

PATRONES DE FLUJO EN REACTORES QUIMICOS: DESARROLLO DE MODELOS MATEMATICOS Y NUMERICOS BASADOS EN CFD

Cristian D. Bahl ^{a,b}, María C. Gely ^b y Ana M. Pagano ^b

^a *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (CIC)*

^b *Área de Procesos-TECSE, Depto. Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires (UNCPBA), Av. del Valle 5737, 7400, Olavarría, Argentina, apagano@fio.unicen.edu.ar, <http://www.fio.unicen.edu.ar>*

Palabras clave: Patrones de flujo, reactores químicos, CFD, distribución de tiempos de residencia.

Resumen. En el mundo real muchas veces el comportamiento de los reactores químicos es muy diferente del que describen los modelos ideales. Las desviaciones del comportamiento ideal pueden originarse por la formación de canalizaciones, recirculación o por formación de zonas estancadas. El conocimiento del comportamiento de los reactores reales permite ajustar los modelos ideales de manera que puedan describir más realísticamente los procesos químicos. Los problemas del flujo no ideal están íntimamente relacionados con el cambio de escala; la decisión de si ha de ensayarse o no en planta piloto depende del control que se tenga sobre las variables más importantes del proceso. A menudo, el factor no controlable en el cambio de escala es la magnitud de la no idealidad del flujo; con frecuencia este factor difiere ampliamente entre las unidades grandes y las pequeñas; por consiguiente, el desconocimiento de este factor puede conducir a grandes errores en el diseño. Para predecir las conversiones y la distribución de productos en los reactores reales resulta necesario un modelo de patrones de flujo. Una forma de evaluar cuánto tiempo permanece cada una de las moléculas en el recipiente es determinar la Distribución de Tiempos de Residencia (DTR) mediante un método de investigación ampliamente difundido: el método experimental *estímulo-respuesta*. La DTR muestra las condiciones hidrodinámicas que ocurren en los reactores. En base esos resultados se establecen hipótesis que permitan reproducir el comportamiento del reactor químico a través de modelos matemáticos y/o numéricos. Un nuevo y reciente enfoque a este problema es el uso de la dinámica de fluidos computacional (CFD) que permite modelar los patrones de flujo de fluidos contribuyendo a mejorar la comprensión del sistema y a optimizar el diseño. El objetivo de este trabajo es caracterizar la hidrodinámica y desarrollar un modelo matemático y/o numérico (CFD) de un reactor utilizado para la obtención de biodiesel, perteneciente a la Planta Piloto de Reacción de la Facultad de Ingeniería (UNCPBA). Se estudia experimentalmente el comportamiento del flujo del reactor mediante la técnica de estímulo-respuesta, utilizando una solución patrón salina coloreada con conductividad eléctrica conocida, evaluándose la respuesta a señales conocidas, bajo diferentes condiciones de operación. Los resultados son evaluados estadísticamente para lograr la caracterización del reactor desde el punto de vista hidráulico a través de modelos matemáticos (combinación de reactores ideales de tanque agitado continuo en serie, de dispersión de flujo) y de modelos numéricos (método de los elementos finitos, CFD), evaluando su aproximación al comportamiento real del reactor para la validación del modelo.

1 INTRODUCCION

En ingeniería de las reacciones químicas, y más precisamente en el diseño de reactores químicos, se consideran dos tipos de flujo ideales importantes: el flujo en pistón o PF (*Piston Flow*) y el flujo de mezcla completa de tanque agitado o CFSTR (*Constant Flow Stirred Tank Reactor*) debido a que son patrones muy sencillos de manejar y que a menudo, alguno de los dos es adecuado para modelar el flujo dentro del reactor sin importar qué proceso se esté diseñando. El PF se caracteriza por ser ordenado, ningún elemento del fluido se mezcla con otro elemento situado antes o después de aquél; 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. El CFSTR se caracteriza por tener composición idéntica en todos los puntos del reactor a cada instante, por lo que su contenido está perfectamente agitado; por consiguiente, la corriente de salida de este reactor tiene la misma composición que la del fluido contenido en el mismo.

En el mundo real, muchas veces el comportamiento de los reactores químicos es muy diferente del que describen los modelos de flujo ideales. Las desviaciones del comportamiento ideal puede originarse por la formación de canalizaciones del flujo, por recirculación del fluido, o por formación de zonas estancadas o muertas. El conocimiento del comportamiento de los reactores reales permite ajustar los modelos ideales de manera que puedan describir más realísticamente los procesos químicos y predecir con mayor exactitud rendimientos y conversiones de una reacción determinada.

Con información apropiada, se podría pronosticar el comportamiento del reactor. La técnica por excelencia para recopilar esta información es el método de *estímulo-respuesta* mediante el uso de un trazador que permite conocer el tiempo que permanece cada elemento de fluido en el recinto reaccionante, o sea, la distribución de tiempos de residencia (*DTR*) necesaria y suficiente para caracterizar la hidrodinámica del reactor. En base a estas mediciones, se establecen hipótesis que permitan reproducir el comportamiento del reactor químico a través de modelos matemáticos y numéricos. Además de utilizarse los modelos matemáticos desarrollados ampliamente en los libros de reactores químicos, hoy en día para el modelado numérico se hace uso de la dinámica de fluidos computacional (CFD) que permite modelar los patrones de flujo de fluidos contribuyendo a mejorar la comprensión del sistema y a optimizar el diseño.

Los problemas de flujo no ideal están íntimamente relacionados con los de cambio de escala, ya que la decisión de si ha de ensayarse o no en planta piloto depende, en gran parte, del control de las variables más importantes del proceso. A menudo, el factor no controlable en el cambio de escala es la magnitud de la no idealidad del flujo y con frecuencia, este factor difiere ampliamente entre las unidades grandes y las pequeñas; por consiguiente, la incertidumbre de este factor puede conducir a grandes errores en el diseño.

1.1 Tipos de flujo no ideal

No todos los reactores de tanque están perfectamente mezclados, y no todos los reactores tubulares exhiben un comportamiento en flujo en pistón. Varios factores influyen sobre el apartamiento de la idealidad del flujo dentro de un reactor. Entre ellos, podemos mencionar el diseño geométrico del reactor, la viscosidad del fluido circulante, la velocidad del mismo y la distribución del relleno en lechos empacados. Cada uno de estos factores contribuye en mayor o menor medida a la formación de distintos tipos de flujo no ideal –tales como canalizaciones, zonas estancas, by-pass– que disminuyen la efectividad del equipo. Las canalizaciones

ocurren cuando parte de los elementos del fluido pasan a través del recipiente más rápido que otros. Las zonas estancadas son determinados lugares del reactor donde el fluido prácticamente no se renueva, disminuyendo el volumen útil del equipo. Estas zonas o espacios muertos pueden tener lugar, por ejemplo en las esquinas rectas de determinados conductos. Finalmente, el by-pass ocurre cuando parte de la corriente de alimentación pasa directamente a la corriente de salida, sin existir mezcla con el resto del fluido del reactor. Estos fenómenos se pueden apreciar en la Fig. 1.

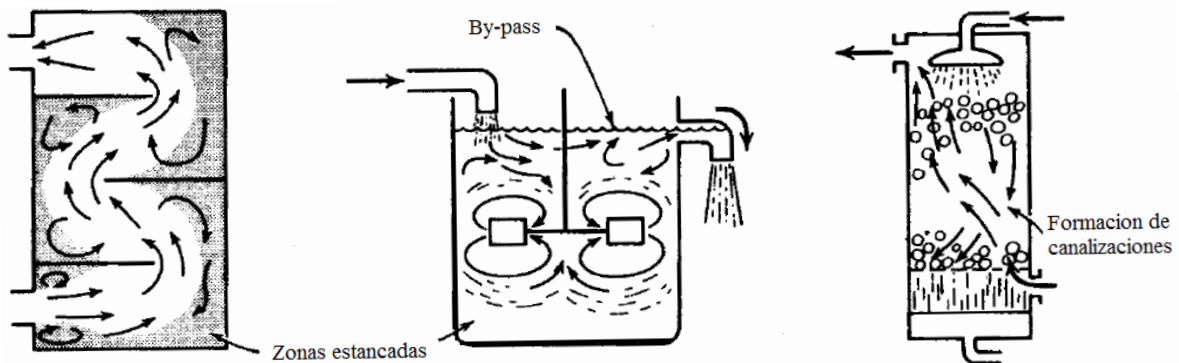


Fig. 1. Tipos de flujo no ideal que pueden presentarse en equipos de procesos (Levenspiel, 1998, 2004).

1.2 Distribución de tiempos de residencia (DTR)

Se denomina “tiempo de residencia” de las moléculas o partículas individuales en el reactor, al tiempo que tarda una molécula desde que entra al reactor hasta que sale del mismo. En un reactor tubular de flujo pistón todas las moléculas tienen el mismo tiempo de residencia, mientras que en un reactor tanque de mezcla perfecta, las moléculas del fluido se mezclan uniformemente con las moléculas que se encuentran en el reactor, de forma que unas saldrán casi inmediatamente, mientras que otras permanecerán más tiempo en el reactor. En conjunto, las moléculas abandonan el reactor tras un periodo de tiempo próximo al tiempo medio de residencia.

La distribución de tiempos de residencia (DTR) se determina experimentalmente mediante técnicas de estímulo-respuesta que emplean trazadores, los cuales se introducen al reactor a una concentración dada conforme a un tipo de señal conocida, determinándose su concentración en la corriente de salida en función del tiempo. Como trazadores se pueden utilizar colorantes, ácidos, bases, sales, isótopos radiactivos, etc, y la forma de analizarlos en la corriente de salida dependerá del tipo de trazador utilizado (absorbancia, pH, conductividad eléctrica, etc.). El estímulo o perturbación que se introduce al sistema también puede ser variado: pulso, escalón, senoide, rampa, al azar, etc. Las más empleadas y más fáciles de interpretar son las señales pulso y de escalón. La señal escalón es aquella en la que la concentración de un trazador en el influente al reactor cambia de un estado estacionario a otro distinto. La señal pulso, en cambio, consiste en inyectar una cantidad relativamente pequeña de trazador a la corriente de alimentación de forma instantánea de forma que se aprecie un pico de concentración en un gráfico de concentración vs. tiempo.

En el caso particular en que la perturbación entrante sea una señal *escalón* de concentración C_0 , se denomina curva F a la representativa de la concentración normalizada (C/C_0) del trazador a la salida del recipiente frente al tiempo (Fig. 2a). Cuando la perturbación en la corriente de fluido entrante es una señal de *pulso* idealizada de trazador, se denomina curva C a la respuesta normalizada del trazador en la corriente de salida frente al tiempo (Fig. 2b).

La DTR es conocida también como distribución de edades a la salida (curva E), y es conveniente representarla en forma normalizada (Fig. 3), tal que $\int_0^{\infty} E \cdot dt = 1$. En recipientes cerrados, las curvas F, E y C están relacionadas entre sí como: $dF/dt = E = C$. Estas relaciones indican cómo las experiencias estímulo-respuesta, empleando entradas tanto escalón como pulso, permiten determinar la DTR.

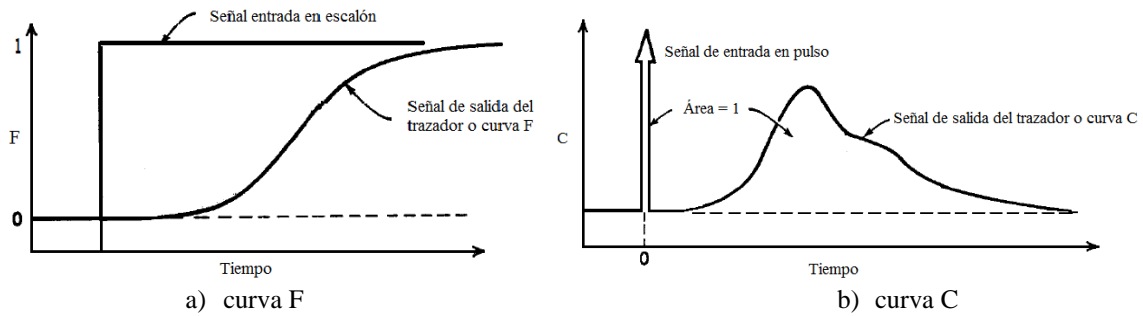


Figura 2. Señal característica aguas abajo, que corresponde a la respuesta de una señal de entrada aguas arriba a) en escalón, b) pulso (Levenspiel, 1998, 2004).

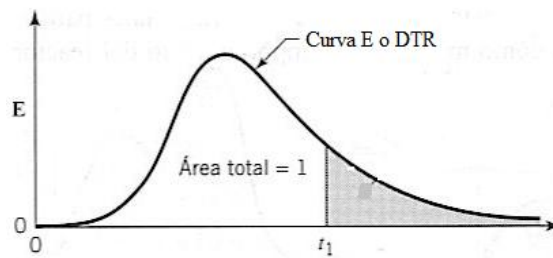


Figura 3. Curva de distribución de edades (Levenspiel, 1998, 2004).

2 MODELOS MATEMÁTICOS DE UN SOLO PARÁMETRO PARA FLUJO NO IDEAL

Pueden emplearse diversos tipos de modelos para caracterizar los tipos de flujo no ideal en los recipientes. En unos modelos –denominados modelos de dispersión– se establece una analogía entre la mezcla en flujo real y la mezcla en los procesos difusionales. En otros, se considera un conjunto de tanques de mezcla ideal combinados, y todavía hay otros en que se suponen varias regiones de flujo conectadas en serie o en paralelo. Algunos modelos son útiles para explicar las desviaciones de los sistemas reales respecto al flujo en pistón (caso de los reactores tubulares y los lechos de relleno); otros describen las desviaciones de los tanques reales con agitación respecto al tanque de mezcla ideal o de mezcla completa, y aún otros pretenden tener en cuenta las desviaciones de los lechos fluidizados y otros dispositivos de contacto. Los diferentes modelos de flujo no ideal varían en complejidad: existen modelos de un parámetro que representan adecuadamente los lechos de relleno o los reactores tubulares; mientras que se han propuesto modelos de dos a seis parámetros para representar los lechos fluidizados. En este trabajo se consideran los modelos uniparamétricos de flujo disperso en pistón y de tanques en serie.

2.1 Modelo de flujo disperso en pistón

Este modelo describe el flujo real en el reactor como una desviación del modelo de flujo

pistón ideal, la cual se cuantifica mediante un único parámetro que se denomina “*módulo de dispersión*”. El modelo de dispersión caracteriza con bastante exactitud el flujo en reactores como lechos de relleno o tuberías largas con flujo laminar, es decir, en aquellos casos que no se encuentran muy alejados del comportamiento de flujo pistón ideal. Este modelo caracteriza el transporte de materia en la dirección axial en términos de una difusividad longitudinal aparente o efectiva, que se superpone al flujo de pistón. El modelo supone también que la velocidad y concentración de los reactantes es constante a lo largo del diámetro de la conducción. La magnitud de la dispersión se considera independiente de la posición dentro del recipiente, por lo tanto no habrá ni regiones estancadas, ni cortocircuitos de fluido. Si se varían la intensidad de turbulencia o las condiciones de intermezcla, las características de flujo pueden variar desde el flujo ideal en pistón hasta el flujo en mezcla completa. En consecuencia, el volumen necesario para el reactor real estará comprendido entre los volúmenes calculados para flujo ideal en pistón y mezcla completa. Como el proceso de mezcla implica un reagrupamiento o redistribución de materia por deslizamiento o formación de remolinos, y esto se repite un número considerable de veces durante el flujo del fluido a través del recipiente, se puede considerar que estas perturbaciones son de naturaleza estadística, como ocurre con la difusión molecular. La ecuación diferencial que rige la difusión molecular en la dirección x viene dada por la ley de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \mathcal{D} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (1)$$

siendo \mathcal{D} el *coeficiente de difusión molecular*, único parámetro que caracteriza al proceso. De modo análogo, las contribuciones a la retromezcla del fluido que circula en la dirección x , se pueden describir por una expresión de forma similar:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2)$$

siendo D el parámetro llamado *coeficiente de difusividad longitudinal*. Esta Ec. (2) puede llevarse a una forma adimensional:

$$\frac{\partial C}{\partial \theta} = \left(\frac{D}{u \cdot L} \right) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial C}{\partial z} \quad \text{con } z = \frac{x}{L}; \theta = \frac{t}{\bar{t}} = \frac{t \cdot u}{L} \quad (3)$$

donde z : longitud adimensional; L : largo del reactor; u : velocidad del fluido; x : distancia desde la entrada; t : tiempo; \bar{t} : tiempo medio de residencia; θ : tiempo adimensional.

El grupo adimensional $(D/u \cdot L)$ es el *módulo de dispersión* del recipiente y es el parámetro que mide el grado de dispersión axial; por lo tanto si:

$$\left(\frac{D}{u \cdot L} \right) \rightarrow \infty \text{ (dispersión grande) se tiende al flujo de mezcla completa.}$$

$$\left(\frac{D}{u \cdot L} \right) \rightarrow 0 \text{ (dispersión pequeña) se tiende al flujo en pistón.}$$

Para una entrada ideal de trazador en pulso, en la Fig. 4 se puede ver la curva E para distintos valores del módulo de dispersión: cuanto más grande es $(D/u \cdot L)$ más asimétrica se hace E y tiende al flujo de mezcla completa, pero cuanto más pequeño, más simétrica es la curva E y tiende al flujo en pistón. Si el grado de dispersión es pequeño, la difusión modifica esta pulsación como se muestra en la Fig. 5, pero la curva del trazador no cambia

significativamente de forma a su paso por el punto de medida, o sea, se mantiene simétrica (durante el tiempo que se está midiendo). En estas condiciones, la solución a la Ec. (3) no resulta difícil y da la curva C simétrica (Ec. 4) que representa una familia de curvas de distribución normal de error de Gauss (Fig. 4):

$$C_{\theta} = \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot (D/u \cdot L)}} \cdot \exp \left[-\frac{(1-\theta)^2}{4 \cdot (D/u \cdot L)} \right] \quad (4)$$

para la cual la media y la varianza son $\bar{t}_{\theta} = 1$ y $\sigma_{\theta}^2 = \sigma^2 / \bar{t}^2 = 2 \cdot (D/u \cdot L)$, siendo σ_{θ} y \bar{t}_{θ} la varianza y el tiempo medio de residencia adimensional, respectivamente. El único parámetro de la curva que indica la Ec. (4) es el módulo de dispersión ($D/u \cdot L$); por lo tanto, a partir de una curva experimental se puede evaluar este parámetro tal como los muestra la Fig. 6.

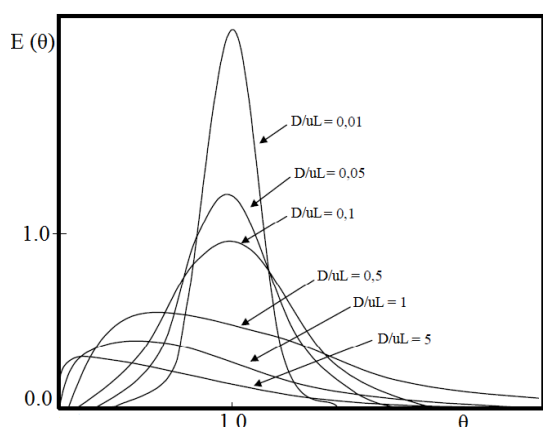


Figura 4. Curvas E para distintos valores del módulo de dispersión.

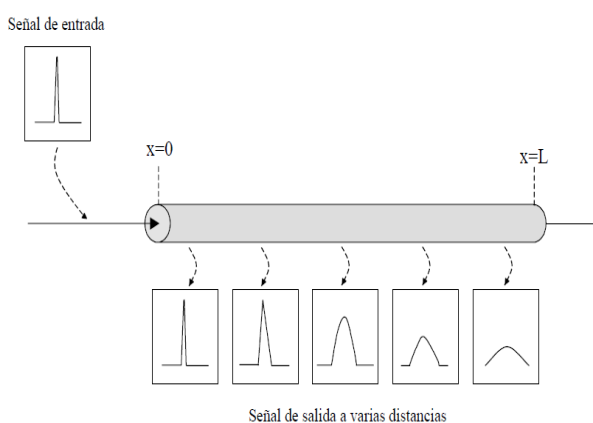


Figura 5. Distribución simétrica del modelo de dispersión en cualquier instante.

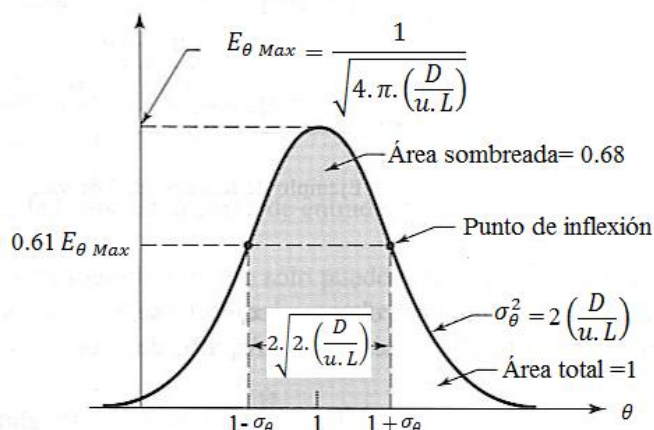


Figura 6. Formas de cálculo para el módulo de dispersión, a partir de una curva E (Levenspiel, 1998, 2004).

2.2 Modelo de tanques en serie

El modelo de tanques en serie es el otro modelo de un único parámetro de aplicación más extendida para representar el flujo no ideal. Este modelo supone que el reactor puede representarse por varios tanques de mezcla completa ideal del mismo tamaño en serie, y el único parámetro es el número de tanques (N), basado en el concepto de que un número suficientemente grande de reactores de mezcla completa se aproxima al flujo en pistón,

cuando N tiende a un valor elevado desde el punto de vista práctico. El número de etapas N puede obtenerse fácilmente la curva E en función del tiempo, generalizando las ecuaciones obtenidas por integración de los balances diferencial de materia para 1, 2, 3...N tanques en serie, llegando finalmente a (Levenspiel, 1998, 2004; Smith, 1991; Fogler, 2005):

$$E(\theta) = N \cdot \frac{N \cdot \theta^{N-1}}{(N-1)!} \cdot \exp(-N \cdot \theta) \quad (5)$$

El número de tanques en serie necesarios para modelar el flujo real se puede calcular mediante el cálculo de la varianza adimensional de un experimento con trazador:

$$N = \frac{1}{\sigma_{\theta}^2} = \frac{\bar{t}^2}{\sigma^2} \quad (6)$$

También, y al igual que en el modelo de dispersión, partiendo de la curva E puede hallarse el número de tanques en serie, a partir de otros puntos característicos de la función de distribución, tal como se muestra en la Fig. 7.

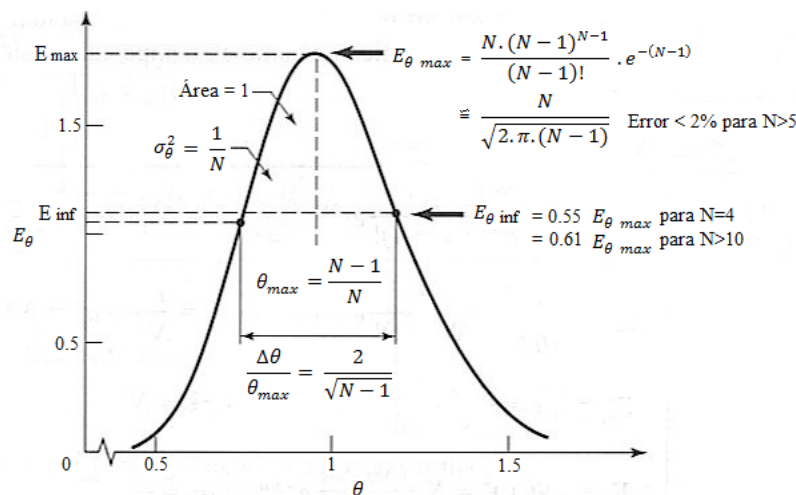


Figura 7. Propiedades de la curva de RTD para el modelo de tanques en serie. (Levenspiel, 1998, 2004).

3 MODELADO CON DINÁMICA DE FLUIDO COMPUTACIONAL (CFD)

Las complejas ecuaciones de la mecánica de fluidos tienen soluciones analíticas sólo para casos muy simplificados; aunque permiten una amplia comprensión de la fluidodinámica, raramente se utilizan en el análisis y el diseño de la ingeniería. Hoy en día, la revolución de la computación en capacidad de almacenaje de datos y realización de operaciones algebraicas ha acelerado el desarrollo de técnicas numéricas destinadas a solucionar las ecuaciones de mecánica de fluidos. Esto ha permitido la aparición de la Dinámica de fluidos Computacional o CFD (*Computational Fluid Dynamics*) que se ocupa de la solución de las ecuaciones fluidodinámicas en computadoras. La metodología CFD es relativamente fácil de aplicar, ofreciendo la posibilidad de tratar configuraciones de flujo bastante complejas. Además, en la CFD se pueden incorporar diferentes procesos simultáneamente.

Una vez planteados los objetivos a lograr, el primero paso del modelado numérico es desarrollar y establecer el modelo matemático (ecuaciones y condiciones de contorno) que describirán los fenómenos relevantes del flujo. La siguiente tarea es escoger un método conveniente por aproximar las ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales; entre ellos, los más importantes se encuentran el método de las diferencias finitas, de los volúmenes finitos y el de los elementos finitos, el cual se utilizó en este trabajo.

4 EXPERIMENTACION EN LA UNIDAD PILOTO DE REACCIÓN (UPR)

4.1 Descripción del equipamiento

La Facultad de Ingeniería de Olavarría (FIO), perteneciente a la Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires (UNCPBA), cuenta en su planta piloto con una unidad piloto de reacción (UPR) compuesta por los siguientes elementos (Fig. 8):

- Reactor tubular (R1) (diámetro de 8 mm, longitud de 40 m) de acero inoxidable AISI 316L, capacidad 2 L, con manta calefactora de acero inoxidable AISI 304L
- Intercambiador de calor (E1) tipo tubo a la salida del reactor
- Depósitos para reactivos (D1, D2) y productos (D3)
- Bombas de engranaje de acero inoxidable para alimentación (G1, G2), con capacidad máxima de 50 L/h
- Bomba de engranaje del producto reaccionado (G3) de acero inoxidable
- Medidores electrónicos de inducción magnética (FI1, FI2) de acero inoxidable, con salida 4-10 mV, para la alimentación del reaccionante
- Indicadores electrónicos de temperatura (TI1, TI2, TI3, TI4), escala 0-200°C
- Líneas de conexión, ejecución de acero inoxidable AISI 316L
- Cuadro eléctrico con interruptor automático diferencial, interruptores de bombas, conmutador automático manual y sinóptico de la unidad piloto.

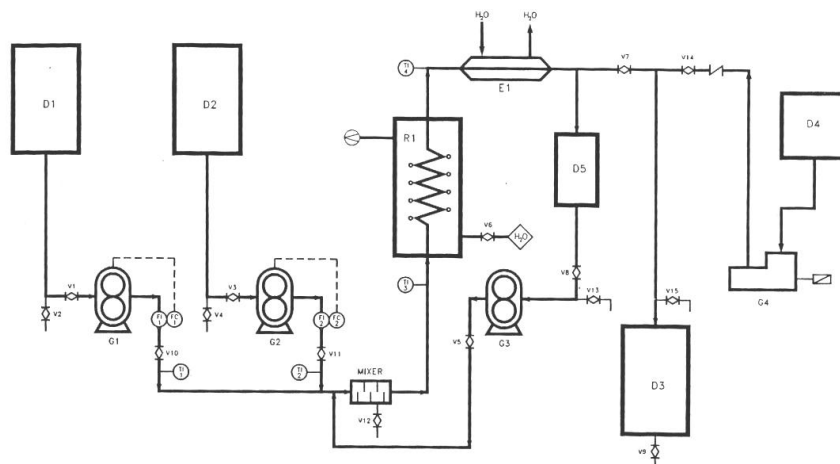


Figura 8. Sinóptico de la UPR de la Facultad de Ingeniería (UNCPBA).

Este equipo es utilizado tanto para las prácticas de reactores de las cátedras de Procesos Químicos I y Laboratorio de Procesos como en proyectos de investigación, llevando a cabo la reacción de transesterificación catalítica para la obtención de biodiesel (Pagano et al., 2007). Actualmente la UPR luce como se muestra en la Fig. 9.



Figura 9. UPR de la Facultad de Ingeniería (UNCPBA) utilizada para el proyecto.

4.2 Trabajo experimental

A fin de estudiar los patrones de flujo en la UPR, en primer lugar se llevó a cabo la calibración de las bombas del desplazamiento de los fluidos, a fin de obtener una expresión matemática para estimar el caudal (L/h) en función del número de vueltas del reóstato (n) del tablero de control, dando como resultado la correlación siguiente:

$$\text{Caudal} = 5.3756 \cdot n - 5.1879 \quad R^2 = 0.9953 \quad (7)$$

Para la determinación experimental de la DTR, se trabajó con la técnica estímulo-respuesta aplicando a la entrada del reactor una señal escalón del trazador (solución de KCl 0.1 N, coloreada con azul de metileno), y evaluando su concentración a la salida a través de la medida de la conductividad eléctrica del efluente, respetando los siguientes pasos:

1. Abrir el circuito de alimentación al reactor correspondiente al depósito D1 manteniendo cerrado el circuito del depósito D2 que contiene el trazador, aguardando que se establezca el régimen estacionario.
2. Cerrar el circuito de alimentación de reactante D1 y simultáneamente abrir el del trazador D2, cuidando de no perturbar el régimen de flujo.
3. A intervalos regulares, recoger muestras en el depósito D3 y determinar la conductividad eléctrica del efluente.
4. Finalizar el experimento cuando se obtenga valor constante para la conductividad eléctrica.
5. Repetir las experiencias para diferentes condiciones de operación (por duplicado).

Este procedimiento permitió obtener la curva F representativa de la concentración del trazador a la salida del recipiente para cada condición experimental.

5 RESULTADOS

5.1 Curvas experimentales

Se obtuvieron experimentalmente las DTR para $1 \leq n \leq 10$ por duplicado. La Fig. 10 presenta algunas de las curvas F (como promedio de duplicados) correspondientes a las condiciones indicadas en la Tabla 1 (régimen laminar); a partir de ellas se obtuvieron las correspondientes curvas E mediante derivación.

Caudal (L/h)	49.1	38.5	27.1
Velocidad en el interior del tubo (m/s)	0.271	0.2125	0.1497
Densidad (kg/m^3)	1005.78	1005.74	1006.08
Viscosidad (kg/m. s)	0.00128	0.00127	0.00136
N° de Reynolds	1703	1342	886
Temperatura promedio ($^{\circ}\text{C}$)	10.75	10.95	8.8

Tabla 1. Parámetros de algunas de las condiciones experimentales ensayadas.

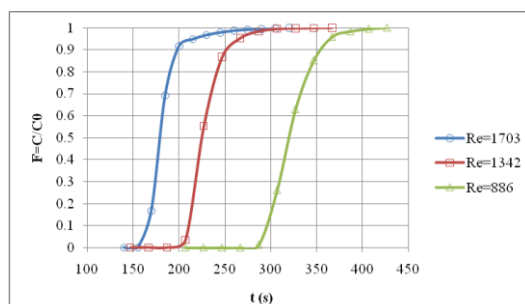


Figura 10. Curvas F experimentales para diferentes condiciones ensayadas.

A partir de las curvas E se obtuvieron los valores correspondientes al módulo de dispersión axial que resultaron entre 0.006382 (Re= 1703) y 0,003164 (Re=886), indicando que el flujo predominante es el flujo en pistón. El error máximo en la estimación del módulo de dispersión axial es menor al 5% cuando el valor del parámetro (D/uL) es menor que 0.01 (Levenspiel, 1998), por lo tanto se puede afirmar que la conclusión del flujo en pistón en la UPR es confiable. Coincidentemente, para aquellas mismas condiciones experimentales de flujo, N resultó entre 76 (Re=1703) y 158 (Re=886) reactores ideales de tanque agitado continuo, es decir, comportamiento de flujo en pistón desde el punto de vista práctico.

5.2 Modelización de la UPR mediante CFD

Selección del modelo matemático

Los fenómenos físicos que intervienen en la determinación del tiempo de tiempos de residencia de la UPR son:

- Flujo de fluido inocuo y flujo de trazador.
- Difusión y convección de materia (trazador).

Teniendo en cuenta esto, se debe elegir un modelo matemático que pueda combinar las ecuaciones de transferencia de materia y transferencia de cantidad de movimiento en estado transitorio para régimen laminar. A este fin, en primer lugar se planteó la resolución de la ecuación de cantidad de movimiento en estado estacionario, acoplando luego los resultados a la resolución del balance material en estado dinámico. **COMSOL Multiphysics (2008)** puede efectuar esta separación del problema físico fácilmente, eligiendo en el módulo de ingeniería química (*Chemical Engineering Module*) las opciones de análisis transitorio para la resolución del problema de transferencia de masa y análisis en estado estacionario con flujo laminar para la resolución del problema de transferencia de cantidad de movimiento. Las ecuaciones que gobiernan estos fenómenos que fueron utilizadas por el software para resolver el problema físico son las siguientes.

- Ecuación de continuidad:
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \cdot v) = 0 \quad (8)$$

donde ρ : densidad del fluido; v : velocidad; t : tiempo.

- Ecuación de convección y difusión de materia:
$$\nabla \cdot (-D_i \cdot \nabla C_i + C_i \cdot v) = R_i \quad (9)$$

donde el subíndice i denota cada una de las especies y R representa el término de reacción (en este caso es nulo).

- Ecuación de cantidad de movimiento:
$$\frac{\partial(\rho \cdot v)}{\partial t} + \nabla \rho v \cdot v = \rho g - \nabla p + \mu \cdot \nabla^2 v \quad (10)$$

(ecuación de Navier-Stokes) donde g : gravedad; p : presión; μ : viscosidad.

Definición de constantes

El siguiente paso para la simulación fue fijar todos aquellos valores que permanecieron constantes: diámetro de la tubería del reactor, densidad y viscosidad media del fluido, concentración inicial del trazador, velocidad media del fluido en la entrada, Re, difusividad longitudinal, temperatura. El parámetro difusividad longitudinal se definió en base al módulo de dispersión axial (D/u·L) determinado a partir de la curva E experimental, para cada una de las condiciones ensayadas.

Diseño de la geometría del dominio

Mediante las herramientas de dibujo asistido (CAD) del software COMSOL Multiphysics

se generó la estructura física del dominio a estudiar como un modelo bidimensional. El comportamiento del fluido se describió en el plano X-Z, ya que la componente axial no representa información para la determinación de la DTR, con lo cual el modelado en 2D tiene la ventaja de reducir la complejidad de cálculo y el tiempo de resolución del software. Las dimensiones relevadas de la UPR se muestran en la [Tabla 2](#).

Dado se desconocen los planos constructivos de las partes encamisadas de la UPR (reactor y mezclador), se propuso un modelo con forma tortuosa ([Fig. 11](#)) para el reactor (ya que su longitud se encuentra totalmente contenida en la camisa calefactora), mientras que el mixer se supuso integrado por cuatro deflectores (baffles) igualmente distanciados, con diferentes longitudes ([Fig. 12a-b](#)), con el fin de estudiar la influencia de su diseño en los resultados simulados.

Parte del UPR	Medida
Tramo entrada	0.05
Diámetro de la tubería	8×10^{-3}
Longitud del mixer	0.15
Diámetro de mixer	0.027
Tramo entrada reactor	0.20
Reactor	40
Diámetro camisa calefactora	0.1718
Longitud camisa calefactora	0.70
Tramo salida del UPR	0.60

Tabla 2. Dimensiones (m) conocidas de la UPR.

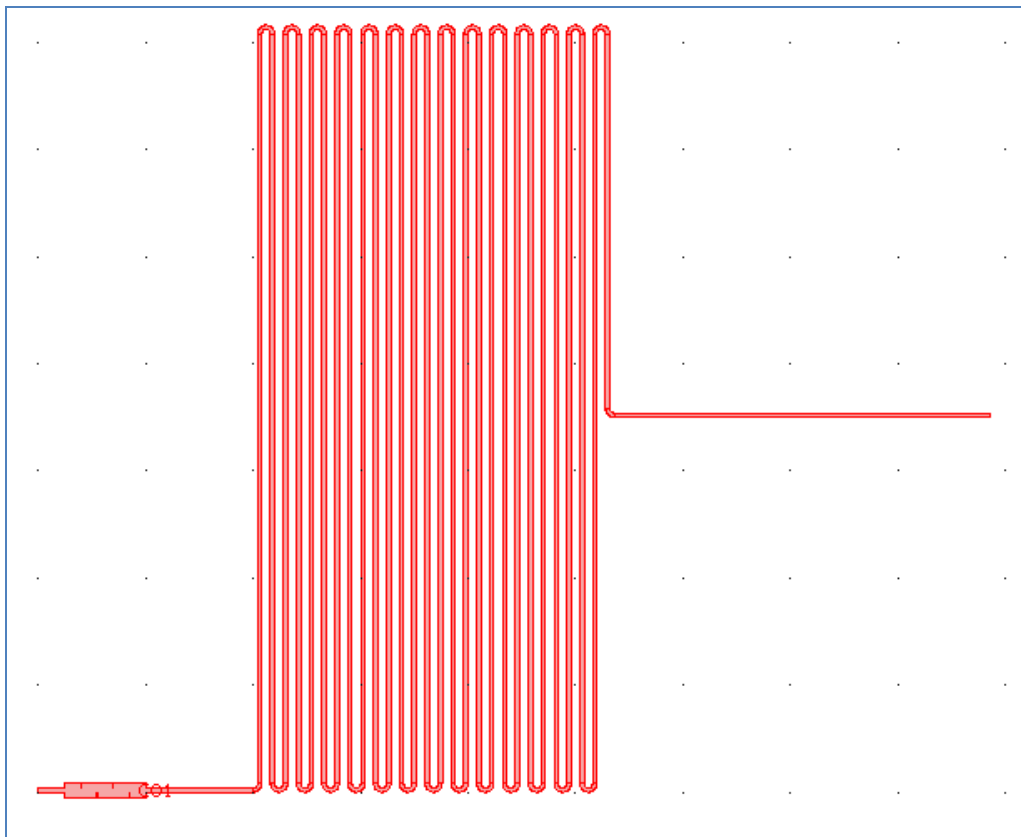


Figura 11. Diseño del reactor tortuoso con el mixer acoplado en la entrada.

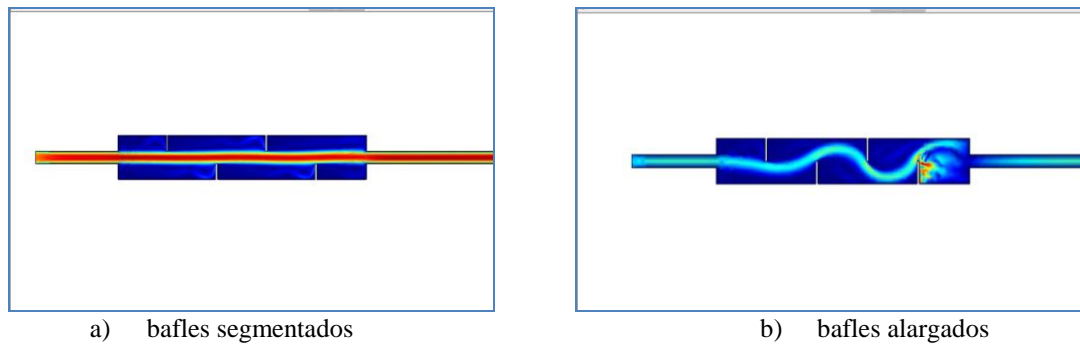


Figura 12. Detalle de los distintos diseños para los deflectores (baffles) del mixer.

Mallado

La generación de la malla, es una de las partes importantes del proceso de simulación en CFD. La exactitud de los cálculos y el tiempo de resolución del modelo, dependen en gran parte del diseño y calidad de la malla. Mallar la estructura quiere decir dividir el volumen que ocupa el fluido en pequeñas celdas. Cada celda será un punto de cálculo. Durante el proceso de mallado, se transforma un dominio continuo en una malla de elementos finitos. Así, cuantas más pequeñas sean las celdas, se dispone de más valores por unidad de área, y con ello el resultado de la simulación se ajustará más a la realidad. Por otro lado, más ecuaciones a resolver tendrá el simulador, con lo que mayor será el tiempo de cálculo al necesitar mayor consumo de memoria del ordenador. Se debe determinar el tipo, la forma y el tamaño de los elementos de la malla. Una buena elección de los parámetros de la malla, minimizará el error en la discretización y dará un equilibrio entre el error de aproximación y el tiempo de cálculo del ordenador. De esta forma se trata de generar una malla óptima, tan fina como sea posible sin que su cálculo tarde tiempos extremadamente largos y su vez, que sea lo más eficiente posible. En la Fig. 13 se puede apreciar el mallado utilizado, cuyas características aparecen en la [Tabla 3](#).

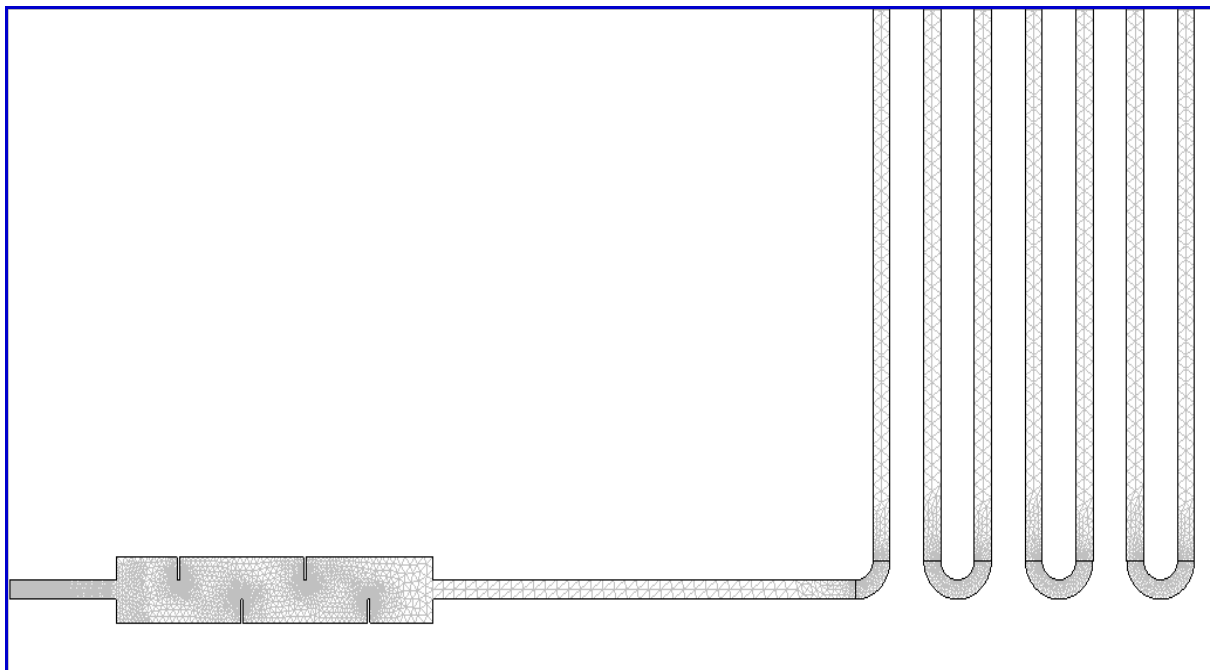


Figura 13. Detalle del mallado utilizado en una sección del modelo CFD.

Número de grados de libertad	222301
Número de puntos malla	20077
Número de elementos	27255
Número de elementos triangulares	27255
Número de elementos cuadriláteros	0
Número de elementos de contorno	13255
Número de elementos de vértices	254
Calidad mínima de un elemento	0.863

Tabla 3. Características del mallado del modelo CFD.

Como se dijo, la efectividad de la malla es muy importante ya que es una medida directa de la calidad del modelo. En este sentido, se analizaron diferentes mallados evaluándose la calidad de los elementos en cuanto a su distorsión y el efecto del tipo de malla sobre los resultados de la simulación, optándose finalmente por la discretización señalada en la Tabla 3.

Condiciones iniciales y de contorno

En el software COMSOL Multiphysics pueden definirse distintos tipos de condiciones de borde como, para el problema de transferencia de cantidad de movimiento, tales como entradas/salidas, paredes, límites abiertos, esfuerzos y bordes simétricos. Para las ecuaciones de movimiento sólo fue necesario definir las siguientes condiciones entradas, salidas y bordes físicos o paredes.

- Condición de contorno de entrada: velocidad media de cada experiencia realizada aplicada al contorno de entrada.
- Condición de contorno de salida: $p=0$ aplicada en la salida.
- Condición de pared: velocidad nula en las paredes.

Como el problema de transferencia de cantidad de movimiento se resolvió en estado estacionario, no fue necesario definir condiciones iniciales.

Para las ecuaciones de masa, las condiciones de contorno incluyen las condiciones de concentración, simetría, flujo convectivo, y flujo (no empleada en la simulación).

- Condición de contorno de concentración: concentración inicial del trazador aplicada en la entrada.
- Condición de flujo convectivo: aplicada a la salida del flujo.
- Condición de simetría: aplicada a las paredes del sistema.
- Condición inicial de concentración: definida como concentración de trazador en el fluido a tiempo cero.

Resolución del modelo

Una vez que se ha definido el modelo matemático, la geometría, condiciones iniciales y de contorno, parámetros constantes, expresiones y mallado, se debe elegir el método mediante el cual se van a resolver las ecuaciones diferenciales con derivadas parciales.

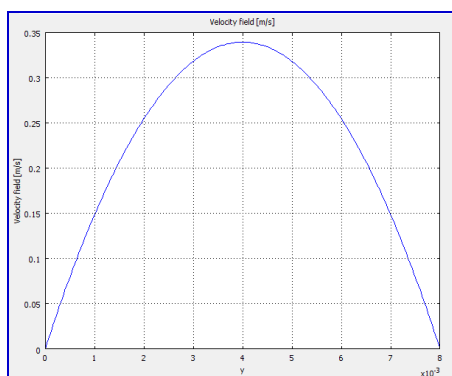
En primer lugar se resolvió el problema de transferencia de cantidad de movimiento (ecuaciones de Navier-Stokes) en estado estacionario, almacenándose los resultados para luego resolver a partir de ellos el problema de transferencia de masa dependiente del tiempo acoplado al de cantidad de movimiento (multifísica).

De la biblioteca de solvers de COMSOL Multiphysics se seleccionó el resolvidor *Direct Pardiso*, un paquete basado en un conjunto de rutinas de alto rendimiento, memoria robusta y

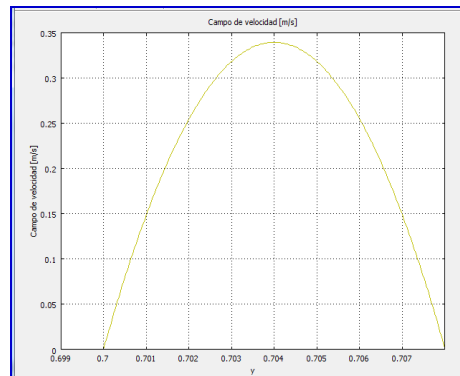
eficiente, ideal para resolver grandes sistemas lineales ralos simétricos y no simétricos del tipo $A \cdot x = B$. El tiempo promedio de resolución fue de 459 s utilizando un procesador Intel Core i3 2.4 GHz con memoria RAM de 3GB.

Postprocesado de resultados

Entre los numerosos resultados de la simulación, en primer lugar se obtuvieron los perfiles de velocidad para una de las condiciones simuladas ($Re=1703$) en planos perpendiculares al eje del mixer ubicados a 0.01 m de la entrada al reactor y a 0.1 m de la salida del mixer, respectivamente (Figs. 14a y b). En estas últimas es posible observar que el flujo se ha desarrollado completamente verificándose que el régimen es laminar, aún para la situación más desfavorable (número de Reynolds más elevado) sin presentar régimen turbulento, ya que el perfil de velocidades tiene la forma parabólica característica de aquel régimen (Bird et al., 1992). También fue posible obtener las distribuciones del campo de velocidad en el dominio, tal como lo muestra en detalle la Fig. 15 (para $Re=1703$).



a) 0.01 m de la entrada al reactor



b) 0.1 m de la salida del mixer

Figura 14. Perfil de velocidades en el plano de corte ubicado 10 cm después del mixer ($Re=1703$).

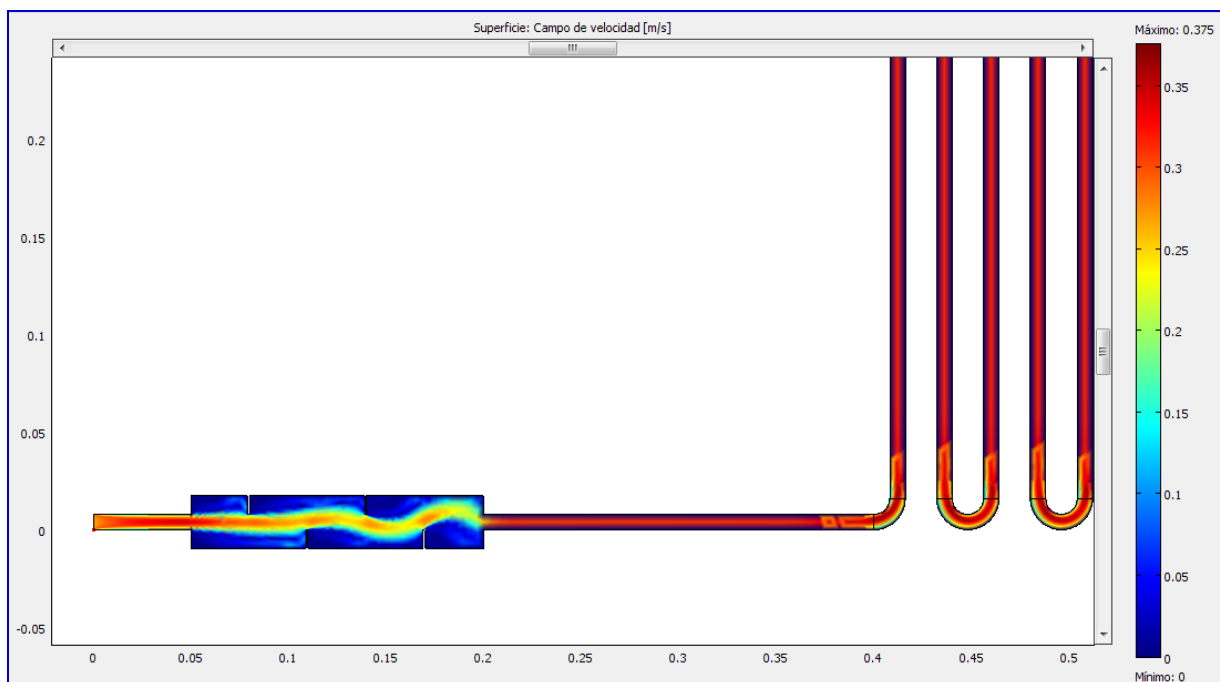


Figura 15. Campo de velocidades para $Re=1703$.

Como resultado de la resolución del problema de transferencia de masa, se obtuvieron las curvas de concentración del trazador en función del tiempo a la salida del reactor, las cuales (normalizadas al dividir los valores por la concentración inicial del trazador) se constituyeron en las curvas F predichas por el software. A modo de ejemplo, la Fig. 16 muestra comparativamente las curvas F predichas para dos modelos de mixer (bafles segmentados: líneas continuas; bafles alargados: líneas discontinuas), para diferentes velocidades de flujo de fluido (números de vueltas del reóstato: 6, 8 y 10), encontrándose resultados muy similares en ambos modelos de mezcladores para las mismas condiciones.

Finalmente, que se compararon las curvas F predichas por los modelos numéricos CFD y por el modelo matemático de tanques en serie (línea violeta) con las observaciones experimentales (puntos), tal como se muestra a modo ilustrativo, en las Figs. 17 ($Re=1703$) y 18 ($Re=1342$).

Se observa que los modelos CFD basados en el enfoque difusional sobre la base del modelo matemático de flujo disperso en pistón son más precisos para describir el comportamiento de flujo de la UPR que el modelo de tanques ideales de mezcla completa en serie. Las Figs. 19, 20 y 21 muestran la correlación entre los valores experimentales de F y los predichos por los modelos, junto con sus correspondientes coeficientes de determinación (R^2) indicando la confiabilidad del ajuste.

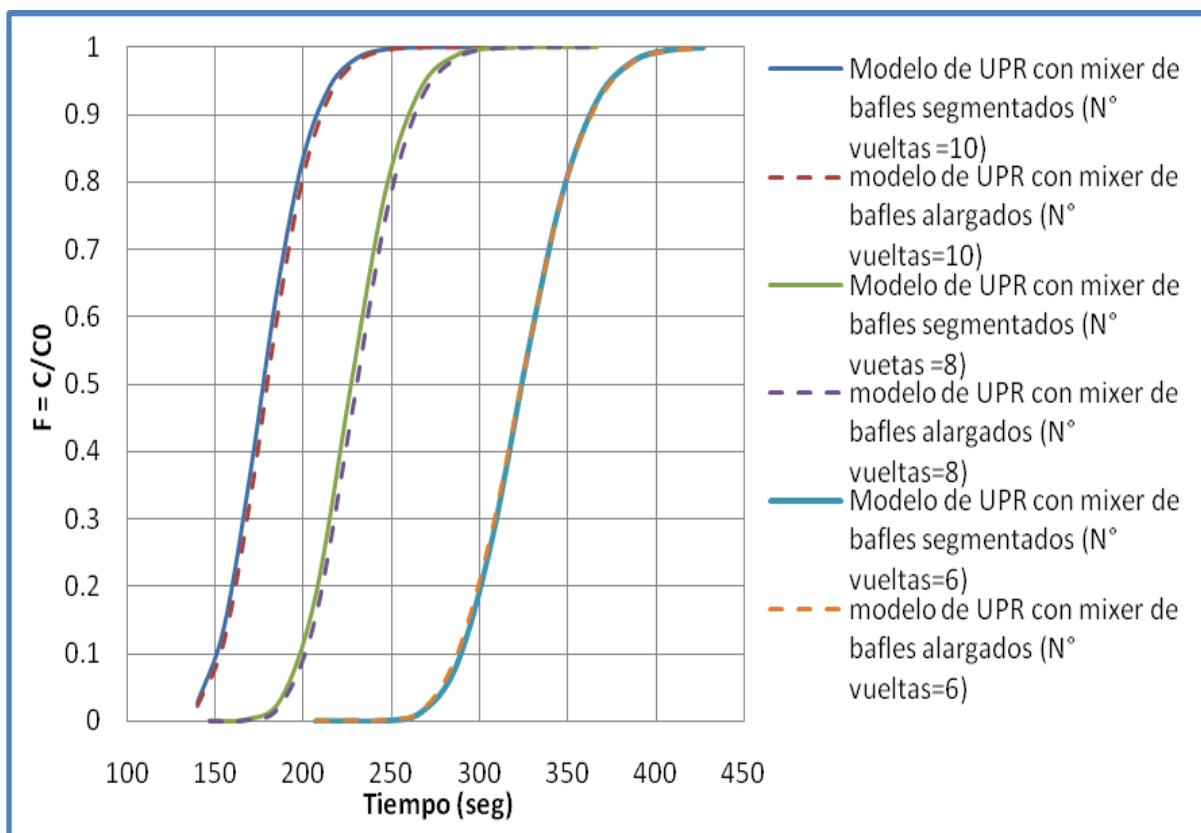


Figura 16. Representación de las curvas F para dos modelos de deflectores (bafles) del mixer.

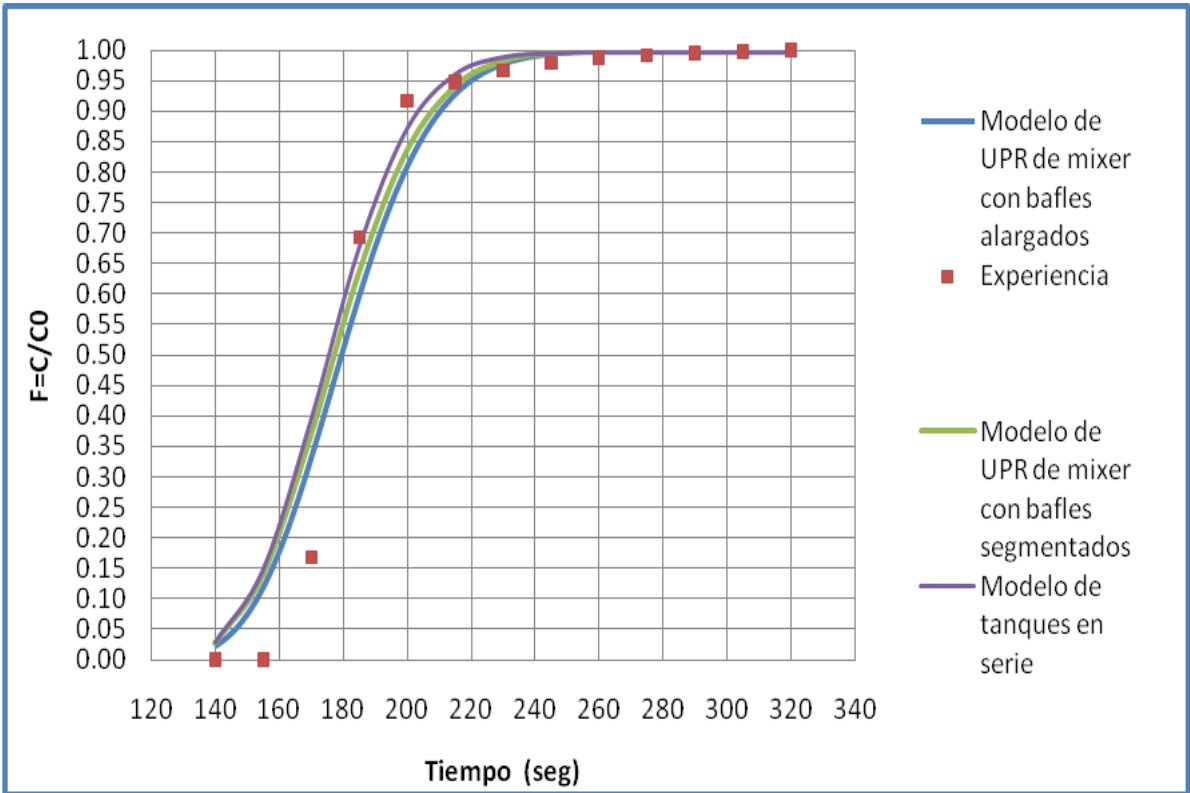


Figura 17. Curvas F predichas por los modelos CFD (azul, verde) y por el modelo de tanques en serie (violeta) comparadas con las observaciones experimentales (puntos) para $Re=1703$.

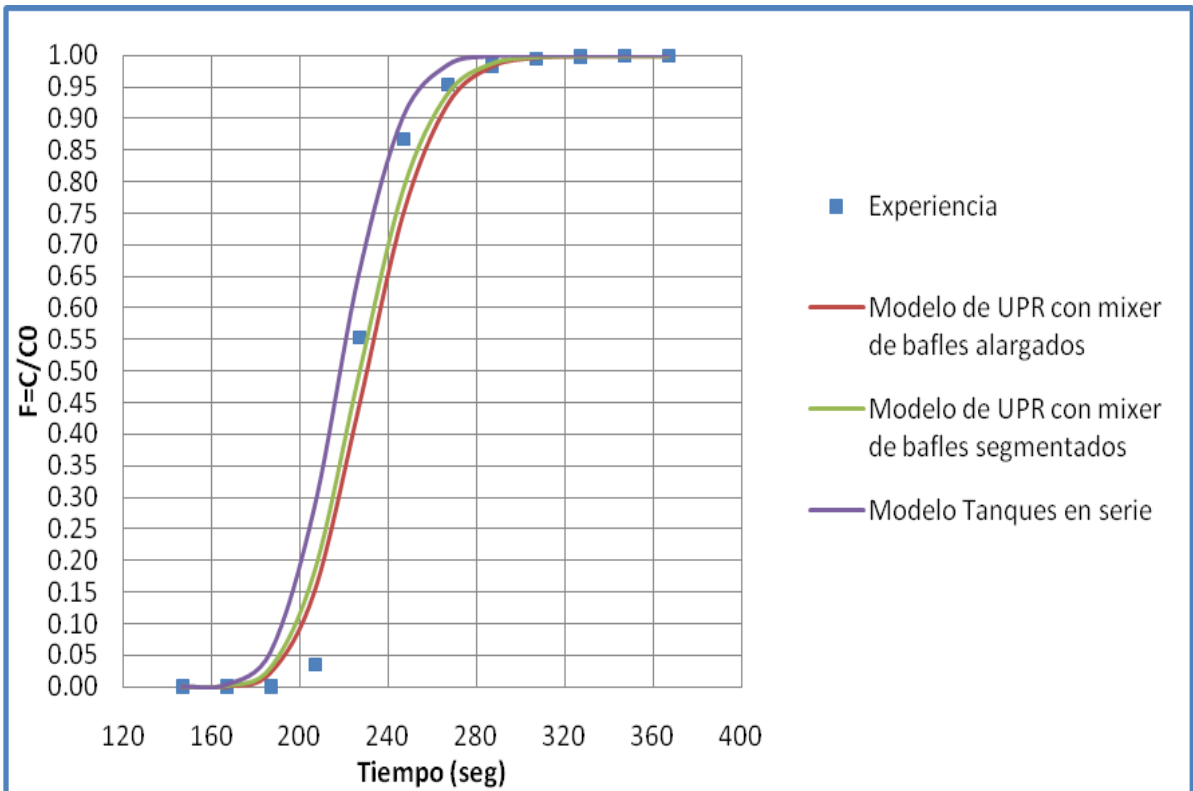


Figura 18. Curvas F predichas por los modelos CFD (roja, verde) y por el modelo de tanques en serie (violeta) comparadas con las observaciones experimentales (puntos) para $Re=1342$.

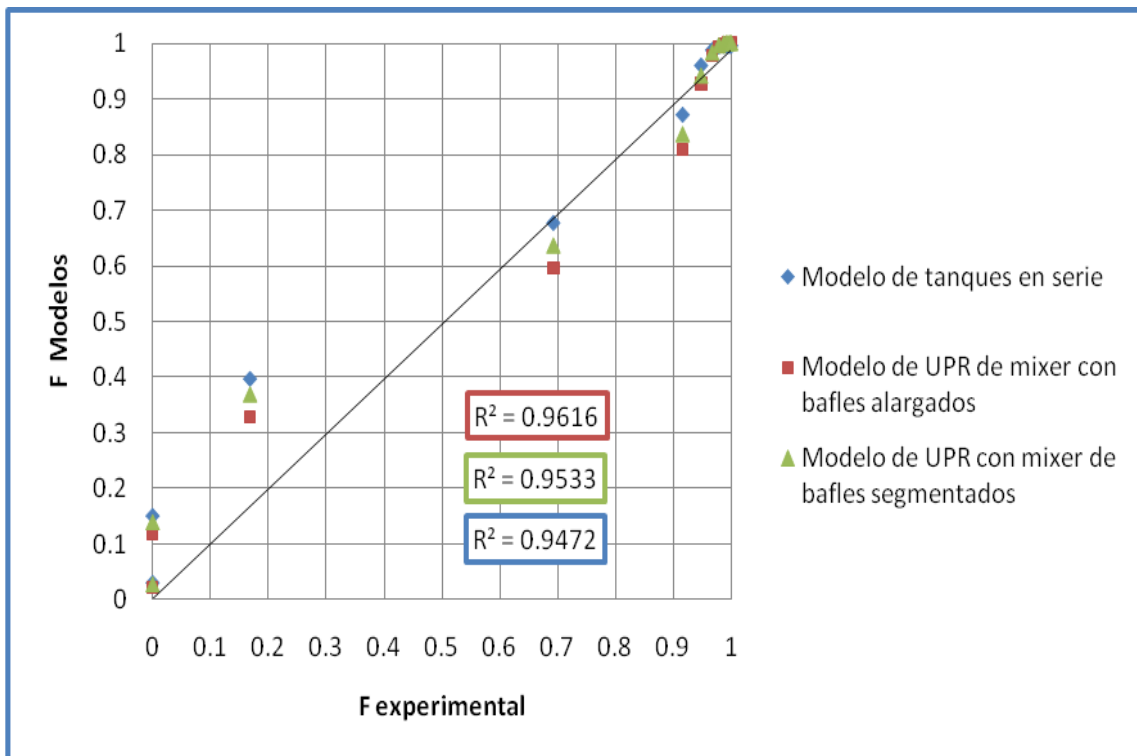


Figura 19. Comparación entre los valores experimentales de F y los predichos por los modelos para $Re=1703$.

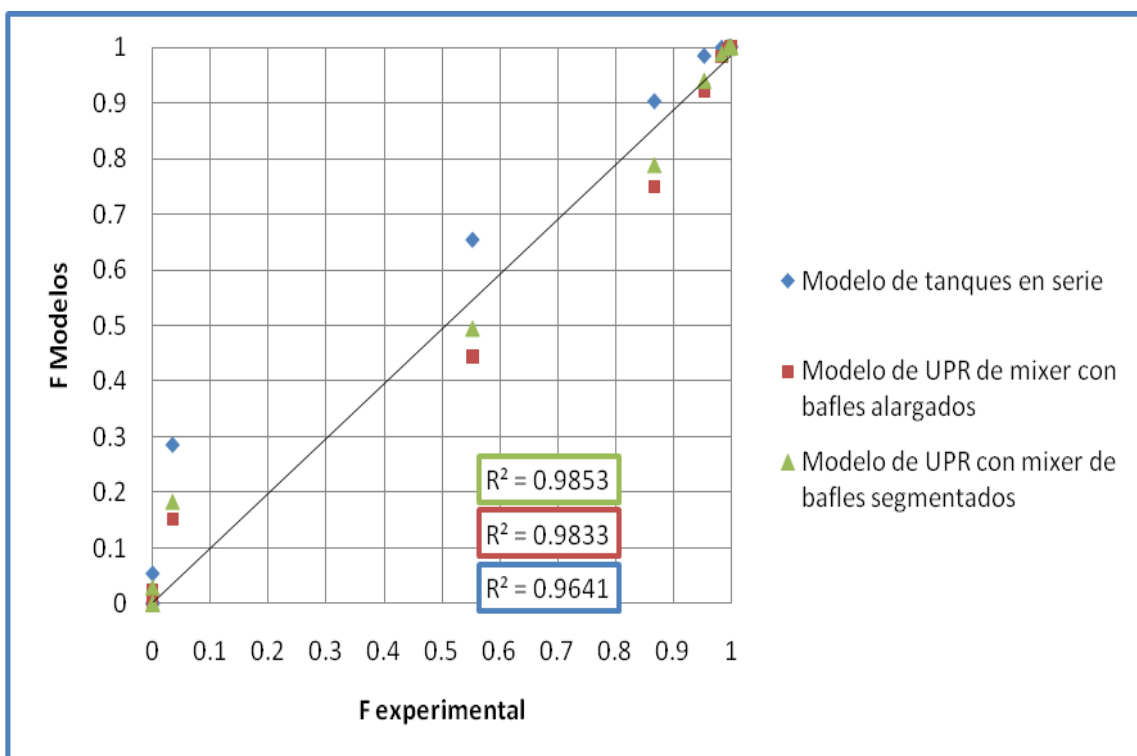


Figura 20. Comparación entre los valores experimentales de F y los predichos por los modelos para $Re=1342$.

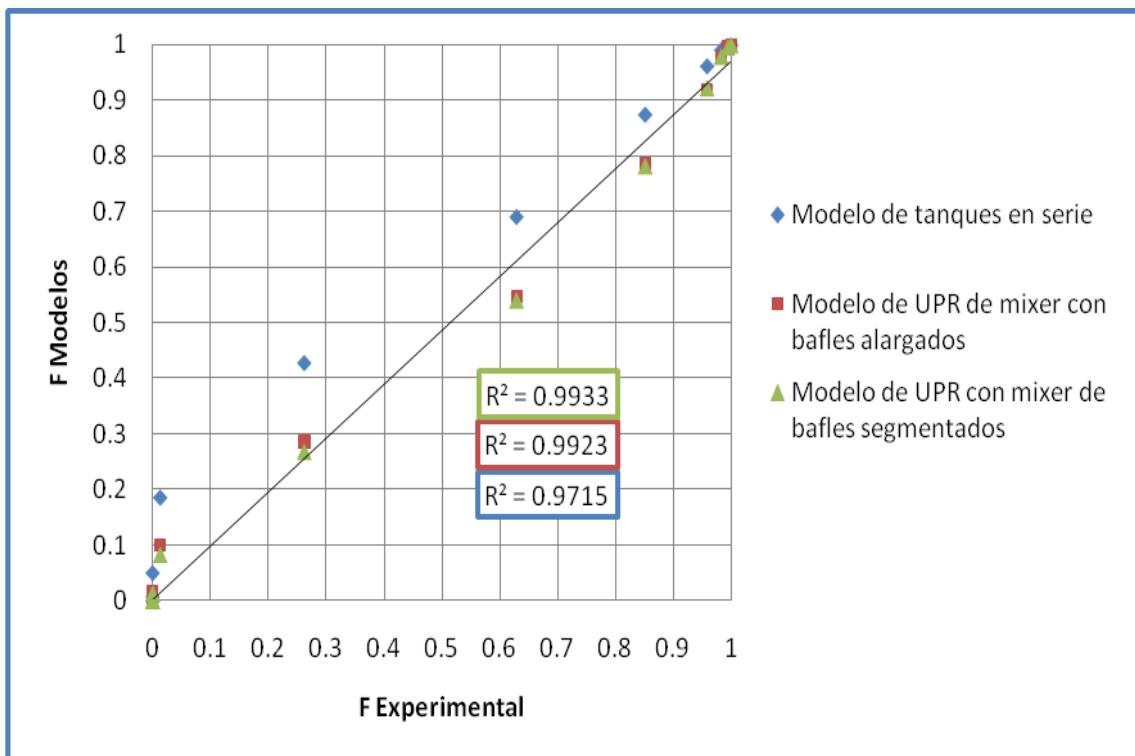


Figura 21. Comparación entre los valores experimentales de F y los predichos por los modelos para $Re=886$.

Del análisis de la Fig. 19 (para altas velocidades de flujo de fluido) es posible deducir que el modelo de UPR de mixer con baffles alargados es el que mejor representa a la serie experimental. No obstante, es prudente mencionar que no existen grandes diferencias entre los dos modelos propuestos para el mixer, por lo que cualquiera de ellos puede ajustar los datos medidos con similar precisión, para las mencionadas condiciones de operación. En el otro extremo, para caudales de fluido bajos (Fig. 21), el modelo de mixer con baffles segmentados describe con más precisión las observaciones experimentales, ya que posee un coeficiente de determinación más elevado y menor dispersión de datos. Mientras tanto, el modelo de tanques ideales de flujo en mezcla completa en serie resulta menos adecuado en todos los casos.

En vista de estos resultados, como trabajo inmediato futuro se prevé que el modelo desarrollado y contrastado con los resultados experimentales sea ensayado para diferentes valores de los parámetros de estabilización y de malla a fin de robustecer la confianza en sus predicciones.

6 CONCLUSIONES

En primer lugar, es preciso remarcar que se pudieron lograr los objetivos planteados y alcanzar buenos resultados a partir de la modelación numérica y matemática de la unidad piloto de reacción, arribándose a conclusiones que coinciden con la lógica y experiencia real, algo que muchas veces no se da, debido a la complejidad de representar mediante un software de simulación, un determinado fenómeno físico en un equipo piloto o industrial.

A partir del análisis de los resultados obtenidos, se puede decir que todos modelos desarrollados son apropiados para la representación de la serie de datos experimentales y, en consecuencia, para caracterizar la hidrodinámica del reactor tubular, ya que no se aprecian grandes diferencias en la comparación de los datos predichos por los modelos. No obstante, se

destaca que a caudales bajos, el modelo de UPR de mixer con baffles segmentados es el que mejor ajusta a la serie experimental, algo que es de esperar, ya que éste modelo propone un escaso mezclado de fluidos. A caudales cercanos a la zona de transición de régimen laminar-turbulento, toma lugar preponderante el modelo de UPR con mixer de baffles alargados, lo que también se preveía, ya que a mayor turbulencia, mayor es el mezclado de fluidos, lo que coincide con lo sugerido por este modelo, ya que a mayor longitud de baffles, mayor es el mezclado. Cabe mencionar, que estas conclusiones no significan que las dimensiones reales de los baffles, al igual que la distancia entre ellos, sean las propuestas, sino que son dimensiones posibles que surgen a partir de la validación de los modelos numéricos.

Con respecto a los modelos matemáticos de un solo parámetro, mostraron para todos los casos, que el flujo predominante es el flujo en pistón, dado por los elevados valores de tanques necesarios para representar el flujo del UPR y los bajos valores del módulo de dispersión obtenidos, lo que era de esperar para un reactor tubular. No obstante, se puede decir que el reactor posee una hidrodinámica que se desvía de la idealidad ya que los valores del módulo de dispersión son pequeños, pero no lo suficiente como para obviar mencionadas desviaciones, por lo que deben ser consideradas cuando se pretenda utilizar la unidad piloto de reacción para obtener determinado rendimiento de la reacción de transesterificación.

Es importante destacar que en el momento del dibujo de la geometría del reactor no se contaba con planos constructivos, por lo tanto es muy probable que la forma del reactor tubular difiera significativamente de la propuesta por este trabajo; sin embargo, al respetarse dimensiones del mismo, se pudieron obtener muy buenos resultados con una geometría poco compleja, por lo que permite decir que la UPR, probablemente, posee un trazado sencillo sin configuración cruzada u otras formas que obligan al fluido a realizar bruscos cambios de direcciones y por lo tanto, producir mayores dispersiones y desvíos al flujo ideal.

REFERENCIAS

- Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., *Fenómenos de Transporte*, Reverté, México, 1992.
- COMSOL Multiphysics, *COMSOL Multiphysics User's Guide*, Version 3.5a, 2008.
- Fogler, S., *Elements of Chemical Reaction Engineering*. 4ª Ed. Prentice Hall, USA, 2005.
- González Bermúdez, Y., Rodríguez Rico, I.L., Obtaining of the model of flow for a battery in series of a tubular reactor and a tank- reactor using stimulus response techniques. *Centro Azúcar*, 32(1): 62–66, 2005.
- Levenspiel, O., *Ingeniería de las Reacciones Químicas*, 2ª Ed., Reverté SA, México, 1998.
- Levenspiel, O., *Ingeniería de las Reacciones Químicas*, 3ª Ed., Limusa Wiley México, 2004.
- Lopes, J.M., Lemos, F., Pinheiro, C., Ramôa Ribeiro F., Magalhães, F.D., Mendes, A., Costa, C., Teaching Residence Time Distributions in the Laboratory. *Int. J. Engng Ed.*, 18(6): 674–681, 2002.
- Madeira, L.M., Alves, M.A., Rodrigues, A.E., Teaching nonideal reactors with CFD tools. *Chemical Engineering Education*, Spring 2004: 154-160, 2004.
- Mendes, A.M., Madeira, L.M., Magalhaes, F.D., Sousa, J.M., An integrated chemical reaction engineering lab experiment. *Chemical Engineering Education*, ASEE: 228-235, 2004.
- Pagano, A.M., Santalla, E.M., Crozza, D.E., Gely, M.C., Producción de biodiesel en reactor tubular a escala piloto. En: *Avances en Ingeniería Rural 2005-2007*. Bocco, M. - Cosiansi, J. (Eds.), Córdoba, Argentina, pp. 1-8, 2007.
- Perry, R.H., Green, D.W., *Chemical Engineer's Handbook*, McGraw-Hill, EEUU, 1999.
- Rosen, E.M., Femlab 3.0: Experiences in Determining RTD. *News about Computers in*

Chemical Engineering Education, CACHE Committee, Texas University, Spring 2004, N° 59, 2004.

Santamaría, J. M., *Ingeniería de Reactores*, Editorial Síntesis, Madrid. 1999.

Smith, J.M., *Ingeniería de la Cinética Química*, 6ª Ed. McGraw-Hill, México, 1991.

Vite-Martínez, P., Ramírez-López, A., Hernández-Espejel, A., de Jesús Morales-Ramírez, A., Simulación matemática para evaluar la eficiencia en un reactor para reciclado de plomo. *Avances en Ciencias e Ingeniería*, 1(2): 1-13, 2010.

Zienkiewicz, O.C., and Taylor, R.L., *The Finite Element Method*, volume II. McGraw Hill, 1991.