

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

Introducción	7
Proceso de extracción	8
Objeto de estudio	9
Organización de la tesis	11
1. Marco teórico	12
1.1. Método de Dispersión de la Matriz en Fase Sólida	12
1.1.1. Factores a considerar en la extracción MSPD	13
1.1.2. Extracción en fase sólida	14
1.2. Dinámica de Fluidos Computacional	14
1.2.1. Solucionadores	16
1.2.2. Metodologías de verificación y validación	16
1.2.3. Análisis bidimensional - 2D	17
1.3. Método de Elementos Discretos	18
1.3.1. Detección de una colisión	19
1.4. Método CFD-DEM	20
1.4.1. Fase del solvente	21
1.4.2. Enfoque <i>Euler - Lagrange</i>	23
1.4.2.1. Planteamiento numérico	24
1.5. Sedimentación	25
1.5.1. Sedimentadores convencionales	25
1.5.2. Sedimentador de placas inclinadas	27
1.5.2.1. Desarrollo teórico	27
1.5.2.2. Modelo simplificado	30
2. Metodología	39
2.1. Recopilación de datos	40
2.2. Propiedades del fluido	40
2.3. Velocidad máxima de sedimentación	41
2.4. Geometría de lamelas	41
2.5. Ancho del sedimentador	42
2.6. Cálculo de Re y v_0	42
2.7. Tubería de entrada y tolva de sedimentos	42
2.8. Discretización del volumen de control	42
2.9. Checkeo de malla	42
2.10. Metodología de frontera	43
2.11. Metodología CFD	44
2.12. Cálculo del error	45
2.13. Metodología CFD-DEM	45
2.14. Software de diseño	46
2.14.1. Frontend	47

2.14.2. Backend	50
2.14.2.1. Diseño funcional teórico	51
2.14.2.2. Simulaciones numéricas	51
3. Resultados	53
3.1. Propiedades del fluido	53
3.2. Velocidad máxima de sedimentación	53
3.3. Geometría inicial	53
3.4. Mallado de la geometría	55
3.5. Condiciones de frontera	56
3.6. Simulación CFD	57
3.7. Error computacional	58
3.8. Simulación CFD-DEM	59
4. Análisis de resultados	62
5. Validación del modelo	64
5.1. Descripción del problema	64
5.2. Desarrollo experimental	65
5.2.1. Descripción particular	65
5.2.2. Métodos experimentales	67
5.3. Resultados	68
Conclusiones	71
Recomendaciones	72

Índice de figuras

1. Extracción	8
2. Proceso productivo de la planta de extracción	10
3. Método MSPD ^[1]	13
4. Discretización del dominio (malla cartesiana)	15
5. Tipos de mallas ^[22]	16
6. Método de validación simple	17
7. Discretización dominio bidimensional	18
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). Fuente: Šmilauer 2015 ^[2]	19
9. Detección de colisión entre partículas. Fuente: Šmilauer 2015 ^[2]	20

10.	Esquema de la aproximación por malla dual para la búsqueda de partículas vecinas en un fluido.	22
11.	Interacción dinámica entre partículas.	24
12.	Esquema de un sedimentador de placas inclinadas ^[3]	27
13.	Análisis de una lamela.	28
14.	Dinámica de la partícula.	30
15.	Cinemática de una partícula sólida.	32
16.	Esquema de la metodología de diseño del presente trabajo. . . .	39
17.	Metodología de cálculo de la velocidad de sedimentación máxima. . . .	41
18.	Zona de generación de partículas en la tubería de entrada. . . .	43
19.	Condiciones de frontera.	43
20.	Solucionador <code>pimpleFoam</code>	44
21.	Simulación CFD-DEM.	46
22.	Interfaz gráfica de ejemplo desarrollada con Jupyter. Fuente: https://jupyterlab.readthedocs.io	
23.	Parte de la interfaz gráfica desarrollada para la automatización del modelo CFD-DEM.	48
24.	Sección de mallado automático del software desarrollado mediante <code>gmsh</code>	49
25.	Árbol de directorios.	50
26.	Vista en corte de la geometría del sistema de sedimentación. . . .	54
27.	Mallado inicial de la geometría.	55
28.	Diagrama de contorno de la distribución de velocidades.	57
29.	Diagrama de contorno de la distribución de presiones.	57
30.	Cambio de la velocidad máxima con respecto al refinamiento de malla.	58
31.	Cambio de la presión máxima con respecto al refinamiento de malla.	59
32.	Simulación CFD-DEM → interacción fluido-partícula.	60
33.	Diagrama de contorno de velocidad $t = 60[s]$	61
34.	Diagrama de contorno de presión $t = 60[s]$	61
35.	Monitoreo de residuales en la simulación CFD-DEM.	63
36.	Geometría de estudio.	64
37.	Esquema del montaje experimental ^[4]	66
38.	Esquema del sistema de medición de la interacción partícula fluido ^[4]	67
39.	Comparación entre resultados del diseño experimental desarrollado por Fessler & Eaton y los obtenidos a partir del modelo CFD-DEM desarrollado.	69
40.	Resultados obtenidos a partir del modelo CFD-DEM desarrollado.	69
41.	Distribución de las partículas de cobre sobre la geometría.	70
42.	Comparación directa de los perfiles de velocidad experimentales con respecto al del modelo numérico desarrollado.	70
43.	Inicio del software.	79
44.	Datos y propiedades del solvente.	80
45.	Velocidad de asentamiento máxima.	81

46.	Geometría inicial.	82
47.	Datos del mallado de la geometría.	83
48.	Mallado de la geometría.	84
49.	Características del mallado.	85
50.	Cambios en el mallado.	86
51.	Cambios en el mallado.	87
52.	Cambios en el mallado.	88

Resumen

Título: Diseño del sistema de elución y filtrado de una planta de extracción¹

Autor: Juan David Argüello Plata²

Palabras clave: 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.

¹Tesis de grado de maestría en ingeniería mecánica.

²Facultad: Físicomecánicas. Escuela: Ingeniería mecánica. Director: Omar Armando Gélvez Arocha.

Abstract

Título: Design of the elution and filtering system of an extraction plant³

Author: Juan David Argüello Plata⁴

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.

³Master thesis project.

⁴Faculty: 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^[5]; razones por las que se han desarrollado estudios de escalabilidad en busca de la industrialización^[6, 7, 8]. La presente investigación desarrolla una metodología de diseño enfocada en la etapa de elución y filtrado de una planta de extracción, basada en el método MSPD. Esta metodología de diseño emplea métodos numéricos que garantizan el correcto desempeño y funcionalidad del sistema.

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: *método CFD-DEM*.

El acoplamiento entre CFD-DEM es 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^[10] y para el estudio de retención de partículas en medios filtrantes^[11], por citar algunos ejemplos. Se han desarrollado estudios experimentales que corroboran la efectividad y viabilidad de las simulaciones numéricas que emplean CFD-DEM^[9, 12].

La metodología de diseño del sistema de elución y filtrado de la planta de extracción, basada en el método CFD-DEM, permite analizar la interacción fluido-partícula a través de diferentes resultados; entre ellos: perfiles de velocidad, de presión y grado de concentración de partículas a lo largo del volumen de control. Esta metodología se elaboró con herramientas de *código abierto*; empleando Python como lenguaje base, Jupyter como entorno de desarrollo, ParaView como plataforma de análisis de resultados y librerías de C++ (entre ellas: LIGGGHTS y OpenFOAM) para el desarrollo de las simulaciones numéricas. El modelo numérico desarrollado ha sido validado a través de la comparación directa entre los resultados obtenidos por éste con un caso reportado en la literatura.

Proceso de extracción

El concepto de *extracción* se concibe como la obtención de un producto “A”, procedente de una materia prima “B”, mediante procesos físico-químicos de separación de sustancias. La naturaleza de esta materia prima, procesada en la planta de extracción de estudio, es de origen orgánico; tratándose de hojas, ramas, frutos, flores y raíces procedentes de **plantas aromáticas y medicinales**.

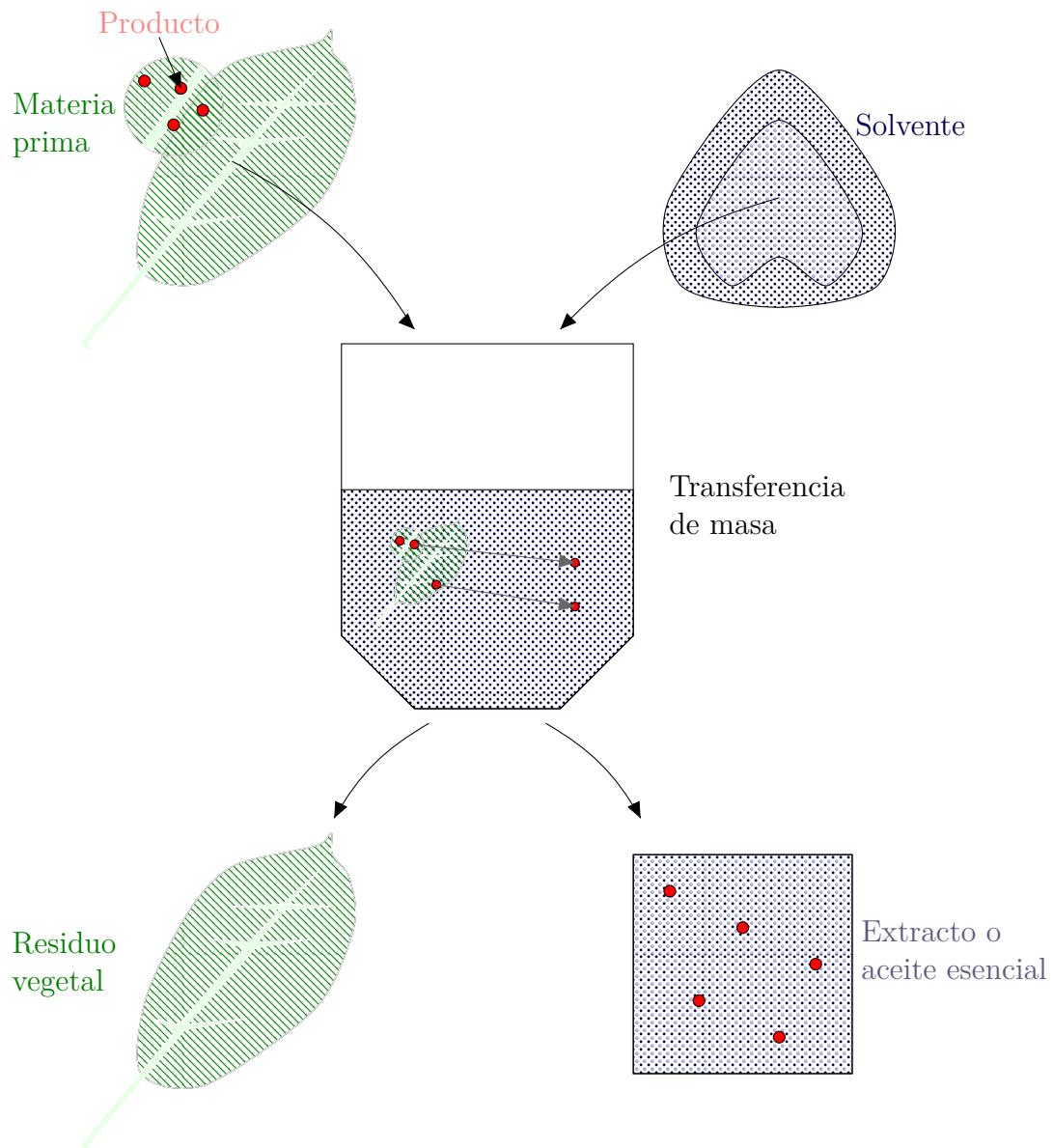


Figura 1: Extracción.

El producto obtenido en la extracción puede tratarse de aceite esencial o extracto, dependiendo de las *condiciones termodinámicas* del proceso. El aceite esencial se compone de moléculas de bajo y mediano peso molecular y son empleados por las plantas para garantizar su supervivencia. Pertenece a diferentes clases de sustancias químicas (fenoles y terpenos, principalmente)^[13]. Se caracterizan por un olor típico y una alta volatilidad. En términos productivos, se requiere garantizar condiciones de ebullición durante la etapa de transferencia de masa para poder obtener aceite esencial. El solvente (normalmente agua) que está en contacto con la materia prima puede estar en estado líquido (hidrodestilación)^[14] o gaseoso (destilación por arrastre con vapor)^[15]. La mezcla gaseosa entre el vapor del solvente y el aceite esencial es condensada y separada a través de decantación.

El **extracto**, producto de estudio del presente trabajo, se compone de metabolitos y *flavonoides* → sustancias de alto peso molecular (no volátiles). Los flavonoides procedentes de algunas especies endémicas de la región (entre ellas, el género *Lippia*, de la familia Verbenaceae) presentan diferentes propiedades de interés en la medicina tradicional colombiana^[16], por lo que representan una interesante oportunidad de innovación en la elaboración de productos farmacéuticos de alto impacto en el mundo^[17], por citar una de sus múltiples aplicaciones. Debido a ello, se han desarrollado estudios referentes a la actividad biológica de extractos de diferentes especies vegetales (existen más de un millón de artículos científicos en la base de datos de *science direct* con las palabras clave *natural extracts*); naciendo de allí la necesidad de desarrollar plantas de extracción para suprir la demanda en auge de ingredientes naturales.

Objeto de estudio

Argüello, J.D. *et al* patentaron una planta de extracción para la producción de extractos vegetales^[8]. La invención consiste de un molino de bolas, rediseñado como recipiente a presión, una unidad evaporadora, un condensador, una torre de enfriamiento, una bomba centrífuga, mecanismo de calentamiento por resistencia eléctrica, una bomba de vacío, un compresor de aire y un filtro micrométrico.

El proceso productivo de la invención (ver Figura 2) consiste en lo siguiente: al material vegetal seco y post-destilado se le realiza un proceso de *molienda* con la ayuda de un agente dispersante (material abrasivo, normalmente arena de río), disminuyendo el tamaño de partícula del material vegetal. A esta mezcla sólida entre el material vegetal pulverizado y la arena de río se eluye un solvente, produciéndose el fenómeno de extracción mostrado en la Figura 1 y dando paso a la etapa de **elución y filtrado**. El molino de bolas se adapta, con la ayuda de un mecanismo rotatorio, para dar paso a la separación de la mezcla heterogénea sólido - líquida. La mezcla se presuriza con la ayuda del compresor de aire y esta se separa a través del filtro micrométrico en las fases sólida y líquida de la mezcla.

La fase líquida consiste en la mezcla homogénea entre el solvente y el extracto. Finalmente, se emplea un sistema de evaporación al vacío para separar el solvente del extracto (producto final).

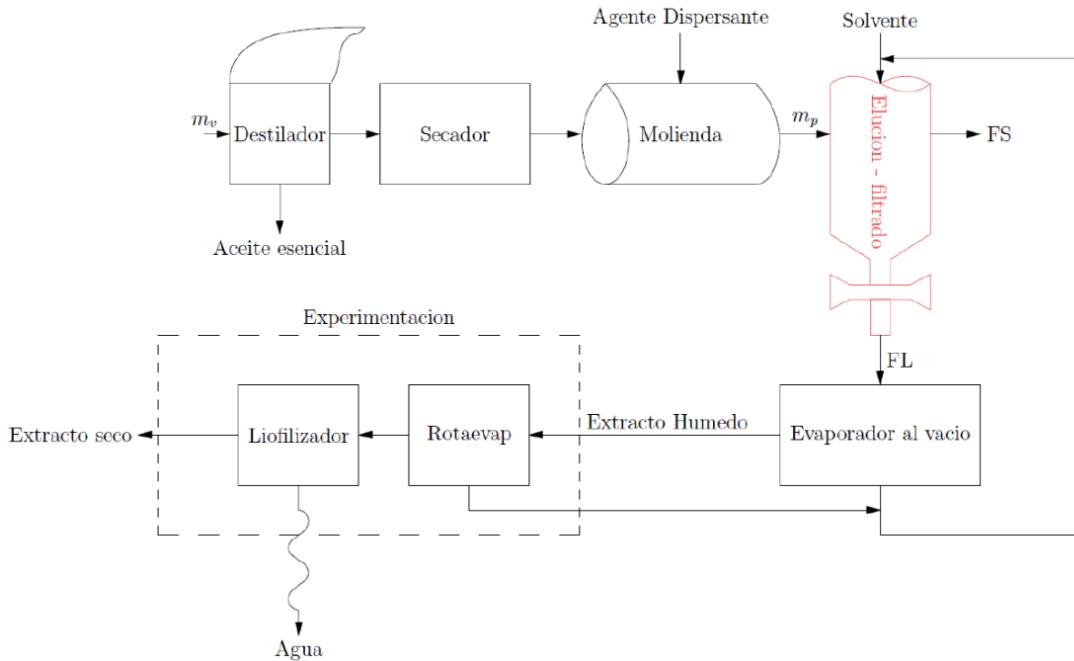


Figura 2: Proceso productivo de la planta de extracción.

De la Figura 2: m_v es la materia prima vegetal, el agente dispersante se trata de un material auxiliar altamente abrasivo (en la mayoría de aplicaciones, se trata de arena de río), m_p es la mezcla entre material vegetal pulverizado y el agente dispersante, FS se trata del residuo sólido y FL es la fase líquida → mezcla homogénea entre el solvente y el extracto.

En pruebas experimentales desarrolladas a la planta construida, se identificó que la etapa de elución y filtrado es el *cuello de botella* del proceso productivo; debido a que el tiempo de esta etapa es cerca del doble del tiempo requerido por las otras etapas. Por esta razón, en este trabajo se evalúa la viabilidad de un sistema de sedimentación de placas paralelas como sistema de elución y filtrado de la planta de extracción; desarrollando, además, una metodología de diseño automático a través de herramientas de código abierto. Esta metodología automatiza el proceso de diseño empleando métodos numéricos (capítulo ??) que permiten predecir el comportamiento fluido-partícula durante la separación de las fases sólida y líquida. La metodología fue validada mediante un estudio experimental reportado en la literatura (capítulo 5).

Organización de la tesis

El presente trabajo se organiza de la siguiente manera:

Número del capítulo	Nombre del capítulo	Objetivo
-	Introducción	Explica brevemente el caso de estudio y la razón por la que se desarrolló el presente trabajo.
1	Marco teórico	Contiene todos los conceptos y teorías empleadas para la ejecución de la tesis.
2	Metodología	Explica de forma detallada la lógica de ejecución.
3	Resultados	Contiene todos los resultados obtenidos del trabajo de investigación
4	Análisis de resultados	Expone el análisis de los resultados obtenidos.
5	Validación del modelo	Resuelve, mediante el método CFD-DEM, un caso experimental reportado en la literatura.
-	Conclusiones	Expone las conclusiones alcanzadas con base en los resultados obtenidos y al análisis desarrollado.
-	Recomendaciones	Capítulo en donde se explican los retos y avances que complementan la presente investigación.
-	Anexo A	Contiene evidencia visual de la funcionalidad del software desarrollado con herramientas de código abierto.

Cuadro 1: Organización de la tesis.

1. Marco teórico

El marco teórico se compone de los siguientes temas:

- Método de dispersión de la matriz en fase sólida: método ampliamente usado a escala de laboratorio para la extracción de analitos de interés de extractos procedentes de muestras biológicas. La planta de extracción desarrollada fue diseñada con base en este método experimental.
- Dinámica de Fluidos Computacional: herramienta computacional ampliamente usada para el análisis de procesos que emplean fluidos de carácter laminar o turbulento, gaseoso o líquido y de tipo Newtoniano o no Newtoniano.
- Método de Elementos Discretos: método numérico que permite modelar la interacción dinámica de procesos mecánicos que emplean partículas.
- Método CFD-DEM: acoplamiento entre la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) y el Método de Elementos Discretos (DEM, por sus siglas en inglés). Permite analizar problemas que emplean tanto fluidos como partículas.
- Sedimentación: expone el fenómeno físico base empleado para la separación de mezclas sólido-líquido. A su vez, explica los sistemas de sedimentación conocidos en la literatura; enfocándose en la metodología de diseño teórico de sedimentadores de placas inclinadas para la propuesta de un diseño inicial del sistema de elución y filtrado de la planta de extracción.

1.1. Método de Dispersión de la Matriz en Fase Sólida

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^[5, 1, 18]. Existen más de 250 publicaciones en las que se emplea este método extractivo para el análisis de extractos de distintas naturalezas^[5]. 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 3):

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*.

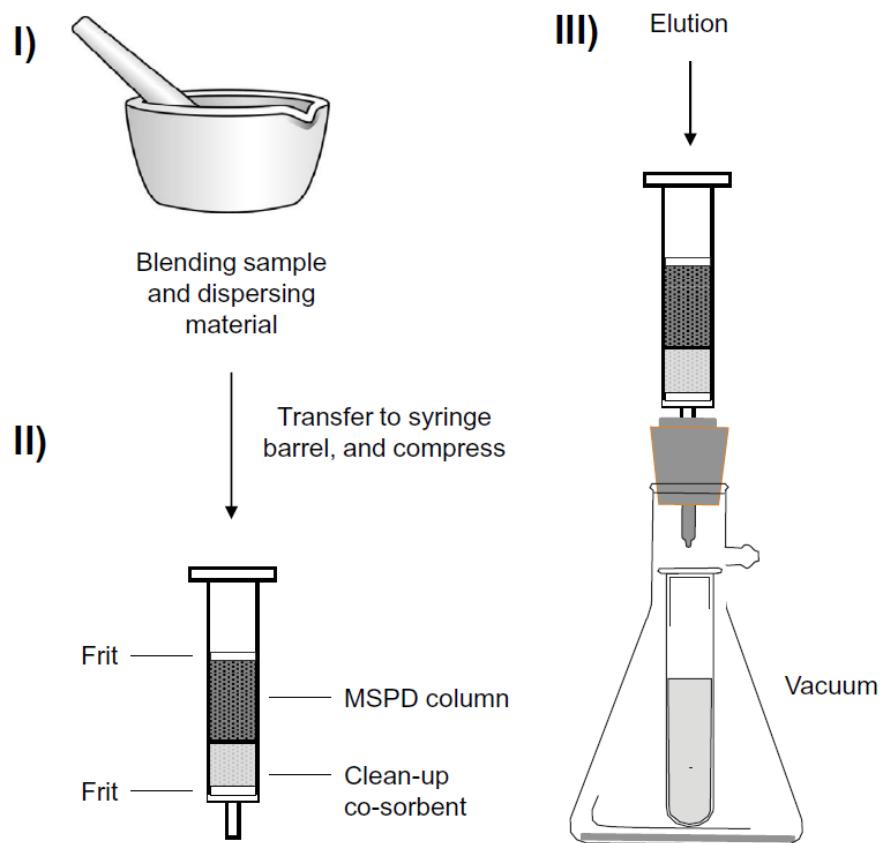


Figura 3: Método MSPD^[1].

1.1.1. 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 μm ^[5]) 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 disruptión 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^[5], 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 [°C]^[19].

1.1.2. 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^[5]:

1. Al emplear el método MSPD, se consigue una disruptión completa de la muestra en partículas de reducido tamaño, incrementando el área de extracción. En SPE, la disruptión 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.

1.2. Dinámica de Fluidos Computacional

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 4. Estas

características lo hacen adecuado para que la simulación presente una variedad de aplicaciones que involucran: 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:

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

- Ecuaciones de momento:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$$

De estas ecuaciones, los componentes desconocidos suelen ser la presión y velocidad. Se requieren condiciones iniciales y de frontera para definir el problema. 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^[20].

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^[21].

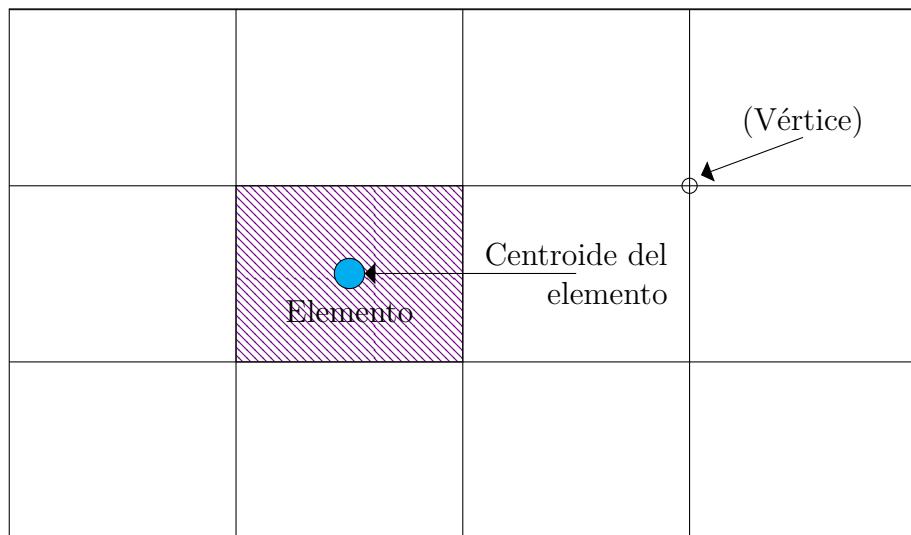


Figura 4: Discretización del dominio (malla cartesiana).

Existen dos tipos de mallas para el análisis mediante CFD, como se aprecia en la Figura 5.

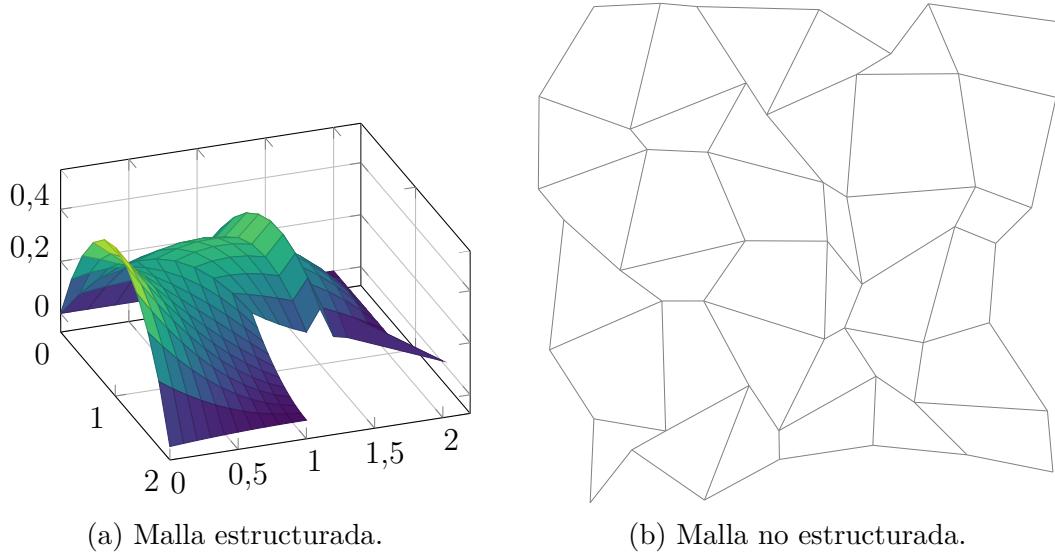


Figura 5: Tipos de mallas^[22].

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

1.2.1. Solucionadores

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 *corroboration*. El método de Gauss - Seidel^[23], 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.

1.2.2. Metodologías de verificación y validación

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

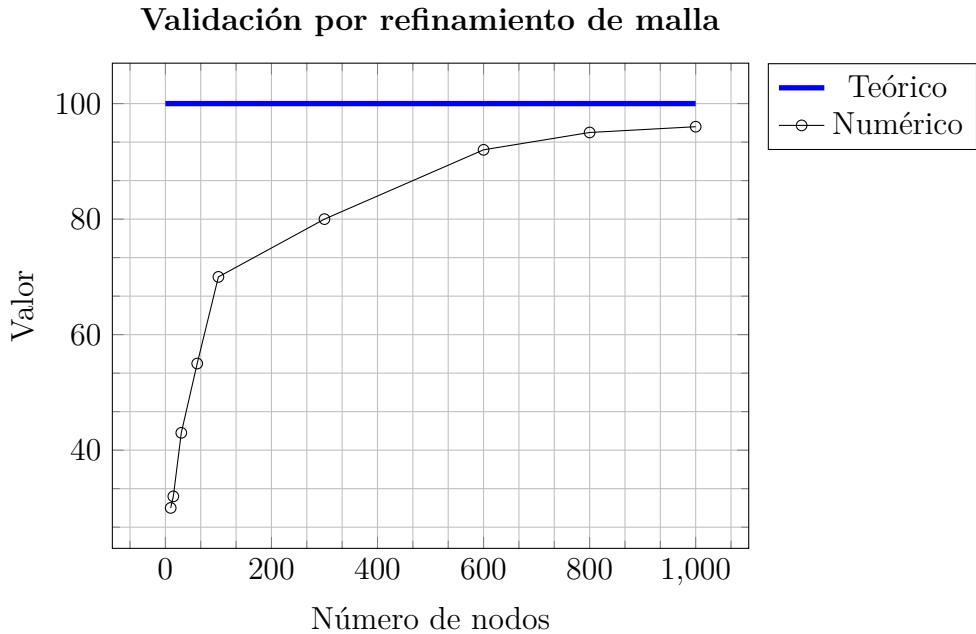


Figura 6: Método de validación simple.

- *Simple*: estudio de la evolución global o local de una variable debido al refinamiento de malla, como se aprecia en la Figura 6.
- *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.

1.2.3. Análisis bidimensional - 2D

Para análisis bidimensional, se busca resolver la Ecuación 1.

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{transitorio}} + \underbrace{\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y}}_{\text{convectivo}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)}_{\text{difusivo}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{fuente}} \quad (1)$$

La discretización del dominio se realiza acorde a la Figura 7.

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:

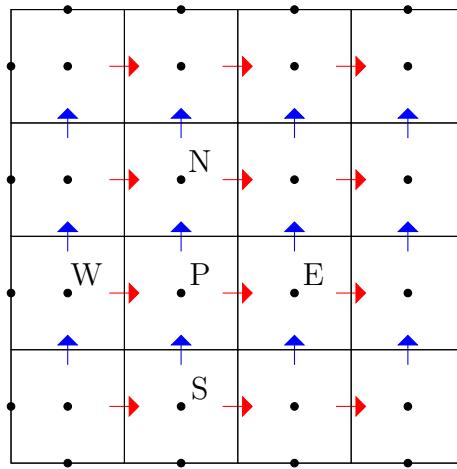


Figura 7: Discretización dominio bidimensional.

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

1.3. Método de Elementos Discretos

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.

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.

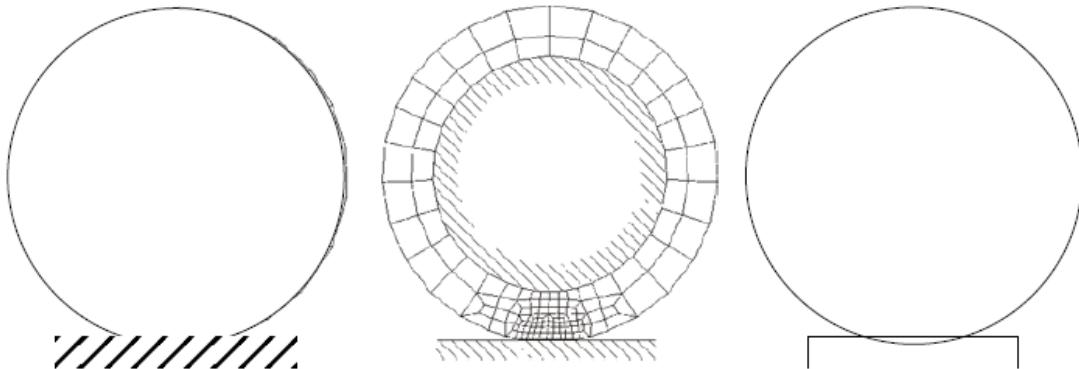


Figura 8: Comparación entre metodologías de análisis de partículas para una esfera suave deformada en un plano: situación física real (izquierda), modelo analizado con el método de elementos finitos (centro) y modelo con el método de elementos discretos (derecha). Fuente: Šmilauer 2015^[2].

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.

1.3.1. 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 estos preconstrucciones en el modo que características individuales P_i y P_j satisfacen la siguiente condición mostrada en la Ecuación 3.

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

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

$$(\tilde{P}_i \cap \tilde{P}_j) = \emptyset \rightarrow (P_i \cap P_j) = \emptyset \quad (4)$$

2. Al filtrar las colisiones imposibles mediante la Ecuación 4, algoritmos de detección de mayor costo computacional pueden ser implementados al filtrar falsas parejas de colisión restantes, como se observa en la Figura 9.

$$(\tilde{P}_i \cap \tilde{P}_j) \neq \emptyset \wedge (P_i \cap P_j) = \emptyset \quad (5)$$

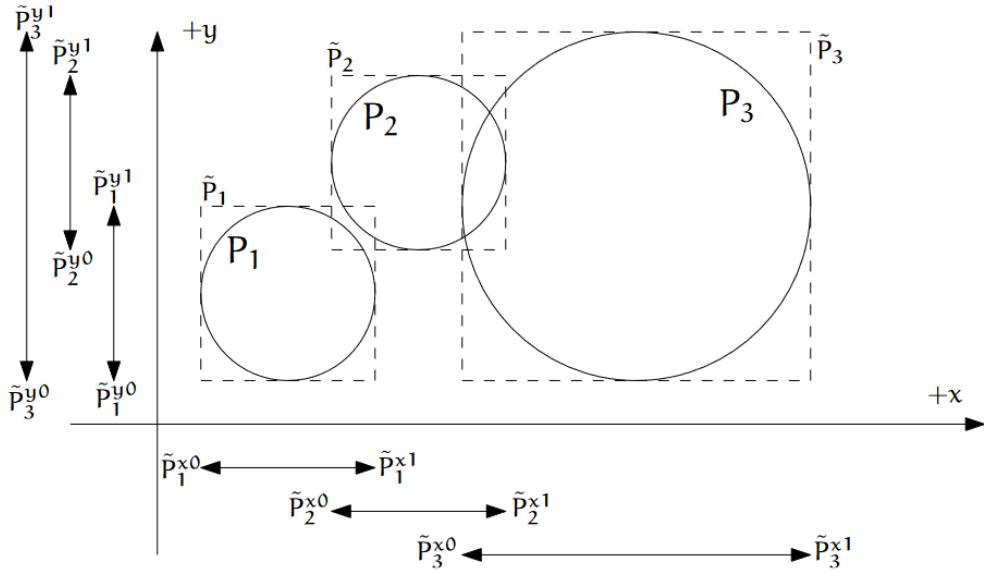


Figura 9: Detección de colisión entre partículas. Fuente: Šmilauer 2015^[2].

Yade^[2] emplea un algoritmo conocido como “Aabb” (*Caja de contorno para alineación de eje*, por sus siglas en inglés); visualmente, consisten en los rectángulos de contorno que rodean cada esfera de la Figura 9. Cada caja de contorno es usada como \tilde{P}_i ; estando definida cada una por sus esquinas εR^3 siendo \tilde{P}_i^{x0} y \tilde{P}_i^{x1} las coordenadas en el eje x de la esfera P_1 , por ejemplo.

La presencia de superposición entre partículas entre dos Aabb’s se determina mediante el conjunto de superposición separada de intervalos sobre cada eje. Está representada por la Ecuación 6.

$$(\tilde{P}_i \cap \tilde{P}_j) \neq \emptyset \iff \bigwedge_{w \in \{x,y,z\}} [((\tilde{P}_i^{w0}, \tilde{P}_i^{w1}) \cap (\tilde{P}_j^{w0}, \tilde{P}_j^{w1})) \neq \emptyset] \quad (6)$$

1.4. Método 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).

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 parallelización 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 parallelización 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) parallelizaron 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.

Los modelos computacionales para flujos fluido-partícula se pueden clasificar en una de estas dos categorías: Euler - Euler (E-E) y Euler - Lagrange (E-L). El modelo E-E, que se conoce también como el modelo de “*dos fluidos*”^[24, 25]; en donde se trata tanto a las fases de la partícula como del fluido como una mezcla de dos fluidos continuos y es normalmente empleado para investigar el flujo en grandes sistemas industriales. Desde este enfoque, es necesario establecer una relación constitutiva para encontrar las propiedades de las partículas en el medio tales como densidad o viscosidad. “A pesar de la gran historia investigativa en este campo, se carece de una relación constitutiva universal aplicable a diferentes regímenes de flujo”^[24]. La interacción partícula-partícula (fuerzas de colisión) y partícula-muro no se resuelve de forma adecuada desde el enfoque E-E; a diferencia del modelo de colisión calculado mediante DEM en el enfoque E-L. Lungu *et al*^[25] desarrollaron un estudio comparativo entre las categorías E-E y E-L para un mismo caso de estudio, concluyendo que el enfoque E-L presentó mejores resultados en términos de caída de presión en simulaciones 3D y en el modelamiento espectral de la interacción fluido partícula.

1.4.1. 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 4) 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).

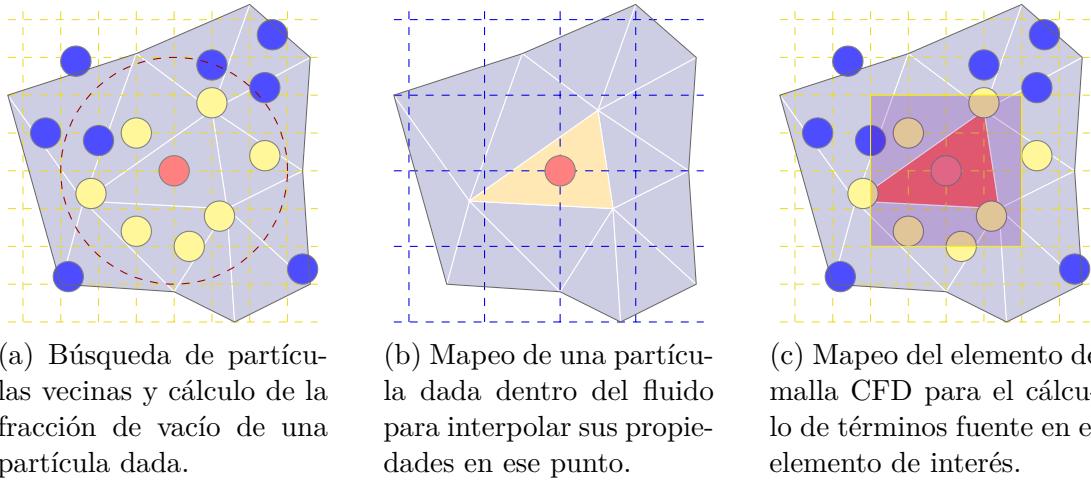


Figura 10: Esquema de la aproximación por malla dual para la búsqueda de partículas vecinas en un fluido.

Los pasos clave con los que se basan las mallas de búsqueda son: detección de colisión de partículas (descrito en la sección 1.3.1), geometría de los elementos de malla CFD (detallado en la sección 1.2.3) 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 7.

$$\phi_p = \phi_{el} + \nabla \phi_{el} \cdot r_{pc} \quad (7)$$

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.

1.4.2. Enfoque *Euler - Lagrange*

La tasa de partículas debido a la sedimentación, a través de canales inclinados, ha sido ampliamente estudiado debido al reconocido efecto *Boycott*^[26]. Este fenómeno se produce por el incremento en el área efectiva de sedimentación debido a la presencia de placas inclinadas^[27]. Acrivos ^[28] desarrolló una serie de planteamientos teóricos y experimentales entre la tasa de sedimentación de partículas y el área efectiva de sedimentación. El efecto Boycott ha sido aplicado con éxito en diversos procesos industriales para la remoción de partículas en lecho de fluidizado a través del asentamiento gravitacional; entre los principales ejemplos de este hecho se encuentran: tratamientos de aguas residuales y procesos de filtrado de agua.

El acercamiento experimental para la investigación característica de partículas en suspensión a alta concentración ha demostrado ser una experiencia retadora debido a las limitantes instrumentales y técnicas de medición^[27]. Los modelos numéricos basados en CFD han demostrado ser una herramienta poderosa y promisoria que provee información detallada y precisa sobre las características locales del flujo particulado. Normalmente, se han aplicado dos enfoques generales en la literatura para resolver problemas que involucran flujo particulado: *Eulerian - Eulerian* (E-E) y *Eulerian - Lagrange* (E-L). En el enfoque E-E, las fases sólida y fluida son interpretadas de manera continua en donde comparten el mismo grupo de ecuaciones gobernantes. Doroodchi *et al.*^[29] emplearon el modelo E-E para investigar la influencia de las placas inclinadas y el efecto expansivo de sólidos en suspensión en camas de lecho fluidizado; obteniendo resultados prometedores tanto en la parte experimental como numérica. Salem *et al* ^[30] desarrollaron un modelamiento en CFD empleando el modelo E-E para evaluar las características hidráulicas de un sedimentador de placas hidráulicas (IPS, por sus siglas en inglés); demostrando el importante rol que cumplen las herramientas computacionales en el estudio de los sistemas de sedimentación. Sin embargo, el tratamiento de la fase sólida de manera continua va en contra de la naturaleza discreta de las partículas sólidas, y todavía más importante: el acercamiento a través de E-E carece de facultades numéricas para revelar información importante referente a la escala particular.

El enfoque otorgado por el modelo E-L, por otro lado, adopta la teoría continua para la fase líquida y resuelve el problema cinemático de cada partícula individual **directamente**. Información referente a la posición, velocidad, fuerza hidrodinámica y difusividad, entre otros, se pueden obtener para cualquier instante de tiempo. Teniendo así el potencial de sobrellevar las dificultades y limitaciones existentes en modelos teóricos y empíricos. Es debido a ello que en el *presente trabajo* se emplea un enfoque E-L para abordar el problema CFD-DEM; investigando la interacción fluido - partícula en un sistema de sedimentación con canales (lamelas) inclinadas.

1.4.2.1. Planteamiento numérico

El flujo del modelo CFD-DEM se resuelve a través de las ecuaciones de momento, continuidad y a través de las ecuaciones de movimiento de cada partícula individual, seguidas a través del método de elementos discretos^[31]. Se consideraron los efectos e interacciones entre partícula-partícula (ver Figura 11), partícula-fluido y partícula-muro. Las ecuaciones gobernantes y la metodología numérica empleada se describe brevemente a continuación.

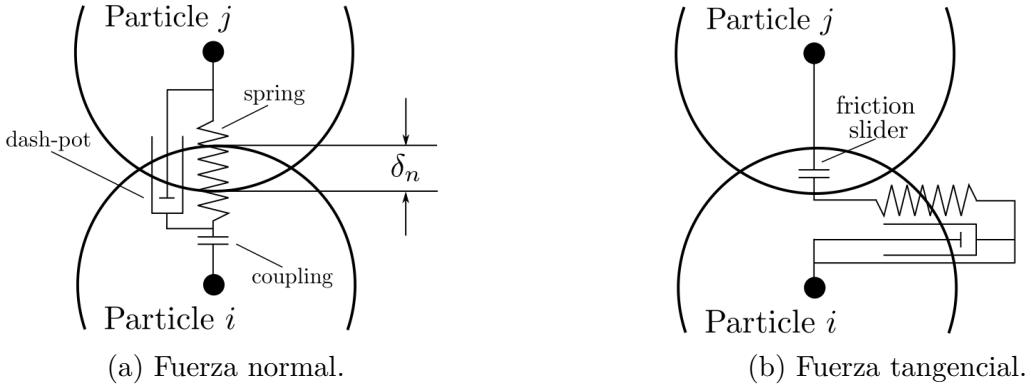


Figura 11: Interacción dinámica entre partículas.

En DEM, no se requiere de un *cierre* para la fase sólida dado que la dinámica de la partícula se resuelve de manera directa. La translación y rotación de la partícula i está dada por las Ecuaciones 8 y 9.

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = F_{c,i} + F_{f,i} + F_{g,i} \quad (8)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = T_{c,i} + T_{r,i} \quad (9)$$

Las fuerzas de impacto ($F_{c,i}$) y el torque de contacto ($T_{c,i}$) fueron calculados por el modelo lineal resorte-dashpot en el que se tuvo en cuenta el efecto histerético causado por el historial de contacto de la partícula. La resistencia a la rodadura se calculó empleando la Ecuación 10.

$$T_{r,i} = - \sum_{j=0}^{N_{pc}} \mu_{rol} |F_{cn,ij}| \frac{\omega_{ij}}{|\omega_{ij}|} r_i \quad (10)$$

Dónde ω_{ij} es la velocidad angular relativa entre las partículas i y j ; y está definida a través de la Ecuación 11.

$$\omega_{ij} = \frac{\omega_i r_i + \omega_j r_j}{r_i + r_j} \quad (11)$$

La fuerza total actuante del fluido $F_{f,i}$ causada por la distorsión de las líneas de corriente alrededor de la partícula, que a su vez produce variación en el tensor de esfuerzos del fluido, se calcula mediante la Ecuación 12.

$$F_{f,i} = -V_i \nabla p + V_i (\nabla \cdot \tau_f) + \epsilon F_{d,i} \quad (12)$$

Dónde τ_f es el tensor de esfuerzos viscoso del fluido; que se calcula de la siguiente manera:

$$\tau_f = \mu_L [(\nabla u_L) + (\nabla u_L)^{-1}] + \left(\lambda - \frac{2}{3}\mu \right) (\nabla \cdot u_L) \bar{I} \quad (13)$$

La fuerza de arrastre $F_{d,i}$ del fluido, de la Ecuación 12, se resuelve a una escala longitudinal mayor que el tamaño de la partícula y está dada por la siguiente relación matemática:

$$F_{d,i} = \frac{V_i}{1-\epsilon} \beta (u_L - v_i) \quad (14)$$

1.5. Sedimentación

Se plantea que el *principio funcional* del sistema de elución y filtrado de la planta de extracción recaiga sobre este fenómeno natural.

Los tanques de sedimentación han sido ampliamente usados como medios filtrantes en plantas purificadoras de agua debido a su capacidad de remoción de residuos sólidos; siendo empleadas para limpiar aguas con turbidez⁵ de hasta 50[NTU]^[3]⁶.

Para asegurar un correcto nivel de turbidez, los sistemas de sedimentación convencionales emplean coagulantes (normalmente sales de hierro) y floculantes (polímeros) en el sistema de alimentación. Cuando el fluido excede el nivel de 50[NTU], se recomienda emplear sistemas de sedimentación de placas inclinadas^[3] para la remoción de elementos sólidos de bajo tamaño de partícula.

1.5.1. Sedimentadores convencionales

Son ampliamente usados para la remoción de partículas en fluidos con turbidez de 20[NTU]^[3]. Consiste de un sistema de una sola etapa estructurado de forma circular o rectangular. A la fecha, sedimentadores rectangulares se emplean sistemas de pretratamiento de aguas salinas por su bajo costo de inversión y gran desempeño. Los parámetros clave para el diseño de estos sistemas son los siguientes:

⁵La turbidez define el nivel de transparencia de fluidos incoloros en contraste a la presencia de partículas en suspensión.

⁶La Organización Mundial de la Salud estipula que el agua de consumo humano debe presentar un nivel de turbidez inferior a 2[NTU]^[32].

- Número mínimo de tanques: 4
- Produndidad del agua: $3,0 - 4,0[m]$.
- Velocidad media de flujo: $0,3 - 1,1[m/min]$.
- Tiempo de detención: $2 - 4[h]$.
- Relación ancho-largo: mínimo de 4:1.
- Relación profundidad-largo: mínimo de 1:15
- Velocidad del recolector de lodos: $0,4 - 0,8[m/min]$.

1.5.2. Sedimentador de placas inclinadas

Estos tanques de sedimentación, también conocidos como *clarificadores*, tienen un desempeño altamente superior a los convencionales, llegando a clarificar fluidos de hasta 200[N TU]^[3] de turbidez. Normalmente tienen una estructura rectangular o circular y son ampliamente usados para la limpieza de agua marina.

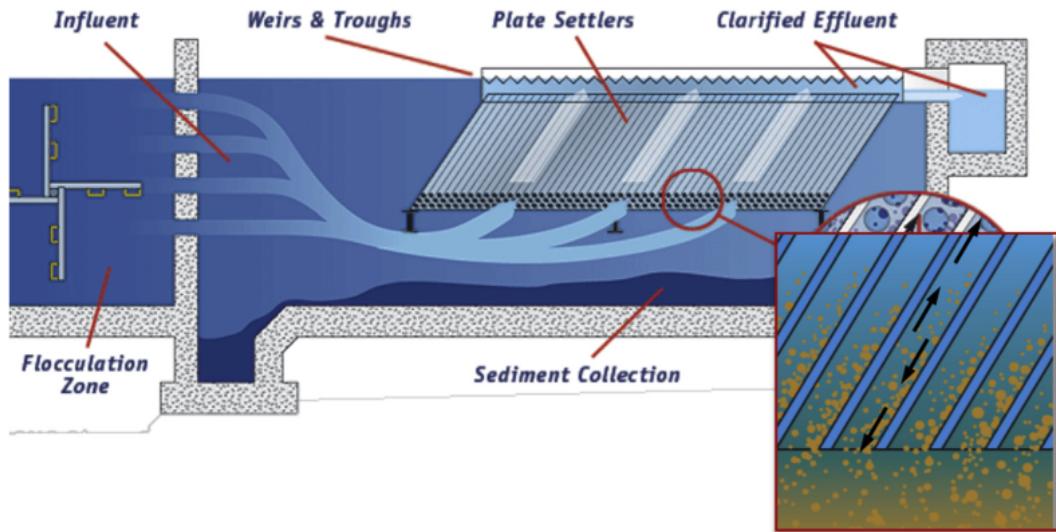


Figura 12: Esquema de un sedimentador de placas inclinadas^[3].

Los criterios clave de diseño para su uso en plantas de tratamiento de agua se evidencia a continuación:

- Número mínimo de tanques: 2
- Produndidad del agua: 3,5 – 5,0[m].
- Velocidad media de flujo: 0,3 – 1,1[m/min].
- Tiempo de detención: 0,2 – 0,4[h].
- Velocidad del recolector de lodos: 0,4 – 0,8[m/min].

1.5.2.1. Desarrollo teórico

Considere el caso bidimensional mostrado en la Figura 13 que consiste de una superficie de longitud infinita y ancho arbitrario, inclinada a un ángulo θ sobre la horizontal y ubicada en una suspensión infinita de esferas pesadas de radio \tilde{a} . La fracción de volumen de las partículas, también conocido como la alimentación de partículas, se identifica mediante el símbolo ϕ_s .

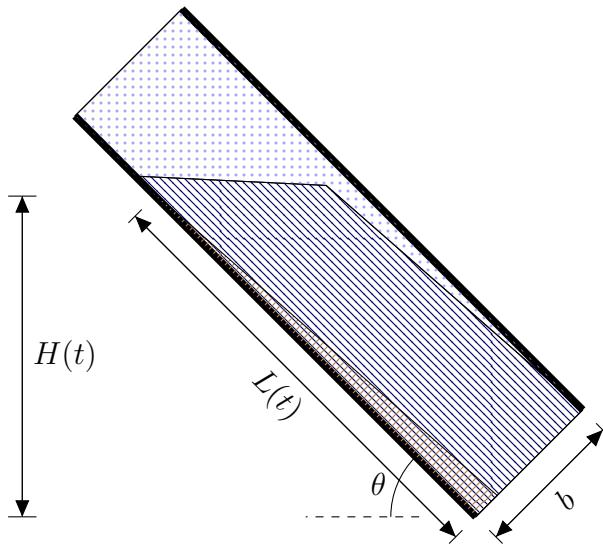


Figura 13: Análisis de una lamela.

Acrivos^[28] modeló la suspensión como un fluido Newtoniano con propiedades físicas *efectivas* que, relativo a la propiedad correspondiente del líquido suspendido, son funciones únicamente de la fracción de volumen local de las partículas. De esta manera, la densidad efectiva está definida mediante la Ecuación 15.

$$\tilde{\rho}(\phi) = \tilde{\rho}_f \gamma(\phi) \quad (15)$$

De igual modo, la viscosidad efectiva se define de la siguiente manera:

$$\tilde{\mu}(\phi) = \tilde{\mu}_f \lambda(\phi) \quad (16)$$

De las Ecuaciones 15 y 16: ϕ denota la fracción de volumen local de las partículas, la acentuación es un indicativo de que la variable en cuestión presenta dimensiones y el suscrito f se refiere a la propiedad correspondiente del fluido. En vista de esta descripción continua efectiva, el balance de momento para el flujo suspendido puede escribirse de la forma usual, como se aprecia en la Ecuación 17.

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\lambda(\phi) \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \frac{9}{2} (\phi - \phi_s) \sin \theta = R_p \gamma(\phi) \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (17)$$

Siendo:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (18)$$

Dónde: $\tilde{u}_t = \frac{2}{9}\tilde{a}^2(\tilde{\rho}_s - \tilde{\rho}_f)$ es la velocidad de asentamiento de Stokes del fluido limpio; $\tilde{\rho}_s$ es la densidad del sólido, de forma esférica, y $R_p = \tilde{\rho}_f \tilde{u}_t \tilde{a}/\tilde{\mu}_f$ es el número de Reynolds de la partícula basada en el movimiento relativo entre la partícula y el fluido. Dado que R_p es generalmente pequeño en la mayoría de sistemas prácticos, el término derecho de la Ecuación 17 es despreciable *dentro* de la capa de sedimentos (ver Figura 13). Adicionalmente, al aplicar el balance de momento en la dirección y , la caída de presión sobre la delgada capa es, también, despreciable para esta aproximación.

La presencia de cortante en una suspensión concentrada induce a la migración de partículas dentro de esta; la cual, junto con el flujo de sedimentos y el flujo a granel, tiende al desarrollo de concentración particular no uniforme, ϕ . Para determinar este perfil, Acrivos^[28] explica que es necesario analizar, en adición a la Ecuación de momento 17, la Ecuación de balance estable de partículas.

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} (N_g) + \frac{\partial}{\partial y} (N_d) = 0 \quad (19)$$

Dónde N_g y N_d denotan, respectivamente, el flujo adimensional de partículas debido al asentamiento gravitacional y al cortante inducido por la difusión en la dirección y .

Las condiciones de frontera en $y = 0$ son:

$$v = 0 \quad (20)$$

$$\left[\beta(\phi) \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\alpha(\phi)}{\lambda(\phi)} \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda(\phi) \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + \phi f(\phi) \cos \theta = 0 \quad (21)$$

La Ecuación 21 refleja que el flujo de sedimentación de las partículas debe estar balanceado por su correspondiente flujo cortante difusivo si el flujo neto de partículas en el muro está por desaparecer; previniendo que la concentración de partículas en el muro alcance su máximo valor.

Para el análisis de la condición de deslizamiento en el muro (zona de sedimentos), se emplea lo siguiente:

$$u = \zeta (\partial u / \partial y)_{y=0} \text{ en } y = 0 \quad (22)$$

Dónde ζ es el coeficiente de deslizamiento. Para una primera aproximación, se asume este coeficiente como una función de la fracción de volumen particular sobre el muro.

Acrivos^[28] comparó la solución del sistema de ecuaciones diferenciales parciales planteadas, resuelto mediante el método de diferencias finitas, con los resultados experimentales referentes al espesor de la zona de sedimentos; reportando una diferencia media superior al 14% con respecto al modelo en donde se emplea la condición de deslizamiento.

1.5.2.2. Modelo simplificado

El modelo teórico expuesto en la sección 1.5.2.1 estudia el sistema en estado *estacionario* en una lamela y aproxima el flujo de sedimentos a un fluido denso y viscoso; contrario a la naturaleza propia del problema. Desde este enfoque, no es posible predecir la interacción fluido-partícula durante la separación de las fases sólida y líquida. Adicional al hecho de que este modelo teórico no presenta un nivel de precisión lo suficientemente alto para definir un diseño final del sistema de sedimentación. Se expone, a continuación, una metodología de diseño simplificada que permite proponer una geometría inicial, para su respectiva evaluación mediante el método CFD-DEM.

1.5.2.2.1. Análisis hidrodinámico de una partícula

La *sedimentación discreta* se refiere a un modelo de sedimentación en donde las partículas sólidas no tienden a aglomerarse ni a colisionar entre sí. El comportamiento de los sólidos se encuentra, únicamente, en función de las propiedades de las partículas y del fluido directamente. El balance de fuerzas sobre una partícula se puede apreciar directamente en la Figura 14.

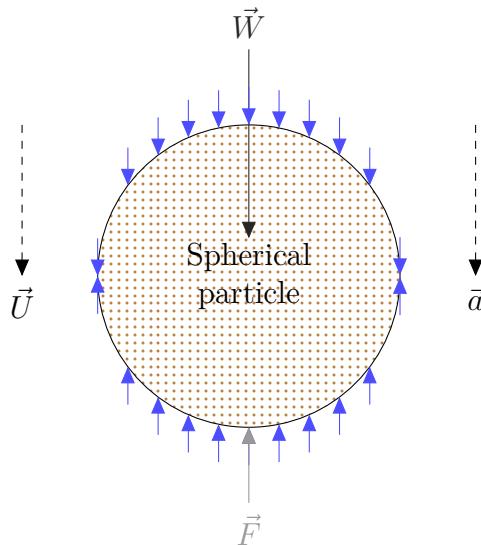


Figura 14: Dinámica de la partícula.

De la Figura 14, \vec{W} se refiere al peso de la partícula, \vec{F} a la fuerza de arrastre, \vec{U} es la velocidad de asentamiento y \vec{a} es la aceleración de asentamiento.

Romero^[33] indica que la fuerza de arrastre se puede calcular con base en la Ecuación 23.

$$F = \frac{C A_n \rho_f U^2}{2} \quad (23)$$

De la Ecuación 23, C es el coeficiente de arrastre de Newton, A_n es el área transversal de la partícula en la dirección de asentamiento, U es la velocidad de asentamiento y ρ_f es la densidad del fluido.

El peso de la partícula en el fluido depende directamente de la gravedad y de las densidades del fluido y de la partícula, como se aprecia en la ecuación 24.

$$W = V (\rho_s - \rho_f) g \quad (24)$$

Dónde: V es el volumen de la partícula, ρ_s es la densidad de la partícula, ρ_f es la densidad del fluido y g corresponde a la aceleración de la gravedad.

El coeficiente de arrastre es función del número de Reynolds:

$$Re_s = \frac{d_p U}{\mu} \quad (25)$$

Dónde d_p es el diámetro de la partícula y μ la viscosidad cinemática del fluido. Se estipula que para partículas esféricas y $Re_s < 10000$ el coeficiente de arrastre se puede calcular de la siguiente forma:

$$C = \frac{24}{Re_s} + \frac{3}{Re_s^{1/2}} + 0,34 \quad (26)$$

En un principio, se espera que en el decenso la partícula acelere hasta que la fuerza de arrastre sea igual a la fuerza impulsora del asentamiento. Cuando las fuerzas verticales se encuentran en equilibrio, la velocidad será constante. De esta manera, es posible relacionar las Ecuaciones 24 y 23:

$$U_{max} = \sqrt{\frac{2V(\rho_s - \rho_f)g}{C A_n \rho_f}} \quad (27)$$

La Ecuación 27 se conoce como la Ley de Stokes y ha sido comprobada de manera experimental^[33].

1.5.2.2. Carga superficial

“Una partícula con velocidad de asentamiento \vec{U} , y transportada con velocidad \vec{v} , seguiría una trayectoria rectilínea inclinada como resultado de la suma del vector de velocidad de flujo y del vector de velocidad de asentamiento, indicada por la recta OB ”[33].

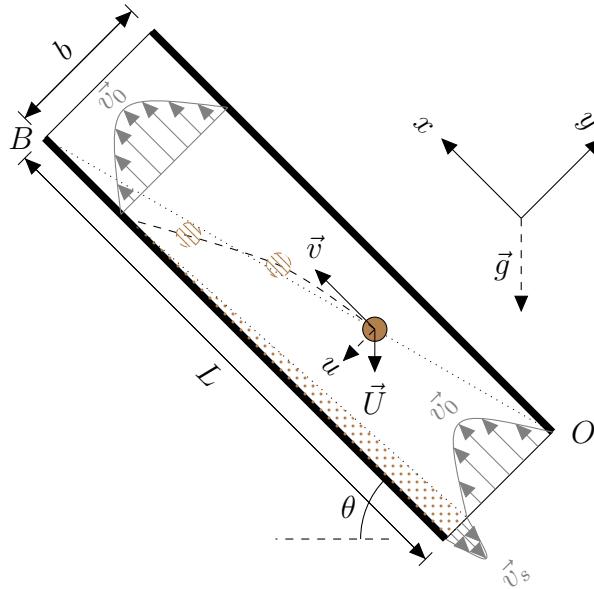


Figura 15: Cinemática de una partícula sólida.

De la Figura 15, \vec{v} corresponde a la velocidad horizontal (a favor del flujo), su valor depende de la posición y en la que se encuentre. \vec{v}_s se refiere a la velocidad de salida de los sedimentos. Para el presente análisis, se asume que la partícula se encuentra en el punto de velocidad máxima \vec{v}_0 ; \vec{U} corresponde a la velocidad de asentamiento de la partícula y u es la componente en la dirección y^- de la velocidad de asentamiento.

Por semejanza de triángulos, se obtiene la siguiente relación matemática:

$$\frac{v}{u} = \frac{L}{b} \quad (28)$$

Debido a la inclinación, existe una componente de la velocidad de asentamiento que se opone al movimiento de la partícula sobre la lamela; de modo que:

$$v = v_0 - U \sin \theta = \frac{Q_l}{bW} - U \sin \theta \quad (29)$$

Dónde W es el ancho del tanque de sedimentación y Q_l el caudal dentro de la lamela. De igual forma, el valor de u corresponde a la magnitud de \vec{U} en la componente y^- .

$$u = U \cos \theta \quad (30)$$

Relacionando las Ecuaciones 28, 29 y 30 se obtiene:

$$U = \frac{Q_l}{\left(\frac{L}{b} + \tan \theta\right) b W \cos \theta} \quad (31)$$

Si el ángulo de inclinación es 0° , la Ecuación 31 se reduce a lo siguiente:

$$U = \frac{Q_l}{LW} = \frac{Q_l}{A} = C_s \quad (32)$$

La Ecuación 32 se conoce en la literatura^[33, 34] como *carga superficial* (C_s); la cual define la sedimentación como una función del área superficial de las lamelas. “Todas las partículas discretas con velocidad de asentamiento igual o mayor que U serán completamente removidas”^[33].

1.5.2.2.3. Trayectoria de una partícula en una lamela

En la práctica, en sistemas de sedimentación de placas inclinadas, el *estrangulamiento* que sufre el flujo en la entrada de la lamela incrementa la velocidad del fluido y, de manera implícita, acelera las partículas en esta misma dirección. Esta aceleración se opone al peso de la partícula; impidiendo que la sedimentación se produzca sino hasta el punto en que la partícula sólida alcanza el equilibrio dinámico con en el medio circundante gracias al comportamiento laminar del flujo. Es debido a ello que la Ecuación 27 representa la velocidad de asentamiento máxima posible que podría alcanzar una partícula durante el proceso de sedimentación; siendo esta velocidad variable durante todo su recorrido dentro de la lamela.

Es posible predecir una trayectoria *aproximada* de una partícula^[35] con base en la simplificación adoptada en la sección 1.5.2.2.1 y al análisis cinemático empleado en la sección 1.5.2.2.2. Conociendo el comportamiento de las velocidades en las componentes x y y (ver Figura 15), se obtiene la siguiente ecuación diferencial:

$$v = \frac{dx}{dt}; u = \frac{dy}{dt} \quad (33)$$

Combinando las Ecuaciones 29, 30 y 33; se tiene:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{-U \cos \theta}{v(y) - U \sin \theta} \quad (34)$$

Al integrar la Ecuación 34, se obtiene:

$$\int v(y) dy - U y \sin \theta + U x \cos \theta = C_0 \quad (35)$$

Para manejar un enfoque *adimensional*, se subdivide la Ecuación 35 por $v_0 b$; siendo v_0 la velocidad promedio de flujo y b la profundidad del flujo.

$$\int \frac{v(y)}{v_0} dY - \frac{U}{v_0} Y \sin \theta + \frac{U}{v_0} X \cos \theta = C_1 \quad (36)$$

Dónde: C_1 corresponde a la constante de integración ajustada, $Y = \frac{y}{b}$ y $X = \frac{x}{b}$. El valor de C_1 y de $\int \frac{v(y)}{v_0} dY$ se puede evaluar para una trayectoria particular.

Streeter^[36] estipula que el perfil de velocidades de un flujo laminar, que pasa a través de placas paralelas, presenta el comportamiento descrito en la Ecuación 37.

$$\frac{v(y)}{v_0} = 6(Y - Y^2) \quad (37)$$

Relacionando las Ecuaciones 36 y 37, se tiene:

$$3Y^2 - 2Y^3 - \frac{U}{v_0} Y \sin \theta + \frac{U}{v_0} X \cos \theta = C_1 \quad (38)$$

La Ecuación 38 define la trayectoria de partículas suspendidas en un flujo laminar dentro de dos placas paralelas. Para el punto B (ver Figura 15), punto donde las partículas tienden a culminar su trayectoria, se tiene:

$$X = \frac{L}{b}$$

$$Y = 0$$

Reemplazando en la Ecuación 38, se tiene:

$$C_1 = \frac{U}{v_0} \frac{L}{b} \cos \theta \quad (39)$$

Reemplazando la Ecuación 39 en la Ecuación 38, se obtiene:

$$3Y^2 - 2Y^3 - \frac{U}{v_0} Y \sin \theta + \frac{U}{v_0} \left(X - \frac{L}{b} \right) \cos \theta = 0 \quad (40)$$

La Ecuación 40 está definida en la literatura^[35, 33] como la “*ecuación de la familia de trayectorias de las partículas*”. Dentro de esta familia de trayectorias existe una trayectoria límite en O (Figura 15) que representa la *trayectoria limitante* que define la velocidad crítica de asentamiento (U_c). Romero^[33] estipula que “toda partícula suspendida con una velocidad de asentamiento mayor que, o igual a, dicha velocidad crítica de asentamiento sería completamente removida en el sedimentador”. Las coordenadas del punto O son las siguientes:

$$X = 0$$

$$Y = \frac{b}{b} = 1$$

Reemplazando las coordenadas en la Ecuación 40, se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{U_c}{v_0} \left(\sin \theta + \frac{L}{b} \cos \theta \right) &= 1 \rightarrow \\ \rightarrow U_c &= \frac{v_0}{\sin \theta + \frac{L}{b} \cos \theta} \end{aligned} \quad (41)$$

Dónde: U_c es la velocidad crítica de asentamiento, v_0 es la velocidad promedio del flujo en la lamela, θ es el ángulo de inclinación, L es la longitud de la lamela y b es el ancho de la misma. Yao^[35] recomienda emplear una *longitud corregida* (parámetro adimensional cuyo valor es superior a la relación L/b) para asegurar una mayor eficiencia en el proceso de sedimentación.

1.5.2.2.4. Diseño analítico

Hasta el momento, el análisis teórico se ha enfocado en desarrollar un análisis aproximado de la interacción fluido-partícula en una lamela. En la presente sección, se complementa esta información con una metodología de dimensionamiento del sistema de sedimentación.

Como se aprecia en la Figura 12, el sedimentador de placas paralelas subdivide el espacio en compartimientos (lamelas). Esta configuración geométrica cumple dos objetivos: incrementa el área de sedimentación y origina el flujo laminar^[37]. La inclinación de las placas permite el deslizamiento de los sedimentos gracias a la gravedad y a la diferencia de densidades respecto al fluido circundante (ver Figura

13). El sedimentador debe contar con una tolva cónica en el fondo del recipiente para la recolección y expulsión de lodos. Es importante destacar que durante toda la operación, el flujo debe ser laminar; de modo que se recomienda que el número de Reynolds sea inferior a 500^[38].

Los parámetros más empleados en el diseño de sedimentadores son la *carga superficial* y el *área superficial*^[33]. En el Cuadro 2, se muestran los criterios de diseño sugeridos por Romero^[33] y Pérez^[34].

Parámetro	Valor
Carga superficial C_s	6,0 – 180[m/d]
Tiempo de retención en placas t_p	8 – 25[min]
Inclinación de placas θ	60[°]
Número de Reynolds Re	≤ 500
Distancia entre placas	5[cm]
Velocidad crítica de asentamiento U_c	15 – 60[m/d]
Relación longitud-distanciamiento entre placas L/b	≥ 8

Cuadro 2: Criterios de diseño.

Para el desarrollo del diseño, se debe conocer el caudal de entrada, la relación mísica entre el material sólido con el fluido y las propiedades del fluido. El tiempo de retención en las lamelas se calcula de acuerdo a lo expuesto en la Ecuación 42.

$$t_p = \frac{L}{v_0} \quad (42)$$

Dónde: l es el largo de las placas y v_0 es la velocidad promedio del fluido en la lamela. La carga superficial es equivalente a:

Es posible adaptar la Ecuación 31 para relacionar la carga superficial con todas las dimensiones del panel de lamelas:

$$U = \frac{Q}{N \left(\frac{L}{b} + \tan \theta \right) b W \cos \theta} \quad (43)$$

De la Ecuación 43, U se refiere a la carga superficial, Q al caudal total de entrada al sistema de sedimentación, N es el número de lamelas, L es el largo cada lamela, b es el ancho de una lamela, W es la profundidad del panel de lamelas y θ es el ángulo de inclinación del panel.

La **metodología de diseño** consiste en desarrollar un algoritmo iterativo tal que se minimice la carga superficial, de acuerdo a lo recomendado en el Cuadro 2, con las menores dimensiones posibles (a menor tamaño de panel, menor costo de inversión) y garantizando un valor de Reynolds en régimen laminar, menor a 500, en cada una de las lamelas.

El número de Reynolds de una lamela se calcula conforme a la Ecuación ??[36].

$$Re = \frac{v_0 b}{\mu} \quad (44)$$

De la Ecuación 44: μ se refiere a la viscosidad cinemática del fluido, b es la separación entre placas y v_0 es la velocidad promedio del fluido en la lamela. La velocidad promedio corresponde a lo siguiente:

$$v_0 = \frac{Q}{N b W} \quad (45)$$

La eficiencia del sistema de sedimentación se estima como la relación entre la velocidad crítica de sedimentación (Ecuación 41) y la velocidad de asentamiento máxima (Ecuación 27).

Romero[33] estipula que el número de placas del sistema de sedimentación se calcula con base en la siguiente expresión:

$$N = \frac{L_s \sin \theta + d}{d + e} \quad (46)$$

Dónde: L_s es el longitud de la lamela, d es la separación entre placas, e es el espesor de las placas y θ es el ángulo de inclinación.

1.5.2.2.5. Tubería de entrada y tolva de sedimentos

El diámetro de entrada de la mezcla líquido-sólido se calcula de la siguiente forma:

$$D_e = \frac{4Q}{Re \pi \mu} \quad (47)$$

De la Ecaución 47: D_e es el diámetro de la tubería de entrada del sistema de sedimentación, Q es el caudal de total de entrada, Re es el número de Reynolds del flujo de entrada ($Re \geq 250$) y μ es la viscosidad cinemática del fluido.

La tolva de sedimentos cumple el objetivo de almacenar los lodos obtenidos durante el proceso de sedimentación. El diámetro mínimo de desagüe es de 30[cm][33] y la pendiente longitudinal varía entre el 2 y 3 %. El tanque debe tener la capacidad para ser desocupado hasta en un máximo de 60[min]. La tubería de desagüe se puede calcular con base en la Ecuación 48[33].

$$S = \frac{A}{4850 t} \sqrt{d} \quad (48)$$

De la Ecuación 48: S es la sección del desagüe, en m^2 , A es el área superficial del sedimentador, m^2 , t es el tiempo de vaciado, en h y d es la altura del agua sobre la boca del desagüe, m .

El caudal de descarga se calcula de la siguiente forma:

$$Q = 0,61 S \sqrt{2 g d} \quad (49)$$

Para evitar el asentamiento de lodos en la tubería de desagüe, la velocidad de flujo debe ser mayor de $1,4[m/s]$ ^[33].

2. Metodología

En la Figura 16 se muestra la metodología empleada para el diseño del sistema de elución y filtrado de la planta de extracción.

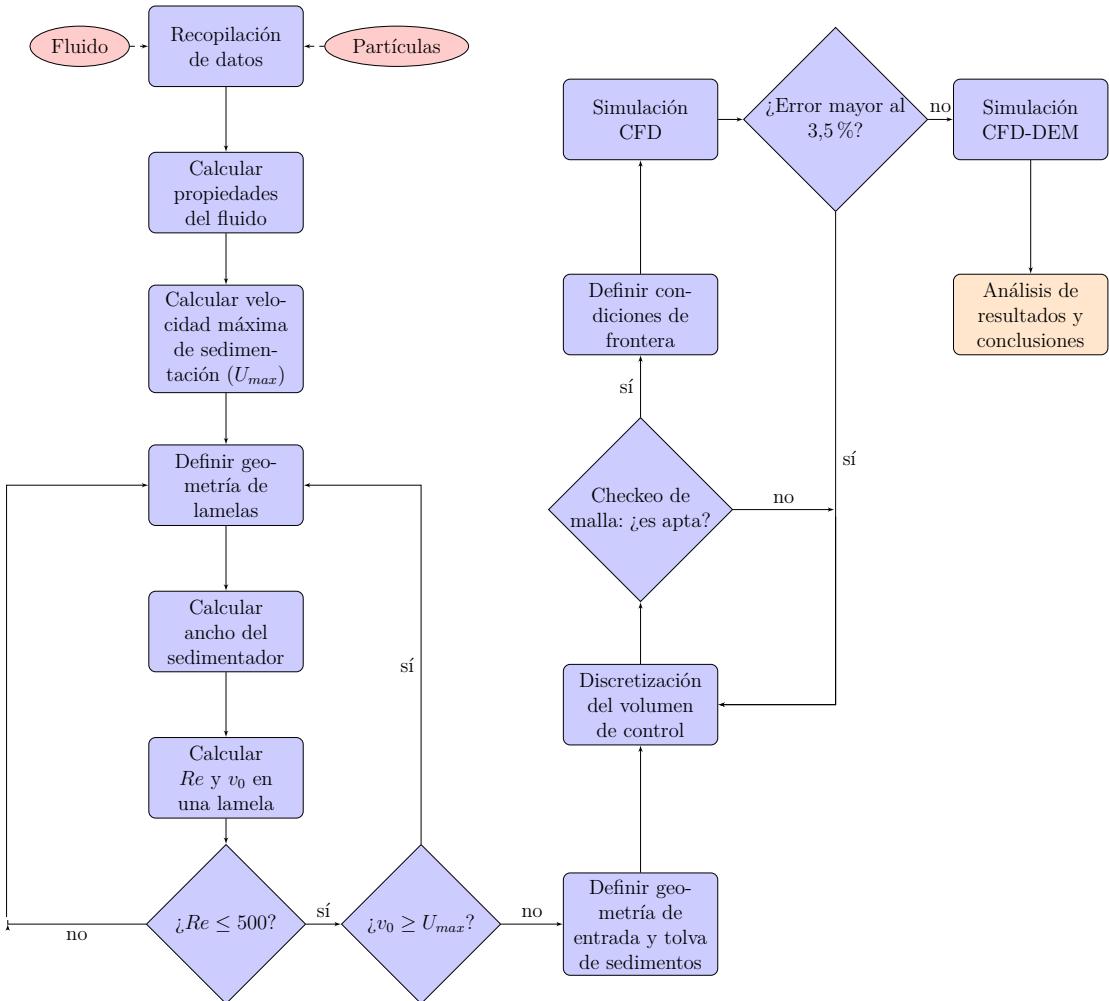


Figura 16: Esquema de la metodología de diseño del presente trabajo.

En esta metodología se desarrolla el diseño del sistema con base en las herramientas analíticas descritas en la sección 1.5.2.2 y al plantamiento numérico mostrado en las secciones 1.2 y 1.4.

En simulaciones numéricas que emplean el método CFD se consideran aceptables errores inferiores al 9 % para casos de estudio del transporte de fluidos en tuberías de PVC^[39], e inferiores al 3 % relativo en estudios de enfriamiento de fundición de cobre^[40]; por citar algunos ejemplos. Debido a ello, en el presente estudio, se adopta un criterio de error máximo del 3,5 % relativo mediante refinamiento de malla.

2.1. Recopilación de datos

Los criterios de diseño del sistema de sedimentación de placas inclinadas se pueden apreciar en los Cuadros 2 y 3.

Parámetro	Valor
Cantidad de material sólido a remover [kg]	80
Densidad media del material sólido [kg/m ³]	1700
Volumen de la mezcla [L]	200
Tamaño de partícula medio [μm]	250
Tipo de solvente	Mezcla agua - etanol (50 %)
Temperatura del proceso [°C]	28
Tiempo del proceso [h]	1

Cuadro 3: Condiciones operacionales.

2.2. Propiedades del fluido

Para desarrollar la automatización del diseño, es necesario predecir el valor de las propiedades del solvente a cualquier valor de temperatura y relación agua - etanol. Para ello, se inicia calculando las propiedades del etanol y del agua a presión atmosférica empleando las Ecuaciones 50. 51, 52 y 53.

$$\rho_{H_2O} = 1,00048675 \cdot 10^3 - 2,23243162 \cdot 10^{-2} * T - 4,60579811 \cdot 10^{-3} * T^2 \equiv [kg/m^3] \quad (50)$$

$$\mu_{H_2O} = 1,63190407 \cdot 10^{-6} - 3,73507082 \cdot 10^{-8} * T + 3,20602877 \cdot 10^{-10} * T^2 \equiv [m^2/s] \quad (51)$$

$$\rho_{et} = 8,06320738 \cdot 10^2 - 8,32481402 \cdot 10^{-1} * T - 5,78205398 \cdot 10^{-4} * T^2 \equiv [kg/m^3] \quad (52)$$

$$\mu_{et} = 2,11316694 \cdot 10^{-6} - 3,69955667 \cdot 10^{-8} * T + 2,57275555 \cdot 10^{-10} * T^2 \equiv [m^2/s] \quad (53)$$

Una vez conocidas las propiedades individuales, se calcula la propiedad de la mezcla a través de la Ecuación 54.

$$\lambda_f = (1 - x) \lambda_{H_2O} + x \lambda_{et} \quad (54)$$

Dónde: λ es la propiedad termodinámica (densidad, viscosidad, etc) x es la concentración de la mezcla.

2.3. Velocidad máxima de sedimentación

La velocidad máxima de sedimentación se calcula empleando una metodología de cálculo iterativa con base en las Ecuaciones 25, 26 y 27. La lógica detrás de dicha metodología se evidencia en la Figura 17.

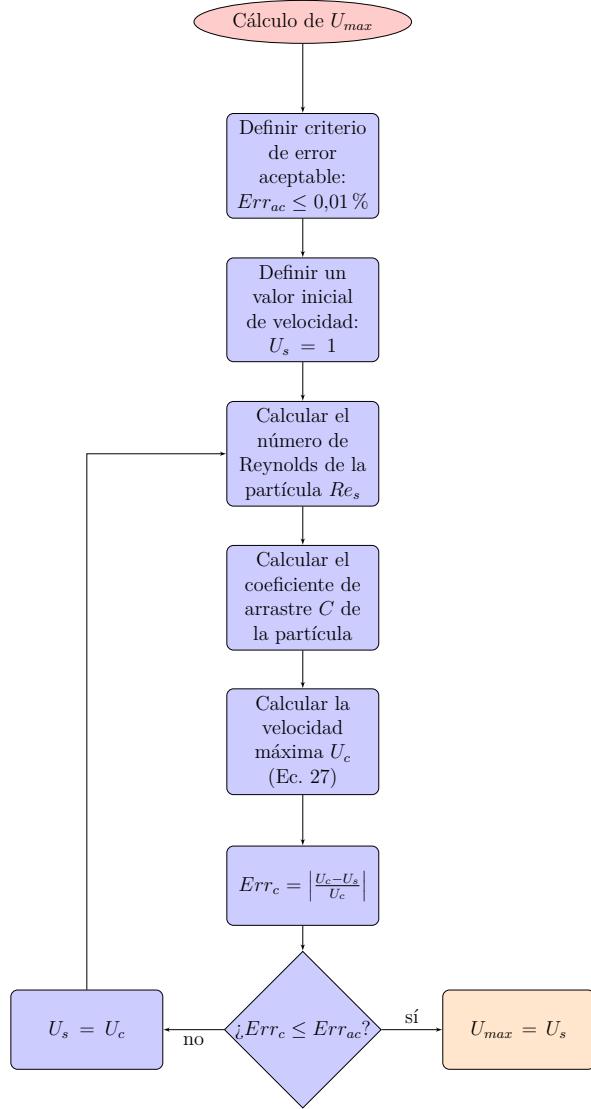


Figura 17: Metodología de cálculo de la velocidad de sedimentación máxima.

2.4. Geometría de lamelas

Se asume una geometría inicial con base en lo recomendado en el Cuadro 2. La geometría inicial evaluada es la siguiente:

Parámetro	Valor
$b[cm]$	5
L/b	8
$\theta[^{\circ}]$	60
Número de lamelas	5
$C_s[m/d]$	180

Cuadro 4: Geometría inicial supuesta.

2.5. Ancho del sedimentador

El ancho del sedimentador se calcula con base en la Ecuación 43 y a la geometría inicial mostrada en el Cuadro 4; definiendo así la geometría del panel de lamelas del sistema de sedimentación.

2.6. Cálculo de Re y v_0

El número de Reynolds, empleado para evaluar el comportamiento del flujo dentro de la lamela, se calcula con base en lo estipulado en la Ecuación 44. La velocidad media del flujo dentro del sedimentador se calcula con la ayuda de la Ecuación 45.

2.7. Tubería de entrada y tolva de sedimentos

La tubería de entrada y tolva de sedimentos se calcula con base en las Ecuaciones 47, 48 y 49.

2.8. Discretización del volumen de control

Gran parte del éxito de las simulaciones numéricas recaen en la discretización del dominio y en la calidad de los elementos que la componen^[22]. Se desarrolló un algoritmo que define la geometría CAD y realiza el mallado de la geometría basado en el lenguaje de código abierto **gmsh**. El algoritmo discretiza el dominio con elementos rectangulares (malla estructurada) o triangulares (malla no estructurada). Además, tiene la capacidad de desarrollar un refinamiento de malla en cada una de las lamelas, como se aprecia en la Figura 10.

2.9. Checkeo de malla

La evaluación de la malla se desarrolla con base en el comando **checkMesh** de OpenFOAM. Los criterios de aprobación de malla son: **no ortogonalidad, oblicuidad máxima** menor a 1 y que la **conclusión** de la malla sea **ok**.

2.10. Metodología de frontera

La mezcla sólido-líquida en la entrada presenta un caudal de $0,2 [m^3/h]$. La temperatura es constante durante todo el proceso e igual a $28[^{\circ}C]$. En el tiempo $t = 0$, las partículas sólidas esféricas se generan en una región lineal, como se aprecia en la Figura 18.

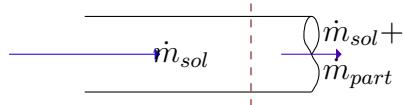


Figura 18: Zona de generación de partículas en la tubería de entrada.

De la Figura 18: \dot{m}_{sol} se refiere al flujo másico de solvente, \dot{m}_{part} es el flujo másico de partículas generadas y las líneas punteadas representan la zona de generación.

Las condiciones de frontera se resumen en la Figura 19.

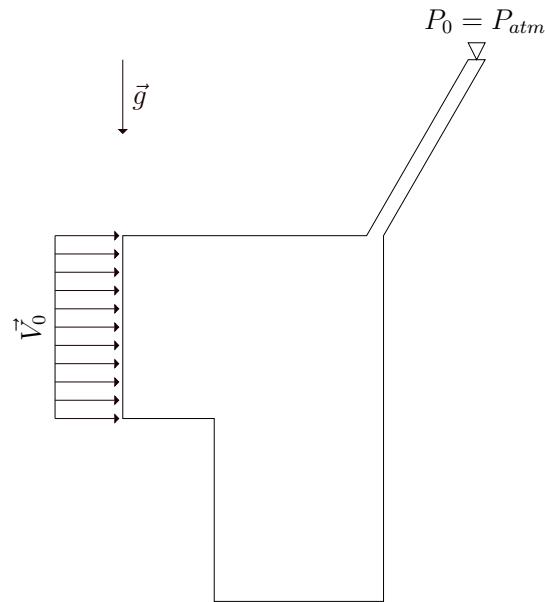


Figura 19: Condiciones de frontera.

Zona	Propiedad	Tipo
Entrada	Velocidad (V_0)	Neumann
Salida	Presión (P_0)	Dirichlet

Cuadro 5: Clasificación de las condiciones de frontera.

La clasificación de las condiciones de frontera se puede apreciar en el Cuadro 5. Al tratarse de una simulación 2D, las caras frontal y posterior de la geometría se consideran superficies vacías.

2.11. Metodología CFD

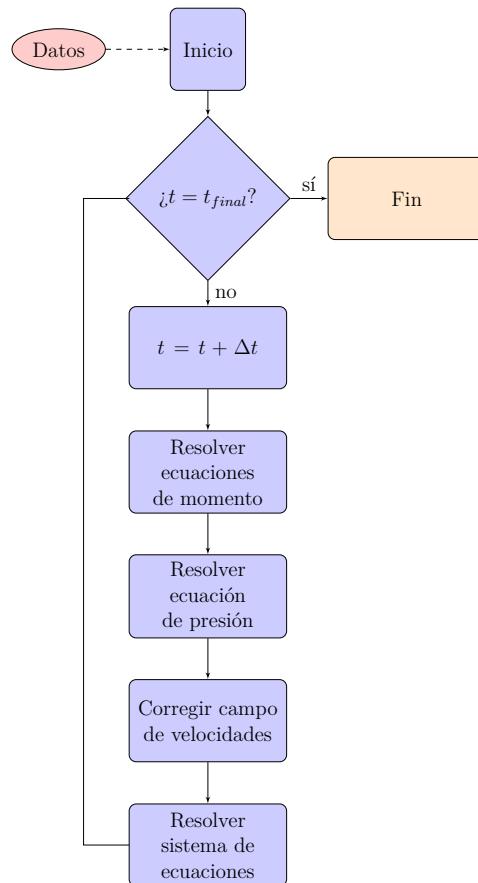


Figura 20: Solucionador `pimpleFoam`.

La simulación se desarrolla usando el solucionador `pimpleFOAM`, de OpenFOAM. Desde un punto de vista de *mecánica de fluidos computacional*, el problema presenta un flujo con las siguientes características:

- Laminar.
- Incompresible.
- Transitorio.
- Fluido newtoniano.

Tratándose de un problema bidimensional, **pimpleFOAM** soluciona la Ecuación ???. La lógica de solución detrás del solucionador se puede apreciar en la Figura 20.

2.12. Cálculo del error

Para la estimación del error de la simulación, se emplea la metodología descrita en la sección 1.2.2. Al tener el comportamiento gráfico mostrado en la Figura 6, es posible calcular el error de la simulación con base en la Ecuación 55.

$$Err = \left| \frac{\gamma_i - \gamma_{i-1}}{\gamma_i} \right| * 100 \leq 3,5 \% \quad (55)$$

Dónde: Err corresponde al porcentaje de error, γ a la propiedad de análisis (puede ser velocidad o presión máximas) e i corresponde a la última iteración desarrollada con un número n de nodos definido durante el mallado de la geometría. El número de nodos en $i - 1$ corresponde a $n/2$.

2.13. Metodología CFD-DEM

Se empleó un solucionador adaptado que vincula OpenFOAM (soluciona las ecuaciones de Navier Stokes) y Yade (soluciona la dinámica de partículas) a través de la Interfaz de Paso de Mensajes (MPI, por sus siglas en inglés)^[41]. El solucionador emplea el enfoque Euler - Lagrange (ver sección 1.4.2) y **pimpleFOAM** para predecir la interacción fluido-partícula en el tiempo. La metodología de cálculo del solucionador se puede apreciar en la Figura 21.

Para el desarrollo de la simulación CFD-DEM, se emplearon los datos mostrados en el Cuadro 6.

Parámetro	Valor
Generales	
Material	Arena de río
Tamaño de partícula [μm]	250
Módulo de Young	10^6
Número de partículas por segundo	22300
$\rho [kg/m^3]$	1600
ν	0,2
Coeficientes de par de resorte Dashpot	
α	0,12
μ	0,52
Pasos de resolución de colisión	12

Cuadro 6: Datos generales para el desarrollo de la simulación CFD-DEM.

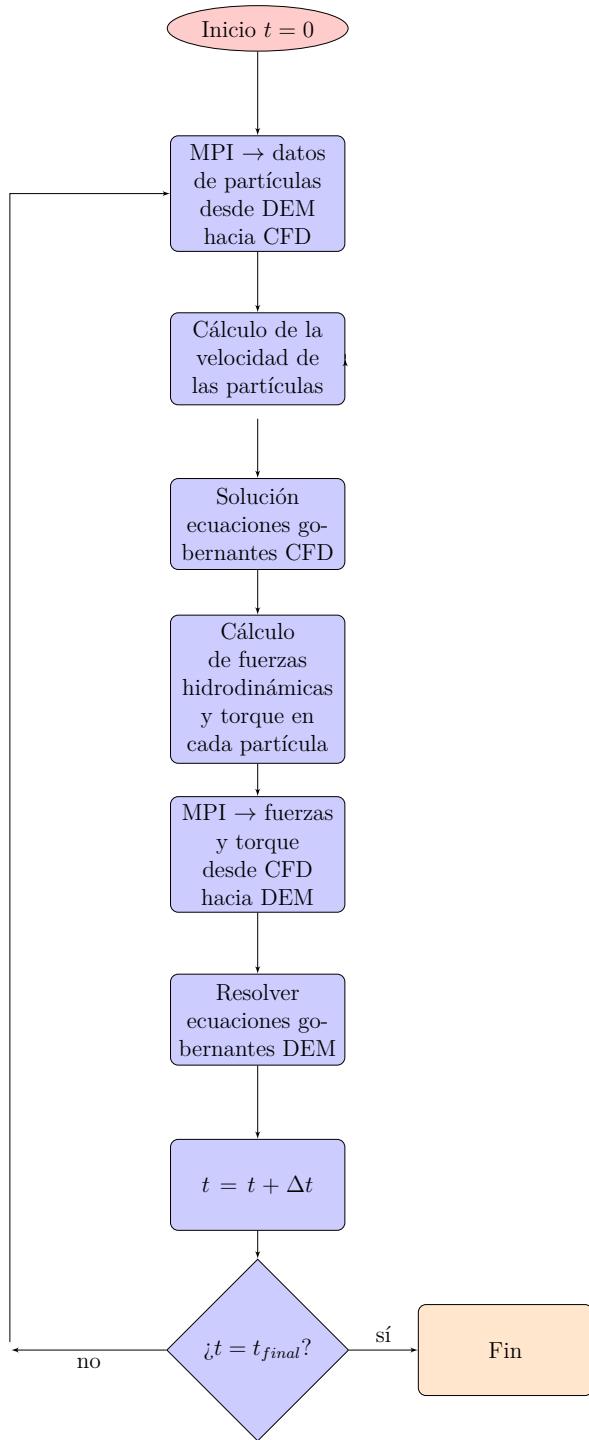


Figura 21: Simulación CFD-DEM.

2.14. Software de diseño

Para la ejecución de la metodología mostrada en la Figura 16, se desarrolló un

software de diseño con herramientas de *código abierto*. El software se compone, principalmente, de dos partes: *Frontend* (interfaz de usuario), desarrollada en Jupyter y ParaView, y *Backend* (lógica detrás del software), desarrollada en Python, C++ y gmsh. Anexo a este trabajo se encuentran los diferentes componentes desarrollados del software; dando evidencia de la calidad de resultados obtenidos a través de este.

2.14.1. Frontend

La interfaz gráfica se desarrolló en *Jupyter*. El proyecto Jupyter existe para facilitar el desarrollo de software libre; tratándose de un servicio de computación interactiva que funciona con diferentes lenguajes de programación, entre ellos: Python y C++. Un ejemplo que permite visualizar el alcance de esta herramienta se puede apreciar en la Figura 22; en dónde se observa la escritura de algoritmos de programación, evaluación de la interactividad del algoritmo y documentación del mismo: todo en una sola pantalla. Jupyter es un acrónimo de los lenguajes: *Julia*, *Python* y *R*.

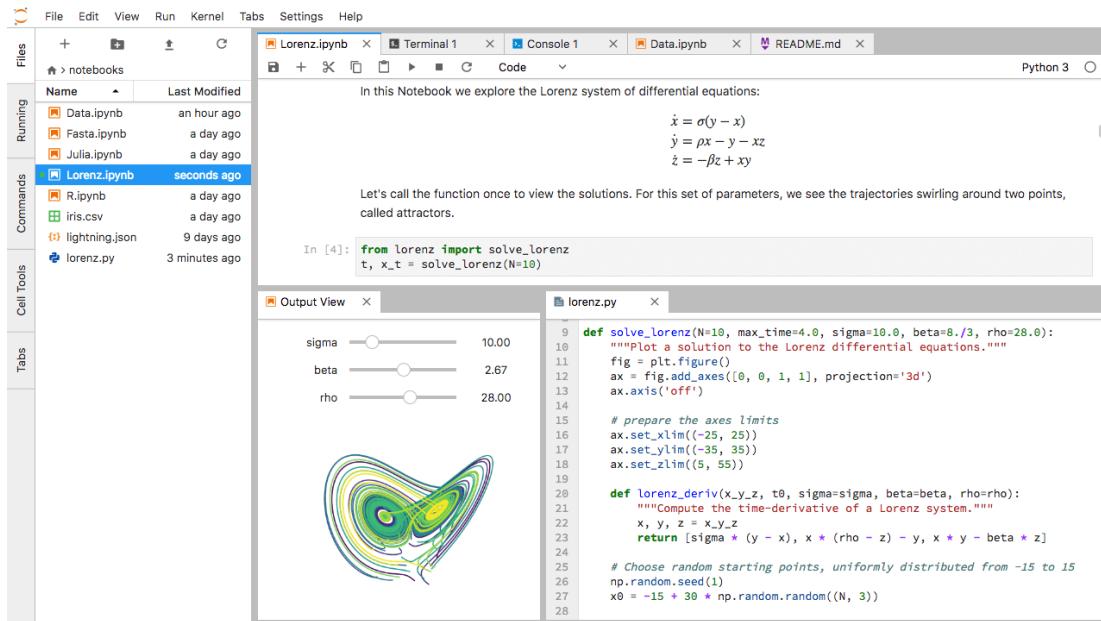


Figura 22: Interfaz gráfica de ejemplo desarrollada con Jupyter. Fuente: <https://jupyterlab.readthedocs.io/en/latest/>

“Jupyter es una aplicación web de código abierto que permite la creación y compatibilidad de diferentes documentos, encontrándose en ellos: código *en vivo*, ecuaciones y visualización de texto explicativo. Entre sus usos se encuentran: limpieza y transformación de datos, simulaciones numéricas, modelado estadístico

y aprendizaje automático, entre muchos otros.”Descripción oficial del proyecto Jupyter.

Parte del Frontend desarrollado para brindar interactividad de usuario se puede apreciar en la Figura 23.

The screenshot shows a Jupyter Notebook interface with the following details:

- File Bar:** File, Edit, View, Run, Kernel, Tabs, Settings, Help.
- Left Sidebar:** Shows a file tree with folders like App, CFD_DEM, FOAMEx, Images, OpenFOAM, Validación, and files like Antiguo.geo, out.msh, out.vtk, Presetation.ipynb, Referencia.geo, and Referencia2.geo.
- Code Cell [1]:**

```
from App.Generalidades.Data import *
data = Datos()
data
```
- Interactive Widgets:**
 - A tab bar with "Fluido" selected and "Material particulado" as an option.
 - A dropdown menu "Relación agua - etanol [%]" with a slider set to 50.
 - Other dropdown menus for "Temperatura [°C]", "Tiempo objetivo [h]", and "Volumen [L]".
- Text:** "Con base en los datos suministrados, las propiedades termodinámicas del solvente se pueden apreciar a continuación."
- Code Cell [2]:**

```
from App.Generalidades.Read import Read
from App.Generalidades.Propiedades import *
general = Read(data)
prop = SolProp(general)()
prop = prop['mezcla']
```
- Table:** "Propiedades termodinámicas de la mezcla agua - etanol al 50[%]"

Propiedad	Valor
Densidad [kg/m ³]	889.4
Viscosidad [kg/m s]	1.06 10 ⁻⁶

Figura 23: Parte de la interfaz gráfica desarrollada para la automatización del modelo CFD-DEM.

Jupyter permite la interactividad a través de diferentes lenguajes de Frontend; entre ellos: HTML, CSS y JavaScript. Para la escritura de textos, adopta lenguajes como Markdown y LATEX. Además, cuenta con diferentes librerías internas

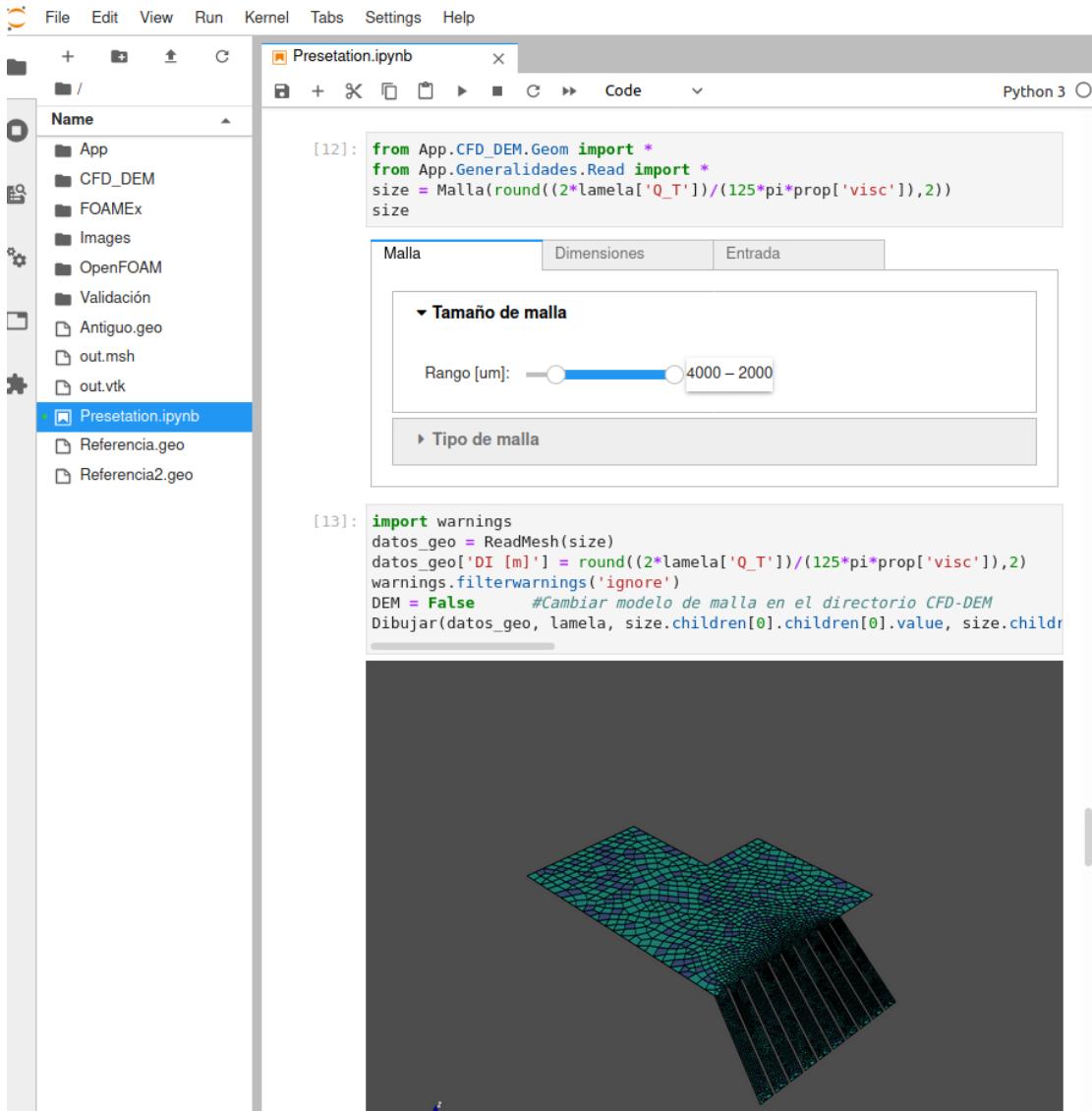


Figura 24: Sección de mallado automático del software desarrollado mediante gmsh.

para el desarrollo de contenidos interactivos, de las que se destacan: `ipywidgets`, `IPython.display` y `Plotly`.

En la Figura 24 se puede apreciar la interfaz gráfica referente al mallado automático de la geometría, desarrollado en el lenguaje `gmsh`; en dónde el usuario puede definir el rango de tamaño de malla, tipo de los elementos (rectangular o triangular) y las dimensiones de la geometría.

2.14.2. Backend

Detrás de la funcionalidad del software se encuentra el árbol de directorios mostrado en la Figura 25.

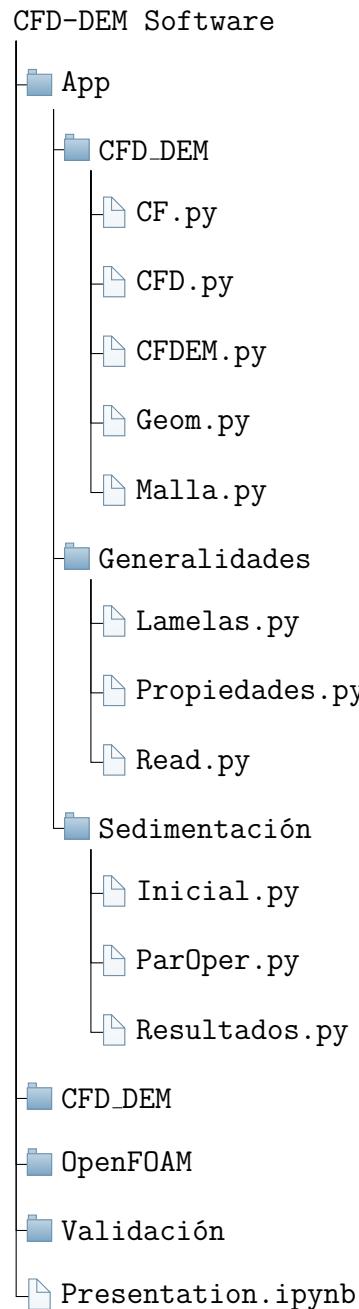


Figura 25: Árbol de directorios.

El software resuelve, básicamente, tres problemas:

- Diseño funcional del panel de lamelas desde un enfoque teórico.
- Análisis del comportamiento, a través de OpenFOAM, de la dinámica de fluidos del panel de lamelas.
- Simulación CFD-DEM que permite predecir la interacción fluido - partícula a distintas condiciones de flujo.

2.14.2.1. Diseño funcional teórico

El diseño funcional busca definir una geometría inicial del panel de lamelas, para el análisis consecuente mediante los métodos numéricos de *volúmenes finitos* y *elementos discretos*, a través de metodologías teóricas y experimentales (capítulo 3).

La lógica desarrollada comprende los siguientes pasos:

1. Definición, por parte del usuario, de las propiedades del solvente (entre ellas: proporción de la mezcla hidroetanólica) y del material particulado.
2. Cálculo de las propiedades termodinámicas del fluido.
3. Definición de la geometría del panel de lamelas.
4. Cálculo de las diferentes propiedades del solvente: caudal, velocidad del fluido y de la sedimentación y el número de Reynolds, por mencionar algunos.

Los algoritmos que emplean esta lógica se encuentran ubicados en las direcciones App/Sedimentación y App/Generalidades, como se aprecia en la Figura 25.

2.14.2.2. Simulaciones numéricas

El modelo CFD permite conocer el comportamiento del solvente dentro del volumen de control para contrastarlo con el modelo CFD-DEM. Comprende los siguientes pasos:

1. Definición de la geometría.
2. Mallado de la geometría.
3. Definición de las condiciones de frontera.
4. Desarrollo de la simulación.

5. Postprocesamiento y presentación de resultados.

Los algoritmos desarrollados para el desarrollo de este modelo se encuentran ubicados en la dirección App/CFD_DEM:

- `Geom.py` permite establecer la geometría del problema de acuerdo a los parámetros definidos por el usuario.
- `Malla.py` define el mallado de la geometría, ejecutando el lenguaje *gmsh*.
- `CF.py` define las condiciones de frontera.
- `CFD.py` se encarga de ejecutar la simulación numérica a través de OpenFOAM.

El modelo CFD-DEM predice las interacciones fluido-partícula del sistema de sedimentación. Emplea la misma lógica descrita en la sección 2.14.2.2. La única diferencia radica en la ejecución del algoritmo descrito en `CFD.py`; en su lugar, ejecuta el de `CFDEM.py` que contiene la metodología de desarrollo de la simulación CFD-DEM basada en el método Euler - Lagrange.

3. Resultados

3.1. Propiedades del fluido

Las Ecuaciones 50 y 51 describen las propiedades termodinámicas del agua; y las Ecuaciones 52 y 53 las del etanol a presión atmosférica en función de la temperatura del fluido ($\forall T \in [5^{\circ}\text{C}, 60^{\circ}\text{C}]$). La Ecuación 54 permite predecir las propiedades de la mezcla agua - etanol a cualquier grado de concentración. Las propiedades de una mezcla agua - etanol al 50 %, 28°C , se pueden apreciar en el Cuadro 7.

Propiedad	Valor
$\rho_f [\text{kg}/\text{m}^3]$	889,4
$\mu_f [\text{m}^2/\text{s}]$	$1,06 * 10^{-6}$

Cuadro 7: Propiedades de la mezcla agua - etanol al 50 %.

3.2. Velocidad máxima de sedimentación

La velocidad máxima de sedimentación se calcula a través del procedimiento iterativo mostrado en la Figura 17. Los resultados de este procedimiento se pueden apreciar en la Figura 8.

Iteración	$U_s [\text{m}/\text{s}]$	Re_s	C	$U_c [\text{m}/\text{s}]$	$Err_c [\%]$
1	1	236,247	0,637	0,068	93,159
2	0,068	16,162	2,571	0,034	50,235
3	0,034	8,043	4,382	0,026	23,397
...					
13	0,022	5,115	6,359	0,022	$0,04 * 10^{-1}$

Cuadro 8: Proceso de cálculo iterativo de la velocidad de sedimentación máxima.

Se concluye que, con una estimación de error inferior al 0,01 %, la velocidad máxima de sedimentación es de $0,022[\text{m}/\text{s}]$ con un número de Reynolds en la partícula de 5,115.

3.3. Geometría inicial

Con base en lo descrito en las secciones 2.4, 2.5, 2.6 y 2.7 la geometría del sistema de sedimentación de placas inclinadas presenta las siguientes dimensiones:

Parámetro	Valor
Ancho lamela [cm]	5
Longitud lamela [cm]	40
Separación entre lamelas [cm]	2,5
Inclinación [°]	60
Número lamelas	5
Ancho panel [cm]	2,2
Diámetro de entrada [cm]	27
Altura total [cm]	105

Cuadro 9: Geometría de estudio

Es posible apreciar la geometría de análisis en la Figura 26; destacando: una zona de *entrada* de la mezcla sólido - líquido; una de *salida* (al final de la superficie inclinada), en donde se espera obtener la *fase líquida* de la mezcla y un área de depósito de lodos, localizada en la parte inferior de la geometría. El **área sombreada** corresponde a la región de interés en donde se desarrollan las simulaciones numéricas.

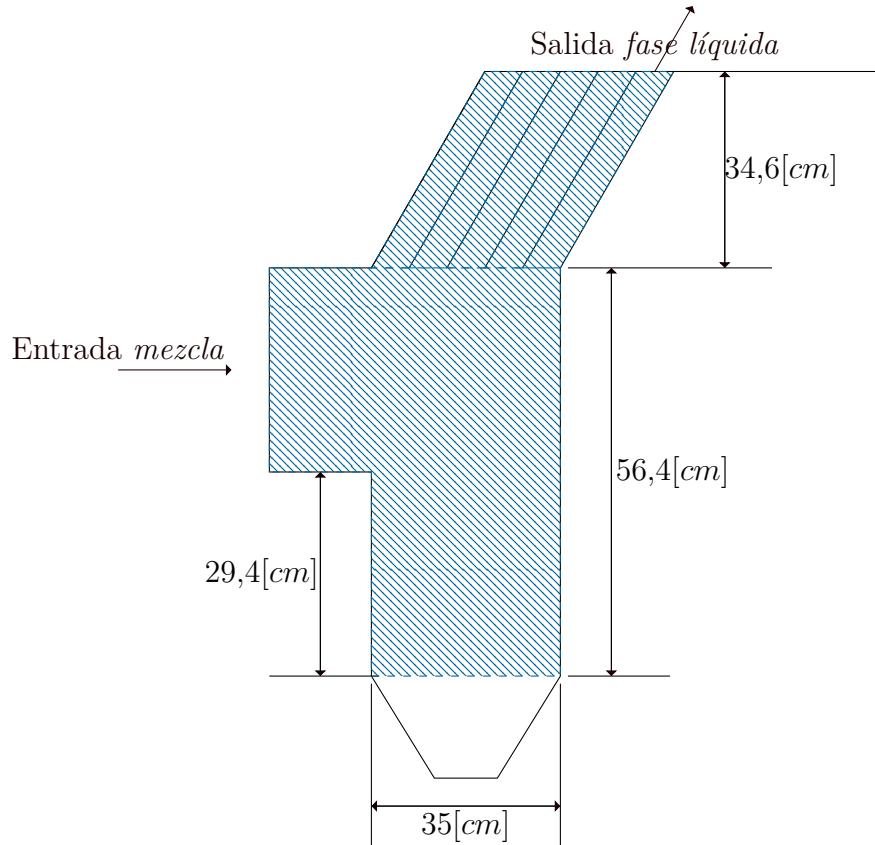


Figura 26: Vista en corte de la geometría del sistema de sedimentación.

Con base en la geometría descrita en el Cuadro 9, se obtuvieron los siguientes parámetros operacionales:

- $v_0 = 1,014[\text{cm/s}]$
- $Re = 478,993$
- $U_c = 0,208[\text{cm/s}]$

3.4. Mallado de la geometría

Con base en el algoritmo desarrollado, a través del lenguaje `gmsh`, se ejecuta una malla *estructurada* con refinamiento automático local en las lamelas, como se aprecia en la Figura 27.

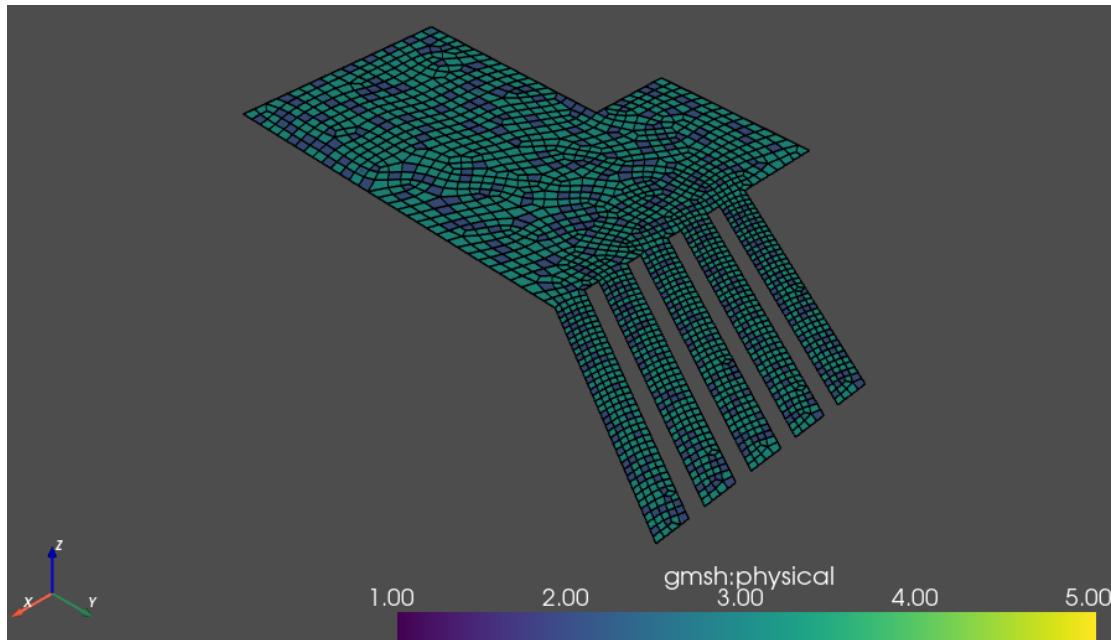


Figura 27: Mallado inicial de la geometría.

Se elaboró la malla con elementos rectangulares debido al mayor índice de precisión en los resultados de simulaciones numéricas que emplean este tipo de elemento de malla^[42, 43]. Los elementos rectangulares presentan mayor facilidad de alcanzar la convergencia en términos de *no ortogonalidad*^[42, 44] y a la baja *oblicuidad*^[42]. La malla mostrada en la Figura 27 presenta las características mostradas en el Cuadro 10.

Parámetro	Valor
Tipo de elementos	Rectangulares
Número de elementos	6097
Número de nodos	4560
Tamaño máximo de elementos [μm]	20000
Tamaño mínimo [μm]	10000

Cuadro 10: Datos de la malla inicial generada.

Al emplear el método `checkMesh` de OpenFOAM para el análisis preliminar de malla, se obtuvieron los siguientes resultados:

Parámetro	Valor
Apertura <i>máxima</i> entre elementos	21.20
Checkeo de <i>no</i> ortogonalidad	OK
Oblicuidad máxima	0.78 OK
Conclusión de malla	OK

Cuadro 11: Resumen de resultados sobre el checkeo de malla.

A partir de los resultados mostrados en el Cuadro 15, se concluye que la malla es apta para el desarrollo de las simulaciones numéricas consecutivas.

3.5. Condiciones de frontera

Complementando la información descrita en la sección 2.10, las condiciones de frontera del problema se resumen en el Cuadro 12.

Zona	Propiedad	Valor	Tipo
Entrada	Velocidad [m/h]	3,493	Neumann
Salida	Presión [KPa]	101,325	Dirichlet

Cuadro 12: Clasificación de las condiciones de frontera.

3.6. Simulación CFD

Con base en la metodología descrita en la sección 2.11, se empleó el solucionador `pimpleFOAM` de OpenFOAM; obteniendo los siguientes resultados:

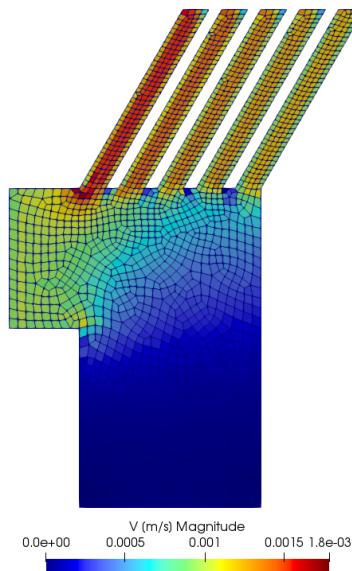


Figura 28: Diagrama de contorno de la distribución de velocidades.

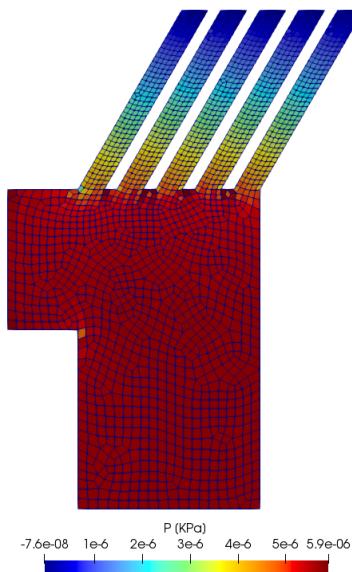


Figura 29: Diagrama de contorno de la distribución de presiones.

3.7. Error computacional

De acuerdo a lo estipulado en la sección 2.12, se desarrolló un refinamiento de malla para estimar el error de la simulación numérica y escoger un tamaño de malla apropiado. El resumen de resultados se puede apreciar en el Cuadro 13.

Iteración	Núm. nodos	Vel. máx. [m/s]	P. máx. [KPa]	Error máx.
1	4560	$17,82 \cdot 10^{-3}$	$5,90 \cdot 10^{-6}$	12,98 %
2	8832	$19,66 \cdot 10^{-3}$	$6,78 \cdot 10^{-6}$	5,83 %
3	17636	$20,50 \cdot 10^{-3}$	$7,20 \cdot 10^{-6}$	3,17 %
4	36820	$19,87 \cdot 10^{-3}$	$7,25 \cdot 10^{-6}$	-

Cuadro 13: Resultados del proceso iterativo.

En la Figura 30, se puede apreciar la tendencia del error de velocidad máxima de forma gráfica.

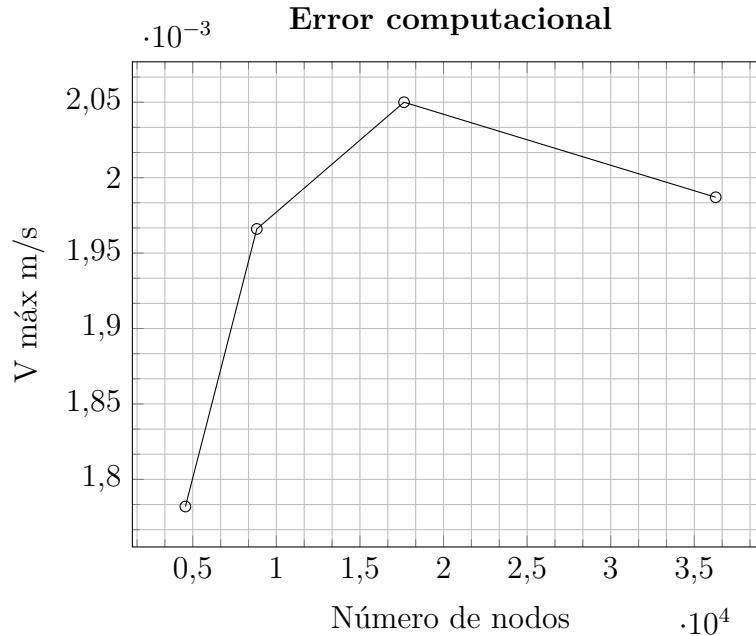


Figura 30: Cambio de la velocidad máxima con respecto al refinamiento de malla.

En la Figura 31, se puede apreciar la tendencia del error en la presión máxima de forma gráfica.

Cabe destacar, con base en las Figuras 28 y 29, que la presión máxima se encuentra entre la zona de entrada de la mezcla y la zona de depósito de los sedimentos; mientras que la velocidad máxima se encuentra en la primera lamela de izquierda

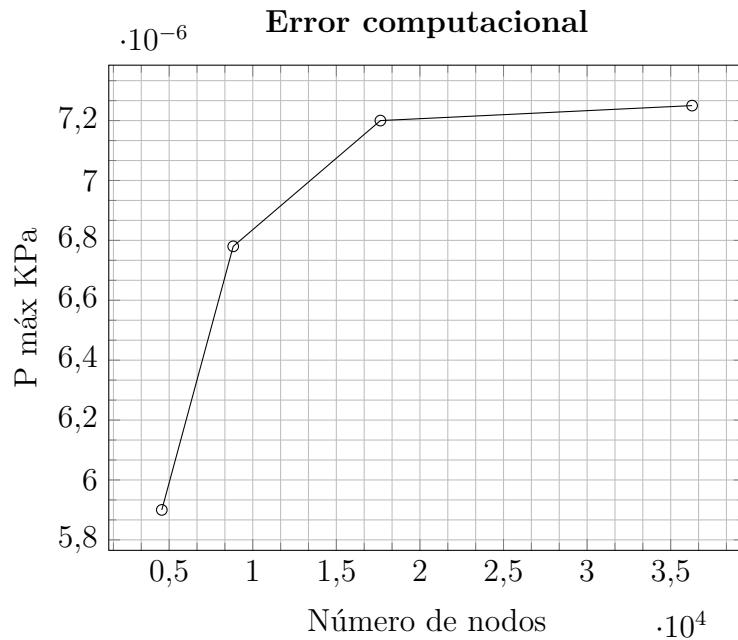


Figura 31: Cambio de la presión máxima con respecto al refinamiento de malla.

a derecha. Con base en los resultados reportados en el Cuadro 13, y las Figuras 30 y 31, se escoge la malla de 17636 nodos para el desarrollo de la simulación CFD-DEM.

3.8. Simulación CFD-DEM

La información referente a la malla empleada para el desarrollo de la simulación CFD-DEM se puede apreciar en el Cuadro 14.

Parámetro	Valor
Tipo de elementos	Rectangulares
Número de elementos	23587
Número de nodos	17636
Tamaño máximo de elementos [μm]	10000
Tamaño mínimo [μm]	5000

Cuadro 14: Datos de la malla empleada.

Se realizó un refinamiento de malla en las lamelas correspondiente a $5000[\mu\text{m}]$ de tamaño mínimo.

La validación de malla a través del comando `checkMesh` de OpenFOAM presenta los siguientes resultados:

Parámetro	Valor
Apertura <i>máxima</i> entre elementos	11.65
Checkeo de <i>no</i> ortogonalidad	OK
Oblicuidad máxima	0.79 OK
Conclusión de malla	OK

Cuadro 15: Resumen de resultados sobre el checkeo de malla.

En la Figura 32 se puede apreciar el comportamiento fluido - partícula del sistema de sedimentación en $t = 60[s]$.

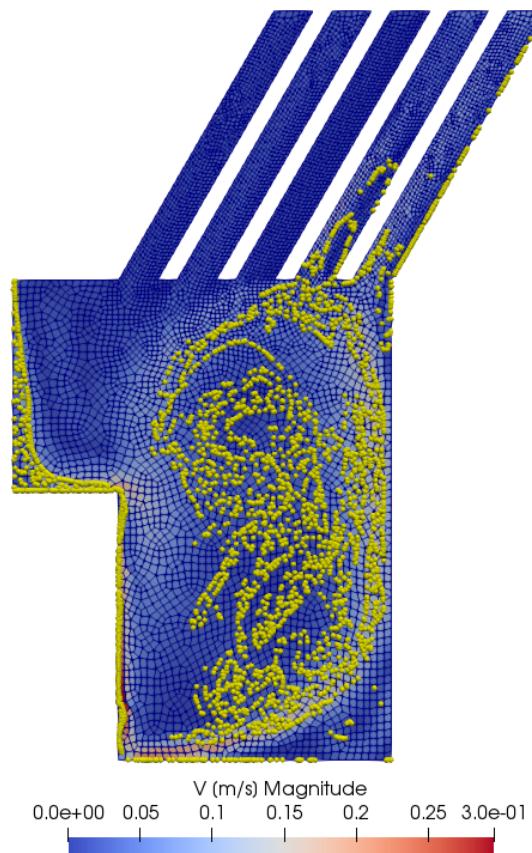


Figura 32: Simulación CFD-DEM → interacción fluido-partícula.

Los resultados de los diagramas de contorno de velocidad y de presión, en $t = 60[s]$, se pueden apreciar en las Figuras 33 y 34.

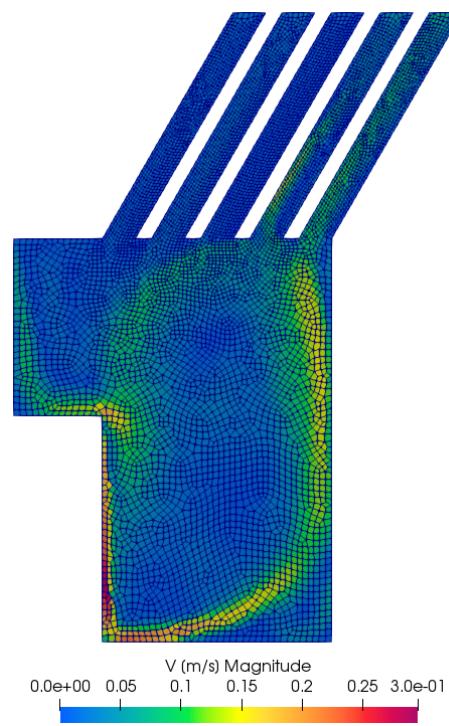


Figura 33: Diagrama de contorno de velocidad $t = 60[s]$.

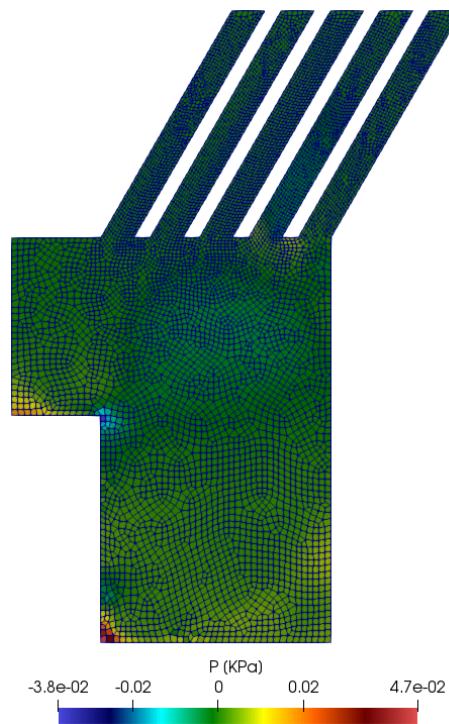


Figura 34: Diagrama de contorno de presión $t = 60[s]$.

4. Análisis de resultados

La simulación numérica CFD, desarrollada con el solucionador `pimpleFoam`, de OpenFOAM, encontró su punto de equilibrio (punto *estacionario*) al cabo de ocho segundos de simulación. En la Figura 28 se observa un valor de velocidad máxima de $0,0018[m/s]$ que es alcanzado en la primera lamela y decrece en las lamelas consecuentes hasta un valor cercano de $0,0012[m/s]$; fenómeno físico que va acorde a la realidad por tratarse de flujos en serie.

En la Figura 29 se puede apreciar el perfil de presiones sobre el sistema; en donde se presenta un comportamiento uniforme y simétrico alcanzando un valor de presión máxima de hasta $5,90 \cdot 10^{-6}[kPa]$. Como era de esperarse, las condiciones de frontera establecidas en la sección 2.10 fueron respetadas: en la salida del flujo se aprecia una presión manométrica de $0[KPa]$ (atmosférica) y la velocidad de flujo en la entrada es de $0,00097[m/s] \approx 3,493[m/h]$.

Comparando las Figuras 28 y 33, se puede apreciar cómo el solvente cambia la distribución de velocidades por la sedimentación sufrida por las partículas de arena, cuya densidad es mayor que la del fluido circundante; razón por la que el solvente tiende a moverse con mayor velocidad en las últimas lamelas en lugar de las primeras, a diferencia de lo observado en la sección 3.6. Debido a ello, es posible clasificar a las lamelas por zonas de “pureza” durante el proceso de separación: en donde las primeras cuatro presentan menor concentración particular que las últimas cuatro.

La presencia de vórtices y remolinos en la simulación CFD-DEM rectifica la decisión de haber empleado un solucionador basado en `pimpleFoam`, el cual fue adaptado para resolver el problema *Euler - Lagrange* (E - L).

Diferente al fenómeno apreciado en la Figura 29, la distribución de presiones en la Figura 34 no es simétrica y tiende a presentar sus máximos valores en la zona de congregación de los sedimentos.

De la Figura 35, la línea morada corresponde al residual de la presión, la de color cian al residual de la velocidad en y y la de color verde al residual de la velocidad en x . El comportamiento de los residuales está directamente relacionado con la magnitud de los errores en la solución de las ecuaciones gobernantes^[45].

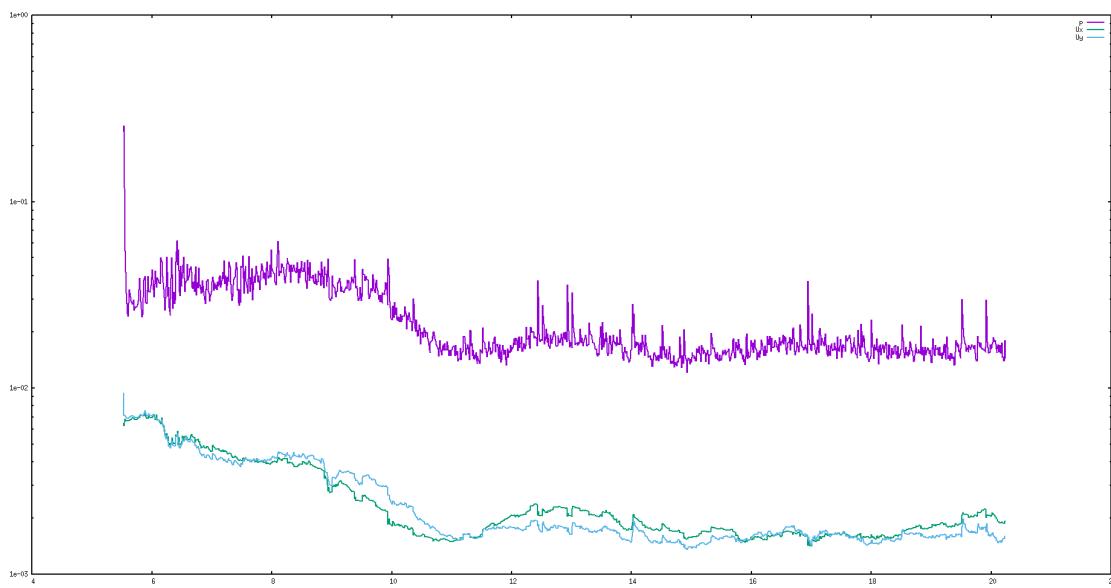


Figura 35: Monitoreo de residuales en la simulación CFD-DEM.

Debido al hecho de que los residuales tienden a aglomerarse en valores cercanos a cero, son un indicativo de alta precisión del modelo numérico implementado. Las variaciones vistas en los residuales de presión se deben a la vorticidad originada por los reflujo consecuentes a la interacción fluido - partícula. Durante la simulación, se observó una estabilización en los perfiles de velocidad; razón por la que los residuales U_x y U_y presentan un comportamiento sin fluctuaciones y con pequeñas variaciones durante el desarrollo del flujo dentro del volumen de control.

5. Validación del modelo

Para la validación del modelo CFD-DEM desarrollado, se aplicó el modelo para resolver el problema de Fessler & Eaton^[4], en donde se investigó el efecto de la turbulencia generada por partículas de cobre de $70[\mu\text{m}]$ de diámetro sobre un flujo orientado hacia atrás, como se muestra en la Figura 36.

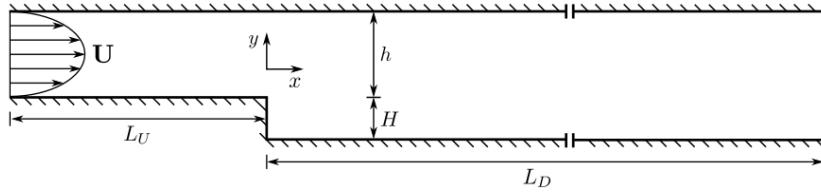


Figura 36: Geometría de estudio.

5.1. Descripción del problema

En 1999, Fessler & Eaton estudiaron el efecto de partículas de vidrio y cobre de distintos tamaños (70 , 90 y $150[\mu\text{m}]$ de diámetro), a diferentes cargas másicas (entre el 3 y el 40% del flujo másico) y a las mismas condiciones experimentales de velocidad y presión de flujo en donde se apreció una atenuación del nivel de turbulencia relacionada con un decaimiento en el número de Stokes de las partículas.

La motivación detrás de esta investigación recae en la complejidad de las interacciones entre partículas pequeñas y densas con la fase turbulenta de una sustancia gaseosa; además de la importancia en diferentes casos, de carácter industrial y natural, en donde se producen flujos particulados que son, muchas veces, inentendidos. En pocos aspectos, tales como la dispersión de partículas en flujos homogéneos, se pueden llevar a cabo estudios analíticos con altos niveles de precisión. Sin embargo, la mayoría de los casos en la realidad comprenden flujos heterogéneos y anisotrópicos sujetos a inestabilidades, con marcadas variaciones entre flujo y flujo, que imposibilitan el desarrollo de un modelo matemático analítico que defina a cabalidad la naturaleza de los flujos y que sea, a su vez, lo suficientemente preciso.

Se ha reportado en la literatura que los niveles de turbulencia pueden ser moderados con la ayuda de la carga de diferentes masas. Investigaciones como la de Hetsroni^[46] y Gore & Crowe^[47] establecieron los cimientos del comportamiento turbulento en la interacción fluido - partícula; mientras que en investigaciones desarrolladas por Kulick, Fessler & Eaton^[48] y Tsuji, Morikawa & Shiomi^[49] se demostró que la atenuación de la turbulencia incrementa tanto con la carga másica como con el número de Stokes de las partículas.

En el presente estudio se investigó el comportamiento de las partículas sobre un flujo *orientado hacia atrás* (Figura 36). Este flujo es ideal para el estudio de la interacción partícula-turbulencia debido a que las estadísticas del flujo medio son conocidas como *invariables* debido a la presencia de partículas sólidas^[48]; hecho esencial que garantiza que los cambios en la turbulencia se deben únicamente a la presencia de material particulado, dado que los flujos separados son sensibles al perfil de velocidad media. En este trabajo se emplearon partículas de vidrio de 90 y 150[μm] de diámetro y partículas de cobre de 70[μm]; que proveen dos diferentes partículas con números de Stokes distinto y tres diferentes valores de Reynolds.

Parámetro	Valor
Altura H	26,7[mm]
Rango de expansión	5:3
Relación de aspecto	17:1
Velocidad inicial U_0	9,39[m/s]
$Re_H = \frac{U_0 H}{\mu}$	18400
τ_f , gran escala de tiempos de remolino, $\frac{5H}{U_0}$	12,7[ms]

Cuadro 16: Parámetros del flujo.

5.2. Desarrollo experimental

El flujo sufre una expansión unidireccional en donde se evita la sedimentación de partículas. El número de Reynolds de la entrada fue de 13800 con una velocidad en la línea central de 10,5[m/s]. El rango de expansión fue de $\frac{5}{3}$; mientras que la relación de aspecto es de 17:1. Hecho que garantiza un flujo bidimensional a través de una porción importante del experimento.

El condicionamiento del flujo de entrada, el flujo de salida y el sistema de alimentación de partículas se ilustra en la Figura 37. El sistema provee velocidad de flujo uniforme con carga de partículas en la entrada. Un canal de 5,2[m] asegura el completo desarrollo del flujo y contempla el tiempo suficiente para que las partículas lleguen al equilibrio con el medio circundante. Se empleó un ventilador, con frecuencia variable, como sistema de control másico.

5.2.1. Descripción particular

El número de Reynolds que define el movimiento particular está definido por la Ecuación 56.

$$Re_p = \frac{d_p U_{rel}}{\mu} \quad (56)$$

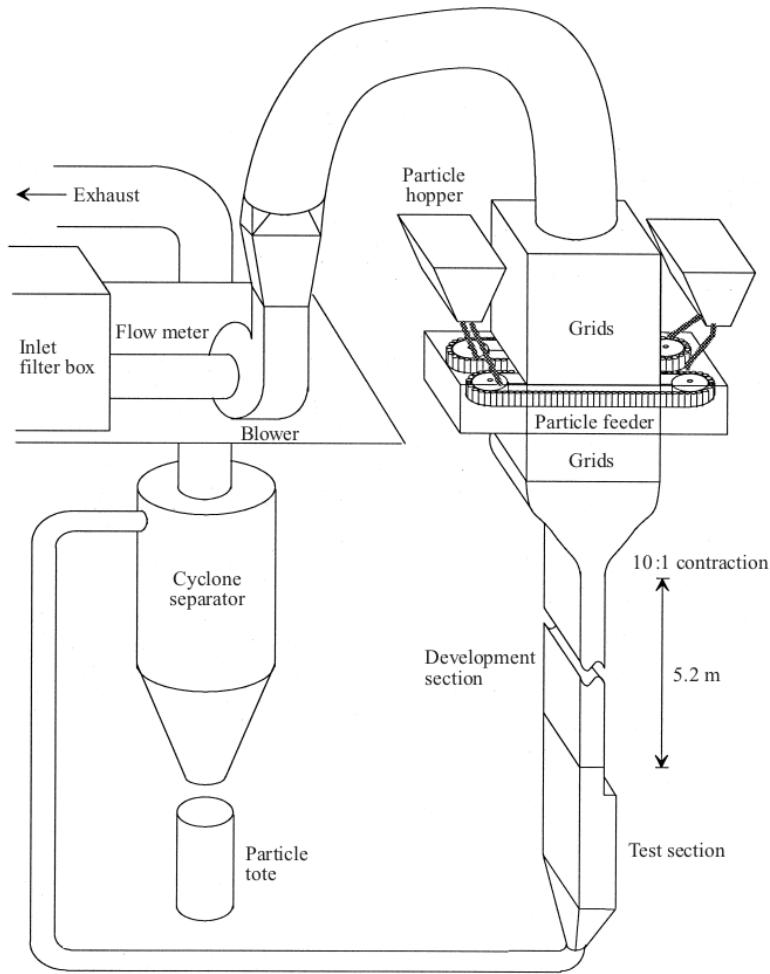


Figura 37: Esquema del montaje experimental^[4].

De la Ecuación 56: d_p es el diámetro de la partícula, μ es la viscosidad cinemática y U_{rel} es la escala de velocidad que caracteriza la velocidad de deslizamiento medio de la partícula sobre el flujo.

El número de Stokes es la relación entre el tiempo de respuesta de las partículas con respecto a la escala de tiempo representativa en el flujo.

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} \quad (57)$$

Para partículas pequeñas con números de Reynolds despreciables, Stokes (1851) demostró que la constante de tiempo particular se define con base en la Ecuación 58.

$$\tau_{p,Stokes} = \frac{(2\rho_p + \rho_f) d_p^2}{36\mu} \quad (58)$$

El coeficiente de arrastre C_D , para números de Reynolds superiores a 700, puede calcularse con base en la Ecuación 59.

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0,15 Re_p^{0,687} \right) \quad (59)$$

El incremento en el coeficiente de arrastre como el del número de Reynolds disminuirá la constante de tiempo particular; de modo que la constante de tiempo modificada empleada en este estudio se puede apreciar en la Ecuación 60.

$$\tau_p = \frac{\tau_{p, stokes}}{1 + 0,15 Re_p^{0,687}} \quad (60)$$

La escala de tiempo representativa en el flujo se calculó con base en la Ecuación 61.

$$\tau_f = \frac{5H}{U_0} \quad (61)$$

5.2.2. Métodos experimentales

Todas las velocidades de flujo fueron medidas a través de un anemómetro láser Doppler (LDA, por sus siglas en inglés). Cada punto de dato representa 2000 muestras individuales de velocidad que mantiene la incertidumbre estadística desde $\pm 0,02[m/s]$ hasta $\pm 0,08[m/s]$. Para medir la velocidad de las partículas, se empleó una técnica de discriminación por amplitud de pedestal, apreciable en la Figura 38. A partir de allí, se estimó un error experimental cercano al 5 %.

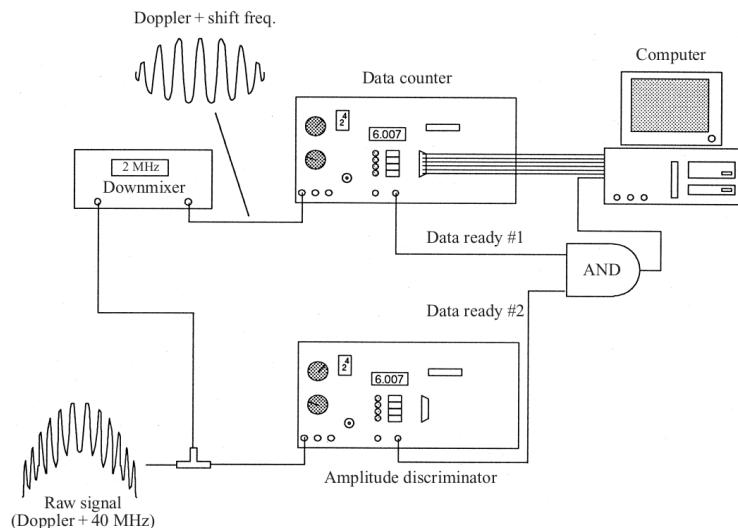


Figura 38: Esquema del sistema de medición de la interacción partícula fluido^[4].

El campo de densidad medio de partículas se midió al iluminar el material particulado a través de un pulso de frecuencia doble, 10[mJ] por pulso de Neodimio, y al analizar diversas fotografías del experimento a través de un software de procesamiento de imágenes; permitiendo así identificar cada partícula, su tamaño y posición en el lecho fluidizado.

5.3. Resultados

Los perfiles de velocidad media se midieron, de manera experimental, a través de las condiciones especificadas en el Cuadro 17. Pocas partículas fueron identificadas en la zona de recirculación, por lo que no se reportaron datos en la zona $x/H = 2,5$ y 7.

Clase de partícula	Dirección de flujo		Dirección normal al muro	
	x/H	Carga másica	x/H	Carga másica
Vidrio de 90[μm]	2,5,7,9,14	20 %		
Vidrio de 150[μm]	2,5,7,9,14	20 %, 40 %	2,5,7,9,14	10 %
Cobre de 70[μm]	-2, 0, 2, 5, 7, 9, 12	3 %, 10 %	2,5,7,9,14	20 %

Cuadro 17: Condiciones experimentales.

En la Figura 39 a) se muestra el esquema de contorno de la densidad media de partículas de cobre de 70[μm]. La velocidad máxima encontrada en este es, aproximadamente, de $0,2U_0$. En la Figura 39 b), se puede apreciar el esquema de contorno obtenido con base en el modelo CFD-DEM desarrollado.

Cerca de la zona de salida del volumen de control, las velocidades de las partículas exceden a las del gas debido a la desaceleración del fluido producida por la expansión. La velocidad media de las partículas en la dirección del muro fue, generalmente, similar a las velocidades del fluido correspondiente.

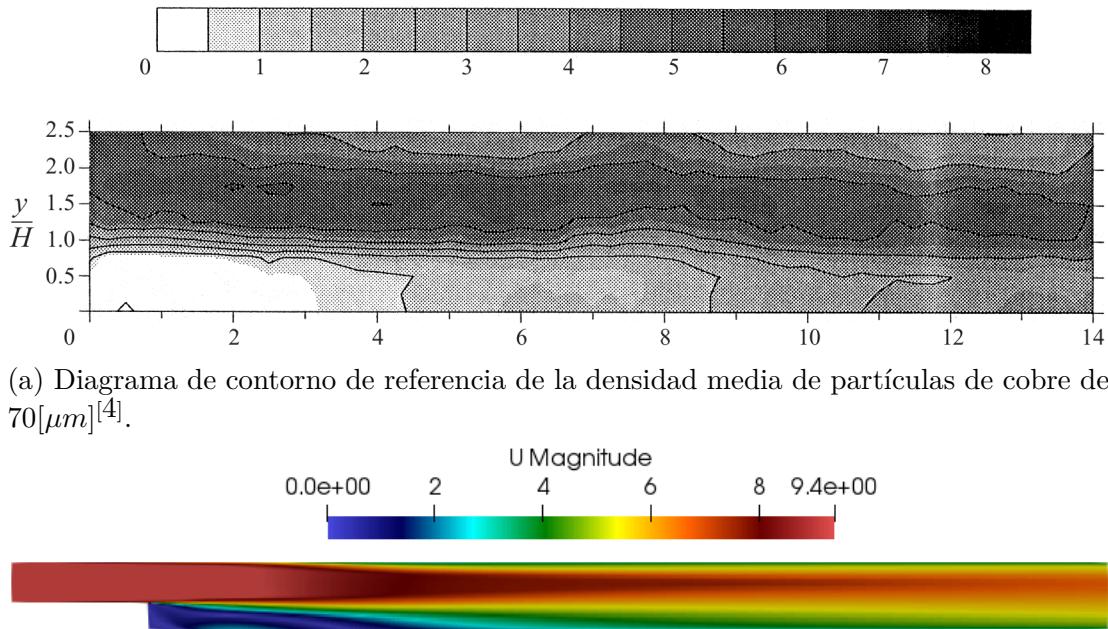


Figura 39: Comparación entre resultados del diseño experimental desarrollado por Fessler & Eaton y los obtenidos a partir del modelo CFD-DEM desarrollado.

Adicional al resultado mostrado en la Figura 39 b), el modelo CFD-DEM desarrollado también permite apreciar los resultados mostrados en la Figura 40.

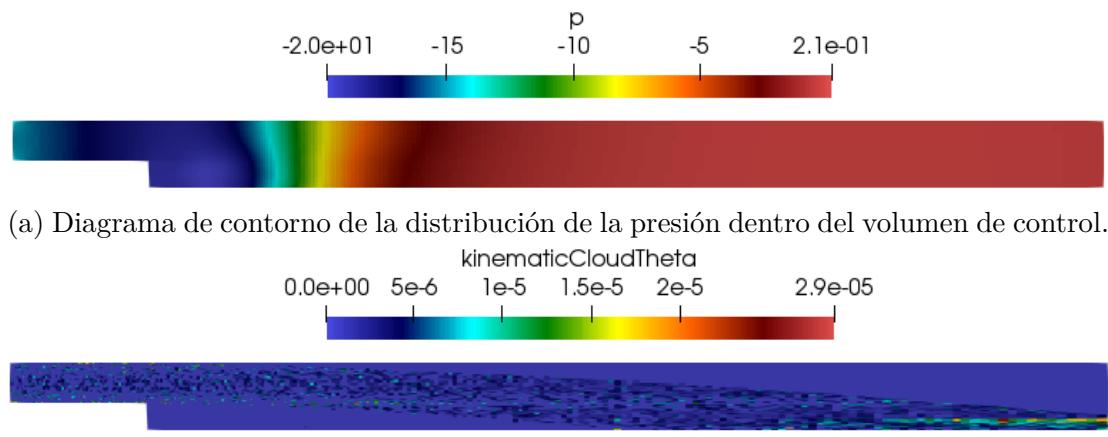


Figura 40: Resultados obtenidos a partir del modelo CFD-DEM desarrollado.

La tendencia de distribución de las partículas de cobre sobre el volumen de control se puede apreciar en la Figura 41.

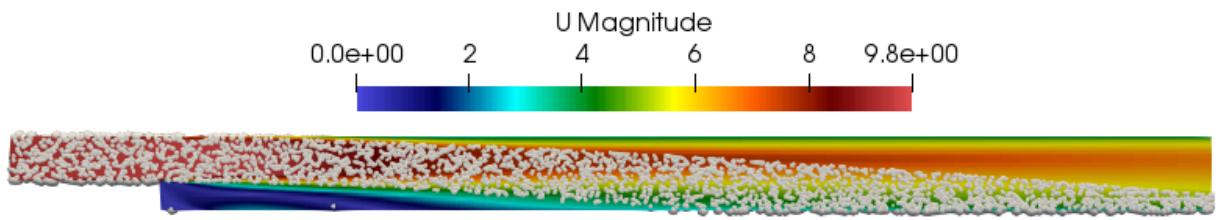


Figura 41: Distribución de las partículas de cobre sobre la geometría.

En la Figura 42 se puede apreciar la comparación directa en los perfiles de velocidad en diferentes puntos de interés, contrastando los definidos por Fessler & Eaton con respecto a los calculados por el modelo CFD-DEM desarrollado.

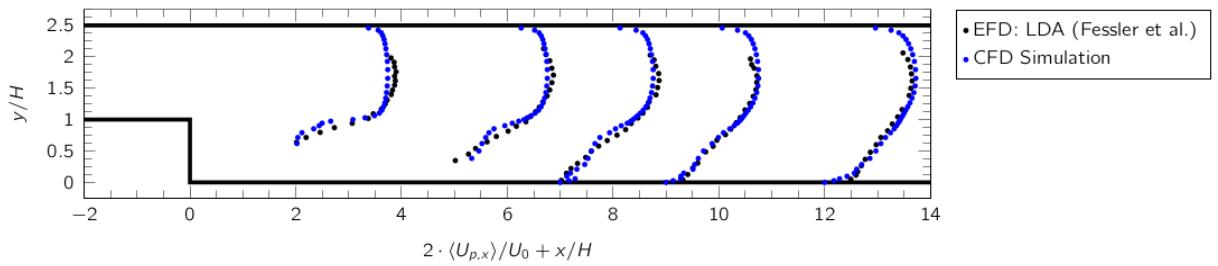


Figura 42: Comparación directa de los perfiles de velocidad experimentales con respecto al del modelo numérico desarrollado.

En la Figura 42, se puede apreciar una variación de hasta el 1,6 % entre los resultados experimentales con respecto a los obtenidos por el modelo numérico; validando así el modelo CFD-DEM desarrollado.

Conclusiones

Con base en los resultados obtenidos, se puede apreciar la importancia de las simulaciones numéricas basadas en CFD-DEM para el diseño de maquinaria y equipos que busquen separar mezclas de sustancias sólidas y líquidas. De la Figura 32 se concluye que el panel de lamelas presenta zonas de salidas *limpias* de material particulado y otras con una concentración menor a la inicialmente procesada. Futuras investigaciones podrían emplear el modelo CFD-DEM desarrollado en el presente trabajo como base para el diseño de un nuevo sistema de sedimentación que emplee un *reflujo* de las zonas con posibles impurezas para garantizar una completa separación de sustancias.

Se logró implementar la metodología del modelo CFD-DEM con la ayuda de herramientas de código abierto; demostrando la viabilidad de estas en el desarrollo de nuevos productos y servicios de bajos costos de inversión inicial y alto grado de innovación.

A las condiciones de operación dadas ($0,3 [m^3/h]$ de caudal, $27 [^\circ C]$ de temperatura de operación y $250 [\mu m]$ de tamaño de partícula medio) las simulaciones numéricas del sistema de elución y filtrado demostraron un nivel de eficiencia general superior al 90 % en la remoción de material particulado. Estos resultados presentan un margen de error inferior al 3,18 % gracias a la caracterización de la malla empleada durante el análisis del error computacional (sección 3.7); en dónde se concluyó que la malla más adecuada para el desarrollo de la simulación CFD-DEM del sistema de sedimentación se trataba de una malla con elementos rectangulares de 17636 nodos, tamaño máximo de elementos de $10 [mm]$ y con un refinamiento en la zona de lamelas con elementos de $5 [mm]$ de tamaño.

Con base en los resultados obtenidos, se concluye que el sistema de sedimentación es una solución viable para emplearlo como sistema de separación de sustancias de la planta de extracción a las condiciones de diseño especificadas en el Cuadro 3.

De acuerdo al proceso de validación desarrollado en el capítulo 5, se concluye que el modelo CFD-DEM desarrollado es preciso y confiable (error inferior al 2 % con respecto a los resultados experimentales) y puede ser empleado en diversas aplicaciones de flujo en donde partículas sólidas interactúan con fluidos newtonianos en fase líquida o gaseosa; gracias a que permite apreciar la interacción fluido-partícula durante la separación de sustancias.

Recomendaciones

Al diseño final del sistema se recomienda emplear un sistema de reflujo en la última lamela para garantizar una completa separación de la fase sólida y líquida.

Es recomendable construir un prototipo del sistema de sedimentación diseñado para ejecutar un diseño experimental con las variables descritas en el Cuadro 18.

Variable	Rango
Temperatura	[20 °C, 60 °C]
Tiempo de separación [h]	[1, 4]
Mezcla agua - etanol [%]	(0, 25, 50, 75, 100)

Cuadro 18: Diseño experimental sugerido.

Una vez seleccionada una especie vegetal de estudio, las variables de respuesta a analizar deberían ser: rendimiento de extracción (valor adimensional que contrasta la cantidad de material procesado con la cantidad de producto obtenido) y la composición química del extracto, obtenida mediante cromatografía líquida (permite conocer la calidad del extracto).

El software desarrollado, y documentado en el Anexo A, se puede complementar con módulos de dibujo CAD a la geometría final (tanto 2D como 3D) e informes de ingeniería automático en L^AT_EX. Debido al hecho de haber sido desarrollado únicamente con lenguajes y herramientas de código abierto, es posible crear un servicio de diseño web interactivo que resuelva simulaciones numéricas en la nube.

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] V. Šmilauer and B. Chareyre, “DEM Formulation,” *The Yade Project*, vol. 2, 2015. [Online]. Available: <http://yade-dem.org/doc/>
- [3] N. Voutchkov, “Sand Removal, Sedimentation, and Dissolved Air Flotation,” in *Pretreatment for Reverse Osmosis Desalination*. Elsevier, jan 2017, pp. 137–152.
- [4] J. R. Fessler and J. K. Eaton, “Turbulence modification by particles in a backward-facing step flow,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 394, pp. 97–117, sep 1999. [Online]. Available: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/turbulence-modification-by-particles-in-a-backwardfacing-step-flow/7CCEE8B4F7C6A3003434D4106D7D1E24>
- [5] S. A. Barker, “Matrix solid phase dispersion (MSPD),” *Journal of Biochemical and Biophysical Methods*, vol. 70, no. 2, pp. 151–162, 2007.
- [6] 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. [Online]. Available: <https://www.foamacademy.com/wp-content/uploads/2016/11/GOFUN2017{-.}ParticleSimulations{-.}slides.pdf>
- [7] 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.
- [8] 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}\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\begin{group}\endgroup\relax\let\ignorespaces\relax\accent127u\egroup\spacefactor\accent@spacefactor\protect\penalty@\M\hskip\z@skip}ello
- [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] K. W. Chu, B. Wang, D. L. Xu, Y. X. Chen, and A. B. Yu, “CFD-DEM simulation of the gas-solid flow in a cyclone separator,” *Chemical Engineering Science*, vol. 66, no. 5, pp. 834–847, mar 2011.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] E. Stashenko, “Plantas aromaticas y aceites esenciales: estudio y viabilidad de su desarrollo en colombia.” *Plantas aromaticas y aceites esenciales: estudio y viabilidad de su desarrollo en colombia.*, vol. 1, no. 33, p. 245, jan 2007. [Online]. Available: <https://revistas.utp.edu.co/index.php/revistaciencia/article/view/5815>
- [14] B. Pavlić, B. Šojić, N. Teslić, P. Putnik, and D. B. Kovačević, “Extraction of bioactive compounds and essential oils from herbs using green technologies,” in *Aromatic Herbs in Food*. Elsevier, jan 2021, pp. 233–262.
- [15] M. Balass, “Distillation method for extraction of essential oils and hydrosols from plant matter within a capsule - Google Patents,” 2013. [Online]. Available: <https://patents.google.com/patent/US10569193B2/en?q=steam+destillation&oq=steam+destillation>
- [16] E. E. Stashenko, J. R. Martínez, M. P. Cala, D. C. Durán, and D. Caballero, “Chromatographic and mass spectrometric characterization of essential oils and extracts from Lippia (Verbenaceae) aromatic plants,” *Journal of Separation Science*, vol. 36, no. 1, pp. 192–202, jan 2013. [Online]. Available: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/23292852/>

- [17] T. Hennebelle, S. Sahpaz, H. Joseph, and F. Bailleul, “Ethnopharmacology of *Lippia alba*,” *Journal of Ethnopharmacology*, vol. 116, no. 2, pp. 211–222, mar 2008.
- [18] R. A. Pérez, B. Albero, and J. L. Tadeo, “Matrix solid phase dispersion,” in *Solid-Phase Extraction*. Elsevier, jan 2019, pp. 531–549.
- [19] 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>
- [20] W. Abou-Hweij and F. Azizi, “CFD simulation of wall-bounded laminar flow through screens. Part I: Hydrodynamic characterization,” *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, vol. 84, pp. 207–232, nov 2020.
- [21] H. Bao, J. Feng, N. Dinh, and H. Zhang, “Deep learning interfacial momentum closures in coarse-mesh CFD two-phase flow simulation using validation data,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 135, p. 103489, feb 2021.
- [22] V. Roda-Casanova and F. Sanchez-Marin, “A simple procedure for generating locally refined 2D quadrilateral finite element meshes of gears,” *Mechanism and Machine Theory*, vol. 157, p. 104185, mar 2021. [Online]. Available: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0094114X2030402X>
- [23] Z. Z. Bai, L. Wang, and W. T. Wu, “On convergence rate of the randomized Gauss-Seidel method,” *Linear Algebra and Its Applications*, vol. 611, pp. 237–252, feb 2021.
- [24] M. Maxey, “Simulation Methods for Particulate Flows and Concentrated Suspensions,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 49, no. 1, pp. 171–193, jan 2017. [Online]. Available: <http://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev-fluid-122414-034408>
- [25] M. Lungu, J. Siame, and L. Mukosha, “Comparison of CFD-DEM and TFM approaches for the simulation of the small scale challenge problem 1,” *Powder Technology*, vol. 378, pp. 85–103, jan 2021.
- [26] Z. J. Xu and E. E. Michaelides, “A numerical simulation of the Boycott effect,” *Chemical Engineering Communications*, vol. 192, no. 4-6, pp. 532–549, apr 2005.
- [27] K. P. Galvin and G. Nguyentrnlam, “Influence of parallel inclined plates in a liquid fluidized bed system,” *Chemical Engineering Science*, vol. 57, no. 7, pp. 1231–1234, mar 2002.

- [28] A. Acrivos, “Sedimentation and sediment flow in settling tanks with inclined walls,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 290, pp. 39–66, 1995. [Online]. Available: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/sedimentation-and-sediment-flow-in-settling-tanks-with-inclined-walls/F5D7B030CCA97FE3A551D6148C1E5C74>
- [29] E. Doroodchi, K. P. Galvin, and D. F. Fletcher, “The influence of inclined plates on expansion behaviour of solid suspensions in a liquid fluidised bed - A computational fluid dynamics study,” *Powder Technology*, vol. 156, no. 1, pp. 1–7, aug 2005.
- [30] A. I. Salem, G. Okoth, and J. Thöming, “An approach to improve the separation of solid-liquid suspensions in inclined plate settlers: CFD simulation and experimental validation,” *Water Research*, vol. 45, no. 11, pp. 3541–3549, may 2011.
- [31] Z. Peng, E. Doroodchi, C. Luo, and B. Moghtaderi, “Influence of void fraction calculation on fidelity of CFD-DEM simulation of gas-solid bubbling fluidized beds,” *AICHE Journal*, vol. 60, no. 6, pp. 2000–2018, jun 2014. [Online]. Available: <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/aic.14421>
<https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.14421>
<https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/aic.14421>
- [32] “OMS — Manual para el desarrollo de planes de seguridad del agua,” *WHO*, 2017. [Online]. Available: http://www.who.int/water_sanitation_health/publications/publication_9789241562638/es/
- [33] J. A. Romero Rojas, *Purificación del agua*. Escuela Colombiana de Ingeniería, 2009.
- [34] J. A. Pérez Parra, *Manual de potabilización del agua*. Medellín: Universidad Nacional de Colombia, 1997.
- [35] K. Yao, “Theoretical Study of High-Rate Sedimentation,” *Water Pollution Control Federation*, vol. 42, pp. 218–228, 1970. [Online]. Available: <https://www.jstor.org/stable/25036470?seq=1>
- [36] V. L. Streeter, *Fluid Mechanics*. McGraw-Hill, 1951. [Online]. Available: <https://books.google.com.co/books?id=K5-rK6HUoo8C>
- [37] O. I. Lekang, A. Marie Bomo, and I. Svendsen, “Biological lamella sedimentation used for wastewater treatment,” *Aquacultural Engineering*, vol. 24, no. 2, pp. 115–127, feb 2001.

- [38] L. D. Robescu, I. C. Moga, and D. Robescu, “Design lamellar secondary settling tank using numerical modeling,” *UPB Scientific Bulletin, Series D: Mechanical Engineering*, vol. 72, 2010. [Online]. Available: <https://www.researchgate.net/publication/265268495{ }Design{ -}lamellar{ -}secondary{ -}settling{ -}tank{ -}using{ -}numerical{ -}modeling>
- [39] M. Ordoñez-Viñán, S. Aquino-Arroba, L. Orozco-Cantos, E. Pozo-Safla, and E. Jácome-Domínguez, “Modelización CFD para determinar el comportamiento del fluido en tubería PVC,” *Dominio de las Ciencias*, vol. 4, pp. 434–446, 2018. [Online]. Available: <https://dominiodelasciencias.com/ojs/index.php/es/index>
- [40] S. Pérez-Cortes, Y. Aguilera-Carvajal, J. Hurtado-Cruz, and J. P. Vargas-Norambuena, “Modelación y simulación fluido-dinámica computacional de sistema de enfriamiento de gases para fundición de cobre mediante Convertidor Teniente con enfriador evaporativo,” *Revista Internacional de Metodos Numericos para Calculo y Diseno en Ingenieria*, vol. 33, no. 3-4, pp. 179–187, jul 2017.
- [41] D. Kunhappan, “Numerical modeling of long flexible fibers in inertial flows,” Ph.D. dissertation, Université Grenoble Alpes, 2018. [Online]. Available: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01877792>
- [42] J. Tu, G.-H. Yeoh, and C. Liu, “CFD Mesh Generation: A Practical Guide-line,” in *Computational Fluid Dynamics*. Elsevier, jan 2018, pp. 125–154.
- [43] B. Illés, O. Krammer, and A. Géczy, “Numerical simulation of reflow ovens,” in *Reflow Soldering*. Elsevier, jan 2020, pp. 199–280.
- [44] J. Martínez, “Mesh handling for the CFD simulation of external gear pumps,” in *Positive Displacement Machines: Modern Design Innovations and Tools*. Elsevier, jan 2019, pp. 345–368.
- [45] R. Liang, Y. Luo, and Z. Li, “The effect of humping on residual stress and distortion in high-speed laser welding using coupled CFD-FEM model,” *Optics and Laser Technology*, vol. 104, pp. 201–205, aug 2018.
- [46] G. Hetsroni, “Particles-turbulence interaction,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 15, no. 5, pp. 735–746, sep 1989.
- [47] R. A. Gore and C. T. Crowe, “Modulation of turbulence by a dispersed phase,” *Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME*, vol. 113, no. 2, pp. 304–307, jun 1991.
- [48] J. D. Kulick, J. R. Fessler, and J. K. Eaton, “Particle response and turbulence modification in fully developed channel flow,” *Journal of Fluid*

- Mechanics*, vol. 277, pp. 109–134, 1994. [Online]. Available: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/abs/particle-response-and-turbulence-modification-in-fully-developed-channel-flow/5C12D16FEB1A89A7C2C8C8502C6F83FA>
- [49] Y. Tsuji, Y. Morikawa, and H. Shiomi, “LDV measurements of an air-solid two-phase flow in a vertical pipe,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 139, pp. 417–434, 1984. [Online]. Available: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/abs/ldv-measurements-of-an-airsolid-twophase-flow-in-a-vertical-pipe/043CBA133D1AE2D65549105FBD48DDBD>

Anexo A: Software de diseño automático

Como complemento de la metodología de diseño, se desarrolló un software de diseño automático (sección 2.14) que, adicional al desarrollo de la metodología de cálculo del diseño analítico, incorpora un módulo de discretización de dominio (pudiendo desarrollar mallas estructuradas y no estructuradas) y simulación automática a través de los métodos CFD y CFD-DEM. A continuación, se puede apreciar la evidencia fotográfica de los componentes del software desarrollado en Python - Jupyter.



Resumen

Se desarrolló 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.

Palabras clave: CFD-DEM, OpenFOAM, Python, Jupyter, ParaView.

5. Diseño del sistema

El diseño del sedimentador de placas paralelas se resume en lo siguiente:

1. Definición de propiedades del *fluído y material particulado*.
2. Cálculo de las propiedades termodinámicas del fluido.
3. Definición de la geometría del panel de lamelas.
4. Cálculo de propiedades de flujo.
5. Resultados.

5.1. Generalidades

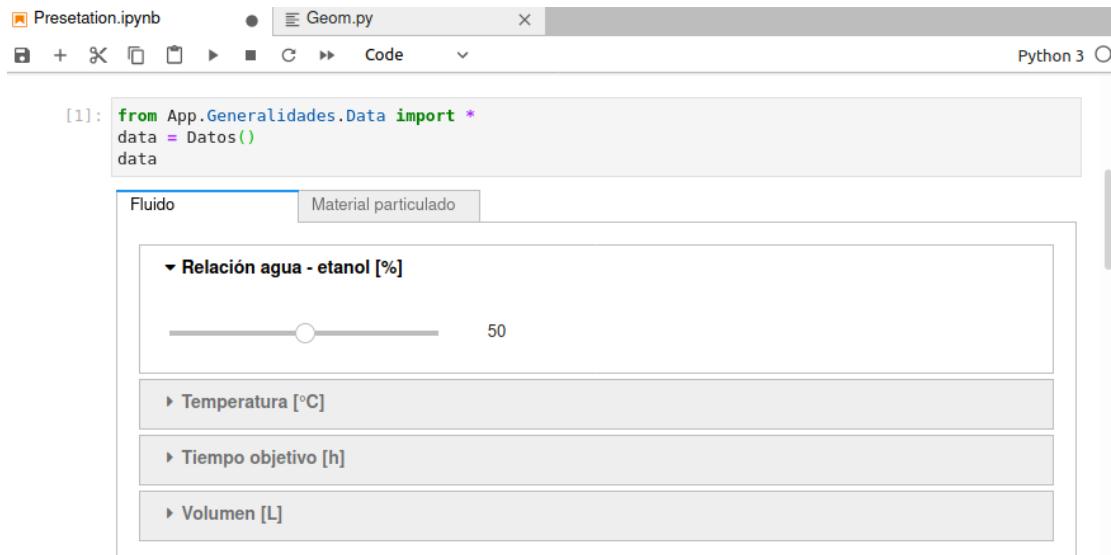
Define las propiedades del *fluído y material particulado*:

```
[ ]: from App.Generalidades.Data import *
data = Datos()
data
```

Figura 43: Inicio del software.

Como se puede observar en la Figura 43, el software se presenta en un formato de texto tipo pdf. Es como una especie de artículo interactivo que permite ejecutar

código en vivo. El primer módulo consiste en definir las condiciones de diseño de entrada; en términos de los datos del fluido y del material particulado. Una vez definidos los datos, se procede a calcular las propiedades termodinámicas.



The screenshot shows a Jupyter Notebook interface with two code cells and a sidebar for input parameters.

Code Cell [1]:

```
from App.Generalidades.Data import *
data = Datos()
data
```

Code Cell [2]:

```
from App.Generalidades.Read import Read
from App.Generalidades.Propiedades import *
general = Read(data)
prop = SolProp(general)()
prop = prop['mezcla']
```

Input Sidebar:

- Fluido (selected)
- Material particulado
- Relación agua - etanol [%]: Sliders for water and ethanol percentages. The ethanol slider is set to 50.
- Temperatura [°C]
- Tiempo objetivo [h]
- Volumen [L]

Con base en los datos suministrados, las propiedades termodinámicas del solvente se pueden apreciar a continuación.

Propiedad	Valor
Densidad [kg/m ³]	889.4
Visc. cinemática kg m/s	1.06 10 ⁻⁶
Visc. dinámica m ² /s	9.23 10 ⁻⁴
Relación de densidades	1.91

Figura 44: Datos y propiedades del solvente.

Una vez conocidas las propiedades del solvente, se procede a calcular la velocidad de asentamiento máxima de las partículas.



5.2. Velocidad de sedimentación

Conociendo las propiedades del solvente y del material particulado, se puede calcular la *velocidad de sedimentación* de las partículas a partir de la Ecuación 1.

$$U_{max} = \sqrt{\frac{2V(\rho_s - \rho_f)g}{CA_n\rho_f}} \quad (1)$$

El coeficiente de arrastre C se calcula de la siguiente forma:

$$C = \frac{24}{Re_s} + \frac{3}{Re_s^{1/2}} + 0.34 \quad (2)$$

El número de Reynolds del fluido colindante con la partícula sólida se calcula como se muestra en la Ecuación 3.

$$Re_s = \frac{d_p U}{\mu} \quad (3)$$

Para resolver la Ecuación 1, es necesario emplear un proceso iterativo de cálculo.

```
[3]: from App.Sedimentation.Calculos import *
dataV = VelSed(general['Solid'], prop)()
```

El proceso iterativo, con una estimación de error del 0.01%, arroja los siguientes resultados: $U = 0.022[m/s]$ y un número de Reynolds de $Re_s = 5.115$.

5.3. Dimensionamiento

A continuación, se define la geometría del panel de lamelas para el diseño del sistema de sedimentación.

```
[ ]: from App.Generalidades.Lamelas import *
geo = Geometry()
geo

[ ]: #%matplotlib
datos_geo = Read(geo, datos={'lamela':[]})
datos_geo = datos_geo['lamela']
lamela = Lamela(general['Fluido'], prop, datos_geo, dataV)()
```

Figura 45: Velocidad de asentamiento máximo.

Luego, se define una geometría inicial de diseño para el cálculo de las propiedades del fluido.

5.3. Dimensionamiento

A continuación, se define la geometría del panel de lamelas para el diseño del sistema de sedimentación.

```
[4]: from App.Generalidades.Lamelas import *
geo = Geometry()
geo
```

▼ Ancho lamela [cm]

► Rel. longitud - ancho

► Número de lamelas

► Inclinación [°]

► Carga superficial [m/d]

```
[5]: #%matplotlib
datos_geo = Read(geo, datos={'lamela':{}})
datos_geo = datos_geo['lamela']
lamela = Lamela(general['Fluido'], prop, datos_geo, dataV)()
```

Propiedad	Valor
Q [L/min]	3.333
W [m]	0.022
v_0 [cm /s]	1.014
Re	478.993

Figura 46: Geometría inicial.

Una vez definida la geometría de estudio, con base en los criterios de diseño, se procede a discretizar el dominio especificando los datos referentes al mallado y al desarrollo de la geometría.

El mallado consiste en la discretización del dominio geométrico del problema.

Figura 2. Discretización del dominio.

```
[8]: from App.CFD_DEM.Geom import *
from App.Generalidades.Read import *
from ipywidgets import Button, Layout, HBox
size = Malla(round((2*lamela['QT'])/(125*pi*prop['visc']),2), datos_geo)
a = HBox([size], layout=Layout(height='200px', overflow_y='auto'))
display(a)
```

Malla Dimensiones Entrada

▼ Tamaño de malla

Rango [um]:

► Tipo de malla

```
[ ]: import warnings
datos_geo = ReadMesh(size)
datos_geo['DI [m]'] = round((2*lamela['QT'])/(125*pi*prop['visc']),2)
warnings.filterwarnings('ignore')
DEM = False      #Cambiar modelo de malla en el directorio CFD-DEM
Dibujar(datos_geo, lamela, size.children[0].children[0].value, size.children[0].children[1].value)
```

La malla desarrollada presenta las siguientes características:

Figura 47: Datos del mallado de la geometría.

Después, se procede a desarrollar la malla:

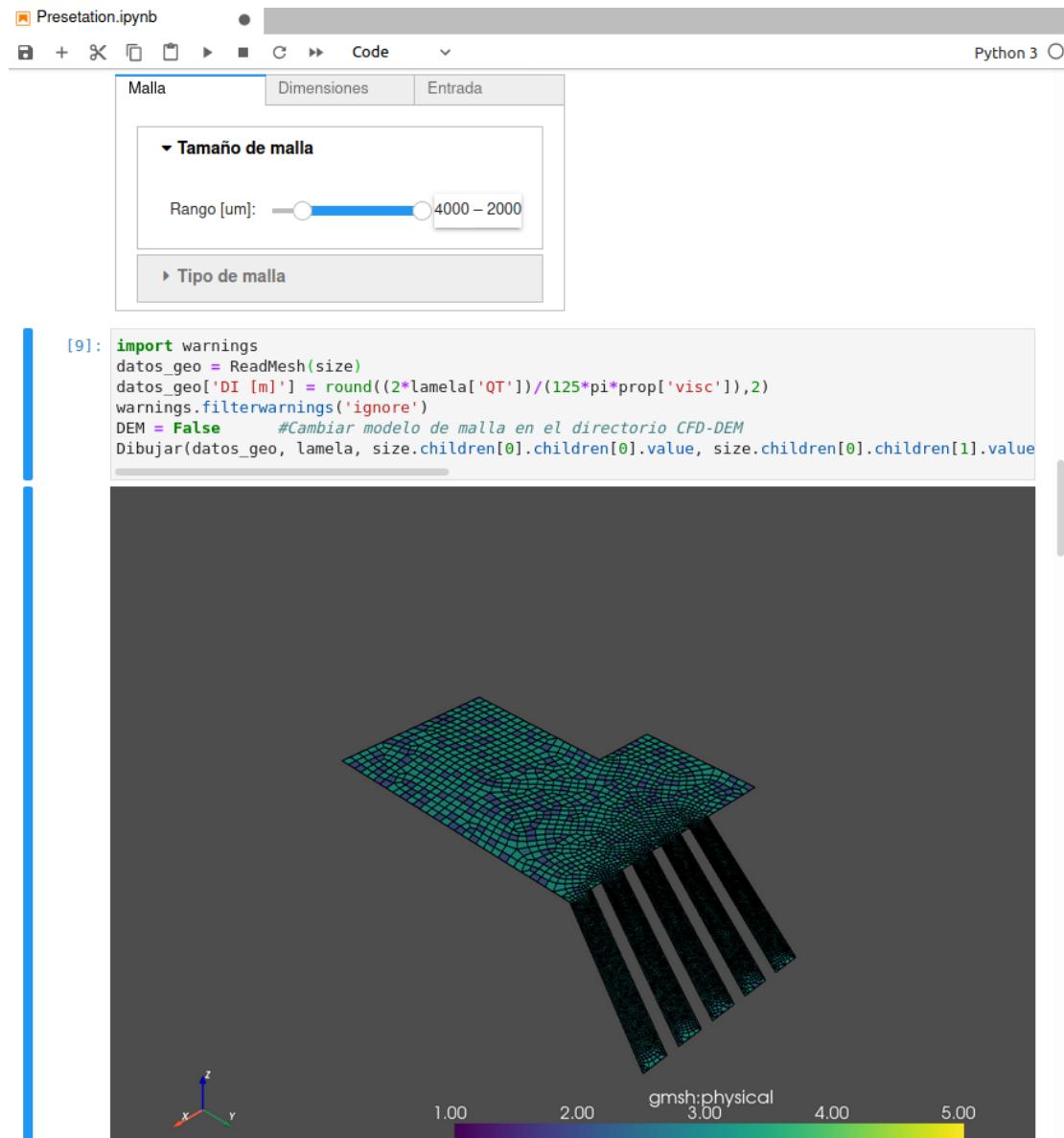
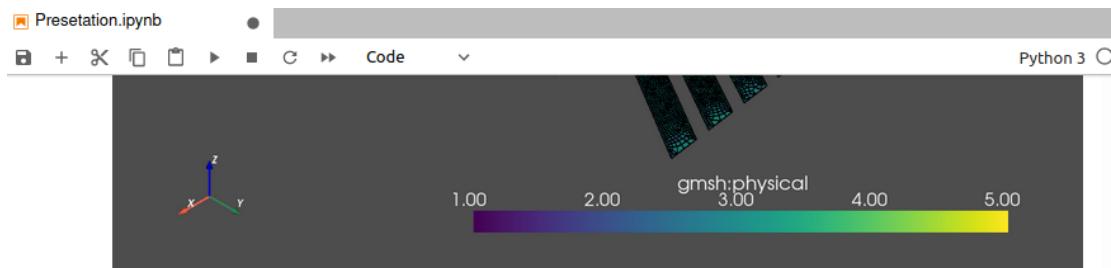


Figura 48: Mallado de la geometría.

Luego, se analizan las características del mallado.



La malla desarrollada presenta las siguientes características:

```
[10]: import pyvista as pv
res_malla = pv.read("out.vtk")
res_malla
```

Header		Data Arrays					
UnstructuredGrid	Information	Name	Field	Type	N Comp	Min	Max
	N Cells	21550					
	N Points	15462					
X Bounds	0.000e+00, 6.848e-01	gmsh:physical	Cells	int32	1	1.000e+00	5.000e+00
Y Bounds	-6.160e-01, 3.460e-01	gmsh:geometrical	Cells	int32	1	1.000e+00	1.540e+02
Z Bounds	0.000e+00, 1.000e-03						
	N Arrays	2					

Resultados de la evaluación de malla a través del comando `checkMesh`, de OpenFoam:

```
[11]: from App.CFD_DEM.Malla import *
ToFoam()
```

Parámetro	Valor
Apertura máxima entre elementos	21.2121
Checkeo de no ortogonalidad	OK.
Oblícuidad máxima	1.12918 OK.
Conclusión de malla	OK.

La oblicuidad máxima es mayor a 1.0. Se recomienda disminuir el rango del tamaño entre elementos para disminuir este valor.

Figura 49: Características del mallado.

En caso de que el mallado no sea el adecuado, es posible desarrollar cambios en los datos referentes a la geometría o al rango de tamaños de la malla.

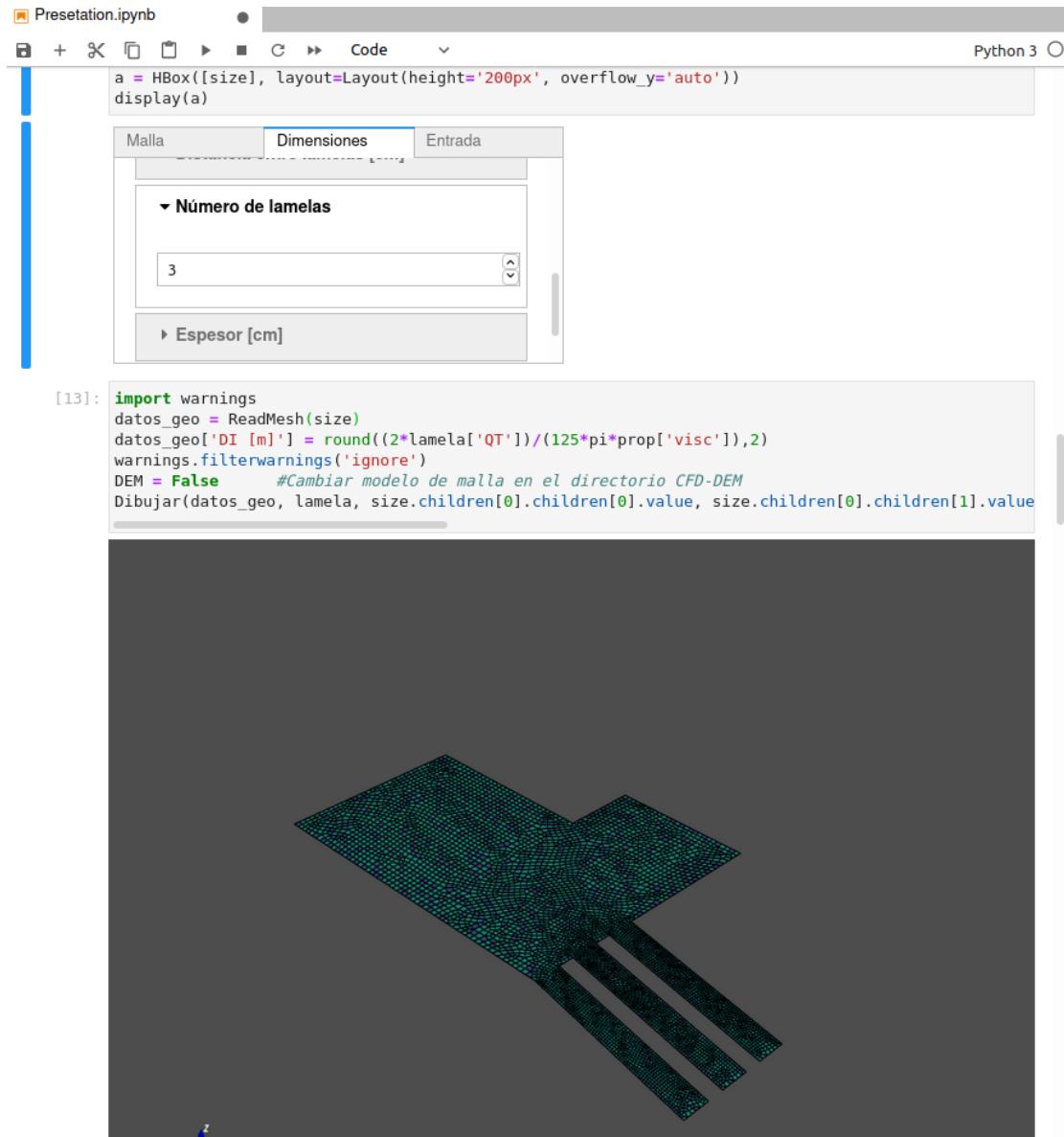
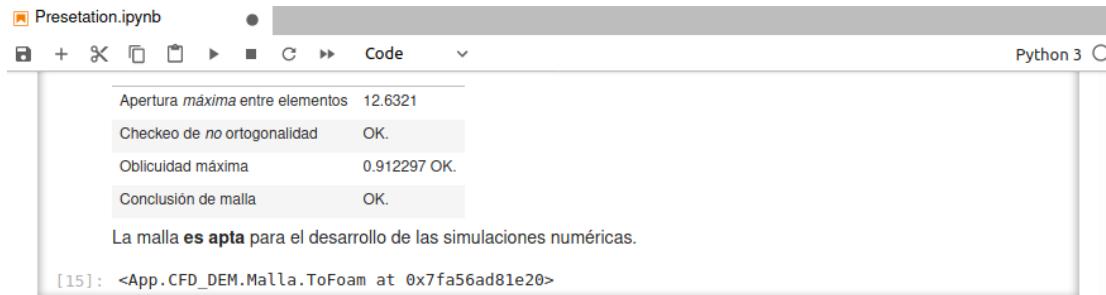


Figura 50: Cambios en el mallado.

Luego, se definen las condiciones de frontera:



```
Apertura máxima entre elementos 12.6321
Checkeo de no ortogonalidad OK.
Oblicuidad máxima 0.912297 OK.
Conclusión de malla OK.

La malla es apta para el desarrollo de las simulaciones numéricas.

[15]: <App.CFD_DEM.Malla.ToFoam at 0x7fa56ad81e20>
```

6.2. Condiciones de frontera

Como se aprecia en la Figura 2, el volumen de control presenta una *entrada* y una *salida*. También cuenta con una zona de lodos, en donde se deposita parte del material particulado que se busca separar. Las condiciones de frontera, que son tanto de tipo *Dirichlet* y *Neumann*, se pueden apreciar a continuación.

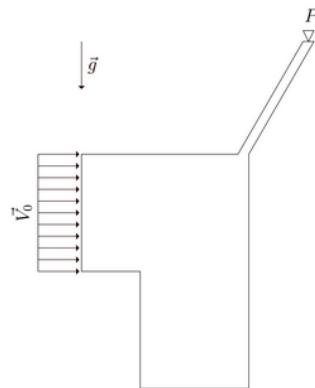


Figura 2. Discretización del dominio bidimensional.

```
[16]: from App.CFD_DEM.CF import *
Condiciones(lamela['QT'], size.children[2].children[0].value)

Zona Propiedad Valor Tipo
Entrada Velocidad [m/h] 3.493 Neumann
Salida Presión [KPa] 101.325 Dirichlet

[16]: <App.CFD_DEM.CF.Condiciones at 0x7fa5297587c0>
```

Figura 51: Cambios en el mallado.

Finalmente, se procede a realizar las simulaciones numéricas CFD y CFD-DEM.

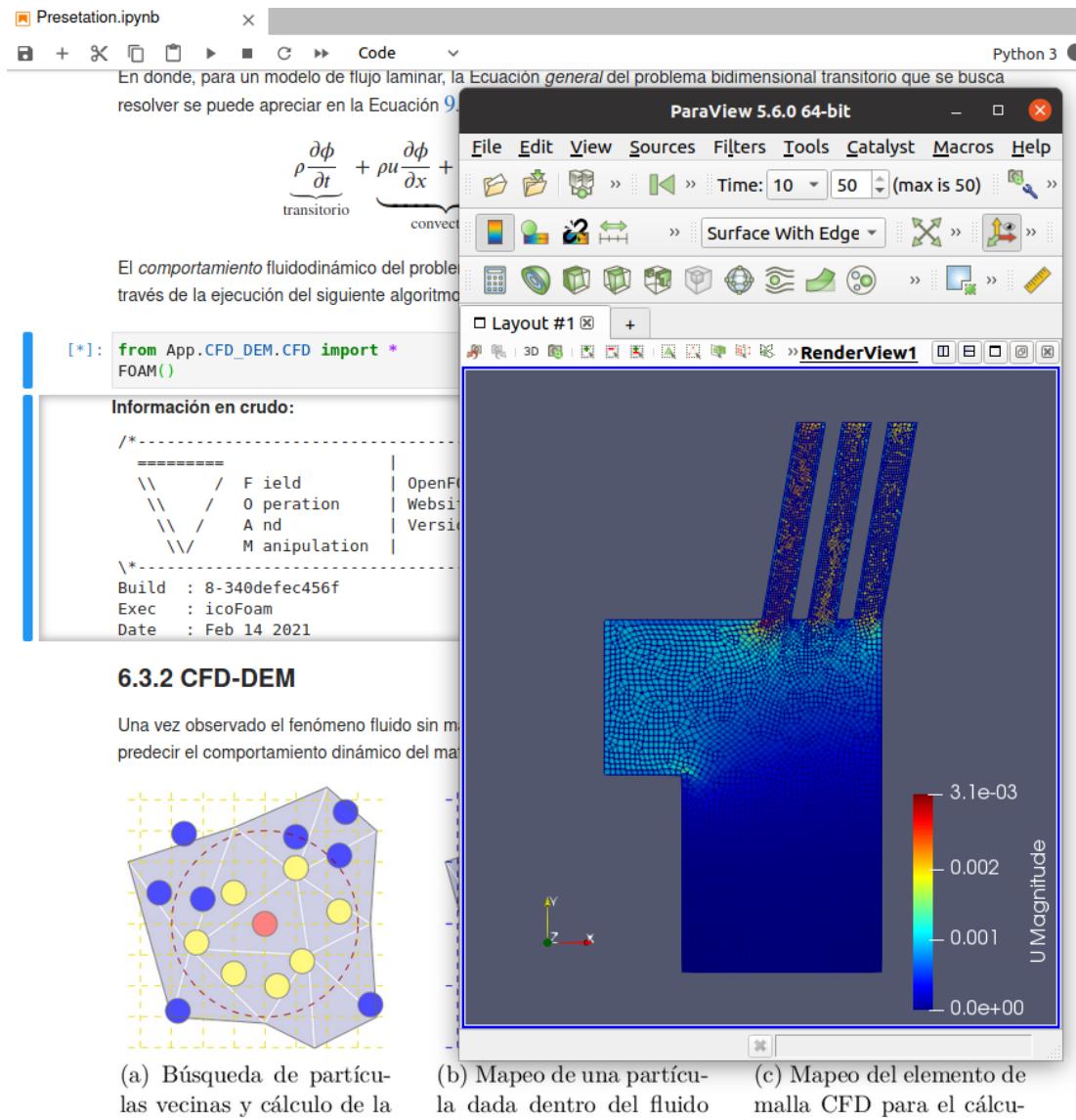


Figura 52: Cambios en el mallado.