

# **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

Trabajo de grado para optar al título de Magíster en Ingeniería Mecánica

Director

**Omar Armando Gélvez Arocha**

Ingeniero Mecánico M.Sc.

**Universidad Industrial de Santander**

Facultado de Ingenierías Físicomecánicas

Escuela de Ingeniería Mecánica

Maestría en Ingeniería Mecánica

2020

# Índice

<b>Introducción</b>	<b>5</b>
<b>1. Método MSPD</b>	<b>6</b>
1.1. Factores a considerar en la extracción MSPD . . . . .	7
1.2. Extracción en fase sólida . . . . .	7
1.3. Prototipo a escala . . . . .	8
<b>2. CFD</b>	<b>9</b>
2.1. Análisis unidimensional estacionario - 1D . . . . .	11
2.2. <i>Solvers</i> . . . . .	13
2.3. Metodologías de verificación y validación . . . . .	13
2.4. Análisis bidimensional estacionario - 2D . . . . .	14
<b>3. DEM</b>	<b>15</b>
3.1. Detección de una colisión . . . . .	16
<b>4. CFD-DEM</b>	<b>17</b>
4.1. Fase del solvente . . . . .	17
<b>5. Estado del Arte</b>	<b>19</b>
5.1. Análisis, comentarios y proyecciones . . . . .	25
<b>6. Formulación de la Pregunta e Hipótesis</b>	<b>26</b>
6.1. Pregunta de investigación . . . . .	26
6.2. Hipótesis . . . . .	26
<b>7. Objetivos</b>	<b>27</b>
7.1. Objetivo general . . . . .	27
7.2. Objetivos específicos . . . . .	27
<b>8. Alcance y resultados</b>	<b>28</b>
8.1. Propiedades termodinámicas del solvente . . . . .	28
8.2. Construcción del modelo CFD . . . . .	28
8.3. Pruebas experimentales . . . . .	28
8.4. Planos constructivos . . . . .	29
<b>9. Gestión del proyecto</b>	<b>30</b>
9.1. Actividades . . . . .	30
9.1.1. Planteamiento de la Investigación (PI) . . . . .	30
9.1.2. Diseño conceptual (DC) . . . . .	30
9.1.3. Diseño funcional (DF) . . . . .	30
9.1.4. Modelo CFD . . . . .	31

9.1.5. Pruebas experimentales (PE) . . . . .	31
9.1.6. Planos constructivos (PC) . . . . .	31
9.1.7. Redacción tesis (RT) . . . . .	31
9.2. Diagrama de Gantt . . . . .	31
9.3. Presupuesto . . . . .	33

## Índice de figuras

1. Método MSPD <sup>[1]</sup> . . . . .	6
2. Prototipo desarrollado <sup>[4, 6]</sup> . . . . .	8
3. Discretización del dominio (malla cartesiana). . . . .	10
4. Tipos de mallas. . . . .	11
5. Problema unidimensional. . . . .	12
6. Método de validación simple. . . . .	13
7. Discretización dominio bidimensional. . . . .	14
8. 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) . . . . .	15
9. Detección de colisión entre partículas. . . . .	16
10. Esquema de la aproximación por malla dual para la búsqueda de partículas vecinas en un fluido. . . . .	18
11. Cronograma 2020 . . . . .	32

## Resumen

<b>Título:</b>	Diseño del sistema de elución y filtrado de una planta de extracción <sup>1</sup>
<b>Autor:</b>	Juan David Argüello Plata <sup>2</sup>
<b>Palabras clave:</b>	CFD-DEM, MSPD, Python, Jupyter, ParaView, OpenFoam, Yade

### Contenido:

El proceso de extracción basado en el método de dispersión de la matriz en fase sólida, MSPD, consiste de tres etapas. La primera es la etapa de pretratamiento, o de molienda, en donde se busca disminuir el tamaño de partícula del material orgánico con el fin de incrementar el área de transferencia de masa. La siguiente se trata de la etapa de elución y filtrado, en donde se produce la extracción de metabolitos secundarios a través de un solvente; luego, se filtra el material particulado para obtener la mezcla homogénea solvente - extracto. Finalmente, se desarrolla una etapa de separación de sustancias, en donde se separa el solvente del extracto (producto final).

Se propone una metodología de diseño automático del sistema de elución y filtrado que simula el comportamiento fluidodinámico durante la etapa de filtrado, permitiendo predecir el grado de concentración de partículas a lo largo del sistema a través de un modelo numérico basado en CFD-DEM. Esta metodología ha sido elaborada con 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.

---

<sup>1</sup>Tesis de grado de maestría en ingeniería mecánica.

<sup>2</sup>Facultad: Físicomecánicas. Escuela: Ingeniería mecánica. Director: Omar Armando Gélvez Arocha.

## Abstract

**Título:** Design of the elution and filtering system of an extraction plant<sup>3</sup>

**Author:** Juan David Argüello Plata<sup>4</sup>

**Key words:** CFD-DEM, MSPD, Python, Jupyter, ParaView, OpenFoam, Yade

### Content:

The extraction process based on the matrix solid-phase dispersion (MSPD) can be summarized in three steps. The first one is the pretreatment, which consists of decreasing the particle size of organic material to increase mass transfer area. The next one consists of the elution and filtering step, where the extraction of secondary metabolites is produced with the help of a solvent. Finally, a separation process is required to reuse the solvent for future extraction processes and to obtain the final product (extract).

An automatic design methodology is proposed, from where the fluid dynamics behaviour is simulated during the filtering process, allowing to predict the particle concentration along the system through a numerical model based on CFD-DEM. This methodology had been elaborated with open source tools. Using Python as base language, Jupyter as development environment, ParaView as platform for analysis of results and C++ libraries (like Yade, LIGGGHTS and OpenFoam) for the developement of numerical simulations.

---

<sup>3</sup>Master thesis project.

<sup>4</sup>Faculty: Physical mechanical engineering. School: Mechanical engineering. Director: Omar Armando Gélvez Arocha.

## Introducción

El método de *dispersión de la matriz en fase sólida*, MSPD, es un método de extracción ampliamente usado a escala de laboratorio para la obtención y análisis de la actividad biológica de extractos. Consiste de tres etapas: pretratamiento; elución y filtrado; y separación de sustancias. El éxito de este método extractivo recae en su simplicidad, rapidez y economía<sup>[3]</sup>; razones por las que se han desarrollado estudios de escalabilidad en busca de la industrialización<sup>[4, 5, 6]</sup>. En estos estudios se ha reportado un cuello de botella<sup>5</sup> durante la etapa de filtrado. Debido a ello, la presente investigación desarrolla una metodología de diseño enfocada en la etapa de filtrado de una planta de extracción basada en el método MSPD; en dónde se aprecia en detalle la concentración de partículas a lo largo del sistema de elución y filtrado, permitiendo la optimización del mismo a través de un modelo numérico validado mediante experimentación.

En general, 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*, o como es mejor conocido: *modelo 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<sup>[9]</sup>, separadores de ciclón (Chu *et al.*, 2009) y para el estudio de retención de partículas en medios filtrantes<sup>[10]</sup>, por citar algunos ejemplos. Se han desarrollado estudios experimentales que corroboran la efectividad y viabilidad de las simulaciones numéricas que emplean CFD-DEM<sup>[9, 11]</sup>.

---

<sup>5</sup>En el prototipo desarrollado, se evidenció que la etapa de filtrado requiere de un tiempo cercano al doble en comparación con las otras etapas del proceso de extracción.

## 1. Método MSPD

El método de dispersión de la matriz en fase sólida (MSPD, por sus siglas en inglés) ha sido 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 de este método de extracción.

Consiste, básicamente, de tres etapas (como se puede observar en la Figura 1):

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*.

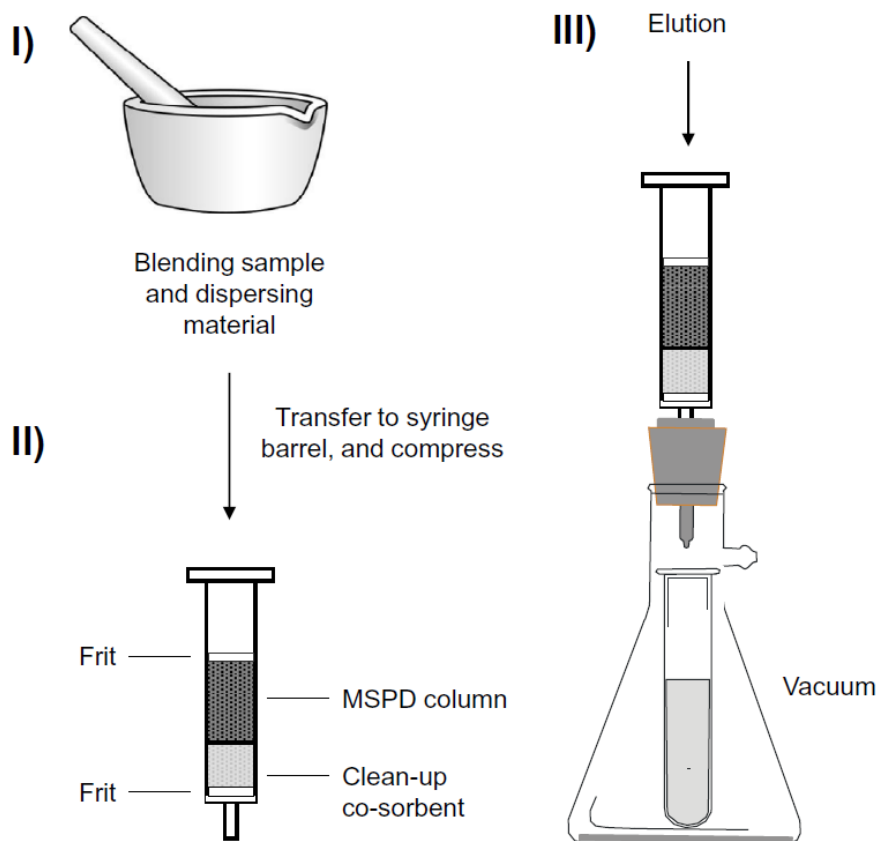


Figura 1: Método MSPD<sup>[1]</sup>.



## 1.1. 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  $\mu m$ ) 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 <sup>[3]</sup>, 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  $^{\circ}C$  <sup>[8]</sup>.

## 1.2. Extracción en fase sólida

El método MSPD presenta diferencias claras respecto a la extracción fase sólida clásica (SPE, por sus siglas en inglés); entre ellas<sup>[3]</sup>:

1. Al emplear el método MSPD, se consigue una disrupción completa de la muestra en partículas de reducido tamaño, incrementando el área de extracción. En SPE, la disrupción de la muestra se considera un paso *adicional*, donde muchos de los compuestos se descartan al procesar la muestra para la columna SPE.
2. En SPE, la muestra es usualmente absorbida en la parte superior de la columna y no a través de ella, como en el método MSPD.
3. La interacción física y química de los compuestos del sistema son mayores en el método MSPD y diferentes, en diversos sentidos, de aquellos apreciados en el SPE clásico, incluyendo otras formas de cromatografía líquida.

### 1.3. Prototipo a escala

Se han desarrollado estudios experimentales sobre un prototipo a escala de una planta de extracción con capacidad productiva de  $1[kg/bache]$ , tres baches al día. El flujo de trabajo se puede apreciar en la Figura 2.

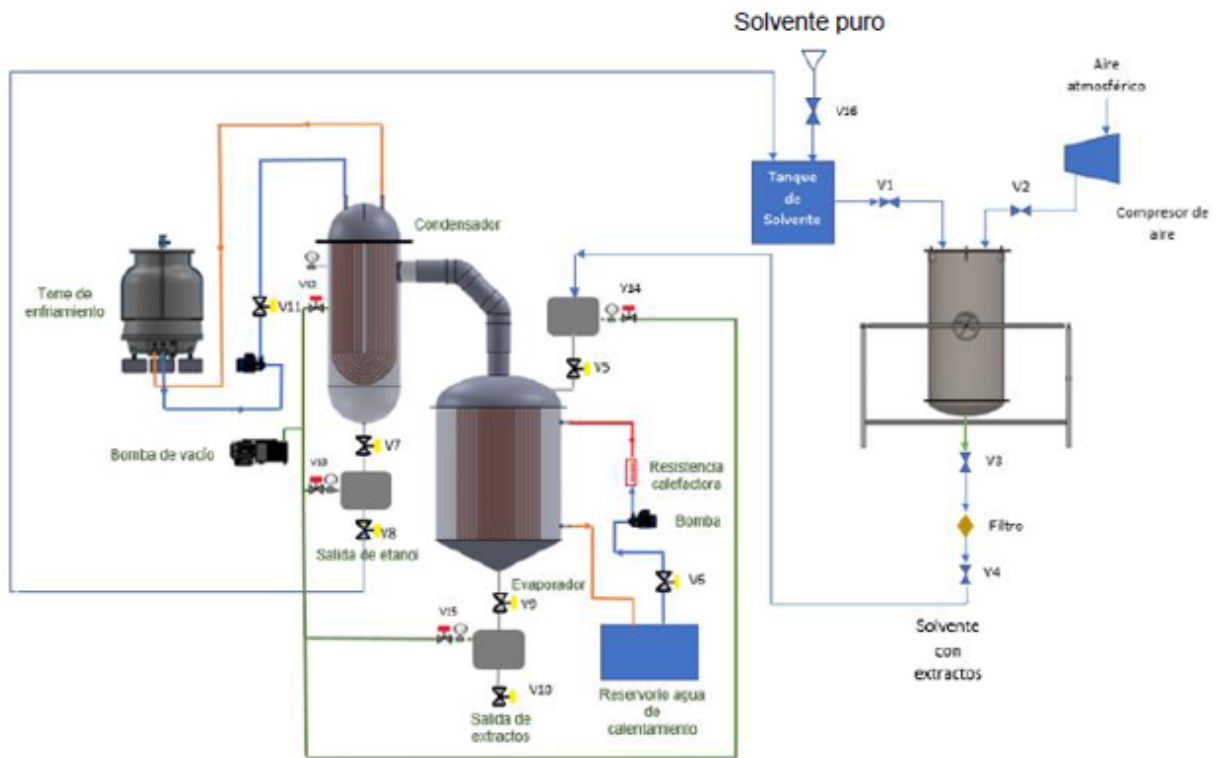


Figura 2: Prototipo desarrollado<sup>[4, 6]</sup>.

La invención desarrollada consiste de:

- Molino de bolas diseñado como recipiente a presión.
- Unidad compresora de aire.
- Evaporador.
- Condensador.
- Sistema de calentamiento de agua por resistencia eléctrica.
- Torre de enfriamiento.

## 2. CFD

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, como se aprecia en la Figura 3. 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.

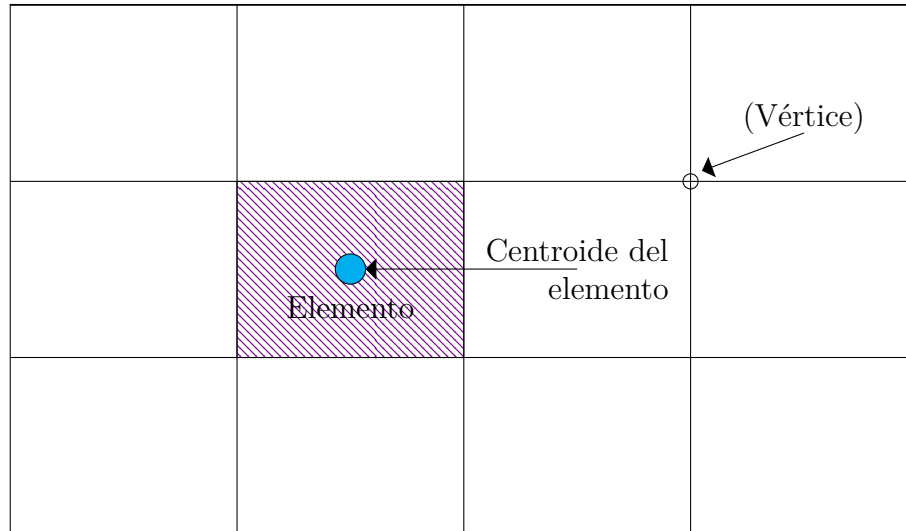


Figura 3: Discretización del dominio (malla cartesiana).

Existen dos tipos de mallas para el análisis mediante CFD, como se aprecia en la Figura 4.

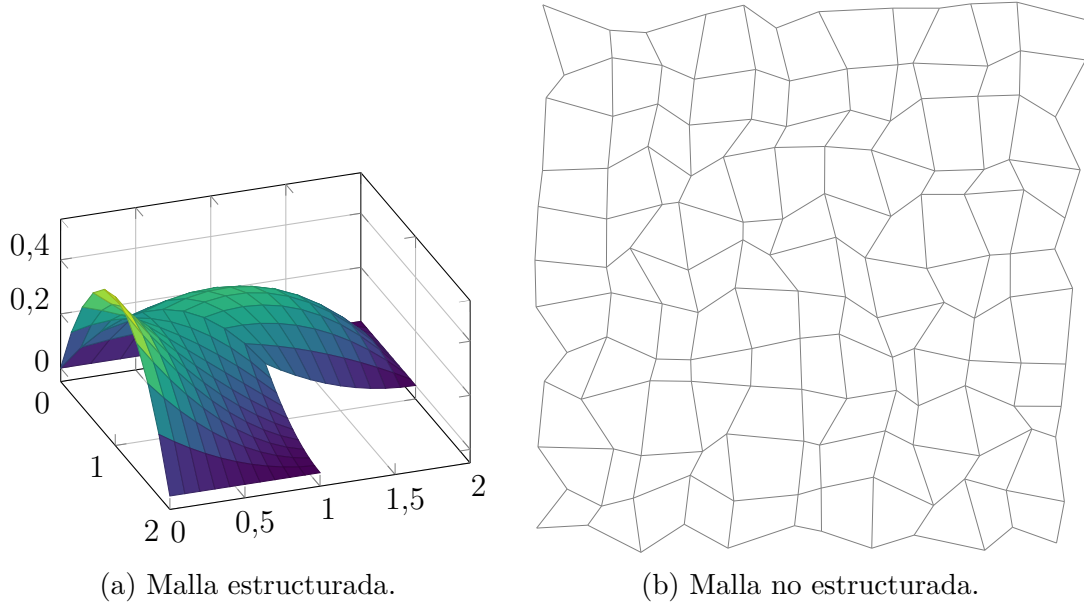


Figura 4: Tipos de mallas.

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

## 2.1. 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 5), 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:

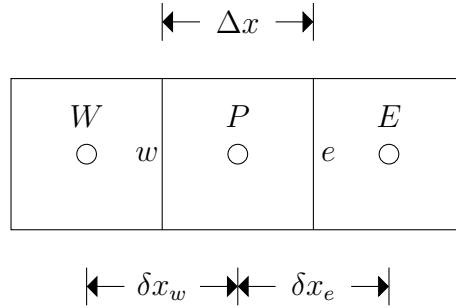


Figura 5: Problema unidimensional.

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 1: Condiciones de frontera - problema unidimensional.

## 2.2. 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, su 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.

## 2.3. 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 6.

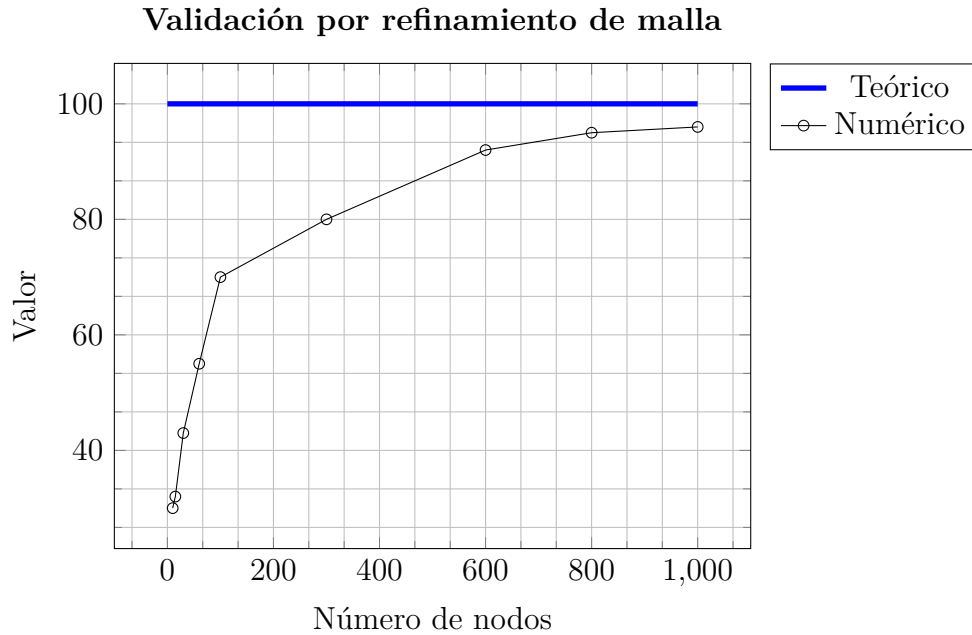


Figura 6: Método de validación simple.

- *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.

## 2.4. 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 7.

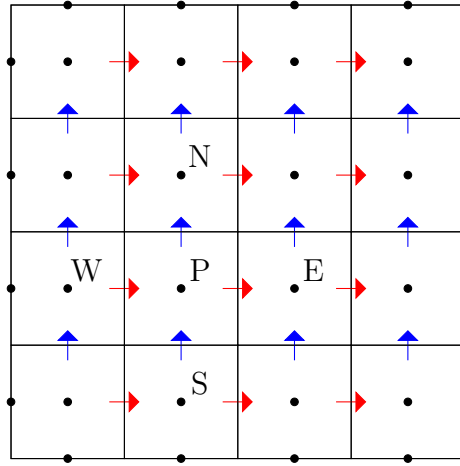


Figura 7: Discretización dominio bidimensional.

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  $\phi$  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. 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.

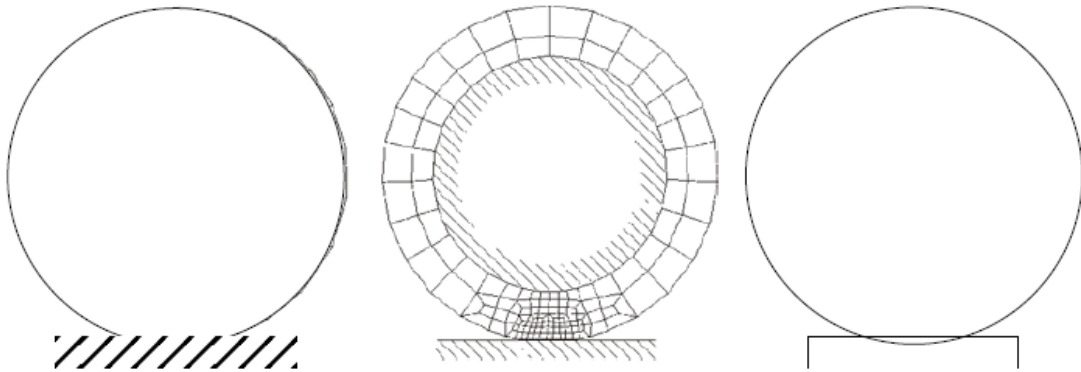


Figura 8: Comparación entre metodologías de análisis de partículas para una esfera suave deformada en un plano: situación física real (izquierda), modelo analizado con el método de elementos finitos (centro) y modelo con el método de elementos discretos (derecha)

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.

### 3.1. 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 9.

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

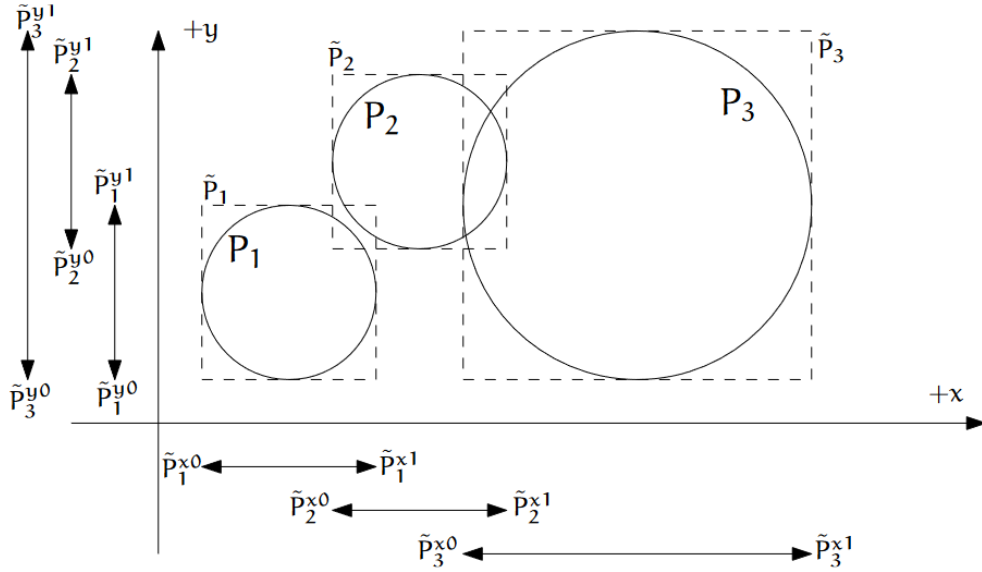


Figura 9: Detección de colisión entre partículas.

## 4. CFD-DEM

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.

### 4.1. 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 3) 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 interpolar 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 10, se crean dos mallas alineadas de búsqueda: la malla de búsqueda de partículas (amarilla) y la malla de búsqueda de fluido (azul).

Los pasos clave con los que se basan las mallas de búsqueda son: detección de colisión de partículas (descrito en la sección 3.1), geometría de los elementos de

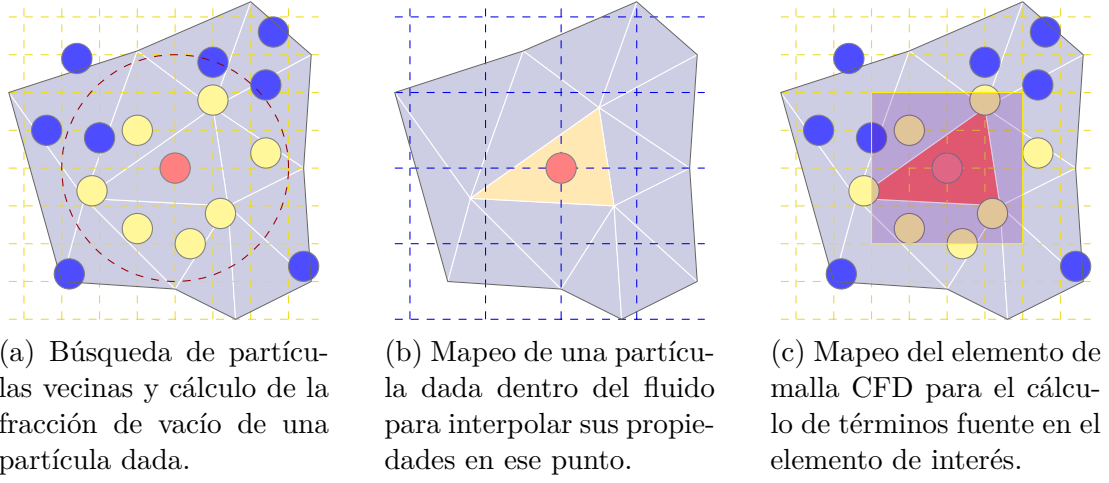


Figura 10: Esquema de la aproximación por malla dual para la búsqueda de partículas vecinas en un fluido.

malla CFD (detallado en la sección 2.4) 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:  $\phi_p$  y  $\phi_{el}$  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.

## 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\\begingroup\\endgroup\\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\\begingroup\\endgroup\\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.