

Abstracts Book

**Workshop on Modeling and
Simulation for Science and
Engineering**



Foristom
Foundation

August 8 to 9, 2024
Medellín, Colombia

Erica Mejía Restrepo
Chairman VI WMSSE

Ely Dannier V. Niño
Editor, Layout Coordinator

Abstracts Book Mailing Address Information

Ely Dannier V. Niño
Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials (FORISTOM)
Bucaramanga, Santander, Colombia
E-mail: info@foristom.org

Copyright © 2024 FORISTOM – FUNDACIÓN OF RESEARCHERS IN SCIENCE AND TECHNOLOGY OF MATERIALS. Abstract Book of the VI Workshop on Modeling and Simulation for Science and Engineering (VI WMSSE); academic and scientific event sponsored by FORISTOM. **ISSN 2745-1496**. This is a publication of FORISTOM; the responsibility for the information published lies with the speakers themselves.

Organizing Committee

Erica Mejía Restrepo (Chairman)
Ely Dannier V. Niño (Co-chairman)

Mariana Pereyra Pérez
José José Barba Ortega
Yuly Andrea Prada Varga
Octavio Andrés González Estrada

National Scientific Committee

- Dr. Ely Dannier Valbuena Niño
Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia
- Dr. Hector Jaime Dulce Moreno
Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia
- Dr. Alejandro David Martínez Amariz
Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia
- Dr. Yuly Andrea Prada Vargas
Universidad Industrial de Santander, Colombia
- Dr. Enrique Mejía Ospino
Universidad Industrial de Santander, Colombia
- Dr. Octavio Andrés González Estrada
Universidad Industrial de Santander, Colombia
- Dr. Rafael Cabanzo Hernández
Universidad Industrial de Santander, Colombia
- Dr. Miryam Rincón Joya
Universidad Nacional de Colombia, Colombia
- Dr. José José Barba Ortega
Universidad Nacional de Colombia, Colombia
- Dr. Erica Mejía Restrepo
Institución Universitaria Pascual Bravo, Colombia
- Dr. Jarol Molina Mosquera
Institución Universitaria Pascual Bravo, Colombia
- Dr. Santiago Jiménez Londoño
Institución Universitaria Pascual Bravo, Colombia
- MSc. Leidy Marcela Dueñas Ramírez
Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia
- MSc. Elkin Gelvez Almeida
Universidad Simón Bolívar, Colombia
- MSc. Tomás Enrique Ramírez
Universidad EAFIT, Colombia

International Scientific Committee

- Dr. José Luis Endrino Armenteros
Universidad Loyola Andalucía, Spain
- Dr. Francisco de Paula Montero Chacón
Universidad Loyola Andalucía, Spain
- Dr. Iván Fernández Martínez
Nano4Energy, Spain
- Dr. Steven Tidrow
Alfred University, United States of America
- Dr. Juan Muñoz Saldaña
Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Mexico
- Dr. Mariana Pereyra Perez
Universidad de la República, Uruguay
- Dr. Eduardo Daniel Méndez Morales
Universidad de la República, Uruguay
- Dr. Elaine Cristina Paris
Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, Brazil
- Dr. Claudinei de Souza Guimaraes
Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brazil
- MSc. Luisa Fernanda Ortiz
Universidad Loyola Andalucía, Spain
- MSc. Anderson Sandoval Amador
Universidad Loyola Andalucía, Spain

Invited Speakers

- ✓ Dr. Steven Tidrow
Alfred University, United States of America
- ✓ Dr. Juan Muñoz Saldaña
Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Mexico
- ✓ Dr. Eduardo Daniel Méndez Morales
Universidad de la República, Uruguay
- ✓ Dr. Elaine Cristina Paris
Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, Brazil

Topics

- ✓ **CS - Computer Science**
- ✓ **MS - Mechatronic Systems**
- ✓ **DSM - Dynamic Systems Modeling**
- ✓ **PCM - Physical-Chemistry Modeling**
- ✓ **PMM - Physics-Mathematical Modeling**
- ✓ **MSD - Modeling, Simulation, and Diagnostics**
- ✓ **ESET - Education on Science, Engineering, and Technology**
- ✓ **SETISI - Science, Engineering, Technology, and Innovation for Social Inclusion**



Foristom
Foundation

VI WMSSE

August 8 to 9, 2024
Medellín, Colombia

Contents

Invited Keynote Speaker	1
Extension of new simple material model to additional space groups	2
Optimization strategies of thermal spray processes	3
Nanoenvironments in biochemistry: contributions to a diffusional model	5
Evaluation of compounds obtained from manganese ore residue as reinforcement to starch films for improving mechanical and optical properties	6
Computer Science	8
Assessing perovskite coatings using artificial intelligence to enhance solar cell efficiency	9
Cluster Bravo presentation - high performance computing	10
Dynamic Systems Modeling	11
Structural dynamics of steel cables	12
Modeling, Simulation, and Diagnostics	13
Evaluation of geometries of thermal energy storage base-cement	14
Modeling applied to evaluate environmental indicators in the production of flanged parts using additive manufacturing: energy demand, carbon footprint and solid waste	15
Thermomagnetic phenomena in a ferrimagnet type-Ising: Monte Carlo analysis	16
Assessment of the distribution and concentration of early deforestation alerts in Colombia through spatial analysis ...	17
Role of the deGennes length on the magnetic reaction of a superconducting chock	19
Topology optimization and additive manufacturing of a McPherson suspension control arm for a combustion vehicle modified to work with an electric motor	20
Hysteretic, compensation and discontinuous behaviors in a high-spin ferrimagnet: $S=3$, $Q=7/2$	21
Application of the Rans k-w, SST model in solving 3D turbulent flow problems	22
Physical-Chemistry Modeling	23
Correlation between kinetic behavior and compressive strength of the alkaline activation process	24
Modeling calcined kaolinitic clays in cement: a discrete kinetic approach	26
Study of the degradation of ceramic oxide coating systems exposed to high temperatures	27
Physics-Mathematical Modeling	28
Influence of the size distribution and shape of the aggregate on the rheology of cement-based mixtures	29
Exploring electrostatic interactions between non-spherical dielectric particles: implications for material design	31
Comparative analysis of compression tests on honeycomb, beetle elytra plate, and biomimetically enhanced beetle elytra plate using Ansys and Abaqus simulations	32
Simulation of phase change materials for a dual heating and cooling system in extreme climates of Canada	34

Science, Engineering, Technology, and Innovation for Social Inclusion	35
Exploring the Impact of synthesis on the properties of simple oxides: a study on iron, titanium, calcium, niobium, and other elements.....	36
Evaluation of the compressive strength of bone cements with antibiotics	37
Construction and demolition waste as a solution to environmental and agricultural challenges.....	38
Education in Science, Engineering, and Technology	40
Gender stereotypes in areas of science, technology, engineering, and mathematics perceived by eleventh-grade adolescent women in an educational institution in Bello, Colombia	41
Gender stereotypes were perceived in science, technology, engineering, and mathematics by eleventh-grade adolescent women and professionals in their educational and work fields in Bello, Colombia.....	43
Innovation in global agriculture: a review of digital tools for application in Colombia.....	45

Invited Keynote Speaker

Extension of new simple material model to additional space groups

Extensión del nuevo modelo de material simple a grupos espaciales adicionales

S Tidrow¹

¹ Alfred University, Alfred, United States of America

E-mail: tidrow@alfred.edu

Abstract. As developed for perovskites, the new simple material model has been shown to significantly improve Goldschmidt's tolerance formalism for predicting whether or not a perovskite will form. Additionally, the new simple material model was shown to significantly improve lattice parameters and volume and provide temperature-dependent structural phase transitions, Mossotti - Lorenz - Lorentz - Clausius polarization, and structural constraint-induced. The new simple material model is extended to other cubic crystal structure systems and compared with experimental data.

Resumen. Se ha demostrado que el nuevo modelo de material simple desarrollado para perovskitas proporciona una mejora significativa sobre el formalismo de tolerancia de Goldschmidt para predecir si se formará o no una perovskita. Además, se demostró que el nuevo modelo de material simple proporciona una mejora significativa en la determinación de los parámetros y el volumen de la red, así como que proporciona transiciones de fase estructurales dependientes de la temperatura, la polarización de Mossotti - Lorenz - Lorentz - Clausius y la restricción estructural inducida. El nuevo modelo de material simple is extended to some other cubic crystal structure systems and is compared with experimental data.

Optimization strategies of thermal spray processes

Estrategias de optimización de procesos de rociado térmico

J Muñoz Saldaña¹, V D Saldarriaga Montoya¹, J S Castillo Figueroa¹, A I Gutierrez Perez¹, L J Buenrostro Huerta¹, N G Yomayuzza Sierra¹, S D Rodríguez Arévalo¹, and J Ganzález Hernández¹

¹ Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Santiago de Querétero, México

E-mail: jmunoz@cinvestav.mx

Abstract. Thermal spray includes a family of technologies for depositing metals, ceramics, cermets, etc. In these processes, a spray plume is formed due to the combination of operation parameters where complex plume-particle interactions occur that define the physical, structural, functional, etc. properties of the deposits. The temperature, velocity, and size of the particles in flight significantly influence the microstructure of the coating. The plume-particle interactions can be optimized using process maps, which in turn allow defining process windows representing the specific temperature and velocities of the particles in flight. Process maps describe the individual effect of particle velocity and temperature on specific coating properties, e.g. different microstructural characteristics, deposition efficiency, adhesion, mechanical properties, etc. Control strategies require the use of suitable in-flight particle diagnostic instruments, which allow the determination of their thermophysical properties and, many of which are commercially available, such as Spraywatch, DPV Evolution, and Accuraspray. However, although the operating parameters of most thermal spray processes can be controlled, the state of the particles being deposited to the substrate can change significantly over time due to wear of nozzles, electrodes, gas quality, etc. Thermal spray optimization consists of recovering the original average temperature and velocity of the particles in flight and, thus, the microstructure of the coating. At Cinvestav, CENAPROT, different strategies are being used to map and control thermal spray technologies, guaranteeing predefined levels of the properties of different coatings. This includes using high-precision diagnostic instruments and the development of alternative methods of functional data acquisition that are flexible and at a low cost. The diagnostic results serve as physical models for mathematical modeling of thermal spray processes, using, for example, computational fluid dynamics, which is also performed at CENAPROT. Computational fluid dynamics provides valuable information on theoretical temperature and velocity characteristics associated with individual particles in flight. However, due to the complex and interconnected nature of the thermal spray, computational fluid dynamics does not allow a global view of the whole process and the dependencies between the different inputs and outputs. For this purpose, big data and artificial intelligence analysis tools are undoubtedly useful. Transforming spray plume features to massive data by monitoring their luminosity, which allows the detection of shock diamonds in high-speed burning thermal spray, is a strategy currently being pursued at CENAPROT. The more data extracted from spray plume diagnostics and the development of methods capable of interpreting them properly, the more we can aspire to optimize thermal spray processes. The complexity of thermal spray is a typical case for applying machine learning techniques whose algorithms contain models based on sample data, known as training data, to make predictions or decisions. Machine learning, considered part of artificial intelligence, implements artificial neural network analysis. The methods presented in this contribution are general and applicable to any thermal spray process.

Resumen. El rociado térmico incluye una familia de tecnologías para el depósito de metales, cerámicos, cermets, etc. En estos procesos se forma una pluma de rociado como resultado de la combinación de los parámetros de la operación en donde se presentan complejas interacciones pluma-partícula que definen las propiedades físicas, estructurales, funcionales, etc. de los depósitos. La temperatura, velocidad y tamaño de las partículas en vuelo influyen significativamente en la microestructura del recubrimiento. Las interacciones pluma-partícula pueden optimizarse mediante los llamados mapas de proceso, que permiten definir a su vez ventanas de proceso que representan la temperatura y velocidades específicas de las partículas en vuelo. Los mapas de proceso describen el efecto individual de la velocidad y la temperatura de las partículas sobre propiedades específicas del recubrimiento; por ejemplo, diferentes características microestructurales, de eficiencia del depósito, de adherencia, propiedades mecánicas, etc. Las estrategias de control requieren el uso de instrumentos de diagnóstico de partículas en vuelo adecuados, que permiten la determinación de sus propiedades termofísicas y muchos de los cuales están disponibles comercialmente tales como Spraywatch, DPV Evolution, Accuraspray. Sin embargo, aunque los parámetros de operación de la mayoría de procesos de rociado térmico se pueden controlar, el estado de las partículas que se depositan al sustrato puede cambiar significativamente con el tiempo por desgaste de boquillas, electrodos, calidad de gases, etc. La optimización del rociado térmico consiste en recuperar la temperatura y velocidad medias originales de las partículas en vuelo y con ello la microestructura del recubrimiento. En Cinvestav, CENAPROT se están utilizando diferentes estrategias para mapear y controlar tecnologías de rociado térmico, garantizando niveles predefinidos de las propiedades de diferentes recubrimientos. Esto incluye el uso de instrumentos de diagnóstico de alta precisión y el desarrollo de métodos alternativos de adquisición de datos funcionales, flexibles a bajo costo. Los resultados de diagnóstico sirven como modelos físicos para el modelado matemático de procesos de rociado térmico, utilizando, por ejemplo, dinámica de fluidos computacional, que también se realiza en CENAPROT. La dinámica de fluidos computacional proporciona información valiosa sobre características teóricas de temperatura, velocidad asociada a partículas individuales en vuelo. Sin embargo, la dinámica de fluidos computacional no permite obtener una visión global de todo el proceso y las dependencias entre las diferentes entradas y salidas, debido a la naturaleza compleja e interconectada del rociado térmico. Para ello, el uso de herramientas de análisis de big data e inteligencia artificial es sin lugar a duda útil para este tipo de propósitos. La transformación de las características de la pluma de rociado a datos masivos mediante el monitoreo por ejemplo de su luminosidad, que permite ver diamantes de choque en rociado térmico de combustión de alta velocidad es una estrategia que se sigue actualmente en CENAPROT. Es claro que entre más datos se extraigan del diagnóstico de la pluma de rociado y se desarrollen métodos capaces de interpretarlos adecuadamente se podrá aspirar a optimizar los procesos de rociado térmico. La complejidad del rociado térmico es un caso típico para aplicar técnicas de aprendizaje de máquina cuyos algoritmos contienen modelos basados en datos de muestra, conocidos como datos de entrenamiento, para hacer predicciones o tomar decisiones. El de aprendizaje de máquina, considerado parte de la inteligencia artificial, implementa análisis de redes neuronales artificiales. Los métodos presentados en esta contribución son generales y aplicables a cualquier proceso de rociado térmico.

Nanoenvironments in biochemistry: contributions to a diffusional model

Nanoambientes en bioquímica: contribuciones a un modelo difusional

E D Méndez Morales¹

¹ Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

E-mail: emendez@fcien.edu.uy

Abstract. Micro- and nanoconfined spaces are decisive when it comes to understanding certain physiological processes. The detection of various metabolites using biomimetic electrodes is a good approximation to the physiological situation, but for those processes in which diffusion plays a predominant role, reliable analytical systems have yet to be developed that allow biomimesis of such a situation. We will present various options for biomimesis of confined spaces under the action of an electric field and the characterization of the diffusion of small electroactive molecules in micro and submicron spaces.

Resumen. Los espacios micro y nanoconfinados resultan determinantes a la hora de comprender determinados procesos fisiológicos. La detección de diversos metabolitos empleando electrodos biomiméticos es una buena aproximación a la situación fisiológicas, pero para aquellos procesos en los que la difusión cumple un papel preponderante, no se han desarrollado sistemas analíticos confiables que permitan hacer una biomimesis de tal situación. Presentaremos diversas opciones de biomimesis de espacios confinados bajo la acción de un campo eléctrico y la caracterización de la difusión de pequeñas moléculas electroactivas en espacios micro y submicrométricos.

Evaluation of compounds obtained from manganese ore residue as reinforcement to starch films for improving mechanical and optical properties

Evaluación de compuestos obtenidos a partir de residuos de mineral de manganeso como refuerzos de películas de almidón para mejorar las propiedades mecánicas y ópticas

J O Donizette Malafatti¹, A C de Almeida Nascimento², G Leite da Silva², S Quaranta³,
B A Miranda Figueira², and E Cristina Paris¹

¹ Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, São Carlos, Brazil

² Federal University of São Carlos, São Carlos, Brazil

³ Institute of Nanostructured Materials, Roma, Italia

E-mail: jmalafatti@hotmail.com

Abstract. Starch films are an alternative renewable source of biomaterials, making them an environmentally friendly option. Adding reinforcing materials to starch films allows control of the higher hydrophilicity, improves the mechanical and optical characteristics, and extends their applications from packaging, bags, and different functional coatings. Mining wastes are significant sources of precursors, such as metallic ions, promoting obtaining different compounds with active properties. Thus, the present work evaluated untreated manganese ore residue and its products as a reinforcing material for corn starch films. Manganese residue, BaMnO₄, and MnO₂ were added with concentrations of 0.25 to 1% (w w-1) to starch films. The composite films were obtained using the casting method. The results showed that adding particles allowed the water vapor permeability (WVP) to decrease in the presence of manganese ore residue and BaMnO₄ from 1.8 ± 0.3 g mm h⁻¹ m⁻² Pa⁻¹ to 0.9 ± 0.2 and 1.0 ± 0.2 g mm h⁻¹ m⁻² Pa⁻¹, respectively. In the mechanical tests, the BaMnO₄ films significantly increased tensile strength from 3.5 ± 0.2 MPa to 20 ± 4 MPa with similar homogeneity in all concentrations. The starch films reinforced with 1% (w w-1) MnO₂ enabled a gain in the ultraviolet-visible (UV-vis) spectrum, absorbing in the 400 - 500 nm region. Furthermore, the manganese ore residue and BaMnO₄ films showed an increase in UV-vis absorption of around 250 - 300 nm. Thus, the addition of low-concentration manganese materials from mining waste showed results indicating a promising gain in the properties of starch films that improve the packaging characteristics and added value of second-generation materials, favoring the circular economy.

Resumen. Las películas de almidón son biomateriales alternativos de fuentes renovables, lo que las convierte en una alternativa respetuosa con el medio ambiente. La adición de materiales de refuerzo a las películas de almidón permite controlar su mayor hidrofilia, mejorar sus características mecánicas y ópticas, así como ampliar sus aplicaciones desde envases, bolsas y diferentes recubrimientos funcionales. Los residuos mineros son una fuente importante de precursores, como los iones metálicos, permitiendo obtener diferentes compuestos con propiedades activas. Así, en el presente trabajo se evaluó el residuo de mineral de manganeso sin tratamiento y sus productos como materiales de refuerzo para películas de almidón de maíz. Se añadieron partículas de residuos de manganeso, BaMnO₄ y MnO₂ con concentraciones del 0,25 al 1% (m m-1) a las películas de almidón. Las películas compuestas obtenidas fueron hechas mediante el método de fundición. Los resultados mostraron que la adición de partículas permitió disminuir la permeabilidad al vapor de agua en presencia del residuo de mineral de manganeso y BaMnO₄ de $1,8 \pm 0,3$ g mm h⁻¹ m⁻² Pa⁻¹ a $0,9 \pm 0,2$ y

$1,0 \pm 0,2 \text{ g mm h}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ Pa}^{-1}$, respectivamente. En los ensayos mecánicos, las películas de BaMnO_4 aumentaron significativamente la resistencia a la tracción de $3,5 \pm 0,2 \text{ MPa}$ a $20 \pm 4 \text{ MPa}$ con una homogeneidad similar en todas las concentraciones. Las películas de almidón reforzadas con un 1% de MnO_2 permitieron una ganancia en el espectro ultravioleta-visible (UV-vis), absorbiendo en la región de 400 - 500 nm. Además, el residuo de mineral de manganeso y las películas de BaMnO_4 mostraron un aumento en la absorción UV-vis de alrededor de 250 - 300 nm. De esta manera, la adición de materiales de baja concentración de manganeso procedentes de residuos mineros mostró resultados que indican una ganancia prometedora en las propiedades de las películas de almidón que benefician tanto a las características del envase como el valor añadido de los materiales de segunda generación, favoreciendo la economía circular.

Computer Science

Assessing perovskite coatings using artificial intelligence to enhance solar cell efficiency

Análisis de revestimientos de perovskita con inteligencia artificial para incrementar la eficiencia de las células solares

C A Hernández Salazar¹, J D Sierra Villegas J¹, and O A González Estrada¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: cahss77@gmail.com

Abstract. Perovskite solar cells are of great interest due to their outstanding photoelectric properties. This study trained five machine learning models (LSTM, random forests, SVM, gradient boosting, and XGBoost) using Python with a dataset consisting of categorical inputs related to fabricating perovskite cells. These inputs included materials for hole and electron transport layers, the photovoltaic perovskite used and its deposition process, back contact material, anti-solvent, and precursor solution. The objective was to perform regression tasks with cell efficiency as the target variable. After evaluating the models, the random forest model was identified as the most suitable among those studied due to its ability to fit real data and processing time. Given their fabrication parameters, this model achieved satisfactory characterization of perovskite solar cells based on their energy conversion efficiency. However, the results could have been better in obtaining the best parameter combinations to maximize this efficiency. Further studies with different approaches are recommended to develop models capable of fulfilling this task effectively.

Resumen. Las celdas solares de perovskita están ganando mucha atención por sus destacadas propiedades fotoeléctricas. En esta investigación, se entrenaron cinco modelos distintos de aprendizaje automático (LSTM, bosques aleatorios, SVM, gradient boosting y XGBoost) utilizando Python, empleando un conjunto de datos categóricos relacionados con la fabricación de celdas de perovskita. Estos datos incluían detalles sobre los materiales de las capas de transporte de huecos y electrones, la perovskita fotovoltaico utilizada y su proceso de deposición, el material de contacto electrónico trasero, el anti-solvente y la solución precursora. El objetivo era realizar tareas de regresión para predecir la eficiencia de las celdas. Tras evaluar los modelos, se determinó que el modelo de bosques aleatorios era el más adecuado entre los analizados, debido a su capacidad para ajustarse a los datos reales y su tiempo de procesamiento. Con este modelo, se logró una caracterización adecuada de las celdas solares de perovskita en términos de eficiencia de conversión energética basada en sus parámetros de fabricación. Sin embargo, los resultados fueron insatisfactorios en la identificación de las mejores combinaciones de parámetros para maximizar dicha eficiencia. Se recomienda realizar estudios adicionales con diferentes enfoques para desarrollar modelos que puedan cumplir esta tarea de manera más efectiva.

Cluster Bravo presentation - high performance computing

Presentación cluster Bravo - high performance computing

S J Londoño Salazar¹, and J E Molina Mosquera¹

¹ Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín, Colombia

E-mail: santiago.jimenez@pascualbravo.edu.co

Abstract. High-performance computing in higher education: academic and scientific transformation at Institución Universitaria Pascual Bravo; high-performance computing redefines the academic and scientific landscape in higher education institutions by facilitating high-impact research in areas requiring advanced computational capabilities. At the Institución Universitaria Pascual Bravo, implementing a high-performance computing cluster has been fundamental in overcoming institutional challenges related to the growing demand for computing power; this infrastructure enables complex simulations and the processing of large volumes of data, optimizing the time and resources allocated to research. Notable projects include computational fluid dynamics modeling for hydroelectric turbines, molecular dynamics simulations of structural proteins of tropical diseases, and using Bayesian methodologies for statistical data analysis. The centralization of high-performance computing resources maximizes institutional investment and fosters a culture of innovation and collaboration, benefiting students and academics.

Resumen. La Computación de alto rendimiento en la educación superior: transformación académica y científica en la Institución Universitaria Pascual Bravo; la computación de alto rendimiento está redefiniendo el paisaje académico y científico en las instituciones de educación superior al facilitar investigaciones de alto impacto en áreas que requieren capacidades computacionales avanzadas. En la Institución Universitaria Pascual Bravo, la implementación de un cluster la computación de alto rendimiento ha sido fundamental para superar desafíos institucionales relacionados con la creciente demanda de capacidad de cómputo; esta infraestructura permite llevar a cabo simulaciones complejas y el procesamiento de grandes volúmenes de datos, optimizando el tiempo y los recursos destinados a la investigación. Proyectos destacados incluyen el modelado de fluidos computacional para turbinas hidroeléctricas, la simulación de dinámicas moleculares en proteínas estructurales de enfermedades tropicales, y el uso de metodologías bayesianas para el análisis estadístico de datos; la centralización de recursos la computación de alto rendimiento no solo maximiza la inversión institucional, sino que también fomenta una cultura de innovación y colaboración, beneficiando a estudiantes y académicos.

Dynamic Systems Modeling

Structural dynamics of steel cables

Dinámica estructural de cables de acero

R F Rua Patiño¹, L A Lara Valencia¹, A A Hoyos Montilla¹, and J D Ospina Correa²

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

² Corporación Universitaria Remington, Medellín, Colombia

E-mail: rfruap@unal.edu.co

Abstract. Modal changes in the wires arise from variations caused by stress-strain cycles; these cycles lead the cable to dissipate energy in the nonlinear elastic range through deformation and damage mechanisms. This phenomenon causes modifications in the micro-organic structure of the material during its useful life; this process of loss of integrity can affect the structural response, as permanent deformations can occur during service conditions, even if the stresses on the element are below the yield limit. Technological advances have allowed for the monitoring of structural cables, enabling data processing for modal analysis; however, these data do not accurately determine the actual level of damage, making it necessary to develop a model or methodology that correlates damage in the cables with their modal analysis. Therefore, it is crucial to develop a numerical model that identifies damage from the wire to the cable within the nonlinear elastic range of the material, considering stress-strain cycles and their correlation with microstructural changes. This work presents a model that relates the stress-strain curve to vibration modes, correlating these results with cable damage. In this way, it seeks to provide a deeper understanding of the stress and deformation fields in structural steel cables based on their modal properties and mechanical response in the nonlinear elastic range.

Resumen. Los cambios modales en los alambres se derivan de las variaciones presentadas por los ciclos de tensión-deformación; estos ciclos conducen al cable a disipar la energía en el rango elástico no lineal mediante mecanismos de deformación y daño. Este fenómeno provoca modificaciones en la estructura micro-orgánica del material durante su vida útil; este proceso de pérdida de integridad puede afectar la respuesta estructural, ya que se pueden generar deformaciones permanentes durante las condiciones de servicio, incluso si los esfuerzos sobre el elemento están por debajo del límite de cedencia. Los avances tecnológicos actuales han permitido el monitoreo de los cables estructurales, posibilitando el procesamiento de datos para el análisis modal; sin embargo, estos datos no permiten determinar con precisión el nivel real de los daños, haciendo necesario un modelo o metodología que correlacione el daño en los cables con su análisis modal. Por tanto, es crucial desarrollar un modelo numérico que permita identificar los daños desde el alambre hasta el cable en el rango elástico no lineal del material, considerando los ciclos de tensión-deformación y su correlación con los cambios microestructurales. Este trabajo pretende presentar un modelo que relacione la curva de esfuerzo-deformación con los modos de vibración, permitiendo así correlacionar estos resultados con los daños en los cables. De esta manera, se busca proporcionar una comprensión más profunda de los campos de esfuerzo y deformación en cables estructurales de acero, en función de sus propiedades modales y su respuesta mecánica en el rango elástico no lineal.

Modeling, Simulation, and Diagnostics

Evaluation of geometries of thermal energy storage base-cement

Evaluación de geometrías de base-cemento de almacenamiento de energía térmica

L F Ortiz Vasquez¹, J L Endrino Armenteros¹, E R Rodríguez¹, and F P Montero Chacon¹

¹ Universidad Loyola Andalucía, Dos Hermanas, España

E-mail: lfortiz@uloyola.es

Abstract. The energy crisis has led to the search for alternative renewable energy sources to satisfy current demand. On the other hand, energy storage systems are essential to harness energy from renewable sources during periods of availability and release it later. In this sense, thermal energy storage components are prone to durability problems due to the intermittency of renewable sources. For this reason, the need arises to perform a computational analysis of thermal energy storage in cement through finite elements using the multiphysics Comsol software to implement it in an energy trigeneration system powered by solar energy. Therefore, in this research, we present the analysis of the thermo-mechanical behavior of four cement-based thermal energy storage systems. The charging time of thermal energy in the storage system is analyzed with Therminol XP and Duratherm S fluids circulating at a temperature of 300 °C. The results obtained from the simulation show the relevance of thermo-mechanical analysis for the design of cement-based thermal storage systems.

Resumen. La crisis energética se ha visto volcada a realizar la búsqueda de fuentes de energía alternativas renovables que puedan satisfacer la demanda actual. Por otra parte, los sistemas de almacenamiento de energía son esenciales para aprovechar la energía procedente de fuentes renovables durante los períodos de disponibilidad y liberarla posteriormente. En este sentido, los componentes de almacenamiento de energía térmica son propensos a presentar problemas de durabilidad por la intermitencia de las fuentes renovables. Por este motivo, surge la necesidad de realizar un análisis computacional del almacenamiento de energía térmica en cemento a través de elementos finitos usando el software Comsol multifísico con el propósito de implementarlo en un sistema de trigeneración energética impulsado por energía solar. Por consiguiente, en esta investigación, presentamos el análisis del comportamiento termo-mecánico de cuatro sistemas de almacenamiento de energía térmica a base de cemento. El tiempo de carga de energía térmica en el sistema de almacenamiento se analiza con los fluidos Therminol XP y Duratherm S que circulan a una temperatura de 300 °C. Los resultados obtenidos de la simulación muestran la pertinencia del análisis termo-mecánico para el diseño de sistemas de almacenamiento térmico a base cemento.

Modeling applied to evaluate environmental indicators in the production of flanged parts using additive manufacturing: energy demand, carbon footprint and solid waste

Modelización aplicada para evaluar indicadores ambientales en la producción de piezas bridadas mediante fabricación aditiva: demanda de energía, huella de carbono y residuos sólidos

C de Souza Guimarães¹, M Lira¹, and J Payão Filho¹

¹ Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

E-mail: claudinei@eq.ufjf.br

Abstract. Additive Manufacturing has proven suitable to support or even replace traditional manufacturing in several industries, offering many advantages such as delivery time and reduction in terms of solid waste generation, energy consumption, and greenhouse gas emissions. This study aimed to model and calculate environmental indicators during the life cycle assessment considering the limit gate-to-gate in producing a flanged part in API 6A BX169 low alloy carbon steel using AWS ER90S-B3 wire. The method used was Wire and Arc Additive Manufacturing, and the calculated variables were energy demand, carbon footprint, and solid waste. The total energy demand in WAAM was 11,496.8 MJ, the total carbon footprint in CO₂ equivalent (CO₂-eq) was 731.0 kgCO₂-eq and the solid waste generated was 64.4 kg.

Resumen. La Fabricación Aditiva ha demostrado ser adecuada para apoyar o incluso reemplazar la fabricación tradicional en varias industrias, ofreciendo muchas ventajas, como el tiempo de entrega y la reducción en términos de generación de residuos sólidos, consumo de energía y emisiones de gases de efecto invernadero. Este estudio tuvo como objetivo modelar y calcular indicadores ambientales durante el análisis del ciclo de vida considerando el límite puerta-a-puerta, en la producción de una pieza bridada en acero al carbono de baja aleación API 6A BX169 utilizando alambre AWS ER90S-B3. El método utilizado fue Fabricación Aditiva por Alambre y Arco, y las variables calculadas fueron demanda de energía, huella de carbono y residuos sólidos. La demanda total de energía en WAAM fue de 11.496,8 MJ, la huella de carbono total en CO₂ equivalente (CO₂-eq) fue de 731,0 kgCO₂-eq y los residuos sólidos generados fueron de 64,4 kg.

Thermomagnetic phenomena in a ferrimagnet type-Ising: Monte Carlo analysis

Fenómenos termomagnéticos en un ferrimagneto tipo Ising: análisis Monte Carlo

N De La Espriella¹, and J Madera²

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

² Universidad del Sinú, Montería, Colombia

E-mail: ndelaespriella@correo.unicordoba.edu.co

Abstract. The thermomagnetic behavior of a ferrimagnet configured in a bipartite square lattice, composed of Ising-type particles of spins-(2,3/2), and subjected to different anisotropies under the effect of an applied external field is investigated using Monte Carlo simulations. The model presents interesting thermomagnetic phenomena, such as compensation temperatures and discontinuous transitions in the finite temperature phase diagrams of the magnetization and magnetic susceptibility, when we vary the single ion anisotropies. The influence of the crystal fields is also reflected in the hysteretic behavior of the ferrimagnet, with phenomena of multiple loops and superparamagnetism.

Resumen. Se investiga mediante simulaciones Monte Carlo el comportamiento termomagnético de un ferrimagneto configurado en una red cuadrada bipartita, compuesto por partículas tipo Ising de espines-(2,3/2), y sometido a diferentes anisotropías bajo el efecto de un campo externo aplicado. El modelo presenta interesantes fenómenos termomagnéticos, como temperaturas de compensación y transiciones discontinuas en los diagramas de fase a temperatura finita de la magnetización y la susceptibilidad magnética, cuando variamos las anisotropías de ion simple. La influencia de los campos cristalinos también se refleja en el comportamiento histerético del ferrimagneto, con fenómenos de lazos múltiples y superparamagnetismo.

Assessment of the distribution and concentration of early deforestation alerts in Colombia through spatial analysis

Evaluación de la distribución y concentración de alertas tempranas de deforestación en Colombia a través del análisis espacial

J E González Balaguera¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: Jegonzalezba@unal.edu.co

Abstract. This study presents an integrated approach for analyzing early deforestation alerts in Colombia generated by the Institute of Hydrology, Meteorology, and Environmental Studies. Deforestation is a global environmental concern, affecting biodiversity, contributing to climate change, and negatively impacting local communities. Therefore, identifying and analyzing early deforestation alerts is essential for the timely implementation of mitigation and conservation measures. To address this issue, we used the silhouette method to determine the optimal number of clusters in the early alert data. This method is a statistical approach that evaluates the coherence of the formed clusters and helps identify the number of groupings that best represent the underlying structure of the data. Once the optimal number of clusters was determined, we calculated the centroids for each cluster. The centroids represent the geometric center of each cluster and provide a key spatial reference for subsequent analysis. The spatial distribution of deforestation alerts was visualized through histograms, both longitudinally and angularly. Longitudinal histograms allow us to observe how alerts are distributed across different geographic longitudes, which can reveal large-scale deforestation patterns. On the other hand, angular histograms offer a perspective on the spatial orientation of the alerts, which helps understand the predominant directions of deforestation processes. These visualizations are fundamental for identifying critical areas and potential deforestation corridors. Additionally, a statistical mechanics-based index was proposed to correlate alert density with potential deforestation in the studied region. This index was derived from the canonical ensemble, which considered the alert's independent particles to quantify the relationship between alert concentration and the probability of significant deforestation. Statistical mechanics provides a robust theoretical framework for modeling the distribution of events and allows for deriving metrics that can be used for decision-making in environmental policies. The suggested index can be valuable for prioritizing intervention areas and allocating resources more effectively. The integrated approach presented in this study combines cluster analysis techniques, spatial visualization, and statistical modeling, providing a comprehensive methodology for analyzing early deforestation alerts. The results of this approach can be used by environmental authorities, non-governmental organizations, and local communities to improve forest conservation and management strategies. Moreover, the proposed methodology can be adapted and applied to other regions affected by deforestation, contributing to global efforts to combat forest loss. This study offers a novel and robust methodology for analyzing early deforestation alerts in Colombia. Combining the silhouette method for determining optimal clusters, detailed spatial visualization through histograms, and a statistical mechanics-based index provides a powerful tool to understand and address deforestation. This approach not only facilitates the identification of patterns and trends in alert data but also helps correlate these alerts with actual deforestation, enabling better decision-making and more effective actions for forest conservation in Colombia.

Resumen. En este estudio se presenta un enfoque integrado para el análisis de alertas tempranas de deforestación en Colombia, generadas por el Instituto de Hidrología, Meteorología y Estudios Ambientales (IDEAM). La deforestación es una preocupación ambiental crítica en Colombia, ya que afecta la biodiversidad, contribuye al cambio climático y tiene impactos negativos en las comunidades locales. Por lo tanto, la identificación y el análisis de las alertas tempranas de deforestación son esenciales para implementar medidas de mitigación y conservación de manera oportuna. Para abordar este problema, utilizamos el método de la silueta para determinar el número óptimo de clústeres en los datos de alertas tempranas. Este método es un enfoque estadístico que evalúa la coherencia de los clústeres formados y ayuda a identificar el número de agrupaciones que mejor representa la estructura subyacente de los datos. Una vez determinado el número óptimo de clústeres, procedimos a calcular los centroides para cada uno de ellos. Los centroides representan el centro geométrico de cada clúster y proporcionan una referencia espacial clave para el análisis subsiguiente. La distribución espacial de las alertas de deforestación se visualizó mediante histogramas, tanto en términos longitudinales como angulares. Los histogramas longitudinales permiten observar cómo se distribuyen las alertas a lo largo de diferentes longitudes geográficas, lo que puede revelar patrones de deforestación a gran escala. Por otro lado, los histogramas angulares ofrecen una perspectiva sobre la orientación espacial de las alertas, lo que es útil para entender las direcciones predominantes de los procesos de deforestación. Estas visualizaciones son fundamentales para identificar áreas críticas y posibles corredores de deforestación. Además, se propuso un índice basado en la mecánica estadística para correlacionar la densidad de alertas con la deforestación potencial en la región estudiada. Este índice se diseñó para cuantificar la relación entre la concentración de alertas y la probabilidad de que se produzca una deforestación significativa. La mecánica estadística proporciona un marco teórico robusto para modelar la distribución de eventos y permite derivar métricas que pueden ser utilizadas para la toma de decisiones en políticas ambientales. El índice propuesto puede servir como una herramienta valiosa para priorizar áreas de intervención y asignar recursos de manera más efectiva. El enfoque integrado presentado en este estudio combina técnicas de análisis de clústeres, visualización espacial y modelado estadístico, proporcionando una metodología comprensiva para el análisis de alertas tempranas de deforestación. Los resultados de este enfoque pueden ser utilizados por autoridades ambientales, organizaciones no gubernamentales y comunidades locales para mejorar las estrategias de conservación y manejo de bosques. Además, la metodología propuesta puede ser adaptada y aplicada a otras regiones afectadas por la deforestación, contribuyendo a los esfuerzos globales para combatir la pérdida de bosques. En conclusión, este estudio ofrece una metodología novedosa y robusta para el análisis de alertas tempranas de deforestación en Colombia. Al combinar el método de la silueta para la determinación de clústeres óptimos, la visualización espacial detallada mediante histogramas y un índice basado en la mecánica estadística, se proporciona una herramienta poderosa para entender y abordar la deforestación. Este enfoque no solo facilita la identificación de patrones y tendencias en los datos de alertas, sino que también ayuda a correlacionar estas alertas con la deforestación real, permitiendo una mejor toma de decisiones y acciones más efectivas para la conservación de los bosques en Colombia.

Role of the deGennes length on the magnetic reaction of a superconducting chock

Papel de la longitud de deGennes sobre la reacción magnética de una cuña superconductora

J J Barba Ortega¹, M Rincón Joya¹, and C Aguirre²

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

² Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá, Brasil

E-mail: jjbarbao@unal.edu.co

Abstract. We analyzed the effect of the deGennes length on the magnetic response and the super-electronic density in a superconducting mesoscopic chock in the presence of an external magnetic field at low temperature. We solve numerically the time-dependent Ginzburg Landau equations considering the demagnetization effects, that is, we study a three-dimensional case. We show that the slope of the chock can be used to control the vortex state and to control the region through which the magnetic flux enters the sample and the critical fields. Also, we found that the critical fields are slowly dependent on this slope.

Resumen. Analizamos el efecto de la longitud de deGennes sobre la respuesta magnética y sobre la densidad super-electrónica en una cuña mesoscópica superconductora en presencia de un campo magnético externo a baja temperatura. Resolvemos numéricamente las ecuaciones de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo teniendo en cuenta los efectos de desmagnetización, es decir, estudiamos un caso tridimensional. Mostramos que la pendiente de la cuña se puede utilizar para controlar el estado de vórtices y para controlar la región a través de la cual el flujo magnético ingresa a la muestra. También encontramos que los campos críticos son levemente dependientes de esta pendiente.

Topology optimization and additive manufacturing of a McPherson suspension control arm for a combustion vehicle modified to work with an electric motor

Optimización topológica y fabricación aditiva de un brazo de control de suspensión McPherson para un vehículo de combustión modificado para funcionar con un motor eléctrico

O A González Estrada¹, S Viancha¹, and H Bayona¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: agonzale@uis.edu.co

Abstract. The vehicle suspension system aims to transmit road-induced loads to the vehicle body in a controlled manner. A critical component of this system is the control arm, which maintains alignment between the wheel and the body, preventing irregular wheel movements. This study focuses on the topology optimization and additive manufacturing of the front control arm for a sedan vehicle converted from a combustion engine to an electric motor, resulting in a changed weight distribution. A finite element model of the McPherson suspension system was developed to determine the loads transmitted to the control arm under two loading conditions. The control arm was then analyzed in isolation to assess the resulting stresses and deformations, which were 119 MPa and 19 MPa, respectively. An oversized control arm model was subsequently created for topology optimization using a nylon matrix with fiberglass reinforcement. The optimized model exhibited equivalent stresses of 38 MPa and 12 MPa under the same conditions. A demonstration prototype of the optimized control arm was fabricated using additive manufacturing, achieving a weight of 230 g, representing a 79% reduction compared to the original model.

Resumen. El sistema de suspensión del vehículo tiene como objetivo transmitir las cargas inducidas por la carretera al cuerpo del vehículo de manera controlada. Un componente crítico de este sistema es el brazo de control, que mantiene la alineación entre la rueda y el cuerpo, evitando movimientos irregulares de la rueda. Este estudio se centra en la optimización topológica y la fabricación aditiva del brazo de control delantero para un vehículo sedán convertido de motor de combustión a motor eléctrico, lo que resulta en un cambio en la distribución del peso. Se desarrolló un modelo de elementos finitos del sistema de suspensión McPherson para determinar las cargas transmitidas al brazo de control bajo dos condiciones de carga. El brazo de control se analizó de manera aislada para evaluar las tensiones resultantes, que fueron de 119 MPa y 19 MPa, respectivamente. Luego, se creó un modelo sobredimensionado del brazo de control utilizando optimización topológica y una matriz de nylon con refuerzo de fibra de vidrio. El modelo optimizado mostró tensiones equivalentes de 38 MPa y 12 MPa bajo las mismas condiciones. Se fabricó un prototipo del brazo de control optimizado utilizando fabricación aditiva, logrando un peso de 230 g, lo que representa una reducción del 79% en comparación con el modelo original.

Hysteretic, compensation and discontinuous behaviors in a high-spin ferrimagnet: $S=3$, $Q=7/2$

Comportamientos histeréticos, de compensación y discontinuos en un ferrimagneto de altos espines: $S=3$, $Q=7/2$

N De La Espriella¹, and J Hoyos Villalba¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: ndelaespriella@correo.unicordoba.edu.co

Abstract. The research consists of describing qualitatively, through an interaction Hamiltonian and a Monte Carlo method, the phenomena of compensation, discontinuity, and hysteresis in an Ising-type ferrimagnet of high spins ($S=3$ and $Q=7/2$), configured in a square lattice. The system undergoes this type of phenomenon under the action of an external magnetic field and the magnetocrystalline anisotropies of the sublattices that compose it. The compensation temperatures increase with decreasing modulus of the anisotropies, as do the temperatures at which discontinuous transitions occur.

Resumen. La investigación consiste en describir cualitativamente, a través de un Hamiltoniano de interacción y un método Monte Carlo, los fenómenos de compensación, discontinuidad e histéresis en un ferrimagneto tipo Ising de altos espines ($S=3$ y $Q=7/2$), configurado en una red cuadrada. El sistema experimenta este tipo de fenómenos bajo la acción de un campo magnético externo y las anisotropías magnetocristalinas de las subredes que lo componen. Las temperaturas de compensación se incrementan con el decrecimiento del módulo de las anisotropías, al igual que las temperaturas a las cuales ocurren las transiciones discontinuas.

Application of the Rans k-w, SST model in solving 3D turbulent flow problems

Aplicación del modelo Rans k-w SST en la solución de problemas 3D de flujo turbulento

C D Barrera Díaz¹, D A Fuentes Díaz¹, J E Jaramillo Ibarra¹, and M De Jesus Martinez¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: cbarrera1096@hotmail.com

Abstract. This study aims to validate proper algorithms for solving 3D turbulent flow problems in naturally ventilated buildings, considering air as an incompressible fluid without thermal effects. The k-w; SST model was used, which combines the Rans equations with the transport equations of k and w and solves the terms of the Reynolds stresses and the production of turbulent kinetic energy using the Boussinesq approximation. Three common flow problems in buildings were simulated, and the numerical results obtained were compared with the data described in the literature of 1:1:2 and 1:4:4 Shape building model, which describes the flow in a building with width, length, and depth proportions and Simple building block model which represents a set of 9 equidistant buildings. For the development of the algorithm, the C++ programming language was used, along with the implementation of the finite volume method for the discretization of the equations and the Simple algorithm for coupling between velocity and pressure.

Resumen. El propósito de este estudio es la validación de algoritmos propios para la solución de problemas 3D de flujo turbulento en edificaciones naturalmente ventiladas, teniendo en cuenta el aire como un fluido incompresible sin efectos térmicos. Se empleo el modelo k-w; SST, el cual combina las ecuaciones Rans junto a las ecuaciones de transporte de k y w;, y resuelve los términos de los esfuerzos de Reynolds y la producción de energía cinética turbulenta mediante la aproximación de Bousinessq. Se simularon 3 problemas comunes del flujo en edificaciones, y los resultados numéricos obtenidos fueron comparados con los datos descritos en la literatura de: 1:1:2 y 1:4:4 Shape building model, el cual describe el flujo en un edificio con las proporciones de ancho largo y profundidad y Simple building block model el cual representa un conjunto de 9 edificios equidistantes. Para el desarrollo del algoritmo se empleo el lenguaje de programación C++, junto a la implementación del método de volúmenes finitos para la discretización de las ecuaciones y el algoritmo Simple para el acoplamiento entre la velocidad y la presión.

Physical-Chemistry Modeling

Correlation between kinetic behavior and compressive strength of the alkaline activation process

Correlación entre el comportamiento cinético y la resistencia a la compresión del proceso de activación alcalina

M Y Echeverri Aguirre¹, J S Rudas Flórez², J E Molina Mosquera², A A Hoyos Montilla¹, J I Tobón², and M C Sanz³

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

² Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín, Colombia

³ Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja, Madrid, Spain

E-mail: myecheverria@unal.edu.co

Abstract. The production of ordinary Portland cement is energy-intensive and generates significant CO₂ emissions; therefore, looking for alternatives to replace this material totally or partially is crucial. Alkali-activated cement is a viable alternative, showing equal or better manufacturing and application conditions than ordinary Portland cement. According to the literature, the heat flow released during the hydration processes of cement can provide insights into their kinetic behavior. This kinetics knowledge contributes to obtaining a cementitious material that meets the compressive strength required in the field. In this research, a model is developed to correlate the kinetic behavior of alkaline activation with the compressive strength of the fly ash activated with sodium hydroxide in the presence of portlandite. It is worth noting that models of a different nature have been developed (empirical, and artificial intelligence models, among others) to perform this correlation; still, they have been widely used in ordinary Portland cement and supplementary cementitious materials. There still needs to be a deeper gap in applying models for Alkali-activated cement. The proposed model is validated with compressive strength tests at 3, 7, and 28 days and microcalorimetric measurements at 25°C and 35°C. The model results indicate a strong incidence of kinetic behavior (represented through the heat flow) on the compressive strength under the conditions analyzed in Alkali-activated cement. This incidence is mainly due to products formed during activation, which depend on the chemical composition of the materials used as precursors, the type and concentration of the activator, and the curing temperature, among others. The proposed model is an efficient tool for correlating the kinetic behavior with the compressive strength of the alkaline activation of fly ash, achieving a high degree of adjustment.

Resumen. La producción de cemento Portland ordinario es un proceso intensivo en energía y genera importantes emisiones de CO₂; por lo tanto, es crucial buscar alternativas para sustituir total o parcialmente este material. Los cementos activados alcalinos son una alternativa viable, mostrando iguales o mejores condiciones de fabricación y aplicación que el cemento Portland ordinario. De acuerdo con la literatura, el flujo de calor liberado durante los procesos de hidratación de los cementos puede proporcionar información sobre su comportamiento cinético; a su vez, el conocimiento de esta cinética contribuye al conocimiento en la obtención de un material cementante que cumpla con la resistencia a la compresión requerida en campo. En esta investigación se desarrolla un modelo para correlacionar el comportamiento cinético de la activación alcalina con la resistencia a la compresión para la activación alcalina de cenizas volantes con hidróxido de sodio en presencia de portlandita. Cabe resaltar que se han desarrollado modelos de diferente naturaleza (empíricos, modelos de inteligencia artificial, entre otros) para realizar esta correlación, pero han sido ampliamente utilizados en cemento Portland ordinario y materiales cementantes suplementarios. Todavía

existe una profunda brecha en la aplicación de modelos para cementos activados alcalinos. El modelo propuesto fue validado con ensayos de resistencia a la compresión a los 3, 7 y 28 días, y mediciones microcalorimétricas a 25°C y 35°C. Los resultados del modelo indican una fuerte incidencia del comportamiento cinético (representado a través del flujo de calor) sobre la resistencia a la compresión en las condiciones analizadas en cementos activados alcalinos. Esta incidencia se debe principalmente a los productos formados durante la activación, los cuales dependen de la composición química de los materiales utilizados como precursores, el tipo y concentración de activador, la temperatura de curado, entre otros. El modelo propuesto es una herramienta eficiente para correlacionar el comportamiento cinético con la resistencia a la compresión de la activación alcalina de las cenizas volantes, logrando un alto grado de ajuste.

Modeling calcined kaolinitic clays in cement: a discrete kinetic approach

Modelado de arcillas caoliníticas calcinadas en cemento: un enfoque cinético discreto

C Rosero-Chicaiza¹, and J I Tobón¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

E-mail: dcroseroc@unal.edu.co

Abstract. The modeling of types of cement supplemented with calcined kaolinitic clays, such as metakaolin, has become a topic of interest due to the need to predict the behavior of these mixtures. So far, most hydration kinetics models have simulated metakaolin as a single phase. However, due to the trend of using multicomponent or low-grade clays as supplementary cementitious materials, there is a need for a more general model whose parameters apply to any type of calcined clay. In this sense, modeling metakaolin not as a single phase but based on its reactive fractions can contribute to this generalization, as what fundamentally changes between clays is the proportion of these phases. Therefore, this work presents a theoretical study of a discrete kinetic model that considers metakaolin's reactive silica and alumina fractions instead of just one for metakaolin. To emulate the kinetic parameters, it was assumed that the chemical kinetics of rice husk silica are not very different from their equivalent in metakaolin. Thus, a Predator-Prey algorithm was used to predict the kinetic parameters of alumina. In this way, the parameter set of both reactive phases of metakaolin was obtained, and their behavior was emulated under different conditions, obtaining trends very similar to those theoretically expected for these phases.

Resumen. El modelamiento de cementos adicionados con arcillas caoliníticas calcinadas como el metacaolín, se ha convertido en un tema de interés, debido a la necesidad de predecir el comportamiento de estas mezclas. Hasta el momento, la mayoría de los modelos de cinética de hidratación, han simulado al metacaolín como una única fase, sin embargo, debido a la tendencia de usar arcillas multicomponente o de bajo grado como material cementante suplementario, se hace necesario la creación de un modelo más general, es decir uno, cuyos parámetros sean aplicables a cualquier tipo de arcilla calcinada. En ese sentido, modelar al metacaolín no como una única fase sino en función de sus fracciones reactivas, puede contribuir a esta generalización, pues lo que fundamentalmente cambia entre las arcillas es la proporción entre estas fases. Es por ello por lo que este trabajo, presenta un estudio teórico de un modelo cinético discreto que tiene en cuenta las fracciones de sílice y alúmina reactivas del metacaolín en vez de sólo una para el metacaolín. Para lograr emular los parámetros cinéticos, se supuso que la cinética química de la sílice de la cascarilla de arroz no es muy diferente a su equivalente en el metacaolín. Con esto se usó un algoritmo Predador-Presa para predecir los parámetros cinéticos de la alúmina. Así, se obtuvo el conjunto de parámetros de ambas fases reactivas del metacaolín y se emuló su comportamiento en diferentes condiciones, obteniendo tendencias muy similares a lo esperado teóricamente para estas fases.

Study of the degradation of ceramic oxide coating systems exposed to high temperatures

Estudio de la degradación de sistemas de recubrimientos óxido cerámicos expuestos a altas temperaturas

K Belisario¹, M Romero¹, S Liscano¹, and A Narvaez¹

¹ Universidad Nacional Experimental Politécnica Antonio José de Sucre, Puerto Ordaz, Venezuela

E-mail: Keyli.belisario@gmail.com

Abstract. This work aims to study the degradation of Ytria-stabilized Zirconia coating systems with a NiCoCrAlY anchor layer on an AISI 310 stainless steel substrate exposed to high temperatures. To achieve the objectives, a simultaneous thermal gravimetric-differential scanning calorimetry analysis was carried out on the coated specimens for a period of 144 hours, where the mass gain (thermal gravimetric analysis) and the possible thermal events that may occur as the time elapsed were studied. Permanence (differential scanning calorimetry analysis) and isothermal oxidation thermal treatments were carried out at 1050°C for times of 72 and 144 hours, with cooling without thermal shocks. Subsequently, a microstructural characterization was carried out on the samples using optical microscopy and scanning electron microscopy to study the degradation of the coating and validate the failure mechanisms that can occur during the growth of the oxide layer formed thermally. Comparing the results obtained, there was a total mass gain of 1.76 mg, where some oxides were formed, and in-residence times of 72 hours, the formation of the oxide layer formed thermally with partial delamination was observed, and at 144 hours, the catastrophic delamination of the coating was observed, being the oxide layer formed thermally a non-protective layer.

Resumen. Este trabajo tiene como finalidad estudiar la degradación de sistemas de recubrimientos Zirconia estabilizada con Ytria con capa de anclaje NiCoCrAlY en un sustrato de acero inoxidable AISI 310 expuestos a altas temperaturas. Para el logro de los objetivos, a las probetas recubiertas se le realizó un análisis termogravimétrico y de calorimetría diferencial de barrido por un tiempo de 144 horas, donde se estudió la ganancia de masa (análisis termogravimétrico) y los posibles eventos térmicos que pueden ocurrir al transcurrir el tiempo de permanencia (calorimetría diferencial de barrido); así como también se realizaron tratamientos térmicos de oxidación isotérmica a 1050°C por tiempos de 72 y 144 horas, con enfriamiento sin choques térmicos. Posteriormente se realizó una caracterización microestructural a las muestras mediante microscopía óptica y microscopía electrónica de barrido con el fin de estudiar la degradación del recubrimiento y validar los mecanismos de fallas que se pueden presentar durante el crecimiento de la capa de óxido formada térmicamente. Comparando los resultados obtenidos, hubo una ganancia de masa total de 1.76 mg, donde se formaron algunos óxidos y en tiempos de permanencia de 72 horas se observó la formación de la capa de óxido formada térmicamente con delaminación parcial y a 144 horas se observó la delaminación catastrófica del recubrimiento, siendo la capa de óxido formada térmicamente una capa no protectora.

Physics-Mathematical Modeling

Influence of the size distribution and shape of the aggregate on the rheology of cement-based mixtures

Influencia de la distribución de tamaño y forma del agregado en la reología de mezclas a base de cemento

J Correa Yepes¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

E-mail: jacorreay@unal.edu.co

Abstract. In this model, after the morphological characterization of the aggregates in particle size distribution, shape, and density and, on the other hand, measurements of viscosity and density in t, it proposes to predict the stress response of creep of a mortar or concrete. Given this, models that cover a physical component through the elastic limit threshold and the gradation factor through the packing factor to predict rheological variables are uncommon in concrete matters. However, when evaluating all the parameters that are developed in the Wu model to calculate the shear stress and comparing it with a rheological analysis using a rheometer, we found specific differences of up to 42%, which does not give very reliable evidence of the representativeness of the model to explain the shear stress response phenomenon derived from the characterizations already mentioned, in this sense, when deconstructing the model, in the elastic limit threshold we see that the model when making a theoretical abstraction to evaluate how the shape of the aggregate interacts with the paste that covers it is not sensitive to the three dimensions of the aggregate, which reduces the representativeness of the shape within the model, and as is known, the shape of the aggregate is a determining factor in the rheological response. Additionally, when reviewing the gradation factor of the model, we found that it is intended to describe the entire particle size distribution through a discrete relationship based on the average size of the distribution, the maximum diameter of the distribution, and the slope of the particle size distribution trend line, according to the theory of Krieger and Dougherty packing factor. In this sense, to reduce this range of uncertainty of the Wu model, it is proposed to initially modify the elastic limit threshold by redefining the assumption of the approach of the interaction between aggregate and cementitious paste, and on the gradation factor side, it was proposed to replace the existing packing factor with the Rosin-Rammler (1980) who proposes a continuous function to describe the particle size distribution and in general increases the representativeness of this distribution by 25% compared to the packing factor. By making these modifications to the general Wu model and evaluating the modified parameters and the new parameters, it was possible to reduce the range of uncertainty between the response of the shear stress model in the Wu model, which was initially at 42% to a difference of 9.3% compared to the rheological measurement by rheometer and in the same sense it was found that at the maximum shear rate of the experiment, the presence of the aggregates increases the shear stress response by 2.8 times, derived from the modification of the specific density of the paste vs. the density of the mixture including the aggregates, which shows that the aggregates are determinants within the rheological performance of a mixture.

Resumen. En este modelo, posterior a la caracterización morfológica de los agregados en distribución de tamaño de partícula, forma y densidad y, por otro lado, mediciones de viscosidad y densidad en la pasta, plantea predecir la respuesta de esfuerzo de fluencia de un mortero o un concreto. Dado esto, modelos que cubran un componente físico mediante el umbral de límite elástico y el factor de gradación mediante el factor de empaquetamiento para predecir variables reológicas, no son muy comunes en materia de concretos. Sin embargo, al evaluar todos los parámetros que se desarrollan en el modelo de Wu para calcular el esfuerzo de

cizalladura y compararlo con un análisis reológico mediante reómetro, encontramos diferencias específicas de hasta el 42%, lo que no da evidencia muy confiable de la representatividad del modelo para explicar el fenómeno de respuesta de esfuerzo de cizalladura derivado de las caracterizaciones ya mencionadas, en este sentido, al deconstruir el modelo, en el umbral de límite elástico vemos que el modelo al hacer una abstracción teórica para evaluar como la forma del agregado interactúa con la pasta que lo cubre, no es sensible a las tres dimensiones del agregado, lo que reduce la representatividad de la forma dentro del modelo, y como es conocido, la forma del agregado es determinante dentro de la respuesta reológica. Adicionalmente al revisar el factor de gradación del modelo encontramos que se pretende describir toda la distribución de tamaño de partícula mediante una relación discreta en función del tamaño promedio de la distribución, el diámetro máximo de la distribución y la pendiente de la línea de tendencia de la distribución de tamaño de partícula, según la teoría del factor de empaquetamiento de Krieger and Dougherty. En este sentido, para reducir este rango de incertidumbre del modelo de Wu, se plantea modificar inicialmente el umbral de límite elástico redefiniendo el supuesto del planteamiento de la interacción entre agregado y pasta cementante y por el lado del factor de gradación se propuso reemplazar el factor de empaquetamiento existente por el modelo de Rosin-Rammler (1980) que plantea una función continua para describir la distribución de tamaño de partícula y en general incrementa la representatividad de esta distribución en un 25% en comparación del factor de empaquetamiento. Al hacer estas modificaciones al modelo de Wu general y evaluar los parámetros modificados y los parámetros nuevos, se logró reducir el rango de incertidumbre entre la respuesta del modelo de esfuerzo de cizalladura en el modelo de Wu que inicialmente estaba en el 42% a una diferencia del 9.3% en comparación con la medición reológica por reómetro y en el mismo sentido se encontró que ante la tasa de cizalladura máxima del experimento, la presencia de los agregados incrementan la respuesta de esfuerzo de cizalladura en 2,8 veces, derivado de la modificación de la densidad específica de la pasta vs la densidad de la mezcla incluyendo los agregados, lo que muestra que los agregados son determinantes dentro del desempeño reológico de una mezcla.

Exploring electrostatic interactions between non-spherical dielectric particles: implications for material design

Explorando las interacciones electrostáticas entre partículas dieléctricas no esféricas: implicaciones para el diseño de materiales

D A Olaya Muñoz¹, J E Molina Mosquera², A V Echeverry¹, J P Hernandez Ortiz¹,
and M O de la Cruz³

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

² Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín, Colombia

³ Northwestern University, Evanston, United States of America

E-mail: daaolayamu@unal.edu.co

Abstract. Polarization effects, often neglected, play a significant role in determining electrostatic interactions between dielectric particles, especially when geometrical anisotropies lead to surface-induced charge segregation; this phenomenon has practical implications in various fields, including self-assembly of nanoparticles, colloidal stability, and the design of functional materials. We use a direct integral formulation for the electrostatic potential to explore geometrically driven particle aggregation, considering dielectric bodies with non-spherical symmetry; by measuring the electrostatic force and energy under vacuum conditions, we demonstrate that breaking the symmetry and altering the close-contact surface between equally charged non-spherical particles can result in attractive regimes at short and long distances. This finding suggests that manipulating particle shape and orientation can be used to control the assembly and stability of colloidal systems; our findings reveal that non-spherical dielectric particle aggregation can be controlled by adjusting their orientation and in-contact surface in dimer and trimer configurations, with potential applications in designing self-assembled systems with tailored properties and developing new strategies for particle sedimentation.

Resumen. Los efectos de polarización, frecuentemente ignorados, juegan un papel significativo al determinar las interacciones electrostáticas entre partículas dieléctricas, especialmente cuando las anisotropías geométricas conducen a la segregación de carga inducida por la superficie; este fenómeno tiene implicaciones prácticas en diversos campos, incluyendo el autoensamblaje de nanopartículas, la estabilidad coloidal y el diseño de materiales funcionales. Utilizando una formulación integral directa para el potencial electrostático, exploramos la agregación de partículas dirigida geoméricamente, considerando cuerpos dieléctricos con simetría no esférica; al medir la fuerza y la energía electrostática en condiciones de vacío, demostramos que romper la simetría y alterar la superficie de contacto cercano entre partículas no esféricas con igual carga puede resultar en regímenes atractivos a distancias cortas y largas. Este hallazgo sugiere que manipular la forma y orientación de las partículas puede ser utilizado para controlar el ensamblaje y la estabilidad de los sistemas coloidales; nuestros resultados revelan que la agregación de partículas dieléctricas no esféricas puede ser controlada ajustando su orientación y superficie de contacto en configuraciones de dímeros y trímeros, con aplicaciones potenciales en el diseño de sistemas autoensamblados con propiedades mejoradas y en el desarrollo de nuevas estrategias para la sedimentación de partículas.

Comparative analysis of compression tests on honeycomb, beetle elytra plate, and biomimetically enhanced beetle elytra plate using Ansys and Abaqus simulations

Análisis comparativo de pruebas de compresión en panel, placa de élitro de escarabajo y placa de élitro de escarabajo mejorada biomiméticamente utilizando simulaciones en Ansys y Abaqus

G O Romero Suarez¹, and D F Villegas Bermudez¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: german2218069@correo.uis.edu.co

Abstract. This project aims to conduct a comprehensive comparative analysis of compression test results for honeycomb structures, beetle elytra plates, and biomimetically enhanced beetle elytra plates. The study uses advanced simulation tools Ansys and Abaqus, implementing periodic boundary conditions to represent the mechanical behavior under compression loads accurately. The primary goal is to validate the simulation results against experimental data and to identify the mechanical performance differences and potential benefits of biomimetic enhancements in beetle elytra plate structures. The study begins with creating detailed finite element models for honeycomb, beetle elytra plates, and biomimetically enhanced beetle elytra plate structures. These models are developed in Ansys and Abaqus, utilizing periodic boundary conditions to replicate these materials' repeating unit cell behavior accurately. The simulations are performed under identical compression loading conditions to ensure a fair comparison. The honeycomb model is designed with hexagonal cells known for their efficient load distribution properties. The material properties are assigned based on standard engineering materials used in honeycomb applications, such as aluminum or composite materials. The beetle elytra plates model is constructed based on detailed morphological studies of beetle elytra, capturing the unique layered structure and microstructural characteristics. The material properties are derived from biological studies that have quantified the mechanical behavior of beetle elytra. The enhanced beetle elytra plate model incorporates biomimetic design principles, such as hierarchical structuring and material grading, to mimic the natural optimization found in beetle elytra. These enhancements aim to improve the beetle elytra plates' overall strength and energy absorption capacity.

Resumen. Este proyecto tiene como objetivo realizar un análisis comparativo exhaustivo de los resultados de las pruebas de compresión para estructuras de panel, placas de élitro de escarabajo y placas de élitro de escarabajo mejoradas biomiméticamente. El estudio utiliza herramientas de simulación avanzadas como Ansys y Abaqus, implementando condiciones de contorno periódicas para asegurar una representación precisa del comportamiento mecánico bajo cargas de compresión. El objetivo principal es validar los resultados de la simulación con datos experimentales e identificar las diferencias en el rendimiento mecánico y los beneficios potenciales de las mejoras biomiméticas en las estructuras de las placas de élitro de escarabajo. El estudio comienza con la creación de modelos de elementos finitos detallados para estructuras de panel, placas de élitro de escarabajo y placas de élitro de escarabajo mejoradas biomiméticamente. Estos modelos se desarrollan en Ansys y Abaqus, utilizando condiciones de contorno periódicas para replicar con precisión el comportamiento de la celda unitaria repetitiva de estos materiales. Las simulaciones se realizan bajo condiciones de carga de compresión idénticas para asegurar una comparación justa. El modelo de panel

está diseñado con celdas hexagonales, que son conocidas por sus propiedades eficientes de distribución de carga. Las propiedades del material se asignan en función de los materiales de ingeniería comunes utilizados en aplicaciones de panal, como el aluminio o los materiales compuestos. El modelo de las placas de élitro de escarabajo se construye basado en estudios morfológicos detallados de los élitros de escarabajo, capturando la estructura única en capas y las características microestructurales. Las propiedades del material se derivan de estudios biológicos que han cuantificado el comportamiento mecánico de los élitros de escarabajo. El modelo de las placas de élitro de escarabajo mejorada incorpora principios de diseño biomimético, como la estructuración jerárquica y la gradación de materiales, para imitar la optimización natural encontrada en los élitros de escarabajo. Estas mejoras están dirigidas a mejorar la resistencia general y la capacidad de absorción de energía de las placas de élitro de escarabajo.

Simulation of phase change materials for a dual heating and cooling system in extreme climates of Canada

Simulación de materiales de cambio de fase para un sistema dual de calefacción y refrigeración en climas extremos de Canadá

G O Romero Suarez¹, and M Lombana²

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: german2218069@correo.uis.edu.co

Abstract. This research focuses on the simulation of phase change materials for a dual heating and cooling system designed to operate in the extreme climates of Canada, with temperature ranges from -40°C to 40°C . The selected phase change material is paraffin wax with a melting point of 25°C . The system utilizes concentric stainless steel tubes containing phase-change materials and air for winter operations and phase-change materials and thermal oil for summer operations. In winter, the system preheats air using solar energy captured by a linear Fresnel lens. The preheated air then enters the conventional electric heating system of the house, reducing energy consumption and improving efficiency. The phase change materials absorb excess heat during sunny periods and release it when the solar input is insufficient, ensuring a stable preheated air supply. During summer, the system uses the thermal oil heated by solar energy to drive a lithium bromide absorption chiller, producing cold air for cooling. The phase change materials play a crucial role in storing thermal energy, allowing the system to maintain cooling even during periods of low solar insolation. The simulations were conducted using Ansys Fluent, focusing on the system's performance in both summer and winter. The study involved detailed modeling of heat transfer processes within the phase change materials, air, and thermal oil and the overall system efficiency. The simulations accounted for the transient behavior of the phase change materials as they undergo phase changes and the impact of varying environmental conditions.

Resumen. Esta investigación se centra en la simulación de materiales de cambio de fase para un sistema dual de calefacción y refrigeración diseñado para operar en los climas extremos de Canadá, con rangos de temperatura de -40°C a 40°C . El material de cambio de fase seleccionado es cera de parafina con un punto de fusión de 25°C . El sistema utiliza tubos concéntricos de acero inoxidable que contienen materiales de cambio de fase y aire para operaciones en invierno, y materiales de cambio de fase y aceite térmico para operaciones en verano. En invierno, el sistema precalienta el aire utilizando energía solar captada por una lente de Fresnel lineal. El aire precalentado luego entra en el sistema de calefacción eléctrico convencional de la casa, reduciendo el consumo de energía y mejorando la eficiencia. El material de cambio de fase absorbe el exceso de calor durante los periodos soleados y lo libera cuando la entrada solar es insuficiente, asegurando un suministro estable de aire precalentado. Durante el verano, el sistema utiliza el aceite térmico calentado por la energía solar para alimentar un enfriador de absorción de bromuro de litio, produciendo aire frío para fines de refrigeración. Las simulaciones se realizaron utilizando Ansys Fluent, enfocándose en el rendimiento del sistema tanto en condiciones de verano como de invierno. El estudio involucró el modelado detallado de los procesos de transferencia de calor dentro del material de cambio de fase, el aire y el aceite térmico, así como la eficiencia general del sistema. Las simulaciones consideraron el comportamiento transitorio del material de cambio de fase a medida que experimenta cambios de fase y el impacto de las condiciones ambientales variables.

**Science, Engineering, Technology, and Innovation for Social
Inclusion**

Exploring the Impact of synthesis on the properties of simple oxides: a study on iron, titanium, calcium, niobium, and other elements

Exploración del impacto de la síntesis en las propiedades de óxidos simples: un estudio sobre hierro, titanio, calcio, niobio y otros elementos

M Rincón Joya¹, E C Paris², and J J Barba Ortega¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

² Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, São Carlos, Brazil

E-mail: mrinconj@unal.edu.co

Abstract. This detailed study investigates how synthesis influences a broad range of properties of simple oxides, such as iron, titanium, calcium, and niobium, among others. Changes in crystalline structure, surface morphology, and nanostructure formation are examined in detail, along with their influence on electrical conductivity, magnetic susceptibility, and optical properties, including UV-VIS and Raman analyses. This comprehensive analysis provides a deep understanding of the relationship between synthesis and the properties of simple oxides, highlighting their potential relevance in a wide variety of technological and scientific applications.

Resumen. Este estudio detallado investiga cómo la síntesis influye en una amplia gama de propiedades de óxidos simples, como hierro, titanio, calcio, niobio, entre otros. Se examinan en detalle los cambios en la estructura cristalina, la morfología de la superficie y la formación de nanoestructuras, junto con su influencia en la conductividad eléctrica, la susceptibilidad magnética y las propiedades ópticas, incluidos los análisis UV-VIS y Raman. Este análisis integral proporciona una comprensión profunda de la relación entre la síntesis y las propiedades de los óxidos simples, destacando su relevancia potencial en una amplia variedad de aplicaciones tecnológicas y científicas.

Evaluation of the compressive strength of bone cements with antibiotics

Evaluación de la resistencia a la compresión de cementos óseos con antibióticos

I S Medina Garcia¹, O A González Estrada², N E Molina Miranda¹, D F Rincón Ovalle¹, A F Sáenz Suarez³, M I Sáenz Suarez³, R E Castañeda Uribe¹, L A Ramírez Gómez¹, and L E Garzón Domínguez¹

¹ Líneas Hospitalarias SAS, Girón, Colombia

² Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

³ IMAO Proyectos e Ingeniería SAS, Bucaramanga, Colombia

E-mail: aux.proyectoscid@lineashospitalarias.com

Abstract. This study investigated the compressive strength of different mixtures of low-viscosity G3 bone cement (Brand G21) with antibiotics, comparing bone cement without antibiotics against mixtures containing vancomycin powder and liquid gentamicin. The compression tests were conducted using an MTS Bionix hydraulic press, and the results were analyzed using an analysis of variance to determine significant differences between the mixtures. The results showed that the bone cement mixtures without antibiotics exhibited the highest compressive strength, while those with liquid gentamicin showed the lowest resistance. Mixtures with vancomycin powder also showed significant differences but mostly met the minimum strength standard established by ASTM F451, except for the mixture with 4 grams of vancomycin. The discussion highlighted how these results align with previous research and analyzed the feasibility of using these mixtures in practical applications. The conclusions emphasize the novel character of the study, confirming the achievement of the proposed objectives, and suggesting areas for future research. The mixtures with liquid gentamicin did not meet the minimum strength standard, which limits their current clinical application. This work provides an important basis for improving bone cements with antibiotics, proposing new directions to optimize their use in medical practices.

Resumen. Este estudio investigó la resistencia a la compresión de diferentes mezclas de cemento óseo de baja viscosidad G3 (Marca G21) con antibióticos, comparando un cemento óseo sin antibiótico con mezclas que contienen vancomicina en polvo y gentamicina líquida. Las pruebas de compresión se realizaron utilizando una prensa hidráulica marca MTS Bionix y los resultados se analizaron mediante análisis de varianza para determinar diferencias significativas entre las mezclas. Los resultados mostraron que las mezclas de cemento óseo sin antibiótico presentaron la mayor resistencia a la compresión, mientras que las mezclas con gentamicina líquida mostraron la menor resistencia. Las mezclas con vancomicina en polvo también presentaron diferencias significativas, pero en su mayoría cumplieron con la resistencia mínima establecida por la norma ASTM F451, a excepción de la mezcla con 4 gramos de vancomicina. En la discusión, se destacó cómo estos resultados concuerdan con investigaciones previas y se analizó la viabilidad de utilizar estas mezclas en aplicaciones prácticas. Las conclusiones enfatizan el carácter novedoso del estudio, confirmando el cumplimiento de los objetivos planteados y sugiriendo áreas para futuras investigaciones. Las mezclas con gentamicina líquida no cumplieron con la norma de resistencia mínima, lo que limita su aplicación clínica actual. Este trabajo proporciona una base importante para la mejora de cementos óseos con antibióticos, proponiendo nuevas direcciones para optimizar su uso en prácticas médicas.

Construction and demolition waste as a solution to environmental and agricultural challenges

Los residuos de construcción y demolición como solución a problemas ambientales y agrícolas

E Mejía Restrepo¹

¹ Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín, Colombia

E-mail: erica.mejia@pascualbravo.edu.co

Abstract. Construction and demolition waste represents a significant environmental issue, generating three times more solid waste than in urban areas. Improper disposal of construction and demolition waste leads to several environmental impacts, including (i) inappropriate dumping of waste, (ii) contamination of water sources, (iii) loss of ecosystem services due to soil and vegetation degradation, and (iv) high waste volumes. One alternative is to utilize construction and demolition waste as recycled aggregates, thereby reducing the demand for virgin materials in the construction industry. However, particles smaller than 4 mm exhibit poor performance and must be discarded. Additionally, urban areas generate substantial volumes of organic waste, which is often improperly managed and ends up in landfills, thus wasting its potential use in composting. Soil acidity is a critical factor that diminishes the productivity of Colombian soils, reducing nutrient availability and causing aluminum ion toxicity. This issue has been exacerbated by agricultural practices, where human activity has accelerated soil acidification without regard for ecological impacts. Systemic pesticides, which are absorbed by plants and distributed throughout their tissues, are effective against pests but are toxic even in small doses and persist in soil and water, thereby contributing to soil acidification. Soil, particularly concrete, contains high levels of calcium and silicon in the form of carbonates and hydrated calcium silicates, which can serve as essential nutrients to regulate soil acidity and enhance plant resistance to pests. Recent studies have demonstrated using residual concrete particles smaller than 4 mm as a soil conditioner, combined with mineral-solubilizing microorganisms. This combination provides nutrients, controls soil acidity, avoids toxicity, and improves soil quality, facilitating its use in agriculture or landscaping. However, collaboration with experts in artificial intelligence and the Internet of Things (IoT) is required to simulate processes and predict conditions in various tropical soils. Integrating advanced technologies and sustainable practices can offer innovative solutions for waste management and enhance agricultural productivity, thereby contributing to sustainable development.

Resumen. Los residuos de construcción y demolición representan un problema ambiental significativo, generando tres veces más residuos sólidos que las áreas urbanas. La disposición irregular de estos residuos produce impactos como: (i) vertimientos inapropiados, (ii) contaminación de fuentes de agua, (iii) pérdida de servicios ambientales debido a la degradación del suelo y la vegetación, y (iv) alto volumen de residuos. Una alternativa es utilizar los residuos de construcción y demolición como áridos reciclados, reduciendo así la demanda de materia prima en la construcción. Sin embargo, las partículas menores a 4 mm deben ser descartadas por su bajo desempeño. Además, en zonas urbanas se generan grandes volúmenes de residuos orgánicos que, en muchos casos, no son gestionados adecuadamente y terminan en rellenos sanitarios, desaprovechando su uso potencial en compostaje. La acidez del suelo es un factor clave que disminuye la productividad de los suelos colombianos, reduciendo la disponibilidad de nutrientes y causando toxicidad por iones de aluminio. Este fenómeno se ha intensificado con la agricultura, donde el hombre, sin considerar los impactos ecológicos, ha acelerado la acidificación del suelo. Los pesticidas sistémicos, absorbidos por

la planta y distribuidos por sus tejidos, son efectivos contra plagas, pero son tóxicos incluso en pequeñas dosis y persistentes en el suelo y el agua, contribuyendo a la acidificación del suelo. Los residuos de construcción y demolición, especialmente el concreto, contienen altos niveles de calcio y silicio en forma de carbonatos y silicatos de calcio hidratados, que pueden regular la acidez del suelo y fortalecer las plantas contra plagas. En estudios recientes, se ha utilizado concreto residual inferior a 4 mm como acondicionador del suelo, combinado con microorganismos solubilizadores de minerales. Esta combinación aporta nutrientes, controla la acidez, no genera toxicidad y mejora la calidad del suelo, permitiendo su uso en agricultura o paisajismo. Sin embargo, es necesario trabajar con expertos en inteligencia artificial para emular procesos y predecir condiciones en diferentes suelos tropicales. Esta integración de tecnologías avanzadas y prácticas sostenibles puede ofrecer soluciones innovadoras para la gestión de residuos y la mejora de la productividad agrícola, contribuyendo así al desarrollo sostenible.

Education in Science, Engineering, and Technology

Gender stereotypes in areas of science, technology, engineering, and mathematics perceived by eleventh-grade adolescent women in an educational institution in Bello, Colombia

Estereotipos de género en áreas de las ciencias, las tecnologías, las ingenierías y las matemáticas percibidos por las mujeres adolescentes de undécimo grado en una institución educativa de Bello, Colombia

G A Mayorga Martínez¹, L M Dueñas Ramirez², S L Gómez Rodríguez¹, and E Muslaco Díaz¹

¹ Corporación Universitaria Minuto de Dios, Bello, Colombia

² Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Bucaramanga, Colombia

E-mail: gloria.mayorga-m@uniminuto.edu.co

Abstract. This study addresses the underrepresentation of women in science, technology, engineering, and mathematics and how gender stereotypes affect the perceptions and decisions of adolescent girls. The research focuses on ten adolescents from the Federico Sierra Arango educational institution in the municipality of Bello, Antioquia, Colombia, examining the gender stereotypes in their personal and family environments and the possible impact of choosing a higher education program in these areas. Using a phenomenological approach, qualitative techniques such as learning logs and workshops were used to collect information. The research highlights the importance of creating more inclusive environments and promoting gender equality in access to higher education. In the personal environment, perceptions were built around the self-concept influenced by gender stereotypes expressed through criticism or comments received; the participants were able to understand that many of their ideas were unfounded by society or culture, which had been planted in their expectations about the characteristics of what a woman should be and what she should not be, as well as two perceptions were identified: 1. rejection and 2. acceptance, in that rejection represents denial or disapproval of themselves in certain aspects, such as their traits. Physical or personal preferences due to social pressure and the generation of emotional discomforts such as sadness or loneliness. Acceptance implies the ability to accept and value themselves as they are despite the strong external comments and expectations in their environment. Several participants recognized the challenges this generated for them amid the influence of the stereotypes. In the family environment, gender stereotypes have a significant burden on the maternal figure, to whom the patriarchal system has historically placed responsibilities in the home and care, traditional roles assigned to women. The perceptions were related to the decisions or directions of their life projects that, without realizing it, played an important role in them. Some participants expressed desires to fulfill family ideals, such as having a big house and a family instead of following their aspirations; others expressed the desire to do what they like and not what others expect, such as studying and reading laws. Or be businesswomen. Thus, two types of gender roles were identified: related to domestic work and 2. associated with the parent-child bond. Regarding domestic work, most adolescent girls perceive the presence of traditional gender expectations, where women are expected to get married, have children, and be housewives or "protectors of the home." Some participants mentioned that men are expected to be the providers and make the main decisions in their families. Likewise, the family often exerts pressure due to their physical appearance and how they perceive themselves. Regarding the parent-child bond, women have a significant role in the mother-daughter or grandmother-granddaughter relationship by having greater closeness to the men in their families. It is concluded that the persistence of traditional gender stereotypes in the family environment also affects the personal environment; some participants expressed expectations about gender roles and limitations perceived by women. However, in

cases of family support towards the free choice of career and the presence of female references who challenge these stereotypes, it could favor and strengthen the interest of adolescent participants in science, technology, engineering, and mathematics areas. Grandmothers and mothers appear to have a significant influence in transmitting these gender expectations to participants.

Resumen. Este estudio aborda la subrepresentación de mujeres en las áreas de ciencias, tecnología, ingeniería y matemáticas y cómo los estereotipos de género afectan las percepciones y decisiones de las adolescentes. La investigación se centra en 10 adolescentes de la Institución educativa Federico Sierra Arango del municipio de Bello, Antioquia, Colombia, examinando los estereotipos de género presentes en sus entornos personal y familiar, así como de la posible incidencia la elección de un programa de educación superior en estas áreas. Mediante un enfoque fenomenológico, se emplearon técnicas cualitativas como bitácoras de aprendizaje y talleres para recolectar la información. La investigación subraya la importancia de crear entornos más inclusivos y de fomentar la igualdad de género en el acceso a la educación superior. En el entorno personal, se construyeron percepciones entorno al autoconcepto influenciado por estereotipos de género expresados mediante críticas o comentarios recibidos, las participantes pudieron comprender que muchas de sus ideas eran infundadas por la sociedad o la cultura, que venía sembrando en ellas unas expectativas sobre las características de lo que debería ser una mujer y lo que no debería ser, así como se identificaron dos percepciones: 1. de rechazo y 2. de aceptación, en cuanto al rechazo representa negación o desaprobación de sí mismas en ciertos aspectos, como sus rasgos físicos o preferencias personales debido a la presión social, así como la generación de malestar emocional como tristeza o soledad. La aceptación, implica la capacidad de aceptarse y valorarse a sí mismas tal y como son a pesar de los comentarios y expectativas externas que son fuertes en su entorno, varía de las participantes reconoció los desafíos que esto generaba para ella en medio de la influencia de los estereotipos. En el entorno familiar, los estereotipos de género tienen una carga significativa en la figura materna, a quien históricamente el sistema patriarcal ha depositado responsabilidades en el hogar y cuidado, roles tradicionales asignados a la mujer. Las percepciones estuvieron relacionadas en cuanto a las decisiones o direcciones de sus proyectos de vida que sin darse cuenta juegan un papel importante en ellas. Algunas participantes expresaron deseos de cumplir los ideales familiares como tener una casa grande y una familia en lugar de seguir sus propias aspiraciones, otras manifestaron el deseo de poder hacer lo que les gusta y no lo que otros esperan de ellas, como estudiar, leer leyes o ser empresarias. Así se identificaron 2 tipos de roles de género: relacionada con las labores domésticas y 2. con relación al vínculo parento-filial. En cuanto a las labores domésticas, la mayoría de las adolescentes perciben la presencia de expectativas tradicionales de género, donde se espera que las mujeres se casen, tengan hijos y sean amas de casa o "protectoras del hogar". Algunas participantes mencionaron que en sus familias se espera que los hombres sean los proveedores y tomen las decisiones principales. Así mismo, la familia en muchas ocasiones es quien ejerce presión por el aspecto físico y la manera en la que ellas se autoperciben. En cuanto al vínculo parento-filial, nuevamente las mujeres son las que tiene un gran protagonismo respecto a la relación madre-hija o abuela-nieta al tener una mayor cercanía respecto con los hombres de sus familias. Se concluye que la persistencia de estereotipos de géneros tradicionales en el entorno familiar inciden también en el entorno personal, algunas participantes manifestaron expectativas sobre roles de género limitaciones percibidas por las mujeres, sin embargo, también en casos de apoyo familiar hacia la libre elección de carrera y la presencia de referentes femeninos que desafían estos estereotipos lo que podría favorecer y fortalecer el interés de las participantes adolescentes en áreas de las ciencias, tecnología, ingeniería y matemáticas. Las abuelas y las madres parecen tener una influencia significativa en la transmisión de estas expectativas de género a las participantes.

Gender stereotypes were perceived in science, technology, engineering, and mathematics by eleventh-grade adolescent women and professionals in their educational and work fields in Bello, Colombia

Estereotipos de género percibidos en áreas de las ciencias, las tecnologías, las ingenierías y las matemáticas por mujeres adolescentes de undécimo grado y profesionales relacionados con su ámbito educativo y laboral en Bello, Colombia

G A Mayorga Martínez¹, S L Gómez Rodríguez¹, L M Dueñas Ramírez², and E Muslaco Díaz¹

¹ Corporación Universitaria Minuto de Dios, Bello, Colombia

² Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Bucaramanga, Colombia

E-mail: gloria.mayorga-m@uniminuto.edu.co

Abstract. The persistence of the gender gap within the Science, Technology, Engineering, and Mathematics disciplines poses a significant challenge to societal advancement. Despite concerted efforts towards inclusivity, women continue to be underrepresented in these domains, a phenomenon attributed mainly to entrenched gender stereotypes and societal constructs. This study employs a mixed-method, statistical approach to explore the influence of gender stereotypes on women employed in Science, Technology, Engineering, and Mathematics professions and high school adolescents navigating educational and vocational pathways. Our findings illuminate pervasive gender biases within educational settings, wherein female students exhibit heightened comfort and engagement under the tutelage of female instructors. Conversely, male-dominated environments engender feelings of insecurity and objectification among female participants. Additionally, the research further unveils the influential role of male educators in perpetuating gender norms and shaping the academic experiences and career aspirations of female students. This can ultimately hinder their self-perception of competence and discourage them from pursuing Science, Technology, Engineering, and Mathematics fields despite proven abilities in these subjects. To mitigate gender disparities in Science, Technology, Engineering, and Mathematics, the study advocates cultivating diverse role models and fostering inclusive learning environments. This will empower girls to pursue their academic and professional aspirations in these domains, ultimately contributing to a more equitable and prosperous society.

Resumen. La persistencia de la brecha de género dentro de las disciplinas de ciencia, tecnología, ingeniería y matemáticas plantea un desafío importante para el avance social. A pesar de los esfuerzos concertados para lograr la inclusión, las mujeres siguen estando subrepresentadas en estos ámbitos, un fenómeno que se atribuye en gran medida a estereotipos de género y construcciones sociales arraigados. Este estudio emplea un enfoque estadístico de métodos mixtos para explorar la influencia de los estereotipos de género en las mujeres empleadas en profesiones de ciencia, tecnología, ingeniería y matemáticas y en los adolescentes de secundaria que navegan por caminos educativos y vocacionales. Nuestros hallazgos iluminan los prejuicios de género generalizados dentro de los entornos educativos, donde las estudiantes exhiben una mayor comodidad y compromiso bajo la tutela de instructoras. Por el contrario, los entornos dominados por hombres engendran sentimientos de inseguridad y cosificación entre las participantes femeninas. Además, la investigación revela aún más el papel influyente de los educadores masculinos en la perpetuación de las normas de género, la

configuración de las experiencias académicas y las aspiraciones profesionales de las estudiantes. En última instancia, esto puede obstaculizar su autopercepción de competencia y disuadirlos de dedicarse a campos de la ciencia, tecnología, ingeniería y matemáticas, a pesar de sus habilidades demostradas en estas materias. Para mitigar las disparidades de género en ciencia, tecnología, ingeniería y matemáticas, el estudio se enfoca por generar diversos modelos a seguir y fomentar entornos de aprendizaje inclusivos a fin de empoderar a las niñas para que persigan sus aspiraciones académicas y profesionales en estos ámbitos y, en última instancia, contribuirá a una sociedad más equitativa y próspera.

Innovation in global agriculture: a review of digital tools for application in Colombia

Innovación global en agricultura: una revisión de tecnologías digitales para su aplicación en Colombia

C U Tirado Murcia¹

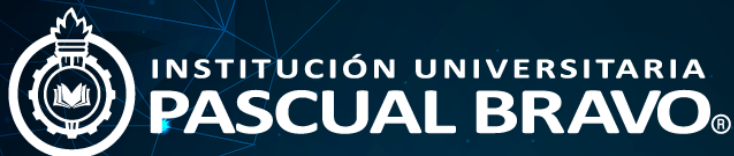
¹ Universidad EAFIT, Medellín, Colombia

E-mail: cutiradom@eafit.edu.co

Abstract. Precision agriculture, aimed at optimizing resource use and maximizing yields, has generated great interest within the Colombian agricultural community. However, the agricultural sector remains relatively uncompetitive because its study and application are still in a very early stage. There is a need for greater understanding and dissemination of available technologies and their potential application within the country's agricultural context. This work provides an overview of the available technologies and their potential application in Colombian agriculture, particularly in the stages of data acquisition and processing to extract information; these are crucial aspects for improving decision-making focused on the productivity and sustainability of plantations. Tools such as unmanned aerial vehicles, agricultural machinery, meteorological sensors, and cameras for collecting data with a geospatial component are highlighted. The physical principles behind these technologies are crucial for understanding their functionality and applicability in the agricultural field. Various data processing techniques were also identified, such as machine learning algorithms for predicting and classifying elements of agricultural interest and geo-statistical modeling of physical variables of the atmosphere and soil. Additionally, a thematic review of existing works was conducted, and new lines of research were identified for future technological innovation in the agricultural sector.

Resumen. La agricultura de precisión, al buscar optimizar el uso de recursos y maximizar los rendimientos, ha generado un gran interés en la comunidad agrícola colombiana. Sin embargo, el sector agropecuario aún no es muy competitivo debido a que su estudio y aplicación están en una etapa muy incipiente. Se necesita una mayor comprensión y difusión de las tecnologías disponibles y su potencial aplicación en el contexto agrícola del país. Este trabajo proporcionará un panorama sobre las tecnologías disponibles y su potencial aplicación en la agricultura colombiana, particularmente en las etapas de adquisición de datos y su procesamiento para extraer información, aspectos cruciales para mejorar la toma de decisiones enfocadas a la productividad y la sostenibilidad de las plantaciones. Se destacan herramientas como vehículos aéreos no tripulados, maquinaria agrícola, sensores meteorológicos y cámaras para recopilar datos con un componente geo-espacial. Los principios físicos detrás de estas tecnologías son cruciales para comprender su funcionamiento y aplicabilidad en el ámbito agrícola. También se hallaron diversas técnicas de procesamiento de datos, como algoritmos de machine learning para la predicción y clasificación de elementos de interés agrícola y el modelado geo-estadístico de variables físicas de la atmosfera y del suelo. Además, se generó un reconocimiento temático sobre los trabajos realizados y se encontraron nuevas líneas de investigación a para desarrollar a futuro en la innovación tecnológica en el sector agropecuario.

Partners



LOYOLA

**IOP
science**

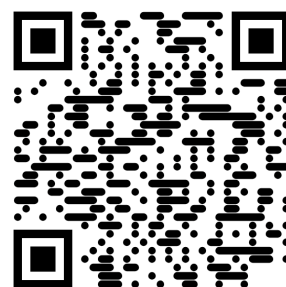
nano4ENERGY



Sponsors



Foristom
Foundation



VIWMSSSE