nominal de $10\ \mu\text{m}$ y $50\ \mu\text{m}$, manteniendo un espesor de película lubricante mínimo de $1\ \mu\text{m}$. El coeficiente de inercia del material poroso se obtuvo de [25] con el coeficiente de permeabilidad aproximado al de [20].

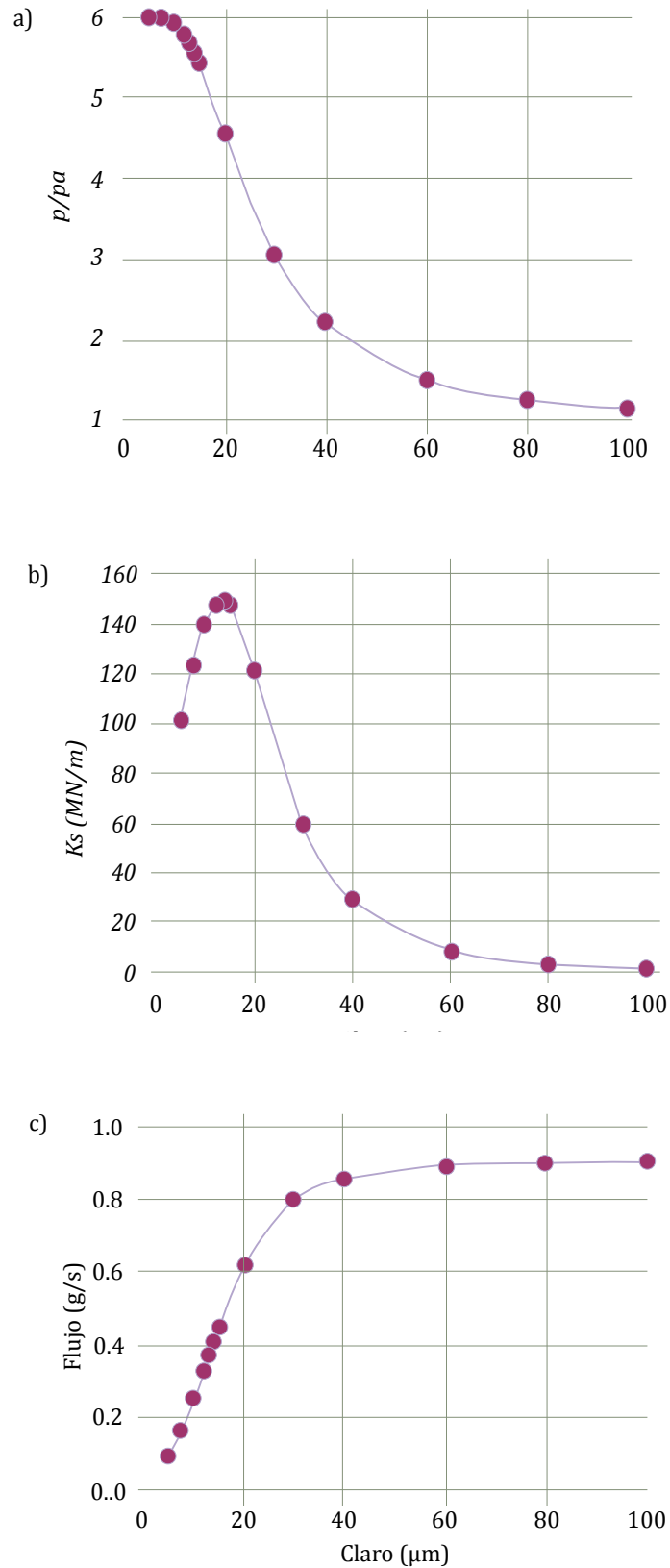


FIGURA 5.

(a) Presión máxima en el plano medio $p_{(z=l/2)}/p_a$ del cojinete;
(b) Coeficiente de rigidez estática K_s ;
(c) Flujo de aire vs variación del claro.
Presión de suministro: $6\ \text{bar}$; relación de excentricidad (ε): 0.1 .



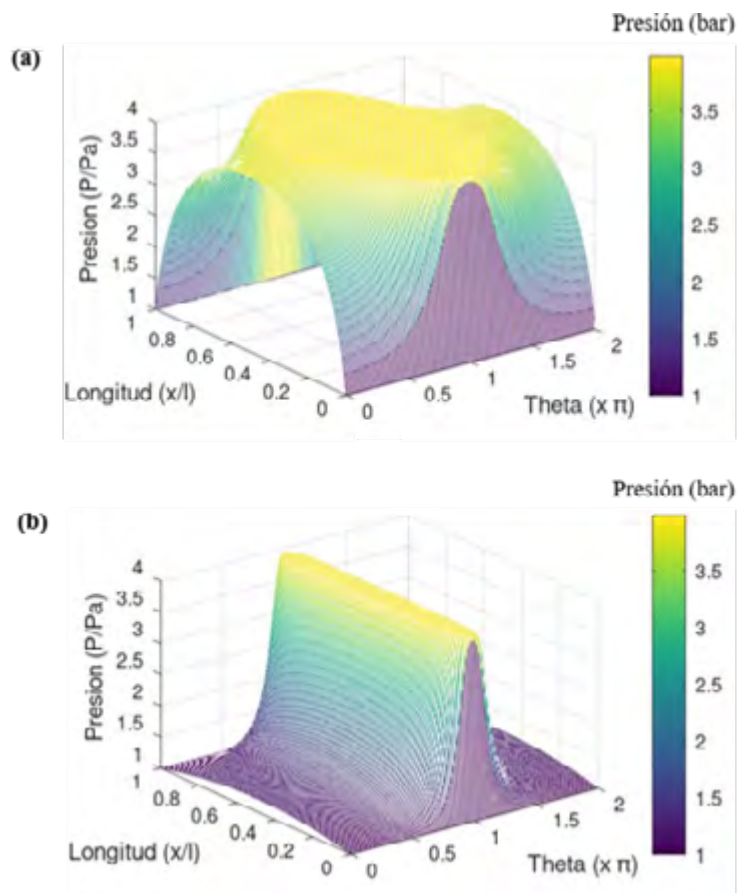
TABLA 2.
Parámetros del cojinete
de gas poroso [20].

CARACTERÍSTICA	DIMENSIÓN	UNIDAD
Longitud	38	mm
Diámetro interno del cojinete	15	mm
Espesor del medio poroso	5	mm
Presión de suministro	4	bar
Permeabilidad del medio poroso	1×10^{-13}	m^2
Coefficiente de inercia del medio poroso	5.62×10^8	m

La Figura 6 muestra las gráficas de las superficies de presión; éstas se encuentran en concordancia con las publicadas en la referencia, aunque hay diferencias alrededor de los extremos del cojinete en $Z = 0$ y $Z = 1$. Las discrepancias son atribuibles al esquema de diferencias para malla no uniforme utilizado en [20].

Es evidente que, al incrementar el claro, la presión máxima tiene variaciones pequeñas y se manifiesta alrededor de los 180° , donde se localiza el espesor mínimo de la película lubricante. La máxima presión alcanzada fue de 3.999 bar, ligeramente menor que la presión de suministro. No obstante, la presión tiene un estrepitoso decaimiento en la dirección circunferencial del cojinete. Tal caída indica que el gradiente de presión fluctúa significativamente al variar el claro del cojinete.

FIGURA 6.
Comparación del campo de presión de la película lubricante a diferentes claros nominales con espesor mínimo de película de 0.001 mm (a) $c = 0.01$ mm, y (b) $c = 0.05$. Presión de suministro: 4 bar.



La Tabla 3 muestra las características de un cojinete de gas poroso de [18]. Se analizó el comportamiento aerostático ($\Omega = 0$ krpm) y aerodinámico ($\Omega = 60$ krpm) del cojinete de gas poroso, con un claro $c = 40 \mu\text{m}$ y una relación de excentricidad $\varepsilon = 0.6$. Los resultados muestran una tendencia similar en las superficies de presión (Figura 7 a - b), empero con valores ligeramente mayores a los reportados. En el plano medio $p(z = 1/2)/p_a$ del cojinete en el modo aerostático, las presiones adimensionales máxima y mínima calculadas son $P_{\text{max}} = 2.5392$ y $P_{\text{min}} = 1.6662$ respectivamente. Estos valores contrastan con las $P_{\text{max}} = 2.1205$ y $P_{\text{min}} = 1.4016$ publicadas. Mientras tanto, en el modo híbrido la presión máxima es $P_{\text{max}} = 3.0932$ y la presión mínima $P_{\text{min}} = 1.4024$, en contraste con las $P_{\text{max}} = 2.3255$ y los $P_{\text{min}} = 1.330$ publicadas.

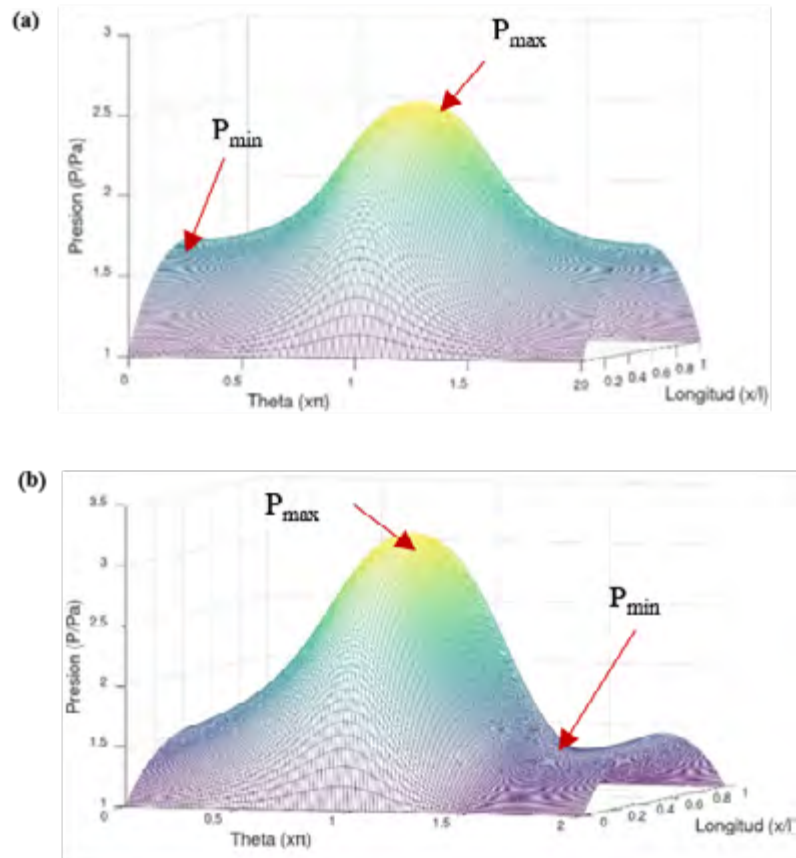


FIGURA 7.

Distribución de la presión adimensional de la película en estado estable de (a) condición aerostática y (b) condición híbrida, $\Omega = 60$ krpm (c) perfil de presión en las dos condiciones. Presión de suministro: 3 bar.

TABLA 3.

Parámetros del cojinete de gas poroso [18].

CARACTERÍSTICAS	DIMENSIÓN	UNIDAD
Longitud	57	mm
Diámetro interno del cojinete	25	mm
Claro	40	μm
Espesor del medio poroso	2.5	mm
Presión de suministro	3	bar
Permeabilidad del medio poroso	1×10^{-15}	m^2
Coefficiente de inercia del medio poroso	2.1×10^{10}	m
Velocidad de rotación	60,000	rpm



Conclusiones

El estudio de los cojinetes de gas poroso, ya sea teórico, numérico o experimental es un problema complicado debido al comportamiento no lineal del fluido compresible a través del medio poroso.

Se propone el uso del modelo de Darcy-Forchheimer para determinar el comportamiento del flujo a través de un cojinete de gas poroso, cuyo diseño se basa en el magno método de solución numérico de diferencias finitas con el algoritmo Newton-Raphson. Las principales barreras para la convergencia del modelo son escoger la relación de nodos en dirección circunferencial y axial, además de ingresar una solución inicial adecuada para llegar a una solución congruente.

Los resultados concuerdan con los encontrados en la literatura. Esto nos da una base para seguir evaluando el comportamiento de los cojinetes de gas y establecer los parámetros que intervienen en el estudio rotodinámico de turbomaquinaria donde se utilizarán.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad Autónoma de Querétaro por el apoyo recibido, y el primer autor agradece al CONAHCYT por la beca otorgada durante los estudios de doctorado.

Nomenclatura

- p = Presión, Pa.
- p_a = Presión atmosférica, Pa.
- x = Coordenada circunferencial, m.
- z = Coordenada axial, m.
- R = Radio del cojinete, m.
- r = Radio del eje, m.
- c = Claro radial del cojinete ($c = R - r$), m
- e = Excentricidad, m.
- h = Espesor de la película lubricante, m.
- ε = Relación de excentricidad, adimensional.
- H = Espesor de la película lubricante, adimensional.



- θ = Coordenada circunferencia, rad.
 Z = Coordenada axial, adimensional.
 P = Presión adimensional.
 ρ = Densidad del aire, 1.2 kg/m^3 .
 μ = Viscosidad, $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$.
 R_g = Constante universal de los gases ideales, $8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$.
 T = Temperatura del gas, $^{\circ}\text{C}$.
 k = Coeficiente de permeabilidad, m^2 .
 t_p = Espesor del medio poroso, m.
 Ω = Velocidad de rotación, rad/s .
 F_x = Componente horizontal de la fuerza, N.
 F_y = Componente vertical de la fuerza, N.

Referencias

- [1] R. C. Juvinall y K. M. Marshek, *Fundamentals of machine component design*, Hoboken, NJ: Wiley & Sons, 2020.
- [2] P. Childs, "Journal bearings", en *Mechanical Design Engineering Handbook*, 2a ed., Reino Unido: Butterworth-Heinemann, 2019, pp. 167-230, DOI: 10.1016/b978-0-08-102367-9.00005-6
- [3] R. G. Budynas y J. Keith Nisbett, *Shigley's mechanical engineering design*. 11a ed., Estados Unidos: Mcgraw-Hill Education, 2020.
- [4] J. W. Powell, *Design of Aerostatic Bearings*, Estados Unidos: Machinery Publishing, 1970.
- [5] Q. Gao, W. Chen, L. Lu, D. Huo, y K. Cheng, "Aerostatic bearings design and analysis with the application to precision engineering: State-of-the-art and future perspectives", *Tribology International*, vol. 135, pp. 1-17, 2019, DOI: 10.1016/j.triboint.2019.02.020
- [6] H. J. Sneck, y R. C. Elwell. "The externally pressurized, porous wall, gas-lubricated journal bearing. II", *ASLE Transactions*, vol. 8, no 4, pp. 339-345, 1965, DOI: 10.1080/05698196508972105
- [7] H. J. Sneck, y K. T. Yen. "The externally pressurized, porous wall, gas-lubricated journal bearing", *ASLE Transactions*, vol. 7, no 3, pp. 288-298, 1964, DOI: 10.1080/05698196408972058
- [8] H. J. Sneck, y K. T. Yen, "The externally pressurized, porous wall, gas-lubricated journal bearing-III", *ASLE Transactions*,



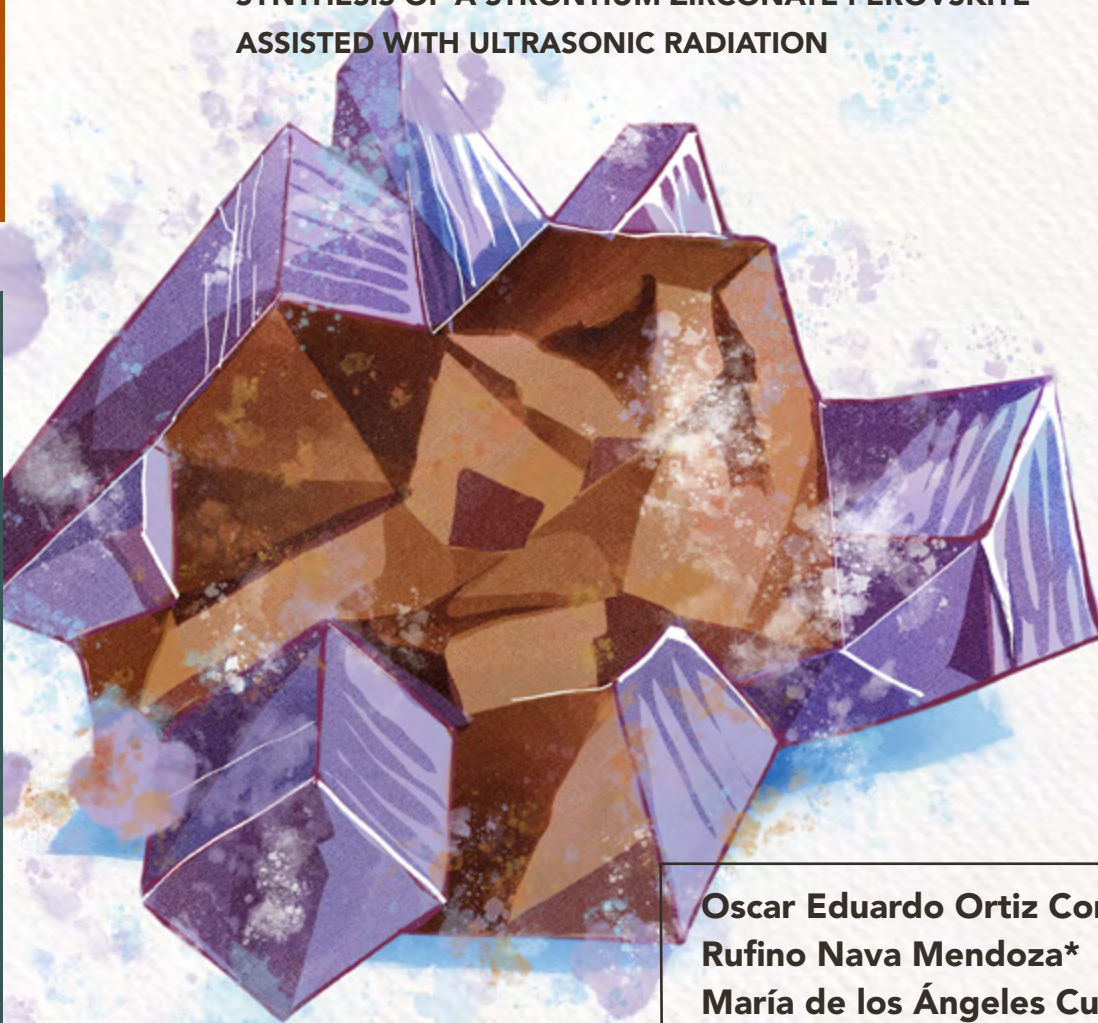
- vol. 10, no 3, pp. 339-347, 1967, DOI 10.1080/05698196708972192
- [9] H. Mori, H. Yabe, H. Yamakage, y J. Furukawa, "Theoretical Analysis of Externally pressurized porous Journal Gas Bearing (1st Report)", *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers*, vol. 33, no. 254, pp. 1718-1726, 1967, DOI: 10.1299/ki-kai1938.33.1718
- [10] H. Mori, H. Yabe, y H. Yamakage, "Theoretical Analysis of Externally Pressurized Porous Journal Gas Bearings: 2nd Report, Journal Bearing with Solid Sleeve Parts", *Bulletin of the JSME*, vol. 12, no. 54, pp. 1512-1518, 1969, DOI: 10.1299/jsme1958.12.1512
- [11] E. P. Gargiulo, "Porous wall Gas Lubricated Journal bearings: Theoretical investigation", *Journal of Lubrication Technology*, vol. 101, no. 4, pp. 458-465, 1979, DOI: 10.1115/1.3453395
- [12] J. W. Lund, "Calculation of stiffness and damping properties of gas bearings", *Journal of Lubrication Technology*, vol. 90, no. 4, pp. 793-803, 1968, DOI: 10.1115/1.3601723
- [13] N. S. Rao y B. C. Majumdar, "Dynamic stiffness and damping coefficients of aerostatic, porous, journal bearings", *Journal of Mechanical Engineering Science*, vol. 20, no. 5, 1978, DOI: 10.1243/JMES_JOUR_1978_020_049_02
- [14] NEWWAY air bearing, Air bearing application and design guide (revision e, january 2006). [En línea]. Disponible: https://www.newwayairbearings.com/sites/default/files/new_way_application_and_design_guide_%20Rev_E_2006-01-18.pdf
- [15] M. Miyatake, S. Yoshimoto, y J. Sato, "Whirling instability of a rotor supported by aerostatic porous journal bearings with a surface-restricted layer", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part J: Journal of Engineering Tribology*, vol. 220, no. 2, pp. 95-103, 2006, DOI: 10.1243/13506501JET89
- [16] G. Belforte, T. Raparelli, V. Viktorov, y A. Trivella, "Permeability and inertial coefficients of porous media for air bearing feeding systems", *Journal of Tribology*, vol. 129, no. 4, pp. 705-711, 2007, DOI: 10.1115/1.2768068
- [17] Y. Otsu, M. Miyatake, y S. Yoshimoto, "Dynamic characteristics of aerostatic porous journal bearings with a Surface-Restricted layer", *Journal of Tribology*, vol. 133, no. 1, 2010, DOI: 10.1115/1.4002730
- [18] W. Li, S. Wang, Z. Zhao, K. Zhang, K. Feng, y W. Hou, "Numerical and experimental



- investigation on the performance of hybrid porous gas journal bearings", *Lubrication science*, vol. 33, no. 2, pp. 60-78, 2020, DOI: 10.1002/lr.1527
- [19] L. S. Andrés, J. Yang, y A. Devitt, "Porous Gas Journal Bearings: An Exact Solution Revisited and Force Coefficients for Stable Rotor-dynamic Performance", *Applied Sciences*, vol. 11, no. 17, p. 7949, 2021, DOI: 10.3390/app11177949
- [20] Y. Gu, J. Cheng, C. Xie, L. Li, y C. Zheng, "Theoretical and Numerical Investigations on Static Characteristics of Aerostatic Porous Journal Bearings", *Machines*, vol. 10, no. 3, p. 171, 2022, DOI: <https://doi.org/10.3390/machines10030171>
- [21] R. Nicoletti, Z. De Castro Silveira, y B. De Moraes Purquerio, "Modified Reynolds equation for aerostatic porous radial bearings with quadratic Forchheimer Pressure-Flow assumption", *Journal of Tribology*, vol. 130, no. 3, 2008, DOI: 10.1115/1.2919776
- [22] J. Wang, "Design of gas bearing systems for precision applications", Tesis de doctorado. Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, Países Bajos, 1993, DOI: <https://doi.org/10.6100/ir391172>
- [23] P. Forchheimer, "Wasserbewegung durch Boden", *Z. Ver. Deutsch. Ing.* vol. 45, pp. 1782-1788, 1901.
- [24] H. Liu y Y. Xu, "Gas-Permeability Measurement in Porous Graphite Under Steady-State Flow", *SSRN Electronic Journal*, 2021, DOI: 10.2139/ssrn.3990054
- [25] J. Kim, J. Ha, J. Lee, y I. Song, "Effect of pore structure on gas permeability constants of porous alumina", *Ceramics International*, vol. 45, no. 5, pp. 5231-5239, 2019, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.11.219>

SÍNTESIS DE UNA PEROVSKITA DE ZIRCONATO DE ESTRONCIO ASISTIDA CON RADIACIÓN ULTRASÓNICA

SYNTHESIS OF A STRONTIUM ZIRCONATE PEROVSKITE
ASSISTED WITH ULTRASONIC RADIATION



Oscar Eduardo Ortiz Contreras
Rufino Nava Mendoza*
María de los Ángeles Cuán Hernández
Ricardo Antonio Escalona Villalpando
Alejandra Martínez Lázaro

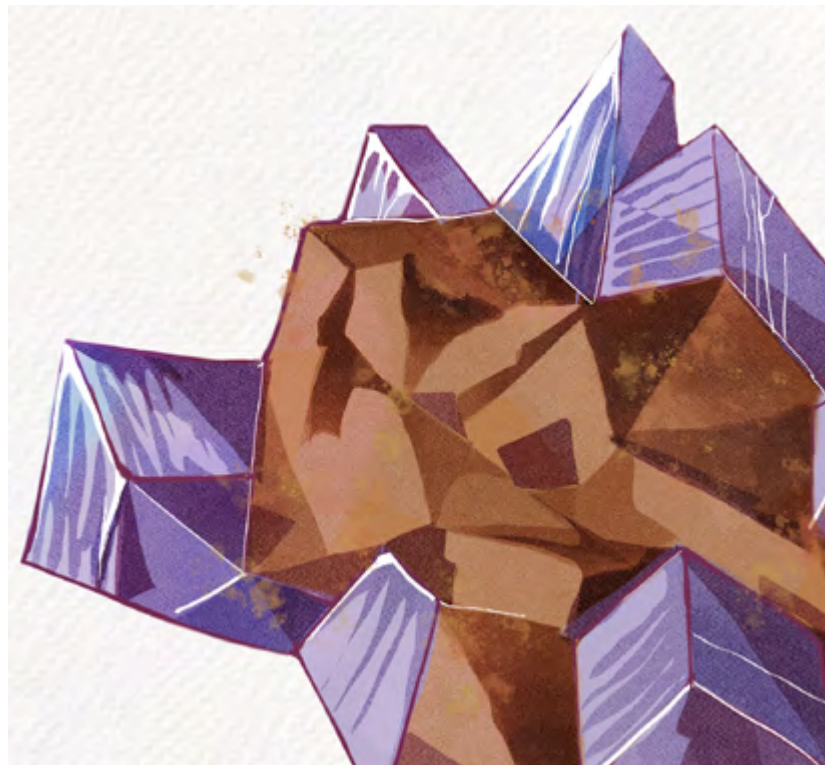
Universidad Autónoma de Querétaro,
Santiago de Querétaro, México

*rufino@uaq.mx

Resumen

Las perovskitas basadas en zirconatos son materiales de gran potencial en el campo de la fotocatalisis debido a sus magnas propiedades electrónicas, ópticas y catalíticas. Empero, su eficiencia aún está lejos de ser óptima debido a la falta de fotorrespuesta a la luz visible y al gran porcentaje de recombinación de portadores de carga, lo que acaece en un bajo rendimiento en la reacción de evolución del hidrógeno. Como resultado, se sintetizaron materiales tipo perovskita de zirconato de estroncio dopados con cobre y con asistencia de radiación ultrasónica "mediante el método sol-gel" para examinar la factibilidad de su aplicación en la reducción de hidrógeno. Las propiedades estructurales, electrónicas, ópticas y electroquímicas fueron evaluadas a través de difracción de rayos X (XRD), espectroscopia de reflectancia difusa (DRS), y caracterización electroquímica. Los resultados develaron que el $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$ SO es ideal para la aplicación del HER, el cobre y el uso de radiación ultrasónica generan cambios favorables en los parámetros de red, tipo de brecha energética del semiconductor (indirecta a directa), porcentaje de absorción de materiales, potencial de reducción y densidad de corriente del catalizador.

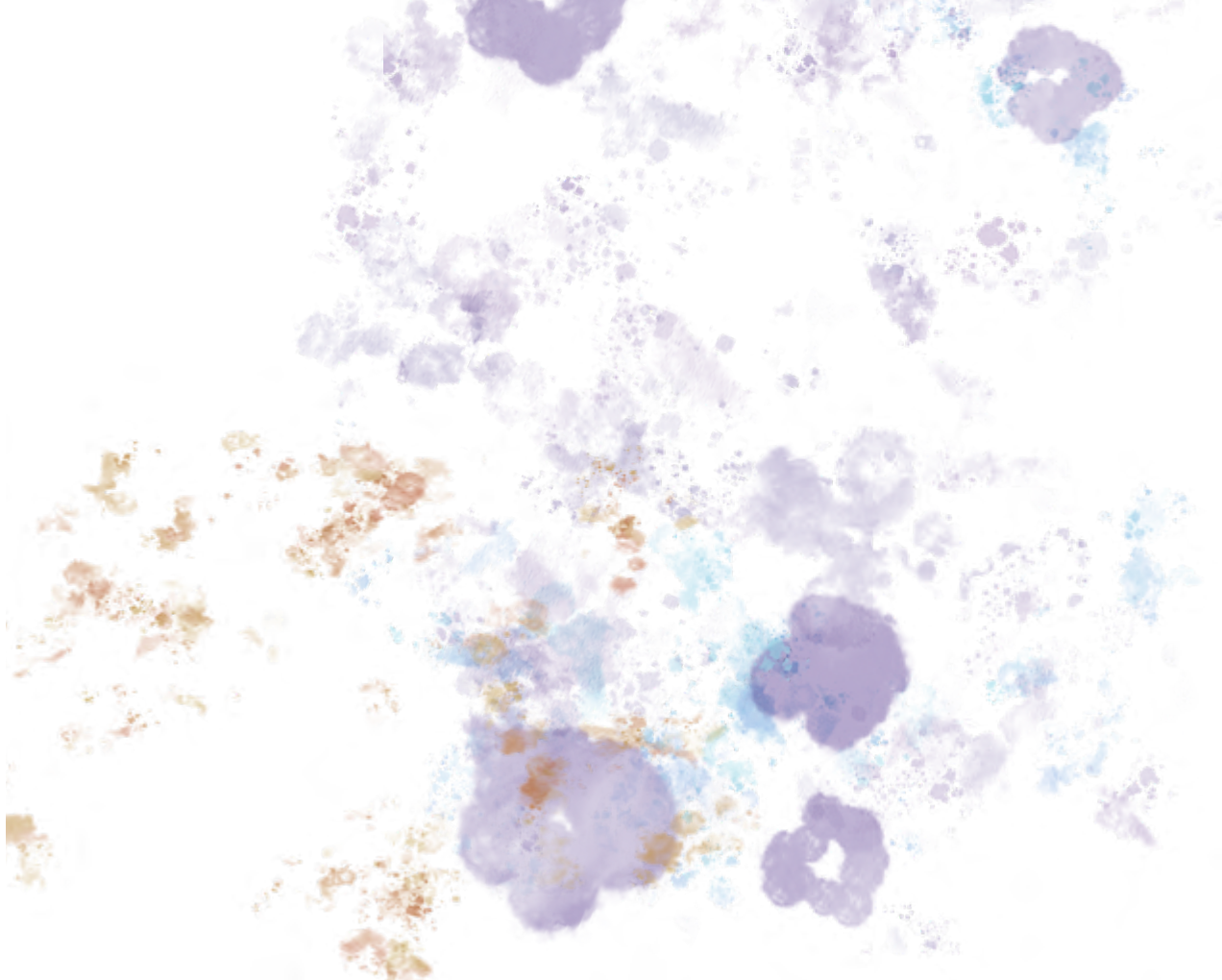
Palabras clave: combustible solar, fotocatalisis, perovskita, semiconductor, sonoquímica.



Abstract

Zirconate-based perovskites are materials with great potential in the field of photocatalysis due to their excellent electronic, optical, and catalytic properties. The absence of photoresponse to visible light and high percentage of charge carrier recombination make it far from optimal, leading to low yields in reactions like the hydrogen evolution one. Strontium zirconate perovskite-type materials, doped with copper and assisted by ultrasonic radiation were synthesized by the sol-gel method, for their possible application in hydrogen reduction. The structural, electronic, optical, and electrochemical properties were evaluated through X-ray diffraction (XRD), diffuse reflectance spectroscopy (DRS), and electrochemical characterization. The results strongly suggested that the best candidate for the application in HER is $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$, since both copper and the application of ultrasonic radiation generate changes in lattice parameters, type of band gap semiconductor (from indirect to direct), light absorption percentage, and finally, the reduction potential and current density of the catalyst.

Keywords: solar fuels, photocatalysis, perovskite, semiconductor, sonochemistry.



Introducción

Durante los últimos dos siglos, la abrumadora demanda del consumo energético ha condenado al planeta a una crisis climática. En las últimas décadas, aproximadamente el 75 % de las emisiones de dióxido de carbono (CO_2) y otros gases de efecto invernadero son provocadas por el hombre a través de la quema de combustibles fósiles [1], en la actualidad la participación de estos materiales representa más del 80 % de la matriz energética. En consecuencia, uno de los desafíos más urgentes de la sociedad es sustituir estos combustibles por fuentes alternativas que contribuyan a atenuar el cambio climático [1], [2].

La generación de energía mediante fotocatalizadores es una tendencia emergente y se considera una estrategia prometedora para satisfacer la creciente demanda mundial [3]. Los fotocatalizadores son principalmente materiales semiconductores que absorben fotones de la radiación electromagnética proveniente de la luz de acuerdo con su energía de banda prohibida (E_g) [4]. Cuando la energía de un fotón es mayor que E_g en el fotocatalizador, un electrón (e^-) se excitará de la banda de valencia (BV) a la banda de conducción (BC), dejando un hueco (h^+) en la BV del catalizador (Figura 1).

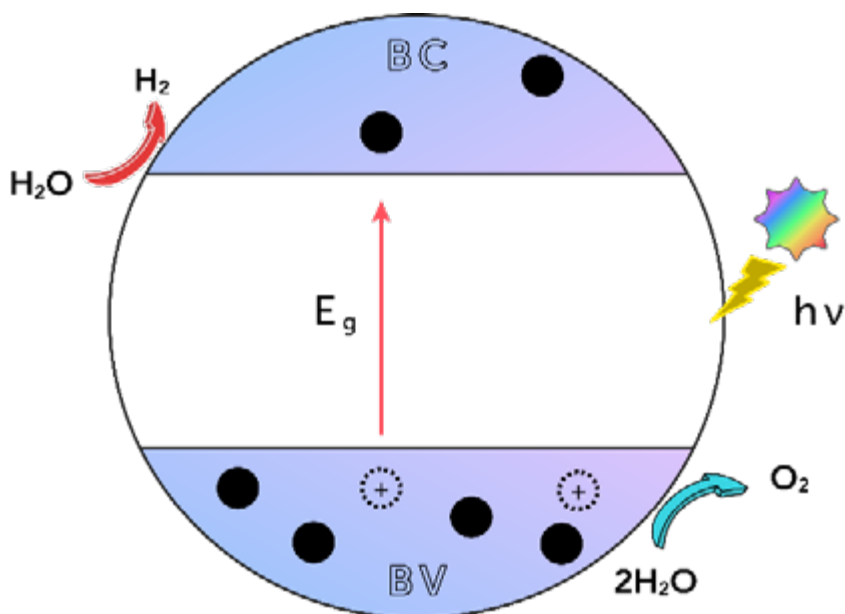


FIGURA 1. Diagrama esquemático de energía de un sistema de fotoexcitación. Adaptado de [5].

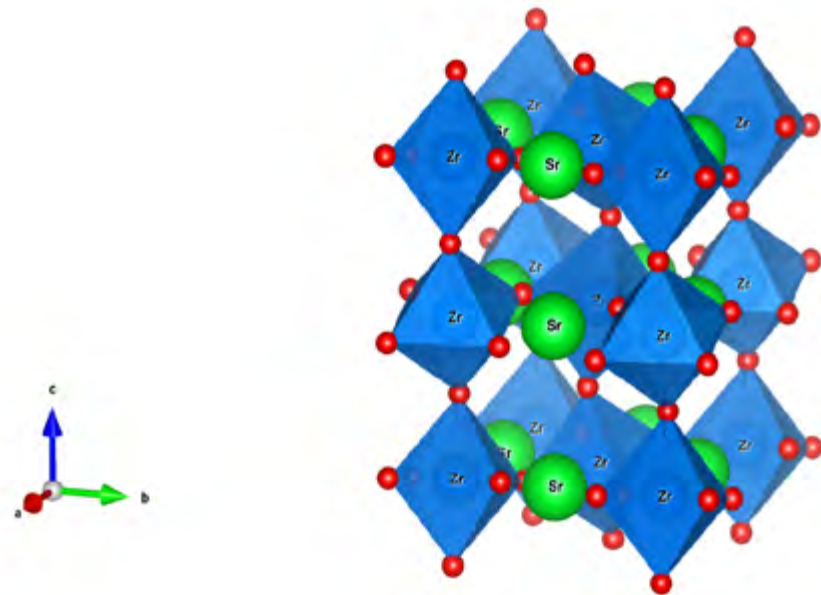
Si los portadores de carga fotoinducidos presentan suficiente actividad, se pueden generar especies químicas [5] utilizables para procesos de oxidación-reducción (fotólisis de la molécula de agua y fotorreducción de CO_2) aplicados a la síntesis de combustibles solares (hidrógeno, metanol) [1], [6]. Dentro del amplio espectro de materiales fotocatalizadores, los de tipo perovskita han llamado la atención durante la última década debido a sus

propiedades ópticas únicas [7]. Las perovskitas se caracterizan por su fórmula ABX_3 , donde A y B son cationes, mientras que X es un anión. Cuando los aniones de esta estructura cristalina se conforman por átomos de oxígeno, se tienen compuestos del tipo ABO_3 , donde A es un alcalinotérreo o un lantánido, y B es un metal de transición [7]. Un ejemplo de estos son los zirconatos ($AZrO_3$), conocidos por sus propiedades ferroeléctricas, piezoeléctricas y fotocatalíticas [8].

En fotocatalisis, la producción de H_2 empleando $AZrO_3$ permanece baja debido a su limitada absorción de luz ($E_g > 4$ eV) asociada a su escasa generación de portadores de carga [8]. En ese sentido, se requieren estrategias para mejorar la absorción de fotones y aumentar la producción de H_2 . Una forma de avanzar es producir un semiconductor por medio de un desplazamiento catiónico ($A = Ba, Ca, Sr$) en $AZrO_3$. Al introducir estroncio (Sr) en un zirconato se produce $SrZrO_3$ y se genera una estructura cristalina ortorrómbica con grupo espacial Pbnm (Figura 2). El compuesto resultante demuestra un gran potencial como material dieléctrico, luminiscente, refractario, catalítico, fotoactivo y conductor protónico a alta temperatura [8], [9].

Debido a que la fotólisis de agua con este tipo de materiales requiere radiación electromagnética de alta energía ($\lambda < 400$ nm) es menester modificar la estructura electrónica del material y con ello mejorar el rendimiento de la reacción de evolución de hidrógeno (HER, por sus siglas en inglés). Una de las rutas para realizar dicha modificación es la incorporación de metales abundantes de transición (Mn, Fe, Co, Ni, Cu) [10].

FIGURA 2. Ilustración de la estructura cristalina ortorrómbica tipo perovskita del $SrZrO_3$. Los sólidos de color verde representan los átomos de Sr; los de color azul simulan cationes de Zr; los de color rojo simbolizan aniones de oxígeno. Los poliedros corresponden a la estructura octaédrica BX_6 característica de los materiales tipo perovskita.





Se ha demostrado que diversos dopajes metálicos permiten capturar y liberar rápidamente portadores de carga fotogenerados, extender la vida útil de pares electrón-hueco, generar vacancias de oxígeno y especies Zr^{3+} , optimizar la absorción de luz y reducir la cantidad de energía necesaria para promover electrones; de este modo, se obtienen materiales fotocatalizadores comparables con los basados en metales nobles. No obstante, a la fecha es desconocida la influencia de este tipo de dopantes en zirconatos tipo perovskita para la producción de combustibles solares. Adicionalmente, debe considerarse la morfología del material, ya que de ella depende el área superficial específica, defectos con electrones o huecos adicionales, modificación en los sitios activos, así como de los potenciales de BV y BC.

El objetivo de este trabajo es determinar el efecto del cobre a baja concentración como dopante en la síntesis, sobre las propiedades ópticas, electrónicas y estructurales del fotocatalizador tipo perovskita basado en zirconato de estroncio. Asimismo, se busca observar el efecto de la radiación ultrasónica de baja frecuencia aplicada durante la síntesis de este tipo de materiales en su morfología y propiedades, para evaluar su potencial en el rendimiento de la HER.

Materiales y métodos

Síntesis de la perovskita

La perovskita de zirconato de estroncio ($SrZrO_3$) fue sintetizada a través de un proceso sol-gel a partir de una solución de propóxido de zirconio [IV] (70 % en peso en 1-propanol, Merck) disuelta en etilenglicol (99.8 %, Merck). En una síntesis típica, la solución de propóxido se disuelve en un volumen de etilenglicol en condiciones estándar bajo agitación vigorosa durante 60 minutos. Posteriormente se adiciona una cantidad de nitrato de estroncio (99 %, Merck) y se deja reaccionar para homogeneizar los cationes Sr^{2+} . A continuación, se agrega ácido cítrico (99 %, Merck) como agente complejante, y la mezcla se mantiene en agitación a 120 °C a lo largo de 24 horas. Una vez cumplido el plazo, la solución obtenida es esterificada a 130 °C durante 24 horas. Después de la formación del gel de Sr-Zr-O se lleva a cabo una primera etapa de calcinado a 450 °C por 8 horas, y finalmente se procede a una segunda etapa a 650 °C por 8 horas.

...La generación de energía mediante fotocatalizadores es una tendencia emergente y se considera una estrategia prometedora para satisfacer la creciente demanda mundial. Las perovskitas basadas en zirconatos son materiales de gran potencial en el campo de la fotocatalisis debido a sus magnas propiedades electrónicas, ópticas y catalíticas.



Síntesis de la perovskita modificada

La obtención de la perovskita de SrZrO_3 dopada con cobre se realizó por el método sol-gel descrito anteriormente, al cual se adicionó una dosis de $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ (99 %, Merck) y $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$, para obtener una perovskita con un dopado teórico estequiométrico del 3 % de Cu ($\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$). A su vez, la adición del ultrasonido de baja frecuencia (26 kHz) se realizó después de dejar la solución a 120 °C por 24 horas y antes de la esterificación a 130 °C. Para tal fin se implementó un sonotrodo modelo UP200HT de la marca Hiel-scher a 50 % de amplitud, con un pulso 1:0 durante 30 minutos.

Difracción de rayos X

Los análisis de difracción de rayos X por polvos se realizaron empleando un voltaje de 20 kV y una radiación $\text{Cu K}\alpha = 1.5406 \text{ \AA}$. Las mediciones se efectuaron en el rango 20-80° de 2θ (ángulos convencionales) en un difractómetro D8 Advance de la marca Bruker.

Caracterización óptica

Las propiedades ópticas fueron analizadas a través de los espectros de reflectancia difusa en un rango de 200-800 nm a temperatura ambiente con un espectrómetro Cary 5000 de la marca Varian.

Caracterización fotoelectroquímica

Las distintas mediciones fotoelectroquímicas se realizaron en una celda de cuarzo de tres electrodos conectada a un potenciostato vSP de la marca Biologic. Se utilizó un contraelectrodo de platino y un electrodo de plata/cloruro de plata (Ag/AgCl) como referencia. El electrodo de trabajo se fabricó depositando 20 μl de una tinta del catalizador sobre una terminal de carbono vítreo de 0.071 cm^2 y se dejó secar a temperatura ambiente durante diez minutos. Para la preparación de la tinta se suspendió una cantidad del catalizador en 8 % volumen de una solución de Nafion® 117 (5 %, Merck) e isopropanol (99.5 %, Merck). Se dispuso Na_2SO_4 como electrolito en solución a 0.5 M.



Resultados y discusión

Difracción de rayos X a ángulos convencionales

TABLA 1. Parámetros de red experimentales empleados en la difracción de rayos X para szo y szo sq.

	A	B	C
szo	5.82 Å	8.22 Å	5.79 Å
szo sq	5.81 Å	8.21 Å	5.78 Å

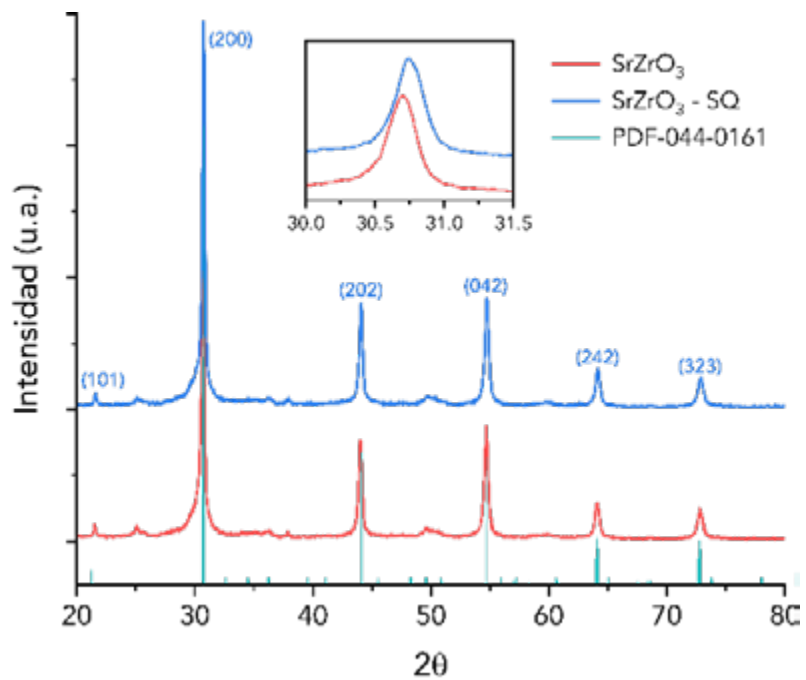


FIGURA 3. Patrones de difracción de las perovskitas SrZrO₃ (rojo) y SrZrO₃ asistida con ultrasonido (azul) a ángulos convencionales.

Los patrones de difracción muestran las reflexiones características en 2θ en 21.26° , 30.79° , 44.07° , 54.78° , 64.12° y 72.76° (PDF-044-0161) correspondientes a los planos (101), (200), (202), (042), (242) y (323). El tamaño de cristalito fue calculado por medio del modelo de deformación uniforme (UDM) de Williamson-Hall (W-H) [11] descrito en la ecuación siguiente:

$$\beta_{(hkl)} \cdot \cos(\theta) = 4\epsilon \sin(\theta) + \frac{k\lambda}{D}$$

Donde:

$\beta_{(hkl)}$ es el ancho total a la mitad del máximo (FWHM, por sus siglas en inglés) de las reflexiones de Bragg (radianes);

θ es el ángulo de la posición de las reflexiones (radianes);

λ es la longitud de onda de los rayos X;

k es la constante de Scherrer (0.89);

ε es el microesfuerzo;

D es el tamaño del cristalito.

A partir del modelo anterior se registraron los tamaños de cristalito reportados en la Tabla 2:

TABLA 2. Tamaños de cristalito y valores de microesfuerzo para las muestras de *szo* y *szo sq*.

	TAMAÑO DE CRISTALITO	MICROESFUERZO
<i>szo</i>	46.71 nm	1.12×10^{-3}
<i>szo sq</i>	51.35 nm	1.34×10^{-3}

Al aplicar la radiación ultrasónica aumenta tanto el tamaño del cristalito como el microesfuerzo de compresión, a su vez se genera un desplazamiento hacia la derecha (Figura 3). Tales incrementos sugieren que la radiación ultrasónica aplicada provee la energía necesaria para unir cristalitas de menor tamaño. Lo anterior se refleja en la disminución de los parámetros de la red del cristal como un esfuerzo de compresión debido a un óptimo empaquetamiento de los átomos.

TABLA 3. Parámetros de red experimentales empleados en la difracción de rayos X para *Cuszo* y *Cuszo sq*.

	a	b	c
<i>Cuszo</i>	5.84 Å	8.23 Å	5.82 Å
<i>Cuszo sq</i>	5.81 Å	8.20 Å	5.79 Å

En cuanto al dopaje con cobre, los patrones de difracción de las perovskitas de $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$ (*Cuszo*) y $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$ asistida con ultrasonido (*Cuszo sq*) (Figura 4) conservan la calidad cristalina y fase ortorrómbica de la perovskita *szo*. Los parámetros de red experimentales correspondientes se muestran en la Tabla 3.

FIGURA 4. Patrones de difracción de las perovskitas $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$ (rojo) y $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$ asistida con ultrasonido (azul) a ángulos convencionales.

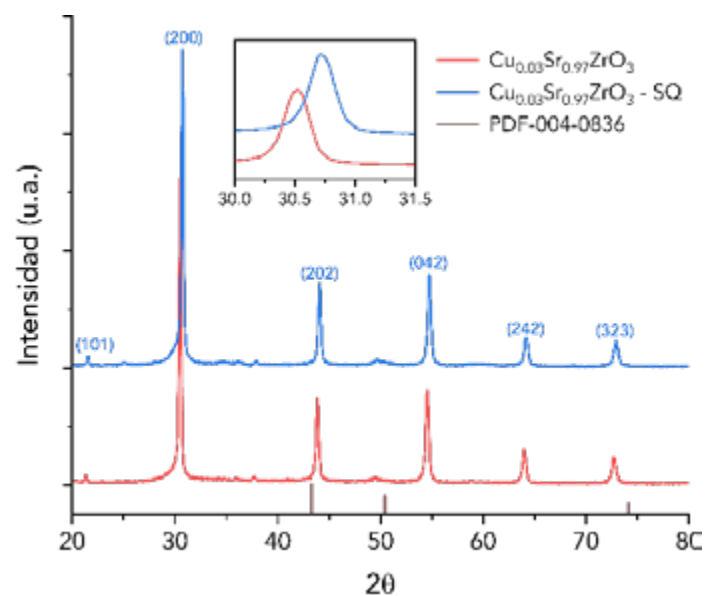




TABLA 4. Tamaños de cristalito y valores de microesfuerzo para las muestras de Cuszo y Cuszo SQ.

	TAMAÑO DE CRISTALITO	MICROESFUERZO
Cuszo	70.29 nm	1.61×10^{-3}
Cuszo SQ	58.86 nm	1.29×10^{-3}

Los patrones de difracción para las perovskitas con cobre no muestran las reflexiones características en 2θ en 43.29° , 50.43° y 74.13° (PDF-004-0836) correspondientes a los planos (111), (200) y (220) de la estructura FCC del cobre. La falta de reflexiones se atribuye a la baja concentración teórica del dopado de cobre (3 %). De acuerdo con la Figura 4, existe un desplazamiento hacia la derecha derivado de la incorporación y la asistencia del ultrasonido. Al aplicar el modelo W-H se obtuvieron tamaños de cristalito de 70.29 y 58.86 nm con microesfuerzos de 1.61×10^{-3} y 1.29×10^{-3} para Cuszo y Cuszo SQ (Tabla 4).

Al incorporar el cobre se advierte un incremento en los parámetros de red, y por consiguiente del volumen de la celda, a pesar de que el átomo del mismo presente un menor tamaño en comparación con el átomo de estroncio. Es posible que el cobre se encuentre en forma de impurezas intersticiales que aumentan el volumen de celda y al mismo tiempo los esfuerzos de compresión; en consecuencia, su señal se desplaza a la derecha con respecto al material sin dopar.

En contraste, al aplicar la radiación ultrasónica se disminuye el tamaño de cristalito, y se mantienen los parámetros de red de la perovskita pura. Asimismo, se proporciona energía suficiente al cristal para que los átomos de Cu se acomoden en la estructura cristalina, aumentando el empaquetamiento. Igualmente, hay desplazamiento en el ángulo de reflexión, pero disminución del volumen de la celda.

Espectros de reflectancia difusa UV-vis (DRS)

Los espectros de reflectancia difusa UV-vis de los catalizadores puros en polvo se presentan en la Figura 5. Estos materiales exhiben una banda de reflectancia en el rango UV ($\lambda < 400$ nm), que se atribuyen a los orbitales 3d del Zr y su amplia brecha energética (E_g).

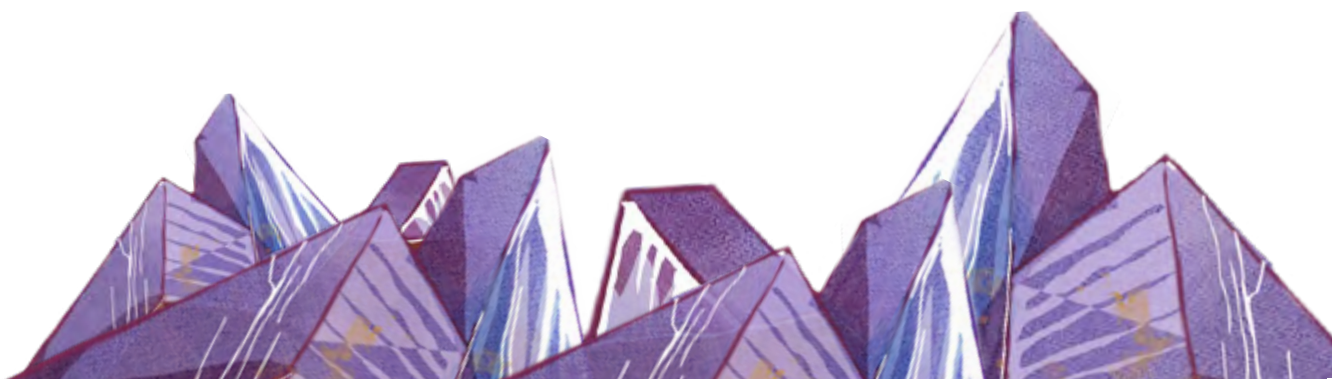
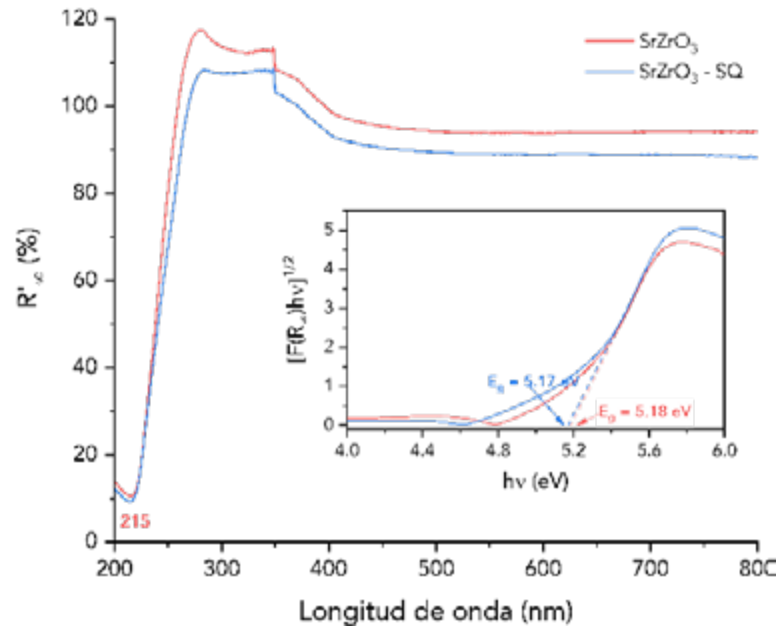


FIGURA 5. Espectros de reflectancia uv-vis de las perovskitas SrZrO₃ (rojo) y SrZrO₃ asistida con ultrasonido (azul) en el rango de 200-800 nm de longitud de onda.



La Figura 5 muestra la función de Kubelka-Munk (K_M) para *szo* y *szo sq* en función de la energía del fotón ($h\nu$) [12], calculada a través de la siguiente ecuación:

$$F(R_{\infty}) = \frac{(1 - R_{\infty})^2}{2R_{\infty}} = \frac{\infty}{S}$$

Donde:

R_{∞} es la reflectancia de una muestra semi infinitamente gruesa;

∞ es el coeficiente de absorción;

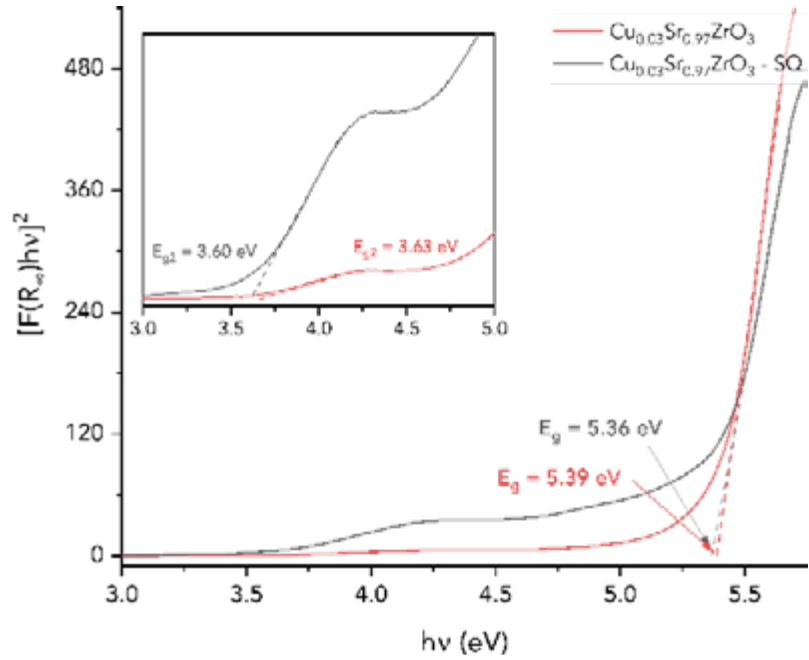
S el coeficiente de dispersión.

Como se puede observar se encontraron brechas E_G de 5.18 y 5.17 eV para *szo* y *szo sq*, respectivamente. Es decir, la aplicación de radiación ultrasónica de baja frecuencia parece afectar ligeramente la reflectancia del material. En principio, esto se atribuye a los cambios estructurales, ya que un mejor acomodo y empaquetamiento de los átomos permite una mejor absorción de radiación electromagnética.

En la Figura 6 se presentan las perovskitas dopadas con cobre, así como tres bandas de reflectancia debido a los orbitales d del átomo cúpreo; se aprecia que la reflectancia resultante de la incorporación de cobre es menor, sobre todo en la parte visible del espectro electromagnético. Al igual que con la perovskita pura, la aplicación de radiación ultrasónica resulta en una disminución de la reflectancia, lo que sugiere que la energía proporcionada por las ondas de sonido optimiza el acomodo de los átomos en la estructura cristalina, mejorando las propiedades ópticas del material.

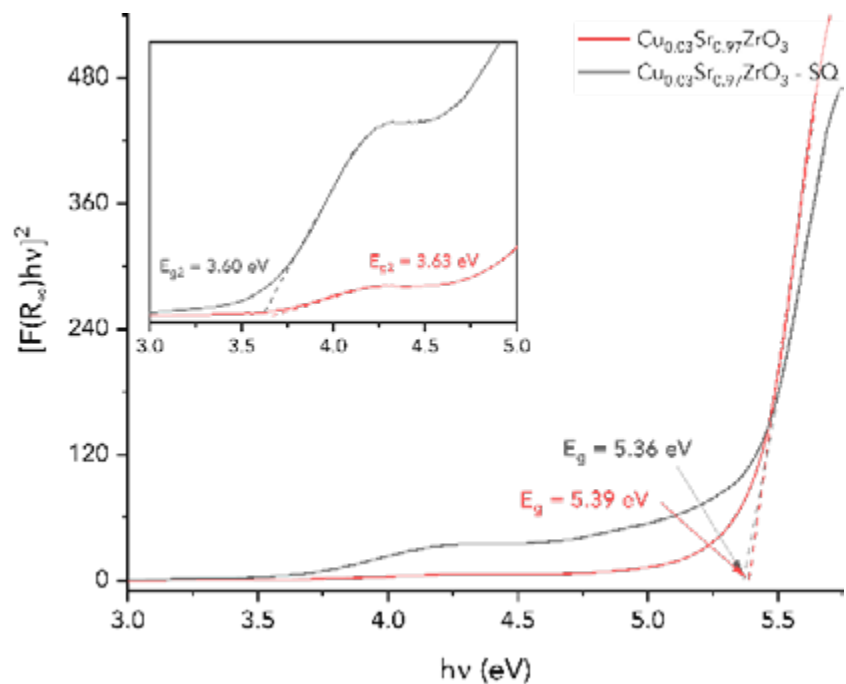


FIGURA 6. Espectros de reflectancia uv-vis de las pervoskitas $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$ (rojo) y $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$ asistida con ultrasonido (negro) en el rango de 200-800 nm de longitud de onda.



La Figura 7 muestra la función κM para las pervoskitas dopadas con cobre; se exhibe la función ajustada a un semiconductor de banda directa con brechas E_g de 5.39 y 5.36 eV. Entonces, resulta que la incorporación de un bajo porcentaje de cobre es suficiente para modificar la estructura electrónica de esta pervoskita de semiconductor de banda indirecta a banda directa. Lo anterior puede relacionarse con el cambio en los parámetros estructurales. Sin embargo, para confirmar esta suposición, es necesario realizar pruebas de fotoluminiscencia, asimismo se logra apreciar una segunda banda $E_{g2} = 3.60$ y 3.63 eV para uszo y Cuszo SQ, respectivamente. Tales valores están relacionados con los estados electrónicos que el cobre incorpora en la estructura tipo pervoskita del zirconato de estroncio.

FIGURA 7. Función Kulbelka-Munk contra la energía del fotón para determinar la brecha energética de $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$ (rojo) y $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3$ SQ (negro) utilizando los gráficos de Tauc.

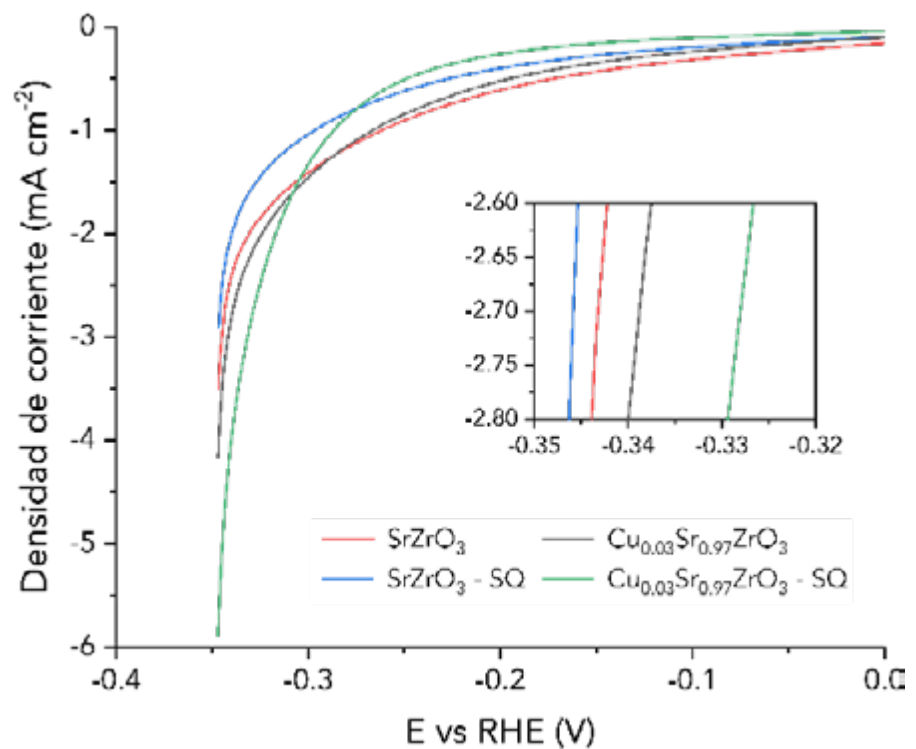


Caracterización electroquímica

El rendimiento de los materiales fue probado para la reacción de evolución de hidrógeno antes de la aplicación de radiación electromagnética, para conocer las propiedades intrínsecas de los distintos fotocatalizadores sintetizados. La Figura 8 muestra las curvas de polarización en oscuro para los distintos materiales. Se puede destacar que todas las muestras requieren más de 300 mV para alcanzar una densidad de corriente igual o mayor a los 3 mA/cm₂.

Es evidente que tanto la incorporación de cobre como la aplicación de radiación ultrasónica disminuyen el potencial requerido para alcanzar la densidad de corriente mencionada. En otras palabras, ambos tratamientos incrementan la densidad de corriente del material. Este aumento se atribuye a los cambios electrónicos y morfológicos generados por el cobre y la aplicación de ultrasonido.

FIGURA 8. Curvas de polarización en oscuro para la reacción de evolución de hidrógeno con una velocidad de barrido de 100 mV/s.



La ecuación de Tafel permite cuantificar la actividad del sistema mediante un parámetro denominado pendiente de Tafel, el cual se calcula ajustando las curvas de polarización de todas las muestras. Como se puede observar en la Tabla 5, tales pendientes oscilan entre 0.21 y 0.30 mV/década, con el mayor valor para *szo*. No obstante, ya que diferentes pendientes pueden conducir al mismo potencial para una densidad de corriente dada, es necesario analizar el área superficial activa electroquímica (ECSA) de todas las muestras.



MATERIAL	E (V)	PENDIENTE DE TAFEL (mV/DÉCADA)	C_{dl} (F/cm ²)	(cm ² ecsa)
szo	-0.343	0.306	0.33	1.18 ⁻⁹
szo sq	-0.346	0.285	0.27	1.15 ⁻⁹
Cuszo	-0.339	0.252	0.39	1.26 ⁻⁹
Cuszo sq	-0.329	0.216	0.41	1.31 ⁻⁹

TABLA 5. Parámetros electroquímicos de las perovskitas de zirconato de estroncio en oscuro.

Para cada muestra se tomó la diferencia en la densidad de corriente a un potencial de 750 mV contra la velocidad de barrido:

$$\Delta j = (j_a - j_c)/2$$

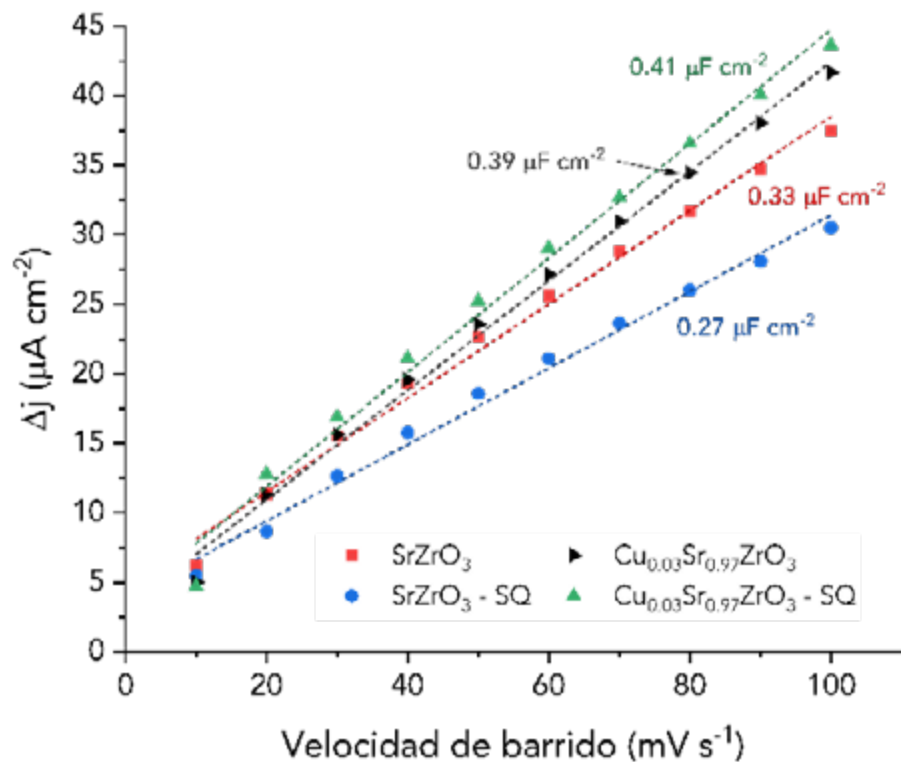
Donde:

j_a representa la corriente anódica;

j_c denota la corriente catódica.

De estas curvas se extrajo la constante de difusión de línea (C_{dl}) de la pendiente del ajuste lineal (Figura 9). Los valores elevados de C_{dl} en los materiales $Cu_{0.03}Sr_{0.97}ZrO_3$ y $Cu_{0.03}Sr_{0.97}ZrO_3 - SQ$ se relacionan con una mayor cantidad de sitios electroactivos, lo que se puede traducir como un aumento en la actividad de HER. Posteriormente, los valores ECSA (la capacitancia de la doble capa dividida por la capacitancia específica de cada material) muestran una baja área superficial electroactiva en oscuro para todos los materiales (Tabla 1).

FIGURA 9. Capacitancia electroquímica de la doble capa y el ajuste lineal de C_{dl} a diferentes velocidades de barrido de 10 a 100 mV/s.





Es importante destacar que estos parámetros también deben repetirse con la aplicación de radiación electromagnética para obtener la cantidad de sitios fotoactivos disponibles de cada material.

Conclusiones

Se sintetizaron perovskitas de zirconato de estroncio utilizando el método sol-gel asistido con ultrasonido para la generación de fotocatalizadores. De acuerdo con los resultados de *XRD*, los polvos obtenidos presentan una alta calidad cristalina con una única fase ortorrómbica y tamaños de cristalito de 46.71, 51.35, 70.29 y 58.86 nm para *SZO*, *SZO SQ*, *Cu_{0.03}SZO* y *Cu_{0.03}SZO SQ*, respectivamente. Tanto la incorporación de cobre como la aplicación de radiación ultrasónica incitan cambios estructurales en los materiales. Estas perovskitas presentan brechas energéticas entre 5.17 y 5.39 eV, acorde a los análisis *DRS*. Además, se sugiere que el dopado con cobre genera cambios electrónicos, ya que pasa de tener un material de banda indirecta a uno de banda directa. Por otro lado, la aplicación de radiación ultrasónica solo parece aumentar la absorción de los materiales, atribuible a los cambios estructurales observados en *XRD*. Las caracterizaciones electroquímicas en oscuro revelan que, efectivamente, la aplicación de ultrasonido a baja frecuencia y los orbitales d del cobre presentan un menor potencial y una mayor densidad de corriente; estos efectos se ven amplificados cuando se aplica luz para activar los materiales, lo que indica su capacidad como materiales fotoactivos para *HER*. Al momento, las propiedades intrínsecas de los materiales indican que la perovskita $\text{Cu}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{ZrO}_3 \text{SQ}$ es la que tendrá más influencia en la reducción de hidrógeno, ya que presenta el menor potencial, la mayor densidad de corriente, así como el área superficial electroquímica más extensa, a lo que sugiere un aumento en el efecto de transferencia de carga.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Laboratorio de Nanotecnología de la Universidad Autónoma de Querétaro (UAQ) campus Aeropuerto y al Laboratorio de Micro y Nano Fluídica (LabMyN) sede Querétaro, por apoyar esta investigación a través de la evaluación y asistencia técnica en las caracterizaciones *DRS* y *XRD*, así como las respectivas pruebas electroquímicas.





Referencias

- [1] S. Ezendam, M. Herrán, L. Nan, C. Gruber *et al.*, "Hybrid Plasmonic Nanomaterials for Hydrogen Generation and Carbon Dioxide Reduction", *ACS Energy Lett*, vol. 7, no. 2, pp. 778-815, 2022, DOI: 10.1021/acsenerylett.1c02241
- [2] R. Marschall, "50 Years of Materials Research for Photocatalytic Water Splitting", *European Journal of Inorganic Chemistry*, vol. 2021, no. 25, pp. 2435-2441, 2021, DOI: 10.1002/ejic.202100264
- [3] S. Luo, X. Ren, H. Lin, H. Song y J. Ye, "Plasmonic photo-thermal catalysis for solar-to-fuel conversion: current status and prospects", *Chem Science*, vol. 12, no. 6, pp. 5701-5719, 2021, DOI: 10.1039/D1SC00064K
- [4] S. C. Shit, I. Shown, R. Paul, K. H. Chen, J. Mondal y L. C. Chen, "Integrated nano-architected photocatalysts for photochemical CO₂ reduction", *Nanoscale*, vol. 12, no. 46, pp. 23301-23332, 2020, DOI: 10.1039/d0nr05884j
- [5] C. Wang, Z. Sun, Y. Zheng y Y. H. Hun, "Recent progress in visible light photocatalytic conversion of carbon dioxide", *Journal of Materials Chemistry*, vol. 7, no. 3, pp. 865-887, 2019, DOI: 10.1039/C8TA09865D
- [6] J. H. Kim, D. Hansora, P. Sharma, J. W. Jang y J. S. Lee, "Toward practical solar hydrogen production – an artificial photosynthetic leaf-to-farm challenge", *Journal Chemical Society Reviews*, vol. 48, no. 7, pp. 1908-1971, 2019, DOI: 10.1039/C8CS00699G
- [7] M. Irshad, Q. tul Ain, M. Zaman y M. Z. Aslam, "Photocatalysis and perovskite oxide-based materials: a remedy for a clean and sustainable future", *RCS Advances*, vol. 12, no. 12, pp. 7009-7039, 2022, DOI: 10.1039/D1RA08185C
- [8] A. M. H. Flores, F. R. Zepeda, C. Eyovge y J. Winczewski, "Enhanced Photocatalytic Hydrogen Evolution from Water Splitting on Ta₂O₅/SrZrO₃ Heterostructures Decorated with Cu_xO/RuO₂ Cocatalysts", *ACS Applied Materials & Interfaces Journal*, vol. 14, no. 28, pp. 31767-31781, jul. 2022, DOI: 10.1021/acsmi.2c02520
- [9] Z. Guo, B. Sa, B. Pathak, J. Zhou, R. Ahuja y Sun, "Band gap engineering in huge-gap semiconductor SrZrO₃ for visible-light photocatalysis", *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 5, pp. 2042-2084, feb. 2015, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.11.055



- [10] J. Zhu, G. Cheng, J. Xiong, W. Li, y S. Dou, "Recent Advances in Cu-Based Co-catalysts toward Solar-to-Hydrogen Evolution: Categories and Roles", *Solar RRL*, vol. 3, no. 10, 2019, DOI: 10.1002/solr.201900256
- [11] B. Himabindu, N. S. M. P. Latha Devi y B. Rajjini Kanth, "Microstructural parameters from X-ray peak profile analysis by Williamson-Hall models; A review", *Materials Today Proceedings*, vol. 47, no. 11, pp. 4891-4896, jul. 2021, DOI: 10.1016/j.matpr.2021.06.256
- [12] S. Landi, I. R. Segundo, E. Freitas, M. Vasilevskiy, J. Carneiro y C. J. Tavares, "Use and misuse of the Kubelka-Munk function to obtain the band gap energy from diffuse reflectance measurements", *Solid State Communications*, vol. 341, no. 1, 2021, DOI: 10.1016/j.ssc.2021.114573





MECANISMO DE ACCIÓN DE TRATAMIENTOS PRECOSECHA CON ÁCIDO SALICÍLICO PARA REDUCIR LA REVERSIÓN EN EL FRUTO DE ZARZAMORA

MECHANISM OF ACTION OF PREHARVEST TREATMENTS WITH SALICYLIC ACID TO REDUCE REVERSION IN BLACKBERRY FRUIT

Joel Ernesto Martínez Camacho*
Noelia Isabel Ferrusquía Jiménez
Irineo Torres Pacheco¹

¹Universidad Autónoma de Querétaro,
El Marqués, México

*qajuelmartinez@gmail.com





Abstract

Red drupelet reversion (RDR) is a physiological disorder that specifically affects blackberry fruit during marketing. It is characterized by a change in coloration from black to reddish in individual drupes, causing a decrease in their commercial value. The specific mechanism of this phenomenon is still under investigation, however, some reports suggest that the reversion is related to pigment degradation in the fruit, and may be aggravated by mechanical damage as well as storage conditions. Reports suggest that there is no significant alteration in the organoleptic properties of blackberry due to reversion, however, the resulting visual appearance impairs its visual appeal and, consequently, generates economic losses. In relation to this, recent research indicates that foliar treatments with salicylic acid (SA) in preharvest stages are effective in maintaining blackberry quality in postharvest. In the present work, a mechanism of action of salicylic acid in the preservation of blackberry was investigated

Resumen

La reversión (RDR, por las siglas en inglés *red drupelet reversion*) es un desorden fisiológico que afecta de manera específica a los frutos de zarzamora durante su comercialización. Se caracteriza por un cambio de coloración de negra a rojiza en las drupas individuales, provocando que disminuya su valor comercial. El mecanismo específico de este fenómeno aún es investigado, sin embargo, algunos reportes sugieren que la reversión está relacionada con la degradación de pigmentos en el fruto, y puede agravarse por el daño mecánico, así como las condiciones de almacenamiento. Los reportes sugieren que no existe una alteración significativa en las propiedades organolépticas de la zarzamora a causa de la reversión, empero, el aspecto visual resultante perjudica su atractivo visual y, por consecuencia, genera pérdidas económicas. En relación a esto, la investigación reciente apunta que los tratamientos foliares con ácido salicílico (As) en etapas precosecha son efectivos para mantener la calidad de la zarzamora en poscosecha. En el presente trabajo, se investigó y propuso un mecanismo de acción del ácido salicílico en la conservación de la zarzamora, con particular atención en la incidencia de reversión en el fruto..

Palabras clave: ácido salicílico, capacidad antioxidante, reversión, zarzamora.



and proposed, with particular attention to the incidence of reversion in the fruit.

Keywords: *Salicylic acid, antioxidant capacity, red drupelet reversion, blackberry.*

Introducción

Las zarzamoras son susceptibles de perder calidad durante su comercialización, principalmente porque el fruto se caracteriza por su piel delgada y propensa a sufrir daños mecánicos durante su manejo; adicionalmente, tiende a perder humedad rápidamente durante su almacenamiento. La reversión (RDR por las siglas en inglés de red drupelet reversion) constituye una de las mayores causas de pérdida en cuanto a atractivo comercial en poscosecha para las zarzamoras en fresco [1]. Se trata de un desorden fisiológico que altera el color de las drupas individuales del fruto, pasando de un color negro intenso a rojo [2]. Pese a los reportes de que la reversión no afecta significativamente las propiedades organolépticas de la zarzamora, como su contenido de azúcares o acidez [3]; este cambio de color afecta significativamente la percepción de la calidad de la fruta por parte de los consumidores [4].

El mecanismo específico de la reversión continúa sin ser descrito a completud; sin embargo, se sospecha que es resultado de una degradación en los pigmentos del fruto, específicamente las antocianinas [5]. Este decaimiento puede agudizarse por factores externos como la vibración [6], [7], las condiciones de almacenamiento y el manejo del fruto [8].

Debido a la fragilidad del fruto de zarzamora, existen limitaciones en los procesos y métodos implementables para mantener su calidad en poscosecha. En este sentido, la mayoría de los estudios en cuanto a la reversión se han enfocado en los efectos de: las condiciones de crecimiento y prácticas de cultivo ante el fenómeno [9], [10]; las condiciones de almacenamiento y la ocurrencia de la reversión [11], [12]; la reversión en las propiedades del fruto [13], y cómo se afecta la percepción del consumidor sobre la calidad de la zarzamora [4], [14]. Aunque comercialmente la RDR supone un desafío prevalente en el cultivo de zarzamora,





pocos trabajos ofrecen métodos para reducir su incidencia, y además se limitan a selección de cultivares y mejoramiento de variedades [15],[16].

Algunos tratamientos precosecha han mostrado potencial para mantener la calidad de los frutos en las etapas de almacenamiento. Por ejemplo, el rociado con ácido salicílico ha reportado mantener la calidad de frutas como uvas y fresas, debido a su acción reguladora del metabolismo vegetal. El tratamiento promueve la síntesis de compuestos fenólicos, activa los sistemas antioxidantes y fortalece la resistencia a patógenos [17]; además mantiene la firmeza y mitiga la pérdida de electrolitos [18]. Adicionalmente, la aplicación precosecha de dicho compuesto en zarzamora ha mostrado el aumento de actividad de enzimas antioxidantes y de biosíntesis de compuestos fenólicos, la reducción de la actividad de enzimas de degradación [21], así como el aumento de antocianinas y la disminución de la reversión en frutos de zarzamora [22].

El presente trabajo persigue los siguientes objetivos: describir el mecanismo de acción del ácido salicílico en la fisiología de la zarzamora e identificar la correlación entre los metabolitos especializados, sistemas antioxidantes enzimáticos y los factores de deterioro, incluyendo la reversión en la zarzamora.

Metodología y análisis estadístico

Ubicación y material vegetal

El lote experimental fue instalado en la comunidad de Senegal de las Palomas, municipio de San Juan del Río, Querétaro (20.436092, -100.085137). El material vegetal consistió en plantas de zarzamora cv. "Tupi" de 5-6 años de edad cultivadas bajo el sistema de riego por goteo, con una separación de 2.4 m entre hileras y una distancia de 80 cm entre plantas. Para el manejo agronómico del cultivo se llevaron a cabo labores culturales de: poda (activación, despunte, rebrote y mantenimiento), nutrición (foliar y al suelo), riego y desyerbe.

Aplicación de tratamientos

Las plantas fueron tratadas con ácido salicílico (AS, grado reactivo. J. T. Baker, USA) a una concentración de 3 mM. Los tratamientos se aplicaron a las hojas y frutos con ayuda de un aspersor de mano, y con un volumen de 1 litro por cada 80 plantas, dejando las hojas a punto de goteo. Las aplicaciones se llevaron a cabo entre las 7:00 y 8:00 am. Se adoptó un diseño experimental de bloques al azar con dos tratamientos y un



La reversión es un desorden fisiológico que afecta de manera específica a los frutos de zarzamora durante su comercialización.

Con este trabajo, se investigó y propuso un mecanismo de acción del ácido salicílico en la conservación de la zarzamora, con particular atención en la incidencia de reversión en el fruto.



control de agua destilada, con 3 repeticiones (28 plantas cada uno). Después de 5 horas de la aplicación de los tratamientos, se colectaron muestras de zarzamora en su punto comercial de maduración que cumplieran las siguientes características: sin evidencia de decoloración, daño mecánico ni enfermedad, con un color negro brillante, drupas completas y firmes, de fácil desprendimiento y ubicación similar respecto a la planta. Las muestras se colectaron en empaques termoformados (conocidos como clamshell) de PET comerciales con capacidad de 6 oz. Las muestras se mantuvieron entre 0 y 1 °C durante 12 horas, posteriormente se almacenaron a una temperatura ambiente promedio de 22 a 23 °C durante 132 horas. La unidad experimental para la determinación de vida de anaquel fue de 12 a 16 zarzamoras con 4 repeticiones por tratamiento. Después del periodo de almacenamiento, se tomaron muestras de manera aleatoria (3-4 zarzamoras por clamshell) y se almacenaron a -70 °C para su posterior análisis..

Determinación de reversión

El criterio para considerar que una zarzamora presentaba RDR fue que dos o más de sus drupas cambiaran su coloración de morado intenso a rojizo durante el almacenamiento (Figura 1). La cuantificación de este aspecto se reporta en porcentaje.

Figura 1. Reversión en frutos de zarzamora. Los círculos blancos indican frutos sanos. Flechas rojas indican presencia de reversión.



Determinación de variables en el fruto

La metodología para determinar la actividad enzimática de superóxido dismutasa (SOD), catalasa (CAT), fenilalanina amonio-liasas (PAL), poligalactu-



ronasa (PG), y para calcular el índice de comercialización (IC) y sus factores individuales (goteo y presencia de micelio) se reportó y describió a detalle previamente en Martínez Camacho et al. [21]. En síntesis, el tratamiento de AS se aplicó de manera foliar a plantas y frutos de zarzamora; posteriormente, se recolectaron y almacenaron los frutos y se determinó vida de anaquel. Después se efectuaron extractos enzimáticos de las muestras de zarzamora, los cuales se compararon con las curvas de calibración correspondientes para SOD y PAL. Respecto a CAT, la actividad se calculó por el método de coeficiente de extinción molar; en cuanto a PG, mediante una comparación contra una solución referencia de pectina. El cálculo del IC se computó integrando factores de deterioro individuales para la zarzamora (goteo, presencia de micelio y reversión). Las determinaciones para contenido total de antocianinas (TAC) y reversión (RDR) se reportaron a detalle previamente en [22]. En resumen, la determinación de TAC se realizó de manera espectrofotométrica mediante la metodología de cambio de color por pH. La determinación de RDR se realizó de manera visual y se expresó como porcentaje. La metodología para la obtención de datos para capacidad antioxidante (%DRSA), contenido de fenoles totales (TPC) y contenido de flavonoides totales (TFC) se incluye como material complementario. Para las variables SOD, CAT, PAL, TPC y TFC se determinó la existencia de diferencias estadísticas significativas mediante una comparación de medias de Tukey ($p = 0.05$). Para las variables IC y %DRSA, se realizó una comparación de medias de Tukey ($p = 0.05$) con valor transformado ($\log x$), utilizando el software JMP® v 12.1.0 (SAS Institute Inc., North Carolina, USA).

Los datos originales sin procesar de todas las variables antes mencionadas se utilizaron para las pruebas de correlación presentadas en este trabajo, en específico, una prueba de Spearman ($\alpha = 0.05$) en el software JMP® v 12.1.0 (SAS Institute Inc., North Carolina, USA).

Resultados y discusión

En [21] se reportó que el ácido salicílico implementado como tratamiento precosecha en zarzamora aumenta la vida de anaquel del fruto. Además, promueve la activación de enzimas del sistema antioxidante vegetal, como SOD y CAT; ambos compuestos se relacionan con el retraso de la senescencia, debido a su acción para contrarrestar los procesos oxidativos y el efecto de radicales libres en frutos. De manera similar, se reportó un aumento en la actividad de la enzima PAL, la cual se asocia a la síntesis de compuestos especializados de tipo fenólico en los frutos.



Adicionalmente, se observó una disminución en la actividad de la enzima PG; dicha baja se vincula con una disminución en los procesos de degradación y senescencia en frutos. El conjunto de estos factores puede haber contribuido a mantener la comerciabilidad de las zarzamoras por un mayor tiempo. Respecto al fenómeno de reversión, se reportó en [22] que los tratamientos de ácido salicílico redujeron la presencia de reversión en frutos de zarzamora almacenadas durante 144 h.

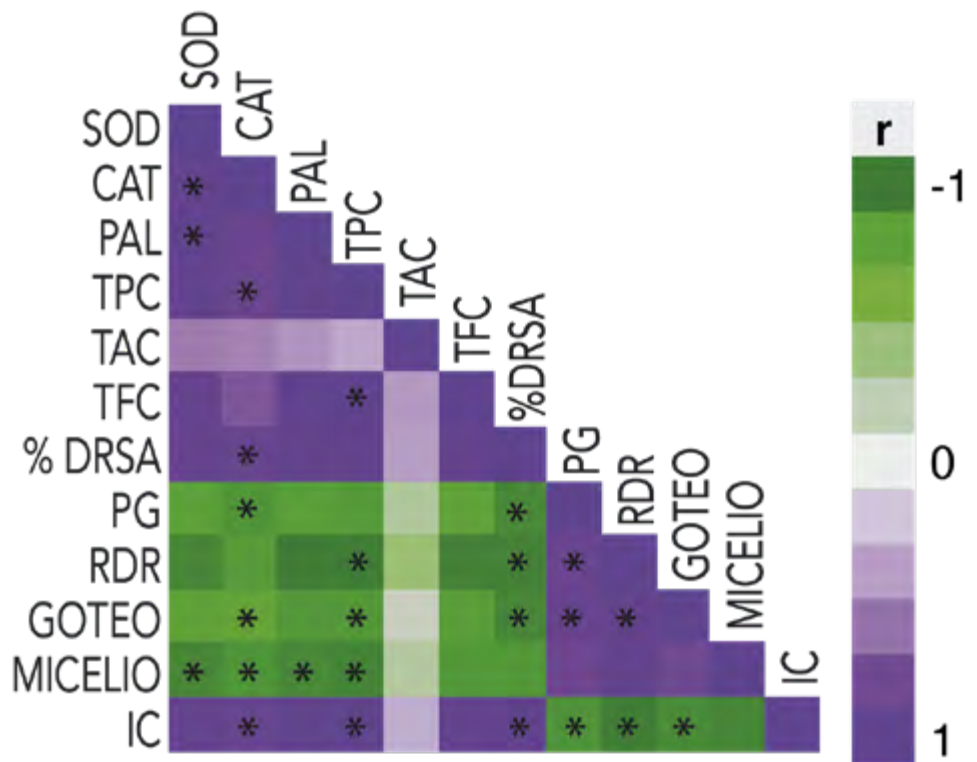
El objetivo de la presente investigación consiste en exponer un mecanismo de acción del ácido salicílico sobre la reversión en los frutos de zarzamora. A partir de reportes previos en tal fruto y otros similares, así como datos obtenidos en este trabajo, se realizó un análisis de correlación entre las variables estudiadas.

Correlación entre variables

La presencia de RDR en frutas tratadas con AS 3 mM mostró estar negativamente relacionada con TPC, DRSA y de manera positiva con la actividad de PG. Respecto a las enzimas antioxidantes, SOD mostró una correlación positiva con CAT y PAL. Por otra parte, se observaron correlaciones positivas entre la enzima CAT y la capacidad antioxidante del fruto de zarzamora. Adicionalmente, ambas variables mostraron una correlación negativa con la actividad de PG (Figura 2).

Figura 2. Heatmap para zarzamoras tratadas con AS 3mM en periodos pre cosecha. Abreviaciones: SOD = Superóxido dismutasa, CAT = Catalasa, PAL = Fenilalanina amonio-liasa, TPC = Contenido de fenoles totales, TAC = Contenido de antocianinas totales, TFC= Contenido de flavonoides totales, %DRSA = Capacidad antioxidante por DPPH, PG = Poligalacturonasa, RDR = Reversión, Micelio= Presencia visible de micelio, IC= Índice de comercialización.

* Indica correlación estadística significativa, prueba de Spearman con $\alpha=0.05$, $N=36$.

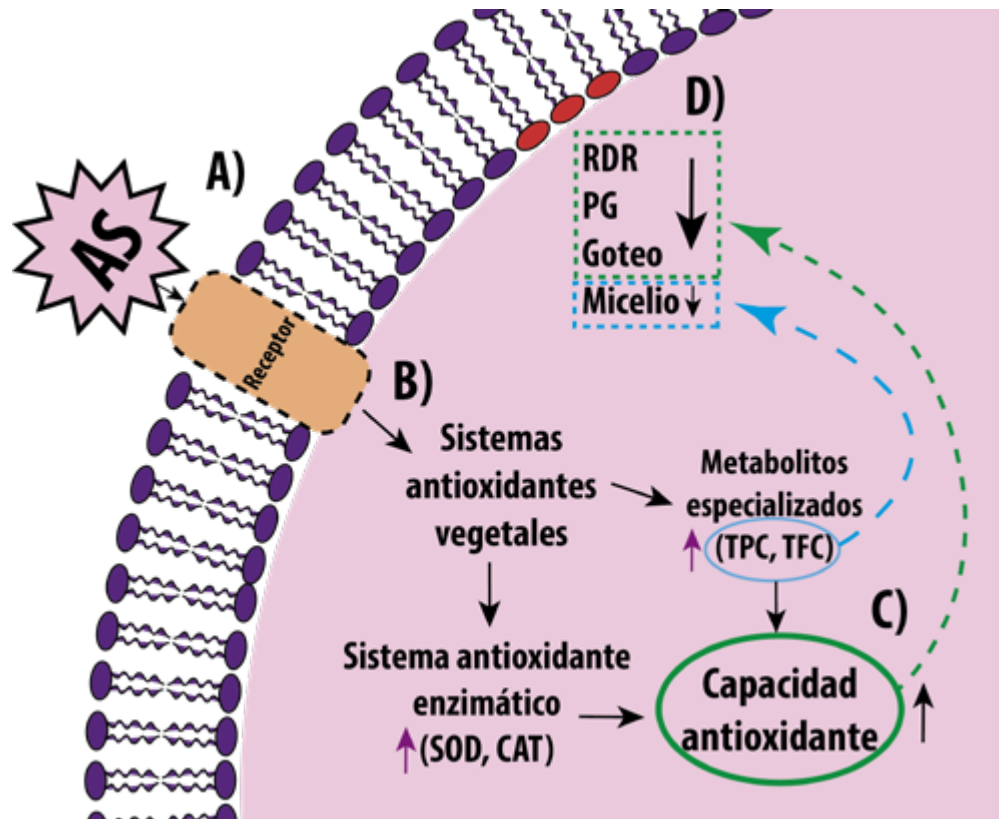


Respecto a los compuestos bioactivos, *TPC* mostró una relación positiva con *CAT* y con *TFC*. Las variables de deterioro, goteo y presencia de micelio mostraron una relación negativa con *CAT* y *TPC*. De manera individual, la presencia de micelio evidenció relacionarse negativamente con la actividad de *SOD* y *PAL*.

Finalmente, el índice de comercialización en los frutos entabló una relación positiva con *CAT*, *TPC* y *DRSA*. Por otra parte, la actividad de *PG*, presencia de goteo y ocurrencia de *RDR* con el índice de comercialización fueron negativas.

El análisis de correlación sugiere que la presencia reducida de *RDR* podría estar ligada a la activación de los sistemas antioxidantes enzimáticos y no enzimáticos por acción del ácido salicílico; otro efecto aparente del tratamiento es la disminución en la actividad de la enzima poligalacturonasa (Figura 3).

Figura 3. Representación gráfica del mecanismo de acción del ácido salicílico sobre frutos de zarzamora. A) Aplicación precosecha de ácido salicílico exógeno, B) Activación de sistemas antioxidantes enzimáticos y no enzimáticos, C) Aumento de capacidad antioxidante, D) Disminución de *RDR*, goteo, presencia de microorganismos y actividad de la poligalacturonasa.



El aumento en la capacidad antioxidante de los frutos se relaciona con la conservación de su calidad, debido a la mitigación de los efectos adversos causados por las especies reactivas de oxígeno y al fortalecimiento de la pared celular [27]; tal incremento también podría estar relacionado con la reducción en el goteo y de *RDR*.

Respecto a los bioactivos *TFC* y *TPC*, se ha reportado que la abundancia de compuestos fenólicos en frutos promueve la protección contra procesos



oxidativos [24]; además, dichos compuestos poseen propiedades antimicrobianas [25]; el conjunto de estas capacidades contribuye a reducir la presencia de organismos de degradación, reforzar la pared celular y disminuir la actividad de PG en los frutos [26].

El índice de comercialización se ve perjudicado por la actividad de PG, que a su vez está relacionada con la presencia de goteo y RDR. Tal interacción sugiere que el debilitamiento o degradación de la pared celular hace más propensa a la zarzamora a presentar dichas afectaciones. Por el contrario, el aumento en el contenido de compuestos fenólicos y la capacidad antioxidante estaría relacionado con la generación de resistencia contra factores de deterioro y, en todo caso, la conservación de calidad de la zarzamora en poscosecha, incluyendo la reducción de la presencia de RDR.

Conclusiones

La información disponible y el resultado del análisis de correlación sugiere que el tratamiento precosecha con ácido salicílico presenta efectos positivos para evitar el fenómeno de reversión y promover la conservación de la zarzamora. Por añadidura, el mecanismo de acción podría estar relacionado con el aumento de la actividad de los sistemas antioxidantes enzimáticos y no enzimáticos, así como la reducción de la actividad de enzimas de degradación como la poligalacturonasa.

Referencias

- [1] M. Edgley, D. Close, and P. Measham, "Red drupelet reversion in blackberries: A complex of genetic and environmental factors," *Scientia Horticulturae*, vol. 272, p. 109555, 2020.
- [2] T. M. Chizk, J. R. Clark, C. Johns, L. Nelson, H. Ashrafi, R. Aryal, and M. L. Worthington, "Genome-wide association identifies key loci controlling blackberry postharvest quality," *Frontiers in Plant Science*, vol. 14, p. 1182790, 2023.
- [3] M. Edgley, D. Close, P. Measham, and D. Nichols, "Physiochemistry of blackberries (*Rubus* l. subgenus *Rubus watson*) affected by red drupelet reversion," *Postharvest Biology and Technology*, vol. 153, pp. 183–190, 2019.
- [4] R. Threlfall, A. Dunteman, J. Clark, and M. Worthington, "Using an online survey to determine consumer perceptions of fresh-market blackberries," in *XII International Rubus and Ribes Symposium*:



Innovative Rubus and Ribes Production for High Quality Berries in Changing 1277, 2019, pp. 469–476.

- [5] A. R. Flores-Sosa, D. Soto-Magaña, L. E. Gonzalez-de la Vara, L. Sanchez-Segura, M. Bah, D. M. Rivera-Pastrana, G. M. Nava, and E. M. Mercado-Silva, "Red drupelet reversion in blackberries caused by mechanical damage is not linked to a reduction in anthocyanin content," *Postharvest Biology and Technology*, vol. 180, p. 111618, 2021.
- [6] G. Pérez-Pérez, M. Fabella-Gallegos, M. Vázquez-Barríos, D. Rivera-Pastrana, L. Palma-Tirado, E. Mercado-Silva, and V. Escalona, "Effect of the transport vibration on the generation of the color reversion in blackberry fruit," in *viii International Postharvest Symposium: Enhancing Supply Chain and Consumer Benefits-Ethical and Technological Issues* 1194, 2016, pp. 1329–1336.
- [7] A. R. Flores-Sosa, M. J. Fabella-Gallegos, M. E. Cruz-Acevedo, D. M. Rivera-Pastrana, G. M. Nava, and E. M. Mercado-Silva, "A portable vibration system to induce and evaluate susceptibility to red drupelet reversion in blackberry cultivars," *Horticulturae*, vol. 8, no. 7, p. 631, 2022.
- [8] M. Edgley, D. C. Close, and P. F. Measham, "Effects of climatic conditions during harvest and handling on the postharvest expression of red drupelet reversion in blackberries," *Scientia Horticulturae*, vol. 253, pp. 399–404, 2019.
- [9] M. Edgley, D. Close, and P. Measham, "Nitrogen application rate and harvest date affect red drupelet reversion and postharvest quality in 'ouachita' blackberries," *Scientia Horticulturae*, vol. 256, p. 108543, 2019.
- [10] B. Lawrence and J. C. Melgar, "Harvest, handling, and storage recommendations for improving postharvest quality of blackberry cultivars," *HortTechnology*, vol. 28, no. 5, pp. 578–583, 2018.
- [11] J. E. McCoy, J. R. Clarke, A. A. Salgado, and A. Jecmen, "Evaluation of harvest time/temperature and storage temperature on postharvest incidence of red drupelet reversion development and firmness of blackberry (*rubus* l. subgenus *rubus* watson)," *Discovery, The Student Journal of Dale Bumpers College of Agricultural, Food and Life Sciences*, vol. 17, no. 1, pp. 59–65, 2016.
- [12] M. E. Armour, M. Worthington, J. R. Clark, R. T. Threlfall, and L. Howard, "Effect of harvest time and fruit firmness





- on red drupelet reversion in blackberry," *HortScience*, vol. 56, no. 8, pp. 889–896, 2021.
- [13] M. J. Kim, M. Y. Lee, J. C. Shon, Y. S. Kwon, K.-H. Liu, C. H. Lee, and K.-M. Ku, "Untargeted and targeted metabolomics analyses of blackberries—understanding postharvest red drupelet disorder," *Food chemistry*, vol. 300, p. 125169, 2019.
- [14] R. T. Threlfall, J. R. Clark, A. N. Dunteman, and M. L. Worthington, "Identifying marketable attributes of fresh-market blackberries through consumer sensory evaluations," *HortScience*, vol. 56, no. 1, pp. 30–35, 2021.
- [15] A. A. Salgado and J. R. Clark, ""crispy" blackberry genotypes: A breeding innovation of the university of arkansas blackberry breeding program," *HortScience*, vol. 51, no. 5, pp. 468–471, 2016.
- [16] A. L. Myers, R. T. Threlfall, L. R. Howard, C. R. Brownmiller, J. R. Clark, M. L. Worthington, and S. Lafontaine, "Identifying unique quality attributes of arkansas-grown fresh-market blackberries," *ACS Food Science & Technology*, vol. 3, no. 5, pp. 816–830, 2023.
- [17] C. Chen, C. Sun, Y. Wang, H. Gong, A. Zhang, Y. Yang, F. Guo, K. Cui, X. Fan, and X. Li, "The preharvest and postharvest application of salicylic acid and its derivatives on storage of fruit and vegetables: A review," *Scientia Horticulturae*, vol. 312, p. 111858, 2023.
- [18] E. Baninaiem and A. M. Dastjerdi, "Enhancement of storage life and maintenance of quality in tomato fruits by preharvest salicylic acid treatment," *Frontiers in Sustainable Food Systems*, vol. 7, p. 1180243, 2023.
- [19] Z. Han, B. Li, D. Gong, P. Xie, L. Yu, Y. Wang, Y. Han, Y. Li, D. Prusky, G. Romanazzi et al., "Preharvest chitooligosaccharide spray alleviates chilling injury in harvested muskmelon fruit by regulating membrane lipid metabolism and activating antioxidant enzyme activity," *Postharvest Biology and Technology*, vol. 204, p. 112452, 2023.
- [20] Z. Li, X. Xu, S. Xue, D. Gong, B. Wang, X. Zheng, P. Xie, Y. Bi, and D. Prusky, "Preharvest multiple sprays with chitosan promotes the synthesis and deposition of lignin at wounds of harvested muskmelons," *International Journal of Biological Macromolecules*, vol. 206, pp. 167–174, 2022.
- [21] J. E. Martínez-Camacho, R. G. Guevara-González, E. Rico-García, E. G. Tovar-Pérez, and I. Torres-Pacheco, "Delayed senescence and marketability index preservation of blackberry fruit by



- preharvest application of chitosan and salicylic acid," *Frontiers in plant science*, vol. 13, p. 796393, 2022.
- [22] J. M. Camacho, D. M. Sabogal, I. C. Valenzuela, and I. T. Pacheco, "Efecto de tratamientos precosecha en la reversión y contenido de antocianinas del fruto de zarzamora (*rubus* sp.)," *Perspectivas de la Ciencia y la Tecnología*, vol. 5, no. 9, pp. 11–18, 2022.
- [23] Y. Niu, L. Ye, Y. Wang, Y. Shi, Y. Liu, and A. Luo, "Improvement of storage quality of 'hayward' kiwifruit by meja combined with sa treatment through activation of phenylpropane metabolism," *Scientia Horticulturae*, vol. 321, p. 112354, 2023.
- [24] K. A. Marak, H. Mir, P. Singh, M. W. Siddiqui, T. Ranjan, D. R. Singh, M. H. Siddiqui, and M. Irfan, "Exogenous melatonin delays oxidative browning and improves postharvest quality of litchi fruits," *Scientia Horticulturae*, vol. 322, p. 112408, 2023.
- [25] Y. Song, Y. Ren, Y. Xue, D. Lu, T. Yan, and J. He, "Putrescine (1, 4-diaminobutane) enhances antifungal activity in postharvest mango fruit against *colletotrichum gloeosporioides* through direct fungicidal and induced resistance mechanisms," *Pesticide Biochemistry and Physiology*, p. 105581, 2023.
- [26] M. A. Khan, M. Azam, S. Ahmad, and M. Atiq, "Improvement of physicochemicals, antioxidant system and softening enzymes by postharvest l-arginine application leads to maintain persimmon fruit quality under low temperature storage," *Journal of Food Measurement and Characterization*, pp. 1–14, 2023.
- [27] A. Njie, X. Dong, Q. Liu, C. Lu, X. Pan et al., "Melatonin treatment inhibits mango fruit (cv. 'guiqi') softening by maintaining cell wall and reactive oxygen metabolisms during cold storage," *Postharvest Biology and Technology*, vol. 205, p. 112500, 2023.



LA BASE DE LA AUTONOMÍA VEHICULAR: LOS ADAS

THE BASIS OF VEHICLE AUTONOMY: ADAS



Jose Eduardo Barnica Muñoz¹
José Antonio Álvarez Castillo¹
Abraham Gastélum Barrios^{1,2*}

¹Universidad Anáhuac Querétaro,
Santiago de Querétaro, México.

²Universidad Abierta y a Distancia de México,
Ciudad de México, México

*abraham.gastelum@anahuac.mx



Abstract

Advanced driver assistance systems (ADAS) comprise a branch of innovation and development within the automotive industry that has enabled vehicle evolution in technological aspects. The need to ensure the integrity of people during transportation has oriented automotive modernization towards autonomous vehicles. The generation of intelligent systems based on sensors, cameras and radars allows for real time information processing in decision making. ADAS help the driver of a car to have a better and safer driving experience, and have become mandatory for the manufacture of new vehicles in some parts of the world. The future points to a massive revolution; large investments are expected to the industry that will result in major advances in the technology implemented in new models of major commercial brands. the present article focuses on highlighting the regulatory, instrumentation and opportunity trends for the development of automotive ADAS systems.

Keywords: ADAS, vehicle autonomy, artificial intelligence, mechatronics, sensors, trends.

Resumen

Los sistemas avanzados de asistencia al conductor (ADAS, por sus siglas en inglés) comprenden una rama de innovación y desarrollo dentro de la industria automotriz que ha permitido la evolución vehicular en aspectos tecnológicos. La necesidad de asegurar la integridad de las personas a la hora de transportarse ha orientado la modernización automotriz hacia los vehículos autónomos. Generar sistemas inteligentes basados en sensores, cámaras y radares permite el procesamiento de información en tiempo real para la toma de decisiones. Los ADAS ayudan al conductor de un automóvil a tener una experiencia de manejo más eficiente y segura, y han comenzado a ser obligatorios para la manufactura de nuevos vehículos en algunas partes del mundo. El futuro apunta a una revolución masiva; se esperan grandes inversiones a la industria que resultarán en avances importantes en la tecnología implementada en los nuevos modelos de las principales marcas comerciales. Este artículo se enfoca en remarcar las tendencias regulatorias, de instrumentación y de oportunidad para el desarrollo de sistemas automotrices ADAS.

Palabras clave: ADAS, autonomía vehicular, inteligencia artificial, mecatrónica, sensores, tendencias.





Introducción

El futuro a nivel mundial de la autonomía vehicular yace en la implementación de tecnología capaz de mejorar la experiencia de manejo. Bajo este fundamento en los últimos diez años han aparecido los sistemas avanzados de asistencia al conductor (ADAS, por sus siglas en inglés), los cuales han incrementado el nivel de inteligencia vehicular mediante el procesamiento computarizado de las principales situaciones de riesgo que una persona enfrenta a la hora de manejar un vehículo [1].

Figura 1.
Representación
con fines visuales
de un vehículo
inteligente [2].



Los ADAS se consideran sistemas capaces de prevenir y reducir la cantidad de impactos vehiculares bajo distintas condiciones de operación. Actualmente se puede atribuir el 94 % de los choques a errores que los humanos cometen de manera indirecta [1]; es decir, el porcentaje que liga el error humano con las fatalidades vehiculares a nivel mundial es casi absoluto. Mediante experimentos realizados en 2005 se averiguó que durante el 78 % de accidentes y el 67 % de casi-accidentes, las personas experimentaron un momento de distracción durante tres segundos que condujeron al impacto vehicular [3]. Estas cifras evidencian la importancia de los ADAS a futuro, ya que ayudarían a reducir las colisiones generadas por el error humano.

Para analizar qué clase de situaciones de riesgo se pueden evitar con el uso de los sistemas ADAS solamente es necesario entender el escenario en que cada uno de los sistemas se activaría: los ADAS son capaces de mitigar colisiones frontales, desvíos involuntarios de carril, choques por punto ciego, impactos con peatones, golpes laterales y de reversa, entre otros percances.

Los orígenes de los sistemas ADAS se pueden establecer en el año 1990, cuando se patentó el primer sistema de evasión de colisiones. El invento



fue presentado por William Kelley, quien propuso un aparato capaz de evitar colisiones mediante un transmisor de pulsos microondas y un receptor que escaneara el haz de pulsos. Asimismo, el sistema contaba con una computadora y un reloj que procesaba la diferencia temporal entre el momento en que se enviaba un pulso y el instante en que se recibía un eco. En la patente se hace mención de que, en ese momento, ya existían vehículos experimentales con radares, e incluso algunos que accionaban los frenos de forma autónoma, sin embargo, dichos sistemas fallaban en trayectorias curvas. Para resolver el problema, el autor diseñó un sistema que calculaba la distancia y la dirección de los obstáculos, y con esos datos estimaba la probabilidad de un choque [4].

El presente artículo expone una perspectiva del avance en los sistemas ADAS, así como la tendencia de desarrollo respaldado por los avances más relevantes que han tenido las principales marcas comerciales.

Desarrollo

Instrumentación en ADAS

Para analizar el entorno y las características del vehículo, los ADAS usan sensores ultrasónicos e infrarrojos, radares, LiDARs y cámaras que muestran una visión perimetral en tiempo real [5] (Figura 2). El procesamiento en tiempo real de cada uno de estos elementos permite la representación inteligente del entorno alrededor del vehículo. La incorporación de los instrumentos de medición conforma la base del sistema, y por ello es fundamental la correcta calibración de cada uno para evitar errores que entorpezcan el funcionamiento del sistema de prevención.



Figura 2. Elementos de un vehículo para los ADAS [6].



La cámara es un sensor pasivo, lo que implica que no emite señales para la medición de parámetros. Sin embargo, es un elemento de visión útil para la detección de colores relacionados con la señalización y la comprensión del entorno. El radar emite ondas de radiofrecuencia que rebotan en los obstáculos que se encuentran en el ambiente para después regresar al sensor. De esta forma se calcula la distancia entre el vehículo y los objetos a su alrededor. Un **LiDAR** se desempeña bajo el mismo fundamento del radar, con la diferencia de que éste emitirá ondas de luz, cuya precisión en el reconocimiento de objetos del ambiente es mayor; también se usa para la reconstrucción del entorno en una representación digital tridimensional en tiempo real.

Estos sensores se suelen combinar mediante técnicas de inteligencia artificial para exhibir un comportamiento más robusto. Entre ellas se encuentra el *Deep Learning*, el cual puede procesar cantidades ingentes de datos estructurados y no estructurados para realizar tareas como el reconocimiento y seguimiento de objetos. Esta metodología cuenta con múltiples capas ocultas que a su vez se componen de pesos y funciones de activación, mediante las cuales se relaciona un conjunto de entradas con la salida deseada. Específicamente para las cámaras, se suelen entamar redes neuronales convolucionales, las cuales realizan operaciones de convolución y reducción de dimensionalidad, como el *pooling*, para efectuar la detección de objetos.

Asimismo, los sensores pueden adoptar el aprendizaje por refuerzo, el cual es una propiedad de la inteligencia artificial que consiste en “aprender” sin datos etiquetados. En este sentido, esta metodología aplica un sistema de recompensas: expone un agente a un ambiente donde existe un conjunto determinado de acciones, y dependiendo de la acción que realice para cada estado, el agente recibirá una recompensa positiva o negativa. De esta forma, los constructos IA son capaces de aprender de forma empírica mientras buscan maximizar las recompensas en el proceso de entrenamiento [7]. Empero, si bien todos estos sensores pertenecen a un específico grupo de componentes capaces de responder ante situaciones de riesgo, es necesario reconocer los factores externos que pueden comprometer su desempeño (Tabla 1).



...los sensores usan aprendizaje por refuerzo para aprender sin datos etiquetados, optimizando recompensas para mejorar su rendimiento.



Tabla 1. Comparativa de elementos de un ADAS [8].

SENSOR	AFECTADO POR ILUMINACIÓN	AFECTADO POR CLIMA	DETECTA COLORES	RANGO DE APLICACIÓN	EXACTITUD BASADA EN DISTANCIA	TAMAÑO	COSTO
Cámara	Sí	Sí	Sí	-	-	Pequeño	Bajo
Radar	No	No	No	Alto	Media	Pequeño	Medio
LiDAR	No	Sí	No	Medio	Alta	Grande	Alto
Ultrasónico	No	No	No	Corto	Baja	Pequeño	Bajo

Como se puede observar, los ADAS no son infalibles; de hecho, sus fallos pueden llegar a causar terribles accidentes, como el ocurrido en Texas en 2021, cuando dos personas perdieron la vida al chocar con un árbol mientras su coche, un Tesla Modelo 2, circulaba en piloto automático. La razón del choque fue que los sensores no pudieron reconocer una curva y el automóvil terminó por salirse de la carretera. Por desgracia, este accidente no es el único que ha ocurrido en vehículos equipados con ADAS [9].

Niveles de manejo autónomo

La finalidad de los ADAS consiste en conseguir una autonomía vehicular que permita el transporte seguro sin las preocupaciones que conlleva sentarse al volante. Así, la SAE (*Society of Automotive Engineers*, por sus siglas en inglés) decidió categorizar los niveles de automatización de un vehículo en función de sus ADAS [8]. Se establecieron las proyecciones a futuro esperadas de los nuevos desarrollos que cada año implementa de manera progresiva la industria (Figura 3).

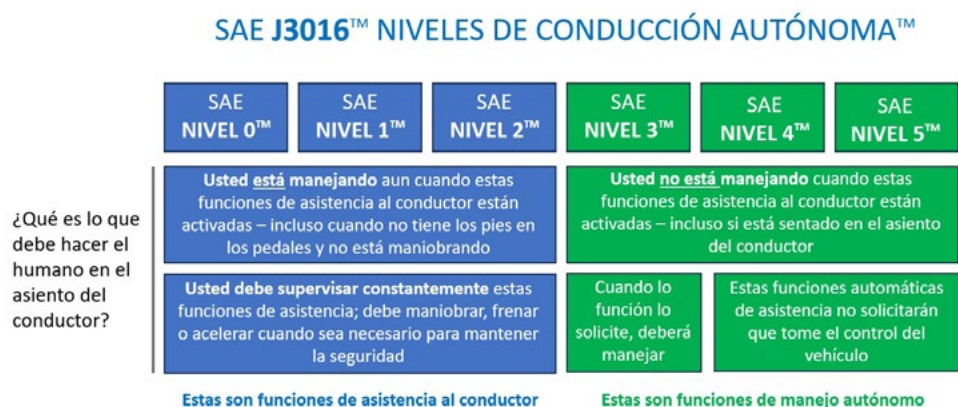


Figura 3. Niveles de autonomía vehicular. Adaptado de [8].



Entre las características más relevantes en cada nivel de autonomía vehicular se destacan:

- Nivel 0. Da soporte al conductor mediante advertencias y asistencia momentánea con el sistema de frenado de emergencia automático y la detección de carril; se refuerza el punto ciego del vehículo.
- Nivel 1. Ofrece retroalimentación al direccionamiento, frenado y aceleración del vehículo mediante el centrado de carril o el control de crucero adaptativo.
- Nivel 2. Brinda retroalimentación al direccionamiento, frenado y aceleración del vehículo mediante el centrado de carril y el control de crucero adaptativo de manera simultánea.
- Nivel 3. El vehículo opera de manera autónoma mientras que las condiciones ideales se cumplan, sin embargo el conductor deberá tomar el mando si se le solicita.
- Nivel 4. El vehículo opera de manera autónoma en caso de que las condiciones ideales se cumplan; la presencia de algunos pedales es opcional y el conductor rara vez será solicitado.
- Nivel 5. Autonomía total del vehículo, podrá operar por sí solo bajo cualquier condición sin la necesidad de alguna intervención humana.

Es notable mencionar que hasta 2023 todavía se desarrollaban vehículos de niveles 2 y 3 de autonomía. En 2017, el Audi A8 fue el primero capaz de alcanzar el nivel 3, promoviendo el enfoque que han tomado las industrias orientadas a la interacción entre la inteligencia artificial y los vehículos autónomos [8].

Tipos de ADAS

Existe una amplia diversidad de tecnologías que permiten el funcionamiento de un asistente autónomo dentro del vehículo. Basados en los componentes explicados anteriormente, se dispone una serie de subsistemas que permiten la modernización vehicular. La Unión Europea impuso, a partir de 2022, la inclusión obligatoria de 8 ADAS para los vehículos de nueva homologación [10]:



- *ISA (Intelligent Speed Assistance)*. El asistente inteligente de velocidad funciona mediante la combinación de un limitador de velocidad y el reconocimiento de señales de tráfico para respetar las regulaciones de velocidad.
- *EDR (Event Data Recorder)*. La grabadora de eventos es similar a una caja negra como las de la industria aeronáutica. Recaba datos específicos de velocidad, posición, aceleración y otros, que permiten determinar las causas de un siniestro.
- *RCTA (Rear Cross Traffic Assist)*. Las cámaras y sensores detectan obstáculos e impiden el avance del vehículo ante el riesgo de colisión.
- *AEB (Automatic Emergency Braking)*. Este sistema de frenado automático evita impactos inminentes y emite una alerta a los usuarios.
- *LDW (Lane Departure Warning)*. Avisa al conductor cuando se aproxima al borde de su carril sin haber activado los indicadores direccionales.
- *Alcolock*. Una medida preventiva para los conductores que se encuentran bajo los efectos del alcohol. Evalúa los niveles de alcohol en el cuerpo del conductor y bloquea el arranque del vehículo si son excesivos.
- Alerta de uso del cinturón en todas las plazas. Anteriormente solo se solicitaba el uso de cinturones de seguridad en los asientos delanteros, pero este sistema exige que todos los pasajeros dentro del vehículo abrochen sus cinturones.
- Detector de fatiga. El automóvil supervisa la atención del conductor mediante cámaras infrarrojas que registran datos como la cadencia de parpadeo y emiten alertas para instarlo a descansar en caso de que presente percances como pérdidas de atención o somnolencia.

La Unión Europea ha promovido estos mecanismos con la intención de migrar a los automóviles inteligentes lo más pronto posible. Dichos subsistemas corresponden a los primeros niveles de la autonomía SAE J3016, pero se espera que la retroalimentación derivada de su implementación acelere el desarrollo de vehículos completamente autónomos en los próximos años.



Tabla 2.
Dispositivos de seguridad obligatorios y complementarios en la NOM-194-SCFI-2021 [11].

Por otra parte, el 22 de septiembre de 2023 fue aprobado en México el estándar NOM-194-SCFI-2021, cuyo propósito es reforzar las regulaciones de seguridad y reducir el número de siniestros viales. La norma es aplicable para modelos 2023 y posteriores, y se basa en el Estándar Oficial Mexicano (EOM), las Normas Mexicanas (NM), los Estándares de Seguridad Federales para Vehículos de Motor (ESFVM) y las pautas de la Organización de las Naciones Unidas (ONU). Cabe recalcar que el sistema de seis bolsas de aire como estándar mínimo todavía no se ha implementado en México, lo cual demuestra que aún existe un largo camino por recorrer en temas de seguridad vial en el país. A continuación, en la Tabla 2 se presentan los dispositivos de seguridad obligatorios y complementarios considerados en la NOM-194-SCFI-2021 [11].

CLASIFICACIÓN	DISPOSITIVO	EOM O NM	SECCIÓN DE ESFVM	REGULACIÓN DE LA ONU
Obligatorio	Monitoreo de Presión de Llantas	-	138	NU R141 o NU R64
	Control Electrónico de Estabilidad	-	126	NU R140 o NU R13H o NU R13
	Anclajes del Sistema de Retención Infantil (Isofix o Latch)	-	225	NU R14 o NU R145
	Prueba de Impacto Lateral de Poste	-	214	NU R135
	Sistema de Dirección en Prueba de Impacto	NMX-D-084-1976	204	NU R12 o NU R94
	Sistema de puertas	-	206	NU R11
	Luz alta de Freno	NMX-D-233-IM-NC-2016	108	NU R48 o NU R07 o NU R148
	Integridad del Sistema de Combustible	-	301	UNECE R34
ADAS Complementarios	Asistencia de Frenado	-	-	NU R139
	Protección de Peatones	-	-	NU R127
	Sistema de Advertencia de Cambio de Carril	-	-	NU R130
	Luces Frontales Adaptativas	-	-	NU R123
	Sistemas de Protección de Impacto a Baja Velocidad	-	49 CFR 581	NU R42
	Caja negra	-	49 CFR 563	-
	Faros de Iluminación en Curva	-	-	NU R119
	Frenado Autónomo de Emergencia	-	-	NU R152

Tabla 3. Dispositivos de seguridad obligatorios y complementarios en la NOM-194-SCFI-2021 [12, 13, 14, 15, 16, 17].

Ahora bien, la infraestructura es un pilar para la adopción de ADAS; en la Tabla 3 se muestran los principales factores en este rubro que influyen en la inserción de los ADAS en México.

CLASIFICACIÓN	FACTOR	VALOR
Caminos	Carreteras pavimentadas	176 984 km
	Extensión total de la Red Nacional de Caminos	788 323 km
	Número de semáforos en la Ciudad de México	3 522
	Semáforos inteligentes en la Ciudad de México	1 440
Vehículos Eléctricos	Vehículos eléctricos e híbridos vendidos en 2022	30 000
	Vehículos híbridos regulares vendidos en 2022	25 150
	Vehículos híbridos <i>plug in</i> vendidos en 2022	2 500
	Vehículos completamente eléctricos vendidos en 2022	5 306
	Producción de vehículos eléctricos en 2022	79 471
Cobertura 5G	Estaciones de carga de velocidad media y rápida en 2022	677
	Número de ciudades con cobertura 5G en 2022	18

Principales exponentes de los ADAS

Dentro de la industria de los vehículos inteligentes existen dos empresas exponentes en avances tecnológicos: Tesla y Google. Ambas han revolucionado el ámbito con desarrollos vanguardistas, generando estudios y pruebas de campo desde hace muchos años para procurar el correcto funcionamiento de sus vehículos. La gigante automotriz de Elon Musk, Tesla Motors, se ha caracterizado por la cantidad de sistemas embebidos de sus vehículos [18], destacando la capacidad de reconocer el entorno en el cual se encuentran mediante sensores ultrasónicos y radares para la detección en tiempo real (Figura 4).



Figura 4. Reconocimiento en tiempo real de Tesla Model 3 [18].



Aun así, Tesla recurre a medidas distintas a la industria automotriz; desde 2023, todos sus modelos se desarrollan sin sensores ultrasónicos ni radares [18]. El procesamiento completo se lleva a cabo en el denominado "Tesla Vision", un sistema basado solamente en cámaras de visión artificial que facultan al vehículo para tomar decisiones autónomas. La intención es replicar el análisis que realizan los seres humanos basado puramente en la visión de su entorno como criterio de decisiones. De tal modo, el sistema queda libre de la interferencia (o "contaminación" como la firma lo define) de los radares externos, y se aseguran las funciones existentes de una manera novedosa a nivel procesamiento.

Google, en cambio, ha incurrido en el mundo de los vehículos autónomos con el uso de los componentes característicos de los ADAS. A base de 4 radares, cámaras, GPS y LiDARs, ha diseñado el procesamiento vehicular de manera eficiente (Figura 5). Mediante técnicas solamente de GPS, ha logrado orientar y dirigir el vehículo durante ciertos trayectos conocidos por el sistema [19].

Hardware The Waymo Driver

- Lidar system
- Vision system
- Radar system

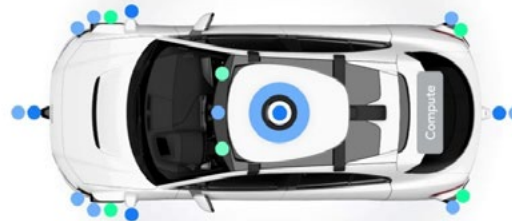


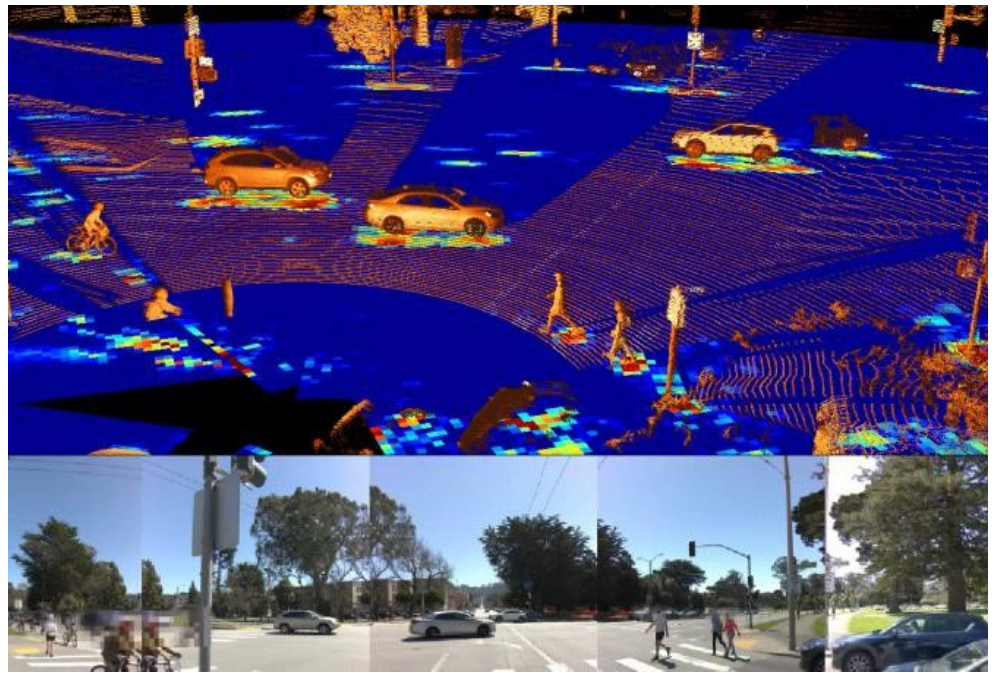
Figura 5. Sistema de Google "Waymo" [20].

La incorporación del LiDAR al vehículo permite reconstruir el entorno en tiempo real; al instalar uno en la parte superior del auto es posible detectar los 360 grados que rodean al sistema (Figura 6). Sin embargo, el costo puede llegar hasta los 80 000 USD por un solo sensor avanzado [19]. Google se ha encargado de entrenar sus sistemas mediante los datos obtenidos en la conducción acumulada durante los últimos años. Se espera que a mediano plazo logre optimizar el LiDAR para evitar pérdidas de información que son frecuentes en el sistema.



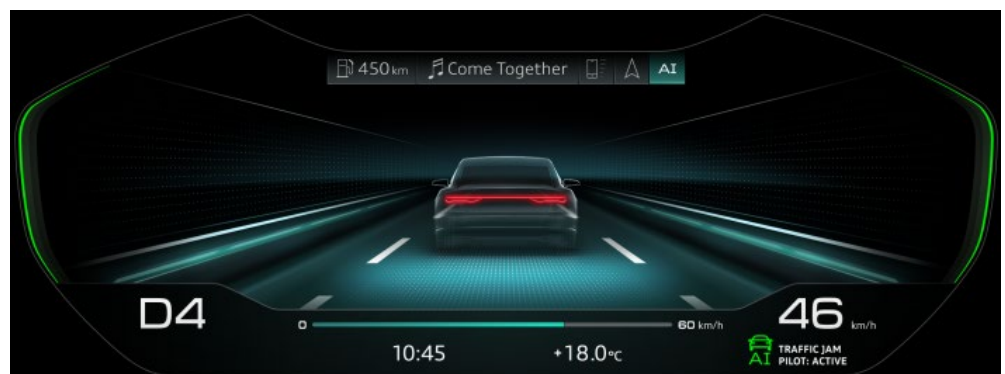


Figura 6. Reconstrucción digital del entorno sistema "Waymo" [20].



Otro exponente de los ADAS es la destacada marca de automóviles Audi, la cual lanzó en 2017 su revolucionario modelo A8, el cual implementaba un sistema *Traffic Jam Pilot*. Con este programa el vehículo se convirtió en el primero en permitir una conducción automatizada condicionada de nivel SAE 3. Específicamente, el coche era capaz de conducir autónomamente en circunstancias de tráfico denso a velocidades no superiores a 60 km/h. Al activarse, el conductor podía soltar los pedales y el volante; simplemente se requería que estuviera alerta en caso de que fuese necesario que retomara el control. Para lograr esta hazaña, Audi aplicó un controlador central para los sistemas de asistencia y datos obtenidos por la unidad de control del radar. Mediante estos dispositivos, el vehículo era capaz de arrancar desde el reposo, acelerar, frenar y respetar su carril [21]. En la Figura 7 se muestra una vista de la interfaz del sistema *Traffic Jam Pilot* en operación.

Figura 7. *Traffic Jam Pilot* en operación [21].





Proyección a futuro

Los avances tecnológicos en los ADAS, aunados a las regulaciones europeas impuestas en 2022, marcan una clara tendencia a la mejora continua y el desarrollo de patentes para los próximos años [10]. Si bien sus estudios se encuentran en etapas tempranas comparados con otros componentes automotrices, se espera que para 2030 se inviertan hasta 83 mil millones de dólares en investigaciones y pruebas físicas [22]. La creciente inversión permite destinar recursos humanos y financieros al desarrollo de variantes con una mejor relación calidad-precio, estableciéndose así una oportunidad valiosa para los gigantes de la industria automotriz.

Por su parte, en Estados Unidos, la organización encargada de regular la seguridad de los vehículos de motor es la Administración Nacional de Seguridad del Tráfico en Carreteras. Este organismo discrepa de los reguladores europeos en que, en Estados Unidos, las regulaciones para vehículos se basan en autocertificaciones obligatorias, mientras que en Europa se necesita de una aprobación previa a la comercialización de cada vehículo. En este sentido, los ESFVM en Estados Unidos todavía no exigen ninguna tecnología ADAS, pero tal situación no ha frenado la inserción de estos dispositivos en el mercado, pues solamente en 2018 el 92 % de los vehículos nuevos tenían integrado al menos un ADAS [23].

Por otra parte, si bien México no es un protagonista en el desarrollo de ADAS en la actualidad, el país cuenta con el potencial para convertirse en uno en los próximos años. México ya posee una robusta cadena de manufactura en la industria automotriz, un generoso nivel de inversión extranjera y la oportunidad de aprovechar el *nearshoring*, la práctica de las empresas que localizan sus fábricas y cadenas de suministro en países cercanos a su mercado objetivo. En este rubro, el director general de Economía, Negocios e Indicadores, John Soldevilla, ha afirmado que México es el país con la mayor oportunidad para aprovechar el fenómeno.

Se espera del *nearshoring* un crecimiento anual del 3.7 %, un porcentaje considerable en comparación con el 2.6 % de la última década [24]. De igual manera, en 2021, México reportó una inversión extranjera directa (IED) de 31 600 millones de dólares, y se espera que la cifra aumente en los siguientes años [25].





En el panorama mundial, durante los próximos siete años habrá un alza en el desarrollo de componentes físicos derivada de la inminente necesidad de abastecer a la industria automotriz (Figura 8). El mercado estima de 30 a 40 mil millones de dólares solamente para la manufactura de estos elementos [26]. De la misma forma se presentarán áreas de oportunidad y mejora en el software para la toma de decisiones. Los algoritmos de inteligencia artificial, predicción y mapeo para la ejecución de comandos se verán inyectados monetariamente hasta en 20 mil millones de dólares en el año 2030.

Figura 8. Ganancias proyectadas en el mercado de los componentes usados en ADAS [23].

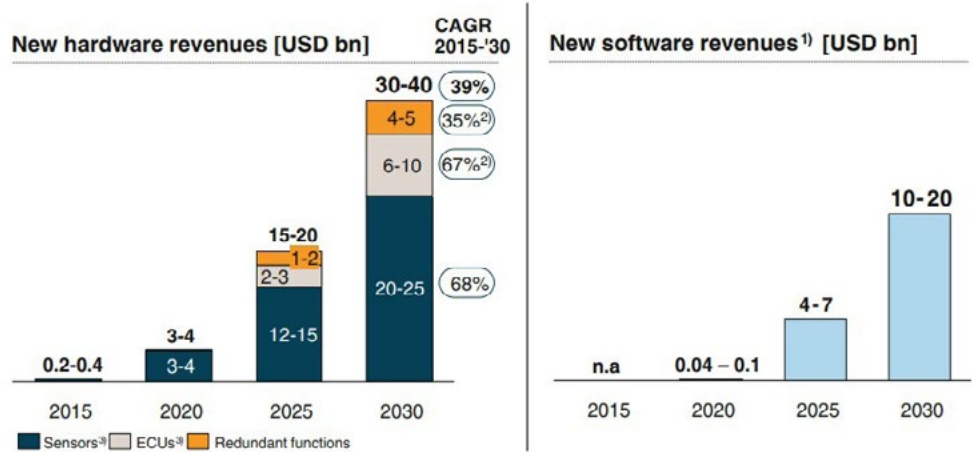


Tabla 4. Fases de desarrollo de los ADAS con base a la Fundación MAPFRE [27].

En 2022 se estableció la primera fase por parte de la Unión Europea y se plantearon nuevas mejoras esperadas para los próximos años. Progresivamente se incorporarán ADAS cada vez más avanzados que permitirán la autonomía vehicular en un mediano plazo (Tabla 4).

FASE	NUEVOS VEHÍCULOS APROBADOS	NUEVAS PARTES/VEHÍCULOS	ADAS INCLUIDOS
Fase 1	Obligatorio a partir de julio de 2022	Obligatorio a partir de julio de 2026	<ul style="list-style-type: none"> Asistencia Inteligente de Velocidad (ISA) Sistema de mantenimiento dentro del carril (coches y camionetas) Frenado automático con vehículo en movimiento y detección de objetos (coches y camionetas) Grabadora de eventos (coches y camionetas) Control de somnolencia y sistemas de advertencia sobre distractores Interfaz para instalación de Alcolock Señal de frenado de emergencia Detección de obstáculos en maniobras de marcha atrás Sistema de información sobre punto ciego (camiones y autobuses) Advertencia de colisión con peatones y ciclistas (camiones y autobuses) Sistema de monitoreo de presión en las llantas (camionetas, camiones y autobuses)



FASE	NUEVOS VEHÍCULOS APROBADOS	NUEVAS PARTES/VEHÍCULOS	ADAS INCLUIDOS
Fase 2	Obligatorio a partir de julio de 2024	Obligatorio a partir de julio de 2026	<ul style="list-style-type: none">• Frenado autónomo con detección de peatones y ciclistas (coches y camionetas)• Advertencia avanzada de distracción del conductor• Zona de impacto frontal extendida para prevenir lesiones de peatones (coches y camionetas)• Sistema de advertencia sobre desgaste de llantas• Grabadora de eventos (vehículos autónomos)• Monitoreo de disponibilidad del conductor (vehículos autónomos)• Pelotón (camiones autónomos)• Actualización de ciberseguridad y software
Fase 3	Obligatorio a partir de enero de 2026	Obligatorio a partir de enero de 2029	<ul style="list-style-type: none">• Requerimientos de visión directa (camiones y autobuses)• Grabadora de eventos (camiones y autobuses)• Protección de peatones para series pequeñas: mediados de 2028 (nuevas aprobaciones), mediados de 2034 (nuevos vehículos)

Conclusiones

La implementación de los ADAS surge de la modernización y globalización actual con el objetivo de asegurar la salud y bienestar de las personas que se movilizan en vehículos, y ha llegado a convertirse en una necesidad regulatoria que la industria automotriz debe acatar durante los próximos años. Se han comenzado a dar los primeros pasos de esta revolución masiva, sin embargo, el horizonte de la autonomía vehicular parece un todavía lejano. México es uno de los promotores de esta revolución al proveer la mano de obra ligada a los desarrollos necesarios para la implementación de dichos sistemas. Las inversiones e inyecciones monetarias que la industria tendrá en los próximos años revelan una gran área de oportunidad para los ingenieros y entusiastas de la tecnología. Finalmente, todos estos sistemas comparte la misma meta: procurar la integridad del ser humano. La tecnología orientada a mejorar la calidad de vida ha llegado a la industria automotriz con planes de quedarse hasta obtener niveles de seguridad confiables.

Dentro de las tendencias al desarrollo e investigación de sistemas, algoritmos y políticas públicas, México se encuentra en un área de oportunidad, ya que cuenta con los recursos, infraestructura para el desarrollo de tecnología, aliados estratégicos y, sobre todo, el talento en las instituciones de educación superior para incentivar y emprender proyectos de I+D enfocados en esta área. Al ser un país fabricante de vehículos de distintas marcas y estilos, México se posiciona como una fuente de creación, validación e inserción en el mercado de productos con alto grado de innovación.



Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad Anáhuac de Querétaro por las facilidades brindadas para el desarrollo del proyecto de investigación de donde se desprende este artículo.

Referencias

- [1] S. Peiris, S. Newstead, J. Berecki-Gisolf, B. Chen, y B. Fildes, "Quantifying the Lost Safety Benefits of ADAS Technologies Due to Inadequate Supporting Road Infrastructure", *Sustainability (Switzerland)*, vol. 14, no. 4, 2022, DOI: 10.3390/su14042234
- [2] Den. "Sistemas ADAS: qué son y cuáles tenemos en nuestros coches". Autodoc Club. <https://club.autodoc.es/magazin/sistemas-adas-que-son>
- [3] K. Hojjati-Emami, B. S. Dhillon, y K. Jenab, "Reliability prediction for the vehicles equipped with advanced driver assistance systems (ADAS) and passive safety systems (PSS)", *International Journal of Industrial Engineering Computations*, vol. 3, no. 5, pp. 731-742, 2012, DOI: 10.5267/j.ijiec.2012.08.004
- [4] W. Kelley, "Collision predicting and avoidance device for moving vehicles", patente US4926171A, 15 de mayo de 1990. <https://worldwide.espacenet.com/patent/search/family/023045982/publication/US4926171A?q=pn%-3DUS4926171>
- [5] A. Ziebinski, R. Cupek, D. Grzechca, y L. Chruszczyk, "Review of advanced driver assistance systems (ADAS)", en *AIP Conference Proceedings*, American Institute of Physics Inc., 2017, DOI: 10.1063/1.5012394.
- [6] Fundación MAPFRE Canarias, "¿Qué son los Sistemas ADAS?". Fundación Mapfre. <https://www.fundacion-mapfre.org/educacion-divulgacion/seguridad-vial/sistemas-adas/que-son-los-sistemas-adas/>
- [7] B. Ben Elallid, N. Benamar, A. Hafid, T. Rachidi, y N. Mrani, "A Comprehensive Survey on the Application of Deep and Reinforcement Learning Approaches in Autonomous Driving", *Journal of King Saud University - Computer and Information Sciences*,



- vol. 34, no. 9, 2022, DOI: 10.1016/j.jksuci.2022.03.013.
- [8] P. Torino y S. Ballesio, "Artificial Intelligence Controls for Vehicle Emergency Maneuvering", *Engineering, Computer Science*, 2020. [En línea]. Disponible: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:236911951>
- [9] Expansión. "Un choque de un Tesla, aparentemente sin conductor deja dos personas fallecidas". Expansion.mx. <https://expansion.mx/tecnologia/2021/04/18/choque-tesla-dos-personas-fallecidas>
- [10] R. Fidalgo. "8 ADAS obligatorias en los coches desde julio de 2022". Autocasion.com. <https://www.autocasion.com/actualidad/reportajes/8-adas-obligatorias-en-los-coches-a-partir-de-julio-de-2022>
- [11] *Dispositivos de seguridad para vehículos ligeros nuevos-Requisitos y especificaciones, NOM-194-SE-2021*, Gobierno de México, 3 de octubre de 2022. https://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5666804&fecha=03/10/2022#gsc.tab=0
- [12] I. Zamarrón. "Así operan los semáforos inteligentes en la capital". El Sol de México. <https://www.elsoldemexico.com.mx/metropoli/cdmx/asi-operan-los-semaforos-inteligentes-en-la-capital-3287849.html>
- [13] S. Cantera. "¿Buscas estaciones de recarga para autos eléctricos?". El Universal. <https://www.eluniversal.com.mx/cartera/buscas-estaciones-de-recarga-para-autos-electricos-google-maps-te-dice-donde/>
- [14] D. Luna. "Estas son las ciudades con cobertura Telcel 5G". Expansión. <https://expansion.mx/tecnologia/2022/02/22/cobertura-telcel-5g-mexico>
- [15] Instituto Mexicano del Transporte. "Representación cartográfica en formato digital y georreferenciada de la red nacional de caminos". Gobierno de México. <https://www.gob.mx/imt/acciones-y-programas/red-nacional-de-caminos>
- [16] M. García, "México produciría 193 mil vehículos eléctricos al cierre de 2023: Directorio Automotriz". Cluster industrial. <https://www.clusterindustrial.com.mx/noticia/6697/mexico-produciria-193-mil-vehiculos-electricos-al-cierre-de-2023-directorio-automotriz>



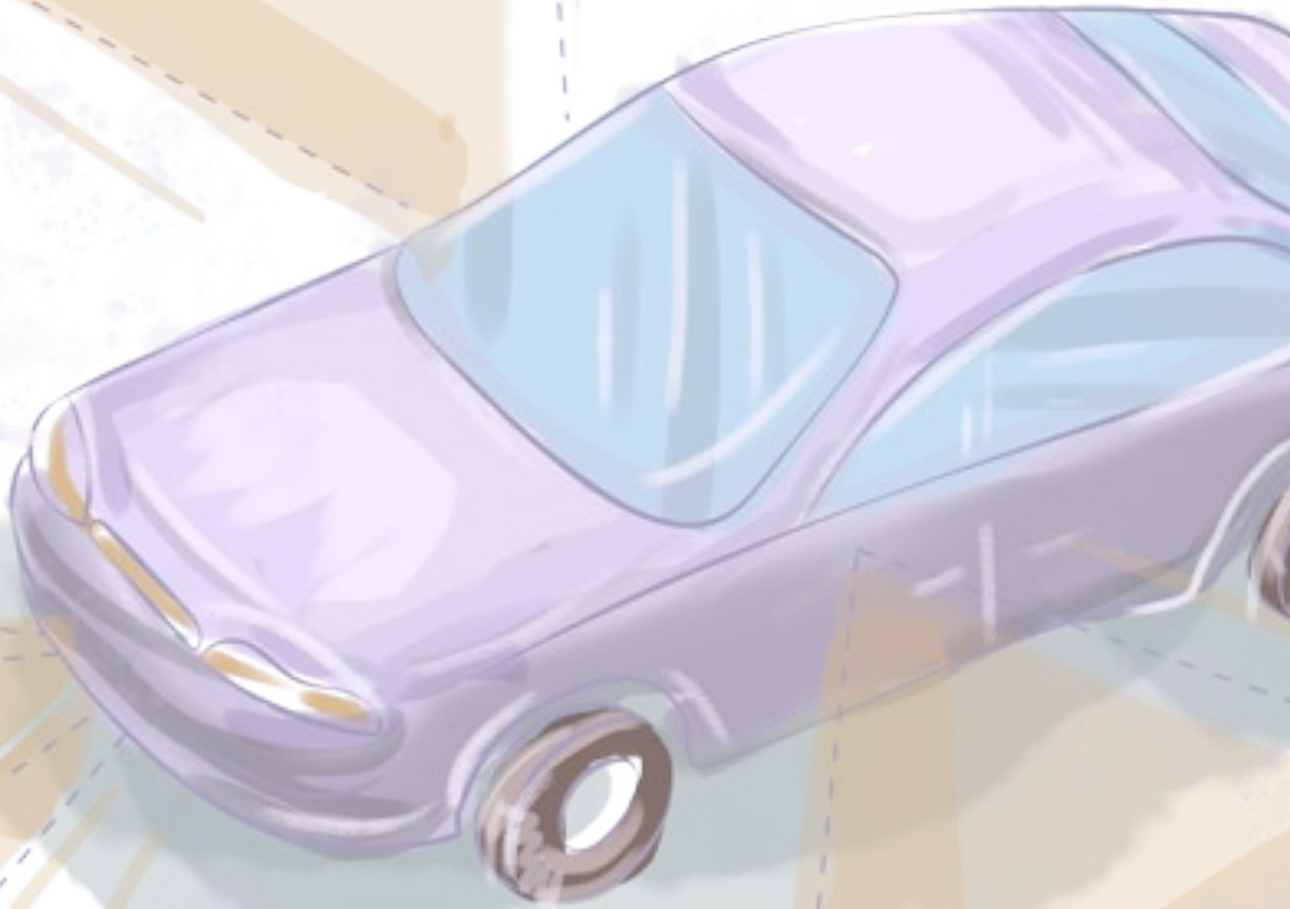
- [17] Statista Research Department. "Número de vehículos eléctricos e híbridos vendidos en México desde 2016 a 2022". Statista.com. <https://es.statista.com/estadisticas/1114981/volumen-ventas-vehiculos-electricos-hibridos-mexico/#:~:text=El%20n%C3%BAmero%20de%20veh%C3%ADculos%20el%C3%A9ctricos%20e%20h%C3%ADbridos%20vendidos,de%20este%20tipo%20de%20autom%C3%B3viles%20registrado%20en%202021>
- [18] S. Ortiz, "Tesla is changing the sensors in its cars. Here is why you should care," ZDNET. <https://www.zdnet.com/article/tesla-removed-its-ultrasonic-sensors-from-its-cars-what-does-that-mean-for-your-tesla-vehicle-your-safety-and-teslas-future/>
- [19] C. Thompson. "There's one big difference between Google and Tesla's self-driving car technology," Business insider. <https://www.businessinsider.com/difference-between-google-and-tesla-driver-less-cars-2015-12?r=MX&IR=T>
- [20] Waymo, "How our cars drive." Support.google.com <https://support.google.com/waymo/answer/9190838?hl=en>
- [21] Comunicación de prensa Audi, "Jornadas Técnicas conducción pilotada". Prensa Audi. <http://prensa.audi.es/wp-content/uploads/2017/09/Dossier-A8-AI-traffic-jam-pilot.pdf>
- [22] J. L. Omeñaca, "Los ADAS alcanzarán los 83 mil millones de dólares para 2030". Valenciacars. <https://valenciacars.blogspot.com/2024/01/adas-2030-mercado.html>
- [23] I. Scully, S. Scally, y R. Clark. "Safety and Regulatory Considerations of Advanced Driver Assistance Systems (ADAS)". American Bar Association. https://www.americanbar.org/groups/tort_trial_insurance_practice/committees/automobile-litigation/safety_regulatory_considerations/
- [24] I. Zamarrón. "Nearshoring en México: estos son los beneficios que podría obtener el país a 2030". Forbes. <https://www.forbes.com.mx/nearshoring-en-mexico-estos-son-los-beneficios-que-podria-obtener-el-pais-a-2030/>



[25] Gobierno de México. "La Inversión Extranjera Directa en México sumó 31.6 mil millones de dólares en 2021". Gobierno de México. <https://www.gob.mx/shcp/gacetaeconomica/articulos/la-inversion-extranjera-directa-en-mexico-sumo-31-6-mil-mdd-en-2021>

[26] W. Bernhart y M. Winterhoff, "Autonomous Driving: Disruptive Innovation that Promises to Change the Automotive Industry as We Know It", en *Energy Consumption and Autonomous Driving*, 2016, pp. 3-10, DOI: 10.1007/978-3-319-19818-7_1

[27] Fundación Mapfre. "ADAS system regulations". Fundaciónmapfre.org. <https://www.fundacionmapfre.org/en/education-outreach/road-safety/adas-systems/what-are-adas-systems/adas-systems-regulations/>





UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA
DE QUERÉTARO