

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. Estado del arte	13
1.1. Método MSPD	13
1.1.1. Factores a considerar en la extracción MSPD	14
1.1.2. Extracción en fase sólida	15
1.2. Dinámica de Fluidos Computacional	15
1.2.1. Análisis unidimensional estacionario - 1D	17
1.2.2. <i>Solvers</i>	19
1.2.3. Metodologías de verificación y validación	19
1.2.4. Análisis bidimensional estacionario - 2D	20
1.3. Método de Elementos Discretos	21
1.3.1. Detección de una colisión	22
1.4. Método CFD-DEM	23
1.4.1. Fase del solvente	24
1.4.2. Enfoque <i>Euler - Lagrange</i>	25
1.4.2.1. Planteamiento numérico	26
1.5. Sedimentación	27
1.5.1. Sedimentadores convencionales	28
1.5.2. Sedimentador de placas inclinadas	29
1.5.2.1. Desarrollo teórico	29
1.5.2.2. Modelo simplificado	32
2. Metodología	41
2.1. Recopilación de datos	41
2.2. Propiedades del fluido	42
2.3. Velocidad máxima de sedimentación	43
2.4. Geometría de lamelas	43
2.5. Ancho del sedimentador	44
2.6. Cálculo de Re y v_0	44
2.7. Tubería de entrada y tolva de sedimentos	44
2.8. CAD y mallado de geometría	44
2.9. Checkeo de malla	44
2.10. Condiciones de frontera	45
2.11. Simulación CFD	46
2.12. Error de la simulación	46
2.13. Simulación CFD-DEM	46
2.14. Software de diseño	47

2.14.1. Frontend	48
2.14.2. Backend	50
2.14.2.1. Diseño funcional teórico	52
2.14.2.2. Simulaciones numéricas	53
3. Resultados	54
3.1. Propiedades del fluido	54
3.2. Velocidad máxima de sedimentación	54
3.3. Geometría de una lamela	54
4. Modelo CFD-DEM	55
4.1. Geometría	55
4.2. Mallado	56
4.3. Desarrollo de la simulación	59
4.3.1. CFD	59
4.3.1.1. Resultados	60
4.3.1.2. Análisis de resultados	60
4.3.2. Método CFD-DEM	62
4.3.2.1. Resultados	62
4.3.2.2. Análisis de resultados	64
5. Validación del modelo	66
5.1. Descripción del problema	66
5.2. Desarrollo experimental	67
5.2.1. Descripción particular	67
5.2.2. Métodos experimentales	69
5.3. Resultados	70
Conclusiones	73

Índice de figuras

1. Extracción.	8
2. Proceso productivo de la planta de extracción.	10
3. Método MSPD ^[1]	14
4. Discretización del dominio (malla cartesiana).	17
5. Tipos de mallas.	17
6. Problema unidimensional.	18
7. Método de validación simple.	20
8. Discretización dominio bidimensional.	21

9.	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)	21
10.	Detección de colisión entre partículas.	23
11.	Esquema de la aproximación por malla dual para la búsqueda de partículas vecinas en un fluido.	24
12.	Interacción dinámica entre partículas.	26
13.	Esquema de un sedimentador de placas inclinadas ^[2]	29
14.	Análisis de una lamela.	30
15.	Dinámica de la partícula.	32
16.	Cinemática de una partícula sólida.	34
17.	Esquema de la metodología de diseño del presente trabajo.	41
18.	Metodología de cálculo de la velocidad de sedimentación máxima.	43
19.	Zona de generación de partículas en la tubería de entrada.	45
20.	Condiciones de frontera.	45
21.	Diagrama de flujo del solucionador <code>pimpleFoam</code>	47
22.	Interfaz gráfica de ejemplo desarrollada con Jupyter. Fuente: https://jupyterlab.readthedocs.io/en/stable/getting_started/overview.html	
23.	Parte de la interfaz gráfica desarrollada para la automatización del modelo CFD-DEM.	50
24.	Sección de mallado automático del software desarrollado mediante <code>gmsh</code>	51
25.	Árbol de directorios.	52
26.	Vista en corte de la geometría del panel de lamelas.	56
27.	Mallado de la geometría.	57
28.	Diagrama de flujo del solucionador <code>pimpleFoam</code>	60
29.	Diagrama de contorno de la distribución de velocidades del sistema de sedimentación.	61
30.	Diagrama de contorno de la distribución de presiones del sistema de sedimentación.	61
31.	Diagrama de contorno de velocidades del sistema.	63
32.	Diagrama de contorno de presiones del sistema de separación de sustancias.	63
33.	Distribución de partículas de arena sobre el volumen de control durante el segundo 28 de la simulación.	64
34.	Monitoreo de residuales en la simulación CFD-DEM.	65
35.	Geometría de estudio.	66
36.	Esquema del montaje experimental ^[3]	68
37.	Esquema del sistema de medición de la interacción partícula fluido ^[3]	69
38.	Comparación entre resultados del diseño experimental desarrollado por Fessler & Eaton y los obtenidos a partir del modelo CFD-DEM desarrollado.	71
39.	Resultados obtenidos a partir del modelo CFD-DEM desarrollado.	71

40.	Distribución de las partículas de cobre sobre la geometría.	72
41.	Comparación directa de los perfiles de velocidad experimentales con respecto al del modelo numérico desarrollado.	72

Resumen

Título:	Diseño del sistema de elución y filtrado de una planta de extracción ¹
Autor:	Juan David Argüello Plata ²
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^[4]; razones por las que se han desarrollado estudios de escalabilidad en busca de la industrialización^[5, 6, 7]. 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^[8], separadores de ciclón^[9] y para el estudio de retención de partículas en medios filtrantes^[10], por citar algunos ejemplos. Se han desarrollado estudios experimentales que corroboran la efectividad y viabilidad de las simulaciones numéricas que emplean CFD-DEM^[8, 11].

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**.

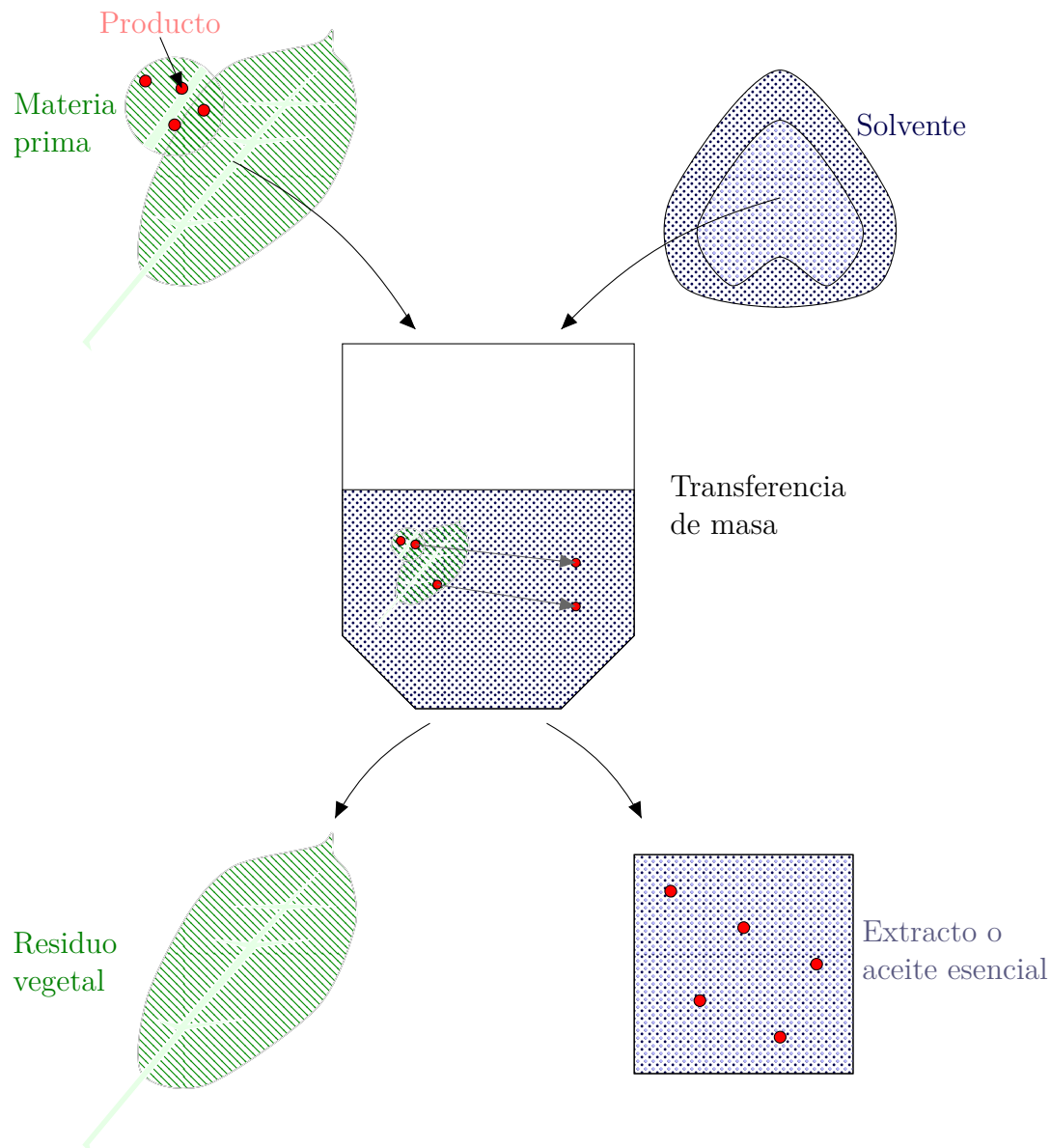


Figura 1: Extracción.

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. Pertenecen a diferentes clases de sustancias químicas (fenoles y terpenos, principalmente)^[12]. 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)^[13] o gaseoso (destilación por arrastre con vapor)^[14]. 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^[15], por lo que representan una interesante oportunidad de innovación en la elaboración de productos farmacéuticos de alto impacto en el mundo^[16], 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 suplir 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^[7]. 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).

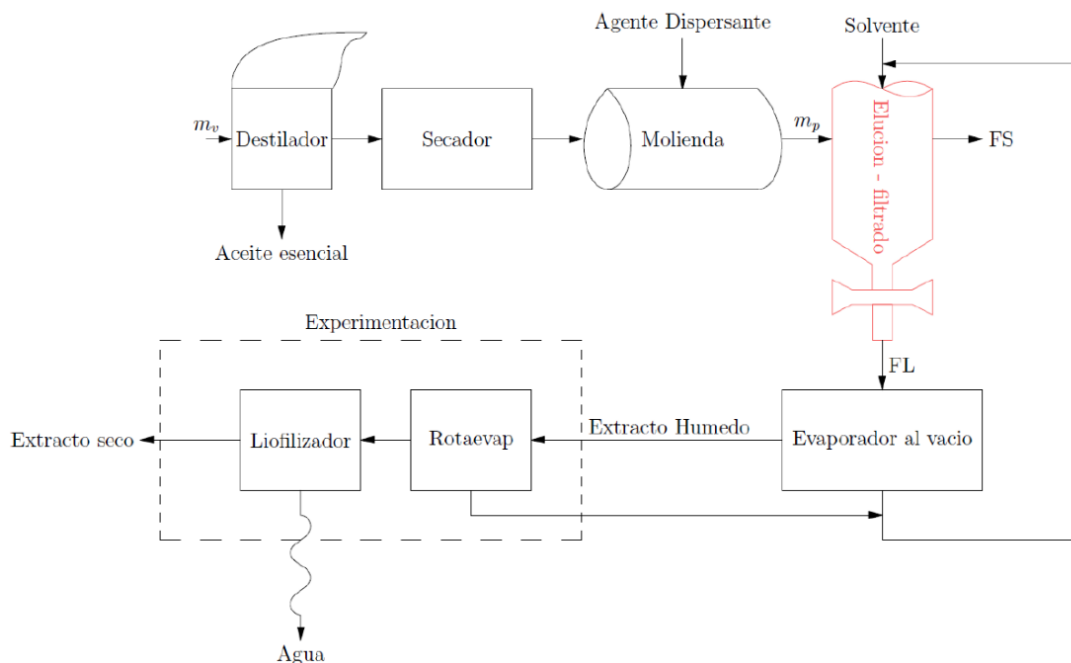


Figura 2: Proceso productivo de la planta de extracción.

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 \rightarrow 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 4) 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
1	Introducción	Capítulo Explica brevemente el caso de estudio y la razón por la que se desarrolló el presente trabajo.
2	Método MSPD	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.
3	CFD	Capítulos en donde se establecen las bases teóricas para el desarrollo de las simulaciones numéricas.
4	DEM	
5	CFD-DEM	
6	Sedimentación	Capítulo en donde se exponen las bases teóricas de la sedimentación.
7	Diseño teórico	Propone una geometría inicial de estudio para el desarrollo de la metodología de diseño con base en simulaciones numéricas.
8	Modelo CFD-DEM	Desarrollo de la metodología de diseño basada en el método CFD-DEM. Permite predecir el comportamiento fluido-partícula del sistema.
9	Implementación del modelo	Bases del desarrollo de la metodología de diseño automático mediante herramientas de código abierto.
10	Validación del modelo	Uso del modelo CFD-DEM desarrollado en el capítulo 8 para la solución de un problema reportado en la literatura que emplea experimentación.

Cuadro 1: Organización de la tesis.

1. Estado del arte

El marco teórico se compone de los siguientes temas:

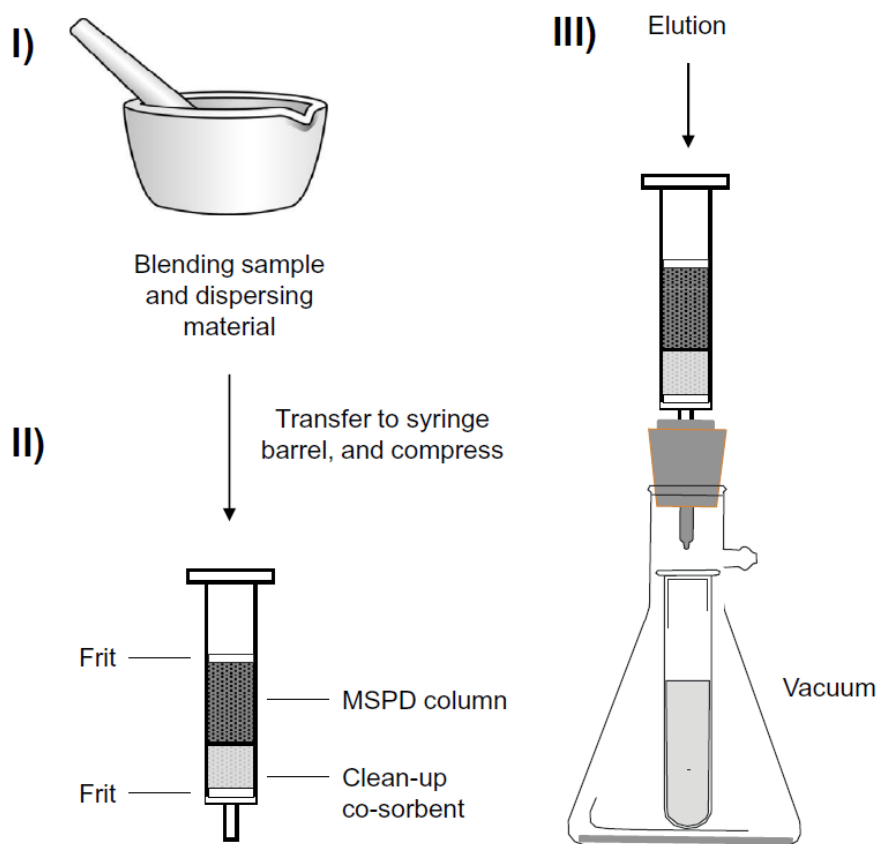
- Método MSPD: método ampliamente usado a escala de laboratorio para la extracción de analitos de interés de extractos procedentes de muestras biológicas. La planta de extracción desarrollada fue diseñada con base en este método experimental.
- Dinámica de Fluidos Computacional: herramienta computacional 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 MSPD

El método de dispersión de la matriz en fase sólida (MSPD, por sus siglas en inglés) ha sido ampliamente utilizado para el estudio de muestras biológicas. Existen más de 250 publicaciones en las que se emplea este método extractivo para el análisis de extractos de distintas naturalezas ^[4]. 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) requiere de grandes tiempos de elución y altos gradientes de presión para obtener un flujo adecuado.
2. *Agente dispersante:* el uso de silicatos infravalorados, como la arena de río, para la maceración de muestras presenta resultados diferentes a los reportados con agentes dispersantes como el C_{18} o el C_8 . A pesar de que el mismo principio de disrupción de la matriz se conserva, debido a la abrasión, es probable que se de una interacción química no deseada entre silicatos infravalorados y algunos de los flavonoides del extracto.
3. *Relación másica:* la mejor relación másica reportada en la literatura frecuente ser una relación 1 a 4 ^[4], 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 $60\text{ }^{\circ}\text{C}$ ^[17].

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^[4]:

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

1.2. 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 involucren: flujo de fluidos y transferencia de calor y masa.

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

- Ecuación de continuidad:

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

- Ecuaciones de momento:

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

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

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

- Ecuación de energía:

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

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

- *Presión - velocidad*: no hay una ecuación específica para definir la presión. Para flujos incompresibles, la presión es el campo que hace que la velocidad logre cumplir la ley de la conservación de la masa^[18].
- *Temperatura - velocidad*: sólo está presente durante la convección natural; la convección mixta o forzada son dependientes de las propiedades físicas.

Los métodos numéricos se enfocan tanto en el proceso de discretización como en el método de solución del grupo de ecuaciones algebraicas obtenidas. La **precisión** de una solución numérica está arraigada al método de discretización^[19].

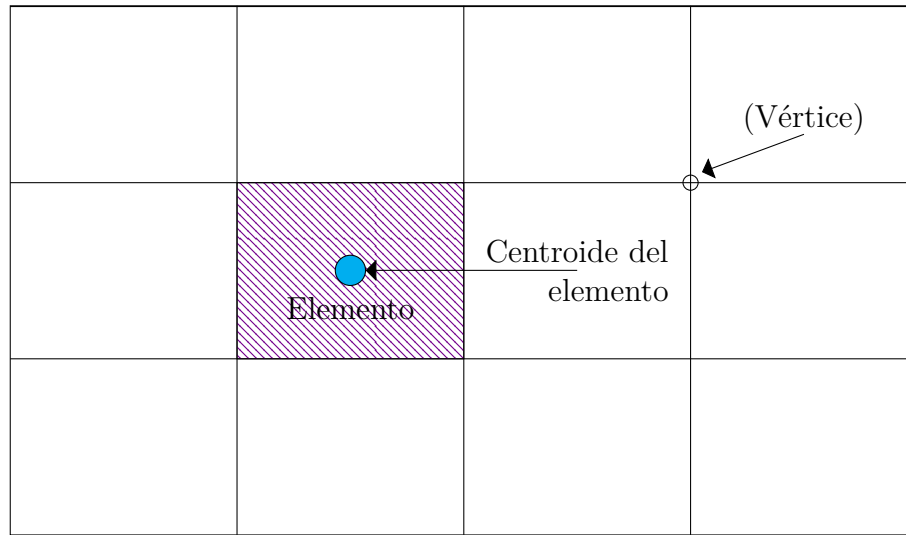


Figura 4: Discretización del dominio (malla cartesiana).

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

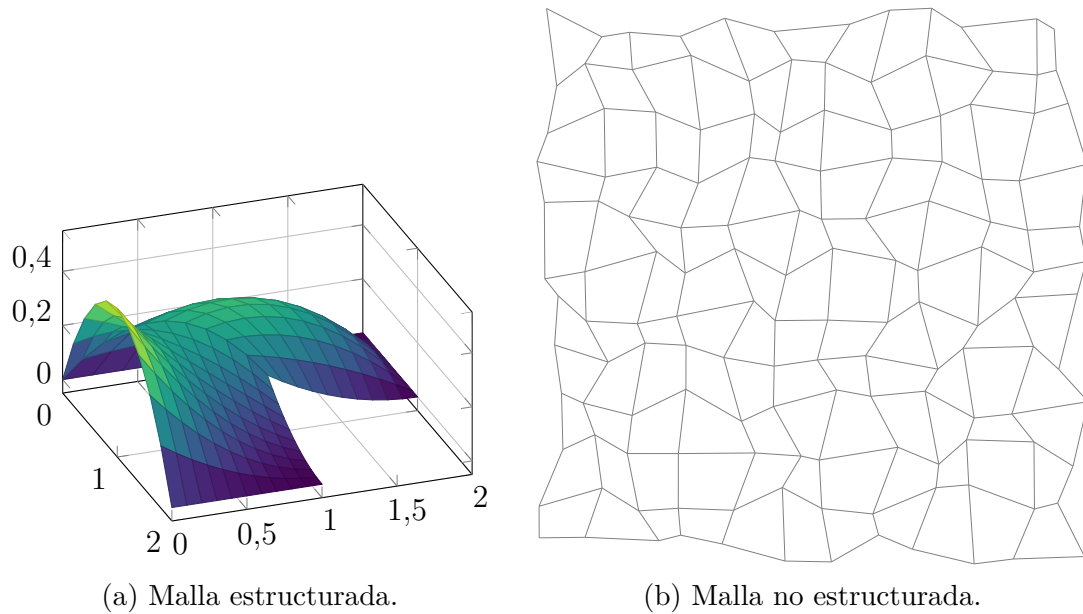


Figura 5: Tipos de mallas.

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. Análisis unidimensional estacionario - 1D

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

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

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

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

Resolviendo la Ecuación 2 para $\phi = T$ e integrando con respecto al elemento P (ver Figura 6), se obtiene lo siguiente:

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

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

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

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

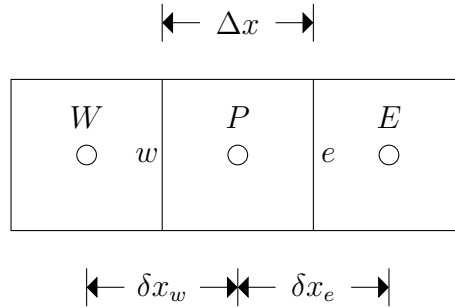


Figura 6: Problema unidimensional.

Agrupando los términos, se obtiene:

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

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

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

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

Cuadro 2: Condiciones de frontera - problema unidimensional.

1.2.2. Solvers

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

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

1.2.3. Metodologías de verificación y validación

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

- *Simple*: estudio de la evolución global o local de una variable debido al refinamiento de malla, como se aprecia en la Figura 7.
- *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.

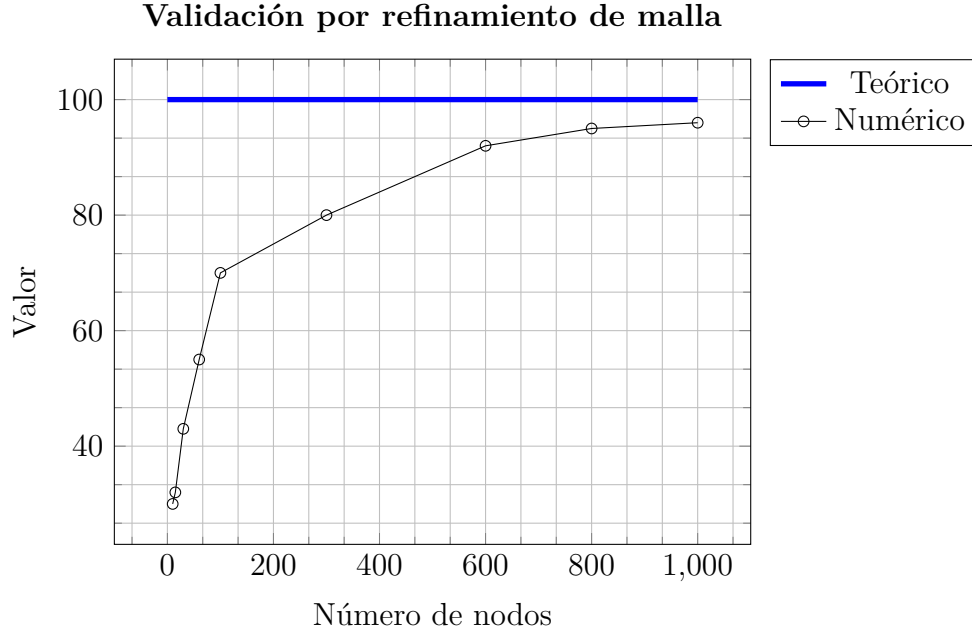


Figura 7: Método de validación simple.

1.2.4. Análisis bidimensional estacionario - 2D

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

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

La discretización del dominio se realiza acorde a la Figura 8.

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

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

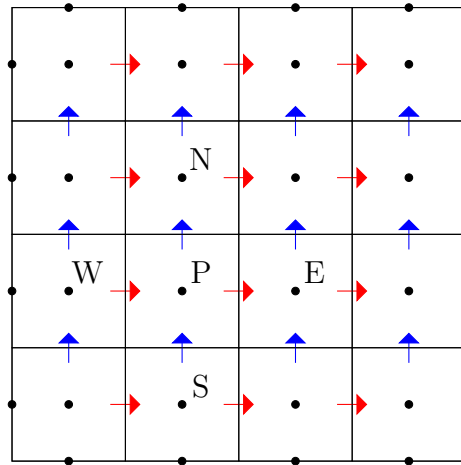


Figura 8: Discretización dominio bidimensional.

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.

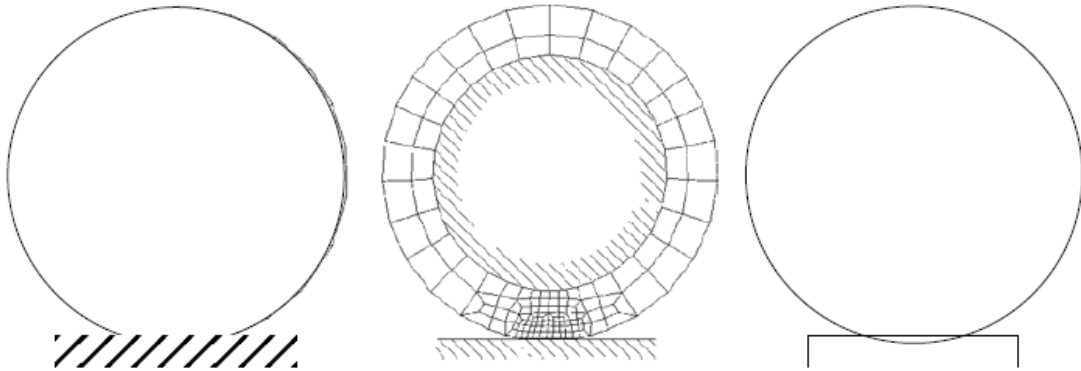


Figura 9: Comparación entre metodologías de análisis de partículas para una esfera suave deformada en un plano: situación física real (izquierda), modelo analizado con el método de elementos finitos (centro) y modelo con el método de elementos discretos (derecha)

El principio de este método es el de computar las fuerzas proporcionales a la superposición geométrica de las partículas empleadas. Para partículas esféricas,

o circulares, las fuerzas involucradas son de tipo central; a diferencia de otras configuraciones geométricas, debido a que deben caracterizar las fuerzas en la forma ‘débil’ y ‘fuerte’.

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

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

Para interacciones ya existentes:

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

1.3.1. Detección de una colición

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

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

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

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

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

2. Al filtrar las colisiones imposibles mediante la Ecuación 9, algoritmos de detección de mayor costo computacional pueden ser implementados al filtrar falsas parejas de colisión restantes, como se observa en la Figura 10.

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

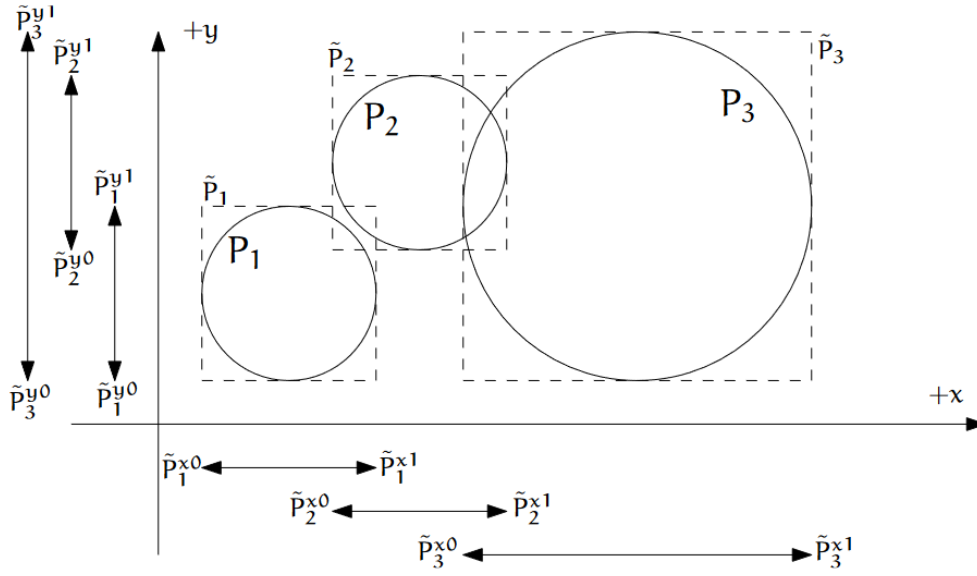


Figura 10: Detección de colisión entre partículas.

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).

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

simulación en CFD-DEM usando MPI para el intercambio de información entre 16 CPUs, reportando el comportamiento fluidodinámico de 4.5 millones de partículas en un medio gaseoso; empleando el método unidimensional de descomposición de dominio.

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 11, se crean dos mallas alineadas de búsqueda: la malla de búsqueda de partículas (amarilla) y la malla de búsqueda de fluido (azul).

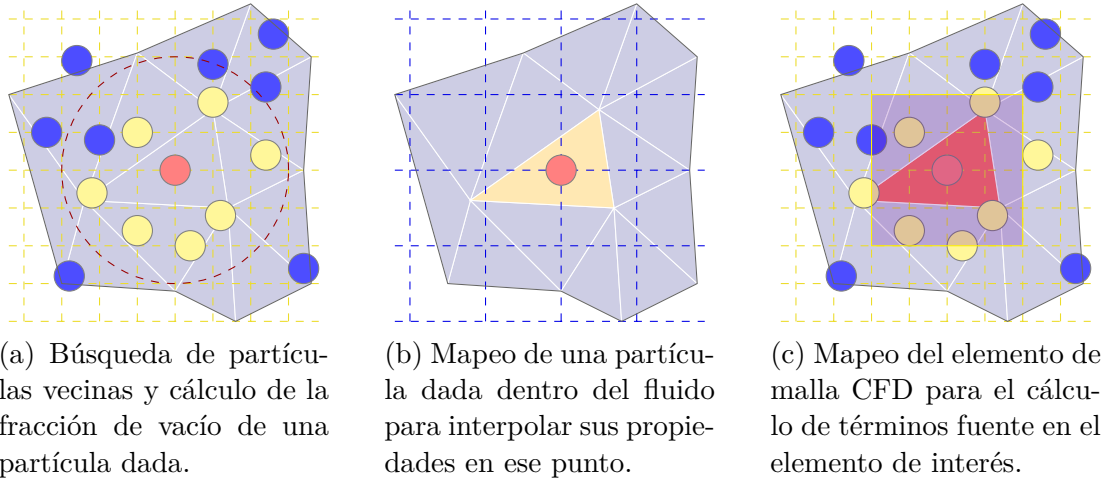


Figura 11: Esquema de la aproximación por malla dual para la búsqueda de partículas vecinas en un fluido.

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 1.2.4) y el cálculo de fuerzas de fluido, entre otras.

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

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

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

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*^[20]. Este fenómeno se produce por el incremento en el área efectiva de sedimentación debido a la presencia de placas inclinadas^[21]. Acrivos ^[22] 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 retardadora debido a las limitantes instrumentales y técnicas de medición^[21]. Los modelos numéricos basados en CFD han demostrado ser una herramienta poderosa y promisoría 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.*^[23] 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* ^[24] 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^[25]. Se consideraron los efectos e interacciones entre partícula-partícula (ver Figura 12), partícula-fluido y partícula-muro. Las ecuaciones gobernantes y la metodología numérica empleada se describe brevemente a continuación.

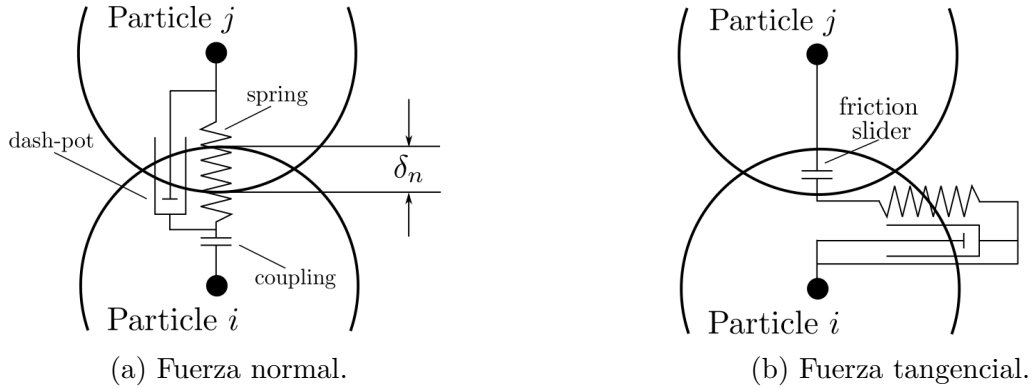


Figura 12: Interacción dinámica entre partículas.

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 traslación y rotación de la partícula i está dada por las Ecuaciones 12 y 13.

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = F_{c,i} + F_{f,i} + F_{g,i} \quad (12)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = T_{c,i} + T_{r,i} \quad (13)$$

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 14.

$$T_{r,i} = - \sum_{j=0}^{N_{pc}} \mu_{rol} |F_{cn,ij}| \frac{\omega_{ij}}{|\omega_{ij}|} r_i \quad (14)$$

Dónde ω_{ij} es la velocidad angular relativa entre las partículas i y j ; y está definida a través de la Ecuación 15.

$$\omega_{ij} = \frac{\omega_i r_i + \omega_j r_j}{r_i + r_j} \quad (15)$$

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 16.

$$F_{f,i} = -V_i \nabla p + V_i (\nabla \cdot \tau_f) + \epsilon F_{d,i} \quad (16)$$

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

$$\tau_f = \mu_L \left[(\nabla u_L) + (\nabla u_L)^{-1} \right] + \left(\lambda - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot u_L) \bar{I} \quad (17)$$

La fuerza de arrastre $F_{d,i}$ del fluido, de la Ecuación 16, se resuelve a una escala longitudinal mayor que el tamaño de la partícula y está dada por la siguiente relación matemática:

$$F_{d,i} = \frac{V_i}{1 - \epsilon} \beta (u_L - v_i) \quad (18)$$

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]^[2]⁶.

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]^[26].

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^[2] 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 $20[NTU]$ ^[2]. 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:

- Número mínimo de tanques: 4
- Profundidad 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 $200[NTU]$ ^[2] de turbidez. Normalmente tienen una estructura rectangular o circular y son ampliamente usados para la limpieza de agua marina.

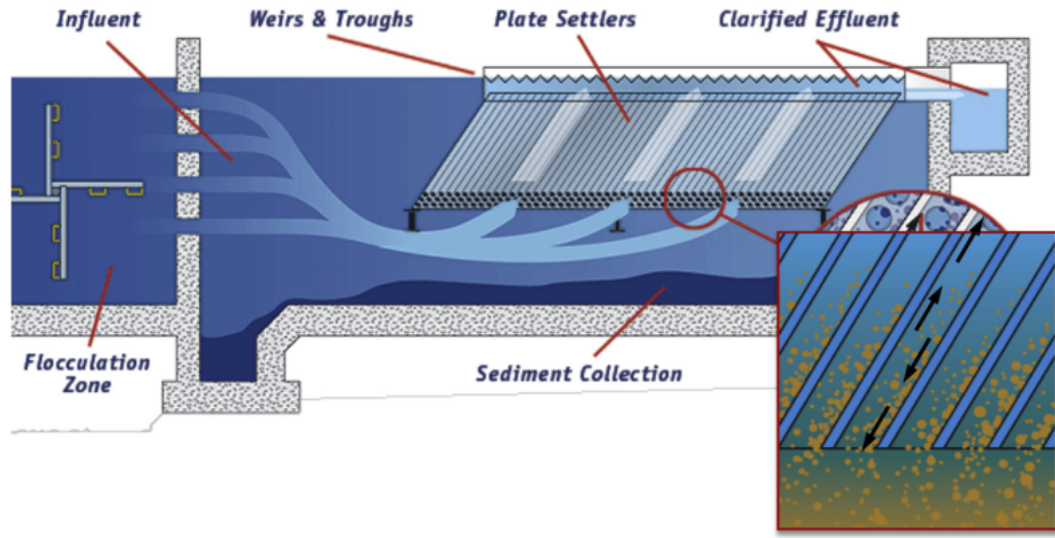


Figura 13: Esquema de un sedimentador de placas inclinadas^[2].

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

- Número mínimo de tanques: 2
- Profundidad 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 14 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 .

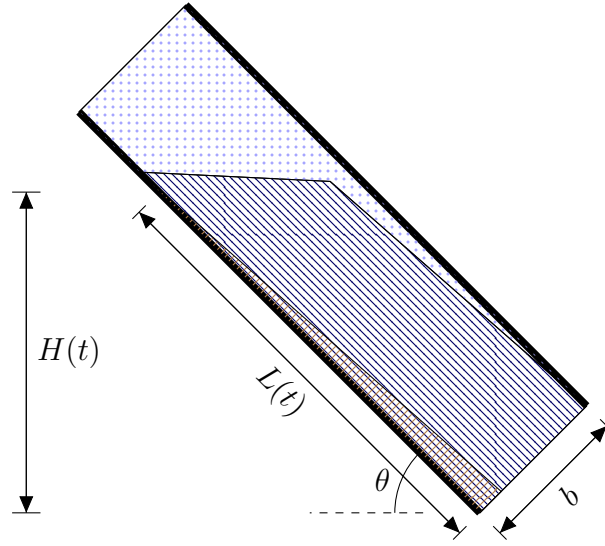


Figura 14: Análisis de una lamela.

Acrivos^[22] 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 19.

$$\tilde{\rho}(\phi) = \tilde{\rho}_f \gamma(\phi) \quad (19)$$

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

$$\tilde{\mu}(\phi) = \tilde{\mu}_f \lambda(\phi) \quad (20)$$

De las Ecuaciones 19 y 20: 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 21.

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\lambda(\phi) \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \frac{9}{2} (\phi - \phi_s) \sin \theta = R_p \gamma(\phi) \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (21)$$

Siendo:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (22)$$

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 21 es despreciable *dentro* de la capa de sedimentos (ver Figura 14). 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^[22] explica que es necesario analizar, en adición a la Ecuación de momento 21, la Ecuación de balance estable de partículas.

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} (N_g) + \frac{\partial}{\partial y} (N_d) = 0 \quad (23)$$

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:

$$v = 0 \quad (24)$$

$$\left[\beta(\phi) \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\alpha(\phi)}{\lambda(\phi)} \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda(\phi) \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + \phi f(\phi) \cos \theta = 0 \quad (25)$$

La Ecuación 25 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:

$$u = \zeta (\partial u / \partial y)_{y=0} \text{ en } y = 0 \quad (26)$$

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^[22] 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 15.

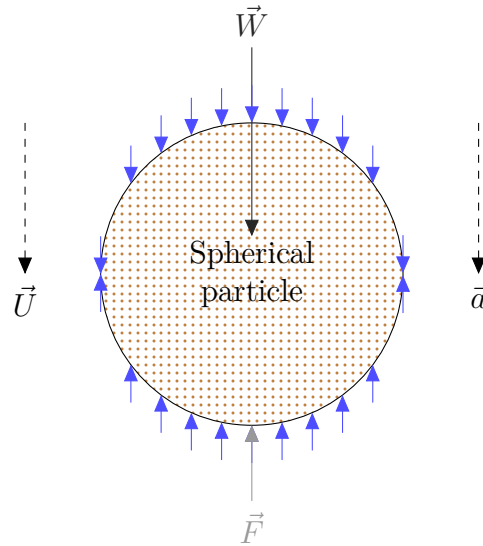


Figura 15: Dinámica de la partícula.

De la Figura 15, \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^[27] indica que la fuerza de arrastre se puede calcular con base en la Ecuación 27.

$$F = \frac{C A_n \rho_f U^2}{2} \quad (27)$$

De la Ecuación 27, 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 28.

$$W = V (\rho_s - \rho_f) g \quad (28)$$

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:

$$Re_s = \frac{d_p U}{\mu} \quad (29)$$

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:

$$C = \frac{24}{Re_s} + \frac{3}{Re_s^{1/2}} + 0,34 \quad (30)$$

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 28 y 27:

$$U_{max} = \sqrt{\frac{2V (\rho_s - \rho_f) g}{C A_n \rho_f}} \quad (31)$$

La Ecuación 31 se conoce como la Ley de Stokes y ha sido comprobada de manera experimental^[27].

1.5.2.2.2. 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 ”^[27].

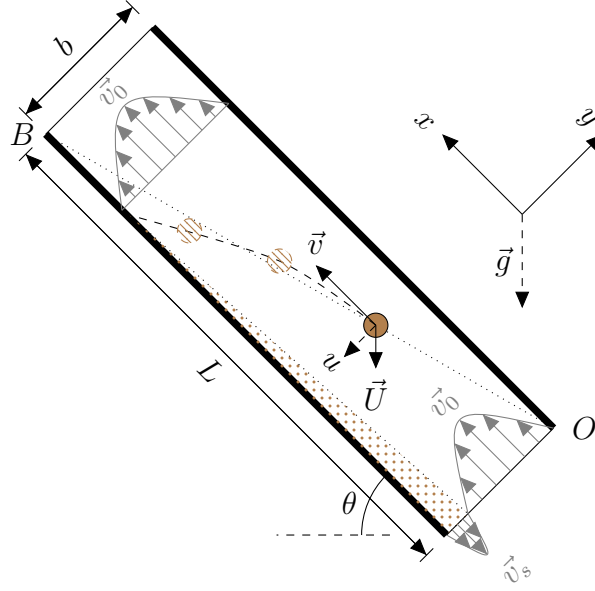


Figura 16: Cinemática de una partícula sólida.

De la Figura 16, \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 máximo \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:

$$\frac{v}{u} = \frac{L}{b} \quad (32)$$

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:

$$v = v_0 - U \sin \theta = \frac{Q_l}{bW} - U \sin \theta \quad (33)$$

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^- .

$$u = U \cos \theta \quad (34)$$

Relacionando las Ecuaciones 32, 33 y 34 se obtiene:

$$U = \frac{Q_l}{\left(\frac{L}{b} + \tan \theta\right) bW \cos \theta} \quad (35)$$

Si el ángulo de inclinación es 0° , la Ecuación 35 se reduce a lo siguiente:

$$U = \frac{Q_l}{LW} = \frac{Q_l}{A} = C_s \quad (36)$$

La Ecuación 36 se conoce en la literatura^[27, 28] 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”^[27].

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 el medio circundante gracias al comportamiento laminar del flujo. Es debido a ello que la Ecuación 31 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^[29] 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 16), se obtiene la siguiente ecuación diferencial:

$$v = \frac{dx}{dt}; u = \frac{dy}{dt} \quad (37)$$

Combinando las Ecuaciones 33, 34 y 37; se tiene:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{-U \cos \theta}{v(y) - U \sin \theta} \quad (38)$$

Al integrar la Ecuación 38, se obtiene:

$$\int v(y) dy - U y \sin \theta + U x \cos \theta = C_0 \quad (39)$$

Para manejar un enfoque *adimensional*, se subdivide la Ecuación 39 por $v_0 b$; siendo v_0 la velocidad de flujo promedio y b la profundidad del flujo.

$$\int \frac{v(y)}{v_0} dY - \frac{U}{v_0} Y \sin \theta + \frac{U}{v_0} X \cos \theta = C_1 \quad (40)$$

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^[30] estipula que el perfil de velocidades de un flujo laminar, que pasa a través de placas paralelas, presenta el comportamiento descrito en la Ecuación 41.

$$\frac{v(y)}{v_0} = 6(Y - Y^2) \quad (41)$$

Relacionando las Ecuaciones 40 y 41, se tiene:

$$3Y^2 - 2Y^3 - \frac{U}{v_0} Y \sin \theta + \frac{U}{v_0} X \cos \theta = C_1 \quad (42)$$

La Ecuación 42 define la trayectoria de partículas suspendidas en un flujo laminar dentro de dos placas paralelas. Para el punto B (ver Figura 16), punto donde las partículas tienden a culminar su trayectoria, se tiene:

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

$$Y = 0$$

Reemplazando en la Ecuación 42, se tiene:

$$C_1 = \frac{U}{v_0} \frac{L}{b} \cos \theta \quad (43)$$

Reemplazando la Ecuación 43 en la Ecuación 42, se obtiene:

$$\boxed{3Y^2 - 2Y^3 - \frac{U}{v_0} Y \sin \theta + \frac{U}{v_0} \left(X - \frac{L}{b}\right) \cos \theta = 0} \quad (44)$$

La Ecuación 44 está definida en la literatura^[29, 27] como la “*ecuación de la familia de trayectorias de las partículas*”. Dentro de esta familia de trayectorias existe una trayectoria límite en O (Figura 16) que representa la *trayectoria limitante* que define la velocidad crítica de asentamiento (U_c). Romero^[27] 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 44, se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{U_c}{v_0} \left(\sin \theta + \frac{L}{b} \cos \theta \right) &= 1 \rightarrow \\ \rightarrow U_c &= \frac{v_0}{\sin \theta + \frac{L}{b} \cos \theta} \end{aligned} \quad (45)$$

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^[29] 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 13, 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^[31]. 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

14). 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^[32].

Los parámetros más empleados en el diseño de sedimentadores son la *carga superficial* y el *área superficial*^[27]. En el Cuadro 3, se muestran los criterios de diseño sugeridos por Romero^[27] y Pérez^[28].

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

Cuadro 3: Criterios de diseño.

Para el desarrollo del diseño, se debe conocer el caudal de entrada, la relación másica 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 46.

$$t_p = \frac{L}{v_0} \quad (46)$$

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 35 para relacionar la carga superficial con todas las dimensiones del panel de lamelas:

$$U = \frac{Q}{N \left(\frac{L}{b} + \tan \theta \right) bW \cos \theta} \quad (47)$$

De la Ecuación 47, 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 3, 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 ??^[30].

$$Re = \frac{v_0 b}{\mu} \quad (48)$$

De la Ecuación 48: 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:

$$v_0 = \frac{Q}{N b W} \quad (49)$$

La eficiencia del sistema de sedimentación se estima como la relación entre la velocidad crítica de sedimentación (Ecuación 45) y la velocidad de asentamiento máxima (Ecuación 31).

Romero^[27] estipula que el número de placas del sistema de sedimentación se calcula con base en la siguiente expresión:

$$N = \frac{L_s \sin \theta + d}{d + e} \quad (50)$$

Dónde: L_s es la 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:

$$D_e = \frac{4Q}{Re \pi \mu} \quad (51)$$

De la Ecuación 51: 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]^[27] 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 52^[27].

$$S = \frac{A}{4850 t} \sqrt{d} \quad (52)$$

De la Ecuación 52: 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 se calcula de la siguiente forma:

$$Q = 0,61 S \sqrt{2 g d} \quad (53)$$

Para evitar el asentamiento de lodos en la tubería de desagüe, la velocidad de flujo debe ser mayor de $1,4[m/s]$ ^[27].

2. Metodología

En la Figura 17 se muestra la metodología empleada para el diseño del sistema de elución y filtrado de la planta de extracción.

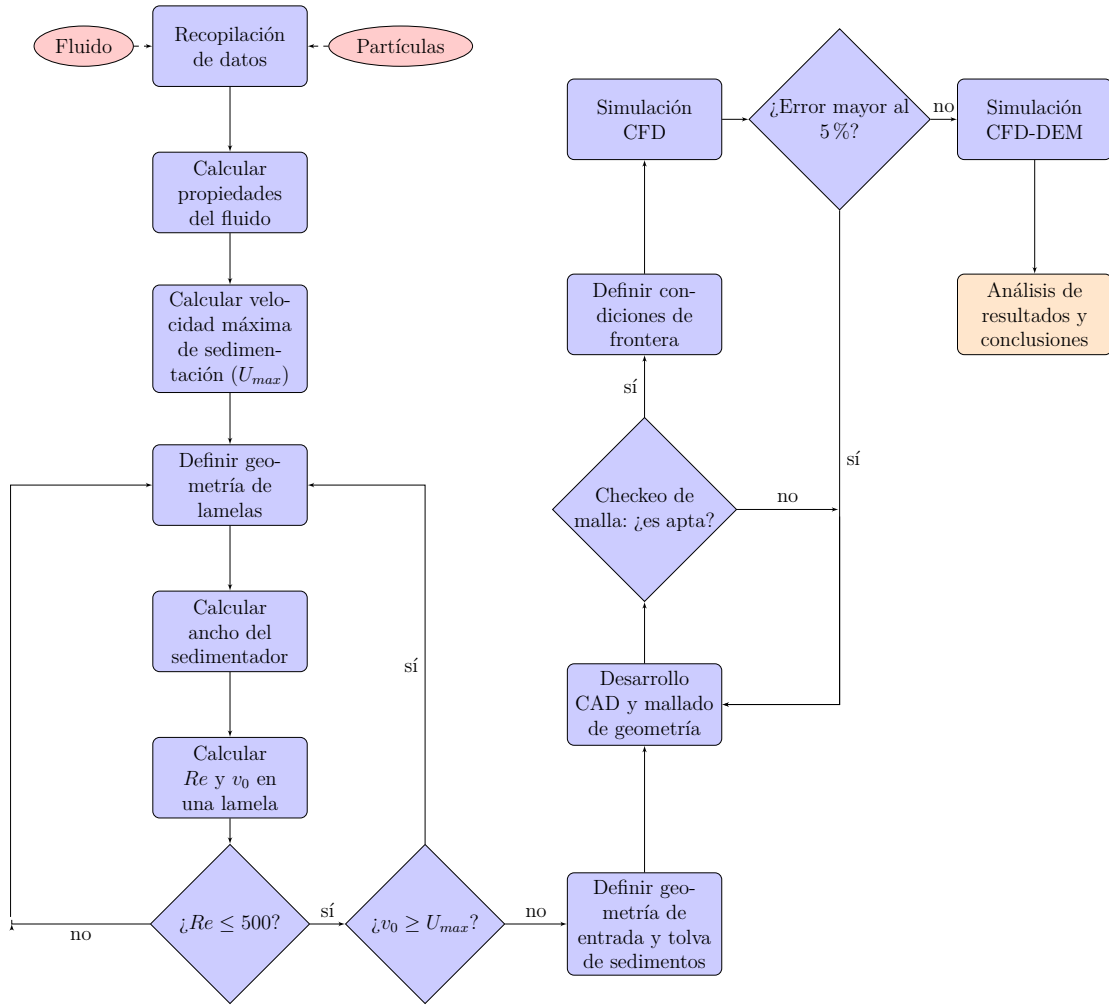


Figura 17: Esquema de la metodología de diseño del presente trabajo.

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 planteamiento numérico mostrado en las secciones 1.2 y 1.4.

2.1. Recopilación de datos

Los criterios de diseño del sistema de sedimentación de placas inclinadas se pueden apreciar en los Cuadros 3 y 4.

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 $[\mu m]$	250
Tipo de solvente	Mezcla agua - etanol (50 %)
Temperatura del proceso $[^{\circ}C]$	28
Tiempo del proceso $[h]$	1

Cuadro 4: 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 54, 55, 56 y 57.

$$\rho_{H_2O} = 1,00048675 \cdot 10^3 - 2,23243162 \cdot 10^{-2} * T - 4,60579811 \cdot 10^{-3} * T^2 \equiv [kg/m^3] \quad (54)$$

$$\mu_{H_2O} = 1,63190407 \cdot 10^{-6} - 3,73507082 \cdot 10^{-8} * T + 3,20602877 \cdot 10^{-10} * T^2 \equiv [m^2/s] \quad (55)$$

$$\rho_{et} = 8,06320738 \cdot 10^2 - 8,32481402 \cdot 10^{-1} * T - 5,78205398 \cdot 10^{-4} * T^2 \equiv [kg/m^3] \quad (56)$$

$$\mu_{et} = 2,11316694 \cdot 10^{-6} - 3,69955667 \cdot 10^{-8} * T + 2,57275555 \cdot 10^{-10} * T^2 \equiv [m^2/s] \quad (57)$$

Una vez conocidas las propiedades individuales, se calcula la propiedad de la mezcla a través de la Ecuación 58.

$$\lambda_f = (1 - x) \lambda_{H_2O} + x \lambda_{et} \quad (58)$$

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 29, 30 y 31. La lógica detrás de dicha metodología se evidencia en la Figura 18.

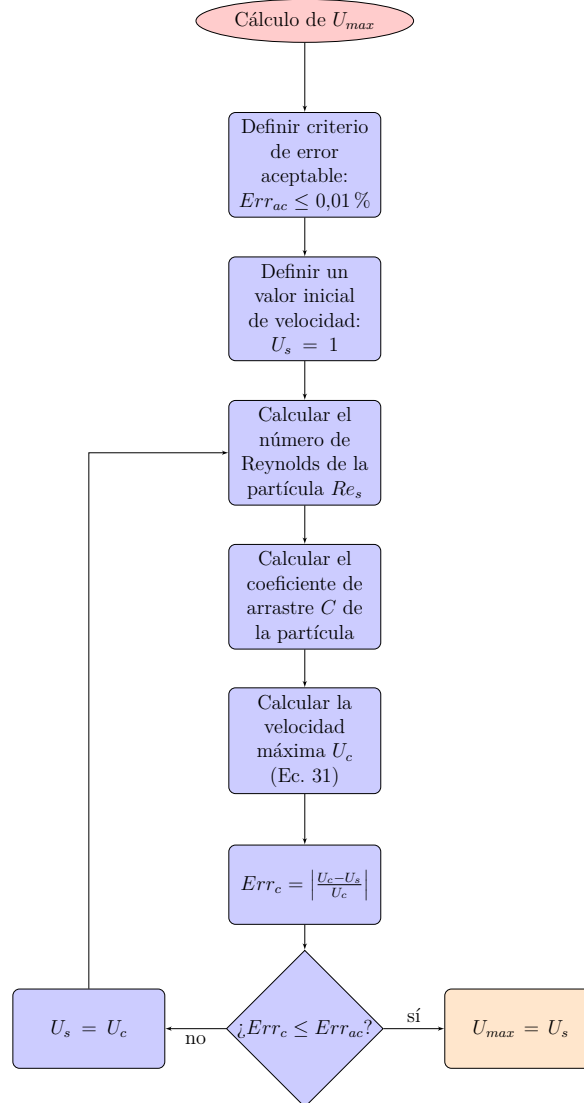


Figura 18: Metodología de cálculo de la velocidad de sedimentación máxima.

2.4. Geometría de lamelas

Se asume una geometría inicial con base en lo recomendado en el Cuadro 3. 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 5: Geometría inicial supuesta.

2.5. Ancho del sedimentador

El ancho del sedimentador se calcula con base en la Ecuación 47 y a la geometría inicial mostrada en el Cuadro 5; 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 48. La velocidad media del flujo dentro del sedimentador se calcula con la ayuda de la Ecuación 49.

2.7. Tubería de entrada y tolva de sedimentos

La tubería de entrada y tolva de sedimentos se calcula con base en las Ecuaciones 51, 52 y 53.

2.8. CAD y mallado de geometría

Gran parte del éxito de las simulaciones numéricas recaen en la discretización del dominio y en la calidad de los elementos que la componen^[33]. Se desarrolló un algoritmo que define la geometría CAD y realiza el mallado de la geometría basado en el lenguaje de código abierto **gms****h**. 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. Condiciones de frontera

La mezcla sólido-líquida en la entrada presenta un caudal de $0,3 [m^3/h]$. 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 19.

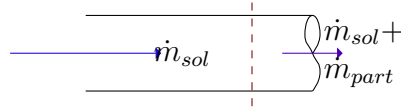


Figura 19: Zona de generación de partículas en la tubería de entrada.

De la Figura 19: \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 20.

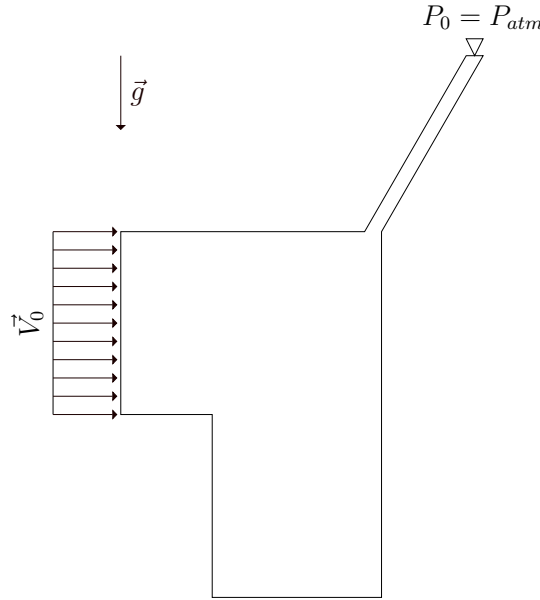


Figura 20: Condiciones de frontera.

Zona	Propiedad	Valor	Tipo
Entrada	Velocidad	V_0	Neumann
Salida	Presión [KPa]	101,325	Dirichlet

Cuadro 6: Clasificación de las condiciones de frontera.

La clasificación de las condiciones de frontera se puede apreciar en el Cuadro 6. Al tratarse de una simulación 2D, las caras frontal y posterior de la geometría se consideran superficies vacías.

2.11. Simulación CFD

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 9. La lógica de solución detrás del solucionador se puede apreciar en la Figura 28.

2.12. Error de la simulación

Para la estimación del error de la simulación, se emplea la metodología descrita en la sección 1.2.3. Al tener el comportamiento gráfico mostrado en la Figura 7, es posible calcular el error de la simulación con base en la Ecuación 59.

$$Err = \left| \frac{\gamma_i - \gamma_{i-1}}{\gamma_i} \right| * 100 \leq 5 \% \quad (59)$$

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. Simulación 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)^[34]. El solucionador emplea el enfoque Euler - Lagrange (ver sección 1.4.2) y `pimpleFOAM` para predecir la interacción fluido-partícula en el tiempo.

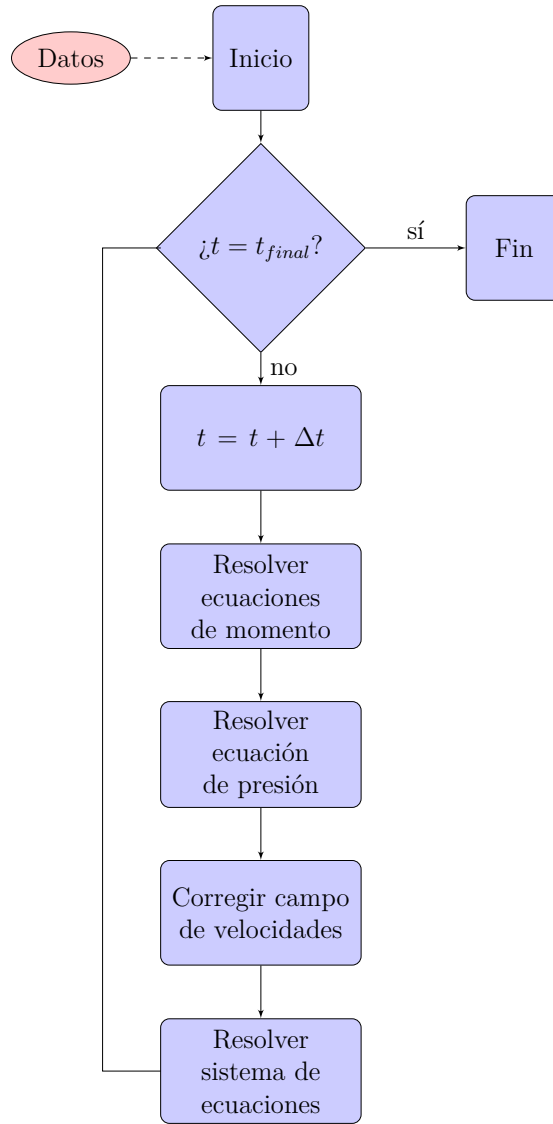


Figura 21: Diagrama de flujo del solucionador `pimpleFoam`.

Para el desarrollo de la simulación CFD-DEM, se emplearon los datos mostrados en el Cuadro 12.

2.14. Software de diseño

Para la ejecución de la metodología mostrada en la Figura 17, 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.

Parámetro	Valor
<i>Generales</i>	
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
<i>Coefficientes de par de resorte Dashpot</i>	
α	0,12
μ	0,52
Pasos de resolución de colisión	12

Cuadro 7: Datos generales para el desarrollo de la simulación CFD-DEM.

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*.

“Jupyter es una aplicación web de código abierto que permite la creación y compartibilidad 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.

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 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

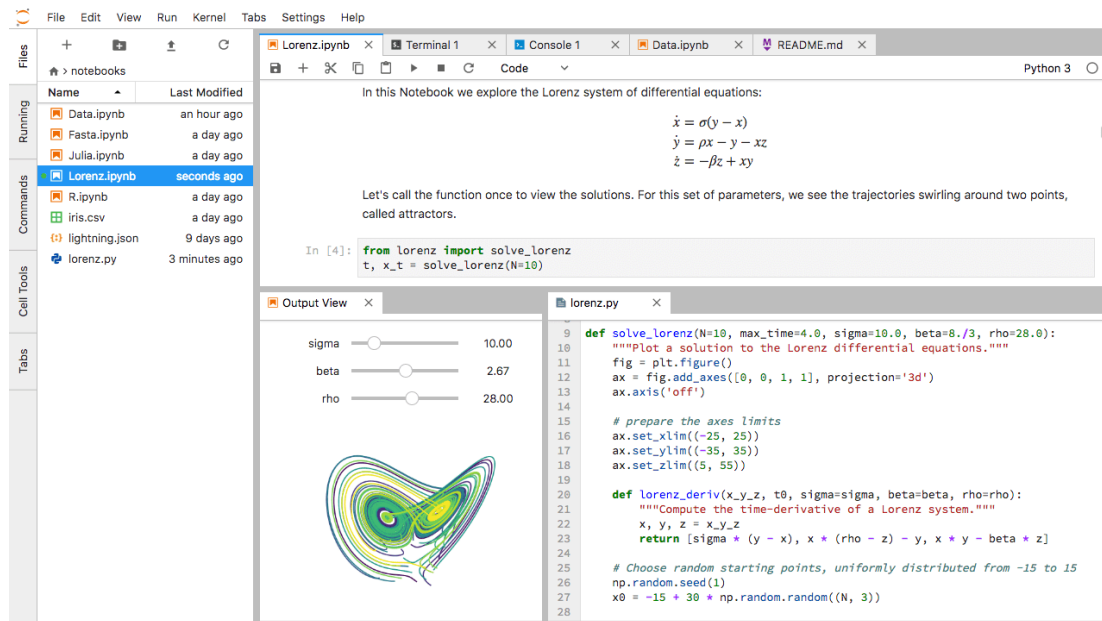


Figura 22: Interfaz gráfica de ejemplo desarrollada con Jupyter. Fuente: <https://jupyterlab.readthedocs.io/en/latest/>

puede definir el rango de tamaño de malla, tipo de los elementos (rectangular o triangular) y las dimensiones de la geometría.

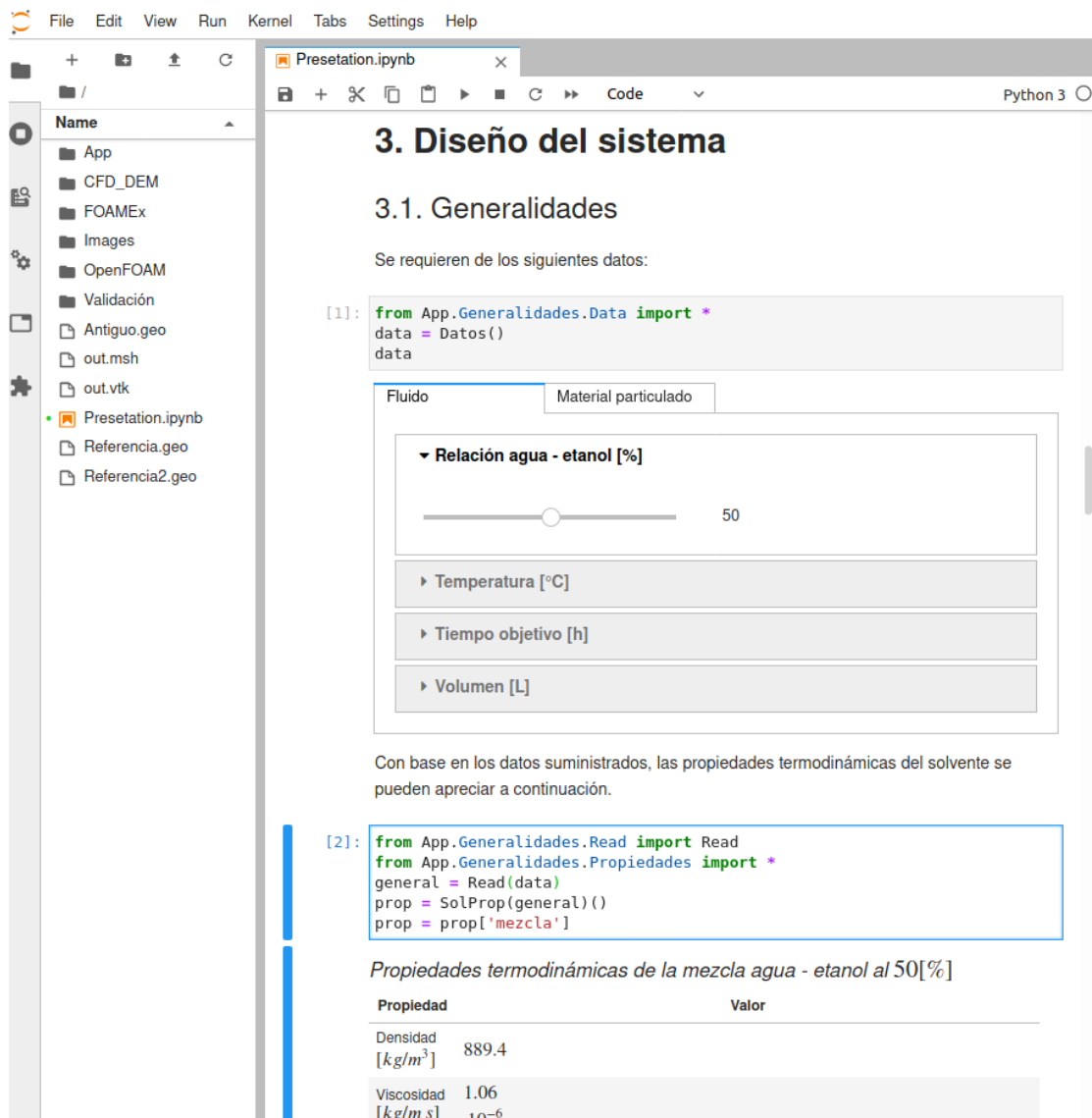


Figura 23: Parte de la interfaz gráfica desarrollada para la automatización del modelo CFD-DEM.

2.14.2. Backend

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

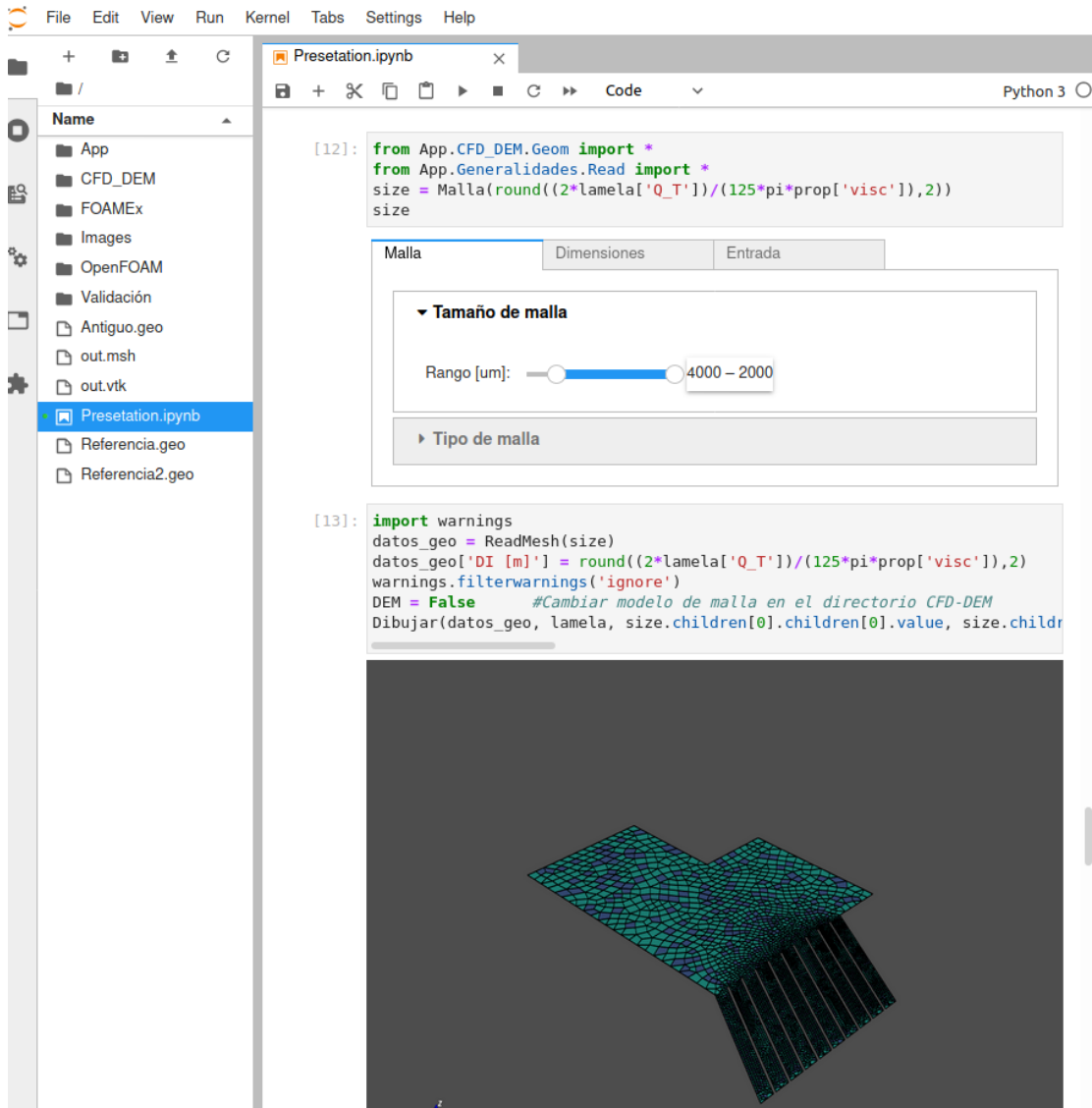


Figura 24: Sección de mallado automático del software desarrollado mediante gmsh.

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.

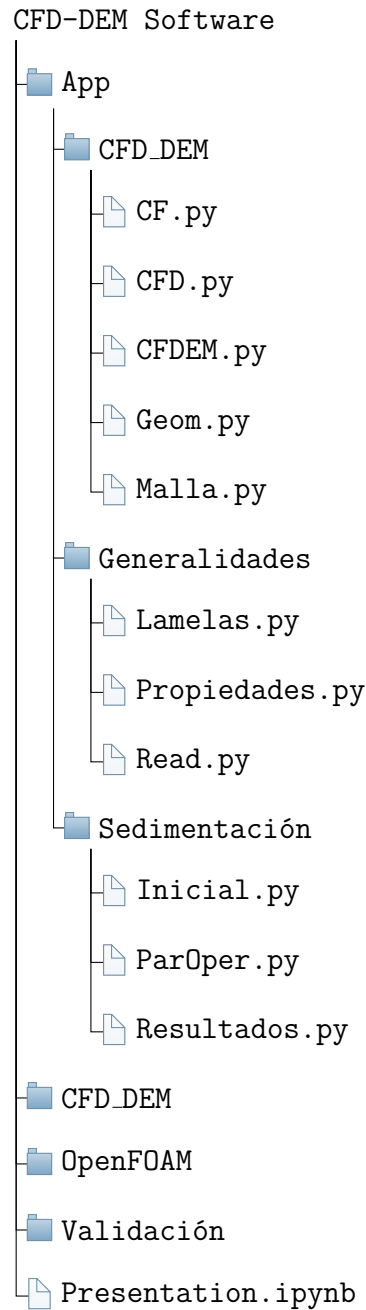


Figura 25: Árbol de directorios.

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 54 y 55 describen las propiedades termodinámicas del agua; y las Ecuaciones 56 y 57 las del etanol a presión atmosférica en función de la temperatura del fluido ($\forall T \in [5^\circ C, 60^\circ C]$). La Ecuación 58 permite predecir las propiedades de la mezcla agua - etanol a cualquier grado de concentración. Las propiedades de una mezcla agua - etanol al 50 %, $28^\circ C$, se pueden apreciar en el Cuadro 8.

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

Cuadro 8: 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 18. El resumen de resultados del proceso iterativo se pueden apreciar en la Figura 9.

Iteración	$U_s [m/s]$	Re_s	C	$U_c [m/s]$	$Err_c [\%]$
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 9: Proceso de cálculo iterativo de la velocidad de sedimentación máxima.

Con base en los resultados mostrados en el Cuadro 9, se concluye que, con una estimación de error inferior al 0,01 %, que la velocidad máxima de sedimentación es de $0,022 [m/s]$ con un número de Reynolds en la partícula de 5,115.

3.3. Geometría de una lamela

4. Modelo CFD-DEM

El modelo CFD-DEM consiste de una metodología de cálculo, a través de los métodos numéricos de volúmenes finitos (FVM) y elementos discretos (DEM), que busca predecir el comportamiento dinámico de las partículas en un medio fluido.

La metodología se resume en lo siguiente:

1. Definición de la geometría del problema.
2. Mallado de la geometría para el análisis fluidodinámico mediante CFD.
3. Definición de las condiciones de frontera.
4. Desarrollo de la simulación CFD - DEM.
5. Postprocesamiento y presentación de resultados.

Se desarrolló un algoritmo a través de herramientas de *código abierto*: Python como lenguaje base; Jupyter como entorno de desarrollo; OpenFOAM y Yade para el desarrollo las simulaciones numéricas; y ParaView como entorno de presentación de resultados de post-procesamiento.

4.1. Geometría

Para la definición de la geometría, se desarrolló una metodología de cálculo teórico automático en Python - Jupyter para diferentes problemas de interés, conforme a la metodología planteada en el Capítulo 3.

El diámetro de la entrada de la mezcla *solvente - material pulverizado* está definido por la Ecuación 60.

$$D_I = \frac{4Q_T}{Re \pi \mu} \quad (60)$$

En dónde: D_I es el diámetro de ingreso de la mezcla sólido - líquido, Q_T es el caudal del problema, Re es el número de Reynolds y μ es la viscosidad cinemática del fluido.

Con base en los resultados mostrados en el Cuadro ??, el diámetro de ingreso tiene un valor de 27[cm]. La geometría con la que se desarrolla el presente modelo se puede apreciar en la Figura 26.

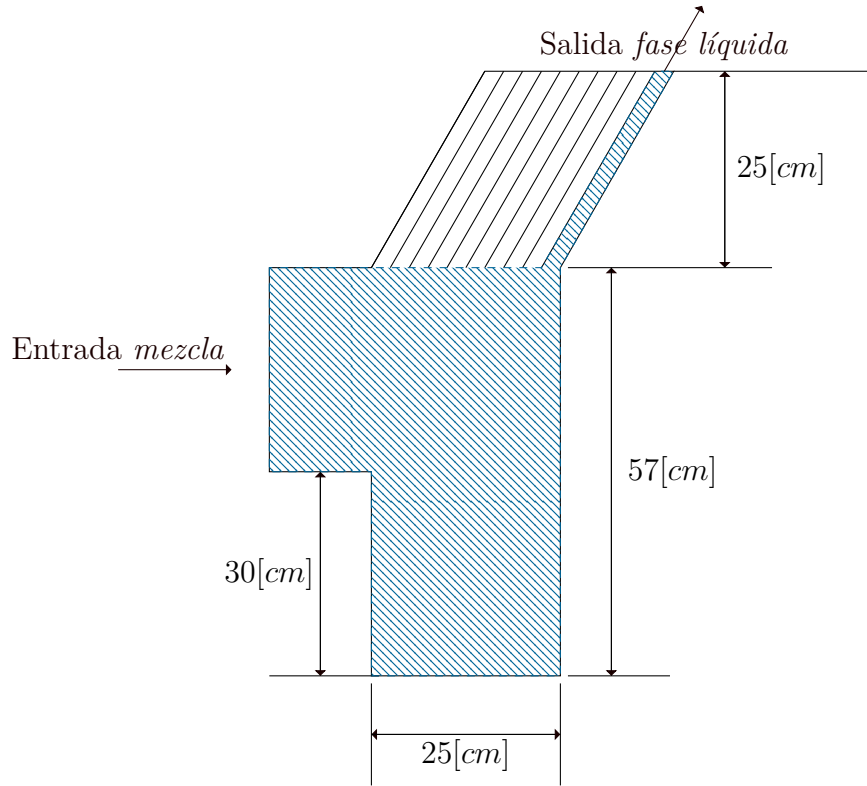


Figura 26: Vista en corte de la geometría del panel de lamelas.

De la Figura 26, el área sombreada corresponde a la geometría de análisis, en donde se observa: 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, en donde se deposita el material particulado.

4.2. Mallado

Gran parte del éxito de las simulaciones numéricas recaen en la discretización del dominio y en la calidad de los elementos que la componen^[33]. Se desarrolló una metodología de mallado automático con base en el lenguaje *gms* tomando como variables de entrada las dimensiones de la geometría definida en la sección 4.1. Esta metodología emplea elementos de diferentes tamaños y permite también definir su naturaleza (rectangulares o triangulares).

El algoritmo ejecuta, además, un refinamiento automático en la zona en donde ocurre el mayor grado de sedimentación: en la superficie inclinada, como se aprecia en la Figura 27.

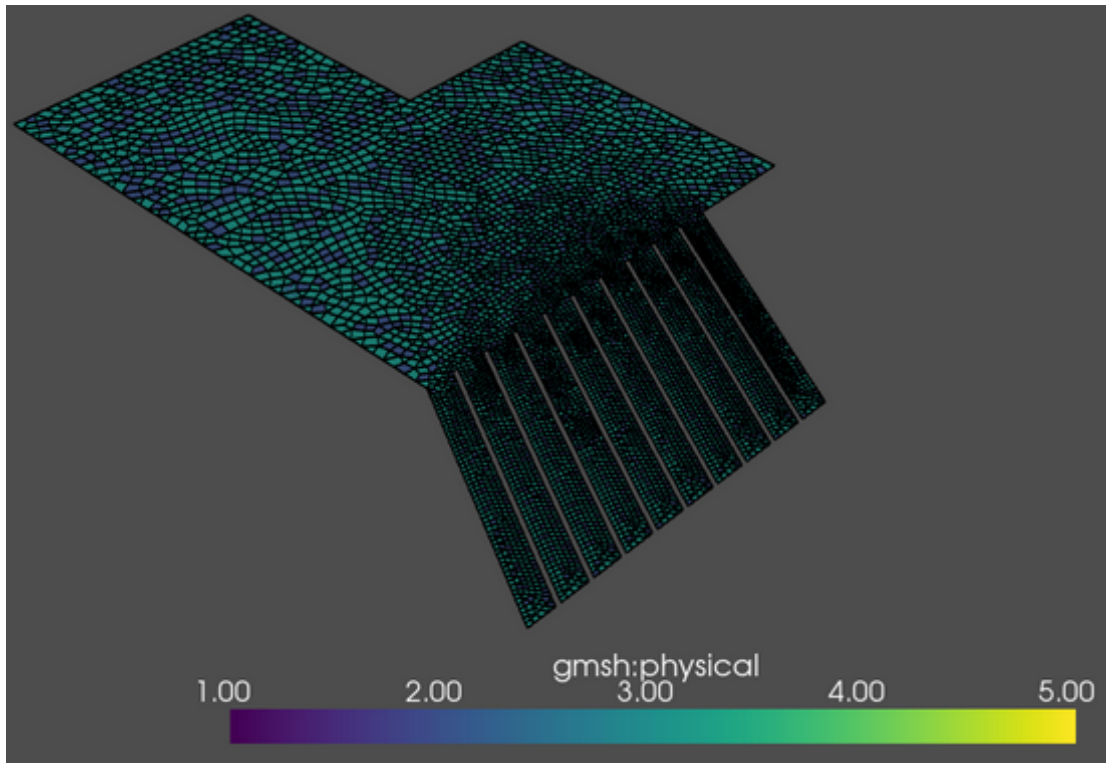


Figura 27: Mallado de la geometría.

La malla mostrada en la Figura 27 presenta las siguientes características:

Parámetro	Valor
Tipo de elementos	Rectangulares
Número de elementos	20415
Número de nodos	13692

Cuadro 10: Datos de la malla 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	11.45
Checkeo de <i>no</i> ortogonalidad	OK
Oblicuidad máxima	0.66 OK
Conclusión de malla	OK

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

A partir de los resultados mostrados en el Cuadro 11, se concluye que la malla es óptima para el desarrollo de las simulaciones numéricas consecutivas.

4.3. Desarrollo de la simulación

La simulación numérica a realizar comprende **dos** métodos numéricos: el método de *volúmenes finitos* (FVM, por sus siglas en inglés), con el cual se predice el comportamiento fluidodinámico dentro del volumen de control, y el método de *elementos discretos* (DEM, por sus siglas en inglés) con el que se predice el comportamiento dinámico de las partículas sólidas y su interacción con el solvente. En la presente sección, se desarrollan dos simulaciones numéricas: CFD y CFD-DEM. La primera busca predecir el comportamiento dinámico del fluido para, luego, ser contrastado con los resultados obtenidos en la simulación CFD-DEM; el cual describe la interacción fluido - partícula.

4.3.1. CFD

La *Dinámica de Fluidos Computacional* (CFD) es una herramienta 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.

Desde un punto de vista de *mecánica de fluidos computacional*, el presente problema busca estudiar un flujo con las siguientes características:

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

Tratándose, además, de un problema *bidimensional*, que matemáticamente hablando se refiere a lo siguiente:

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{transitorio}} + \underbrace{\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y}}_{\text{convectivo}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)}_{\text{difusivo}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{fuente}} \quad (9)$$

De la gama de solucionadores estándar que maneja OpenFOAM, existen dos que pueden resolver el sistema de ecuaciones de la Ecuación 9: **icoFoam** y **pimpleFoam**. Para la solución del modelo CFD-DEM, se seleccionó un solucionador basado en *pimpleFoam* debido a que existe la posibilidad de generación de turbulencia a ciertas velocidades de flujo del sistema en la interacción fluido-partícula.

La lógica de solución detrás de **pimpleFoam** se puede apreciar en la Figura 28.

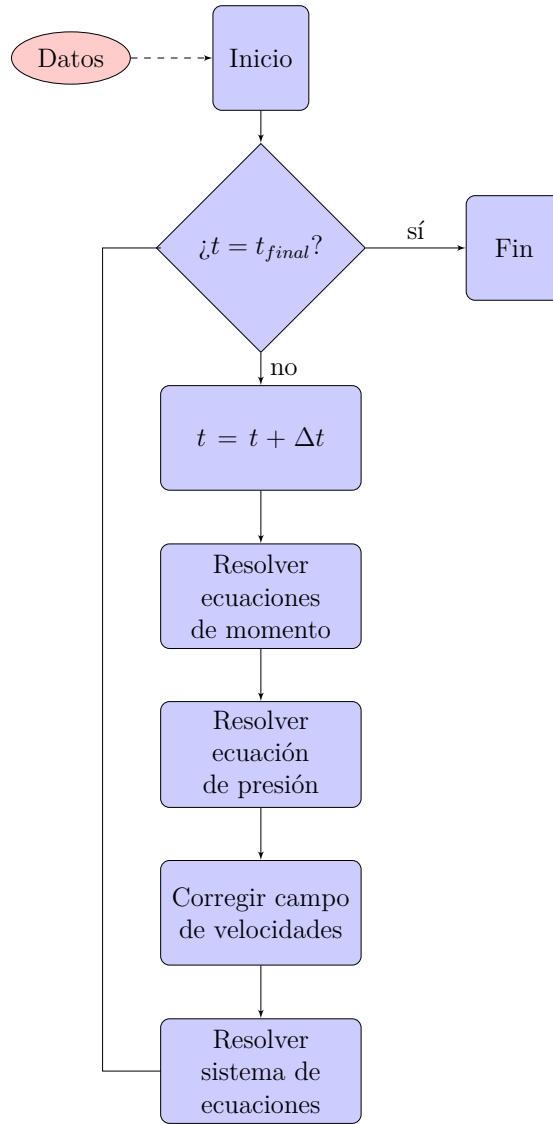


Figura 28: Diagrama de flujo del solucionador `pimpleFoam`.

4.3.1.1. Resultados

Los resultados de la simulación numérica mediante el método de *volúmenes finitos* se puede apreciar en las Figuras 29 y 30.

4.3.1.2. Análisis de resultados

La simulación numérica, desarrollada en OpenFOAM, encontró su punto de equilibrio (punto *estacionario*) al cabo de ocho segundos de simulación; cuyos resultados, en términos de velocidad y presión, pueden apreciarse en las Figuras 29 y 30, respectivamente.

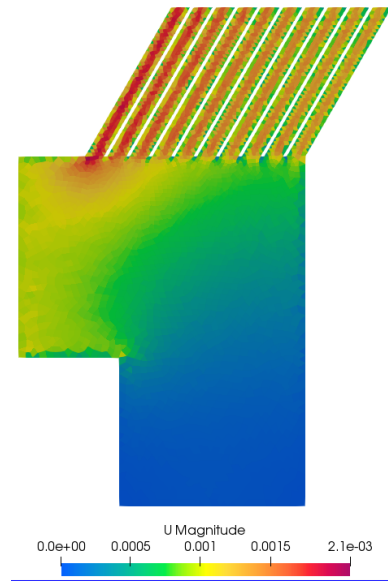


Figura 29: Diagrama de contorno de la distribución de velocidades del sistema de sedimentación.



Figura 30: Diagrama de contorno de la distribución de presiones del sistema de sedimentación.

En la Figura 29 se observa un valor de velocidad máxima de $0,0021[m/s]$ que es alcanzada en la primera lamela y decrece en las lamelas consecuentes hasta un valor cercano de $0,0015[m/s]$; fenómeno físico que va acorde a la realidad por tratarse de flujos en serie.

En la Figura 30 se puede apreciar el perfil de presiones sobre el sistema; en don-

de se presenta un comportamiento uniforme y simétrico alcanzando un valor de presión máxima de hasta $0,000012[kPa]$. 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 de 0 (atmosférica) y la velocidad de flujo en la entrada es de $0,00097[m/s]$.

4.3.2. Método CFD-DEM

El acoplamiento entre CFD (“*Computational Fluid Dynamics*”) y DEM (“*Discrete Element Method*”) busca predecir la interacción fluido-partícula. El flujo se resuelve a través de CFD basado en malla (ver sección 4.3.1), 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^[35, 36, 37].

4.3.2.1. Resultados

Para la definición de la interacción partícula-partícula, fluido-partícula y partícula-muro se emplearon los datos contenidos en el Cuadro 12.

Parámetro	Valor
<i>Generales</i>	
Material	Arena de río
Tamaño de partícula $[\mu m]$	250
Módulo de Young	10^6
Número de partículas por segundo	22300
Velocidad inicial $[m/s]$	0,0097
$\rho[kg/m^3]$	1600
ν	0,2
<i>Coefficientes de par de resorte Dashpot</i>	
α	0,12
μ	0,52
Pasos de resolución de colisión	12

Cuadro 12: Datos generales para el desarrollo de la simulación CFD-DEM.

La simulación numérica desarrollada permitió observar el comportamiento dinámico entre las partículas y el solvente; desarrollándose el fenómeno de sedimentación desde la entrada de material debido a la baja velocidad de flujo. El diagrama de contorno de velocidades del sistema se puede apreciar en la Figura 31.

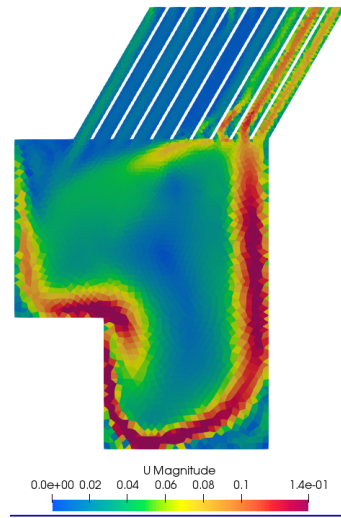


Figura 31: Diagrama de contorno de velocidades del sistema.

El diagrama de contorno de presiones del sistema de sedimentación se puede apreciar en la Figura 32.

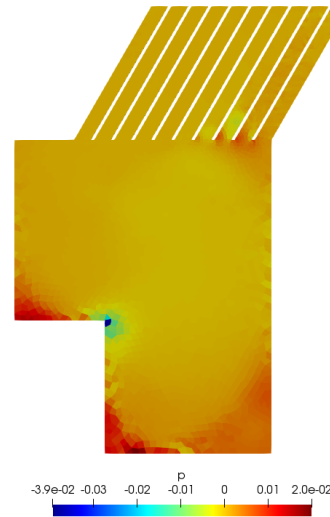


Figura 32: Diagrama de contorno de presiones del sistema de separación de sustancias.

Durante la simulación, en el que se analizaron 30[s], se apreció el desarrollo de vórtices y remolinos debido al reflujo de las partículas, como se aprecia en la Figura 33.

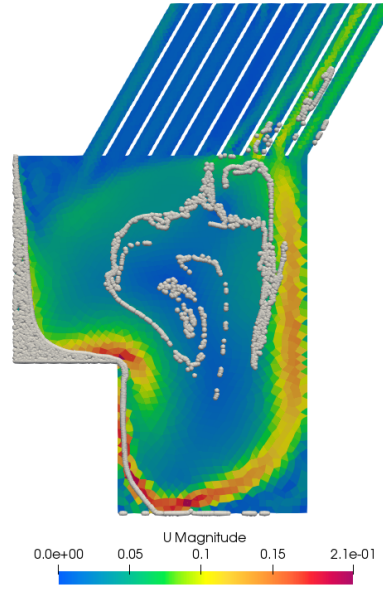


Figura 33: Distribución de partículas de arena sobre el volumen de control durante el segundo 28 de la simulación.

4.3.2.2. Análisis de resultados

Comparando las Figuras 29 y 31, 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 4.3.1.1. Debido a ello, es posible clasificar a las lamelas por zonas de “pureza” durante el proceso de separación: en donde las primeras seis 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 se adaptó para resolver el problema *Euler - Lagrange* (E - L).

Diferente al fenómeno apreciado en la Figura 30, la distribución de presiones en la Figura 32 no es simétrica y tiende a presentar sus máximos valores en la zona de congregación de los sedimentos.

De la Figura 34, 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^[38]. Debido al hecho de que tienden a aglomerarse en valores cercanos a cero, son un indicativo de alta precisión del modelo numérico implementado. Las variaciones

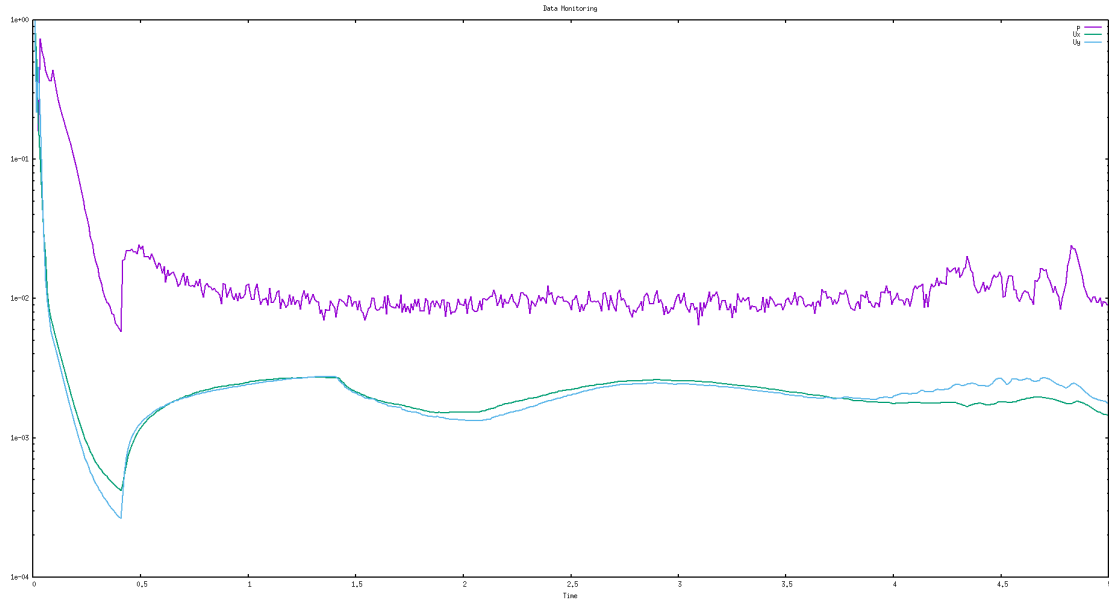


Figura 34: Monitoreo de residuales en la simulación CFD-DEM.

vistas en los residuales de presión se deben a la vorticidad originada por los reflujos 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^[3], 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 35.

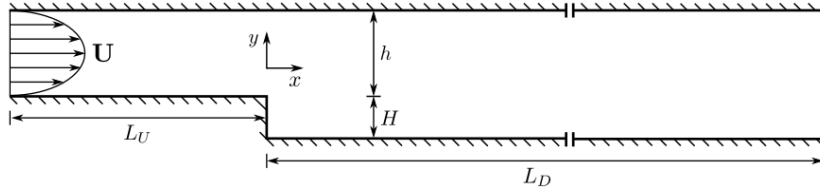


Figura 35: Geometría de estudio.

5.1. Descripción del problema

En 1999, Fessler & Eaton estudiaron el efecto de partículas de vidrio y cobre de distintos tamaños (70 , 90 y $150[\mu m]$ 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^[39] y Gore & Crowe^[40] establecieron los cimientos del comportamiento turbulento en la interacción fluido - partícula; mientras que en investigaciones desarrolladas por Kulick, Fessler & Eaton^[41] y Tsuji, Morikawa & Shiomi^[42] 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 35). 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^[41]; 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 13: 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 36. 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 61.

$$Re_p = \frac{d_p U_{rel}}{\mu} \quad (61)$$

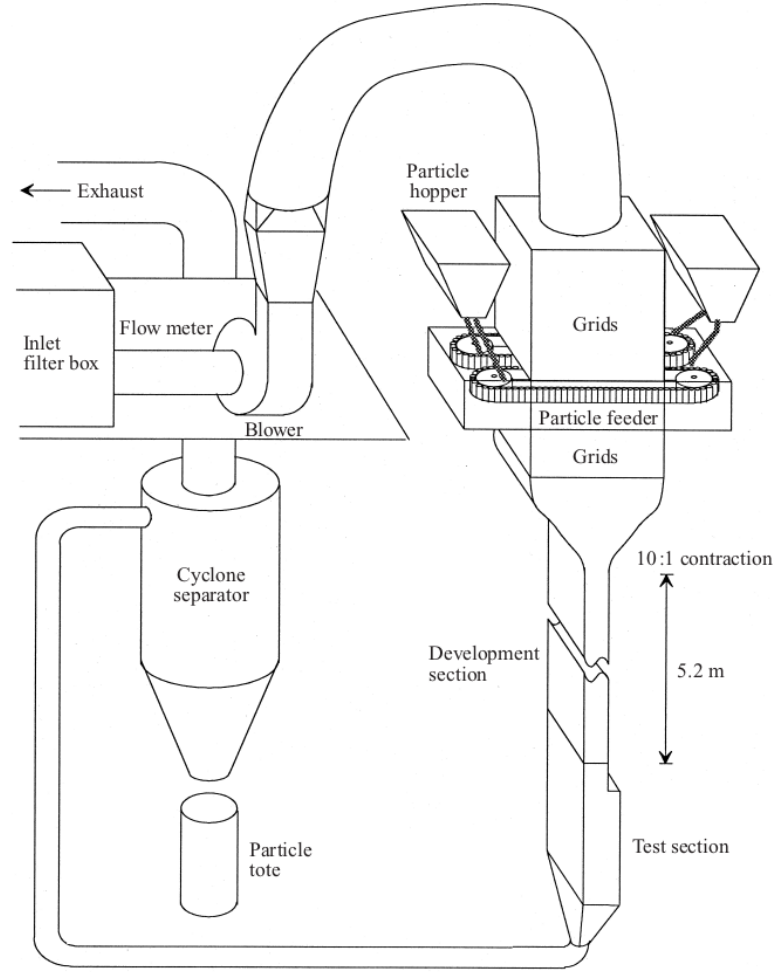


Figura 36: Esquema del montaje experimental^[3].

De la Ecuación 61: 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.

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} \quad (62)$$

Para partículas pequeñas con números de Reynolds despreciables, Stokes (1851) demostró que la constante de tiempo particular se define con base en la Ecuación 63.

$$\tau_{p,Stokes} = \frac{(2\rho_p + \rho_f) d_p^2}{36\mu} \quad (63)$$

El coeficiente de arrastre C_D , para números de Reynolds superiores a 700, puede calcularse con base en la Ecuación 64.

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0,15 Re_p^{0,687} \right) \quad (64)$$

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 65.

$$\tau_p = \frac{\tau_{p,stokes}}{1 + 0,15 Re_p^{0,687}} \quad (65)$$

La escala de tiempo representativa en el flujo se calculó con base en la Ecuación 66.

$$\tau_f = \frac{5H}{U_0} \quad (66)$$

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

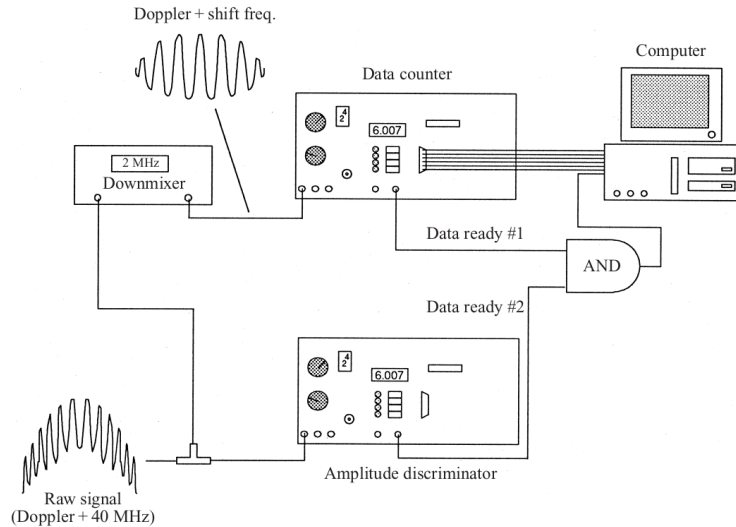


Figura 37: Esquema del sistema de medición de la interacción partícula fluido^[3].

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

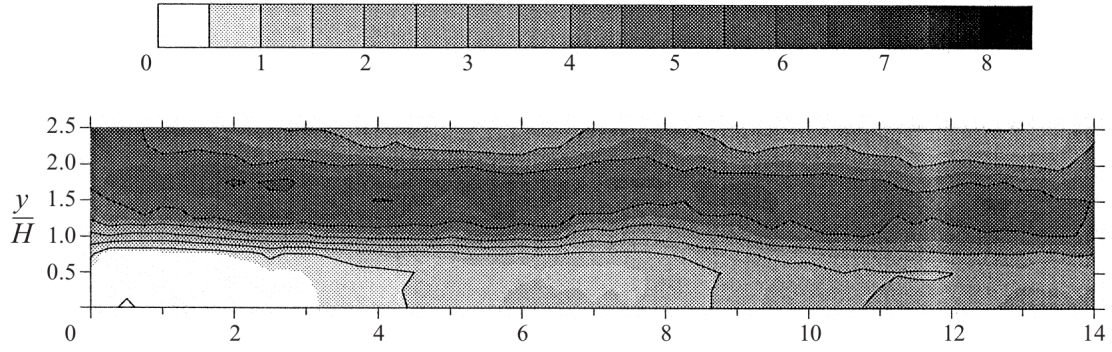
Los perfiles de velocidad media se midieron, de manera experimental, a través de las condiciones especificadas en el Cuadro 14. Pocas partículas fueron identificadas en la zona de recirculación, por lo que no se reportaron datos en la zona $x/H = 2,5$ y 7 .

Clase de partícula	Dirección de flujo		Dirección normal al muro	
	x/H	Carga másica	x/H	Carga másica
Vidrio de $90[\mu m]$	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 %

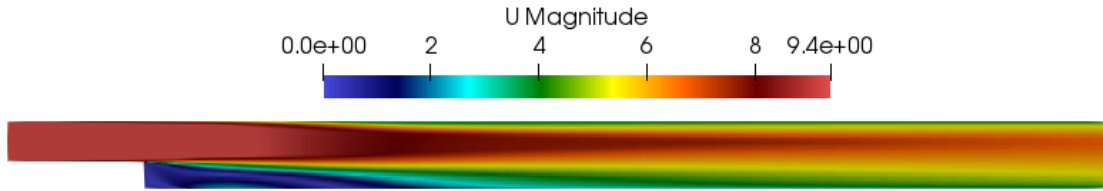
Cuadro 14: Condiciones experimentales.

En la Figura 38 *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 38 *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.



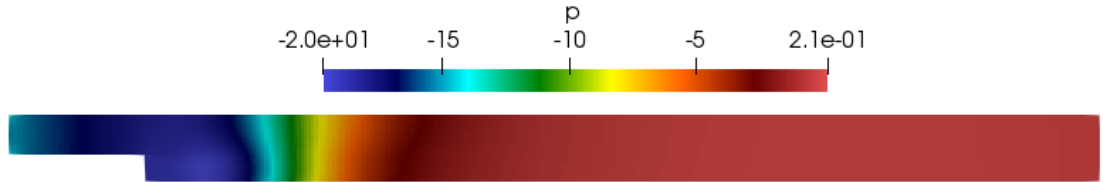
(a) Diagrama de contorno de referencia de la densidad media de partículas de cobre de $70[\mu m]^3$.



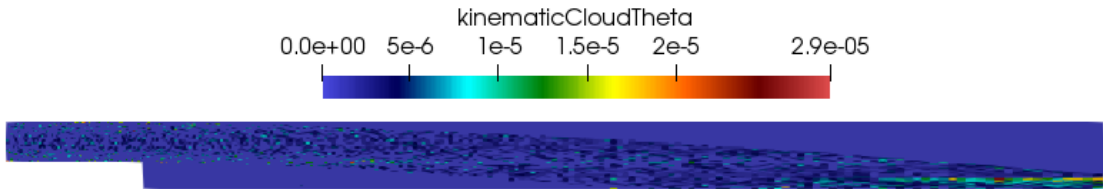
(b) Diagrama de contorno de la distribución de velocidad del sistema con partículas de cobre de $70[\mu m]$ - resultado obtenido al usar el modelo CFD-DEM desarrollado.

Figura 38: 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 38 b), el modelo CFD-DEM desarrollado también permite apreciar los resultados mostrados en la Figura 39.



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



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

Figura 39: 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 40.

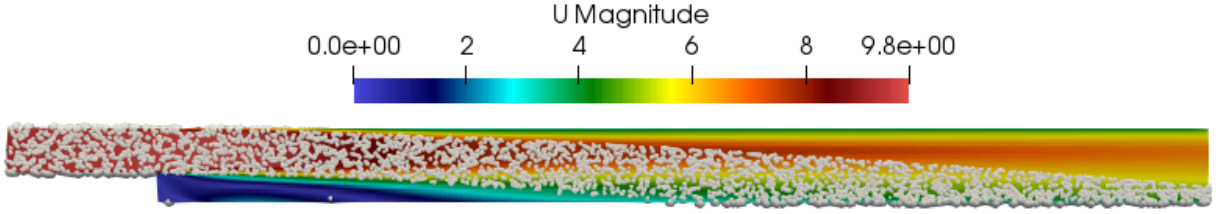


Figura 40: Distribución de las partículas de cobre sobre la geometría.

En la Figura 41 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.

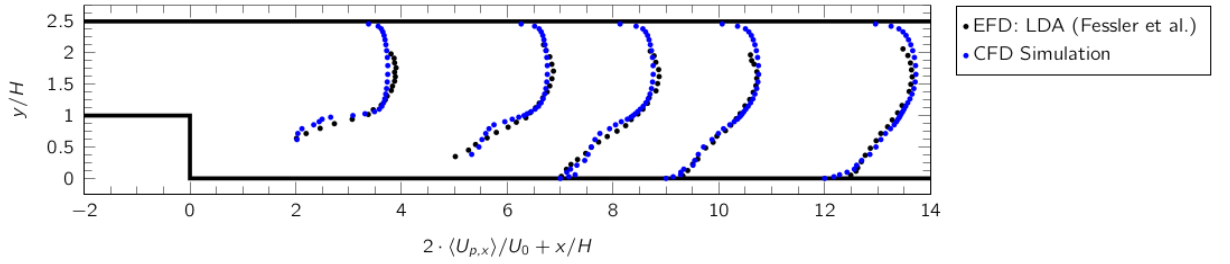


Figura 41: Comparación directa de los perfiles de velocidad experimentales con respecto al del modelo numérico desarrollado.

En la Figura 41, se puede apreciar una variación de hasta el 0,6% entre los resultados experimentales con respecto a los obtenidos por el modelo numérico; validando así el modelo CFD-DEM desarrollado.

Conclusiones

1. Se desarrolló una metodología de diseño numérico de un sistema de elución y filtrado para una planta de extracción, en dónde se apreció la interacción fluido - partícula durante la etapa de filtrado, basada en el fenómeno de sedimentación. El modelo numérico fue validado, llegando a reportar márgenes de precisión en los perfiles de velocidad de flujo inferiores al 1 %.
2. A las condiciones de operación dadas ($0,3 [m^3]$ 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; hecho que va acorde a los resultados reportados en el diseño global (capítulo 3).
3. 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 33 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.
4. Se implementó la metodología del modelo CFD-DEM con base en herramientas de código abierto; demostrando la viabilidad de estas herramientas en el desarrollo de nuevos productos y servicios de bajos costos de inversión inicial y alto grado de innovación.
5. De acuerdo al proceso de validación desarrollado en el capítulo 5, se concluye que el modelo CFD-DEM desarrollado es preciso (error inferior al 1 % con respecto a los resultados experimentales) y puede ser empleado en diversas aplicaciones de flujo, bien sea laminar o turbulento, en donde partículas sólidas interactúan con fluidos newtonianos en fase líquida o gaseosa.

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] N. Voutchkov, “Sand Removal, Sedimentation, and Dissolved Air Flotation,” in *Pretreatment for Reverse Osmosis Desalination*. Elsevier, jan 2017, pp. 137–152.
- [3] 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>
- [4] S. A. Barker, “Matrix solid phase dispersion (MSPD),” *Journal of Biochemical and Biophysical Methods*, vol. 70, no. 2, pp. 151–162, 2007.
- [5] 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>
- [6] 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.
- [7] O. A. Gélvez Arocha, J. R. Martínez Morales, E. Stashenko, Ó. A. Gómez Sepúlveda, and J. D. Argüello Plata, “CO2018013023A1 - Equipo, proceso y producto obtenido a partir de material vegetal con propiedades biológicas - Google Patents,” 2018. [Online]. Available: <https://patents.google.com/patent/CO2018013023A1/es?inventor=juan+david+arg{\unhbox\voidb@x\bgroup\let\unhbox\voidb@x\setbox\@tempboxa\hbox{u\global\mathchardef\accent@spacefactor\spacefactor}\let\begin\group\end\group\relax\let\ignorespaces\relax\>

accent127u\egroup\spacefactor\accent@spacefactor\protect\penalty\@M\hskip\z@skip}ello{\&}oq=juan+david+arg{\unhbox\voidb@x\bgroup\let\unhbox\voidb@x\setbox\@tempboxa\hbox{u\global\mathchardef\accent@spacefactor\spacefactor}\let\begin\group\endgroup\relax\let\ignorespaces\relax\accent127u\egroup\spacefactor\accent@spacefactor\protect\penalty\@M\hskip\z@skip}ello

- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] C. Yue, Q. Zhang, and Z. Zhai, “Numerical simulation of the filtration process in fibrous filters using CFD-DEM method,” *Journal of Aerosol Science*, vol. 101, pp. 174–187, nov 2016.
- [11] A. E. Carlos Varas, E. A. Peters, and J. A. Kuipers, “CFD-DEM simulations and experimental validation of clustering phenomena and riser hydrodynamics,” *Chemical Engineering Science*, vol. 169, pp. 246–258, sep 2017.
- [12] E. Stashenko, “Plantas aromáticas y aceites esenciales: estudio y viabilidad de su desarrollo en colombia.” *Plantas aromáticas 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>
- [13] 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.
- [14] 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>
- [15] 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/>
- [16] 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.

- [17] 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>
- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] 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.
- [21] K. P. Galvin and G. Nguyentranlam, "Influence of parallel inclined plates in a liquid fluidized bed system," *Chemical Engineering Science*, vol. 57, no. 7, pp. 1231–1234, mar 2002.
- [22] 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/abs/sedimentation-and-sediment-flow-in-settling-tanks-with-inclined-walls/F5D7B030CCA97FE3A551D6148C1E5C74>
- [23] 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.
- [24] 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.
- [25] 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>

- [26] “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/>
- [27] J. A. Romero Rojas, *Purificación del agua*. Escuela Colombiana de Ingeniería, 2009.
- [28] J. A. Pérez Parra, *Manual de potabilización del agua*. Medellín: Universidad Nacional de Colombia, 1997.
- [29] 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>
- [30] V. L. Streeter, *Fluid Mechanics*. McGraw-Hill, 1951. [Online]. Available: <https://books.google.com.co/books?id=K5-rK6HUoo8C>
- [31] 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.
- [32] 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>
- [33] 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>
- [34] 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>
- [35] B. P. Hoomans, J. A. Kuipers, W. J. Briels, and W. P. Van Swaaij, “Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: A hard-sphere approach,” *Chemical Engineering Science*, vol. 51, no. 1, pp. 99–118, jan 1996.
- [36] B. H. Xu and A. B. Yu, “Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics,” *Chemical Engineering Science*, vol. 52, no. 16, pp. 2785–2809, aug 1997. [Online]. Available: <https://research.monash.edu/en/publications/numerical-simulation-of-the-gas-solid-flow-in-a-fluidized-bed-by->

- [37] Y. Tsuji, T. Kawaguchi, and T. Tanaka, “Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed,” *Powder Technology*, vol. 77, no. 1, pp. 79–87, 1993.
- [38] 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.
- [39] G. Hetsroni, “Particles-turbulence interaction,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 15, no. 5, pp. 735–746, sep 1989.
- [40] 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.
- [41] 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>
- [42] 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-air-solid-two-phase-flow-in-a-vertical-pipe/043CBA133D1AE2D65549105FBD48DDBD>