



Análisis térmico, modelamiento matemático y simulación de un reactor de agitación discontinuo para volumen específico

Thermal analysis, mathematical modeling and simulation of a discontinuous agitation reactor for specific volume

Humberto Rolón-Ortiz^{1a}, Carlos Acevedo-Peñaloza², Yesenia Villamizar-González^{1b}

¹ Grupo de Investigación de Fluidos y Térmicas-FLUTER, Programa de Ingeniería Mecánica, Universidad Francisco de Paula Santander, Colombia. Email: ^ahumbertoalejandrero@ufps.edu.co, ^byeseniavg@ufps.edu.co

² Grupo Investigación en Diseño Mecánico, Materiales y Procesos-GIDIMA, Programa de Ingeniería Mecánica, Universidad Francisco de Paula Santander, Colombia. Email: carloshumbertoap@ufps.edu.co

Recibido: 14 noviembre, 2017. Aceptado: 3 mayo, 2018. Versión final: 19 junio, 2018.

Resumen

El presente trabajo expone el análisis térmico y modelamiento matemático de un reactor de agitación discontinuo. Se implementó una fase de adquisición de datos en cuanto a funcionamiento y utilidad de los reactores de agitación. Posteriormente, se aplicaron los conceptos de termodinámica, mecánica de fluidos, transferencia de calor y transporte de materia para realizar el respectivo análisis térmico y así determinar la energía contenida y transferida en los fluidos utilizados. Por último, se dedujo un modelo matemático en el software EES para comprobar su comportamiento, teniendo en cuenta las variables operativas sometidas a diversos tipos de fluidos. Además, se simuló el entorno físico-químico del reactor para validar los datos calculados y compararlos con los valores experimentales, relacionando la geometría del equipo con las condiciones de trabajo y las especificaciones del producto final.

Palabras clave: mecánica de fluidos; reactor de agitación; termodinámica; transferencia de calor.

Abstract

The present work exposes the thermal analysis and mathematical modeling of a discontinuous agitation reactor. A data acquisition phase was implemented in terms of operation and utility of the agitation reactors. Subsequently, the concepts of thermodynamics, fluid mechanics, heat transfer and matter transport were applied to perform the respective thermal analysis and thus determine the energy contained and transferred in the fluids used. Finally, a mathematical model was deduced in the EES software to check its behavior taking into account the operational variables subjected to various types of fluids. In addition, the physical-chemical environment of the reactor was simulated to validate the calculated data and compare them with the experimental values, relating the geometry of the equipment with the performance conditions and the specifications of the final product.

Keywords: fluid mechanics; heat transfer; stirred reactor; thermodynamics.

1. Introducción

1.1. Reactores químicos

Un reactor químico es una unidad procesadora diseñada para que en su interior se lleve a cabo una o varias

reacciones químicas. Dicha unidad procesadora está constituida por un recipiente cerrado, el cual cuenta con líneas de entrada y salida de sustancias químicas. Se pretende diseñar un reactor con el objetivo de maximizar la conversión y selectividad de una reacción con el menor coste posible. Es por esto que la idea de realizar este

proyecto surge de la necesidad de crear un combustible con componentes biológicos que permita disminuir los efectos adversos de la emisión de gases de invernadero.

Para producir este tipo de biocombustibles, es empleado el método de transesterificación, el cual se fundamenta en la reacción de un triéster de glicerilo (triglicérido) con un alcohol para formar alquil ésteres y glicerol [1]. En pocas palabras, consiste en mezclar diversos fluidos a una velocidad y temperatura determinada para lograr un proceso químico de excelente calidad, reduciendo los costos de operación al mínimo.

La reacción de transesterificación, puede llevarse a cabo por diferentes vías. La más común de ellas es utilizando reactores de tipo Bach. Existen diversas investigaciones realizadas en base a este tipo de reactores en las cuales se evalúan las diferentes condiciones de transesterificación [2], [3], [4]. Las variables típicas de reacción incluyen una relación molar de 6:1 metanol: aceite, agitación vigorosa, temperatura de 60 °C a 90 °C a presión atmosférica y la cantidad de catalizador ronda en el 1%, en peso, de la masa total de la fuente oleosa. Otra vía de transesterificación es la utilización de reactores continuos mediante catálisis heterogénea, que en general resulta más costosa, debido a la fuente de síntesis del catalizador como reactor, además de que requiere largos períodos de reacción [5].

Los reactores químicos tienen como funciones principales: asegurar el tipo de contacto (modo de fluir) de los reactantes en el interior del tanque, para conseguir una mezcla deseada con los materiales reactantes. Proporcionar el tiempo suficiente de contacto entre las sustancias y el catalizador, para conseguir la extensión deseada de la reacción. Permitir condiciones de presión, temperatura y composición de modo que la reacción tenga lugar en el grado y velocidad deseada, atendiendo a los aspectos termodinámicos y cinéticos de la reacción. [6].

En el presente trabajo se han realizado ensayos en un reactor de agitación con las adecuaciones necesarias para convertirlo en un proceso discontinuo. A continuación, se presentan las características físico-químicas de este tipo de sistemas.

1.2. Tipos de reactores

Los más conocidos son los reactores discontinuos, en donde los reactantes se introducen en el reactor, se mezclan, se deja que reaccionen en un tiempo determinado y finalmente se descarga la mezcla resultante. Esta es una operación no estacionaria en la que

la composición va variando con el tiempo, manteniendo la uniformidad en todos los puntos del reactor.

El primero de los dos reactores ideales de flujo estacionario, es el reactor de flujo en pistón. Este reactor se caracteriza porque el flujo es perpendicular a una sección transversal. Asimismo, es ordenado; ningún elemento del mismo se sobrepasa o se mezcla con cualquier otro elemento situado antes o después de él; en realidad, en este reactor puede haber mezcla lateral de fluido, pero nunca ha de existir mezcla o difusión a lo largo de la trayectoria de flujo. La condición necesaria y suficiente para que exista flujo en pistón es que el tiempo de residencia en el reactor sea el mismo para todos los elementos del fluido [7].

El otro reactor ideal de flujo estacionario, se denomina reactor de mezcla completa. Como su nombre lo indica, su contenido está perfectamente agitado y su composición en cada instante del proceso es la misma a lo largo del reactor. Por consiguiente, la corriente de salida de este reactor tiene la misma composición que la del fluido contenido en el mismo [8].

1.3. Procesos continuos y discontinuos

Un proceso discontinuo o por lotes se da cuando los reactivos son precargados y se vacían cuando la reacción se ha completado.

La ventaja clave de este tipo de procesos es la flexibilidad. Por eso se usan principalmente en la industria química, alimentaria o farmacéutica, donde es muy importante ofrecer una gran variedad de productos e introducir otros nuevos rápidamente, ya que estos sectores industriales operan en mercados altamente competitivos.

Los equipos de procesos discontinuos se diseñan para manejar un amplio rango de operaciones y productos. La flexibilidad permite manufacturar nuevos productos sin tener que construir una nueva planta o sin tener que hacer grandes cambios de equipos. Esta flexibilidad también permite producir pequeñas cantidades de un producto sin arriesgar toda la productividad [9]. En los procesos discontinuos una desviación excesiva de la reacción, suele ser difícil de controlar. Por ello, frecuentemente para reacciones exotérmicas y para las de dos fases (gas-líquido) se utiliza una operación semidiscontinua. En éstas, sólo una parte de los reactivos son cargados inicialmente y el resto son añadidos de forma controlada. De este modo, si ocurre una pérdida de control es posible detener la carga de reactivos. Los procesos por lotes (discontinuos) se caracterizan por trabajar en condiciones

no estacionarias; es decir, que durante la operación la composición y la generación de calor cambian [9].

Por otro lado, los procesos continuos se suelen realizar en recipientes agitados, ya sea de modo simple o en cascada, con tuberías de flujo de descarga. En estos sistemas todos los reactivos son continuamente cargados al reactor y los productos son continuamente descargados. Los procesos continuos se caracterizan por trabajar en condiciones estacionarias, en las que tanto el calor generado como la composición química permanecen constantes durante toda la operación.

Los procesos continuos tienen la ventaja de producir en gran volumen un producto estándar que generalmente proporciona una buena recuperación del capital invertido. Dado que los requerimientos de productos no cambian significativamente el proceso necesitará mínimas modificaciones durante su vida de trabajo para mantenerse competitivo [10].

En la tabla 1, se aprecia una comparación entre los procesos continuos y discontinuos, evaluando diferentes características y variables de producción.

Tabla 1. Comparación procesos discontinuos y continuos

Características	Discontinuo	Continuo
Operación de procesos	Ocurre una secuencia específica	Es continuo, simultáneo
Diseño de equipos, uso	Diseñado para obtener muchos productos	Diseñado para obtener productos específicos
Producto	Cantidad limitada	Flujo continuo
Entorno	Variable, a menudo cambia notablemente entre operaciones	Usualmente, estado fijo con presión, flujo, y cantidades constantes
Intervención del operador	Necesario, regularmente como parte de las operaciones de trabajo	Principalmente, para corregir condiciones anormales.

Fuente: elaboración propia.

2. Metodología

2.1 Factores de diseño

Para elegir un reactor es conveniente realizar un balance técnico-económico completo, teniendo en cuenta elementos como el tipo de operación y el mantenimiento a realizar, además se debe elegir la configuración más

apropiada que dependerá principalmente de los factores físico-químicos propios de cada tipo de reacción.

El diseño de reactores tiene como fin seleccionar los elementos técnicos, mecánicos y químicos más apropiados, y ensamblarlos de forma que estos operen eficientemente. Por esto, es necesario conocer tanto la cinética como la termodinámica de las reacciones de interés. Otras disciplinas importantes para el diseño de reactores son la mecánica de fluidos, la transferencia de materia y la transmisión de calor [11].

Para el diseño de un reactor se debe tener en cuenta que las condiciones en éste varían con la posición y con el tiempo, para ello es necesario efectuar la integración adecuada de la ecuación cinética para las condiciones de operación. Se compara en la tabla 2, los diferentes tipos de reactores de acuerdo al régimen de operación y de acuerdo a los principios físico-químicos, resaltando las ventajas y desventajas propias de cada uno.

Tabla 2. Comparación diferentes tipos de reactores

Tipo de reactor	Ventajas	Desventajas
PFR (reactor de flujo pistón)	Bajo inventario. Condiciones estacionarias	Dependencia del proceso. Posibles puntos calientes. Agitación presente solo en mezclas en línea. Difícil de diseñar.
Reactor continuo de mezcla completa	Condiciones estacionarias. Presenta herramienta de seguridad. El flujo puede ser diluido para ralentizar la reacción	Gran inventario. Difícil de enfriar grandes masas. Problemas de precipitación. Bajo rendimiento global.
Reactor discontinuo	Presenta herramienta de seguridad.	Reacciones exotérmicas difíciles de controlar. Grandes inventarios. Todos los materiales presentes en el proceso.
Reactor semidiscontinuo	Velocidad de adición controlable. Reacción exotérmica controlable.	Temperatura de inicio crítica (si es muy baja, se acumulan reactivos). Problemas de precipitación.

Fuente: elaboración propia.

El punto de partida para el diseño de un reactor es un balance de materia propio del reactante (o producto) a utilizar, sobre determinado volumen de control.

$$\left(\begin{array}{c} \text{entrada de} \\ \text{reactante al} \\ \text{volumen de} \\ \text{control} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{salida de} \\ \text{reactante de} \\ \text{volumen del} \\ \text{control} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{desaparicion} \\ \text{de reactante} \\ \text{por reaccion} \\ \text{quimica} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{acumulacion} \\ \text{de reactante} \\ \text{en el volumen} \\ \text{de control} \end{array} \right)$$

En las operaciones no isotérmicas debe agregarse también el balance de energía, que está relacionado con el término de reacción química, ya que el calor generado o absorbido es proporcional a la extensión de la reacción. No obstante, para el presente trabajo estos aspectos no serán tomados en consideración, asumiéndose que se trabaja en condiciones isotérmicas [11].

El reactor del caso de estudio es de tipo tanque agitado, envuelto por una camisa exterior que permite el calentamiento o enfriamiento de la masa reaccionante según convenga. Figura 1. Este tipo de reactores es ampliamente utilizado en industrias con producciones pequeñas, en las que el coste de operación y el tiempo muerto representan solamente una pequeña fracción del coste unitario del producto. Es por eso que abastecen el mercado de los bienes de alto valor añadido como los correspondientes a la industria de la química fina, específicamente en plantas en las que se necesita un completo portafolio de productos.

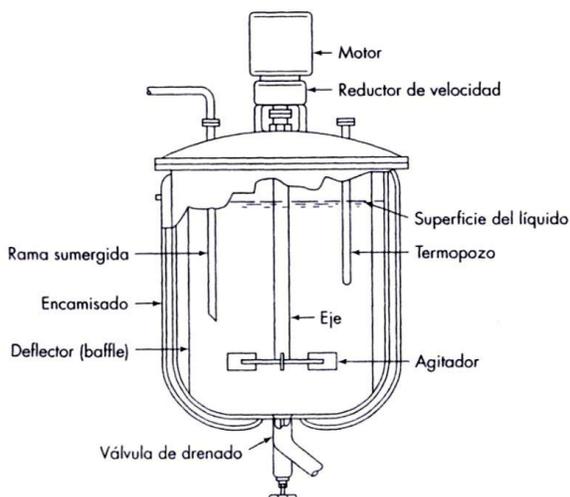


Figura 1. Tanque típico del proceso de agitación.
Fuente: Denbigh y Turner, 1990.

De esta forma, se selecciona el tipo de reactor apropiado para las pruebas matemáticas y la simulación. El dispositivo adecuado es un reactor de agitación

discontinuo, Figura 2, el cual cuenta con una capacidad de almacenaje de 10 litros, esta reforzado de camisa de acero y posee un serpentín como herramienta de disipación de calor en aluminio.

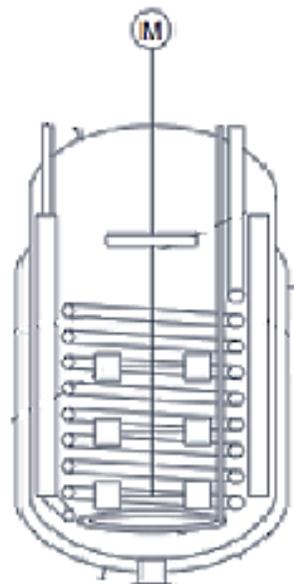


Figura 2. Reactor de agitación discontinuo.
Fuente: Towler y Sinnott, 2013.

2.2. Características del cilindro para un volumen de 10 L

A continuación, en la figura 3, se muestra la discretización de un volumen de control de 10 L, el cual hace parte del caso de estudio.

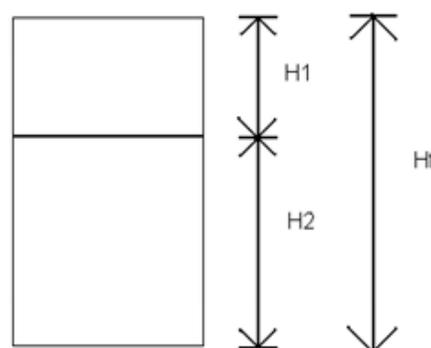


Figura 3. Volumen de control. Fuente: elaboración propia.

Se escriben las distintas expresiones matemáticas que involucran las correlaciones de volumen de trabajo de acuerdo a la cantidad de producto final que se quiere obtener. Las variables incluyen el área de mezclado, de transferencia y de disipación de calor [12].

$$Vt = V1 + V2 \quad (1)$$

$$V2 = A * H2 ; \quad V2 = 10 \text{ l} = 0.01 \text{ m}^3 \quad (2)$$

$$0.01 \text{ m}^3 = \frac{\pi}{4} * (0.2\text{m})^2 * H2$$

$$H2 = 0.32\text{m} = 32\text{cm}$$

Ahora, teniendo en cuenta un factor de seguridad (Fs) de 0.25 en referencia a la altura anterior para el volumen inicial de 10 L se obtiene que H1=8cm. Dicho lo anterior $Ht = 8\text{cm} + 32\text{cm} = 40\text{cm}$.

Entonces:

$$Vt = 0.01 \text{ m}^3 + \frac{\pi}{4} * (0.2\text{m})^2 * 0.08\text{m} = 0.0125\text{m}^3 \quad (3)$$

$$Vt = 10.125 \text{ l}$$

También se analiza la longitud de tubo del reactor, el cual se basa en la cantidad de espirales que rodean el sistema de almacenaje de reactivos y catalizadores. Según esto:

Número de espiras: 6,

Espacio entre espiras: 2.5 cm

$d_{\text{medio intercambiador}} = 14.8 \text{ cm}$

$$L_{\text{tubo}} = (N^{\circ} \text{ espiras} * \pi * d) + 4\text{cm} \quad (4)$$

$$L_{\text{tubo}} = (6 * \pi * 14.8\text{cm}) + 4\text{cm}$$

$$L_{\text{tubo}} \approx 283 \text{ cm}$$

Debido a que el proceso a tratar se basa en reacciones exotérmicas, se genera una cantidad considerada de energía manifestada en forma de calor. Por esto, el reactor se debe diseñar para que el área de recibo sea la necesaria para disipar el calor.

$L_{\text{tubo}} = 283 \text{ cm}$

$dt_{\text{tubo}} = 0.5 \text{ in} = 1.27 \text{ cm}$

$$A = L_{\text{tubo}} * dt_{\text{tubo}} * \pi \quad (5)$$

$$A = 283\text{cm} * 1.27\text{cm} * \pi$$

$$A = 0.1129 \text{ m}^2$$

2.3. Código de programación en EES: modelo matemático

Se describe el código utilizado en el programa EES para solucionar las ecuaciones del modelo matemático, y así compararlas con los resultados de la simulación [13].

Parámetros de entrada y suposiciones de funcionamiento: Pérdida de calor insignificante al rededor del reactor; propiedades constantes; cambios de energía cinética y potencial insignificantes; factores de impureza insignificantes; condiciones de estado estable; condiciones de estado estable.

$T1=273+23; P1=Po\#; T2=273+30; Z_1=0; V_1=0;$
 $Z_2=-0,5; Di=0,00848336; Do=0,0127; L=2,83;$

$K=k_{\text{'Aluminum'}}; \quad 293; \quad \text{OMEGA}=10,472;$
 $r_{\text{rodete}}=0,05$
 $CV(\text{Ethanol};T=T1;P=P1)=cv$
 $CP(\text{Ethanol};T=T1;P=P1)=cpet$
 $CP(\text{Water};T=T1;P=P1)=cpagua$
 $Visc_{\text{eth}}=VISCOSITY(\text{Ethanol};T=318;P=P1)$
 $DENSITY(\text{Ethanol};T=T2;P=P1)=Den_{\text{eth}}$
 $DENSITY(\text{Water};T=280,5;P=P1)=Den_{\text{wat}}$
 $Visc_{\text{agua}}=VISCOSITY(\text{Water};T=280,5;P=P1)$
 $CONDUCTIVITY(\text{Ethanol};T=318;P=P1)=K_{\text{eth}}$
 $CONDUCTIVITY(\text{Water};T=280,5;P=P1)=K_{\text{wat}}$
 $PRANDTL(\text{Ethanol};T=318;P=P1)=pr_{\text{eth}}$
 $PRANDTL(\text{Water};T=280,5;P=P1)=pr_{\text{wat}}$
 $GAMMA=(g\#*DENSITY(\text{Water};T=T1;P=P1))/1000$
 $A_o=PI*Do*L; \quad A_i=PI*Di*L; \quad A_i=A;$
 $A_{\text{serpentin}}=(PI/4)*Di^2$
 $m_{\text{Ethanol}}=10*(1/1000)*DENSITY(\text{Ethanol};T=318;P=P1)$
 $q_{\text{ethanol}}=m_{\text{Ethanol}}*(cpet*((60+273)-(30+273)))$

"Interior del tubo (agua)"

"Aplicando la ecuacion de Bernoulli a todo el sistema"
 $PI/GAMMA+(V_1^2/(2*g\#))+Z_1=(PI/GAMMA)+(V_2^2/(2*g\#))+Z_2$
 $m_{\text{dot}}=DENSITY(\text{Water};T=T1;P=P1)*(V_2*A_{\text{serpentin}})$
 $Re_i=(4*m_{\text{dot}})/(PI*Di*VISCOSITY(\text{Water};T=280,5;P=P1))$

"Flujo turbulento"

"Para hallar el factor de friccion (f) tendremos en cuenta las siguientes restricciones: $0,5 < Pr_{\text{agua}} < 2000$ y $3000 < Re_i < 5*10^6$."
 $f=(0,790*LN(Re_i-1,649))^{(-2)}$
 $Nur_i=((f/8)*(Re_i/1000)*PRANDTL(\text{Water};T=280,5;P=P1))/((1+(12,7*(f/8)^{0,5})*(PRANDTL(\text{Water};T=280,5;P=P1)^{(2/3)-1})))$
 $Nur_i=h_i*Di/CONDUCTIVITY(\text{Water};T=280,5;P=P1)$

"Exterior del tubo (Ethanol)"

$V_{\text{eth}}=OMEGA*r_{\text{rodete}}$
 $Re_o=(DENSITY(\text{Ethanol};T=318;P=P1)*V_{\text{eth}}*Do)/VISCOSITY(\text{Ethanol};T=318;P=P1)$

"Flujo turbulento"

$Re_i*PRANDTL(\text{Ethanol};T=318;P=P1)=Restriccion$
 "Como $Re_i*Pr_{\text{Ethanol}} > 0.2$ Se usa la siguiente ecuacion para hallar el numero de Nusselt"

$Nur_o=0,3+(0,62*Re_o^{(1/2)}*(PRANDTL(\text{Ethanol};T=318;P=P1)^{(1/3)))/(1+(0,4/(PRANDTL(\text{Ethanol};T=318;P=P1))^{(2/3))^{(1/4)}*(1+(Re_o/282000)^{(5/8))^{(4/5))})$

$$Nur_o = h_o * Do / CONDUCTIVITY(Ethanol; T=318; P=P1)$$

$$(1/U * A) = (1/h_i * A_i) + (LN(Do/Di) / (2 * PI * K * L)) + (1/h_o * A_o)$$

"De la tabla 11-2 del libro *Transferencia De Calor de Frank Incropera*, podemos corroborar que el valor del *U* hallado para los fluidos en proceso esta en el rango de 250-700"

$$LMTD = (((333-283) - (303-278)) / LN((333-283) / (303-278)))$$

$$q_{water} = (U/1000) * A * (LMTD)$$

"Para conocer el tiempo en cual se lleva a cabo el proceso de enfriamiento tenemos:"

$$Tiempo = (q_{ethanol} / q_{water}) / 60$$

2.4. Configuración de simulación: Flow Simulation

Como fase inicial, se obtiene el modelo 3D del objeto de estudio. En la tabla 3, se encuentran los datos de la geometría del reactor y del intercambiador de calor. Se destaca la conductividad térmica de cada material, pues es una variable importante al momento de calcular la transferencia de calor por conducción [14].

Tabla 3. Datos de geométricos del reactor y del intercambiador de calor

Características	Reactor	Intercambiador de calor
Altura / Longitud	0.40 m	2.83 m
Diámetro	0.20 m	0.0127 m
Espesor	0.002 m	0.00042164 m
Volumen / área de disipación	0.01251 m ³	0.1129 m ² (6 espiras)
Material	Acero	Aluminio
Conductividad térmica a 45°C	47-58 W/m*K	237 W/m*K

Fuente: elaboración propia.

De acuerdo a los datos anteriores, en la figura 4, se realizó la esquematización del dispositivo en el software CAD Solidworks.

Una vez se define la geometría, esta se carga al módulo Flow Simulation, en el cual se establecen los parámetros de operación del reactor, como composición química de los reactivos y reactantes; sus propiedades termofísicas como densidad, calor específico, conductividad térmica, viscosidad dinámica, y numero de Prandtl [14], como se observan en la tabla 4.

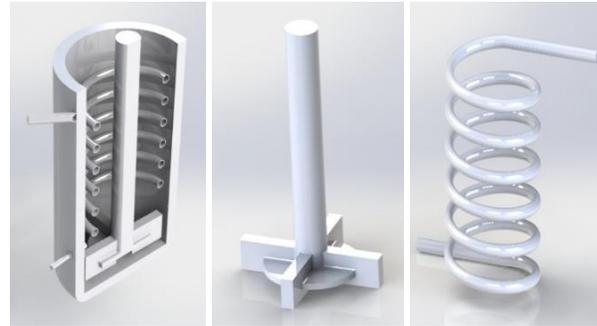


Figura 4. Esquematación del dispositivo: cuerpo del reactor, dispositivo de agitación, intercambiador de calor. Fuente: elaboración propia.

Dentro del sistema global de experimento se definen los límites principales, donde el serpentín constituye el elemento principal tipo *Inlet* que reproduce la entrada de fluido al sistema, como lo hizo Villa-Salazar en las simulaciones realizadas en su proyecto. [15].

Flow simulation tiene la función de pared modificada con la cual admite el modelo de transición laminar-turbulento, además representa la compresibilidad de los flujos automáticamente. El módulo de simulación se basa en el modelo de turbulencia k-ε, el cual describe los flujos laminares, turbulentos y transicionales instintivamente, como lo explica Dassault Systemes en su guía de usuario [16].

Tabla 4. Propiedades físico-químicas de los reactivos y reactantes

Propiedades	Datos alcohol T=45°C	Datos agua T=7.5°C
Temperatura de entrada	60°C	5°C
Temperatura de salida	30°C	10°C
Calor específico	2.48KJ/Kg*K	4.198KJ/Kg*K
Conductividad Térmica	0.1597W/m*K	0.5623W/m*K
Densidad ρ	781.4 Kg/m ³	999.93Kg/ m ³
Viscosidad dinámica μ	0.0007588Pa-s	1413x10 ⁻⁶ Pa-s
Prandtl	13.06	10.53

Fuente. [14].

En un principio, se delimita el volumen de control, y se inicia el módulo de ayudante de simulación "Wizard", seleccionando el sistema de unidades, y los mecanismos de transferencia de calor. Como se ve en la figura 5 y 6, se agrega el régimen de turbulencia al objeto de estudio,

y se definen los fluidos que intervienen en la simulación. También se considera la especificación de las variables de presión y el flujo del fluido dentro del sistema. [17], [18].

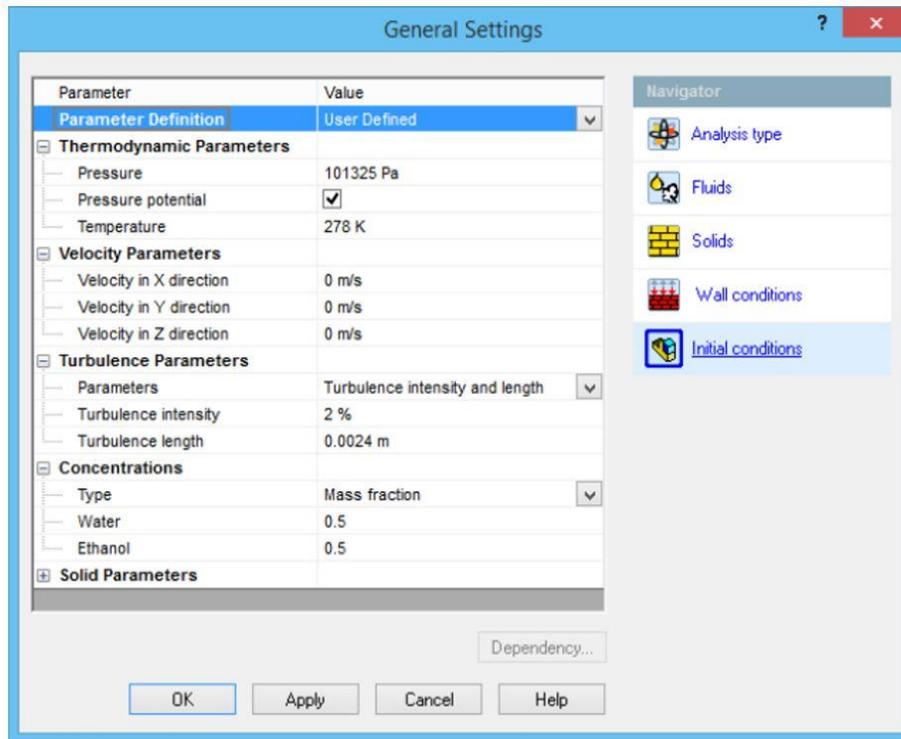


Figura 5. Cuadro de diálogo, configuración del sistema. Fuente: Solidworks 2016.

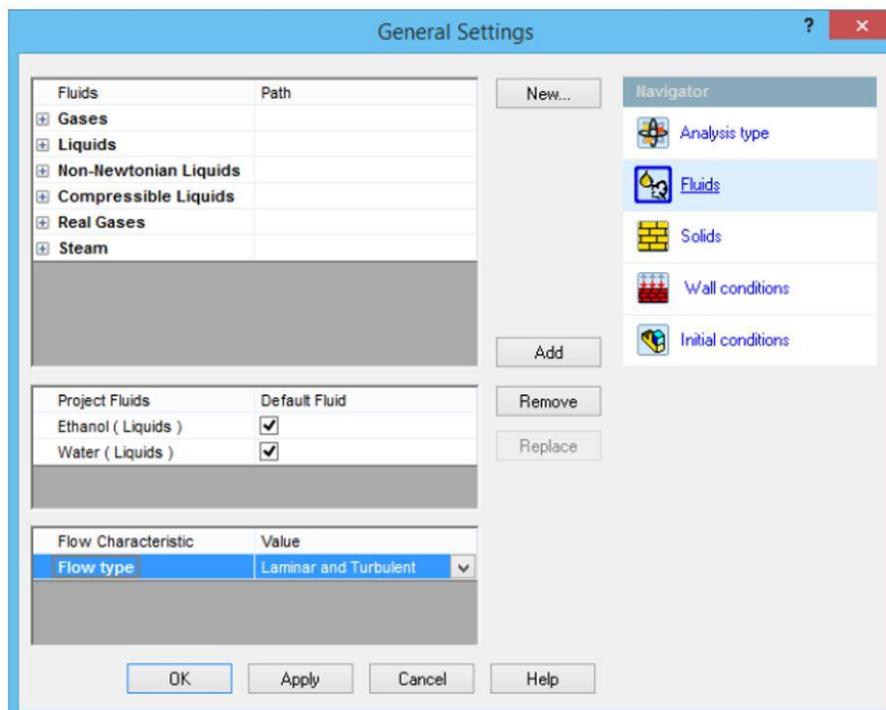


Figura 6. Cuadro de diálogo, configuración de los fluidos de trabajo. Fuente: Solidworks 2016.

3. Resultados

3.1. Modelo matemático

En la figura 7, se muestra el comportamiento del reactor de agitación, específicamente como la temperatura de operación al interior del equipo disminuye en función del tiempo de operación.

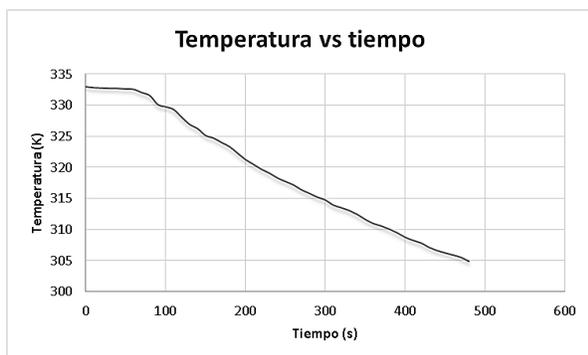


Figura 7. Relación temperatura en función del tiempo.
Fuente: elaboración propia.

De acuerdo a la gráfica, una vez el dispositivo entra en su régimen de trabajo ideal, se tiende a disipar más rápido el calor al interior del tanque. Al iniciar la reacción química, se genera un incremento súbito de temperatura, pues el reactor viene de un estado de reposo actual.

3.2. Simulación

Como fase de análisis de datos, se deben seleccionar principalmente las variables que se quieren evaluar. En la figura 8, se muestra cómo se configura esta opción de postprocesamiento desde el módulo de Flow simulation, y se establece un tiempo para observar los resultados en un instante específico.

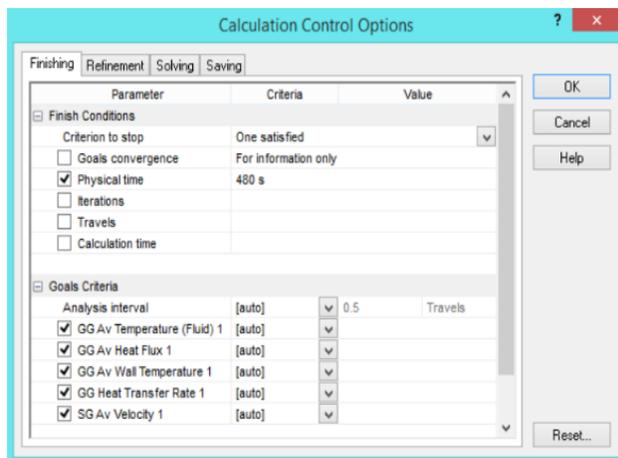


Figura 8. Parámetros de postprocesamiento.
Fuente: Solidworks 2016.

La simulación muestra los resultados de la temperatura al interior del serpentín del reactor en la figura 9.

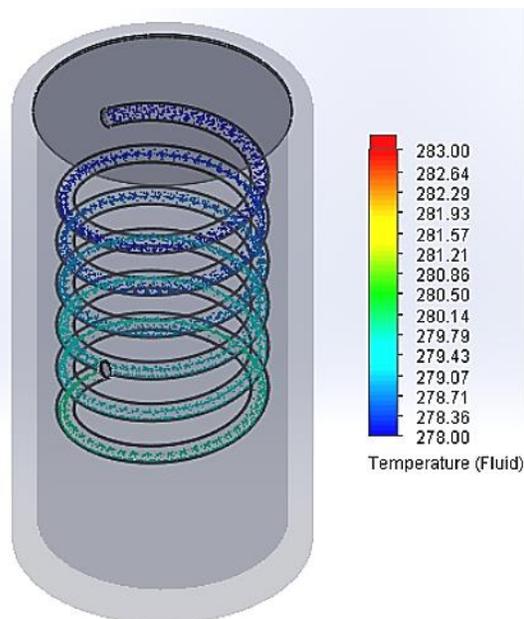


Figura 9. Temperatura en el serpentín del reactor.
Fuente: elaboración propia.

Además, en la figura 10, se ilustra cómo afecta el calor que disipa el serpentín, a todo el cuerpo del reactor. Se observa la temperatura de todo el equipo en 3 instantes de operación: fase de inicio, a los 240 segundos de operación y a los 480 segundos.

4. Conclusiones

Se evidencia un buen desempeño por parte del reactor de agitación discontinuo, además se demuestra que es el dispositivo adecuado para lograr una mezcla óptima de acuerdo al producto final que se quiere obtener.

El modelo matemático y la simulación presentan resultados similares, específicamente en el comportamiento de la temperatura a lo largo del ciclo de operación del reactor. En la fase inicial se alcanza un pico de 333 K al interior del dispositivo. Conforme pasa el tiempo, la temperatura disminuye constantemente, para ser precisos, a los 280 segundos está por debajo de los 240 K, y a los 480 segundos ha descendido hasta el rango de 305 K.

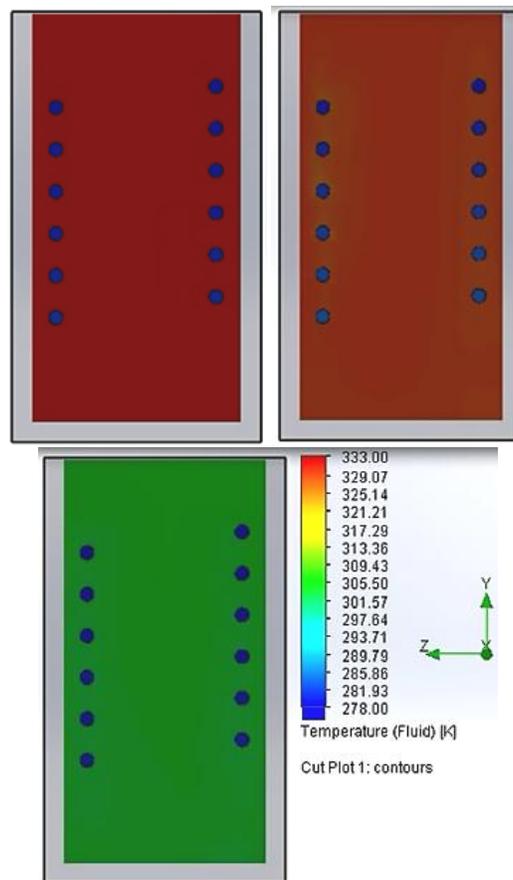


Figura 10. Temperatura al interior del reactor: Fase inicial, 240s de operación, 480s de operación respectivamente. Fuente: elaboración propia.

El desempeño del intercambiador de calor es el adecuado, pues en la base del cilindro no se superan los 280 K, rango apropiado para que los fluidos de operación puedan reaccionar correctamente en las fases adecuadas y no rompan sus enlaces químicos antes de tiempo.

Este método es el indicado para diseñar reactores de agitación, pues se logró una metodología matemática, partiendo de premisas prácticas o experimentales y validadas a través de software asistido por computadora.

5. Agradecimientos

El grupo de trabajo desea agradecer al departamento de Fluidos y Térmicas de la Universidad Francisco de Paula Santander, por poner a nuestra disposición el laboratorio de plantas térmicas. Además, se hace una mención especial a los alumnos Andrés Báez, Leopoldo Valero y Marcos Duarte del programa de ingeniería mecánica por

su cooperación en la elaboración de las pruebas y en el posterior análisis de datos.

Referencias

- [1] G.Castellar, E.R.Angulo, B.M.Cardozo, “Transesterification vegetable oils using Heterogeneous catalysts”, *Prospect*, Vol 12, N° 2, pp. 90-104, 2014. Disponible en: <http://www.scielo.org.co/pdf/prosp/v12n2/v12n2a10.pdf>
- [2] T. Leevijit, C. Tongurai, G. Prateepchaikul, W. Wisutmethangoon, “Performance test of a 6-stage continuous reactor for palm methyl ester product ion”, *Bioresource Technology*, Vol 99, pp. 214–221, 2007.
- [3] S.D. Romano, E. González Suárez, M.A. Laborde, “Combustibles Alternativos”, Ed.1era. Buenos Aires, Argentina. *Ediciones Cooperativas*. 2005.
- [4] M. Fangrui, A. Milford, Hanna, “Biodiesel production: A Review”, *Bioresource Technology*, Vol 70, pp. 1-15. 1999.

- [5] S. Furuta, H. Matsushashi, K. Arata, "Biodiesel fuel production with solid amorphous-zirconia catalysis in fixed bed reactor", *Biomass and Bioenergy*, Vol 30, pp. 870-873. 2006.
- [6] W.G. Morales, P. Dagnino, A. Diaz, N. Polich, A. Sequeira, E. Chamorro, "Proceso semicontinuo en la transesterificación de triglicéridos de semilla de algodón", Grupo de Investigación en Química Orgánica Biológica (QUIMOBIO). Pp. 1-8. 2014. Disponible en: <https://www.researchgate.net/publication/267234769>
- [7] K.G. Denbigh, J.C. Turner. "Introducción a la teoría de los reactores químicos". Editorial Limusa. México. pp. 83-99. 1990.
- [8] M. Bayas, "Diseño y construcción de un reactor continuo de mezcla completa". Trabajo de grado de Ingeniero Químico. Ecuador. Facultad de Ciencias. Escuela Superior Politécnica de Chimborazo. 2011. Disponible en: <http://dspace.esPOCH.edu.ec/handle/123456789/1968>
- [9] M. Dolors Grau Vilalta. "Estudio del comportamiento de reactores discontinuos y semicontinuos: modelización y comprobación experimental" Universitat Politècnica De Catalunya. Director: Lluís Puigjaner Corbella. 1999. Disponible en: http://www.tdx.cat/bitstream/handle/10803/6463/02_grauVilalta_capitol_1.pdf;jsessionid=D7342C7FADDC5E1B0DBD4090299A32D7?sequence=2
- [10] C. Hernández Pedrera, M. Rivera Soto, R. Matos Durán, Y. Piñó Cuenca. "Estudio de sensibilidad paramétrica en reactores continuos con agitación". Facultad de Ingeniería Química, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba. RTQ vol.34 no.1. 2014. Disponible en: http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2224-61852014000100006
- [11] W. McCabe, J. Smith, P. Harriott. "Operaciones unitarias en ingeniería química". Sección III y IV. Editorial McGraw Hill. Séptima edición. México. 2007.
- [12] D. Kern. "Procesos de transferencia de calor". Trigésima primera reimpresión. Traducido por Ing. Nicolás Marino Ambrossi. Mc Graw Hill Book Company, Inc. 1999.
- [13] S. A. Klein. *Handbook Engineering Equation Solver* EES. F-Chart Software. 2016.
- [14] F. Incropera. "Fundamentos de transferencia de calor". Cuarta edición. Traducido por R. Cruz, Investigador Fundación Javier Barros Sierra. México. Prentice Hall. 1999.
- [15] D. Villa, D. Hincapié, y E. Torres, "Simulación computacional de la transferencia de calor en herramientas usadas en soldadura por fricción-agitación," *Rev. UIS Ing.*, vol. 14, no 2, p.p. 19-26, 2015. DOI: <https://doi.org/10.18273/revuin.v14n2-2015003>
- [16] Dassault Systemes. *Guia de usuario Solidworks Flow Simulation*. 2016.
- [17] G. Valle-Tamayo, L. Valbuena-Luna, C. Rojas-Beltrán, M. Cabarcas-Simancas, "Modelo numérico para el análisis y el diseño de redes de tuberías para flujo bifásico," *Rev. UIS Ing.*, vol. 17, no. 2, pp. 201-214, 2018. DOI: <https://doi.org/10.18273/revuin.v17n2-2018018>
- [18] J. Matsson. *An introduction to SolidWorks Flow Simulation*. Edition 2013. U.S.A. SDC Publications. 2013.