



UADY
UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA
DE YUCATÁN

Análisis de Reactores mediante Dinámica de Fluidos Computacional en el Marco Curricular de Ingeniería Química

Sergio Antonio Baz Rodríguez
Seminario Permanente de Investigación
Facultad de Ingeniería Química

Motivación de esta participación

CORRESPONDENCIA ENTRE LA
INVESTIGACIÓN Y LOS PARADIGMAS
DOMINANTES EN INGENIERÍA QUÍMICA
CON LA EVOLUCIÓN GRADUAL DE LA
MALLA CURRICULAR

DINÁMICA COMPUTACIONAL DE FLUIDOS



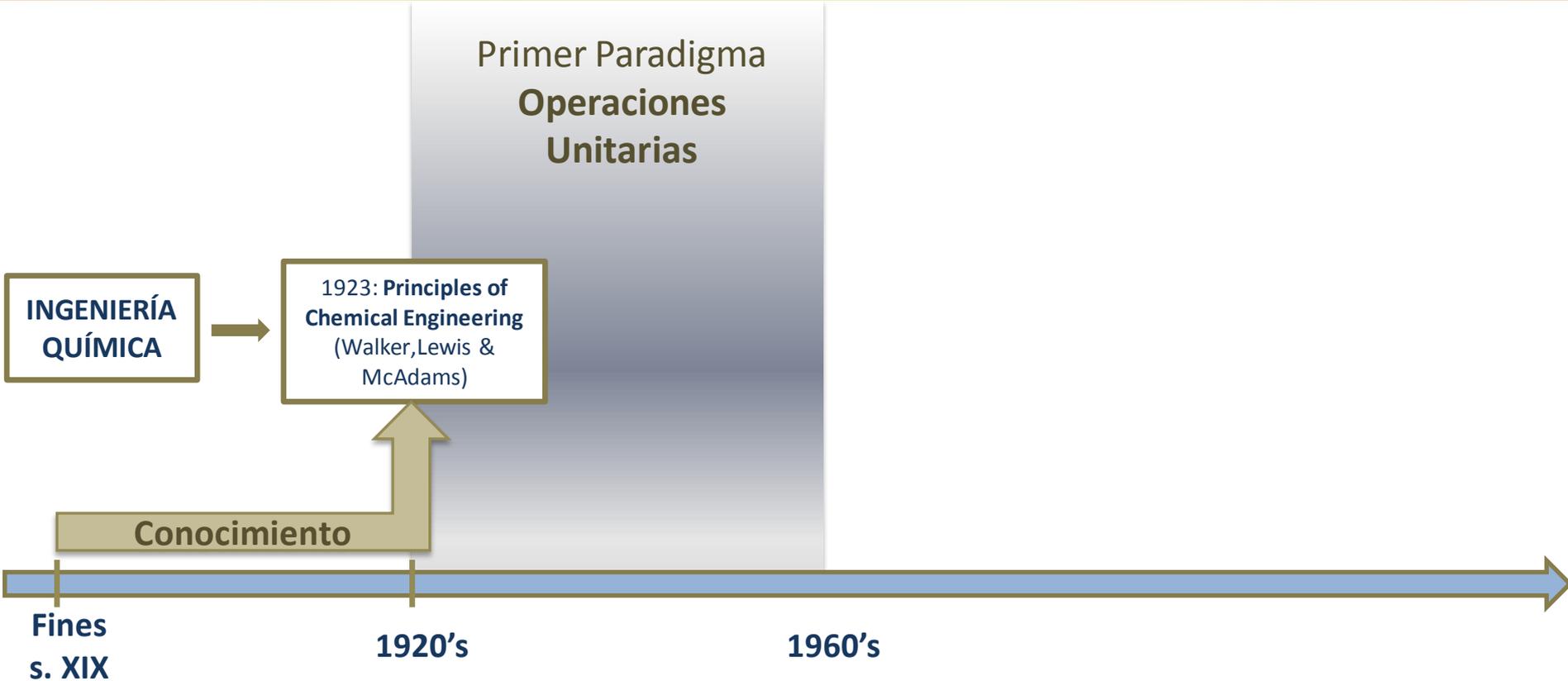
<https://www.wits.ac.za>; <https://www.pinclipart.com>

**INGENIERÍA
QUÍMICA**

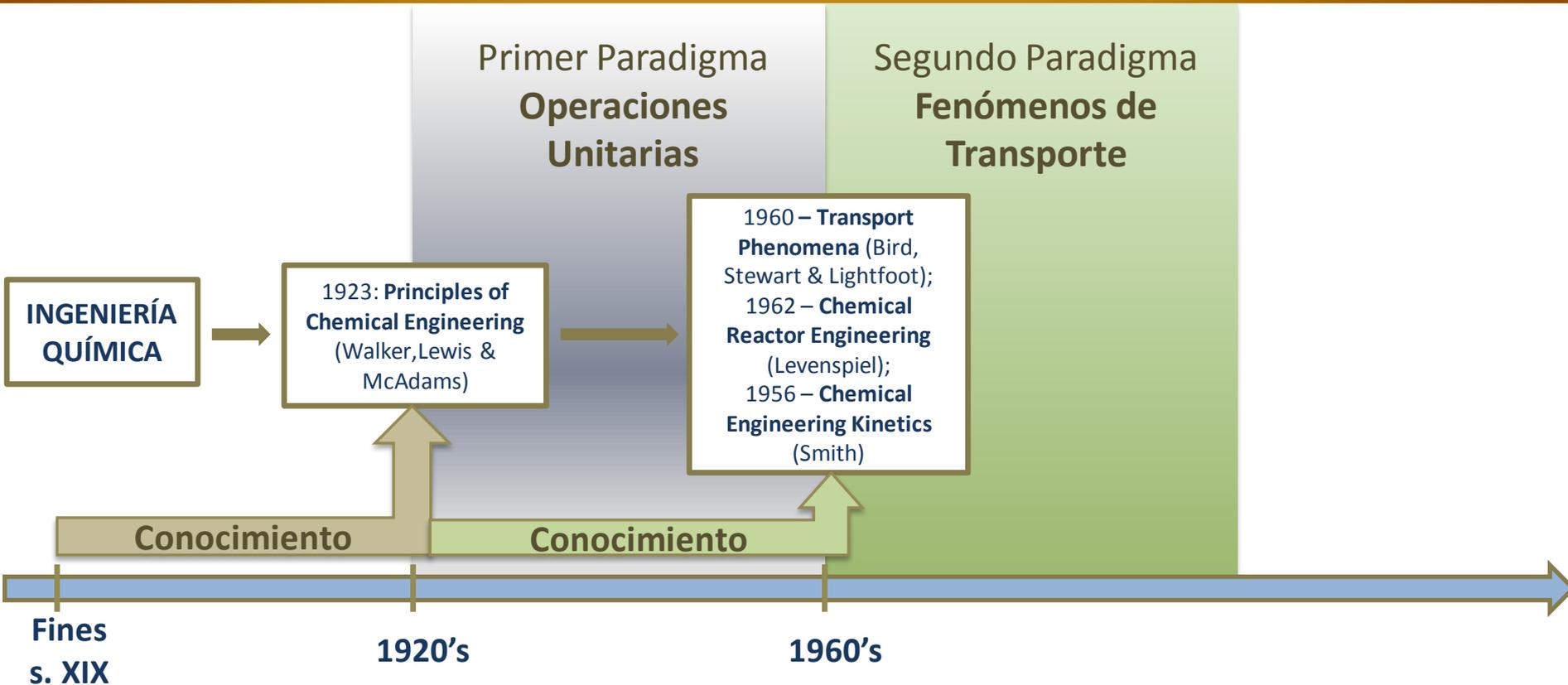


**Fines
s. XIX**

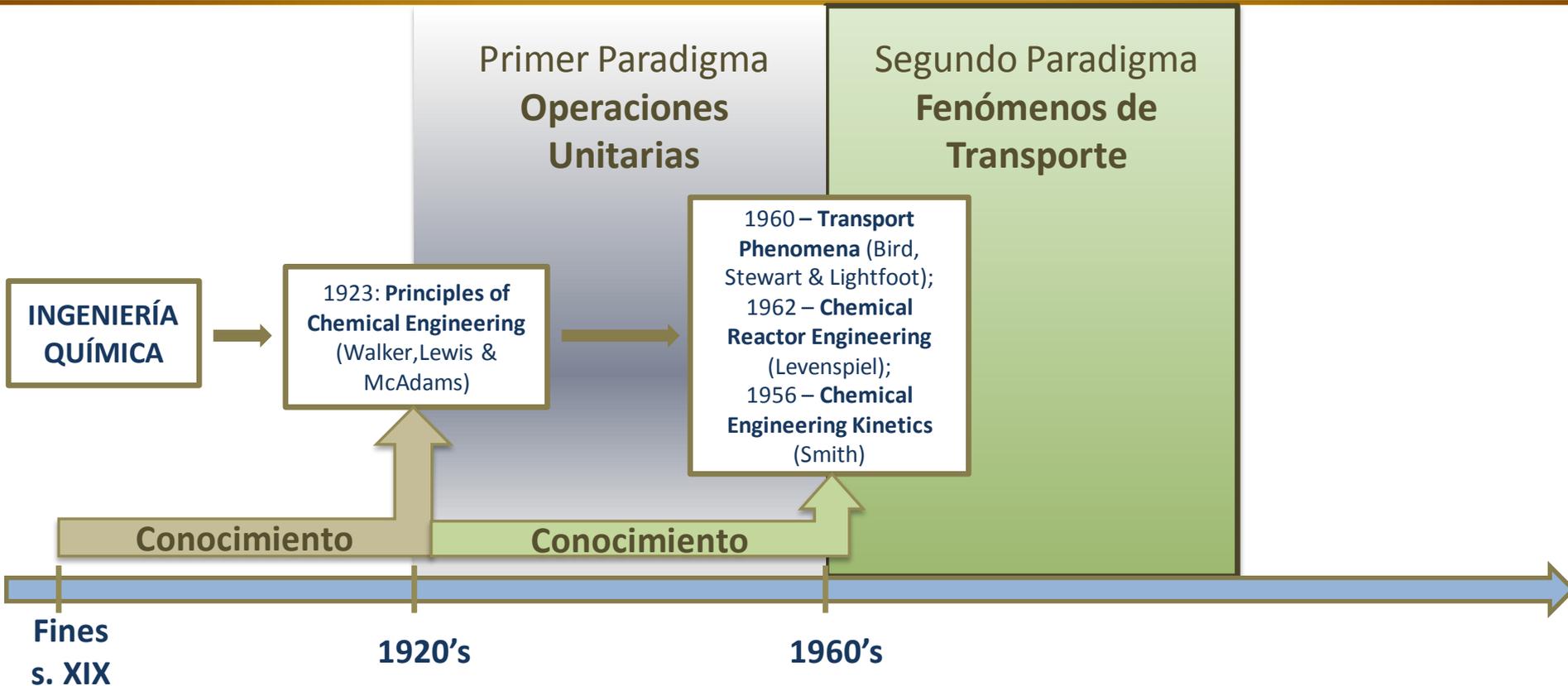
De la Generación de Conocimiento a la Enseñanza



De la Generación de Conocimiento a la Enseñanza

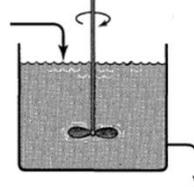
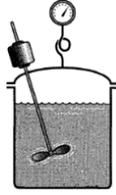


De la Generación de Conocimiento a la Enseñanza

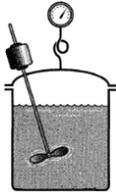
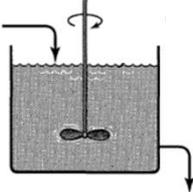


Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

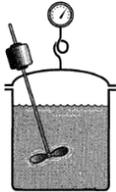
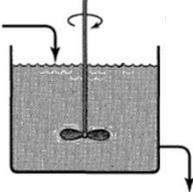
Tipo de Reactor
Homogéneo



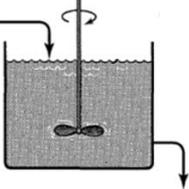
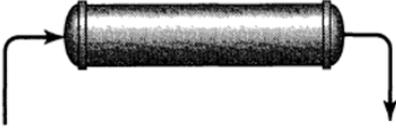
Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			

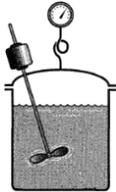
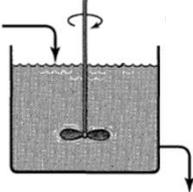
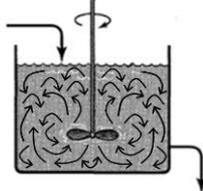
Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			

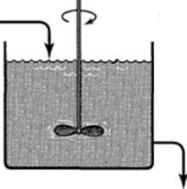
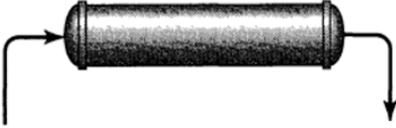
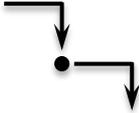
Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>	<p>•</p>		

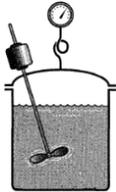
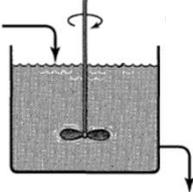
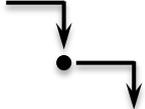
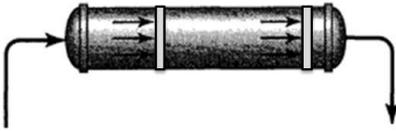
Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			

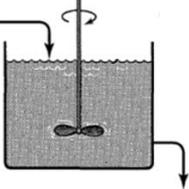
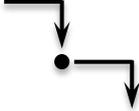
Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			

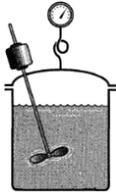
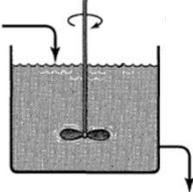
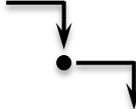
Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			

Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			

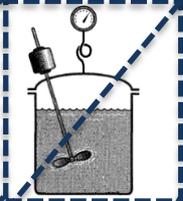
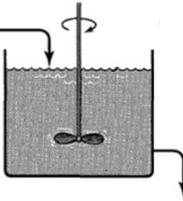
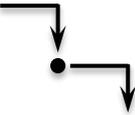
Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

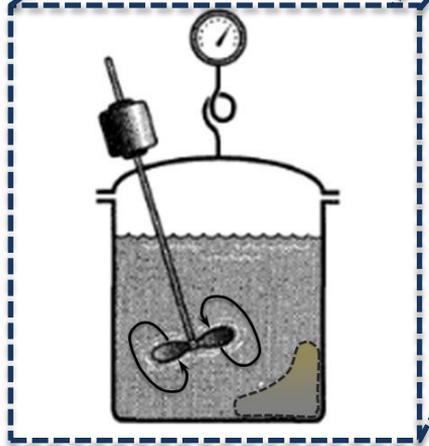
<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			

“Para entender la ciencia siempre es necesario abstraerse de la complejidad del mundo real y en su lugar sustituir situaciones más o menos idealizadas que sean mucho más amenas de analizar”

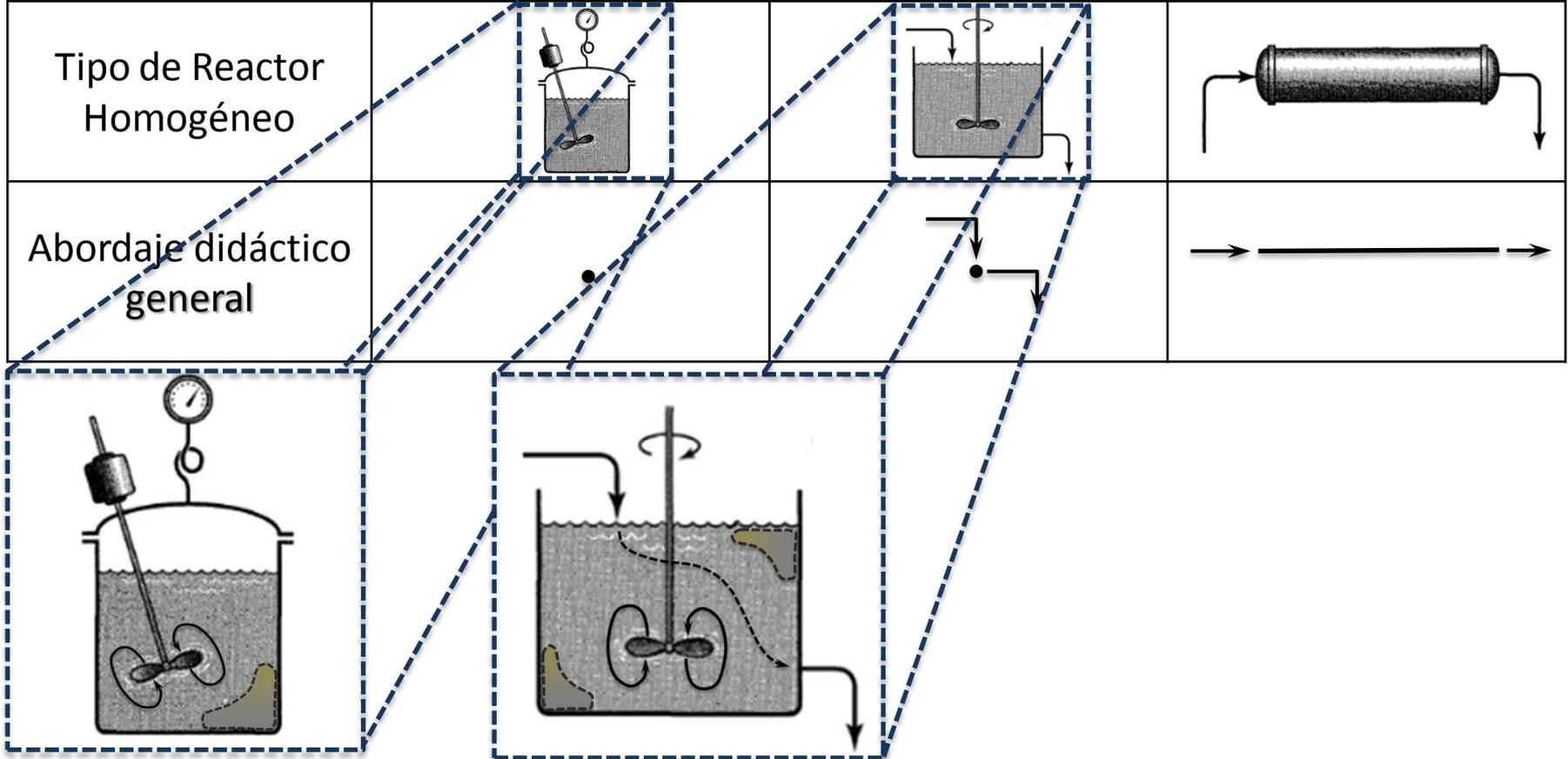
- Octave Levenspiel

Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

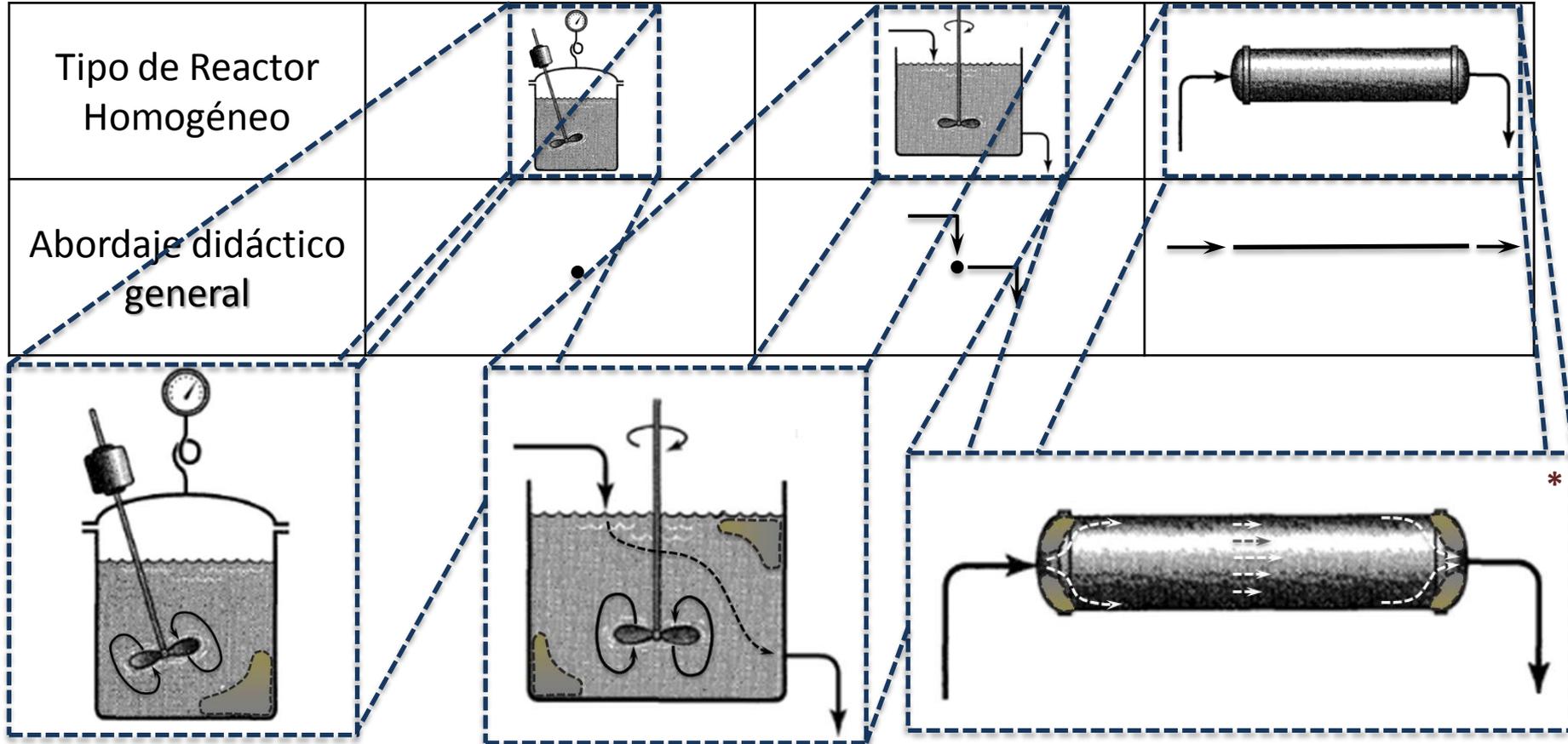
<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			



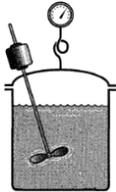
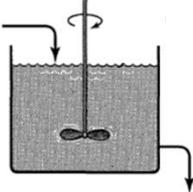
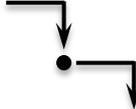
Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

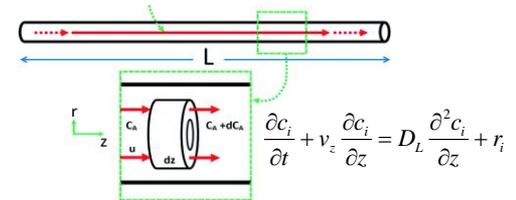
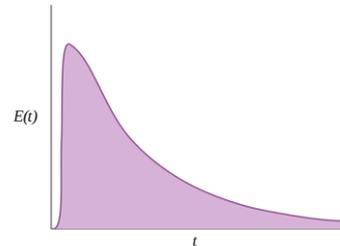
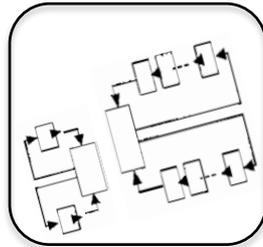


Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

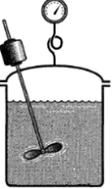
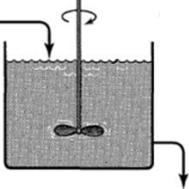
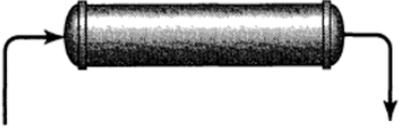
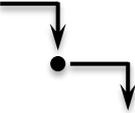


Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

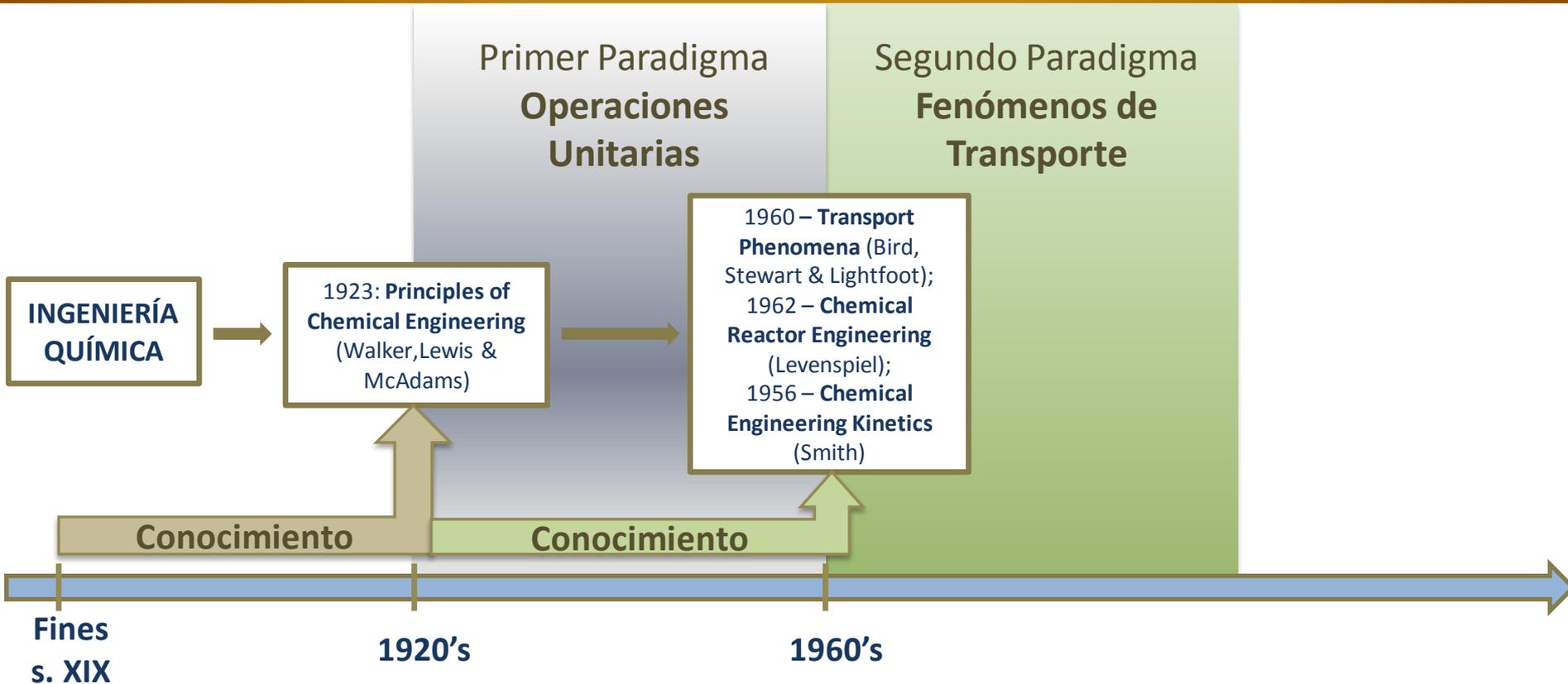
<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			
<p>Abordaje didáctico especializado</p>	<p>Modelos de múltiples compartimentos</p>	<p>Distribución de tiempos de residencia - Flujo segregado</p>	<p>Modelos de dispersión axial</p>



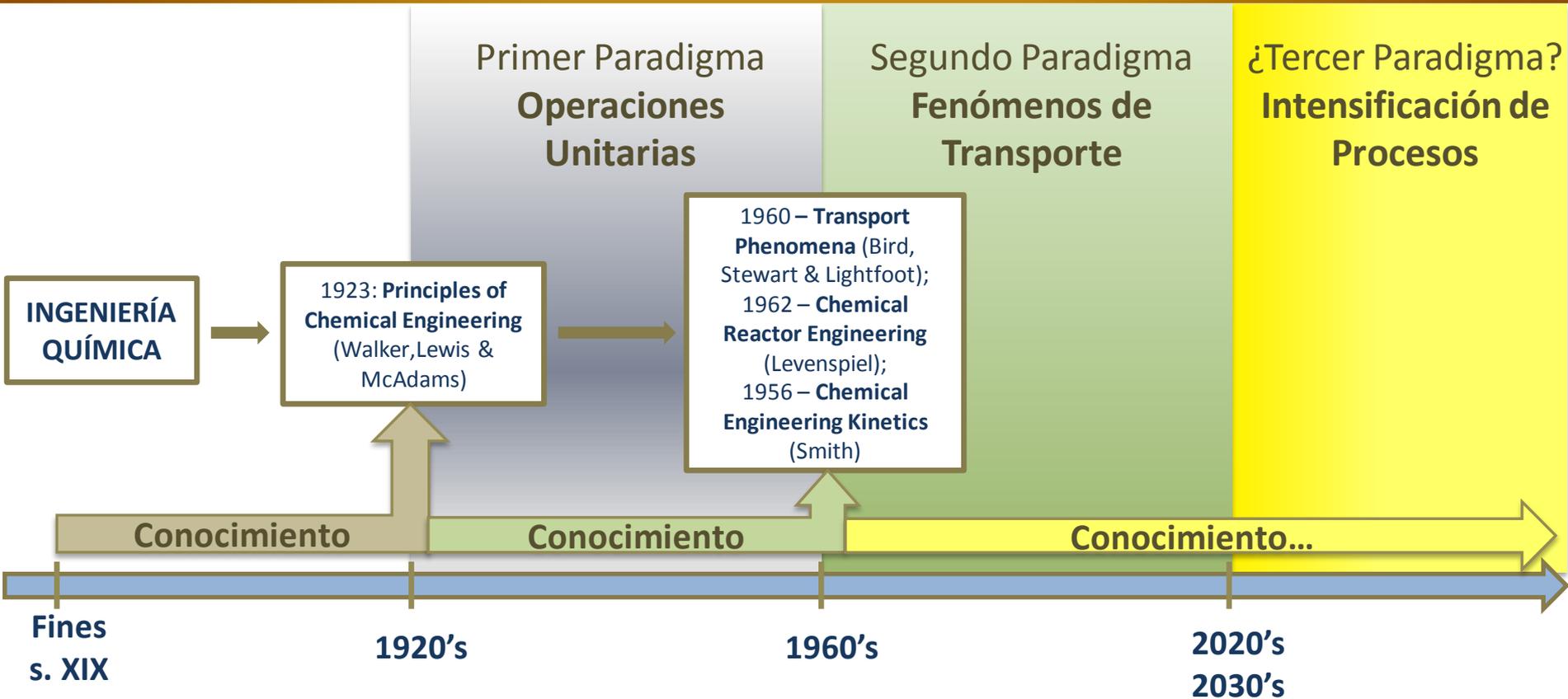
Caso Ilustrativo: Dimensionamiento de Reactores

<p>Tipo de Reactor Homogéneo</p>			
<p>Abordaje didáctico general</p>			
<p>Abordaje didáctico especializado</p>	<p>Modelos de múltiples compartimentos</p>	<p>Distribución de tiempos de residencia - Flujo segregado</p>	<p>Modelos de dispersión axial</p>
<p>Capacidad y requerimiento actuales</p>	<p>Mezclado imperfecto, altas viscosidades, escalas piloto e industrial, escalas pares, geometrías mejoradas, turbulencia, valoración y rediseño</p>		

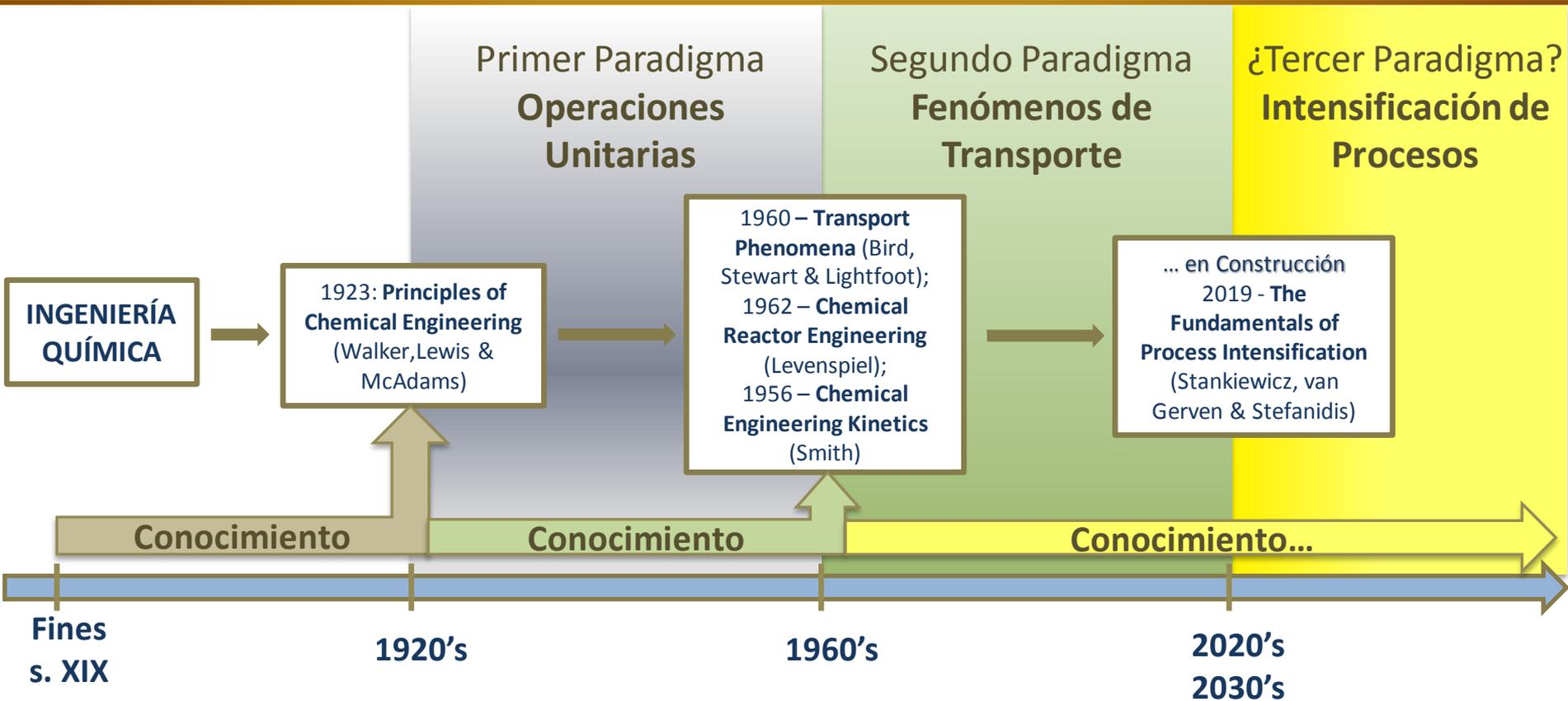
De la Generación de Conocimiento a la Enseñanza



De la Generación de Conocimiento a la Enseñanza



De la Generación de Conocimiento a la Enseñanza



Principios rectores de la Intensificación de Procesos

1. Maximizar la efectividad de los eventos intra- e inter-moleculares
2. Proporcionar a cada molécula la misma historia o experiencia en el proceso
3. Optimizar las fuerzas impulsoras en cada escala y maximizar el área específica superficial a la cual se aplican esas fuerzas
4. Maximizar los efectos sinérgicos de procesos individuales

EQUIPOS

Para Reacción

- Microreactores
- Reactor de discos rotatorios
- Reactores heterogéneos rotatorios o de campo centrífugo
- Reactores de mezclado estático

Para Separación/Intercambio

- Intercambiador de calor de microcanales
- Lechos empacados rotatorios
- Mezcladores estáticos

MÉTODOS

Reactores Multifuncionales y/o Separaciones Reactivas

- Destilación reactiva
- Extracción reactiva
- Absorción reactiva
- Cristalización reactiva
- Membranas reactivas

Separaciones Híbridas

- Destilación extractiva
- Destilación asistida por membrana
- Destilación asistida por pervaporación

Energías Alternas

- Microondas
- Ultrasonido
- Cavitación hidrodinámica

EQUIPOS

Para Reacción

- Microreactores
- Reactor de discos rotatorios
- Reactores heterogéneos rotatorios o de campo centrífugo
- Reactores de mezclado estático

Para Separación/Intercambio

- Intercambiador de calor de microcanales
- Lechos empacados rotatorios
- Mezcladores estáticos

2. Proporcionar a cada molécula la misma historia o experiencia en el proceso
3. Optimizar las fuerzas impulsoras en cada escala y maximizar el área específica superficial a la cual se aplican esas fuerzas

MÉTODOS

Reactores Multifuncionales y/o Separaciones Reactivas

- Destilación reactiva
- Extracción reactiva
- Absorción reactiva
- Cristalización reactiva
- Membranas reactivas

1. Maximizar la efectividad de los eventos intra- e inter-moleculares
4. Maximizar los efectos sinérgicos de procesos individuales

Separaciones Híbridas

- Destilación extractiva
- Destilación asistida por membrana
- Destilación asistida por pervaporación

Energías Alternas

- Microondas
- Ultrasonido
- Cavitación hidrodinámica

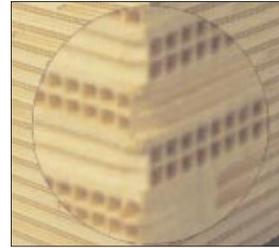
EQUIPOS

Para Reacción

Para Separación/Intercambio

- Microreactores
- Reactor de discos rotatorios
- Reactores heterogéneos rotatorios o de campo centrífugo
- Reactores de mezclado estático
- Intercambiador de calor de microcanales
- Lechos empacados rotatorios
- Mezcladores estáticos

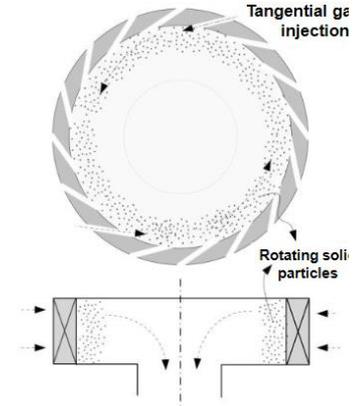
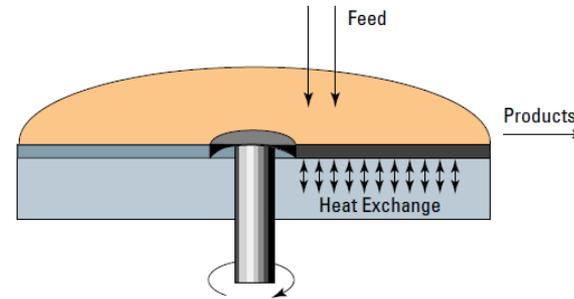
2. Proporcionar a cada molécula la misma historia o experiencia en el proceso
3. Optimizar las fuerzas impulsoras en cada escala y maximizar el área específica superficial a la cual se aplican esas fuerzas



Flow Division



Radial Mixing

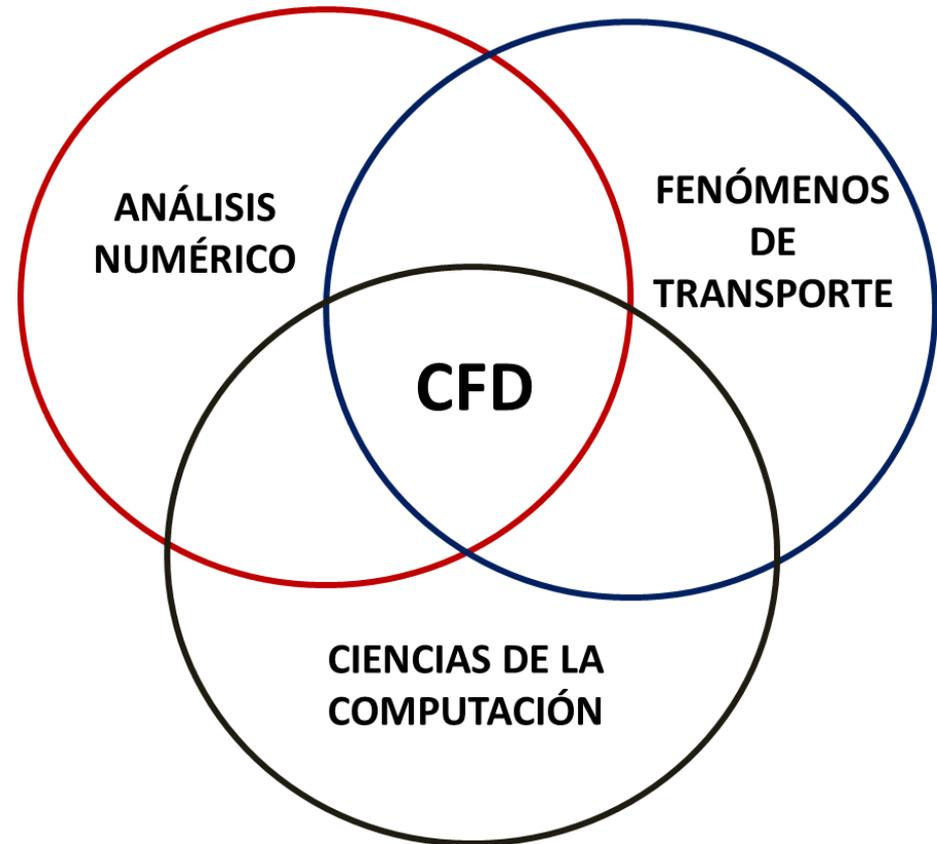


Recapitulando...

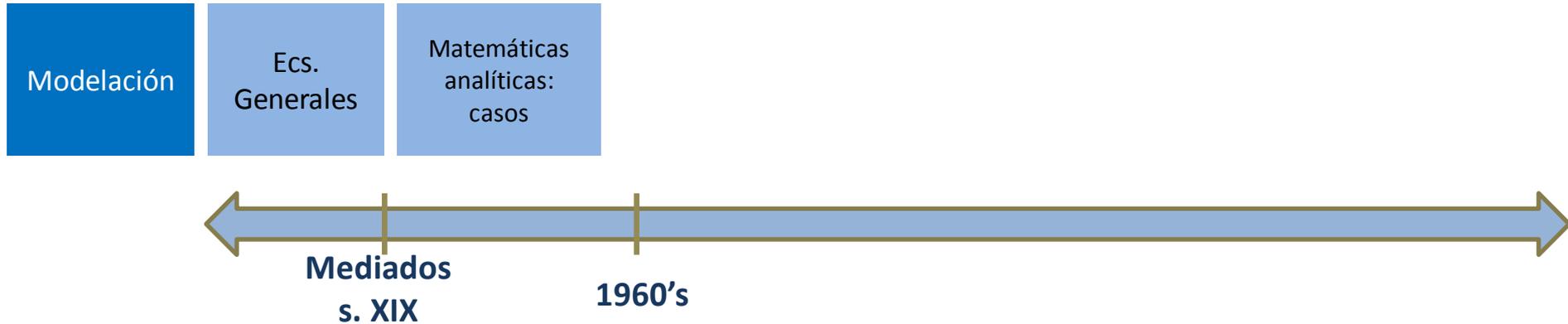
Área disciplinar	Necesidad descriptiva y predictiva	Abordaje curricular
Ingeniería de Reactores	... para sistemas con mezclado imperfecto y/o flujo no ideal	Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)
Fenómenos de Transporte	... para sistemas de flujo turbulento y fenómenos interfaciales	
Intensificación de Procesos	... para equipos con geometrías y condiciones de operación complejas	

Análisis, solución e interpretación mediante métodos numéricos de procesos de transporte de momentum, calor y especies químicas

Herramienta para solución de sistemas de múltiples EDP's no lineales y acopladas



EN BREVE PERSPECTIVA HISTÓRICA...



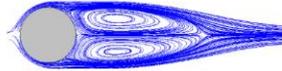
Dinámica de Fluidos Computacional

EN BREVE PERSPECTIVA HISTÓRICA...



20 h/Semana
por 18 meses

M. Kawaguti, 'Numerical Solution of the NS Equations for the Flow Around a Circular Cylinder at Reynolds Number 40', Journal of Phy. Soc. Japan, vol. 8, pp. 747-757, 1953.



Dinámica de Fluidos Computacional CFD

Primeras soluciones a casos simples

Modelación

Ecs. Generales

Matemáticas analíticas: casos

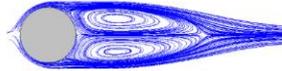


EN BREVE PERSPECTIVA HISTÓRICA...



20 h/Semana
por 18 meses

M. Kawaguti, 'Numerical Solution of the NS Equations for the Flow Around a Circular Cylinder at Reynolds Number 40', Journal of Phy. Soc. Japan, vol. 8, pp. 747-757, 1953.



Dinámica de Fluidos Computacional CFD

Primeras soluciones a casos simples

Desarrollo de Cómputo

Desarrollo de análisis numérico avanzado

Modelación

Ecs. Generales

Matemáticas analíticas: casos

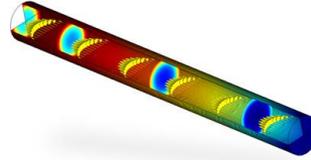
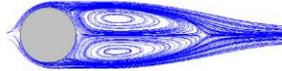


Dinámica de Fluidos Computacional

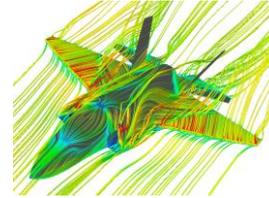
EN BREVE PERSPECTIVA HISTÓRICA...

20 h/Semana
por 18 meses

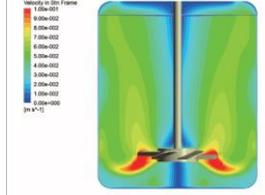
M. Kawaguti, 'Numerical Solution of the NS Equations for the Flow Around a Circular Cylinder at Reynolds Number 40', Journal of Phy. Soc. Japan, vol. 8, pp. 747-757, 1953.



<https://www.ansys.com/ko-kr/blog/5-factors-define-aerospace-and-defense-industry-trends>



<https://flowvisioncf.com/en/flowvision-applications/cardiac-simulations>



Dinámica de Fluidos Computacional CFD

Primeras soluciones a casos simples

Desarrollo de Cómputo

Desarrollo de análisis numérico avanzado

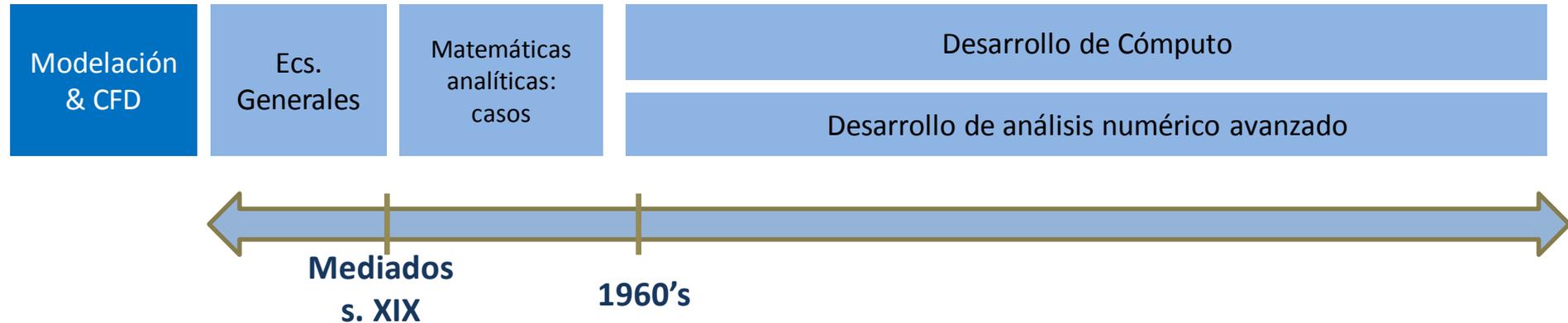
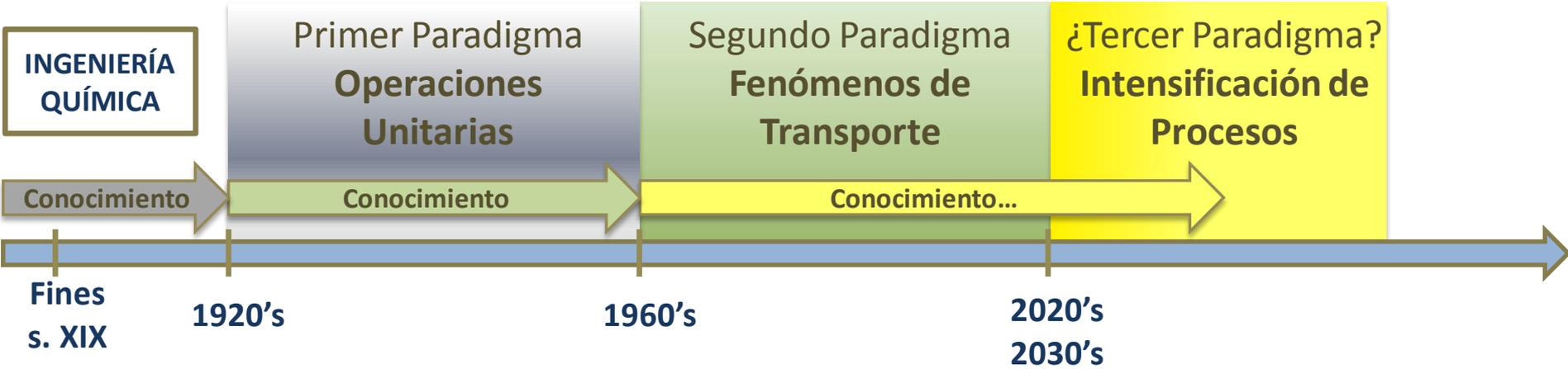
Modelación

Ecs. Generales

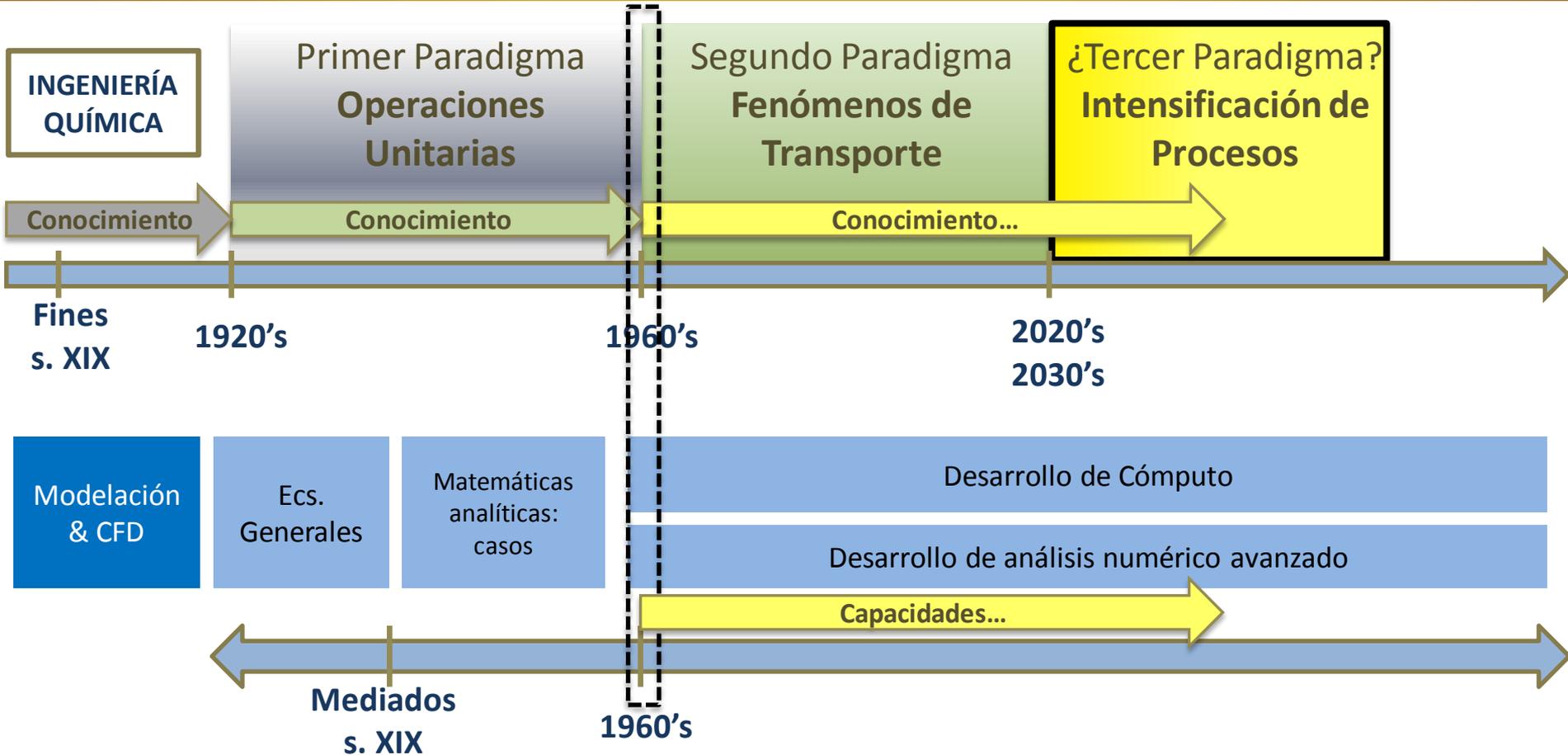
Matemáticas analíticas: casos



Dinámica de Fluidos Computacional



Dinámica de Fluidos Computacional



Licencia de Investigación de Software CFD Comercial y Equipo de Cómputo

Análisis y evaluación del sistema de separación y recuperación de gas y condensados amargos del CPTG Atasta (Vinculación con PEMEX Exploración y Producción, 2005, Dr. Daniel Pacho Carrillo) – Enfoque exclusivo a Investigación; línea descontinuada en 2007; licencias conservadas hasta 2013

Asignatura optativa: Agitación y CFD

CFD incorporado en asignaturas obligatorias de Malla Curricular en Plan Modificado e impartido desde 2016; asignatura obligatoria de Intensificación de Procesos

ANSYS Fluent & OpenFoam

PRIMER SEMESTRE	SEGUNDO SEMESTRE	TERCER SEMESTRE	CUARTO SEMESTRE	QUINTO SEMESTRE	SEXTO SEMESTRE
FIQ-TC-CAD CÁLCULO DIFERENCIAL 8 CB HP HNP HT 96 32 128	FIQ-TC-CBI CÁLCULO INTEGRAL 7 CB HP HNP HT 80 32 112	FIQ-TC-CAV CÁLCULO Y ANÁLISIS VECTORIAL 7 CB HP HNP HT 80 32 112	FIQ-TC-ECD ECUACIONES DIFERENCIALES 7 CB HP HNP HT 80 32 112	FIQ-IQ-INT1 PROYECTO INTEGRADOR I 4 OC HP HNP HT 32 32 64	FIQ-IQ-INT2 PROYECTO INTEGRADOR II 4 OC HP HNP HT 32 32 64
FIQ-TC-QMG QUÍMICA GENERAL 6 CB HP HNP HT 64 32 96	FIQ-IQAB-QOR QUÍMICA ORGÁNICA 9 CB HP HNP HT 80 64 144	FIQ-TC-PYE PROBABILIDAD Y ESTADÍSTICA 7 CB HP HNP HT 80 32 112	FIQ-TC-CMP CULTURA EMPRENDEDORA 6 CSH HP HNP HT 48 48 96	FIQ-IQ-SPM SEPARACIONES MECÁNICAS 6 IA HP HNP HT 64 32 96	FIQ-IQ-IR2 INGENIERÍA DE REACTORES II 6 IA HP HNP HT 80 16 96
FIQ-TC-MCL MECÁNICA CLÁSICA 6 CB HP HNP HT 64 32 96	FIQ-IQAB-QAN QUÍMICA ANALÍTICA 6 CB HP HNP HT 64 32 96	FIQ-TC-MNU MÉTODOS NUMÉRICOS 6 CB HP HNP HT 64 32 96	FIQ-IQ-CMC CONTROL Y MEJORA DE LA CALIDAD 6 CEA HP HNP HT 64 32 96	FIQ-IQ-IR1 INGENIERÍA DE REACTORES I 6 IA HP HNP HT 80 16 96	
FIQ-TC-ALL ÁLGEBRA LINEAL 6 CB HP HNP HT 64 32 96	FIQ-TC-TDF TEMAS DE FÍSICA 6 CB HP HNP HT 64 32 96	FIQ-IQ-IMA INGENIERÍA DE MATERIALES 5 CI HP HNP HT 64 16 80	FIQ-IQAB-ADM ADMINISTRACIÓN 4 CEA HP HNP HT 48 16 64	FIQ-IQAB-FB FUNDAMENTOS DE LA INGENIERÍA INDUSTRIAL 6 CEA HP HNP HT 64 32 96	FIQ-IQ-II INGENIERÍA INDUSTRIAL 5 CEA HP HNP HT 64 16 80
FIQ-TC-PPI PROGRAMACIÓN PARA INGENIERÍA 4 CI HP HNP HT 48 16 64	FIQ-TC-TRM TERMODINÁMICA 7 CI HP HNP HT 80 32 112	FIQ-IQA-EOF EQUILIBRIO DE FASES 8 CI HP HNP HT 80 48 128	FIQ-IQ-INS INSTRUMENTACIÓN INDUSTRIAL 4 IA HP HNP HT 48 16 64	FIQ-IQ-NAI MÉTODOS NUMÉRICOS AVANZADOS 4 CI HP HNP HT 48 16 64	FIQ-IQA-OTCM OPERACIONES DE TRANSFERENCIA DE MOMENTUM Y CALOR 8 IA HP HNP HT 96 32 128
FIQ-IQ-IQ INTRODUCCIÓN A LA INGENIERÍA QUÍMICA 4 OC HP HNP HT 32 32 64	FIQ-TC-RSU RESPONSABILIDAD SOCIAL UNIVERSITARIA 6 CSH HP HNP HT 48 48 96	FIQ-TC-MIN METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN 6 CSH HP HNP HT 64 32 96	FIQ-IQA-BME BALANES DE MATERIA Y ENERGÍA 9 CI HP HNP HT 96 48 144	FIQ-IQA-FT1 FENÓMENOS DE TRANSPORTE I 5 CI HP HNP HT 64 16 80	FIQ-IQA-FT2 FENÓMENOS DE TRANSPORTE II 6 CI HP HNP HT 64 32 96
FIQ-TC-CMM CULTURA MAYA 6 CSH HP HNP HT 48 48 96	FIQ-TC-INV INTRODUCCIÓN A LA INVESTIGACIÓN 4 CSH HP HNP HT 32 32 64				

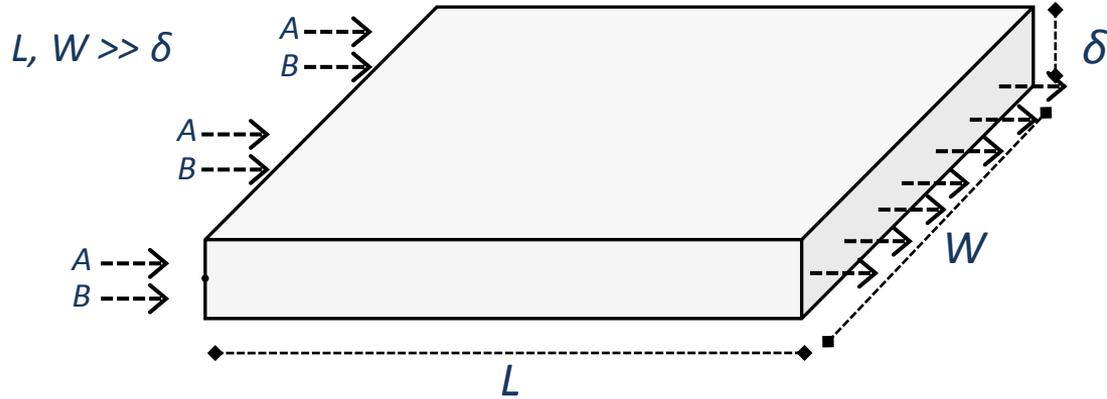
SÉPTIMO SEMESTRE	OCTAVO SEMESTRE	NOVENO SEMESTRE	DÉCIMO SEMESTRE
FIQ-IQ-IHP SEPARACIONES POR ETAPAS DE EQUILIBRIO 6 IA HP HNP HT 64 32 96	FIQ-TC-SSC SERVICIO SOCIAL 12 SSPP HP HNP HT 480 0 480	FIQ-TC-PR1 PRÁCTICA PROFESIONAL 12 SSPP HP HNP HT 480 0 480	FIQ-IQ-TTI TALLER DE TITULACIÓN 4 OC HP HNP HT 32 32 64
FIQ-IQ-IGE INGENIERÍA ECONÓMICA 5 CEA HP HNP HT 64 16 80	FIQ-IQ-IHP DISEÑO DE PROCESOS 7 DI HP HNP HT 64 48 112	FIQ-IQ-IGV FUNDAMENTOS DE INGENIERÍA VERDE 4 DI HP HNP HT 48 16 64	FIQ-IQ-ITP INTENSIFICACIÓN DE PROCESOS 4 DI HP HNP HT 32 32 64
FIQ-IQ-IGS INGENIERÍA DE SERVICIOS 9 IA HP HNP HT 96 48 144	FIQ-IQ-PY1 INGENIERÍA DE PROYECTOS I 7 DI HP HNP HT 64 48 112	FIQ-IQ-PY2 INGENIERÍA DE PROYECTOS II 7 DI HP HNP HT 64 48 112	FIQ-IQ-COR COMPORTAMIENTO ORGANIZACIONAL 4 CSH HP HNP HT 48 16 64
	FIQ-IQ-CTP CONTROL DE PROCESOS 5 DI HP HNP HT 48 32 80	FIQ-IQ-INP INTEGRACIÓN DE PROCESOS 4 DI HP HNP HT 48 16 64	FIQ-IQ-SGH SEGURIDAD E HIGIENE INDUSTRIAL 4 CSH HP HNP HT 48 16 64
	FIQ-IQ-IHG INGENIERÍA DE SERVICIOS 9 IA HP HNP HT 96 48 144	FIQ-IQ-PSC SEPARACIONES POR CONTACTO CONTINUO 6 IA HP HNP HT 64 32 96	

- Fenómenos de Transporte II
- Ingeniería de Reactores II
- Optativa enfocada a agitación

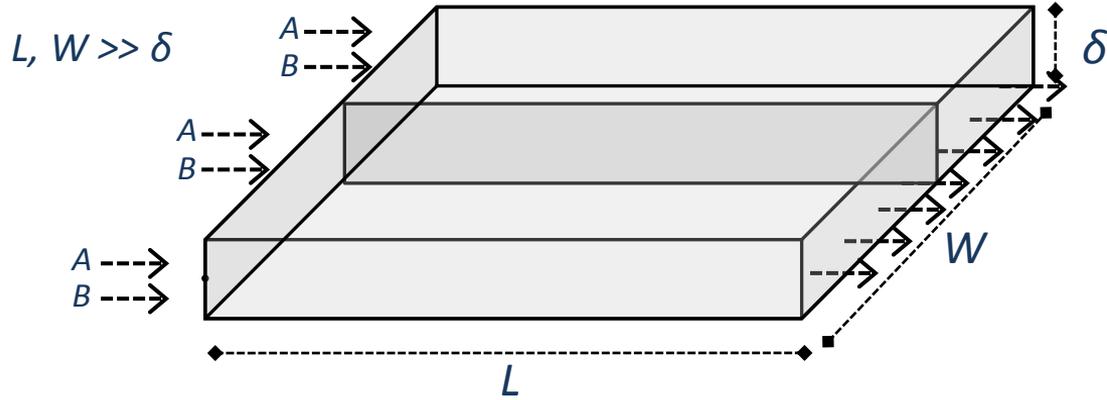
Expectativa	Realidad	Lo que se trabaja
CFD es la mejor herramienta para analizar y asistir el diseño de equipos	Puede convertirse en una caja negra y sacrificar la comprensión fundamental	Identificar siempre los modelos fundamentales que emplea el software y su aplicabilidad
Licencia de investigación no restringida; gran capacidad de cómputo	Sin licencia de investigación; licencia docente y estudiantil; cómputo convencional y equipo personal	Adaptarse a los capacidades de cómputo y software disponibles; implementar migración gradual a software libre y de código abierto
Analizar a fondo sistemas reactivos y procesos de transporte	Curva de aprendizaje regular (software comercial) o larga (software libre)	Adaptar los tiempos dentro de los cursos para abarcar lo suficiente sobre el uso de la herramienta
Disponer de libro de texto guía para CFD en ingeniería química	Aún no hay libros de texto que integren esta herramienta en un marco docente en ingeniería química	Diseñar y desarrollar casos originales de utilidad curricular; adaptar tutoriales de otros tipos de aplicaciones
Analizar casos didácticos idénticos a los de la industria de proceso	Limitación de recursos de cómputo y software	Diseñar casos didácticos que hagan manifiestas las ventajas, capacidades y potencial de CFD en la industria de proceso

Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores

Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores



Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores



Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores

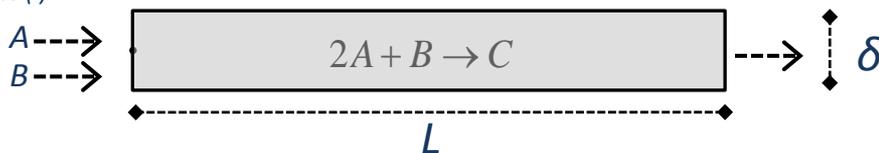
Mezcla reactiva incompresible

$$L = 0.89628 \text{ m}$$

$$\delta = 0.05975 \text{ m}$$

$$V_0 = 0.056017 \text{ m/s}$$

Presencia de inerte (I)



$$c_{AE} = 3.1125 \text{ kmol/m}^3$$

$$c_{BE} = 4.3304 \text{ kmol/m}^3$$

$$r_A = -0.0172225 \left(\frac{\text{m}^6}{\text{kmol}^2 \cdot \text{s}} \right) c_A^2 c_B$$

$$\tau = 16 \text{ s}$$

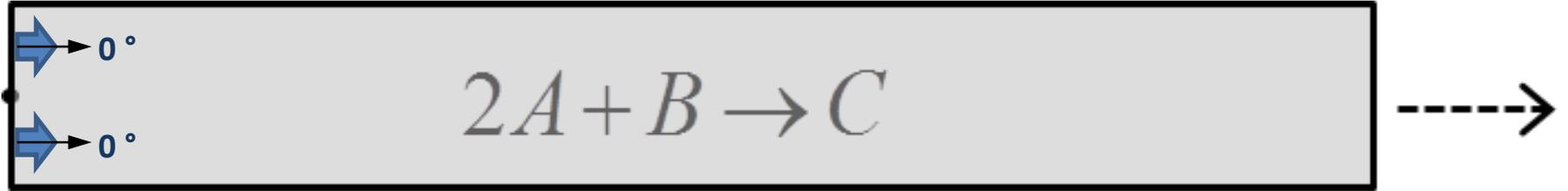
Si el flujo fuera ideal
(flujo pistón):

$$c_B(c_A) = c_{BE} + \frac{V_B}{V_A}(c_A - c_{AE})$$

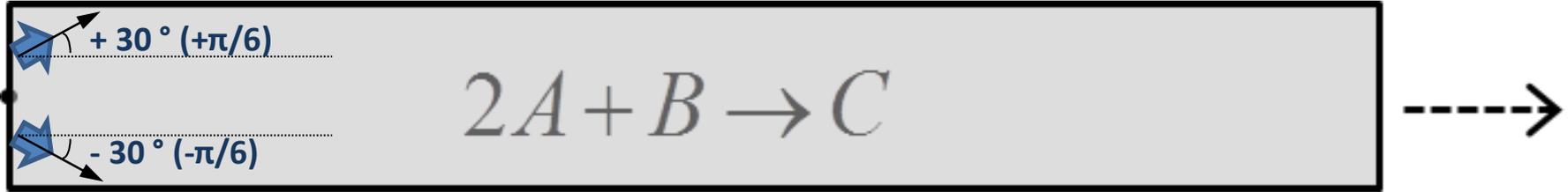
$$\tau = \int_{c_{AE}}^{c_A} \frac{dc_A}{r_A} = \int_{c_{AE}}^{c_A} \frac{dc_A}{-kc_A^2 c_B(c_A)}$$

$$c_A = 0.781 \text{ kmol/m}^3 \quad f_A = 0.75$$

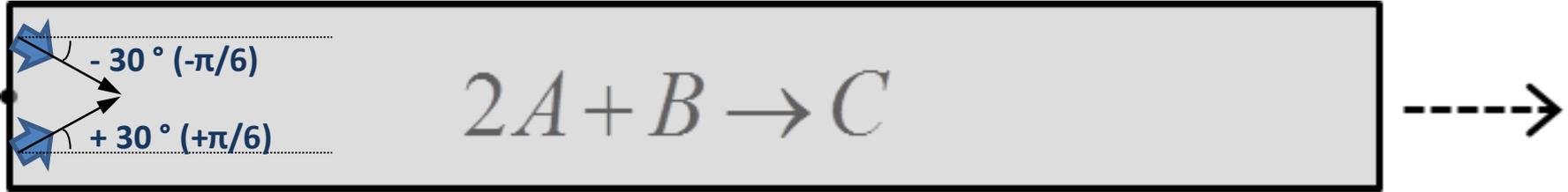
Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores



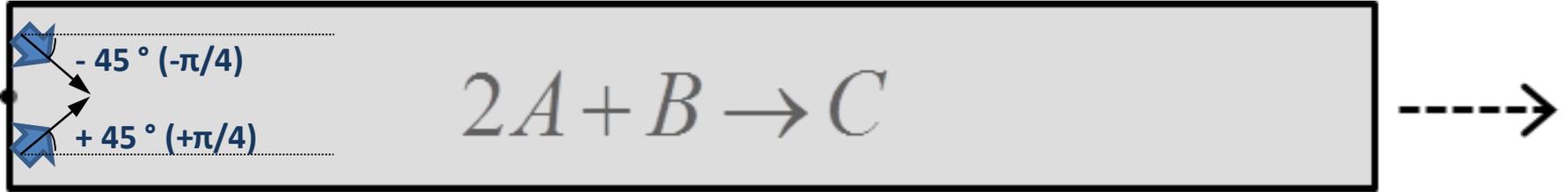
Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores



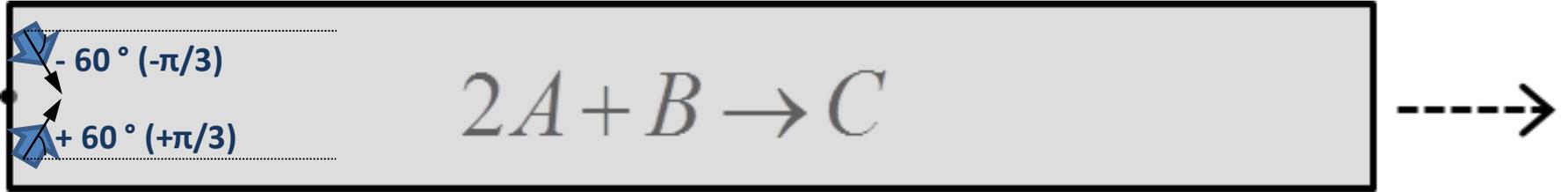
Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores



Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores

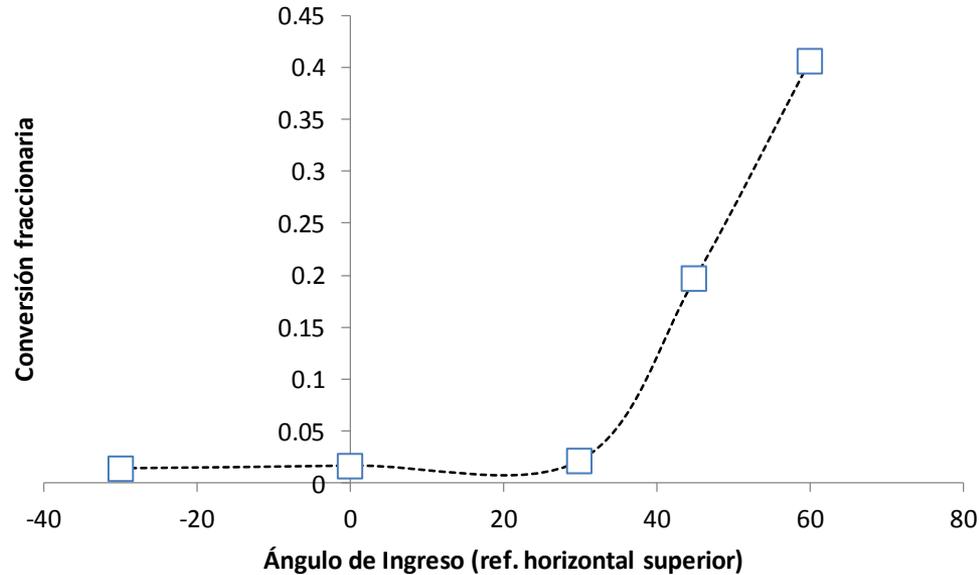


Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores

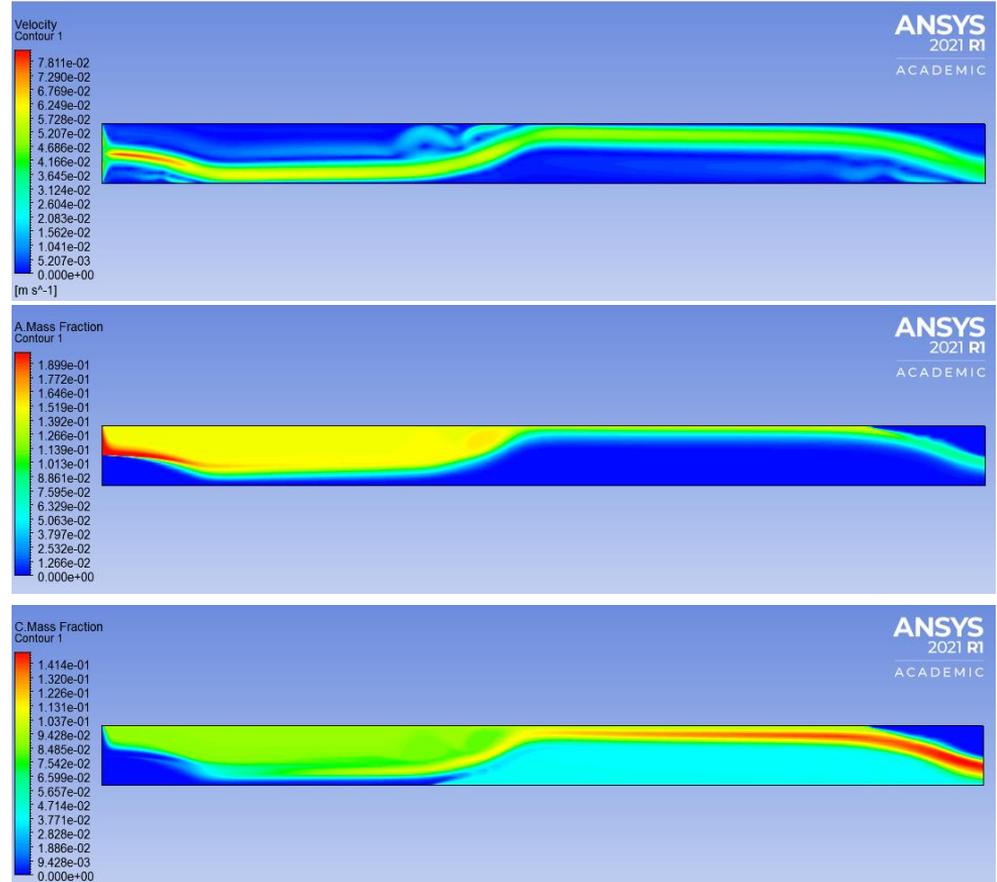


Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores

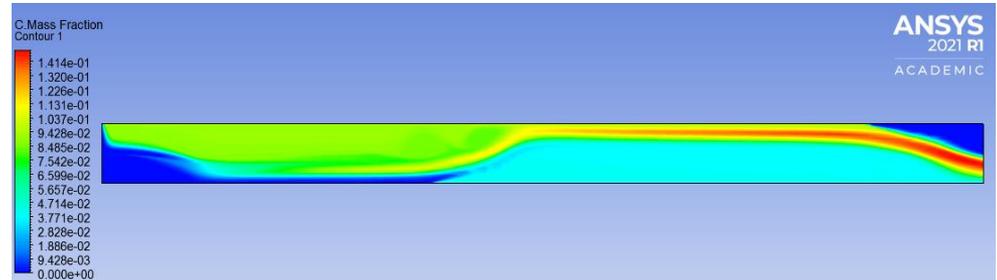
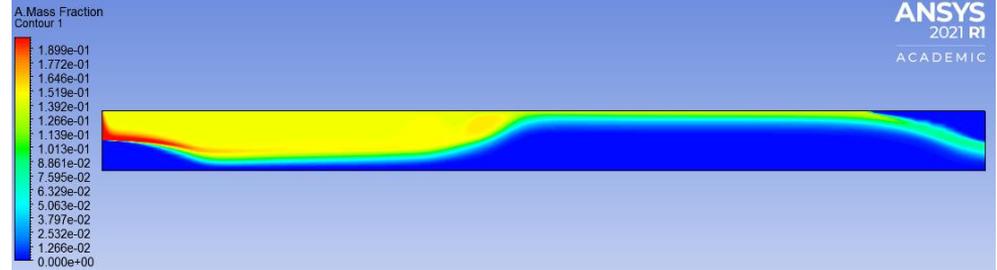
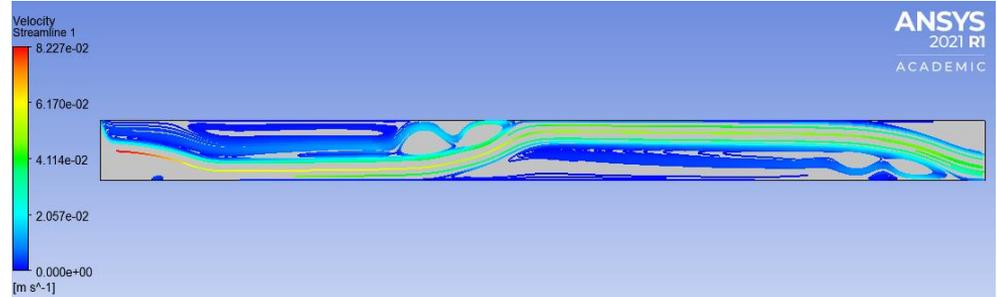
Si el flujo fuera ideal
(flujo pistón): $f_A = 0.75$



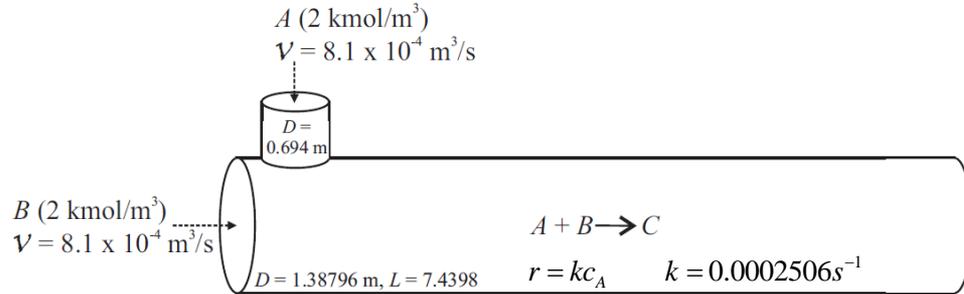
Casos Ilustrativos



Casos Ilustrativos



Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores



Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores

Si el flujo fuera ideal
(flujo pistón):



$$f_A = 0.8237$$



$$f_A = 0.8019$$

Efecto de Puntos y Modos de Alimentación en Reactores

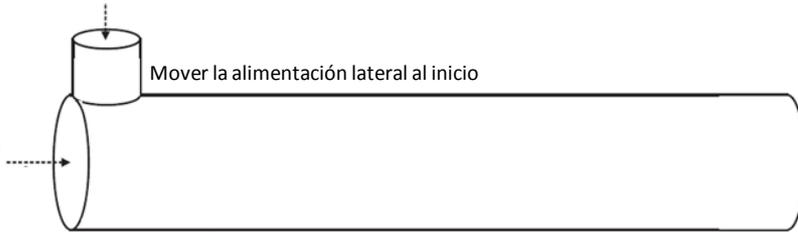
Si el flujo fuera ideal
(flujo pistón):



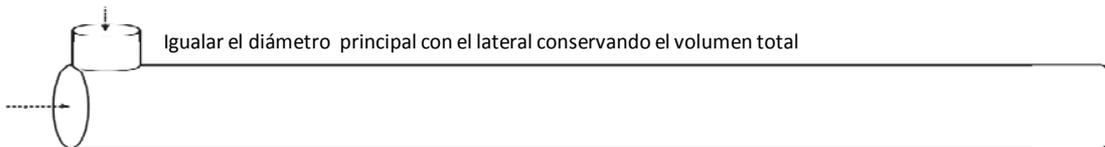
$$f_A = 0.8237$$



$$f_A = 0.8019$$



$$f_A = 0.7957$$

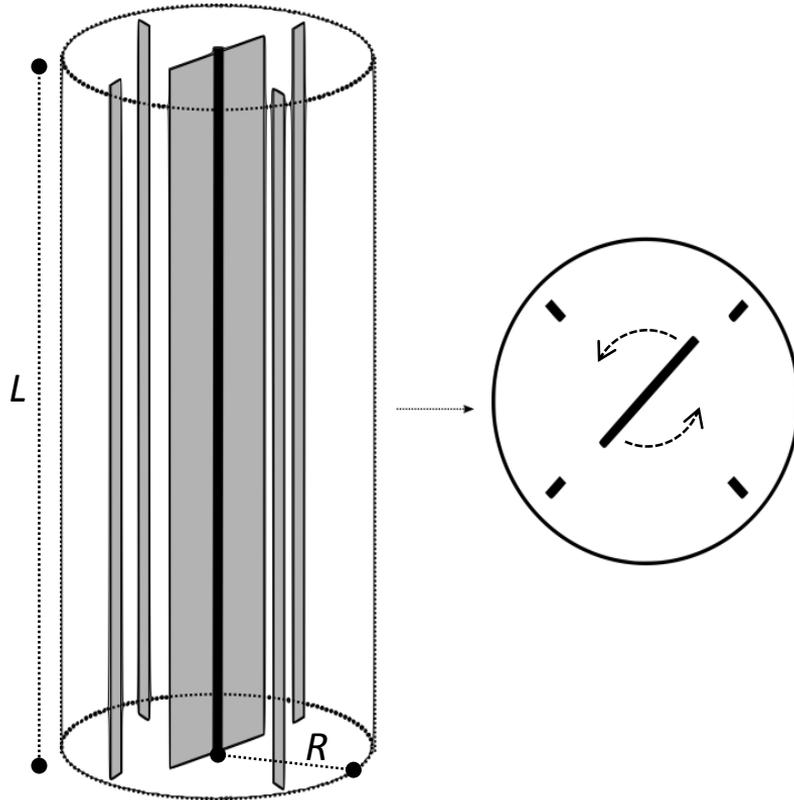


$$f_A = 0.8126$$

Casos Ilustrativos

Comparativo entre predicción de mezcla perfecta y mezcla distribuida

Comparativo entre predicción de mezcla perfecta y mezcla distribuida



- El reactor consiste en un tanque con una **paleta central** rotatoria y cuatro **baffles**.
- $L \gg R$ de modo que el reactor puede representarse como un **sistema 2D** consistente en un **corte planar**
- El dominio se dividirá en dos sub-regiones: una central en la cual la malla es móvil, y otra externa con malla fija.
- Sistema transitorio
- Mezcla reactiva líquida (considerada como **incompresible**).
- Reacción: saponificación de acetato de etilo
- Cinética de segundo orden, aproximadamente isotérmica:

Casos Ilustrativos

Comparativo entre predicción de mezcla perfecta y mezcla distribuida

$t = 300 \text{ s}$	Simulación por CFD	Ideal Mezcla Perfecta
$C_{\text{acetato-etilo}}$	0.1241 kmol/m ³	0.1224
$f_{\text{acetato-etilo}}$	0.371	0.379

↑
Promedio en el Dominio



$$t = \int_{C_{\text{acetato-etilo},0}}^{C_{\text{acetato-etilo}}} \frac{dc_{\text{acetato-etilo}}}{-kC_{\text{acetato-etilo}}C_{\text{hidroxido-sodio}}}$$

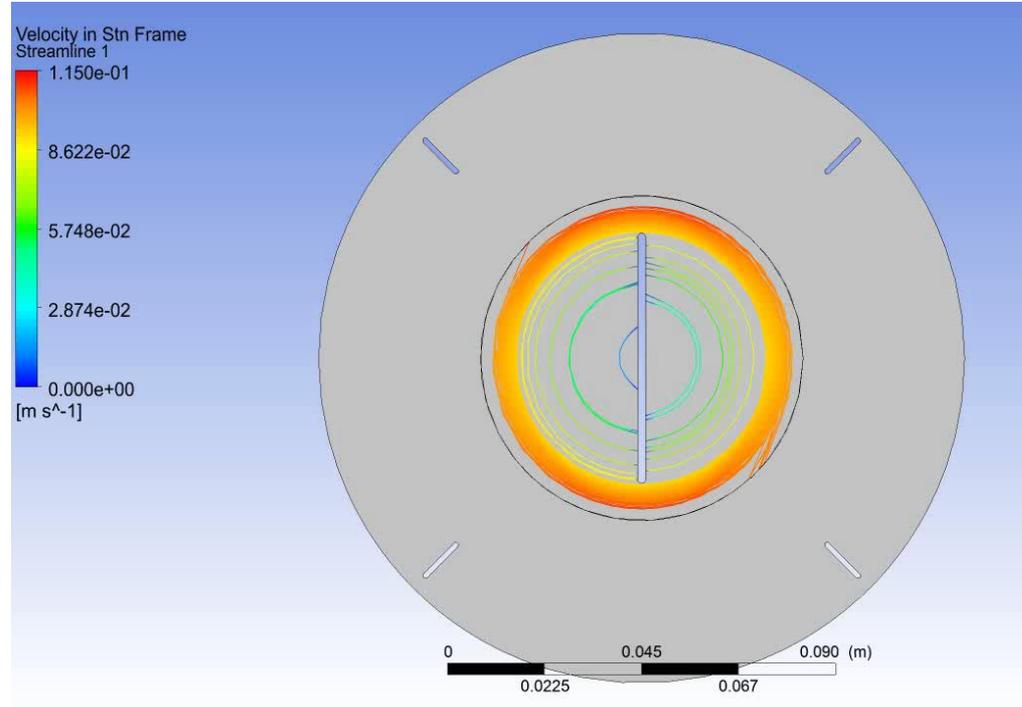
Fluido: mezcla reactiva líquida

Solvente: agua

$$C_{\text{acetato-etilo},0} = 0.19723 \text{ kmol/m}^3$$

$$C_{\text{hidroxido-sodio},0} = 0.07557 \text{ kmol/m}^3$$

Comparativo entre predicción de mezcla perfecta y mezcla distribuida



$t = 300 \text{ s}$	Simulación por CFD	Ideal Mezcla Perfecta
$C_{\text{acetato-etilo}}$	0.1241 kmol/m ³	0.1224
$f_{\text{acetato-etilo}}$	0.371	0.379

↑
Promedio en el Dominio

↑

$$t = \int_{C_{\text{acetato-etilo},0}}^{C_{\text{acetato-etilo}}} \frac{dc_{\text{acetato-etilo}}}{-kC_{\text{acetato-etilo}}C_{\text{hidroxido-sodio}}}$$

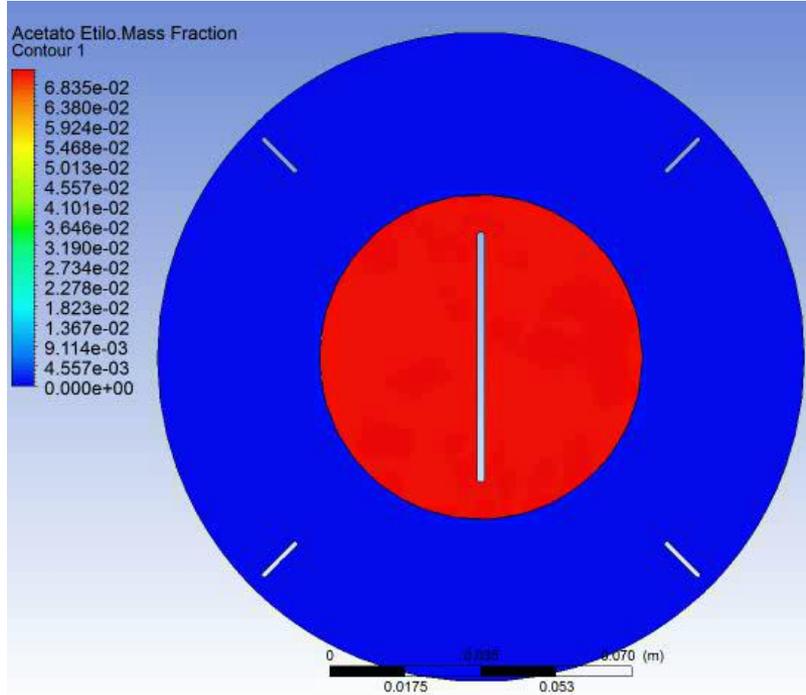
Fluido: mezcla reactiva líquida

Solvente: agua

$C_{\text{acetato-etilo},0} = 0.19723 \text{ kmol/m}^3$

$C_{\text{hidroxido-sodio},0} = 0.07557 \text{ kmol/m}^3$

Comparativo entre predicción de mezcla perfecta y mezcla distribuida



$t = 300 \text{ s}$	Simulación por CFD	Ideal Mezcla Perfecta
$C_{\text{acetato-etilo}}$	0.1241 kmol/m ³	0.1224
$f_{\text{acetato-etilo}}$	0.371	0.379

↑
Promedio en el Dominio

$$t = \int_{C_{\text{acetato-etilo},0}}^{C_{\text{acetato-etilo}}} \frac{dc_{\text{acetato-etilo}}}{-kC_{\text{acetato-etilo}}C_{\text{hidroxido-sodio}}}$$

Fluido: mezcla reactiva líquida

Solvente: agua

$C_{\text{acetato-etilo},0} = 0.19723 \text{ kmol/m}^3$

$C_{\text{hidroxido-sodio},0} = 0.07557 \text{ kmol/m}^3$

Casos Ilustrativos

Comparativo entre predicción de mezcla perfecta y mezcla distribuida

$t = 300 \text{ s}$	Simulación por CFD	Ideal Mezcla Perfecta
$C_{\text{acetato-etilo}}$	0.1241 kmol/m ³	0.1224
$f_{\text{acetato-etilo}}$	0.371	0.379

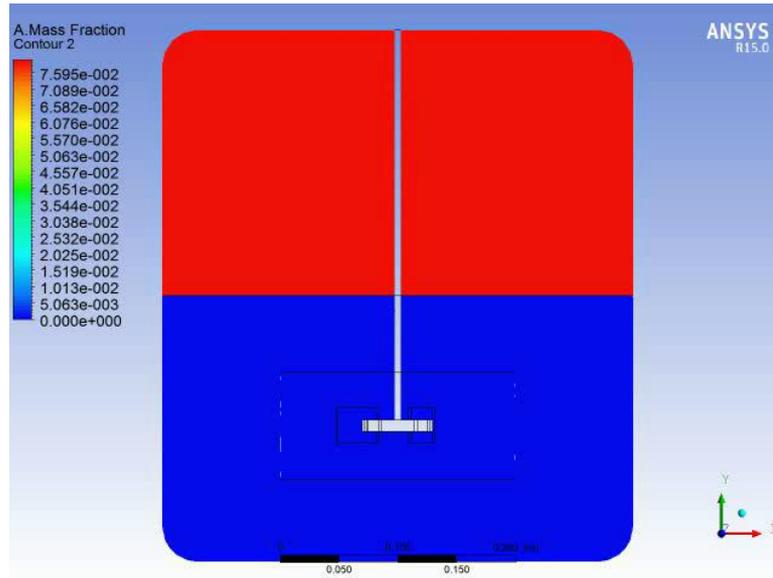


Promedio en el Dominio

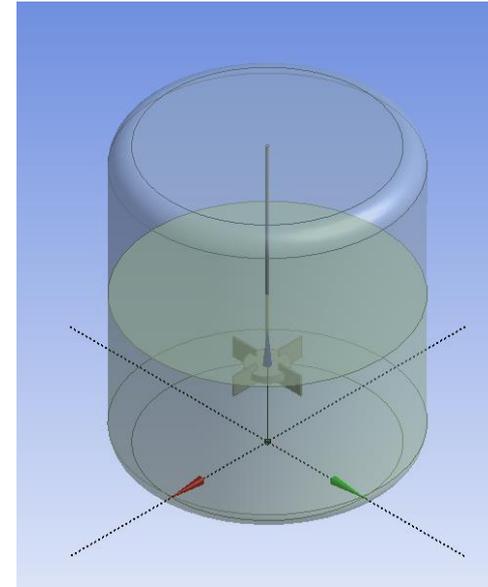
Efectos factibles de análisis:

- Viscosidad variable
- Agitación variable
- Relación de diámetro de impulsor vs diámetro de tanque variable

Comparativo entre predicción de mezcla perfecta y mezcla distribuida

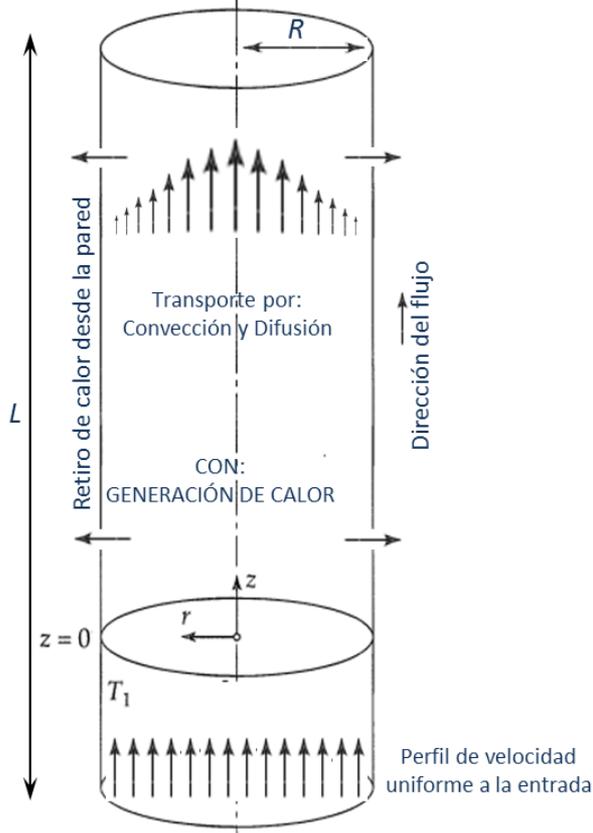


Caso 3D



Efecto del Mallado

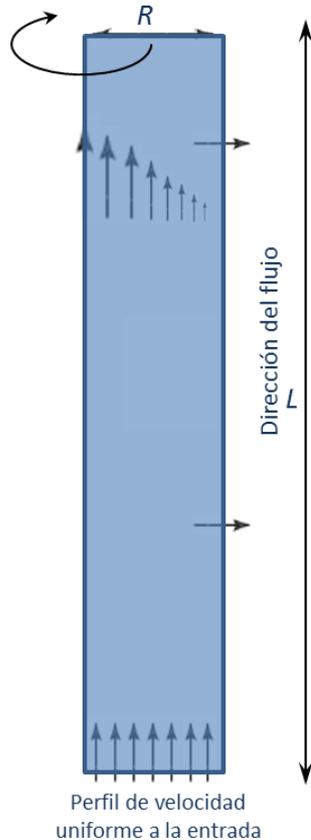
Efecto del Mallado



Flujo en una tubería con generación volumétrica e intercambio de calor en la pared

- Aun cuando el modelo matemático sea correcto, la confiabilidad de la solución
 - Sistema tubular con flujo uniforme a la entrada.
 - La mezcla líquida tiene propiedades fisicoquímicas similares al agua
 - Se genera calor en el fluido (generación volumétrica), a manera de una reacción exotérmica de orden cero
- $$\phi \left[\frac{W}{m^3} \right] = r \cdot \Delta h = kc_i^0 \cdot \Delta h = k \cdot \Delta h$$
- Se retira calor a través de la pared del sistema
 - Interpretación axisimétrica del sistema geométrico

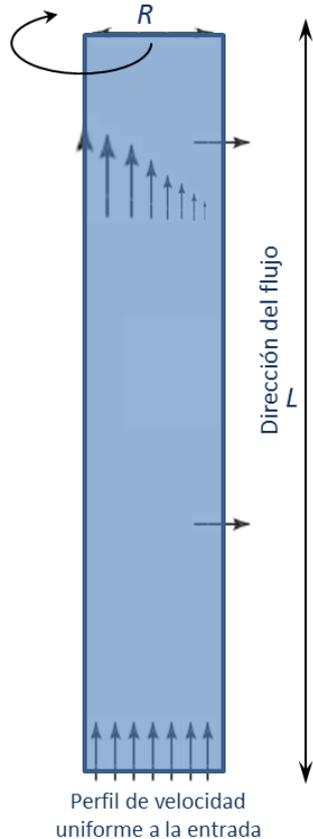
Efecto del Mallado



Flujo en una tubería con generación volumétrica e intercambio de calor en la pared

- Aun cuando el modelo matemático sea correcto, la confiabilidad de la solución
 - Sistema tubular con flujo uniforme a la entrada.
 - La mezcla líquida tiene propiedades fisicoquímicas similares al agua
 - Se genera calor en el fluido (generación volumétrica), a manera de una reacción exotérmica de orden cero
- $$\phi \left[\frac{W}{m^3} \right] = r \cdot \Delta h = kc_i^0 \cdot \Delta h = k \cdot \Delta h$$
- Se retira calor a través de la pared del sistema
 - Interpretación axisimétrica del sistema geométrico

Efecto del Mallado

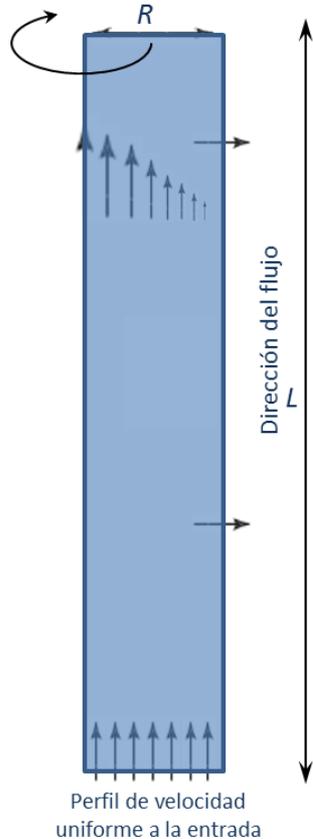


ESPECIFICACIONES:

- $R = 0.4 \text{ m}$
- $L = 2.4 \text{ m}$
- $V_0 = 0.004 \text{ m/s}$
- Generación: $300,000 \text{ W/m}^3$
- Intercambio: $-25,000 \text{ W/m}^2$

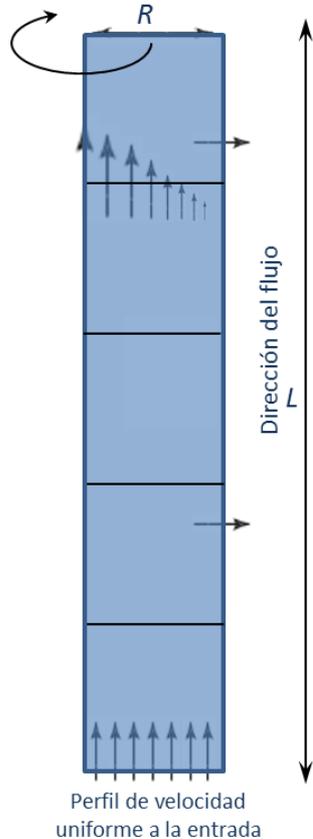
PROPIEDADES DE AGUA LÍQUIDA

Efecto del Mallado



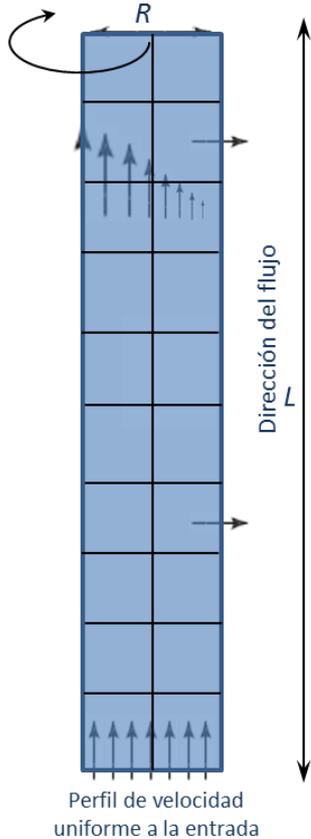
¿QUÉ TAMAÑO/NÚMERO DE CELDAS SE NECESITAN PARA QUE LA SOLUCIÓN NO DEPENDA DEL MALLADO DEL SISTEMA?

Efecto del Mallado



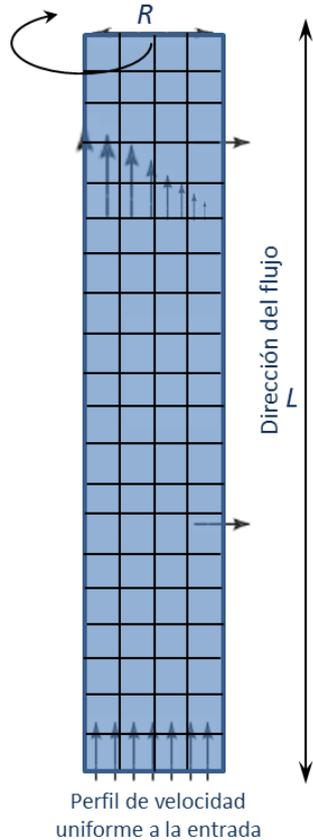
¿QUÉ TAMAÑO/NÚMERO DE CELDAS SE NECESITAN PARA QUE LA SOLUCIÓN NO DEPENDA DEL MALLADO DEL SISTEMA?

Efecto del Mallado



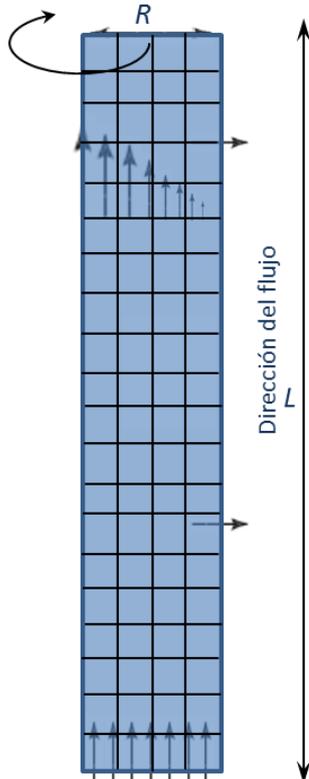
¿QUÉ TAMAÑO/NÚMERO DE CELDAS SE NECESITAN PARA QUE LA SOLUCIÓN NO DEPENDA DEL MALLADO DEL SISTEMA?

Efecto del Mallado



¿QUÉ TAMAÑO/NÚMERO DE CELDAS SE NECESITAN PARA QUE LA SOLUCIÓN NO DEPENDA DEL MALLADO DEL SISTEMA?

Efecto del Mallado

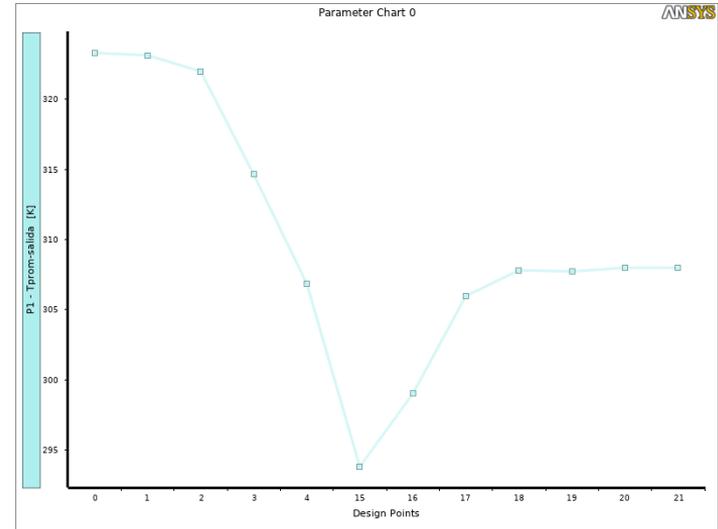


Perfil de velocidad uniforme a la entrada

Tamaño de Elemento (m)	Número de Elementos	T promedio (K)
0.4	7	323.30157
0.2	14	323.13337
0.1	28	321.98939
0.05	56	314.63588
0.04	70	306.85802
0.025	112	293.78766
0.02	140	299.00671
0.01	280	305.96501
0.005	560	307.80151
0.004	700	307.71627
0.0025	1120	307.98523
0.002	1400	307.97638

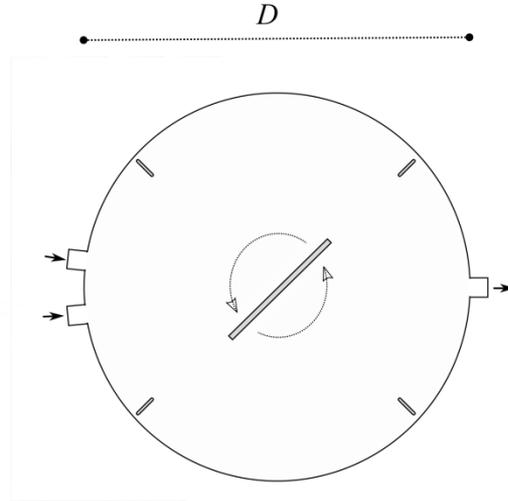
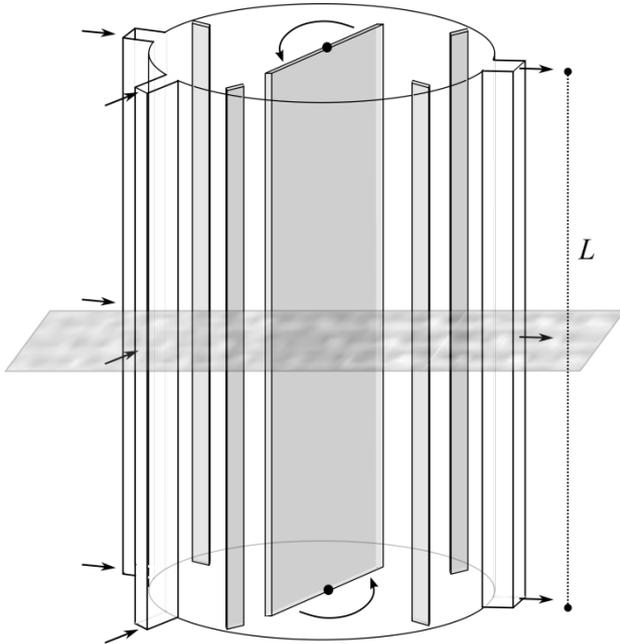
Parámetro guía: número/tamaño de elementos de la malla

Parámetro respuesta: temperatura promedio a la salida



Efecto de la Agitación y Tamaño de Impulso en Reactor Continuo

Efecto de la Agitación y Tamaño de Impulso en Reactor Continuo

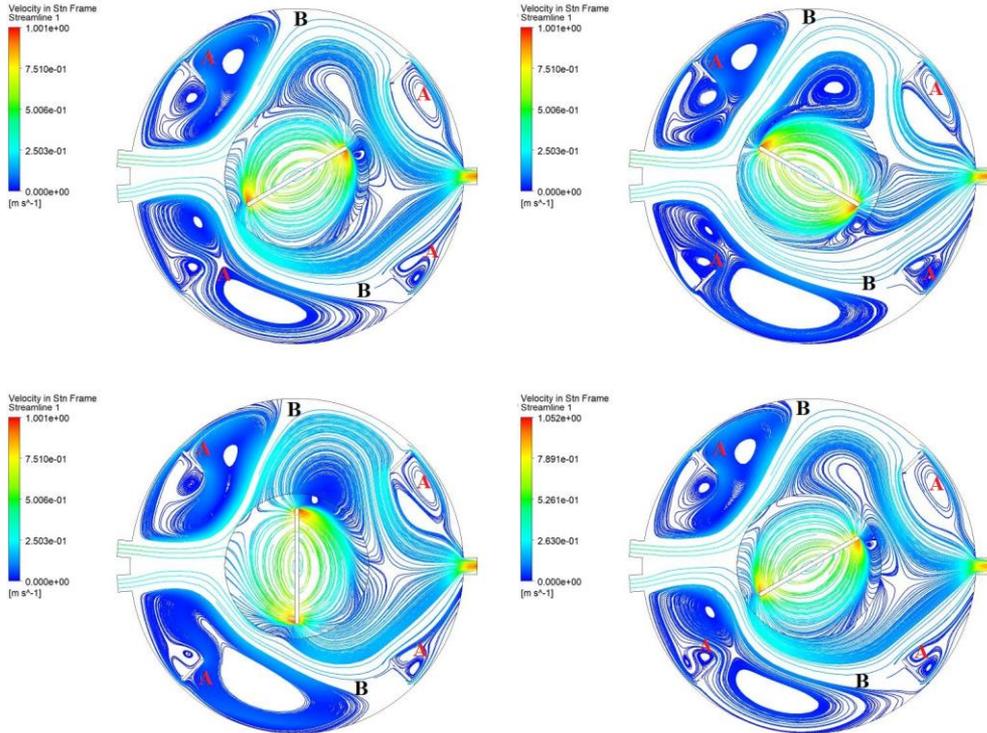


ESPECIFICACIONES:

- Hidrólisis de Glicidol $A + B \xrightarrow{cat} C$,

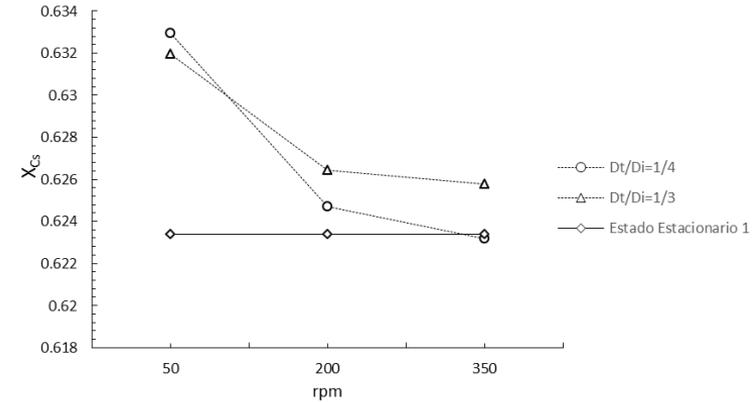
$$r = A \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_{cat} c_A$$
- Caso no isotérmico
- Intercambio de calor
- $T_{pared} = 293.15 \text{ K}$; $T_{entrada} = 293.15 \text{ K}$
- Tiempo espacial: 3s
- Alimentación agua y glicidol puros en sendas entradas
- Velocidad de agitación variable
- Diámetro de impulsor variable

Efecto de la Agitación y Tamaño de Impulso en Reactor Continuo



ANSYS
R19.2
Academic

ANSYS
R19.2
Academic



Casos Ilustrativos



Buscar

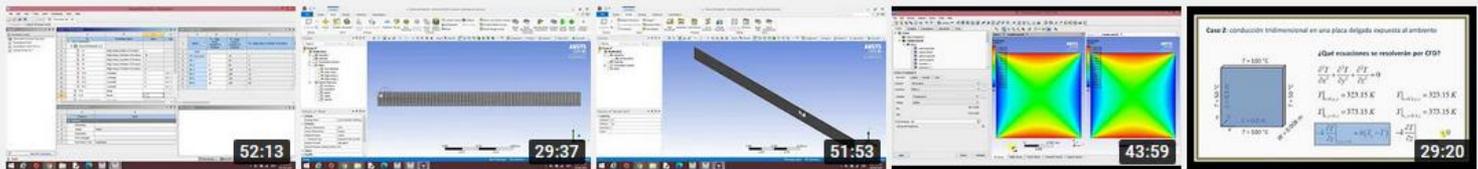


 ACCEDER

-  Principal
-  Explorar
-  Suscripciones
-  Biblioteca
-  Historial

PÁGINA PRINCIPAL **VIDEOS** LISTAS DE REPRODUCCIÓN CANALES DEBATE ACERCA DE

Videos subidos REPRODUCIR TODO ORDENAR POR



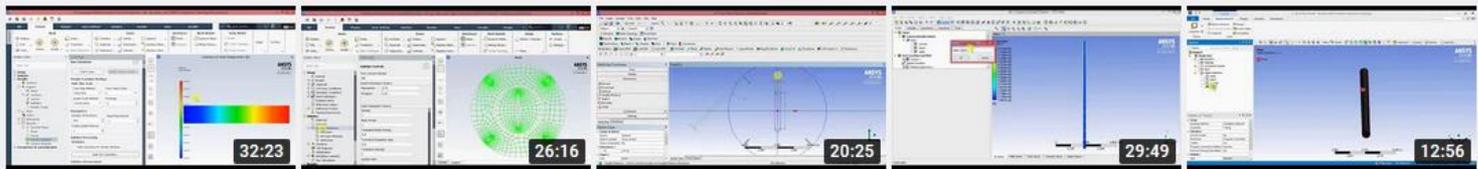
<p>Reactor de rendija 2D con reacción isotérmica (CFD - ...</p> <p>135 vistas • hace 7 meses</p>	<p>Reactor de rendija 2D con reacción isotérmica (CFD - ...</p> <p>131 vistas • hace 7 meses</p>	<p>Reactor de rendija 2D con reacción isotérmica (CFD - ...</p> <p>298 vistas • hace 7 meses</p>	<p>Conducción de Calor en una Placa Sólida 2D/3D (CFD - ...</p> <p>350 vistas • hace 11 meses</p>	<p>Conducción de Calor en una Placa Sólida 2D/3D (CFD - ...</p> <p>313 vistas • hace 11 meses</p>
---	---	---	--	--

Accede para dar "Me gusta" a los videos, realizar comentarios y suscribirte.

 ACCEDER

LO MEJOR DE YOUTUBE

-  Música
-  Deportes
-  Videojuegos



<p>Convergencia de Malla para Flujo Laminar con...</p> <p>451 vistas • hace 1 año</p>	<p>Reactor Discontinuo con Agitación (Batch)...</p> <p>493 vistas • hace 1 año</p>	<p>Reactor Discontinuo con Agitación (Batch)...</p> <p>404 vistas • hace 1 año</p>	<p>Convección de Calor en una Tubería con Flujo Laminar...</p> <p>457 vistas • hace 1 año</p>	<p>Convección de Calor en una Tubería con Flujo Laminar...</p> <p>363 vistas • hace 1 año</p>
--	---	---	--	--

... y otros casos descritos en texto

- La incorporación de CFD en la malla curricular de licenciatura permite incorporar el estudio virtual de aspectos formativos indispensables que no pueden analizarse bajo un enfoque tradicional

Relevancia del diseño espacial de i) puntos y ii) modos de alimentación en equipos continuos, iii) de la geometría de equipos discontinuos, iv) de la velocidad de agitación y tamaños de impulsores en equipos continuos agitados, v) de la convergencia de malla en la confiabilidad de soluciones numéricas, vi) determinación y correlación de coeficientes de película, vii) flujos con fluidos no Newtonianos, viii) sistemas de dos o más fases, etc.

- Las capacidades de esta herramienta son necesarias para sostener una correspondencia entre un paradigma en construcción en ingeniería química y la evolución gradual en la misma dirección de la malla curricular

- La familiarización de estudiantes de licenciatura con estas herramientas les da un panorama disciplinar más amplio y facilita en quienes tiene vocación de investigación su incorporación en posgrado con temas de tesis que las involucran
 - Análisis no lineal de reactores agitados continuos a partir de modelos de mezcla perfecta y dinámica de fluidos computacional (2019)
 - Análisis multiescala de transferencia de masa y bioreacción en cultivos sumergidos con areación (en proceso)
 - Diseño y evaluación tecno-económica de un secador solar-híbrido para el secado de sargazo (coasesor, en proceso)
- La situación actual de limitación de recursos alienta el desarrollo de trabajos teóricos que suelen requerir menos financiamiento que los de corte experimental

- La adaptación e implementación de herramientas científicas de diversa índole a la docencia son paso previo para explorar problemas de investigación relevantes, y en el camino permite la generación de productos académicos complementarios sobre didáctica de la ingeniería

Revistas Scopus (Chemical Engineering Education, Education for Chemical Engineers, Educación Química) y/o JCR (Journal of Engineering Education)

GRACIAS