

DISEÑO DE UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL PARA SIMULAR EL ESFUERZO CORTANTE EN UNA SUSPENSIÓN DE ARCILLAS TOMANDO UN DATO DE VISCOSÍMETRO DE TASA CONSTANTE

Gabriel Aguilera¹; Juan Esteban Calle²; Lúver Echeverri³

Grupo de Investigación Pirometalúrgica y de Materiales, Universidad de Antioquia, Medellín, Antioquia, Colombia. ¹gaguile-
ra@sumicol.com ; ²juancalle@udea.edu.co, ³luvercheverry@udea.edu.co

RESUMEN

En los procesos industriales donde se involucra la reología de suspensiones de minerales cerámicos resulta muy difícil establecer las variables que produce una curva de flujo mediante las mediciones que son más comunes para un control de proceso en línea, y son aquellas tomadas en un viscosímetro a tasa de cizalladura constante. Estas variables son muy importantes pues representan el tipo de comportamiento pseudoplástico y/o dilatante de dichas dispersiones. Debido a que el dispositivo más apropiado para producir los elementos de análisis a partir de una curva de flujo operando bajo tasa/esfuerzo controlado es el reómetro, el cual no es el equipo más apropiado para el control en línea de procesos, se presenta un simulador del esfuerzo cortante a lo largo de una curva de flujo tomando como variable de entrada el dato producido por un viscosímetro de tasa constante, basado en la arquitectura de una Red Neuronal Artificial (RNA), la cual puede implementarse como elemento de control en línea de las plantas de procesamiento cerámico.

Palabras clave: Reología de suspensiones de minerales cerámicos, Redes Neuronales Artificiales, esfuerzo cortante, viscosímetro.

INTRODUCCIÓN

En los procesos industriales de beneficio y procesamiento de minerales arcillosos resulta muy importante determinar el esfuerzo de las suspensiones, incluso más que la misma viscosidad, pues el esfuerzo τ es una variable reológica que es medida directamente por los equipos reológicos, mientras que la viscosidad es una variable que se determina indirectamente por conversión de los valores de esfuerzo (o torque) medidos sobre la muestra, teniendo en cuenta la geometría del dispositivo de medición. Sin embargo, los equipos disponibles para control en línea de procesos como los viscosímetros tradicionales, ofrecen solo datos de viscosidad en intervalos de muy bajas tasas de cizalladura, por lo que no

son representativos de la mayoría de procesos industriales. Si se lograra definir en las suspensiones este parámetro, resultaría muy importante tanto para los sistemas de control de proceso como para el diseño de las mezclas de minerales, pues la variable mecánica más común en los equipos industriales es la fuerza, potencia o presión, los cuales se traducen fácilmente a condiciones de esfuerzo sobre los materiales. Por otro lado, las suspensiones de minerales arcillosos en general no presentan un comportamiento newtoniano como el de su fase continua; ni aún a bajas concentraciones de sólidos (Aguilera, 2005), debido a que la mayoría de las arcillas poseen pequeños tamaños de partícula ($\approx 100 \mu\text{m}$) sumados a una alta actividad química superficial que altera la reología del sistema. Este factor hace que las suspensiones sean pseudoplásticas o dilatantes según la naturaleza de sus componentes y las condiciones mecánico-químicas a las que están sometidas, como se observa en la figura 1.

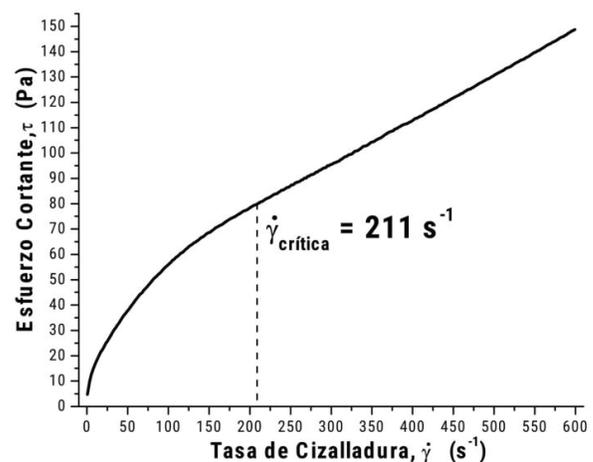


Figura 1. Comportamiento reológico del esfuerzo para una suspensión saturada de minerales arcillosos (%peso = 72.2%).

Particularmente en el caso de suspensiones de arcillas y pastas cerámicas el comportamiento reológico es muy dependiente de la velocidad de deformación, presentando inicialmente un comportamiento pseudoplástico, y luego un comportamiento dilatante a partir de una tasa de cizalladura crítica (Ver figura 1). Hasta el momento no se ha desarrollado un modelo matemático o alguna nueva aproximación que sea capaz de representar dicho comportamiento en su totalidad (Einstein, 1956; Batchelor, 1977; Jinescu, 1974; Tangsathikulchai & Austin, 1988; Barrientos et al., 1994; Bustamante, 2002; Cross, 1965; Ostwald-deWaele, 1925; Hershel-Bulckley, 1926; Bingham, 1916 entre otros). La mayor dificultad en el desarrollo matemático radica en encontrar una ecuación que represente la pseudoplasticidad-dilatancia y que además involucre las principales variables físicas, químicas y mecánicas que definen una suspensión mineral. Esta situación resulta crítica para los procesos donde inevitablemente se alcanzan las velocidades de deformación en las cuales las suspensiones se encuentran en su fase dilatante, tales como la atomización de pastas cerámicas o la dispersión de alta intensidad de arcillas.

En consecuencia, las Redes Neuronales Artificiales (RNA) constituyen una alternativa para la modelación y simulación de procesos, especialmente en aquellos casos donde no se cuenta con un modelo ni matemático ni empírico que permita la simulación de los procesos involucrando todas las variables del sistema.

La estructura de las RNA permite reunir innumerables comportamientos y variables que se van anexando a la información que el modelo de RNA utiliza para su aprendizaje, a la vez que se comprende de mejor manera los fenómenos reológicos y sus causas. Por lo tanto, su importancia radica en el hecho de que como herramienta producida por la Inteligencia Artificial posee un diseño tal que permite seguir adaptando nuevos casos (a manera de aprendizaje, como un sistema biológico real) acerca de las variables y su influencia en los fenómenos, lo que le asigna algunas ventajas sobre otros métodos, pues no se necesita conocer detalladamente el comportamiento de cada variable ni su influencia particular en el desempeño de los materiales.

REOLOGÍA DE SUSPENSIONES DE MINERALES ARCILLOSOS

Una suspensión de minerales arcillosos tiene una característica muy importante y es la de ser base para una pasta cerámica, o bien ser la pasta misma con adiciones de otros minerales como cuarzo y feldespato. Estas suspensiones son procesadas en las fábricas bajo una amplia variedad de características físicas, químicas y mecánicas: desde suspensiones muy diluidas en algunas etapas del beneficio, hasta

dispersiones de máxima concentración de sólidos en una pasta cerámica, por lo cual los escenarios reológicos son también muy diversos. La mayoría de las ocasiones es necesario recurrir a la ayuda de aditivos químicos que favorezcan la dispersión, o bien ayuden a la sedimentación. En consecuencia, una suspensión de este tipo presenta en la mayoría de los casos una primera región pseudoplástica, y a cierta tasa de cizalladura crítica el comportamiento reológico se torna dilatante. Una curva de flujo de estas suspensiones muestra el comportamiento ilustrado en la figura 2. Nótese el cambio en el comportamiento reológico en la curva de esfuerzo.

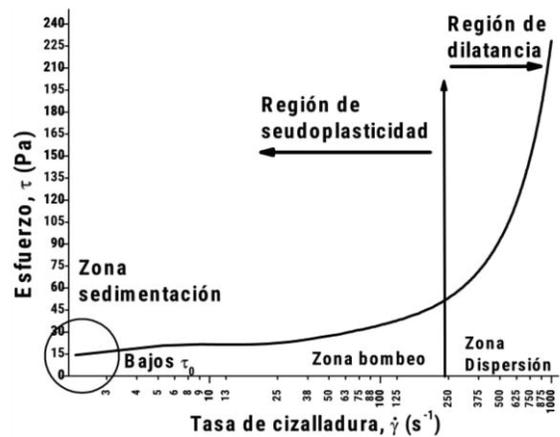


Figura 2. Curva de flujo para una suspensión de caolín en su mínimo de viscosidad y máxima saturación de sólidos.

Por otro lado, cada material tiene una concentración de sólidos de trabajo característica, que se deriva de su naturaleza mineralógica, de física de partículas, y fisicoquímica de interfase, por lo cual es muy importante conocer de antemano los diferentes intervalos donde se presentan los cambios en los comportamientos reológicos para cada material, (aceptando que estos cambios ocurren de manera diferente), razón por la cual se hace muy difícil establecer modelos de comportamiento universales. Si a este factor se le suma el uso de aditivos químicos, se tendrá que propiedades reológicas importantes como el esfuerzo de cedencia tiene una reducción considerable, lo cual es seguido del fenómeno dilatante a bajas tasas de cizalladura, quizá por turbulencia a una velocidad de deformación determinada como crítica, que a su vez depende directamente de la velocidad de aplicación de los esfuerzos sobre las suspensiones (Aguilera, 2005). Esta situación es de constante preocupación y seguimiento en las plantas de beneficio y procesamiento.

La suma de todos los factores anteriores conforman un conjunto de características que modifican otras variables reológicas importantes como la plasticidad, lo cual también debe

ser evaluado y controlado. En especial, la plasticidad de una suspensión o barbotina son más evidentes al estudiar la curva de esfuerzo vs tasa de cizalladura; y no cuando se analiza una curva de viscosidad. La figura 3 ilustra dos distintos comportamientos reológicos según la viscosidad; la figura 4 muestra el mismo caso pero en una curva de esfuerzo. En ambos casos los ejemplos corresponden a la misma arcilla caolinítica, ambos en su máxima concentración de sólidos, pero una sin química adicionada y la otra con la ayuda de agentes dispersantes.

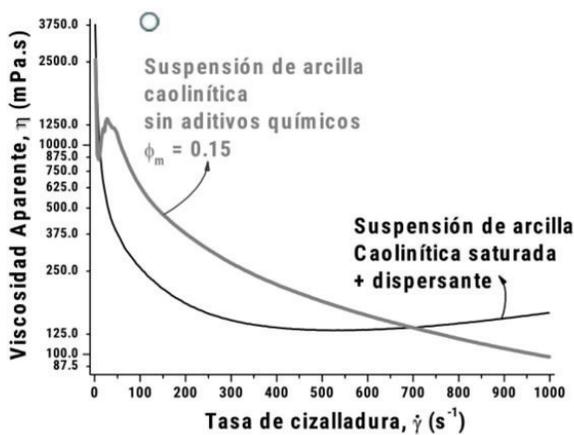


Figura 3 Curva de flujo comparativa de Viscosidad vs Tasa de cizalladura, entre una arcilla caolinítica sin química adicionada y otra con aditivos químicos dispersantes, ambas a su máxima concentración de sólidos.

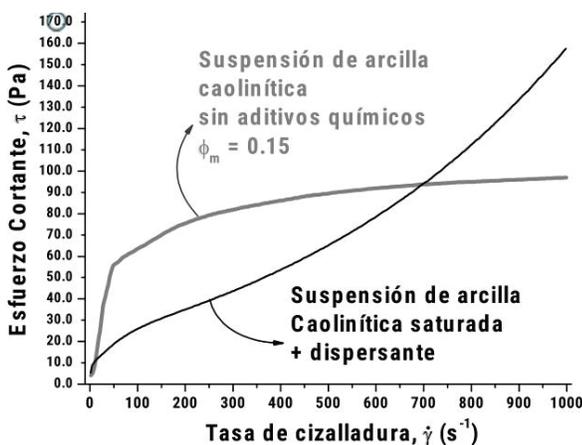


Figura 4 Curva de flujo comparativa de Esfuerzo vs Tasa de cizalladura, entre una arcilla caolinítica sin química adicionada y otra con aditivos químicos dispersantes, ambas a su máxima concentración de sólidos.

En estos ejemplos puede apreciarse el cambio de comportamiento reológico a cierta tasa de cizalladura, siendo más notorio este cambio en la curva de esfuerzo, pues la curva de viscosidad está graficada en escala semi-log. En otros casos esta diferencia no es apreciable ni siquiera con un cambio en la escala de la gráfica. Como se ha anotado anteriormente, a pesar de la notable importancia que representa el control en planta de los fenómenos reológicos pertinentes a las suspensiones de minerales, los modelos teóricos tradicionales no son capaces de representar dichos comportamientos. Algunos de los modelos más utilizados son el modelo plástico de Bingham, el modelo de Ley de Potencia para suspensiones pseudoplásticas o dilatantes, y modelo de Herschel-Bulckley en el caso de las suspensiones pseudoplásticas o dilatantes con esfuerzo de cedencia (Zaman, 1988).

$$\tau = \tau_0 + \eta \dot{\gamma} \text{ (Bingham)}$$

$$\eta = k \dot{\gamma}^{(n-1)} \text{ (Ley de Potencia)}$$

$$\eta = b + k \dot{\gamma}^{(n-1)} \text{ (Herschel-Bulckley)}$$

Estos modelos son válidos sólo si se presenta uno de los dos fenómenos en cuestión, pseudoplasticidad o dilatancia, pero no los dos al mismo tiempo. Adicionalmente no involucran variables de indiscutible importancia como la concentración de sólidos o el factor de forma de las partículas. En la figura 5 puede observarse el resultado de aplicar el modelo de Herschel-Bulckley a una suspensión saturada de arcilla caolinítica.

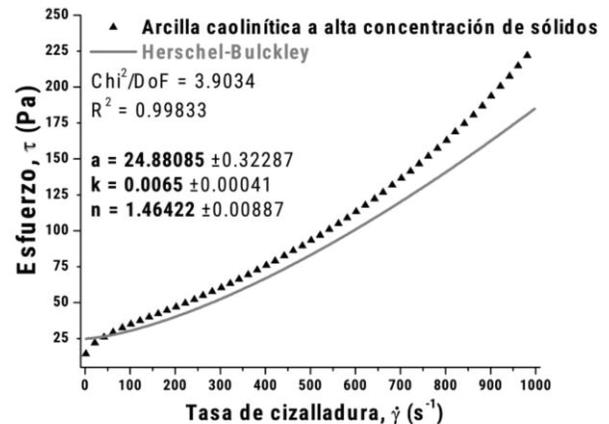


Figura 5 Ajuste de la viscosidad de una suspensión de arcilla Caolinítica saturada según el modelo de Ley de Potencia.

REDES NEURONALES ARTIFICIALES COMO ALTERNATIVA DE SIMULACIÓN

Dando como cierto que la reología de suspensiones minerales tipo arcilloso es de gran complejidad por el tipo y la cantidad de variables que involucra, la modelación de variables como el esfuerzo genera errores apreciables como el presentado en la figura 5, por lo que se limita su uso a intervalos muy estrechos, teniendo que realizar análisis por partes de las curvas. Al mismo tiempo es necesario que la modelación de una variable reológica como el esfuerzo cortante agrupe la mayor cantidad de factores posible, teniendo en cuenta que ellos interactúan formando sinergias que es imposible determinar a partir del estudio de cada variable individualmente. Dado que estas sinergias definen las principales características de la reología de suspensiones de minerales, la modelación clásica ha encontrado uno de sus mayores obstáculos, por lo que sigue persistiendo la falta de generalización dada la dificultad de cuantificar algunas variables, de las cuales se ha mencionado el factor de forma, variaciones mineralógicas del sistema particulado, y variaciones de la distribución de tamaño de partículas.

Las Redes Neuronales Artificiales permiten desarrollar una estrategia de simulación directa sin tener a disposición un modelo matemático que se asume de bastante complejidad. Si se sabe de antemano que el esfuerzo de cizalladura depende de muchas variables simultáneas tanto del escenario mecánico de deformación, por ejemplo la tasa de cizalladura, así como de variables del sistema mismo (por ejemplo DTP, ASE, química soluble, etc.), es posible presentarlas todas juntas ante la Red como parte de un sistema continuo, asociando unas condiciones iniciales de las suspensiones a un comportamiento mostrado bajo alguna condición mecánica, en lo que se conoce como fase de entrenamiento. De esta manera, cuando se presentan datos nuevos, éstos son relacionados con los datos ya aprendidos”, y así la red genera su respuesta por analogía entre los casos que presentan mayor similitud con los nuevos datos. De ahí que no se requiera conocer la particularidad de cada variable involucrada.

Modelación y simulación utilizando RNA. Como en cualquier caso de modelación y simulación, la elaboración de un modelo basado en las RNA exige tener en cuenta que existen muchos tipos de algoritmos que sirven a diferentes propósitos (o incluso algunos sirven para lo mismo), por lo cual es de mucha importancia la selección de la Arquitectura de red adecuada, y es indispensable el conocimiento del proceso o propiedad que se está estudiando. Una vez que se ha escogido el algoritmo de RNA, y definido el plan experimental, se adelanta la recopilación de los datos que alimentarán la red, los cuales tendrán características especiales en cuanto a número y calidad dependiendo del tipo de arquitectura de red seleccionada. Una vez se cuenta con la colección de datos

experimentales se pasa a la fase de entrenamiento, fase que definirá el correcto funcionamiento del modelo, pues datos de mala calidad en esta etapa de “aprendizaje” producirán respuestas equivocadas en el futuro. Esta fase también es propia de cada modelo de red. Al utilizar los datos recopilados en la fase experimental debe tenerse en cuenta que no todos se utilizan en la fase de entrenamiento, pues un porcentaje de ellos se guardan para la siguiente fase del proceso, la fase de validación y generalización del modelo. Si en una RNA entrenada las salidas calculadas por la red con los datos guardados están relativamente próximos a los valores deseados, existe generalización

Red Neuronal de Regresión Generalizada. Para cualquier tipo de RNA que se seleccione se tiene la misma base conceptual por la cual la información “aprendida” se asocia con la información presentada a la red como nuevos datos de entrada y la salida que ésta puede ofrecer según el entrenamiento a que fue sometida, en un proceso llamado memoria asociativa (Freeman, 1993), lo cual resulta muy útil en la simulación del esfuerzo de cizalladura o cortante pues permite evaluar tanto una función, o un punto en particular sobre la curva de esfuerzo, según una serie de datos de entrenamiento que tendrán implícitos todas las variables del sistema que influyen y determinan el esfuerzo de la suspensión. De esta manera resulta más claro que se pretende elaborar un modelo que permita predecir el esfuerzo cortante en suspensiones de arcillas expresada como una función continua de esfuerzo, lo que incluye casos particulares sobre la curva. En este sentido se escogió la Red de Regresión Generalizada (GRNN) pues cumple de muy buena manera el propósito de simulación de funciones continuas basadas en vectores de entrada y de salida. La arquitectura de este tipo de redes consiste en una capa de base radial y una capa lineal especial, como se ilustra en la figura 6:

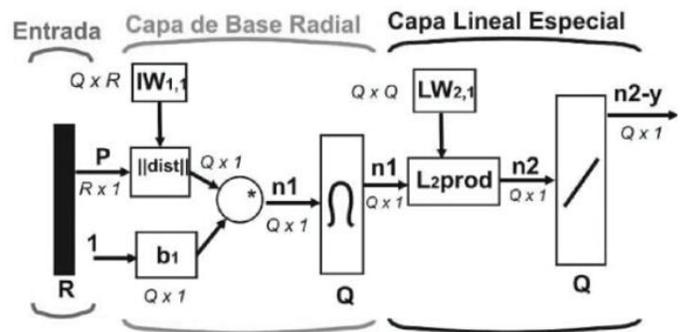


Figura 6. Arquitectura de una Red de Regresión Generalizada (tomado de www.matworks.com).

La función de transferencia simbolizada por el ícono de la capa radial es:

$$\text{radbas}(n) = \exp(-n^2)$$

Para comprender la manera como trabaja este modelo se debe tener en cuenta que los datos se presentan ante la Red a manera de vectores. Si un vector de entrada P es presentado a la Red es inmediatamente asociado a una “distancia” o “longitud de separación” entre sus componentes de acuerdo a cada valor del vector, lo cual es posible gracias a la función de transferencia que traduce la información reológica a términos de “distancias” entre los valores del vector. Cada neurona en la capa de base radial producirá un valor de acuerdo a la cercanía del vector de entrada con el vector de peso de cada neurona. De esta manera las neuronas de base radial con vectores de peso muy diferentes al del vector de entrada tienen salidas cercanas a cero (Aguilera, 2005). Por el contrario, si una neurona de base radial que tiene un vector de peso (asignado a una distancia) muy parecido al vector de entrada, se produce un valor cercano a 1. Si la neurona tiene una salida de 1 sus pesos de salida en la segunda capa pasan sus valores a las neuronas lineales de la segunda capa. En consecuencia, si una neurona de base radial tiene una salida de 1, todas las demás salidas son muy cercanas a cero.

La función de la primera capa es utilizar cada neurona que la constituye para producir una serie de entradas pesadas (o asociadas cada una a un peso), es decir, producir una distancia entre el vector de entrada y su valor pesado, calculado con la función “dist”. Cada entrada global de red es el producto elemento por elemento de su entrada pesada. Cada salida de neurona es su entrada pesada a través de “radbas”, la función de transferencia cuya expresión está dada por la ecuación 4. Si un vector de peso de una neurona es igual al vector de entrada, entonces su salida pesada es cero, su entrada de red es cero y su salida es 1. El vector de pesos de una neurona es una distancia o “spread” desde el vector de entrada. Tanto la primera como la segunda capa tiene tantas neuronas como vectores de entrada/objetivo tenga el vector P . Se debe tener precaución al escoger el “spread”, pues si selecciona grande se produce un área grande alrededor del vector de entrada donde las neuronas de la capa 1 van a responder con salidas significantes. Si el “spread” es pequeño la función de base radial es muy empinada así que la neurona con el vector de pesos más cercano a la entrada tendrá salida mucho más larga que las otras neuronas. Por último, la Red tenderá a responder con el vector de entrenamiento asociado con el más cercano al vector de entrada.

SIMULACIÓN

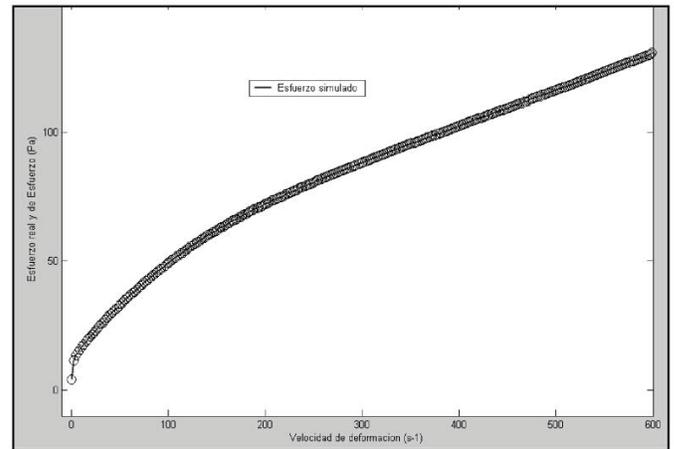


Figura 7 Curva de esfuerzo de una suspensión saturada de minerales arcillosos aproximada mediante un modelo de RNA de Regresión Generalizada.

El simulador propuesto está en capacidad de producir valores puntuales e intervalos de viscosidad en Pa cuando se presenta al simulador un valor de viscosidad tomado en un viscosímetro convencional de laboratorio. En principio, las curvas de flujo generadas para una suspensión en particular son medidas en el viscosímetro y posteriormente llevadas al reómetro, así que cada curva tiene asignada una variable de inicio (viscosidad de viscosímetro) y una curva de flujo en términos de esfuerzo cortante, como el caso mostrado en la figura 7. Adicionalmente se asignan otras variables de inicio como el tipo de suspensión, es decir, si es de materiales individuales o mezcla de ellos, y algunas de sus propiedades fisicoquímicas como conductividad, DTP, concentración de sólidos (expresada como fracción volumétrica de sólidos) y Área superficial. Es posible obtener al mismo tiempo un valor de esfuerzo específico a una tasa de cizalladura aleatoria dentro del rango de la curva, entre 0-100s⁻¹ en este caso, así como un intervalo de la curva de esfuerzo expresado como un segmento de la curva de flujo en un intervalo de tasa de cizalladura determinado.

El éxito de la simulación depende directamente del número de ejemplos aprendidos por la red en su fase de entrenamiento. Por lo tanto, para que exista una consistencia entre los valores simulados y los experimentales, a similitud de lo presentado en la figura 7, es recomendable tener los casos más diversos posibles de condiciones iniciales que puedan ocurrir en un proceso cotidiano de procesamiento de minerales arcillosos. Puede verse que el ajuste de la curva simulada es muy bueno, y resulta muy valioso teniendo en cuenta que no existe un modelo teórico que contraste la función de

esfuerzo producida por una gran variedad de factores combinados, con gran influencia de la naturaleza mineralógica del sistema, y con el fenómeno reológico de la dilatación después del comportamiento pseudoplástico.

CONCLUSIONES

La simulación usando RNA funciona para todo tipo de suspensiones que se quiera evaluar, siempre y cuando su comportamiento haya sido identificado y medido de alguna manera, y presentado a la RNA en su fase de entrenamiento. Cabe anotar que el aprendizaje de una RNA es infinito, y es posible seguir añadiendo casos en la medida que se estudien nuevas condiciones de los materiales. Si existiera un comportamiento al cual no fuera posible atribuirle una causa concreta, pero se tuvieran las mediciones que evidencien una tendencia, es posible alimentar el simulador con estos datos y producir una nueva función de viscosidad donde el factor desconocido se encuentre implícito. Para el caso particular se ha logrado simular funciones de esfuerzo que dependen de muchas variables (físicas, químicas y mineralógicas) bajo diversas condiciones de concentración de sólidos, sin importar que el resultado sea un comportamiento pseudo-plástico, dilatante, o combinación de ambos. Por otro lado, la dispersión entre datos experimentales y simulados por los algoritmos de RNA planteados es mínima, razón por la cual puede afirmarse que el simulador propuesto representa un eficiente mecanismo de aproximación para la viscosidad de las suspensiones saturadas de minerales cerámicos.

BIBLIOGRAFIA

1. Aguilera, G. F. 2005. Simulación de la viscosidad de suspensiones minerales mediante el uso de Redes Neuronales Artificiales. Tesis de Magíster en Materiales y Procesos, Universidad Nacional de Colombia.
2. Barnes H.A.; Hutton; Walters. 1989. An Introduction to Rheology. ELSEVIER.
3. Batchelor, G. K. 1977. The effect of Brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*. 83(1): 97 – 118.
4. Bustamante, M. Oswaldo. 2002. Reología de suspensiones: Modelación matemática del tensor esfuerzo y de la viscosidad de una suspensión mineral. Tesis de Doctor en Ciencias de la Ingeniería, con mención en Metalurgia Extractiva. Universidad de Concepción – Chile..
5. Claville De, Jesper. 2004. Viscosity Models for Silicate Melts. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. Article in Press. ELSEVIER.
6. Dabak, T.; YuceL, O. 1987. Modelling of concentration and particle size distribution effects on the rheology of highly concentrated suspensions. *Powder Technology* 52: 193-206.
7. Einstein, Albert. 1993. *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. Dover Publications Inc., (USA, 1956). Freeman J. A. y Skapura D. M. *Redes Neuronales, aplicaciones y técnicas de programación*. Editorial Addison-Wesley/Díaz de Santos.
8. Funk, James; Dinger, Dennis. 1994. *Predictive Process Control of Crowded Particulate Suspensions Applied to Ceramic Manufacturing*. Kluwer Academic Publishers.
9. Jinescu, V. V. 1974. The rheology of suspensions. *International Journal of Chemical Engineering* 14 (3): 397-420.
10. Makosko, Christopher W. *Rheology. Principles, Measurements and Application*. Wiley-VCH, 1994. Masters, Timothy. *Practical Neural Network Recipes in C++*. Academic Press Inc., 1993.
11. Quemada, D. 1985. Phenomenological rheology of concentrated dispersions, I. Clustering effects and the structure-dependent packing fraction. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 267-288.
12. Tangsathitkulchai, C.; 1988. Austin, L. G. Rheology of Concentrated Slurries of Particles of Natural Size Distribution Produced by Grinding. *Powder Technology*, 56 (1988) 293-299.
13. Zaman, A. A. 1998. *Techniques in Rheological measurements: Fundamentals and Applications*. The NSF Engineering Research Center of Particle Science & Technology, University of Florida.
14. Zaman, A.; Mathur s. 2004. Influence of Dispersing Agents and Solution Conditions on the Solubility of Crude Kaolin. *Journal of Colloid and Interface Science*, 271: 124-130, ELSEVIER.