

Diseño del sistema de elución y filtrado de una planta de extracción

Juan David Argüello Plata

Universidad Industrial de Santander

Facultado de Ingenierías Físicomecánicas

Escuela de Ingeniería Mecánica

Maestría en Ingeniería Mecánica

2020

Diseño del sistema de elución y filtrado de una planta de extracción

Autor

Juan David Argüello Plata

Ingeniero Mecánico

Propuesta de investigación presentada como requisito parcial para optar al
título de Magíster en Ingeniería Mecánica

Director

Omar Armando Gélvez Arocha

Ingeniero Mecánico M.Sc.

Codirectores

Jairo René Martínez Morales

Químico PhD.

Diego Camilo Durán García

Químico PhD.

Universidad Industrial de Santander

Facultado de Ingenierías Físicomecánicas

Escuela de Ingeniería Mecánica

Maestría en Ingeniería Mecánica

2020

PROPUESTA DE INVESTIGACIÓN

DISEÑO DEL SISTEMA DE ELUCIÓN Y FILTRADO DE UNA PLANTA DE EXTRACCIÓN

Resumen del trabajo

Preguntas de investigación	¿ Qué nivel de precisión se podría obtener al implementar una metodología de diseño que emplee los métodos de <i>elementos discretos</i> (DEM) y <i>volúmenes finitos</i> (FVM), para el análisis del comportamiento fluidodinámico durante la etapa de filtrado de una planta de extracción basada en el método de dispersión de la matriz en fase sólida - MSPD?
Tipo de investigación:	Trabajo de investigación
Costo Total:	\$ 112'393.000
Plazo:	12 meses
Programa Nacional de Ciencia y Tecnología:	Colombia Científica: Bio-Reto XXI - 15:50. Proyecto 3

Breve reseña de la propuesta:

El programa Bio-Reto XXI - 15:50 es un proyecto avalado por Colciencias que busca el desarrollo social y productivo del país a partir de la implementación de programas *I+D+i*. Se trata de la construcción de una biofábrica destinada a la producción y comercialización de aceite esencial, extracto y material de compostaje. La presente propuesta se centra en el diseño y construcción de la planta de extracción perteneciente a la cadena productiva de la biofábrica.

Índice

1. Enfoque del problema	5
2. Justificación del problema	7
3. Marco Teórico	8
3.1. Extracto	8
3.1.1. Flavonoides	8
3.1.2. Plantas endémicas	9
3.2. Método de <i>Dispersión de la Matriz en Fase Sólida</i> - MSPD	10
3.2.1. Factores a considerar en la extracción MSPD	11
3.3. Sistemas de extracción	12
3.3.1. Sistemas convencionales → <i>Extracción sólido - líquido</i>	12
3.3.1.1. Rotocel	13
3.3.1.2. Carrousel	14
3.3.1.3. Pretratamiento	15
3.3.1.4. Recuperación del solvente	16
3.3.2. Extracción con Fluido Supercrítico (SFE)	16
3.4. Métodos Numéricos	18
3.4.1. <i>Método de Volúmenes Finitos</i> - FVM	18
3.4.1.1. Análisis unidimensional estacionario - 1D	20
3.4.1.2. <i>Solvers</i>	22
3.4.1.3. Metodologías de verificación y validación	22
3.4.1.4. Análisis bidimensional estacionario - 2D	23
3.4.2. <i>Método de elementos discretos</i> - DEM	24
3.4.2.1. Detección de una colisión	25
3.4.3. CFD-DEM	26
3.4.3.1. Fase del solvente	26
4. Estado del Arte	28
4.1. Análisis, comentarios y proyecciones	34
5. Formulación de la Pregunta e Hipótesis	35
5.1. Pregunta de investigación	35
5.2. Hipótesis	35
6. Objetivos	36
6.1. Objetivo general	36
6.2. Objetivos específicos	36

7. Alcance y resultados	37
7.1. Propiedades termodinámicas del solvente	37
7.2. Construcción del modelo CFD	37
7.3. Pruebas experimentales	37
7.4. Planos constructivos	38
8. Gestión del proyecto	39
8.1. Actividades	39
8.1.1. Planteamiento de la Investigación (PI)	39
8.1.2. Diseño conceptual (DC)	39
8.1.3. Diseño funcional (DF)	39
8.1.4. Modelo CFD	40
8.1.5. Pruebas experimentales (PE)	40
8.1.6. Planos constructivos (PC)	40
8.1.7. Redacción tesis (RT)	40
8.2. Diagrama de Gantt	40
8.3. Presupuesto	42

Índice de figuras

1. Cadena productiva de la biofábrica.	5
2. Extracto de <i>Lippia alba</i>	8
3. Estructura química de un flavonoide.	8
4. Método MSPD ^[1]	10
5. Extractor Rotocel.	13
6. Interior de un extractor tipo carrousel de doble piso ^[2]	14
7. Segmento del fondo de la bandeja de tamiz de un extractor Carrousel ^[2]	14
8. Sistemas de pretratamiento mecánico.	15
9. Flujo de trabajo de la extracción con CO_2 supercrítico.	16
10. Diagrama termodinámico T-S.	17
11. Discretización del dominio (malla cartesiana).	19
12. Tipos de mallas.	20
13. Problema unidimensional.	21
14. Método de validación simple.	22
15. Discretización dominio bidimensional.	23
16. Comparación entre metodologías de análisis de partículas para una esfera suave deformada en un plano: situación física real (izquierda), modelo analizado con el método de elementos finitos (centro) y modelo con el método de elementos discretos (derecha)	24
17. Detección de colisión entre partículas.	25
18. Esquema de la aproximación por malla dual para la búsqueda de partículas vecinas en un fluido.	27

19. Cronograma 2020	41
-------------------------------	----

1. Enfoque del problema

Existen en el mercado actual productos de origen biológico cuya obtención parte de un mismo proceso productivo para sectores industriales como lo son el sector salud, agropecuario y cosmético. Estos bioproductos presentan una gran demanda en el mercado, tanto nacional como internacional, debido a que cuentan con diferentes propiedades químicas que los hacen competitivos frente a su contraparte sintética.

Se han realizado múltiples estudios científicos a las propiedades biológicas de la flora colombiana referente a las hojas, tallos, raíces, semillas y flores de distintas especies vegetales; destacándose los metabolitos y flavonoides, encontradas en hojas y flores, que presentan actividad antimicrobiana, antibacterial, antifúngica, antioxidante e insecticida, por mencionar algunas.

Por estas razones, Colciencias, a través de la convocatoria de Colombia Científica, avaló el programa 'Bio-Reto XXI - 15:50', que se trata de un proyecto que busca impulsar la producción a mediana y gran escala de ingredientes naturales, tanto a nivel nacional como internacional, para mejorar la competitividad de diferentes industrias y directamente la economía del país. Básicamente, se trata del diseño y construcción de una biofábrica destinada a la producción de *aceite esencial* y *extracto* de origen vegetal, como se aprecia en la Figura 1.

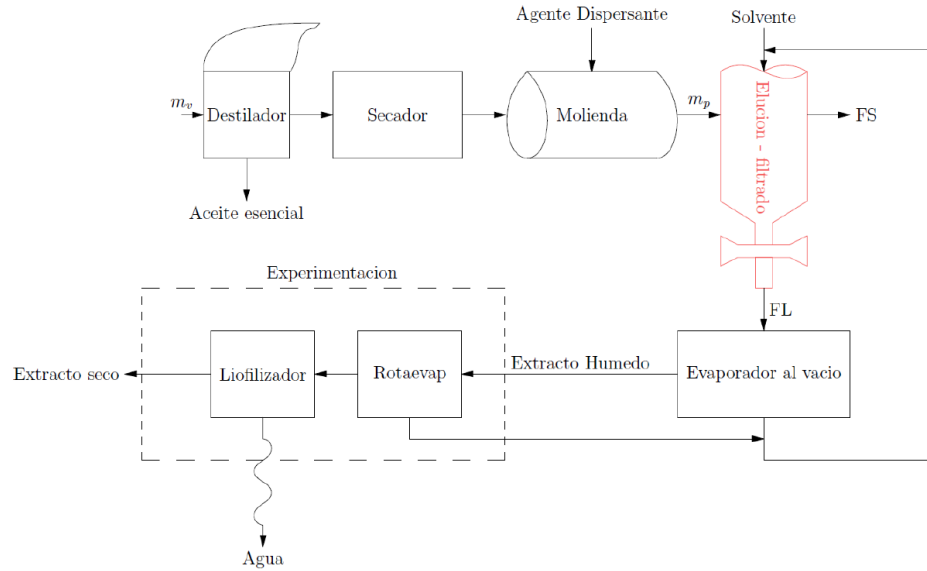


Figura 1: Cadena productiva de la biofábrica.

De la Figura 1:

- $m_v \rightarrow$ Material vegetal.
- $m_p \rightarrow$ Material pulverizado (mezcla entre el material vegetal con el agente dispersante).
- $FS \rightarrow$ Fase sólida. Corresponde al residuo del material pulverizado después de la extracción.
- $FL \rightarrow$ Fase líquida. Corresponde a la mezcla líquida homogénea entre el solvente y el extracto.

El *objeto* de estudio del presente trabajo se centra en el sistema de elución y filtrado de la planta de extracción, que tiene por *objetivo* separar el extracto del material vegetal pulverizado.

2. Justificación del problema

La metodología de extracción que se busca implementar en la planta está basada en el método de *dispersión de la matriz en fase sólida* - MSPD. En la literatura está reportado que esta técnica extractiva presenta problemas durante la etapa de elución debido a la necesidad de emplear presurización externa al solvente para disminuir el tiempo de operación^[3]; problema que persistió en estudios de escalabilidad ^[4, 5] y en una patente de invención ^[6].

Debido a ello, se propone una investigación enfocada en esta etapa del proceso extractivo que concluya con el diseño de un prototipo a escala de esta etapa.

3. Marco Teórico

3.1. Extracto

El extracto es una sustancia procedente de un tejido orgánico que se compone de *metabolitos* y *flavonoides* (ver Figura 3).



Figura 2: Extracto de *Lippia alba*.

Los extractos se utilizan como materias primas para la elaboración de productos de consumo en diferentes industrias. La actividad biológica del extracto depende tanto de su procedencia como del tipo de solvente empleado durante el proceso de extracción.

3.1.1. Flavonoides

Se trata de sustancias fenólicas aisladas de una amplia gama de plantas vasculares, con más de 8000 compuestos conocidos [7].

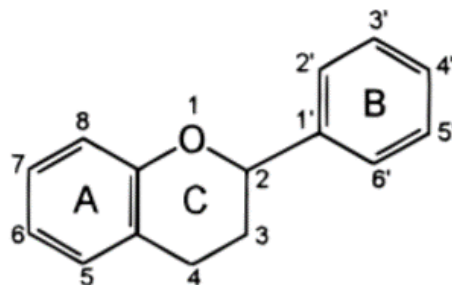


Figura 3: Estructura química de un flavonoide.

Estos compuestos tienen aplicaciones como: antioxidante, antibacterial, antifúngica, insecticida y plagicida [7].

3.1.2. Plantas endémicas

El tipo de especie define la actividad biológica del extracto obtenido. Un resumen de las plantas endémicas que se procesarían en la biofábrica, se puede apreciar en el Cuadro 1.

Especie vegetal	Actividad biológica	Composición Química	Aplicaciones
<i>Lippia origanoides</i>	Actividad antimicrobiana	Carvacrol, γ -terpineno, timol	Alta actividad antioxidante y efectividad contra control de plagas.
	Actividad antifúngica	Timol, O-acetiltimol, O-cimeno	Efectivo contra <i>P. cinnamomi</i> .
<i>Lippia canescens</i>	Baja actividad antiproliferativa	Flavonoides: Flavonas	N/A
<i>Turnera diffusa</i>	Actividad antibacteriana	Extracto de hexano	Efectivo contra bacterias grampositivas y gramnegativas
	N/A	óxido de cariofileno, cariofileno, γ -cadineno, elemeno, 1,8-cineol	Se utiliza como brebaje, ingrediente para licores
	N/A	N/A	Tratamiento de úlceras gástricas.
<i>Cordia curassavica</i>	Actividad antibacteriana y antifúngica	4-methyl, 4-ethenyl-3-(1-methyl ethenyl)-1-(1-methyl methanol) cyclohexano, β -Eudesmol, Spathulenol, Cadina	Tratamiento de enfermedades infecciosas.
	Potencial larvicida	α -pineno, β -pineno, E-cariofileno, bicyclogermacrene	Efectivo contra larvas del mosquito <i>Ae. Aegypti</i> que transmite el dengue y la fiebre amarilla
<i>Psidium sartorianum</i>	Actividad antifúngica	N/A	N/A
	Actividad antiparasitaria	Pinosotrobin chalcone	N/A
<i>Tagetes caracasana</i>	Actividad antiproliferante	N/A	Presentó efecto nocivo contra las células cancerígenas.
<i>Wedelia calycina</i>	Actividad antibacteriana	Germacren-D, 3,3,7,7-tetrametil-5-(2-metil-1-propenil)-tricyclo [4.1.0.0(2,4)] heptano, β -sesquifelandreno	Tratamiento contra la tos.
	Actividad larvicida	N/A	Efectivo contra <i>Aedes aegypti</i>
<i>Piper cumanense</i>	Actividad antiparasitaria	N/A	Tratamiento contra la malaria y la fiebre.
	Actividad antifúngica	α -pineno, β -pineno, linanool, germacrene, β -cariofileno	Efectivo contra <i>Fusarium oxysporum</i> .
	Actividad insecticida	α -pineno, β -pineno, linanool, germacrene, β -cariofileno	Efectivo contra <i>Sitophilus zeamidis</i> y <i>Spodoptera frugiperda</i> .

Cuadro 1: Resumen de algunas plantas endémicas de Colombia.

3.2. Método de *Dispersión de la Matriz en Fase Sólida* - MSPD

Se trata de un método de extracción ampliamente utilizado para el estudio de muestras biológicas. Existen más de 250 publicaciones en las que se emplea este método extractivo para el análisis de extractos de distintas naturalezas [3]. Esto se debe a la alta eficiencia y bajo costo del método de extracción.

El método consiste, básicamente, de tres etapas (como se puede observar en la Figura 4):

1. Maceración de la muestra con un *agente dispersante* (material particulado, normalmente compuesto de sílice).
2. Homogenización de la muestra macerada en la columna.
3. Elución con solvente y filtrado de la mezcla *solvente - extracto*.

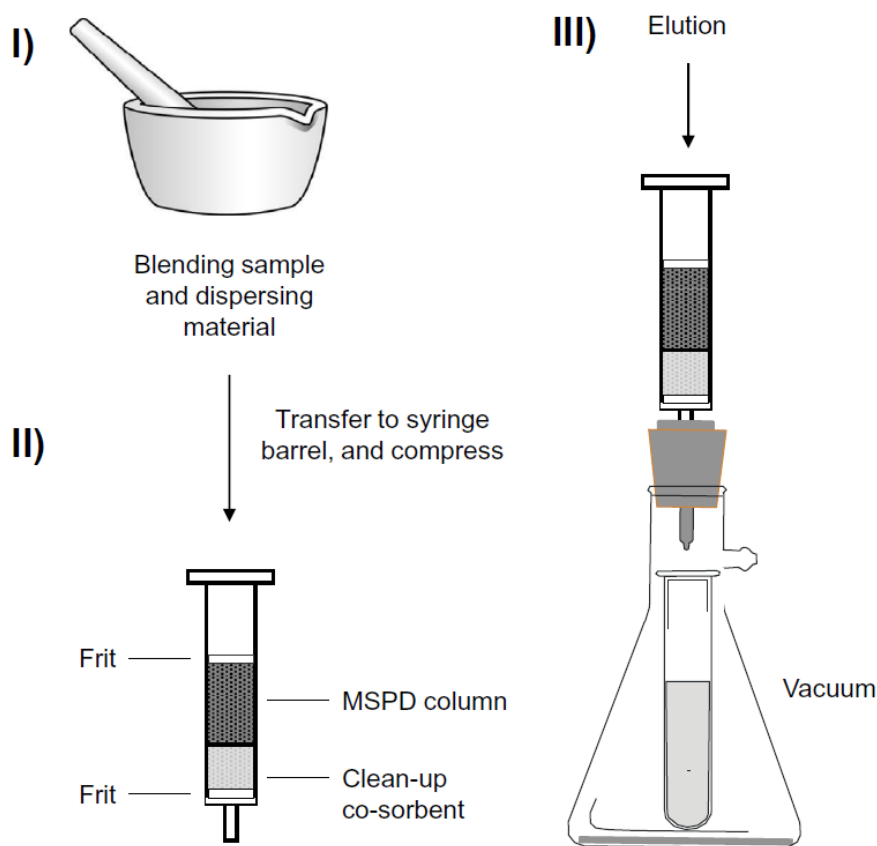


Figura 4: Método MSPD^[1].

3.2.1. Factores a considerar en la extracción MSPD

Hay varios factores a considerar en la extracción MSPD, que incluye:

1. *Efecto del tamaño de partícula media:* tamaños de partícula pequeños (entre 3 - 10 μm) requiere de grandes tiempos de elución y altos gradientes de presión para obtener un flujo adecuado.
2. *Agente dispersante:* el uso de silicatos infravalorados, como la arena de río, para la maceración de muestras presenta resultados diferentes a los reportados con agentes dispersantes como el C_{18} o el C_8 . A pesar de que el mismo principio de disrupción de la matriz se conserva, debido a la abrasión, es probable que se de una interacción química no deseada entre silicatos infravalorados y algunos de los flavonoides del extracto.
3. *Relación másica:* la mejor relación másica reportada en la literatura frecuenta ser una relación 1 a 4 ^[3], aunque puede variar de una aplicación a otra.
4. *Solvente:* el vertimiento del solvente en la columna MSPD tiene el fin de aislar analitos específicos o familias de compuestos. El tipo de solvente, y la polaridad de este, define la composición final del extracto. Existen estudios en donde se ha demostrado un incremento en el rendimiento extractivo al emplear solventes a temperaturas superiores a la temperatura ambiente e inferiores a los 60 $^{\circ}C$ ^[8].

3.3. Sistemas de extracción

Los métodos industrializados más utilizados en el sector alimenticio emplean extracción *sólido - líquido* y con *fluido supercrítico (SFE)*^[2].

3.3.1. Sistemas convencionales → *Extracción sólido - líquido*

El diseño y selección del sistema de extracción depende, en gran medida, del compuesto objetivo y de las propiedades físicas tanto del material a extraer como del producto.

Modalidad	Tipo	Descripción
Modo de operación	Extracción por lotes	La extracción se desarrolla en contenedores llenos con el material sólido a extraer. Es ineficiente debido a las paradas de planta por <i>carga y descarga</i> de material.
	Extracción <i>semi</i> continua	Con la idea de incrementar la eficiencia de extracción, se desarrolla una operación de extracción en serie con múltiples recipientes conectados a la misma línea de solvente, el cual se satura de extracto al pasar por cada uno de ellos.
	Extracción continua	El material a extraer es cargado y descargado de manera continua. Se emplean diferentes sistemas de transporte, tanto para los procesos de filtrado como de inmersión en solvente. No es recomendable para extracciones que requieran presiones distintas a la atmosférica.
Principio de trabajo	Extracción de etapa simple	Emplea un recipiente de una etapa para la extracción por inmersión. La inmersión debe presentar agitación para tener un margen mínimo de eficiencia de extracción.
	Extracción <i>multi</i> etapa	Utiliza un sistema de operación contracorriente (propio de sistemas <i>semi</i> continuos). El solvente entra en contacto, primero, con la matriz sólida de menor concentración de extracto hacia el de mayor concentración.

Cuadro 2: Clasificación de sistemas de extracción convencionales.

Los solventes más empleados consisten en agua, hidrocarburos (como el hexano), alcoholes y las mezclas entre ellos a diferentes proporciones.

La tendencia sobre el diseño de extractores se enfoca en el mejoramiento de la eficiencia y desempeño de extracción. Implica el compromiso entre la *simplicidad* del número de partes móviles y los sistemas de transporte, bombas y bandas transportadoras, y la *eficiencia* del proceso de elución del solvente.

3.3.1.1. Rotocel

El extractor *Rotocel* es un sistema de extracción por percolación desarrollado por Blonox en 1960. Se trata de un tanque giratorio con 18 compartimientos de fondo poroso. El material es rociado en cada celda con diferentes concentraciones de solvente recirculado tipo *contracorriente* (como se observa en la Figura 5): el solvente rociado en la primera celda corresponde a solvente con cierto grado de saturación de extracto (proviene de material procesado de otros compartimientos), mientras que el material de la última celda se rocía con solvente puro.

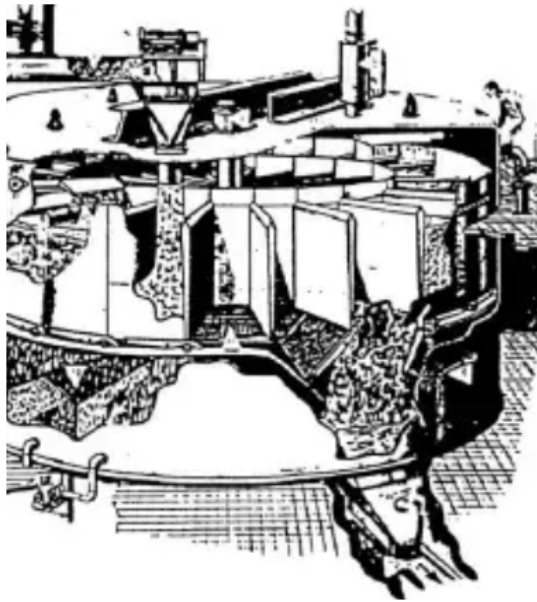


Figura 5: Extractor Rotocel.

Una rotación del sistema dura más de una hora, dependiendo de la solubilidad extractiva, y requiere de una energía rotacional mínima debido a que la fuerza de fricción ejercida por el material en cada celda no es de una magnitud considerable. Se conoce como sistema extractor de “cama profunda”, porque cuenta con una profundidad de 1.8 a 3 metros.

3.3.1.2. Carrousel

En 1990, el extractor *Carrousel* fue desarrollado mediante la fusión de las licencias Krupp y Extraktionstechnik. Este tipo de extractor puede tener diámetros de hasta $15,3[m]$.

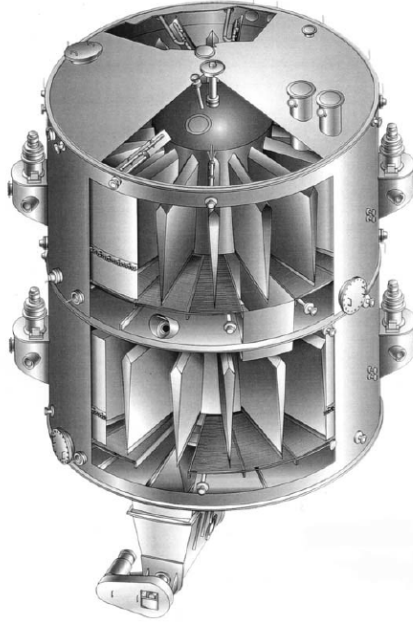


Figura 6: Interior de un extractor tipo carrousel de doble piso^[2].

Presenta el mismo principio de funcionamiento que el sistema de extracción tipo Rotocel, con la diferencia de que el marco de los compartimientos de extracción gira sobre una bandeja de tamiz estática; estructura apreciada en la Figura 7.

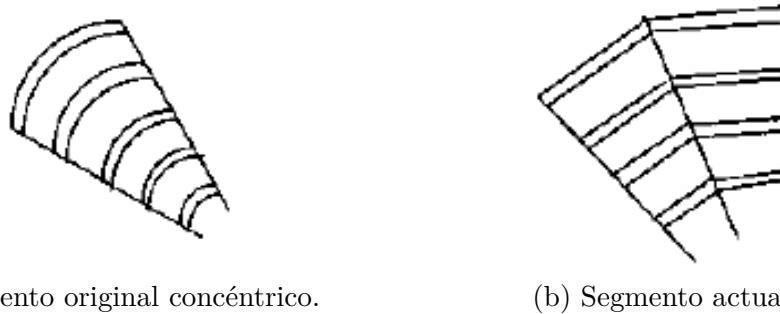
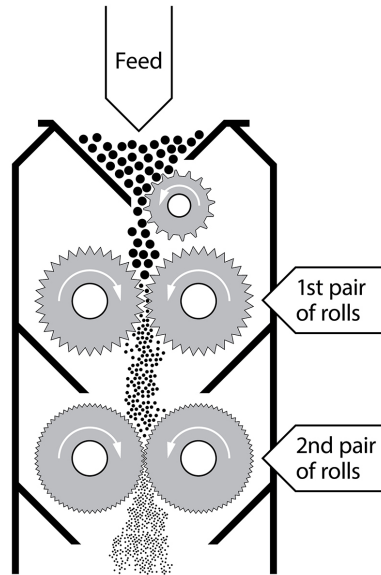


Figura 7: Segmento del fondo de la bandeja de tamiz de un extractor Carrousel^[2].

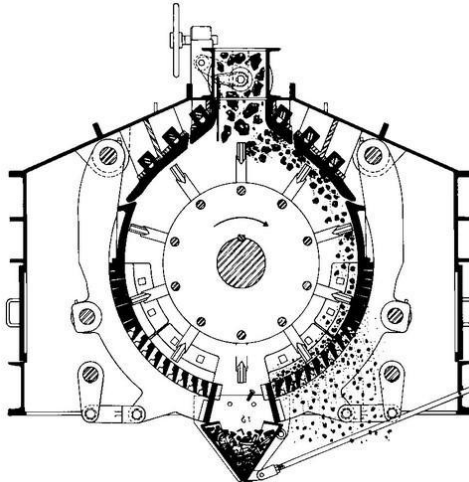
De esta manera, se mejora la transferencia de masa debido a que las partículas se mantienen en constante movimiento.

3.3.1.3. Pretratamiento

La eficiencia de extracción está directamente relacionada con la preparación del material sólido a extraer. Pequeños tamaños de partícula son ventajosos debido a la baja resistencia a la difusión entre partículas. Sin embargo, conseguir tamaños de partícula cercanos al polvo ($< 200 \mu m$) involucra grandes esfuerzos en procesos de trituración y molienda. Es común emplear como **pretratamiento mecánico** sistemas de molienda de operación continua; entre ellos: *molinos de rodillos* y *molinos de martillos*, como se aprecia en la Figura 8.



(a) Molino de rodillos.



(b) Molino de martillos.

Figura 8: Sistemas de pretratamiento mecánico.

En la industria alimenticia es común realizar un **pretratamiento térmico** para incrementar la eficiencia extractiva durante la producción de aceites con altos valores proteicos, entre ellos: semillas de algodón, soja, semillas de sésamo y maní. Este tratamiento consiste mantener el material solido cerca del 10 % de humedad a temperaturas de $90 - 95^{\circ}C$.

3.3.1.4. Recuperación del solvente

Una vez obtenida la mezcla solvente - extracto es necesario separarlos a través de procesos de destilación. Una vez obtenido el extracto, se pueden realizar procesos de extracción posteriores para limpiarlo de compuestos indeseados, enriquecerlo de otros compuestos o para desarrollar una modificación química.

3.3.2. Extracción con Fluido Supercrítico (SFE)

La extracción mediante fluido supercrítico, especialmente la extracción con dióxido de carbono (CO_2), está establecida a una escala industrial y presenta una amplia gama de aplicaciones, entre ellas: producción de café descafeinado; extracto de lúpulo; y producción de ingredientes naturales provenientes de hierbas, raíces y aceites esenciales.

El sistema de extracción con fluido supercrítico se puede apreciar en la Figura 9 y consiste de un sistema de presurización, un recipiente a presión donde ocurre la extracción, otro donde se realiza la separación y recuperación del solvente y un par de intercambiadores de calor.

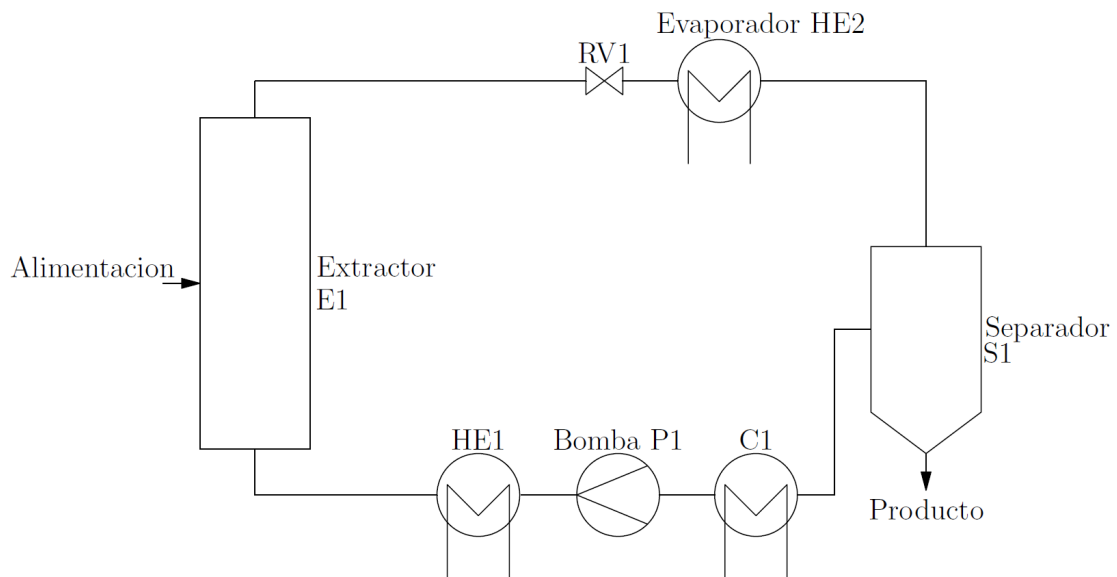


Figura 9: Flujo de trabajo de la extracción con CO_2 supercrítico.

El diagrama termodinámico del proceso se puede apreciar en la Figura 10, del cual se pueden desarrollar balances energéticos.

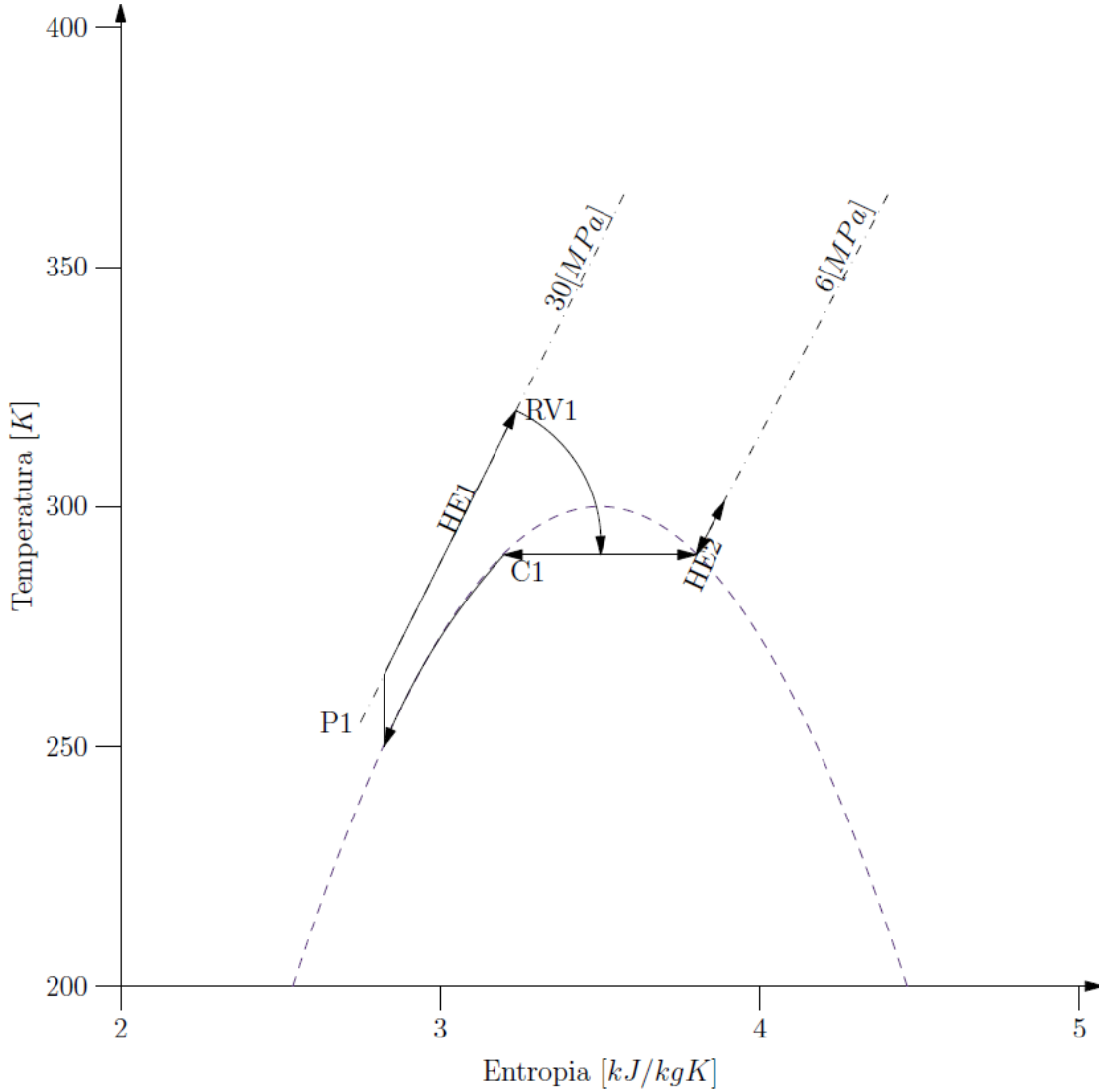


Figura 10: Diagrama termodinámico T-S.

Después de entrar a la zona de líquido saturado en el chiller $C1$, el fluido es luego comprimido por la bomba $P1$. El incremento de presión se produce de manera casi reversible (isentrópicamente). El calentador $HE1$ incrementa la temperatura del fluido hasta la temperatura de extracción. Debido a la expansión adiabática que ocurre en la válvula $RV1$, por el efecto Joule-Thomson, el dióxido de carbono se enfría hasta llegar a las condiciones de saturación. Para facilitar la separación entre el extracto y el solvente (CO_2), el fluido se evapora completamente justo antes de entrar al separador $S1$ al pasar por el evaporador $HE2$.

3.4. Métodos Numéricos

Los métodos numéricos son teoremas matemáticos que permiten describir la naturaleza de diferentes fenómenos de carácter físico-químico. Son ampliamente usados en ingeniería como metodologías predictivas durante el proceso de diseño funcional y mecánico. Para el análisis de comportamientos fluidodinámicos de partículas, es común encontrar estudios que combinen los métodos numéricos de *elementos discretos* y *volúmenes finitos*.

3.4.1. Método de Volúmenes Finitos - FVM

La *Dinámica de Fluidos Computacional* (CFD, por sus siglas en inglés) es una herramienta computacional ampliamente usada en ingeniería para el desarrollo de simulaciones numéricas que involucren fluidos. Emplea como método base el método de volúmenes finitos (FVM). Este método numérico transforma las ecuaciones diferenciales parciales, que representan las leyes conservativas, en ecuaciones algebraicas discretas sobre volúmenes finitos.

Inicia con la discretización del dominio en elementos no superpuestos. Las ecuaciones diferenciales son discretizadas (transformadas) en ecuaciones algebraicas al integrarlas sobre cada dominio de los elementos. El sistema de ecuaciones algebraicas es luego resuelto para calcular los valores de las variables dependientes de cada elemento. Algunos de los términos en la ecuación de conservación se convierten en flujos que se evalúan sobre las caras de los elementos. Es ‘sencillo’ evaluar condiciones de frontera, tanto de tipo *Dirichlet* como *Neumann*, de manera no invasiva, dado que las variables desconocidas se evalúan en los centroides de los elementos, no en las caras de los mismos. Estas características lo hacen adecuado para que la simulación presente una variedad de aplicaciones que involucren: flujo de fluidos y transferencia de calor y masa.

Básicamente, con este método numérico se busca resolver los siguientes grupos de ecuaciones:

- Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

- Ecuaciones de momento:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) - \beta g_x (T - T_{ref})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) - \beta g_y (T - T_{ref})$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) - \beta g_z (T - T_{ref})$$

- Ecuación de energía:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$

De estas ecuaciones, los componentes desconocidos suelen ser la presión, temperatura y velocidad. Se requieren condiciones iniciales y de frontera para definir el problema. Dos fuertes *acoplamientos* caracterizan este sistema de ecuaciones:

- *Presión - velocidad*: no hay una ecuación específica para definir la presión. Para flujos incompresibles, la presión es el campo que hace que la velocidad logre cumplir la ley de la conservación de la masa.
- *Temperatura - velocidad*: sólo está presente durante la convección natural; la convección mixta o forzada son dependientes de las propiedades físicas.

Los métodos numéricos se enfocan tanto en el proceso de discretización como en el método de solución del grupo de ecuaciones algebraicas obtenidas. La **precisión** de una solución numérica está arraigada al método de discretización.

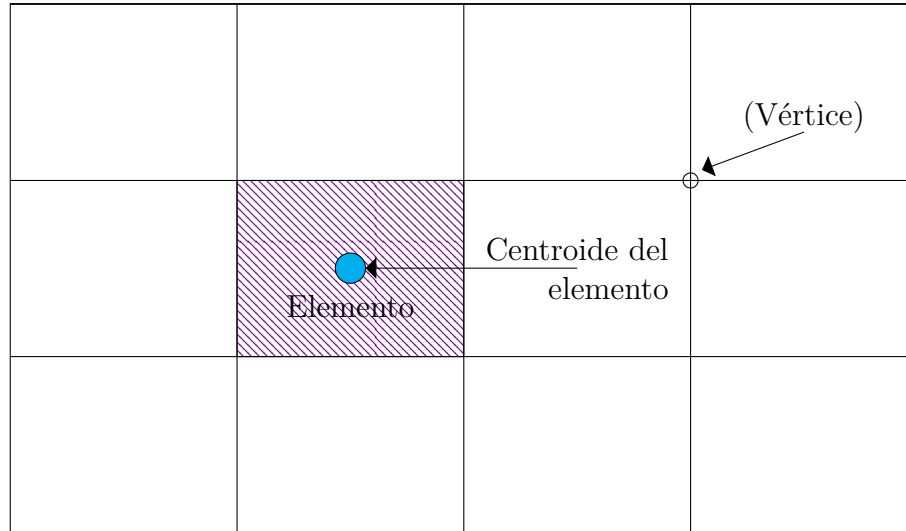


Figura 11: Discretización del dominio (malla cartesiana).

Existen dos tipos de mallas para el análisis mediante FVM, como se aprecia en la Figura 12.

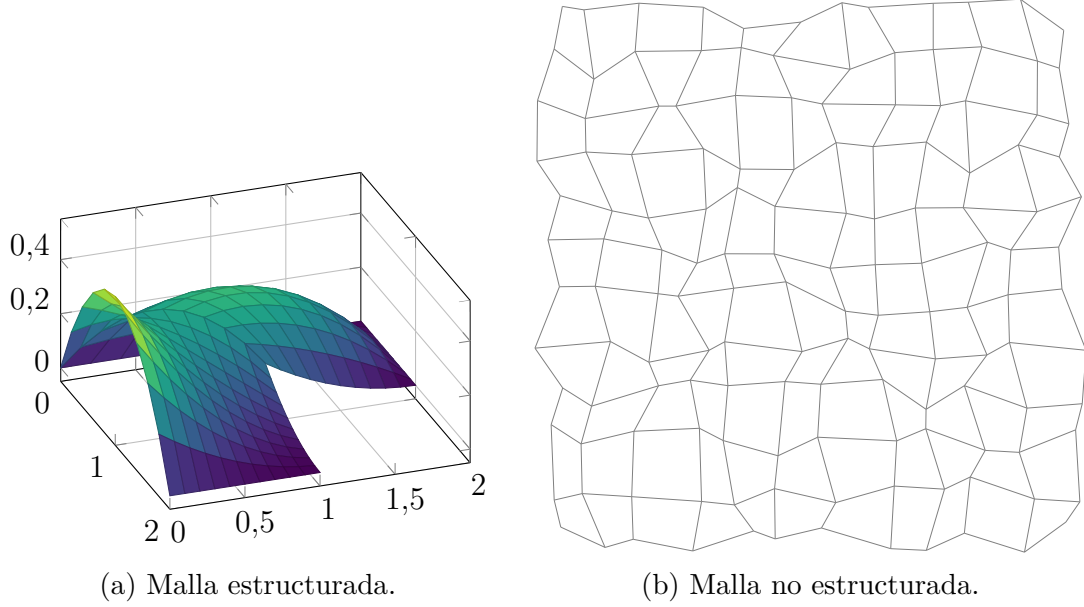


Figura 12: Tipos de mallas.

La conversión de las ecuaciones diferenciales parciales requieren la discretización del dominio de estudio; que, a su vez, depende de la dimensionalidad del problema.

3.4.1.1. Análisis unidimensional estacionario - 1D

Las Ecuaciones diferenciales parciales se pueden agrupar en diferentes términos; entre ellos: *transitorio*, *convectivo*, *difusivo* y *fuentes*, como se aprecia en la Ecuación 1.

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{transitorio}} + \underbrace{\rho u_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j}}_{\text{convectivo}} - \underbrace{\alpha \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)}_{\text{difusivo}} = \underbrace{S_\phi}_{\text{fuente}} \quad (1)$$

Asumiendo estado estacionario, unidimensional en la dirección x ; la ecuación de difusión se puede apreciar a continuación.

$$\underbrace{\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)}_{\text{difusivo}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{fuente}} = 0 \quad (2)$$

Resolviendo la Ecuación 2 para $\phi = T$ e integrando con respecto al elemento P (ver Figura 13), se obtiene lo siguiente:

$$\int_w^e \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{dT}{dx} \right) dx + \int_w^e S dx = 0 \rightarrow \left(\Gamma \frac{dT}{dx} \right)_e - \left(\Gamma \frac{dT}{dx} \right)_w + \int_w^e S dx = 0 \quad (3)$$

Si se asume que T varía linealmente entre nodos, se tiene:

$$\frac{\Gamma_e (T_E - T_P)}{\delta x_e} - \frac{\Gamma_w (T_P - T_W)}{\delta x_w} + S \Delta x = 0 \quad (4)$$

La expresión mostrada en la Ecuación 4 ya no es exacta. Gráficamente, el problema se ve reducido a lo siguiente:

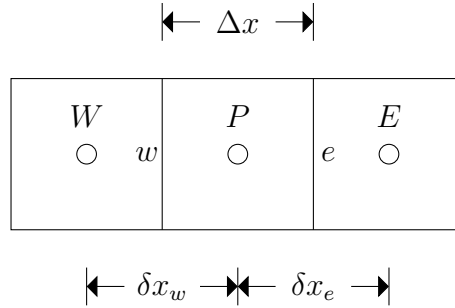


Figura 13: Problema unidimensional.

Agrupando los términos, se obtiene:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b \quad (5)$$

Dónde: $a_i = \Gamma_i / \delta x_i$, $a_P = a_E + a_W$ y $b = S \Delta x$. De esta forma, la conservación se garantiza para cada elemento de la malla a través de los flujos sobre las caras de los elementos.

Las condiciones de frontera pueden ser tipo *Dirichlet* o *Neumann*, dependiendo del problema.

Dirichlet	Neumann
$a_E = a_W = 0$	$a_I = 1$
$a_B = 1$	$a_B = 1$
$b = \phi$	$b = 0$

Cuadro 3: Condiciones de frontera - problema unidimensional.

3.4.1.2. Solvers

Existen diferentes métodos de solución de sistemas de ecuaciones algebraicas que pueden ser: *exactos* o *iterativos*. Los solucionadores que emplean métodos exactos no suelen usarse en simulaciones numéricas debido al alto costo computacional, básicamente tratan de resolver el sistema matricial $A\phi = B \rightarrow \phi = A^{-1}B$.

Los métodos iterativos suelen basarse en la lógica de *suposición* y *corroboración*. El método de Gauss - Seidel, por ejemplo, inicia suponiendo el valor de una variable, corroborándola con el cálculo de las demás; en caso de no coincidir, se supone el resultado final de la variable supuesta, donde se vuelve a corroborar hasta que el supuesto y la corroboración coincidan o hasta que el margen de error sea tolerable.

3.4.1.3. Metodologías de verificación y validación

Tienen por objetivo garantizar el menor *error computacional* posible. Entre ellas se destacan:

- *Simple*: estudio de la evolución global o local de una variable debido al refinamiento de malla, como se aprecia en la Figura 14.

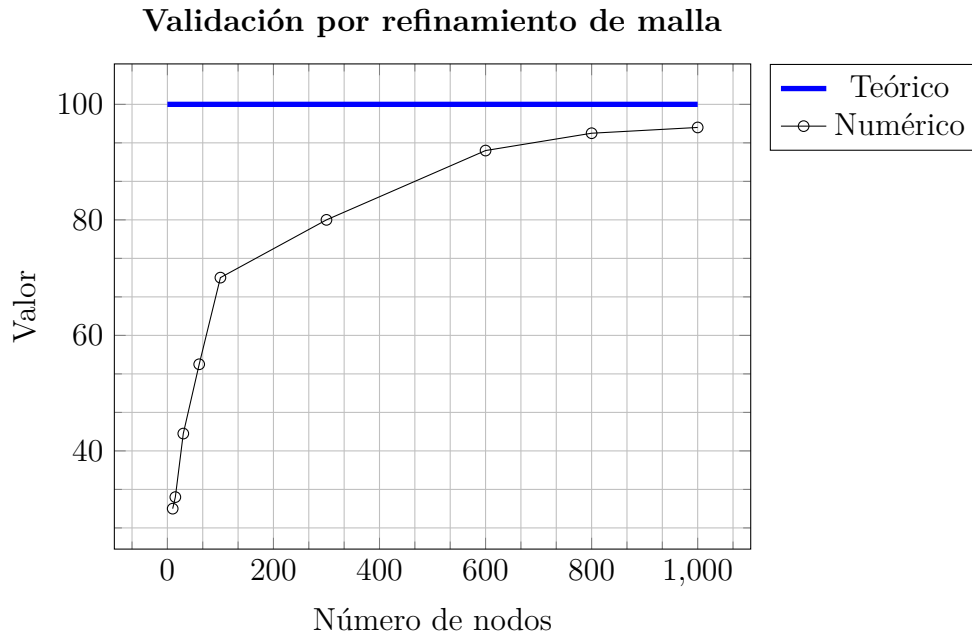


Figura 14: Método de validación simple.

- *Detallada*: se basa en la extrapolación generalizada de Richardson y en el índice de convergencia de malla (GCI).
- *Experimentación*: se validan los resultados con estudios experimentales.

3.4.1.4. Análisis bidimensional estacionario - 2D

Para análisis bidimensional, la Ecuación 1 se transforma en lo siguiente:

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{transitorio}} + \underbrace{\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y}}_{\text{convectivo}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)}_{\text{difusivo}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{fuente}} \quad (6)$$

La discretización del dominio se realiza acorde a la Figura 15.

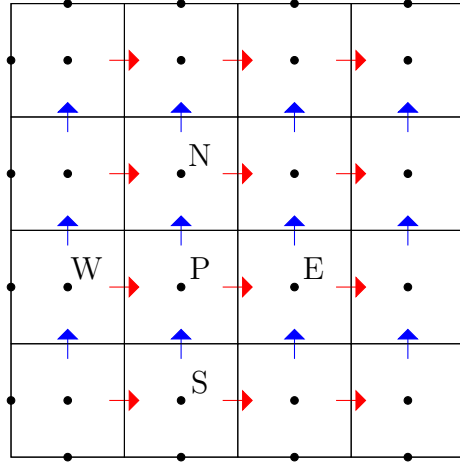


Figura 15: Discretización dominio bidimensional.

Existen diferentes enfoques para el análisis de problemas bidimensionales, entre ellos se encuentran: diferencias centradas, *upwind* e híbrido. El acercamiento por diferencias centradas asume una variación lineal de ϕ entre nodos para una malla uniforme, de modo que:

$$\begin{aligned} a_P \phi_P &= a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \\ a_E &= D_e - F_e/2 \\ a_W &= D_w + F_w/2 \\ a_N &= D_n - F_n/2 \\ a_S &= D_s + F_s/2 \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + \rho \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + (F_e - F_w + F_n - F_s) \\ b &= \rho \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \phi_P^0 + S \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (7)$$

3.4.2. Método de elementos discretos - DEM

El método de elementos discretos (DEM) es un método que modela fuerzas interpartícula basadas en parámetros de elasticidad y la superposición de partículas no deformadas, que se entiende como la cantidad de deformación necesaria para que puedan, físicamente, ocupar el espacio en su actual configuración. Requiere de seis grados de libertad en cuerpos rígidos: tres en dos dimensiones y seis en tres dimensiones.

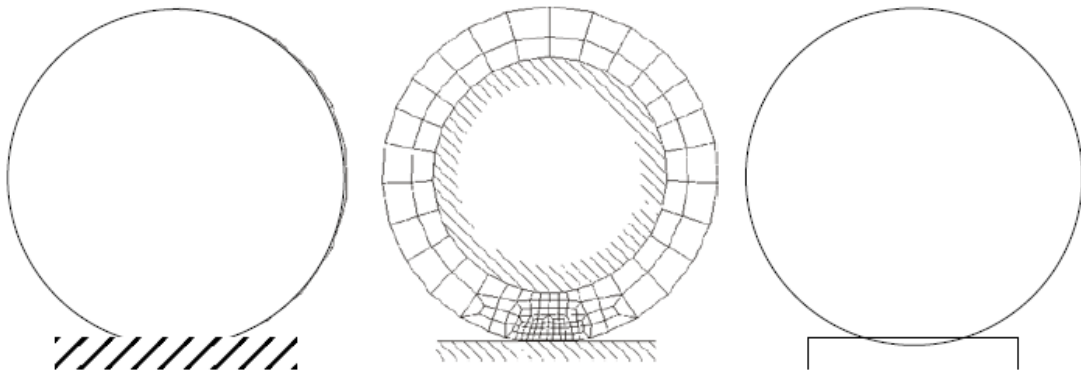


Figura 16: Comparación entre metodologías de análisis de partículas para una esfera suave deformada en un plano: situación física real (izquierda), modelo analizado con el método de elementos finitos (centro) y modelo con el método de elementos discretos (derecha)

El principio de este método es el de computar las fuerzas proporcionales a la superposición geométrica de las partículas empleadas. Para partículas esféricas, o circulares, las fuerzas involucradas son de tipo central; a diferencia de otras configuraciones geométricas, debido a que deben caracterizar las fuerzas en la forma ‘débil’ y ‘fuerte’.

Una simulación que emplea este método numérico, normalmente se rige bajo los siguientes pasos:

1. Detección de colisión entre partículas.
2. Creación de una nueva interacción y determinación de diferentes propiedades, entre ellas la rigidez.

Para interacciones ya existentes:

1. Evaluación de deformación.
2. Computación del esfuerzo basada en la deformación.
3. Aplicación de fuerzas en la interacción entre partículas.

3.4.2.1. Detección de una colisión

La detección *exacta* de colisión entre dos partículas requiere de un alto costo computacional. Tomando una pareja de cuerpos i y j y su colisión ‘exacta’ (en el sentido de precisión admisible por la implementación numérica) presentadas en los puntos P_i y P_j la detección procede en los siguientes dos puntos:

1. Detección de colisión rápida usando puntos aproximados \tilde{P}_i y \tilde{P}_j ; siendo estas preconstrucciones en el modo que características individuales P_i y P_j satisfacen la siguiente condición mostrada en la Ecuación 8.

$$\forall x \in R^3 : x \in P_i \rightarrow x \in \tilde{P}_i \quad (8)$$

De igual manera para P_j . El predicado aproximado se conoce como ‘volumen límite’, siguiendo lo siguiente:

$$(\tilde{P}_i \cap \tilde{P}_j) = \emptyset \rightarrow (P_i \cap P_j) = \emptyset \quad (9)$$

2. Al filtrar las colisiones imposibles mediante la Ecuación 9, algoritmos de detección de mayor costo computacional pueden ser implementados al filtrar falsas parejas de colisión restantes, como se observa en la Figura 17.

$$(\tilde{P}_i \cap \tilde{P}_j) \neq \emptyset \wedge (P_i \cap P_j) = \emptyset \quad (10)$$

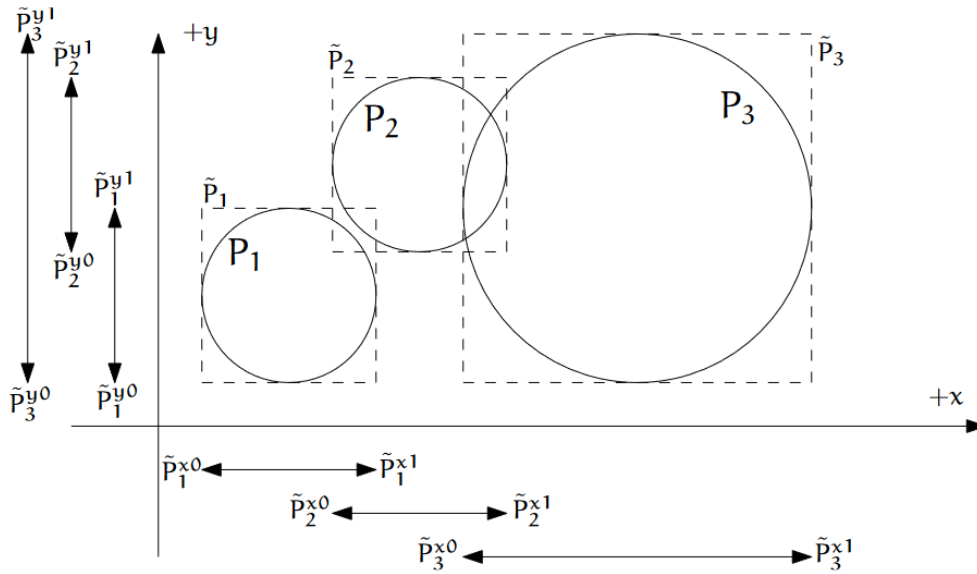


Figura 17: Detección de colisión entre partículas.

3.4.3. CFD-DEM

El acoplamiento entre CFD-DEM se ha empleado cuando se busca desarrollar análisis de partículas y su interacción en medios viscosos. Ampliamente usado para análisis de lecho fluidizado^[9], separadores de ciclón (Chu *et al.*, 2009) y para el estudio de retención de partículas en medios filtrantes^[10], por citar algunos ejemplos. Se han desarrollado estudios experimentales que corroboran la efectividad y viabilidad de las simulaciones numéricas que emplean CFD-DEM^[9, 11].

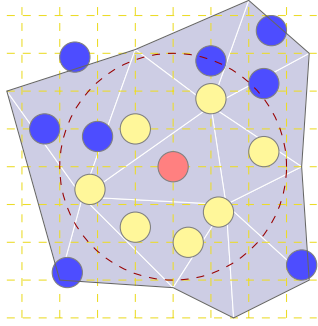
En el acoplamiento clásico entre CFD-DEM, el flujo se resuelve a través del método CFD basado en malla, mientras que la fase sólida es modelada mediante DEM para cada partícula sujeta a través de fuerzas hidrodinámicas, fuerzas de cuerpo (como la gravedad) y a través de fuerzas de contacto, actualizando valores de velocidad y posición conforme a la segunda ley de Newton (Hoomans *et al.*, 1996; Tsuji *et al.*, 1993; Xu y Yu, 1997). En principio, todos los métodos CFD pueden acoplarse con DEM; lo que ha dado origen a diferentes métodos discretos y continuos, tal como el método de Lattice Boltzmann (LBM), Hidrodinámica de Partículas Suaves (SPH), métodos de Diferencias Finitas y Volúmenes Finitos (FVM).

Gran parte de las simulaciones reportadas en la literatura comprenden modelos 2D o sistemas prototipados de pequeña escala. En busca de acelerar los tiempos de simulación e incrementar la eficiencia computacional, se han desarrollado técnicas de computación paralela; donde gran parte de los esfuerzos han sido enfocados en la paralelización del DEM. Muchos algoritmos se han propuesto para lograr este hecho, como la técnica de espejo de dominio (Damana, *et al.*, 2006; Washington y Meegoda, 2003), el método de subconjunto de partículas (Kafui *et al.*, 2011) y métodos de descomposición de dominios (Amritkar *et al.*, 2014; Tsuji *et al.*, 2008). El uso de estos algoritmos depende de la arquitectura del hardware. La paralelización sobre memoria compartida del sistema se alcanza, normalmente, empleando *OpenMP* (“Open Multi-Processing”, por sus siglas en inglés), mientras que el MPI (Interfaz de Paso de Mensajes) se emplea en sistemas de memoria distribuida (Rabenseifner *et al.*, 2009). Por ejemplo, Tsuji *et al.* (2008) paralelizaron una simulación en CFD-DEM usando MPI para el intercambio de información entre 16 CPUs, reportando el comportamiento fluidodinámico de 4.5 millones de partículas en un medio gaseoso; empleando el método unidimensional de descomposición de dominio.

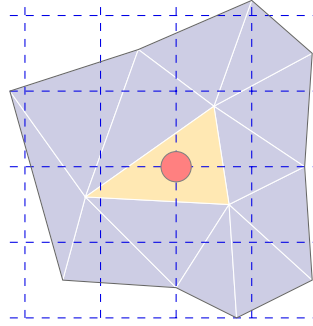
3.4.3.1. Fase del solvente

En un modelo CFD-DEM, la fase del fluido se resuelve en el nivel computacional en cada elemento de la malla (ver Figura 11) empleando un marco de referencia Euleriano mientras que el movimiento de la partícula se sigue a través de un marco de referencia Lagrangiano. Para lograr el acoplamiento de fase, es necesario

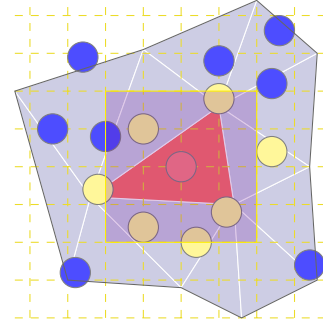
interpolan las propiedades de las partículas a los centroides de los elementos CFD y las propiedades del fluido a la posición de cada partícula. Como se muestra en la Figura 18, se crean dos mallas alineadas de búsqueda: la malla de búsqueda de partículas (amarilla) y la malla de búsqueda de fluido (azul).



(a) Búsqueda de partículas vecinas y cálculo de la fracción de vacío de una partícula dada.



(b) Mapeo de una partícula dada dentro del fluido para interpolan sus propiedades en ese punto.



(c) Mapeo del elemento de malla CFD para el cálculo de términos fuente en el elemento de interés.

Figura 18: Esquema de la aproximación por malla dual para la búsqueda de partículas vecinas en un fluido.

Los pasos clave con los que se basan las mallas de búsqueda son: detección de colisión de partículas (descrito en la sección 3.4.2.1), geometría de los elementos de malla CFD (detallado en la sección 3.4.1.4) y el cálculo de fuerzas de fluido, entre otras.

Para el cálculo de las fuerzas ejercidas por el fluido, se requiere conocer las propiedades del fluido en la posición de la partícula; incluyendo el gradiente de presión, la velocidad del flujo y el gradiente de velocidades (para fluidos gaseosos). Normalmente, las propiedades del fluido se ‘almacenan’ en el centroide de los elementos de malla durante cálculos mediante FVM, como se muestra en la Ecuación 11.

$$\phi_p = \phi_{el} + \nabla \phi_{el} \cdot r_{pc} \quad (11)$$

Dónde: ϕ_p y ϕ_{el} son las propiedades del fluido en la posición de la partícula y el centroide del elemento, respectivamente; y r_{pc} es el vector distancia que va desde el centro del elemento hasta la posición de la partícula.

4. Estado del Arte

En la presente sección, se muestra un resumen de diferentes avances científicos, ordenados cronológicamente y mediante normativa IEEE, de los siguientes temas: MSPD, simulación numérica en sistemas de extracción, sistemas de molienda y peletizado, y patentes de sistemas de extracción.

- Yao, L.M. *et al.* ***An optimized CFD-DEM method for fluid-particle coupling dynamics analysis.*** International Journal of Mechanical Sciences. 2020.
<https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2020.1055034>

Al emplear el método CFD-DEM en la solución de flujos de dos fases (compuesto por fluido fracturado y arena de cuarzo) a través de tuberías, a pesar de que las colisiones y acumulación de partículas se pueden describir a escala mesoscópica, presenta serios problemas de eficiencia y precisión. En el presente estudio, se plantea un método CFD-DEM mejorado basado en incrementos de tiempo de rotonda. Al implementar la mejora en la estrategia de solución del problema CFD-DEM en términos del tiempo creciente, el criterio de convergencia iterativo y el algoritmo de avance de tiempo de la pareja fluido-partícula se establecieron; ajustando de manera automática la los pasos de tiempo del modelo de acuerdo al criterio de convergencia.

- M. N. Alnajrani and O. A. Alsager. ***Removal of antibiotics from water by polymer of intrinsic microporosity: isotherms, kinetics, thermodynamics and adsorption mechanism.*** Nature Research. 2020.
<https://doi.org/10.1038/s41598-020-57616-4>

Investigación acerca de la capacidad filtrante de un polímero de microporosidad intrínseca (PIM) para la remoción de antibióticos presentes en aguas residuales como la doxiciclina, ciproflaxina, penicilina G y amoxicilina; llegando a remover cerca del 80 % de la concentración inicial. Se emplearon los modelos de Langmuir y Freundlich para la correlación de los datos de equilibrio. Las constantes de adsorción se evaluaron a partir de pseudo modelos de segundo orden, y los parámetros termodinámicos se obtuvieron mediante los estudios de adsorción a diferentes temperaturas de reacción.

- Avi Uzi, G. B. Halevy y Avi Levy. ***CFD-DEM Modeling of soluble NaCl particles conveyed in brine.*** Powder Technology. 2020.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.09.039>

Este estudio se enfoca en la disolución de cloruro de sodio en salmuera empleando CFD-DEM en una escala unidimensional. Diversas funciones de usuario han sido integradas en el código para describir las propiedades termofísicas variacionales con el cambio de concentración. El modelo completo es comparado con diferentes experimentos estudiando dos parámetros clave: tamaño de partícula y concentración de la salmuera. La precisión se estableció a partir del número de Sherwood para la correlación de la transferencia de masa convectiva comparándola con la experimentación física.

- E. O. dos Santos, *et al.* ***Sand as a solid support in ultrasound-assisted MSPD: A simple, green and low-cost method for multi-residue pesticide determination in fruits and vegetables.*** Food Chemistry. 2019.
doi: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2019.05.200>

Artículo donde se estudió la viabilidad de emplear arena como soporte sólido en ultrasonido asistido con dispersión de la matriz en fase sólida (UA-MSPD) para la extracción de diferentes clases de pesticidas, incluyendo: organofosforados, carbamatos, triazonas y piratoides de frutas y vegetales, determinados por las técnicas GC-MS y LC-MS/MS. El desempeño de la arena se comparó con el de diferentes tipos de soportes sólidos, entre clásicos y alternativos naturales. Los mejores resultados se obtuvieron con 0,5[g] de muestra, 1[g] de arena, 20[mg] de carbón activado y 5[mL] de acetato de etilo como solvente de elución. El método desarrollado fue eficiente, simple, barato, robusto y ambientalmente amigable.

- C. Sielfeld, J. M. del Valle and F. Sastre, ***Effect of pelletization on supercritical CO₂ extraction of rosemary antioxidants.*** The Journal of Supercritical fluids. pp. 162-171, 2019.
doi: <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2016.04.010>

Investigación donde se estudia el efecto de peletización de hojas de romero para el proceso de extracción mediante CO₂ supercrítico (SC – CO₂). Se desarrolló un diseño de experimento factorial (2³), donde se estudiaron los efectos referentes a la temperatura (40 y 70 °C) y presión (30 y 50 MPa) de extracción; y el efecto del pretratamiento del sustrato. Las condiciones en el punto central del diseño experimental son de 55 °C y 40 MPa, con control del sustrato para los puntos centrales de extracción, debido a que el pretratamiento es una variable categórica.

En el presente estudio, se observó que el rendimiento de extracción disminuyó del 4,28 % al 1,33 %; el rendimiento volumétrico (masa de soluto recuperado por unidad de tiempo y por unidad de volumen extraído) se incrementó hasta el 34 %; se redujo la actividad antioxidante del extracto debido a las temperaturas presentadas durante el proceso de peletizado; y se corroboró una relación lineal ($R^2 = 0,83$) entre la actividad antioxidante y el ácido carnósico fenólico del romero.

- M. E. Mostafa *et al*, *The significance of pelletization operating conditions: an analysis of physical and mechanical characteristics as well as energy consumption of biomass pellets*. Renewable and sustainable energy reviews. pp. 332-348, 2019.
doi: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.01.053>

Artículo de investigación que trata sobre la importancia de las condiciones de operación para la elaboración de biomasa peletizada como combustible alternativo, para la producción de energía dentro de una termoeléctrica. El proceso de peletizado puede realizarse tanto con una peletizadora como con un sistema cilindro - pistón, donde, en ambos casos, la biomasa es comprimida de tal forma que se producen pequeñas unidades, o pellets, permitiendo tener grandes masas de material vegetal en un volumen reducido.

En este trabajo, se desarrolla una metodología de cálculo que permite definir: longitud y diámetro de los pellets, humedad final del material vegetal, durabilidad mecánica (resistencia abrasiva), dureza y consumo energético, entre muchos otros.

- T. Naukkarinen, M. Nikku y T. Turunen-Saaresti *CFD-DEM simulations of hydrodynamics of combined ion exchange-membrane filtration*. Chemical Engineering Science. 2019.
doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.08.009>

El sistema de filtrado combinado ion de intercambio-membrana, donde una capa de filtrado activa es formada usando una cama de resinas y agua, tiene el potencial de reducir el uso de energía e incrementar la calidad de aguas residuales purificadas. El diseño hidrodinámico de este sistema está en su *infancia* y se requiere del uso de métodos numéricos para su análisis. En este trabajo, se emplea el método CFD-DEM para analizar la hidrodinámica de este sistema, la formación del lecho de filtrado, entre otros parámetros de interés al variar las condiciones de flujo. Como resultado, los detalles de la formación del lecho, ideas sobre otros parámetros que afectan este fenómeno y sugerencias para mejorar el diseño hidrodinámico de este sistema han sido presentadas.

- J.D. Argüello *et al*. *Equipo, proceso y producto obtenido a partir de material vegetal con propiedades biológicas*. CO2018013023A1. Nov, 18, 2018.

Patente que expone una metodología para la producción de extractos vegetales a escala prototipo. Presenta los cimientos de la escalabilidad de plantas de extracción basadas en el método de *dispersión de la matriz en fase sólida* (MSPD, por sus siglas en inglés).

- M. Cerqueira *et al.* ***Sampe as solid support in MSPD: A new possibility for determination of pharmaceuticals, personal care and degradation products in sewage sludge.*** CO2018013023A1. Nov, 18, 2018.

Método de extracción basado en la dispersión de la matriz en fase sólida (MSPD) y enfocada en los principios la química analítica ambiental. Propone soportes sólidos y solventes de menor toxicidad para la determinación simultánea de 19 fármacos, cuatro productos de cuidado personal y cuatro más de productos degradados en muestras de aguas residuales. Altas recuperaciones fueron obtenidas cuando 2[g] de muestra fue macerada por 5[*min*] en un mortero, transferido luego a un tubo centrífugo, y 1[*min*] de agitación con 5[mL] de metanol.

- E. E. Stahenko *et al.* ***Numerical simulation through the discrete element method (DEM) and the finite volume method (FVM) of the crushing and filtering processes for the production of vegetable extracts by the matrix solid-phase dispersion (MSPD).*** XI Congreso Colombiano de Métodos Numéricos. ISBN: 978-958-48-5477-3. pp. 57-67, 2018.

Artículo de investigación que trata sobre el análisis numérico del diseño de una planta de producción de extractos vegetales. La planta diseñada se basa en el método MSPD y consta de un sistema de trituration, adaptado como recipiente a presión, y de un sistema de recuperación del solvente.

En el artículo, se desarrolla un estudio numérico mediante los métodos del elemento discreto (DEM) y de volúmenes finitos (FVM) de los procesos de trituration y filtrado, respectivamente, donde se propone un rediseño referente a un tamaño óptimo de las bolas del molino y de la presión de operación durante el proceso de filtrado.

- J. D. Argüello y O. Gómez. ***Diseño de un prototipo de una planta destinada a la producción de extractos vegetales mediante el método de extracción de dispersión de la matriz en fase sólida - MSPD, con sistema de recuperación de solvente.*** Bucaramanga, Colombia: Universidad Industrial de Santander, 2017.

Trabajo de grado que trata sobre el diseño y construcción de un prototipo de una planta destinada a la producción de extractos vegetales; dónde, además, se propone el diseño de una planta con capacidad de procesamiento de 100[kg/lote], 4 lotes al día.

En este trabajo, se evalúa la viabilidad de la escalabilidad del método MSPD a partir de estudios experimentales sobre el prototipo construido.

- C. Yue, Q. Zhang and Z. Zhai. *Numerical simulation of the filtration process in fibrous filters using CFD-DEM method*. Journal of Aerosol Science, Volume 101. pp. 174-187, 2016.

Artículo de investigación dónde se desarrolla un estudio numérico, mediante CFD (computational fluid dynamics) y DEM (discrete element method), del proceso de filtrado de partículas presentes en un flujo de aire sobre filtros fibrosos con diámetro de fibra entre 10 y 20 micrómetros.

- A. L. Capriotti *et al.* *Recent advances and developements in matrix solid-phase dispersion*. Trends in analytical chemistry, Volume 71. pp. 186-193, 2015. 10.1016/j.trac.2015.03.012

Reseña donde se presentan y analizan algunos de los últimos avances referentes al método de dispersión de la matriz en fase sólida - MSPD. Diferentes métodos de preparación de muestras, materiales inusuales e innovadores empleados como dispersantes y la combinación entre MSPD con otros métodos extractivos, como la extracción mediante líquido presurizado, por citar un ejemplo, son algunos de los temas tratados en este artículo de investigación.

- E.E. Stashenko *et al.* *Chromatography and mass spectrometric characterization of essential oils and extracts from Lippia (Verbenaceae) aromatic plants*. Journal of separation science. pp. 192-202, 2013. doi: 10.1002/jssc.201200877.

Artículo de investigación que trata sobre el estudio de los diferentes compuestos químicos, mediante el uso de metodologías analíticas GC y HPLC, presentes en hojas y ramas de plantas aromáticas pertenecientes al género *Lippia*, familia Verbenacea, de las que destacan las especies: *Lippia alba*, *Lippia organoides*, *Lippia micromera*, *Lippia americana*, *Lippia graveolens* y *Lippia citridora*. Se emplearon métodos de extracción por solvente (metanol) y fluido supercrítico (CO_2).

- Liu Kuiyu *et al.* *Equipment and method for extracting biologically active ingredients from subcritical fluid*. CN 1 019 0509 1B, dec, 08, 2010.

Invencción que involucra tanto la metodología como el equipo de extracción de componentes biológicos a partir de fluido supercrítico. El equipo consiste de un sistema de suministros, sistema de extracción, sistema de separación y sistema de recuperación del solvente.

- D. A. Flórez, W. A. Ramírez y L. B. Varela, *Diseño conceptual de una máquina peletizadora de alimentos para aves de corral*. Medellín, Colombia: Universidad Nacional de Colombia, 2010.

Trabajo de grado que consiste en el diseño conceptual de una máquina peletizadora para la elaboración de alimentos para pollos, en forma de pellet. Se estudian diversas variables de diseño, entre ellas: tipo de peletizadora, métodos de transmisión de energía (térmica y mecánica), selección de componenets y equipos, diseño de ejes y paletas, y recomendaciones de mantenimiento, entre muchas otras.

- M. Kimura, M. Narumi and T. Kobayashi. *Design method of ball mill by discrete element method*. Sumitomo Chemical Co., Ltd. pp. 1-9, 2007

Se plantea una metodología de diseño, mediante simulaciones numéricas que emplean el método del elemento discreto, de molinos de bolas destinados a la óptima trituración de rocas. Esta metodología emplea como parámetros de entrada: velocidad de rotación, tamaño de las bolas, propiedades físicomecánicas del material a triturar, geometría de las aletas, o elevadores, y coeficientes de fricción, entre otros, y entre los resultados esperados, se encuentran: granulometría final del material a triturar en función del tiempo de molienda, cinemática de las bolas en función de la velocidad de rotación, relación entre energía de impacto de las bolas y granulometría final del material.

- A. Ryser, *et al.* *Cap extraction device*, US 8613246B2, 2003.

Invencción de *Societe des Produits* (Nestle SA) que muestra el funcionamiento mecánico de un dispositivo de extracción por lotes. Consta de un sistema de compresión y una parte movable donde va la materia prima encapsulada para desarrollar la extracción.

- P. Mengal and B. Mompon, *Method and plant for solvent-free microwave extraction of natural products*, EP 0 698 076 B1, Enero, 14, 1998.

Patente que trata sobre la metodología de extracción de material biológico sin solvente mediante radiación por microondas. La exposición del material a la radiación produce que se separe el producto natural deseado del residuo biológico, donde se involucra presión de vacío durante la etapa extractiva por radiación para evitar la degradación del producto.

- **E. Favre and P. Masek. *Device for the extraction of cartridges*, US4846052A, 1986.**

Dispositivo diseñado para la extracción de material contenido en cartuchos. Estos cartuchos constan de un cuerpo hueco de fondo abierto. En la parte superior de la carcasa se incluye un elemento de inyección con un punto que sobresale hacia el interior abierto que penetra el cartucho para el desarrollo del proceso de extracción.

4.1. Análisis, comentarios y proyecciones

Los avances científicos expuestos comprenden el periodo de 1986 y 2020. La mayoría de los estudios que involucran el método MSPD están dirigidos a mejorar la empleabilidad del método a escala de laboratorio. A pesar de haber estudios realizados a diseños escalables propuestos y de que existe una patente en trámite que cimenta las bases de plantas de extracción basadas en el método MSPD, no existe una planta física que demuestre su viabilidad como proceso industrial.

En la base de datos de Scopus, sólo existe una revista especializada en la extracción con solvente, titulada: “*Solvent Extraction Research and Developement*”, la cual ha operado entre 1996 y 2020. Se han realizado publicaciones referentes al uso de métodos extractivos en otras revistas, de las que se destacan: “*TrAC - Trends in Analytical Chemistry*”, “*Analytical Chemistry*”, “*Food Chemistry*” y “*Trends in Environmental Analytical Chemistry*”. Todo lo anterior, enfocado a desarrollo científico a escala de laboratorio.

En el presente trabajo, se propone una nueva investigación sobre la escalabilidad del método MSPD, **enfocado** en la etapa de elución y filtrado a través del desarrollo de un modelo CFD-DEM que permita la predicción del comportamiento hidrodinámico entre el solvente a emplear y el material vegetal pulverizado.

5. Formulación de la Pregunta e Hipótesis

5.1. Pregunta de investigación

¿Qué nivel de precisión se podría obtener al implementar una metodología de diseño que emplee los métodos de *elementos discretos* (DEM) y *volúmenes finitos* (FVM), para el análisis del comportamiento fluidodinámico durante la etapa de filtrado de una planta de extracción basada en el método de dispersión de la matriz en fase sólida - MSPD?

5.2. Hipótesis

Se espera alcanzar un nivel de precisión igual o superior al 75% al comparar los resultados de la simulación numérica con respecto a los obtenidos por un estudio experimental sobre un sistema físico real, debido a que la correlación entre los métodos numéricos DEM y FVM permite describir el comportamiento fluidodinámico de partículas en medios viscosos.

6. Objetivos

6.1. Objetivo general

- Desarrollar una metodología para el diseño del sistema de elución y filtrado, de la planta de extracción, que permita determinar la concentración de partículas¹ durante la etapa de filtrado a través de un modelo numérico, validado mediante experimentación.

6.2. Objetivos específicos

- Construir el modelo CFD-DEM que simule el comportamiento fluidodinámico durante la etapa de filtrado, para una geometría dada del sistema, donde se obtengan los siguientes resultados: perfiles de velocidad, de presión y grado de concentración de partículas a lo largo del sistema virtual en función de la relación másica entre el material pulverizado y el solvente (mezcla etanol - agua al 50 %).
- Implementar el modelo CFD-DEM a través de herramientas de código abierto; utilizando Python como lenguaje base, Jupyter como entorno de desarrollo, ParaView como plataforma de análisis de resultados y librerías de C++ (como Yade, LIGGGHTS y OpenFoam) para el desarrollo de las simulaciones numéricas.
- Evaluar el modelo desarrollado mediante pruebas experimentales realizadas a un sistema físico real que emplee el mismo principio físico-químico de separación de sustancias, tomando como variable de entrada la relación másica entre el material pulverizado y el solvente (mezcla etanol - agua al 50 %), y evaluando como variable de salida la concentración de partículas en los puntos inicial, medio y final del sistema.

¹Corresponde al material pulverizado proveniente de la etapa de molienda (ver Figura 1).

7. Alcance y resultados

Conforme a los objetivos planteados en la sección anterior, se propone la siguiente metodología de trabajo por objetivo.

7.1. Propiedades termodinámicas del solvente

A partir de metodologías de cálculo de las propiedades termodinámicas (presión, temperatura, densidad, calor específico y entalpía, entre otras) de mezclas reportadas en la literatura, se planteará un algoritmo, hecho en Python - Jupyter, que permita describir el estado termodinámico de mezclas hidroalcohólicas cambiando parámetros como: concentración de la mezcla, temperatura y presión.

7.2. Construcción del modelo CFD

Una vez desarrollado el algoritmo de propiedades termodinámicas, se desarrollaría el modelo CFD (*“Computational Fluid Dynamics”*) en Python - Jupyter, empleando las librerías OpenFOAM y Yade para la simulación fluidodinámica entre el solvente y el material vegetal pulverizado. El algoritmo desarrollado se elaborará de tal forma que permita la simulación automática del sistema durante la etapa de filtrado, seleccionado previamente en el *Diseño conceptual*. Dicho algoritmo permitirá, a su vez, elaborar un informe de ingeniería automático sobre los diferentes resultados obtenidos de la simulación.

El cumplimiento de este objetivo tendrá como resultados:

- La publicación de los algoritmos desarrollados en una revista especializada de diseño mecánico y/o de software libre.
- Publicación de la metodología de la simulación en un congreso internacional en la modalidad de ponencia oral o póster.

7.3. Pruebas experimentales

Desarrollo de un estudio experimental que permita comparar y validar los resultados obtenidos del modelo CFD, tomando muestras de la mezcla en tres puntos clave del proceso (punto inicial, medio y final), para la evaluación de la concentración de la misma. En estos mismos puntos, se evaluará también valores como temperatura y velocidad de flujo, que se emplearán también como referencia. Como resultado, se esperaría poder realizar una publicación en un congreso internacional, en la modalidad de ponencia oral o póster, exponiendo los resultados de la prueba comparativa.

7.4. Planos constructivos

Una vez validado el modelo CFD, se procede al desarrollo de los planos constructivos respectivos del sistema de elución y filtrado que se adapte a la capacidad objetivo de la planta de extracción de $20 [kg/bache]$, tres baches al día.

8. Gestión del proyecto

8.1. Actividades

El desarrollo del proyecto se divide en **diez** etapas, cada una de ellas cuenta con diferentes tareas, o procesos, que permitirán alcanzar los objetivos propuestos.

8.1.1. Planteamiento de la Investigación (PI)

Cumple el propósito de conocer y comprender el objeto de estudio, permitiendo definir el planteamiento del problema, los objetivos del proyecto y cimentar las bases de la presente propuesta de investigación. Está compuesta por las siguientes tareas:

- *Base investigativa (BI)*: se identifica el problema a resolver y se define tanto el alcance del proyecto como los objetivos específicos a cumplir. Tiempo requerido: 2 semanas.
- *Recopilación bibliográfica (RB)*: recolección de información de interés. Busca crear una fundamento sólido sobre el cual desarrollar la investigación. Tiempo requerido: 2 semanas.
- *Selección de alternativas (SA)*: a partir de los resultados obtenidos en la etapa de recopilación bibliográfica, se plantean las alternativas de solución para el inicio del diseño conceptual. Tiempo requerido: 2 semanas.

8.1.2. Diseño conceptual (DC)

Se plantea una metodología de selección de la alternativa final de diseño, teniendo en cuenta parámetros como:

- Costo de inversión inicial.
- Consumo energético.
- Tiempo de elución.

8.1.3. Diseño funcional (DF)

Conocido el sistema a diseñar, se procede a elaborar algoritmos de diseño empleando como referencia lo reportado en la literatura para definir características operacionales y tamaños de referencia.

8.1.4. Modelo CFD

Desarrollo del modelo CFD para conocer el funcionamiento del sistema de elución y filtrado empleando los métodos numéricos de volúmenes finitos (FVM) y elementos discretos (DEM).

8.1.5. Pruebas experimentales (PE)

Pruebas que verifican la eficiencia y efectividad del diseño realizado basado en el modelo CFD desarrollado.

8.1.6. Planos constructivos (PC)

Desarrollo de los planos constructivos del sistema de elución y filtrado para la planta de extracción con capacidad de procesamiento de 20 $[kg/bache]$, tres baches al día.

8.1.7. Redacción tesis (RT)

Espacio donde se espera poder redactar la tesis de maestría.

8.2. Diagrama de Gantt

Todo lo explicado anteriormente se puede apreciar gráficamente en las Figuras ?? y 19.

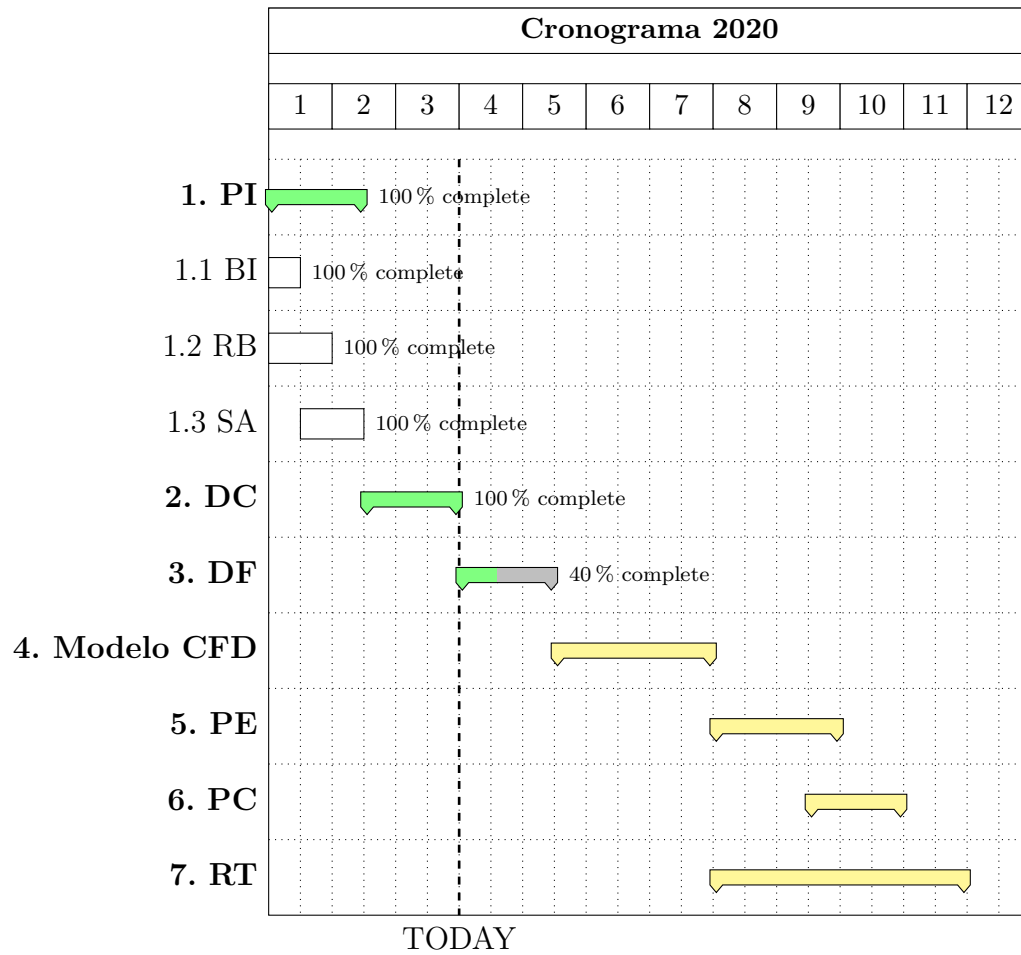


Figura 19: Cronograma 2020

8.3. Presupuesto

El informe de costos y recursos necesarios para el desarrollo de la investigación se presenta en el Cuadro 4.

Recursos y Presupuesto					
Descripción	Costo Semestral	Cantidad de Semestres	Costos Asumidos UIS	Recursos Propios	Costo Total
Investigador Principal Dedicacion Tiempo Completo	\$12.460.750	4	X		\$49.843.000
Asesor: Director Proyecto 3 horas/semana	\$9.600.000	4	X		\$38.400.000
Equipos de laboratorio	\$4.000.000	2	X		\$8.000.000
Licencias de Software	\$6.000.000	1	X		\$6.000.000
Papelería y elementos de escritorio	\$150.000	1		X	\$150.000
Libros y material bibliográfico	\$600.000	1		X	\$600.000
Equipo de Computo	\$3.400.000	1		X	\$3.400.000
Viajes (Consultoría / Congresos)	\$3.000.000	1		X	\$3.000.000
Viáticos	\$1.500.000	1		X	\$1.500.000
Imprevistos	\$1.500.000	1		X	\$1.500.000
TOTAL					\$112'393.000

Cuadro 4: Resumen de costos del proyecto.

Referencias

- [1] A. L. Capriotti, C. Cavaliere, P. Foglia, R. Samperi, S. Stampachiacchiere, S. Ventura, and A. Laganà, “Recent advances and developments in matrix solid-phase dispersion,” *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, vol. 71, pp. 186–193, sep 2015. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0165993615001387>
- [2] G. Liadakis, *Extraction Optimization in Food Engineering*, 2003.
- [3] S. A. Barker, “Matrix solid phase dispersion (MSPD),” *Journal of Biochemical and Biophysical Methods*, vol. 70, no. 2, pp. 151–162, 2007.
- [4] J. D. Argüello Plata and Ó. A. Gómez Sepúlveda, “Diseño de un prototipo de una planta destinada a la producción de extractos vegetales mediante el método de extracción de dispersión en la fase sólida - MSPD, con sistema de recuperación del solvente,” *Tech. Rep.*, 2017.
- [5] E. Stashenko, O. A. Gélvez Arocha, J. R. Martínez Morales, D. C. Durán García, J. D. Argüello Plata, and Ó. A. Gómez Sepúlveda, “Numerical simulation through the Discrete Element Method (DEM) and the Finite Volume Method (FVM) of the crushing and filtering processes for the production of vegetable extracts by the Matrix Solid-Phase Dispersion (MSPD),” in *XI Congreso Colombiano de Métodos Numéricos*, vol. 1. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander, 2017, pp. 57–66.
- [6] O. A. Gélvez Arocha, J. R. Martínez Morales, E. Stashenko, Ó. A. Gómez Sepúlveda, and J. D. Argüello Plata, “CO2018013023A1 - Equipo, proceso y producto obtenido a partir de material vegetal con propiedades biológicas - Google Patents,” 2018. [Online]. Available: <https://patents.google.com/patent/CO2018013023A1/es?inventor=juan+david+arg{\unhbox\voidb@x\bgroup\let\unhbox\voidb@x\setbox\@tempboxa\hbox{u\global\mathchardef\accent@spacefactor\spacefactor}\let\begin\group\end\group\relax\let\ignorespaces\relax\accent127u\egroup\spacefactor\accent@spacefactor\protect\penalty\@M\hskip\z@skip}ello{\&}oq=juan+david+arg{\unhbox\voidb@x\bgroup\let\unhbox\voidb@x\setbox\@tempboxa\hbox{u\global\mathchardef\accent@spacefactor\spacefactor}\let\begin\group\end\group\relax\let\ignorespaces\relax\accent127u\egroup\spacefactor\accent@spacefactor\protect\penalty\@M\hskip\z@skip}ello>
- [7] S. Martinez Florez, J. Gonzalez Gallego, J. Culebras, and J. Tunon, “Los flavonoides: propiedades y acciones antioxidantes,” *Nutrición hospitalaria: órgano oficial de la Sociedad Española de Nutrición*, vol. 17, pp. 271 – 278, 2002.

-
- [8] J. Vieira, R. Mantovani, M. Raposo, M. Coimbra, A. Vicente, and R. Cunha, “Effect of extraction temperature on rheological behavior and antioxidant capacity of flaxseed gum,” *Carbohydrate Polymers*, vol. 213, pp. 217–227, jun 2019. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0144861719302206>
- [9] F. Alobaid and B. Epple, “Improvement, validation and application of CFD/DEM model to dense gas-solid flow in a fluidized bed,” *Particuology*, vol. 11, no. 5, pp. 514–526, oct 2013.
- [10] C. Yue, Q. Zhang, and Z. Zhai, “Numerical simulation of the filtration process in fibrous filters using CFD-DEM method,” *Journal of Aerosol Science*, vol. 101, pp. 174–187, nov 2016.
- [11] A. E. Carlos Varas, E. A. Peters, and J. A. Kuipers, “CFD-DEM simulations and experimental validation of clustering phenomena and riser hydrodynamics,” *Chemical Engineering Science*, vol. 169, pp. 246–258, sep 2017.
- [12] C. A. Oliveros, “Estudio por técnicas cromatográficas y de espectometría de masas de los alcaloides harmala en extractos de *Benisteriopsis caapi* y en muestras de orina,” Ph.D. dissertation, Universidad Industrial de Santander, 2015.