**Modelado de la Extracción de Aceite de Clavo de Olor mediante Elementos Finitos usando ALGOR Windows**

**Jorge A. Autoruno1,2  y Daniel M. Autordos1**

(1) Facultad de Ingeniería, Dpto. de Ingeniería Numérica, Univ. del Arbolito, Casilla 333, Rotonda-Chile

(2) Centro de Investigación Numérica, Grupo de Estudios Avanzados, Casilla 712, Rotonda-Chile

E-mail: jautoruno@uarbolito.cl; dmautordos@cin.cl

Resumen

Se ha aplicado el software Algor Windows, al proceso de extracción del aceite de clavo de olor, para determinar el coeficiente de difusión de materia. Se realiza una analogía entre transferencia de calor para lo que está diseñado Algor y transferencia de materia, que se requiere para determinar el coeficiente de difusión, asociando las distintas variables involucradas en las ecuaciones de balance. Se han obtenido de la literatura algunas propiedades requeridas por la simulación, tal como la concentración en función de la posición en la columna y se han introducido suposiciones físicamente razonables para formular el modelo y las condiciones iniciales y de contorno requeridas. El estudio muestra que el programa Algor, diseñado para otros fines, permite realizar aplicaciones en el campo de la transferencia de materia, como es la extracción del aceite del clavo de olor.

## Modeling of the Extraction of Clove Oil by Finite Elements using ALGOR Windows

## Abstract

The software Algor Windows has been applied to the extraction process of clove oil to determine the mass diffusion coefficient in the extraction column. An analogy between heat transfer problems, for which Algor is designed, and mass transfer, which is required to determine the diffusion coefficient, has been done to associate the different variables involved in the balance equations. Properties required for the simulation, such as the concentration as a function of position in the column, has been obtained from the literature and reasonable assumptions have been introduce to formulate the model and the required initial and boundary conditions. The study shows that the program Algor, although designed for other purposes, can be used in the field of mass transfer, such as the extraction of clove oil at high pressure.

Keywords: finite elements, diffusion, Algor, modeling, extraction, clove oil

### Introducción

La extracción de productos naturales ha sido objeto de variados estudios, experimentales y teóricos, presentados en la literatura (Catchpole y King, 1994; Roy et al., 1996; Liu y Ruckenstein, 1997; Xiao-ning et al., 2000; Razeai y Temelli, 2000; Kong y Kagei, 2003). Varios estudios han mostrado también que el conocimiento de la difusividad dentro de la matriz sólida es esencial para determinar el mejor proceso de extracción, aumentar el rendimiento del equipo de extracción y aprovechar mejor el producto natural. Uno de estos estudios fue presentado por Zapata (1998) y Zapata y Meireles (1997) en el cual utilizan el clavo de olor como soluto sólido y el CO2 como solvente.

La ecuación general básica que describe la concentración contenida en el clavo de olor puede ser escrita como (Bird et al., 1964; Crank, 1964).

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

En esta ecuación, C es la concentración en base seca (Kg. de aceite /Kg. sólido seco), D es el coeficiente de difusión, t es el tiempo de extracción y z es la posición en la dirección axial. Por otro lado, la ecuación de difusión de Fick en tres dimensiones es (Crank, 1964):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

que es llamada segunda Ley de Difusión de Fick. Esta ecuación se utiliza, generalmente, para la difusión de gases en sólidos o en líquidos estacionarios. Para analizar el clavo de olor (sólido compactado) se consideró el sistema real, descrito por Zapata (1998). En dicho estudio el clavo de olor dentro del extractor se dispuso en 7 cilindros verticales, formando una sola columna de 47.7 cm.

El programa Algor tiene gran aplicación en diversos campos de la ingeniería, como por ejemplo en planes de diseño y optimización de elementos de máquinas o en estudios de variados tipos de procesos mecánicos y físicos. Algor puede analizar distintos tipos de problemas tales como análisis estático lineal y no lineal, transferencia de calor, flujo de fluidos, corrientes, entre otros. Algor considera una estructura básica y simplificada en la resolución de un problema, la que consiste en tres etapas: 1) etapa de pre-proceso (formulación del problema); 2) etapa de proceso (cálculo); y 3) etapa de post-proceso (análisis de resultados).

Para el análisis se consideró que los siete cilindros estaban unidos mediante nodos en los cuales fueron aplicadas las condiciones iniciales y de contorno. Después de tener las secciones unidas se aplicó el comando FEA Mesh, ubicado dentro de la rutina Superdraw III de Algor y que es capaz de segmentar cualquier región determinada considerando el tipo de elemento seleccionado (triangular, mixto, rectangular) y una distribución homogénea dada por una densidad de malla especificada. Luego de obtener el enmallado, el modelo fue rotado en 360° para obtener los siete cilindros (sólidos), cuya discretización fue de 14652 elementos con 13734 nodos. Para distinguir cada cilindro se utilizó distintos grupos de elementos cuya identificación es mediante el color.

El programa Algor permite el ingreso de distintas propiedades para cada uno de los grupos, lo cual es de utilidad en el caso en estudio en el que, siguiendo la descripción de Zapata, se considera que la difusividad depende de la concentración. Para lograr obtener la difusividad deseada en cada cilindro, el valor de D (Kq para Algor), fue variado hasta llegar a la concentración del primer cilindro. Después se mantienen constantes las propiedades del primer cilindro, se sigue con el segundo y así sucesivamente.

En el análisis se consideró también lo siguiente: 1) concentración inicial uniforme en todos los cilindros, que es la condición planteada por Zapata (1998) en su estudio, 2) concentración en la superficie de cada cilindro igual a Cs = 0. Esta condición se aplicó en la parte inferior vertical del primer cilindro donde empieza a difundir el CO2 y en las uniones de cada cilindro excepto en la parte superior del séptimo cilindro, el cual está aislado (no hay transferencia de materia), y 3) la variación de concentración con respecto a la posición es igual a cero para un tiempo finito en la parte superior vertical del último cilindro, por lo tanto C = Co. La Fig. 1 muestra la forma en que están dispuestos los siete cilindros y las condiciones impuestas para el análisis: condiciones de contorno, velocidades de gas, concentraciones de aceite, y características del cilindro: por ejemplo que el CO2 se mueve a velocidad muy baja y que la concentraciòn de aceite en el gas superdctitica es muy baja,

|  |
| --- |
| fig3 |
| Fig. 1:Condiciones utilizadas para el análisis del modelo |

**EL MODELO**

Para el caso de transferencia de calor en un medio isotrópico, sin generación de calor, Algor considera las siguientes ecuaciones:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

La analogía entre la ecuación de transferencia de materia (que se requiere resolver), y la ecuación de transferencia de calor (que considera Algor), debe incorporar el siguiente cambio de variables: *T=C; Ts=Cs; T∞=Ce; hq=hm; Kq*=*D; Cq=1 ρ=1.*  En este caso, la ecuación (4) no fue utilizada en el análisis, dado que no hay convección en la superficie (velocidad muy pequeña). Por lo tanto, se aplicaron en la superficie de cada cilindro una concentración dada (Cs=0). La Tabla 1 muestra los datos experimentales y los calculados por Zapata (1998) para siete horas de extracción que fueron utilizados para el análisis del modelo y posterior comparación.

Las propiedades del clavo de olor fueron tomadas de la tesis de Zapata (1998) y son las siguientes: i) concentración inicial Co= 0.25 kg aceite/kg sólido seco.; ii) concentración en la superficie Cs ≈ 0; y iv) ∂C/∂z=0 para z=L y para un tiempo finito esto implica C=Co = 0.25. Además, comparando las ecuaciones (2) y (4) se tiene que: ρ = 1, Cp = 1 y Kd=D (incógnita a determinar).

Tabla 1:Concentración C (Kg. de aceite / Kg. sólido seco), longitud (cm) y C calculada por Zapata. Datos a P=64.7 bar y T=10°C, para t= 7 horas.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *L(cm)* | *C exp.* | *C Zapata* |
| 6.7 | 0.18 | 0.16 |
| 6.8 | 0.19 | 0.18 |
| 6.8 | 0.20 | 0.20 |
| 6.9 | 0.21 | 0.21 |
| 6.8 | 0.22 | 0.22 |
| 6.9 | 0.23 | 0.23 |
| 6.8 | 0.24 | 0.23 |

**RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

Se presenta una selección de los resultados obtenidos en este trabajo. En cada análisis se utilizó un intervalo de tiempo de integración de 0.05 horas (3 min) con 140 pasos, lo que da las 7 horas, tiempo informado por Zapata (1988), para los datos de la Tabla 1. Los resultados obtenidos y las comparaciones de los datos experimentales, con los calculados por Zapata y con los calculados mediante Algor se muestran en las Tablas 2 y 3, además de las Figuras 2 a 5. En las Figuras 2 a 5 se observa que los valores de concentración determinados por Algor y los experimentales son bastante similares y muestran bajas desviaciones. Los valores de difusividades muestran sin embargo diferencias apreciables. Estas se deben probablemente a las condiciones de borde diferentes impuestas al modelo utilizado en cada caso. Los valores de difusividad obtenidos con Algor para los cilindros superiores (menores a 10-10), parecen indicar que hay otros mecanismos de transferencia de materia que no se observan en un análisis global como el presentado por Zapata (1998).

Según Cremasco (1998), podría haber una importante contribución del fenómeno de convección natural, con un coeficiente de transferencia de materia dependiente de la concentración y un coeficiente de difusión constante. Esto es corroborado por los resultados encontrados en este trabajo. Este coeficiente de difusión dependería solo de las sustancias involucradas y no de la concentración del soluto en el lecho. Esto puede ser considerado en Algor introduciendo la condición de borde (ecuación 4) con un coeficiente *hm* variable. Esto es, *hm* va a ser la variable a determinar, siendo D un valor constante. En el caso estudiado se tomó el valor de difusividad encontrado en el primer cilindro en el análisis anterior con coeficiente de difusión variable.

Para determinar el coeficiente de transferencia de materia se utilizó la misma metodología del caso descrito para difusión pura, variando la condición de contorno Cs=0 en cada cilindro por las condiciones que Algor utiliza para analizar medios convectivos. Los valores que se introducen son Ce≈0 (concentración de equilibrio) y hm (coeficiente de transferencia de materia por convección) que es el valor a determinar. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 4.

Tabla 2: Concentración media CM en Kg. de aceite / Kg. sólido seco y difusividades en m2/s en los siete cilindros para una presión de 64,7 bar y temperatura de 10 °C.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Cilindros | *Longitud (cm)* | *Dif. Algor (m2/s)* | *CM Algor* | *Dif. Zapata (m2/s)* |
| 1 | 6.8 | 2.22 x 10-9 | 0.181 | 4.38 x 10-10 |
| 2 | 6.7 | 1.388 x 10-9 | 0.19 | 4.35 x 10-10 |
| 3 | 6.9 | 5.55 x 10-10 | 0.201 | 4.31 x 10-10 |
| 4 | 6.9 | 2.5 x 10-10 | 0.212 | 4.26 x 10-10 |
| 5 | 6.8 | 2.77 x 10-11 | 0.218 | 4.23 x 10-10 |
| 6 | 6.8 | 1.388 x 10-13 | 0.228 | 4.18 x 10-10 |
| 7 | 6.8 | 1.388 x 10-13 | 0.243 | 4.16 x 10-10 |

Tabla 3: Desviación promedio de resultados obtenidos de Zapata y Algor para el clavo de olor usando CO2 de extracción a 64,7 bar y 10 °C. Modelo 3D.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *C exp.* | *C Zapata* | *CM Algor* | *%er Zapata(%)* |  *%er Algor(%)* |
| 0.18 | 0.16 | 0.181 | 11.1 | 0.6 |
| 0.19 | 0.18 | 0.19 | 5.3 | 0 |
| 0.20 | 0.20 | 0.201 | 0 | 0.5 |
| 0.21 | 0.21 | 0.212 | 0 | 0.1 |
| 0.22 | 0.22 | 0.218 | 0 | 0.9 |
| 0.23 | 0.23 | 0.228 | 0 | 0.9 |
| 0.24 | 0.23 | 0.243 | 4.2 | 1.3 |
|  |  | Promedio | 2.9 | 0.6 |

Fig. 2: Concentración v/s longitud para el clavo de olor a 64.7 bar y 10 °C.

Fig. 3: Difusividad v/s concentración para el clavo de olor a 64.7 bar y 10 °C.

Fig. 4:Concentración v/s longitud (modelo 3D) para el clavo de olor a 69.7 bar y 20 °C

Fig. 5: Difusividad v/s concentración (modelo 3D) para el clavo de olor a 69.7 bar y 20 °C

Tabla 4: Concentración C y coeficiente de transferencia de materia por convección (mm/h), para una difusividad de 2.22x10-9 m2/s.

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| C | 0.18 | 0.19 | 0.20 | 0.21 | 0.22 | 0.23 | 0.24 |
| hm  | 100 | 10 | 3 | 1.5 | 0.8 | 0.6 | 0.5 |

**CONCLUSIONES**

A partir de los resultados obtenidos, se pueden indicar las siguientes conclusiones: 1) El estudio muestra que el programa Algor representa una buena herramienta para la simulación y estimación del coeficiente de difusión de materia; 2) Algor permite determinar difusividades para variaciones en diversas variables involucradas en el proceso de extracción; 3) las diferencias entre los valores determinados en este trabajo y los de Zapata se pueden deber a las distintas condiciones de contorno usadas; y 4) la convección natural domina el proceso de transferencia de materia y el coeficiente de difusión es constante a través del lecho.

REFERENCIAS

Bird, R., W. Stewart y E. Lightfoot, “*Fenómenos de Transporte“,* Reverté, México (1964).

Catchpole, O.J. y M.B. King, *“Measurement and Correlation of Binary Diffusion Coefficients in Near-Critical Fluids”*, Ind. Eng. Chem. Res., 33,1828-1837 (1994).

Crank, J, *”The Mathematics of Diffusion“,* Oxford University Press, New York (1964).

Cremasco, M.A, *“Fundamentos de Transferencia de Masa“*, Campinas, Editora da Unicamp, Brasil (1998).

Kong, C.Y. y S. Kagei, “*Infinite Dilution Binary Diffusion Coefficients for Unsaturated Fatty Acids and its Derivatives in Supercritical CO2”,* 6th Int. Symposium on Supercritical Fluids, Versailles-Francia (2003).

Liu, H. y E. Ruckenstein, *“Predicting the Diffusion Coefficients in Supercritical Fluids”*, Ind. Eng. Chem. Res., 36(3), 888-895 (1997).

Razeai, K.A. y F. Temelli, “Using Supercritical Fluid Chromatography to Determine Diffusion Coefficients of Lipids in Supercritical CO2”, J. Sup. Fluids. 17, 35-44 (2000).

Roy, C.B., M. Goto y T. Hirose, *“Extraction of Ginger Oil with Supercritical Carbon Dioxide. Experiments and Modeling”*, Ind. Eng. Chem. Res., 35(2), 607-611 (1996).

Xiao-ning, Y., L.A.F. Coelho y M.A. Mattews, “*Near-Critical Behavior of Mutual Diffusion Coefficients for Five Solutes in Supercritical CO2*”, Ind. Eng. Chem. Res., 39, 3059-3068 (2000).

Zapata, C. y M.A. Meireles, *“The Effective Diffusivity of Clove (Eugenia caryophyllus) Essential Oil in Pressurized CO2 “*, Cienc. Tecnol. Aliment., 17(4), 393-398 (1997).

Zapata, C, “*Determinacao Da Difusividade Mássica Efetiva do Óleo Essencial de Cravo Da Índia (Eugenia caryophyllus), em CO2 Líquido, a Diferentes Condicoes de Pressao e Temperatura”*”, Tesis de Magister, Dpto. Eng. Alimentos, UNICAMP-Brasil (1998).