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

Juan David Argüello Plata

Universidad Industrial de Santander

Facultado de Ingenierías Físicomecanicas Escuela de Ingeniería Mecánica Maestría en Ingeniería Mecánica 2020

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

Juan David Argüello Plata

Ingeniero Mecánico

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

Omar Armando Gélvez Arocha

Ingeniero Mecánico M.Sc.

Universidad Industrial de Santander

Facultado de Ingenierías Físicomecanicas Escuela de Ingeniería Mecánica Maestría en Ingeniería Mecánica 2020

${\bf \acute{I}ndice}$

In	trod	ucción
1.	Vali	dación del modelo
	1.1.	Descripción del problema
		Desarrollo experimental
		1.2.1. Descripción particular
		1.2.2. Métodos experimentales
	1.3.	Resultados
Ír	ndia	ce de figuras
	1.	Geometría de estudio.
	2.	Esquema del montaje experimental ^[1]
	3.	Esquema del sistema de medición de la interacción partícula fluido ^[1] .
	4.	Comparación entre resultados del diseño experimental desarrollado por Fessler & Eaton y los obtenidos a partir del modelo CFD-DEM
		desarrollado
	5.	Resultados obtenidos a partir del modelo CFD-DEM desarrollado.
	6.	Distribución de las partículas de cobre sobre la geometría
	7.	Comparación directa de los perfiles de velocidad experimentales con
		respecto al del modelo numérico desarrollado.

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.

 $^{^2\}underline{\text{Facultad:}}$ Físicomecanicas.
 $\underline{\text{Escuela:}}$ Ingeniería mecánica.
 $\underline{\text{Director:}}$ 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 development of numerical simulations.

³Master thesis project.

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

Introducción

En el presente documento, se aplica el modelo CFD-DEM desarrollado a un caso experimental existente en la literatura, y que ha sido ampliamente estudiado y empleado como referencia en más de 220 publicaciones, para validarlo como herramienta numérica del proyecto de investigación titulado "Diseño del sistema de elución y filtrado de una planta de extracción".

1. Validación del modelo

Para la validación del modelo CFD-DEM desarrollado, se aplicó el modelo para resolver el problema de Fessler & Eaton^[1], en donde se investigó el efecto de la turbulencia generada por partículas de cobre de $70[\mu m]$ de diámetro sobre un flujo orientado hacia atrás, como se muestra en la Figura 1.

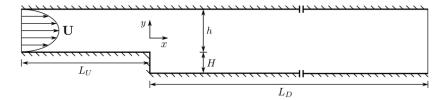


Figura 1: Geometría de estudio.

1.1. Descripción del problema

En 1999, Fessler & Eaton estudiaron el efecto de partículas de vidrio y cobre de distintos tamaños (70, 90 y $150[\mu m]$ 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^[?] y Gore & Crowe^[?] establecieron los cimientos del comportamiento turbulento en la interacción fluido - partícula; mientras que en investigaciones desarrolladas por Kulick, Fessler & Eaton^[?] y Tsuji, Morikawa & Shiomi^[?] 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 1). 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^[?]; 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 $150[\mu m]$ de diámetro y partículas de cobre de $70[\mu m]$; 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 1: Parámetros del flujo.

1.2. 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 2. 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.

1.2.1. Descripción particular

El número de Reynolds que define el movimiento particular está definido por la Ecuación 1.

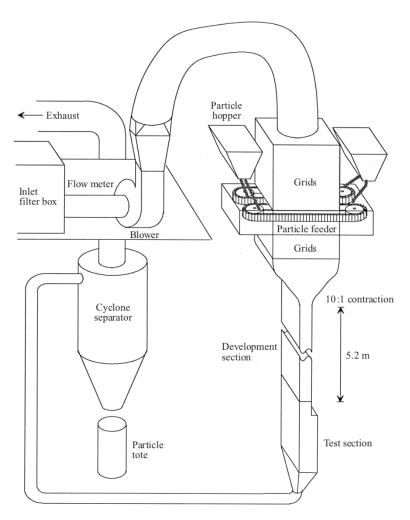


Figura 2: Esquema del montaje experimental^[1].

$$Re_p = \frac{d_p U_{rel}}{\mu} \tag{1}$$

De la Ecuación 1: 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.

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} \tag{2}$$

Para partículas pequeñas con números de Reynolds despreciables, Stokes (1851) demostró que la constante de tiempo particular se define con base en la Ecuación 3.

$$\tau_{p,Stokes} = \frac{(2\rho_p + \rho_f) d_p^2}{36\mu} \tag{3}$$

El coeficiente de arrastre C_D , para números de Reynolds superiores a 700, puede calcularse con base en la Ecuación 4.

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0.15 Re_p^{0.687} \right) \tag{4}$$

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 5.

$$\tau_p = \frac{\tau_{p,stokes}}{1 + 0.15Re_p^{0.687}} \tag{5}$$

La escala de tiempo representativa en el flujo se calculó con base en la Ecuación 6.

$$\tau_f = \frac{5H}{U_0} \tag{6}$$

1.2.2. 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 3. A partir de allí, se estimó un error experimental cercano al 5 %.

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.

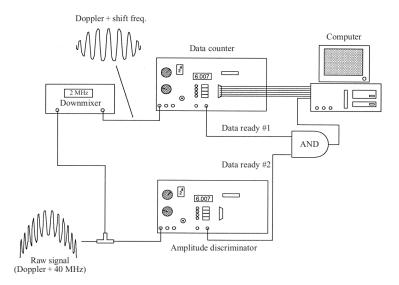


Figura 3: Esquema del sistema de medición de la interacción partícula fluido^[1].

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

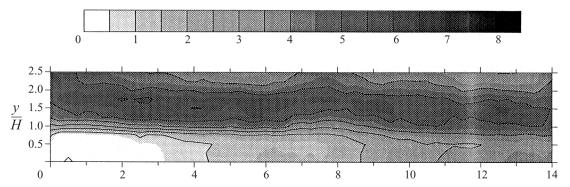
Cuadro 2: Condiciones experimentales.

1.3. Resultados

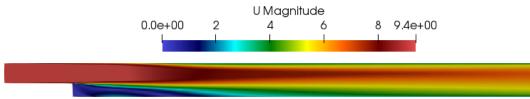
Los perfiles de velocidad media se midieron, de manera experimental, a través de las condiciones especificadas en el Cuadro 2. Pocas partículas fueron identificadas en la zona de recirculación, por lo que no se reportaron datos en la zona x/H=2.5 y 7.

En la Figura 4 a) se muestra el esquema de contorno de la densidad media de partículas de cobre de $70[\mu m]$. La velocidad máxima encontrada en este es, aproximadamente, de $0,2U_0$. En la Figura 4 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.



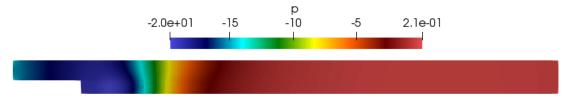
(a) Diagrama de contorno de referencia de la densidad media de partículas de cobre de $70[\mu m]^{[1]}$.



(b) Diagrama de contorno de la distribución de velocidad del sistema con partículas de cobre de $70[\mu m]$ - resultado obtenido al usar el modelo CFD-DEM desarrollado.

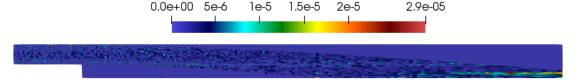
Figura 4: Comparación entre resultados del diseño experimental desarrollado por Fessler & Eaton y los obtenidos a partir del modelo CFD-DEM desarrollado.

Adicional al resultado mostrado en la Figura $4 \ b$), el modelo CFD-DEM desarrollado también permite apreciar los resultados mostrados en la Figura 5.



(a) Diagrama de contorno de la distribución de la presión dentro del volumen de control.

kinematicCloudTheta



(b) Diagrama de contorno de la variación de la fracción de vacío en el volumen de control

Figura 5: 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 6.

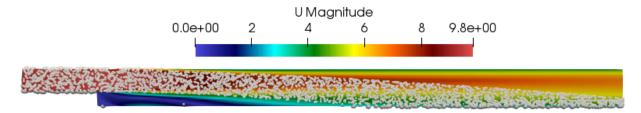


Figura 6: Distribución de las partículas de cobre sobre la geometría.

En la Figura 7 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.

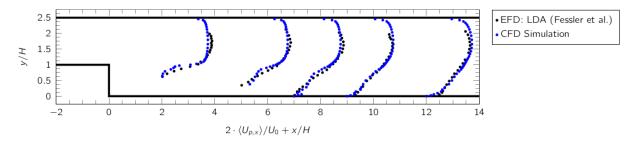


Figura 7: Comparación directa de los perfiles de velocidad experimentales con respecto al del modelo numérico desarrollado.

En la Figura 7, se puede apreciar una variación de hasta el 0,6 % entre los resultados experimentales con respecto a los obtenidos por el modelo numérico, reafirmando la exactitud de los resultados del modelo CFD-DEM; permitiendo así validar el modelo desarrollado en el capítulo ??.

REFERENCIAS REFERENCIAS

Referencias

[1] 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/abs/turbulence-modification-by-particles-in-a-backwardfacing-step-flow/7CCEE8B4F7C6A3003434D4106D7D1E24