



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**MODELADO DE LA DISTRIBUCIÓN DE TIEMPOS DE RESIDENCIA EN UN
REACTOR TIPO FILTRO PRENSA FM01-LC**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO**

PRESENTA

MIGUEL GONZÁLEZ MORALES



MÉXICO, D.F.

2013



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: Profesor: Rafael Herrera Nájera

VOCAL: Profesor: Francisco Javier Garfias Vázquez

SECRETARIO: Profesor: Ángel Enrique Chávez Castellanos

1er. SUPLENTE: Profesor: Aida Gutiérrez Alejandre

2° SUPLENTE: Profesor: Eligio Pastor Rivero Martínez

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA CAMPUS UNIDAD IZTAPALAPA

ASESOR DEL TEMA: DR. RAFAEL HERRERA NÁJERA

SUPERVISOR TÉCNICO: DR. ELIGIO PASTOR RIVERO MARTÍNEZ

SUSTENTANTE: MIGUEL GONZÁLEZ MORALES

Resumen

Se propone el modelado y estudio de los problemas en la hidrodinámica y en el transporte de masa, en un reactor electroquímico tipo filtro prensa FM01-LC y su comparación con un nuevo reactor, a través de la Distribución de Tiempos de Residencia, obtenidos con tres distintas formas:

- ❖ Técnica experimental, consiste en inyectar un trazador a la entrada en forma de pulso.
- ❖ Ajuste de las curvas de Distribución de Tiempos de Residencia experimentales con los modelos de MDA y PDE, Modelo de Dispersión Axial (MDA) y el Modelo de Zonas Dinámicas y Estancadas (PDE).
- ❖ Obtención de la Distribución de Tiempos de Residencia con el modelo de Dinámica de Fluidos Computacional o DFC con Comsol Multiphysics para simular el comportamiento hidrodinámico y de transporte de masa en el reactor FM01-LC modificado.

Se pretende que los resultados obtenidos con la simulación del modelo de Dinámica de Fluidos Computacional puedan predecir los datos experimentales, con el propósito de un mejor estudio y análisis de la hidrodinámica y transporte de masa en el reactor FM01-LC modificado.

Índice

Capítulo 1: Introducción.....	1
Capítulo: 2. Objetivos	5
Capítulo: 3. Antecedentes	7
3.1. Reactor FM01-LC.....	7
3.1.1. Antecedentes del estudio del patrón de flujo en el reactor FM01-LC.....	8
3.2. Comportamiento de un flujo ideal y no ideal en un reactor	10
3.2.1. Flujo tapón o flujo pistón (PFR).....	10
3.2.2. Tanque de flujo continuo perfectamente mezclado o CST	12
3.2.3. Modelo de tanques en serie con retromezclado	13
3.2.4. Problemas de los reactores reales.....	14
3.3 Distribución de Tiempos de Residencia.....	16
3.3.1. Descripción esquemática para la obtención de la Distribución de Tiempos de Residencia, DTR, técnica de estímulo-respuesta	17
3.3.2. Función de distribución de tiempo de residencia $E(t)$	19
3.3.3. Tiempo de residencia medio (τ).....	19
3.3.4. Función $F(t)$	19
3.3.5. Tiempo de residencia adimensional (θ)	20
3.3.6. Función $E(\theta)$	20

3.4. Tratamiento de datos para obtener una curva de DTR	21
3.4.1. Obtención de la curva de Distribución de Tiempos de Residencia, de una respuesta pulso tras una perturbación en alguna variable de cualquier reactor o sistema	22
3.4.2. Obtención de la curva de Distribución de Tiempos de Residencia, de una respuesta escalón tras una perturbación en alguna variable de cualquier reactor o sistema	25
3.4.3. Demostración que el procedimiento pulso y procedimiento escalón se obtiene la misma curva de Distribución de Tiempos de Residencia (DTR)	28
3.5 Modelos Físicos	30
3.5.1. Transferencia de Momentum, Modelo Hidrodinámico.....	30
3.5.2. Transporte de Masa: Convección Difusión	30
3.5.3 Tres regiones en un flujo turbulento.....	31
Capítulo: 4. Metodología	33
4.1. Determinación experimental de la Distribución de Tiempos de Residencia para el reactor FM01-LC y el reactor FM01-LC modificado, a diferentes flujos de entrada (0.5- 4.0 LPM)	34
4.2 Aproximación de las curvas de DTR experimentales usando el modelo de Dispersión Axial (MDA) y el modelo de Zonas Dinámicas y Zonas Estancadas o Modelo PDE	36
4.2.1 Modelo de Dispersión Axial MDA.....	37

4.2.2 Modelo de Zonas Dinámicas y Zonas Estancadas o Modelo PDE	41
4.3. Simulación del comportamiento hidrodinámico y de transferencia de masa (Dinámica de Fluidos Computacional o DFC) para el reactor FM01-LC modificado.....	43
4.3.1. Modelo geométrico del FM01-LC modificado en Comsol 4.3	43
4.3.2. Modelo de turbulencia: k- ϵ de número de Reynolds bajo	44
4.3.3 Modelo de Transporte de Masa (Convección y Difusión)	49
4.3.4. Resumen de Ecuaciones	52
Capítulo: 5. Resultados	54
5.1. Comparación de la Distribución de Tiempos de Residencia Experimentales, para el Reactor FM01-LC y el Reactor FM01-LC modificado	55
5.2. Comparación de la Distribución de Tiempos de Residencia Experimentales y Simulados con los modelos MDA y PDE, Para el Reactor FM01-LC y el Reactor FM01-LC Modificado.....	59
5.3. Comparación gráfica del reactor FM01- LC y el reactor FM01-LC modificado	63
5.4. Gráficos de la hidrodinámica y perfil de concentraciones a diferentes tiempos, obtenidos con Comsol 4.3 para el reactor FM01-LC Modificado.....	65
5.5. Obtención de la curva de Distribución de Tiempos de Residencia, de una respuesta escalón en la concentración de salida del reactor FM01-LC Modificado.....	71

5.6. Comparación de las DTR de los Datos Experimentales y Simulados con Comsol del reactor FM01-LC Modificado.....	76
5.7. Comparación de las DTR de Comsol con sus imágenes de gradientes de concentración.....	81
Capítulo: 6. Análisis de Resultados.....	88
6.1 Calculo del error.....	88
Capítulo: 7. Conclusiones.....	93
Capítulo: 8. Bibliografía.....	94
8.1. Libros.....	94
8.2 Artículos.....	94
Anexo I Metodología Comsol 4.3.....	97

CAPÍTULO:

1

Capítulo 1: Introducción

El comportamiento de cualquier reactor depende de dos aspectos. El primero es la cinética de la reacción y el segundo es el transporte de masa. Ambos están ligados a la conversión, una cinética lenta da como resultado una baja conversión, de igual modo un deficiente transporte de masa en el interior del reactor da una baja conversión. La forma más sencilla de definir la cinética de la reacción es mediante la ecuación de Arrhenius la cual depende de la temperatura y de la energía de activación. Por otro lado, el transporte de masa es tan importante como la cinética de la reacción es por esta razón que el trabajo se enfoca en el transporte de masa y sus problemas. En síntesis, la conversión en un reactor es función de la cinética de la reacción y el transporte de masa.

Conversión = Cinética de la Reacción x **Transporte de Masa**

Para describir el transporte de masa una de las técnicas más usadas es la Distribución de Tiempos de Residencia o DTR. Es decir, la función de distribución de tiempos de residencia describe el tiempo que han estado las moléculas de interés dentro del reactor. Es de mencionarse que no todas las moléculas,

elementos, y átomos tienen el mismo tiempo de residencia. Sumado a esto, los cambios y desviaciones en el tiempo de residencia de los elementos son función del transporte de masa. Agregado a lo anterior, la DTR se presenta en curvas en función del tiempo.

Las curvas de DTR son una muestra del transporte de masa a la salida de cada reactor y detectan los problemas en el transporte de masa. Sin embargo de acuerdo con Fogler (2008) las curvas de DTR no describen de manera completa la estructura de un reactor o un sistema de reactores específico. La DTR es singular para un reactor en específico. No obstante, el reactor no es singular para una DTR dada.

Por otro lado la DTR no identifica en que zona del reactor se encuentran los problemas de transporte de masa. Con el fin de identificar los problemas dentro de un reactor se utilizan diversas técnicas. Una de las técnicas más modernas y más utilizada es la dinámica de fluidos computacional (DFC), la dinámica de fluidos computacional resuelve la hidrodinámica y transporte de masa en una geometría en tercera dimensión. De esta forma es posible identificar los problemas del transporte de masa en el interior del reactor. De tal modo que para resolver la dinámica de fluidos computacional (DFC) el simulador Comsol Multiphysics en su versión 4.3.

Por otra parte, los reactores electroquímicos no están exentos de problemas en el transporte de masa, resultando particularmente importante para el reactor electroquímico tipo filtro prensa FM01-LC. Se define a un reactor tipo filtro prensa

con una geometría de un prisma rectangular, en donde el fluido pasa continuamente por el reactor. Principalmente el patrón de flujo se define en la entrada y salida del reactor electroquímico. Como resultado, un problema común en los reactores tipo filtro prensa como el FM01-LC es que se lleva a cabo una mala agitación a la entrada y salida del reactor, provoca que se agote el electrolito sin que exista una regeneración adecuada proveniente de la corriente fresca entrante. Por lo tanto al disminuir la concentración del electrolito reacciones secundarias pueden tener lugar disminuyendo la eficiencia y pureza del producto final (R.E.W. Jansson, 1980).

Se analizará el patrón de flujo en un nuevo reactor electroquímico el cual parte de la modificación de la geometría del reactor FM01-LC. Sobre todo, la modificación al reactor FM01-LC fue hecha con el propósito de mejorar el patrón de flujo dentro del reactor. Además para analizar el reactor modificado y compararlo con el conocido se utilizaron diversos pasos. El primer paso es la obtención de la Distribución de Tiempos de Residencia experimentalmente mediante la técnica estímulo respuesta con distintos flujo de entrada. El paso siguiente es ajustar las curvas de Distribución de Tiempos de Residencia experimentales con modelos matemáticos. El tercer paso consiste en el uso de la dinámica de fluidos computacional (DFC). Finalmente, se validan los resultados obtenidos en la dinámica de fluidos computacional (DFC) con las curvas de Distribución de Tiempos de Residencia (DTR) experimentales.

Una vez validada la dinámica de fluidos computacional o DFC con Comsol 4.3 para el reactor FM01-LC, se podrá reducir la necesidad de datos experimentales. Además de permitir futuras modificaciones. En conclusión, no solo se pretende resolver los problemas de transporte de masa en el reactor FM01-LC, también se pretende que la metodología propuesta en esta tesis sea utilizada para caracterizar y resolver problemas de transporte de masa en otros reactores.

CAPÍTULO:

2

Capítulo: 2. Objetivos

Objetivo General

- ❖ Modelar la Distribución de Tiempos de Residencia en un Reactor Tipo Filtro Prensa FM01-LC.
- ❖ Simular el movimiento del electrolito dentro del reactor y predecir la distribución de tiempos de residencia, validando los resultados con datos experimentales obtenidos mediante la técnica de estímulo-respuesta.

Objetivos Particulares

- ❖ Obtener y describir las curvas de Distribución de Tiempos de Residencia (DTR) para el reactor FM01-LC y para el reactor FM01-LC con modificaciones en los distribuidores de entrada y salida obtenidas experimentalmente.

- ❖ Describir las curvas de DTR con los modelos de MDA y PDE, Modelo de Dispersión Axial (MDA) y el Modelo de Zonas Dinámicas y Estancadas (PDE).

- ❖ Aplicar el Modelo de Dinámica de Fluidos Computacional o DFC para simular el comportamiento hidrodinámico y el transporte de masa del reactor FM01-LC modificado.

- ❖ Analizar las curvas de Distribución de Tiempos de Residencia (DTR) para el reactor FM01-LC modificado con el modelo de DFC validándolas con las curvas de DTR experimentales.

CAPÍTULO:

3

Capítulo: 3. Antecedentes

3.1. Reactor FM01-LC

El reactor tipo filtro prensa FM01-LC es utilizado en el tratamiento de aguas residuales provenientes de la industria minera, y almacenamiento de energía. El desempeño de un reactor FM01-LC depende de tres características de acuerdo con Rivera (2010):

- (1) Las características electro catalíticas del electrodo
- (2) La corriente y la distribución del potencial
- (3) Las características de la hidrodinámica de la fase líquida

El reactor FM01-LC fue diseñado para comportarse con un patrón de flujo de tipo pistón con el fin de evitar una mala distribución del potencial. Sin embargo esto no se consigue por completo, a efectos en la entrada y salida del reactor; provocando que existan flujo preferenciales y zonas de estancamiento (Bengoa et al, 2002).

El reactor FM01-LC (con un área del electrodo de 64 cm^2) es una versión a escala del reactor FM21-SP (área del electrodo de 21 dm^2), ambos reactores fueron diseñados por ICI (Imperial Chemical Industries). La figura 3.1 muestra las dimensiones y geometría del reactor

3.1.1. Antecedentes del estudio del patrón de flujo en el reactor FM01-LC

Durante los últimos 10 años diversos trabajos se han enfocado al estudio del patrón de flujo en el reactor FM01-LC. De acuerdo con Rivera, el distribuidor del reactor FM01-LC tal y como se muestra en la figura 3.1, la dirección del fluido es de izquierda a derecha, produce regiones con diferentes velocidades causando recirculaciones y zonas estancadas; las recirculaciones y zonas estancadas afectan el coeficiente global de transferencia de masa (Brown et al., 1992; Frías-Ferrer et al., 2008) a la entrada y salida del reactor. Estos efectos no son considerables en reactores con una gran longitud debido a que la entrada y salida representan una pequeña proporción de la longitud total del reactor. Sin embargo en reactores como el reactor FM01-LC, la entrada y salida representa un porcentaje considerable del reactor, comprometiendo la conversión y selectividad en una reacción química en el reactor. La necesidad de un nuevo distribuidor a la salida y entrada del reactor es necesaria si se desea mejor la distribución del fluido a lo largo del reactor.

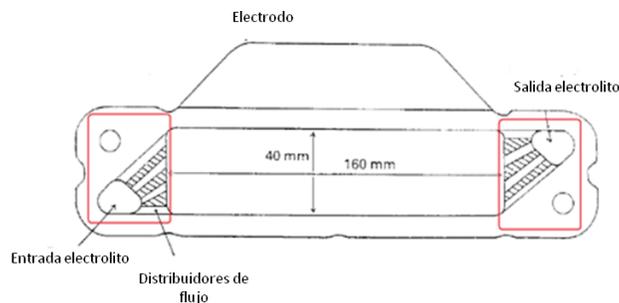


Figura.3.1 Corte horizontal en el reactor FM01-LC, en donde se indican los distribuidores de flujo (Trinidad, 1996)

Método experimental estándar para determinar las DTR de un reactor electroquímico

El método experimental estándar para determinar las DTR de un reactor electroquímico es introduciendo un trazador al reactor, el trazador es una sustancia que no interacciona con las reacciones que se llevan dentro del reactor y además de que no se adhiere a las paredes del reactor, se mide la concentración del trazador a la salida del reactor con respecto al tiempo (Westerterp et al, 1984). En el caso del FM01-LC se mide la conductividad con el fin de conocer una concentración promedio a la entrada y salida del reactor.

Con motivo de mejorar la transferencia de masa, se han utilizado diferentes estrategias, como: aumentar la velocidad del electrolito, facilitar la generación de gas en la superficie del electrodo o el uso obstáculos que promuevan la turbulencia (promotores de turbulencia). No todos resultan ser efectivos; el aumentar la velocidad al electrolito provoca una mayor demanda en la energía suministrada a la bomba y bajas conversiones (Brown C, 1995).

3.2. Comportamiento de un flujo ideal y no ideal en un reactor

El ingeniero químico requiere escoger la configuración de operación óptima en un reactor, en términos del patrón de flujo, existen dos modelos ideales de reactores con un mezclado perfecto. Los reactores ideales son:

1. Reactor de Flujo pistón o PFR por sus siglas en inglés
2. Tanque de flujo continuo perfectamente mezclado o CSTR por sus siglas en inglés

Estos dos tipos de reactores ideales suponen los dos extremos de mezclado un PFR representa el mezclado mínimo y el CSTR representa un mezclado máximo.

3.2.1. Flujo tapón o flujo pistón (PFR)

El modelo de un Flujo Tapón o Flujo Pistón (PF) requiere que no exista un mezclado longitudinal de sus elementos, por lo tanto que no hay dispersión, ni gradientes de temperatura, velocidad, concentración en la dirección radial (figura 3.2), todos los átomos de material que entran y salen del recipiente han estado dentro de él exactamente el mismo tiempo. La velocidad, composición, presión, temperatura de los elementos en un corte diametral es exactamente la misma, considerando que el mezclado radial es infinitamente rápido.

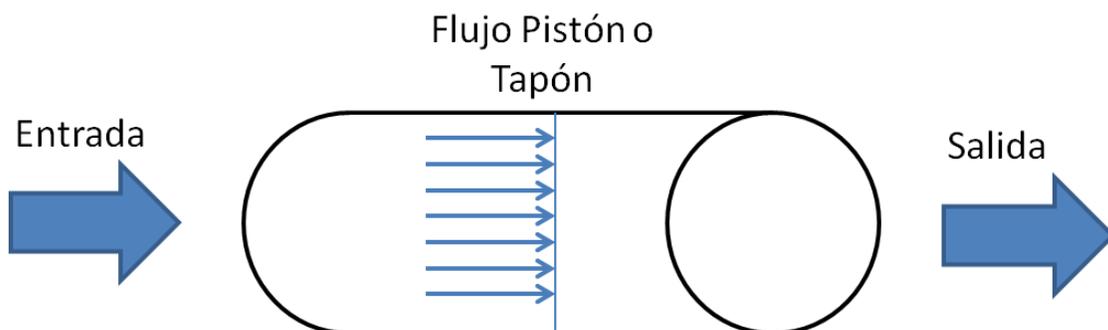


Figura 3.2. Representación esquemática de un reactor ideal de flujo pistón o tapón

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_z \frac{dC}{dz} - D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{D_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial C}{\partial r} \right] = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{D_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial C}{\partial r} \right] = 0 \quad (3.2)$$

$$u_z \frac{dC}{dz} \gg D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_z \frac{dC}{dz} = 0 \quad (3.4)$$

Para las ecuaciones 3.1 a 3.4, la concentración C es la concentración del reactivo o trazador que entra al reactor tubular, u_z es la velocidad en la dirección z que lleva el fluido, D_z es el coeficiente (coeficiente de difusión en la dirección z) de dispersiones la dirección z, D_r es el coeficiente de dispersión en la dirección radial. La ecuación 3.1 es igual a cero debido a que no existe reacción.

El balance de masa general se encuentra en la ecuación 3.1, sin embargo con las consideraciones de que solamente existe transporte de masa en la dirección axial (ecuación 3.2), predomina el transporte por convección por encima de la difusión en la dirección z (ecuación 3.3), el balance de masa para un reactor de flujo pistón (PFR) se ilustra en la ecuación 3.4 quedando el término de acumulación y convección en la dirección z.

3.2.2. Tanque de flujo continuo perfectamente mezclado o CST

El modelo ideal de un CST asume que el contenido dentro del reactor está perfectamente mezclado y por lo tanto las propiedades del sistema son uniformes en todo el reactor y a la salida del mismo. La concentración y la temperatura son las mismas en cualquier punto del reactor. La aproximación para que un reactor se comporte como un CST es válida siempre y cuando el tiempo necesario para que se disperse un elemento entrante del fluido (trazador) es mucho más corto que el tiempo de residencia promedio dentro del tanque.

Un perfecto mezclado, indica que una molécula de trazador que entre al reactor tiene una probabilidad igual de estar en cualquier parte del contenedor justo después de haber ingresado al mismo. Esto quiere decir que todos los elementos del reactor tienen la misma probabilidad de salir del reactor ante el próximo incremento de concentración de un trazador.

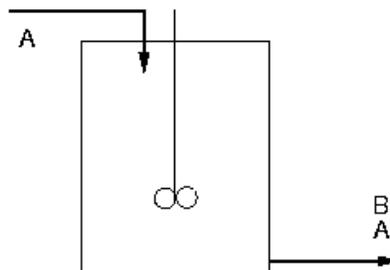


Figura 3.3. Tanque de flujo continuo perfectamente mezclado

$$\frac{\partial C_A}{\partial z} = 0; \frac{\partial C_A}{\partial r} = 0 \quad (3.5)$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{Q}{V}(C_{entrada} - C) \quad (3.6)$$

Un mezclado perfecto indica que no hay cambio de la concentración ni en z ni en r , ecuación 3.5. Para un sistema en estado transitorio con flujos volumétricos de entrada y salida constantes y volumen de reacción constante, la ecuación de balance para un CST es la ecuación 3.6, el tiempo de residencia es constante, el volumen y la alimentación volumétrica constantes. La figura 3.3 muestra esquemáticamente un CST, en donde entra el componente A y se mezcla inmediatamente al entrar al tanque, el flujo volumétrico de entrada y salida tiene el mismo valor dejando el volumen del reactor constante. La acumulación está dada por la diferencia de los flujos másicos que entran y salen del reactor.

3.2.3. Modelo de tanques en serie con retromezclado

En ocasiones, con el propósito de incrementar la conversión de él o los reactivos de interés, se acostumbra recircular una parte de la corriente que sale del reactor. Esta forma de operar es relativamente sencilla; sin embargo, el análisis matemático de este tipo de reactores es más complejo que el de un PF o CST, por la dificultad que se tiene para establecer su tiempo de residencia. Uno de los modelos que se utiliza para analizar reactores con recirculación es considerarlos como un PF con recirculación (Carberry, 2001), utilizando como parámetro de ajuste a la recirculación.

Por otro lado, el modelo de tanques en serie consiste en un conjunto de tanques perfectamente mezclados CST en donde la salida de uno es la entrada del otro y además existe una corriente que va en sentido contrario. Pese a que la concentración es uniforme a lo largo de un reactor, existe un decremento progresivo del reactante o trazador conforme el efluente pasa de un reactor a otro.

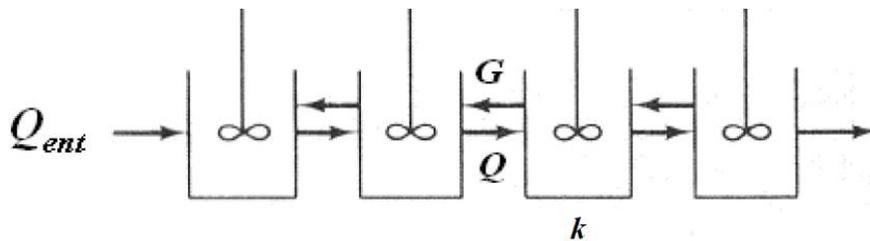


Figura 3.4. Modelo de tanques en serie con retromezclado

Balance de Materia esta dado por la ecuación 3.7.

$$Q(C_{k-1} - C_k) + G(C_{k+1} - C_k) = 0 \quad (3.7)$$

3.2.4. Problemas de los reactores reales

a. Zonas Estancadas

Como se ha dicho anteriormente, la conversión de él o los reactivos de interés en el interior de un reactor depende de las condiciones que prevalecen en dicho equipo, siendo el tiempo de residencia uno de los parámetros más importantes. En reactores que tienen zonas estancadas. Resulta complicado determinar su tiempo

de residencia. Como consecuencia, la dificultad para modelar matemáticamente su comportamiento.

En las zonas estancadas hay poco o ningún intercambio de material con las regiones bien mezcladas. Resultando que en estas zonas prácticamente no exista reacción alguna.

b. Recirculación

Es común que en los reactores tubulares o de canal, la salida no tenga el mismo diámetro que el resto del reactor, ocasionando que el flujo choque con las paredes cercanas a la salida del reactor induciendo recirculaciones. Las recirculaciones son partes del fluido con un tiempo de residencia más grande que al del promedio.

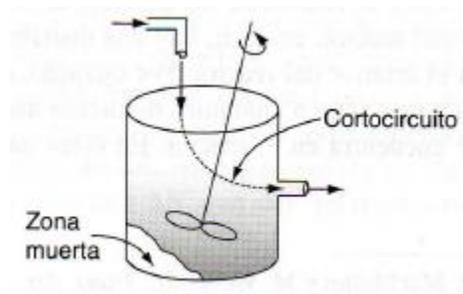


Figura 3.5 Zona muerta y cortocircuito en un CST

c. Cortocircuitos (Bypass) o Flujo Preferenciales

Los reactores que no tienen un mezclado ideal (no PFR ni CSTR) tienen zonas en las cuales el fluido viaja a una velocidad mayor a la velocidad promedio. Son zonas de flujo preferencial, las cuales tienen un tiempo de residencia relativamente menor y esto se refleja en la conversión del reactivo de interés.

Evidentemente, la presencia de zonas con un flujo preferencial es otro de los factores que hace más compleja la determinación del tiempo de residencia del reactor.

Existen algunas regiones en donde el fluido pasa más rápido dentro del reactor, provocando que estas regiones tengan un menor tiempo de residencia, y de esta forma obteniendo una menor conversión. La figura 3.5 muestra el cortocircuito en un reactor CSTR. En el caso de los reactores tubulares en donde la reacción sucede en las paredes del reactor, un cortocircuito o flujo preferencial sería en el centro del reactor que en ocasiones tiene una velocidad mayor que el resto del fluido.

Con el fin de caracterizar y analizar las desviaciones de un reactor respecto al comportamiento ideal o determinar algunos tipos de problemas en su patrón de flujo se utiliza la Distribución de Tiempos de Residencia (DTR).

3.3 Distribución de Tiempos de Residencia

Una forma de modelar matemáticamente el grado de mezclado que tiene un reactor, es considerar que su comportamiento se puede representar utilizando la Distribución de Tiempos de Residencia o DTR, la cual indica la presencia de zonas estancadas y flujos preferenciales en el reactor. Este enfoque implica la determinación experimental de dicha DTR, y esto se consigue operando el reactor en condiciones de flujo similares a las de reacción, pero en lugar de llevar a cabo

la transformación química se estudia el transporte de masa de un trazador en un estado transitorio. El uso de la DTR experimental fue usada por vez primera por P.V. Danckwerts en 1953, aunque fue propuesta en un artículo de MacMullin y Weber (1935).

3.3.1. Descripción esquemática para la obtención de la Distribución de Tiempos de Residencia, DTR, técnica de estímulo-respuesta

El flujo principal lleva un líquido de arrastre el cual lleva al trazador sin interaccionar químicamente con él, el líquido más común es el agua. El método más simple, y utilizado para la obtención de las curvas de DTR es utilizar un trazador que no interfiera ni afecte al equipo. El trazador es introducido al flujo principal por medio de una válvula la cual manda al trazador, en forma de alguna perturbación como se muestra en la figura 3.6, las perturbaciones más utilizadas son la perturbación pulso y escalón. Para una perturbación pulso el fluido es inyectado, o en el caso de usar una válvula se abre y cierra en un tiempo muy corto dejando entrar una pequeña porción del trazador. Y para una perturbación escalón la válvula antes del tiempo cero se encuentra completamente cerrada, justo después del tiempo cero se abren completamente y se mantiene abierta durante el experimento dejando pasar el trazador.

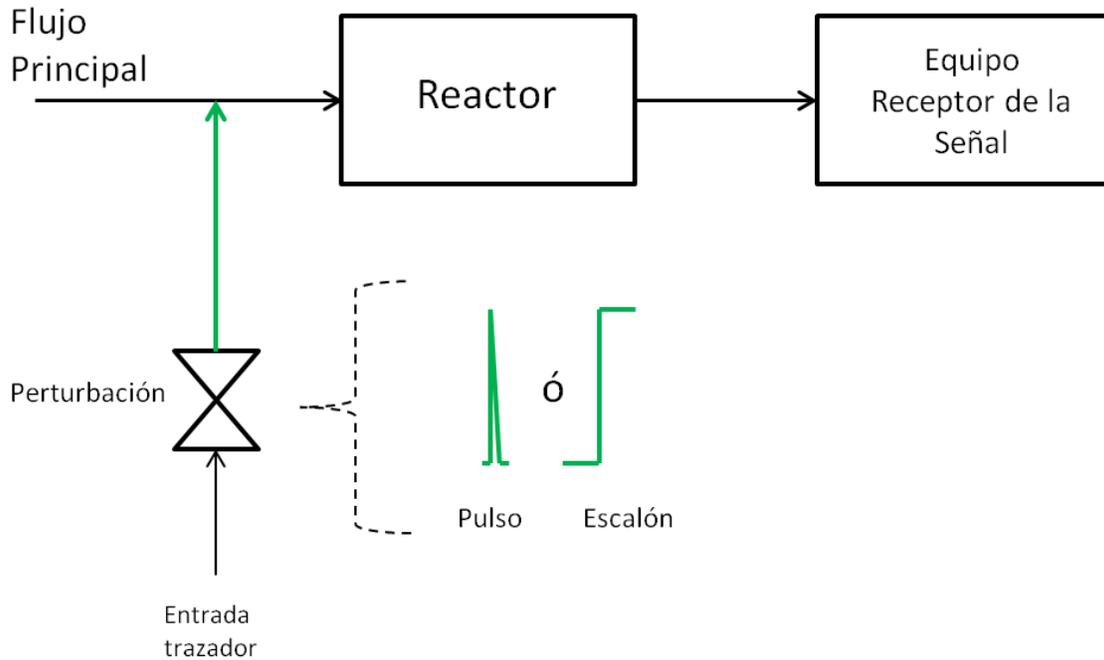


Figura: 3.6. Obtención de las curvas de DTR de forma experimental

El flujo principal con la perturbación, ya sea pulso o escalón, entra al reactor en donde el patrón de flujo se desarrolla y a la salida del reactor se instala un equipo que mida de forma indirecta o directa la concentración del trazador con respecto al tiempo, por ejemplo con un espectrofotómetro.

Las dos principales características de las curvas de DTR son:

1. Diagnóstico de problemas de reactores en operación. Zonas estancadas, cortocircuitos y recirculaciones.
2. Predicción de la conversión o la concentración de efluente en reactores existentes o disponibles, cuando se va a realizar una nueva reacción en el reactor.

Antes de empezar a explicar el procedimiento para obtener las curvas de DTR, es conveniente explicar algunos términos fundamentales que se utilizan en este tipo de análisis, para ello se va a utilizar el enfoque y la nomenclatura de Fogler (2008).

3.3.2. Función de distribución de tiempo de residencia $E(t)$

La función de distribución de tiempo de residencia $E(t)$ describe de manera cuantitativa el tiempo que han estado las especies de interés (marcadores o reactivos, según el caso) que se transportan en el fluido que fluye dentro del reactor.

3.3.3. Tiempo de residencia medio (τ)

El tiempo de residencia medio, indica el tiempo promedio que le tomó a la especie de interés transportarse a través del reactor.

3.3.4. Función $F(t)$

La función $F(t)$ está definida como la fracción del efluente del reactor que tiene un tiempo de residencia menor que el tiempo de interés t . Para el escalón se refiere a la fracción acumulada que ha cambiado la concentración de trazador con respecto al tiempo t . Cuando $F(t)$ alcance un valor de uno entonces la concentración del trazador con respecto al tiempo habrá llegado a un nuevo estado estacionario. Danckwerts (1953) definió $F(t)$ como *función de la distribución acumulativa*.

3.3.5. Tiempo de residencia adimensional (θ)

El tiempo de residencia adimensional, θ , se obtiene a partir de la división del tiempo físico entre el tiempo de residencia promedio.

3.3.6. Función $E(\theta)$

La función de la distribución de tiempos de residencia adimensional ($E(\theta)$) permite comparar el tiempo que pasa una molécula, átomo o elemento en cualquier reactor y flujo de entrada en cualquier reactor, si se tomara solo la función $E(t)$ los valores serían completamente diferentes y su comparación sería imposible.

3.4. Tratamiento de datos para obtener una curva de DTR

Existen dos formas de tratar los datos de salida dependiendo del tipo de perturbación que se le haga al sistema como se muestra en la figura 3.7: (1) la primera forma de tratar los datos de salida de un reactor corresponde a la perturbación tipo pulso, (2) la segunda forma de tratar los datos es si la perturbación inicial es de tipo escalón.

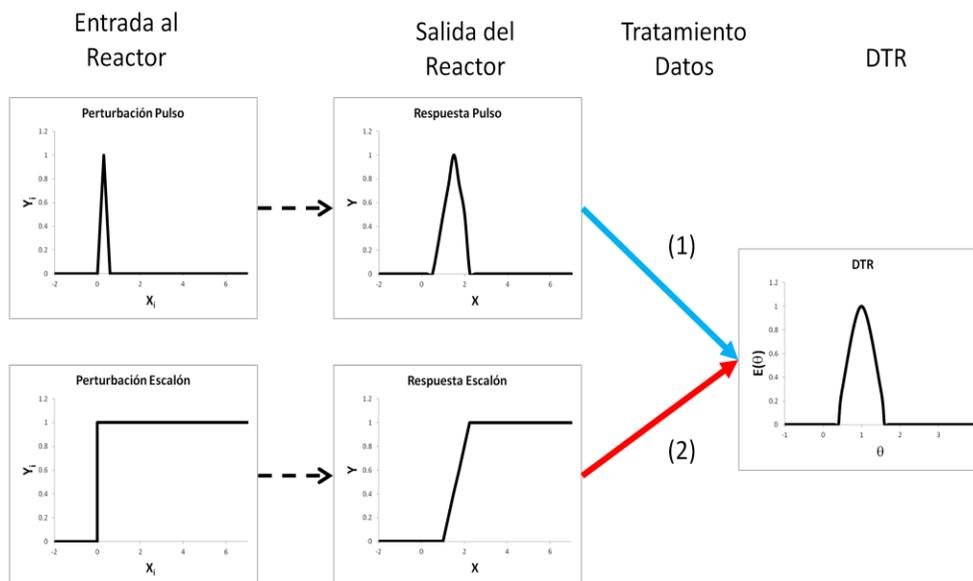


Figura: 3.7. Perturbación pulso y escalón a la entrada del reactor; respuesta de ambas perturbaciones a la salida del reactor, tratamiento para la respuesta pulso y escalón, (1) y (2) respectivamente; y la DTR final

3.4.1. Obtención de la curva de Distribución de Tiempos de Residencia, de una respuesta pulso tras una perturbación en alguna variable de cualquier reactor o sistema

El procedimiento mostrado en la figura 3.8, es aplicable para la obtención de las curvas de Distribución de Tiempos de Residencia en cualquier sistema o reactor que haya sufrido una perturbación tipo pulso.

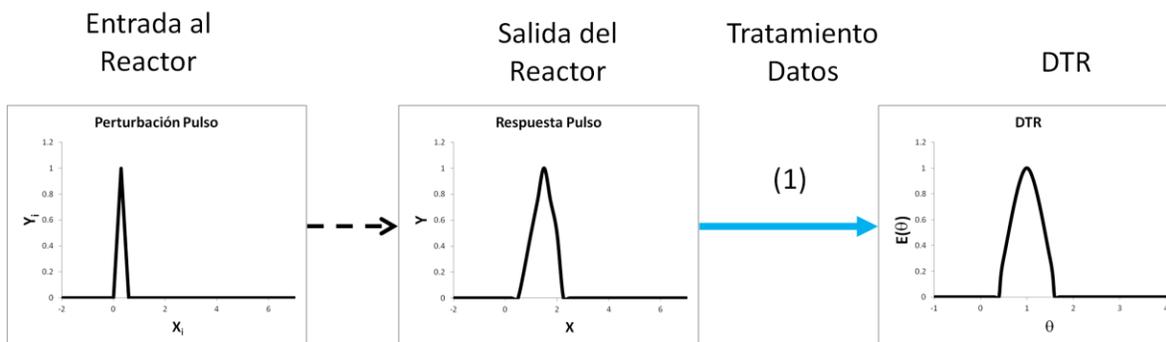


Figura: 3.8 Perturbación pulso a la entrada del reactor; respuesta a la salida del reactor, tratamiento para la respuesta pulso (1) y la DTR final.

El tiempo de residencia promedio indica el tiempo promedio que pasa una molécula dentro de un sistema o reactor, el tiempo que pasa desde su entrada a su salida. Y está definido por la ecuación 3.8.

$$\tau = \frac{\int_0^{\infty} t C dt}{\int_0^{\infty} C dt} = \frac{\sum_{i=0}^n t_i \cdot \Delta t \cdot C_i}{\sum_{i=0}^n \Delta t \cdot C_i} \quad (3.8)$$

La ecuación 3.9 indica el área bajo la curva de la concentración contra el tiempo a la salida del reactor.

$$A = \int_0^{\infty} C dt = \sum_i C_i \Delta t_i \quad (3.9)$$

El tiempo adimensional se obtiene a partir de la división del tiempo físico entre el tiempo de residencia promedio, el tiempo adimensional está definido por la ecuación 3.10.

La función de la distribución de tiempos de residencia está dada por la ecuación 3.11). De acuerdo con Fogler (2008), es la función que describe de manera cuantitativa cuanto tiempo han pasado diferentes elementos del fluido dentro del reactor. En ocasiones $E(t)$ se denomina función de distribución de edades de salida. La edad de una molécula, átomo o elemento es el tiempo que ha residido en el reactor.

$$\theta = \frac{t_i}{\bar{\tau}} \quad (3.10)$$

$$E(t) = \frac{C_i}{A} = \frac{C_i}{\int_0^{\infty} C dt} = \frac{C_i}{\sum_i C_i \Delta t_i} \quad (3.11)$$

.

Función de la distribución de tiempos de residencia adimensional

$$E(\theta) = \tau E(t) \quad (3.12)$$

La función de la distribución de tiempos de residencia adimensional permite comparar la DTR con cualquier reactor y flujo.

$$\int_{t_1}^{t_2} E(t) dt \quad (3.13)$$

$$\int_0^{\infty} E(t) dt = 1 \quad (3.14)$$

Las ecuaciones 3.13 y 3.14 explican mejor el propósito de las DTR, la ecuación 3.13 indica la fracción de materia o trazador que sale del reactor y ha residido dentro de él entre los tiempos t_1 y t_2 .

Varianza

$$\sigma^2 = \frac{\int_0^{\infty} [t-\tau]^2 c dt}{\int_0^{\infty} c dt} = \frac{\sum_i [t_i-\tau]^2 C_i \Delta t_i}{\sum_i C_i \Delta t_i} \quad (3.15)$$

Varianza adimensional

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{\sigma^2}{\tau^2} \quad (3.16)$$

La varianza indica la dispersión de la distribución. A medida que el valor de la varianza es mayor, la dispersión de la distribución también lo es. La varianza es un valor que muestra que tanto se alejan los datos de la función de la distribución de tiempos de residencia del valor correspondiente al tiempo promedio de residencia.

3.4.2. Obtención de la curva de Distribución de Tiempos de Residencia, de una respuesta escalón tras una perturbación en alguna variable de cualquier reactor o sistema

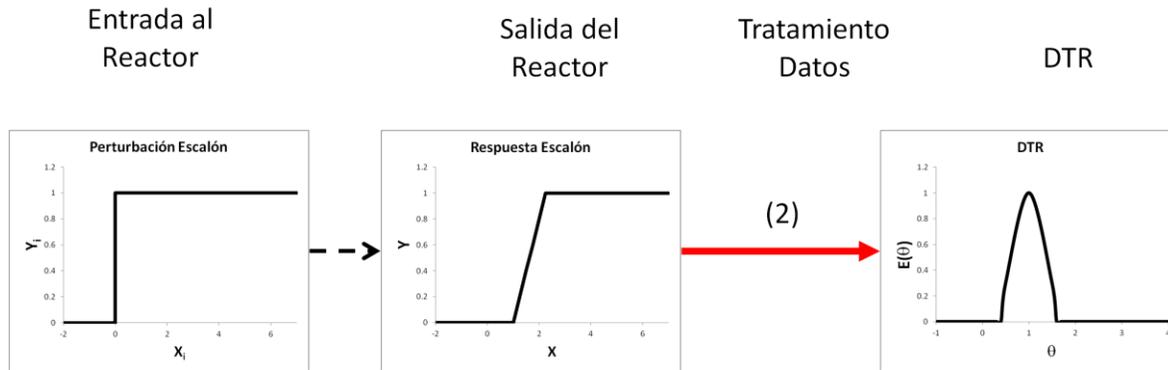


Figura: 3.9. Perturbación escalón a la entrada del reactor, respuesta a la salida del reactor, tratamiento para la respuesta escalón (2) y la DTR final

El procedimiento propuesto en la figura 3.9, no es muy diferente al tratamiento de una respuesta de un pulso, sin embargo existen algunos pasos que son importantes mencionarlos, los datos a tratar son los mismos, la concentración del trazador a la salida del reactor en un tiempo dado.

$$CA(t) = \text{Concentración} \quad (3.17)$$

$$\frac{CA}{CA0} [=] \text{Concentración Adimensional} \quad (3.18)$$

La ecuación 3.18 deja sin dimensiones a la concentración dividiéndola entre la concentración del estado estacionario CA_0 . La concentración adimensional además de dejar sin unidades a la concentración si se desea ayuda a compara diferentes respuestas de una perturbación escalón usando diferentes flujos de entrada.

$$\frac{CA}{CA_0} = F(t) \quad (3.19)$$

$$F(t) = \int_0^t E(t) dt \quad (3.20)$$

Un dato muy importante que nos da el valor de la concertación adimensional para una perturbación escalón, es el valor de $F(t)$ y es como la fracción de efluente que ha estado en reactor en un tiempo menor a t . Para el escalón se refiere a la fracción acumulada que ha cambiado la concentración de trazador con respecto al tiempo t . Cuando $F(t)$ alcance el valor de uno entonces la concentración del trazador con respecto al tiempo habrá llegado a un nuevo estado estacionario. Danckwerts (1953) definió la ecuación 3.19 como *función de la distribución acumulativa*. $F(t)$

El procedimiento para adimensionalizar la función $E(t)$ es muy similar al procedimiento utilizado para tratar los datos de una respuesta tipo pulso

$$\Delta t = \Delta t_i = t_i - t_{i-1} \quad (3.21)$$

Tiempo de Residencia Promedio (τ)

$$\tau = \frac{\sum_{i=0}^n t_i \cdot \Delta t \cdot E(t)}{\sum_{i=0}^n \Delta t \cdot E(t)} \quad (3.22)$$

La ecuación 3.22 es parecida a la ecuación 3.8 para un pulso, sin embargo en lugar de ser la concertación a un tiempo t es la distribución de tiempos de residencia $E(t)$.

$$E(t) = \frac{d}{dt}(F(t)) \quad (3.23)$$

Las ecuaciones para obtener el tiempo adimensional y la edad adimensional son 3.8 y 3.12- respectivamente

3.4.3. Demostración que el procedimiento pulso y procedimiento escalón se obtiene la misma curva de Distribución de Tiempos de Residencia (DTR)

Con la definición de $F(t)$ en las ecuaciones 3.21 y 3.22 se puede obtener la función $E(t)$, ecuación 3.23.

$$\frac{d}{dt}(F(t)) = \frac{d}{dt}(\int_0^t E(t)dt) = E(t) \therefore E(t) = \frac{d(\frac{CA}{CA_0})}{dt} \quad (3.23)$$

$$\frac{d}{dt}(F(t))[Escalón] = E(t)[Pulso]$$

La ecuación 3.23 demuestra que la curva de Distribución de Tiempos de Residencia (DTR) es exactamente la misma, con cualquiera de los dos procedimientos, escalón o pulso.

$$\frac{d(\frac{CA}{CA_0})}{dt} = E(t) = Pendiente \quad (3.24)$$

La ecuación 3.24 es muy importante y es la diferencia más importante entre el tratamiento de los datos de una respuesta escalón y pulso. Además la función de

la distribución de tiempos de residencia $E(t)$ es directamente la derivada de la concentración adimensional con respecto al tiempo, para una perturbación escalón. La derivada representa la pendiente de la curva de concentración adimensional entre el tiempo siendo el punto de inflexión en la función $F(t)$ el valor más grande de $E(t)$.

3.5 Modelos Físicos

El patrón de flujo del fluido que circula por el reactor determina la Distribución de Tiempos de Residencia y, consecuentemente el transporte de masa. Por lo tanto para modelar el comportamiento de un reactor mediante un modelo que presente un flujo segregado, es necesario determinar el patrón de flujo del reactor, y esto se hace resolviendo la ecuación de transporte de momentum y transporte de masa.

3.5.1. *Transferencia de Momentum, Modelo Hidrodinámico*

Para el estudio de la hidrodinámica en estado estacionario se resuelven dos ecuaciones, la ecuación de continuidad (ecuación 3.25) y la ecuación de Navier-Stokes con promedios en Reynolds (RANS) la cual es una modificación para un régimen turbulento de la ecuación de movimiento.

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.25)$$

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + F \quad (3.26)$$

Las ecuaciones de continuidad y de movimiento se explican en la sección 4.3.2, lo que hay que destacar que de estas dos ecuaciones se obtiene un perfil de velocidades \mathbf{u} en estado estacionario el cual es ligado con las ecuaciones de transporte de masa para obtener el perfil de concentraciones en estado dinámico.

3.5.2. *Transporte de Masa: Convección Difusión*

Para describir el transporte de masa, se acopló la velocidad obtenida en el modelo de la ecuación de Navier - Stokes al modelo de transporte Convección y Difusión.

Transferencia de Masa (Convección y Difusión)

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \cdot \nabla C_i + \nabla \cdot (D_i + D_{i,T}) \nabla C_i \quad (3.27)$$

La ecuación 3.20 define que el cambio en la concentración con respecto al tiempo es igual a la parte convectiva $= -u \cdot \nabla C_i$ más la parte difusiva $\nabla \cdot (D_i + D_{i,T}) \nabla C_i$. La parte convectiva está definida como el producto punto entre la velocidad normal (u) y el gradiente de la concentración ∇C_i . La parte difusiva se define como la difusión laminar y turbulenta por el gradiente de concentraciones.

3.5.3 Tres regiones en un flujo turbulento

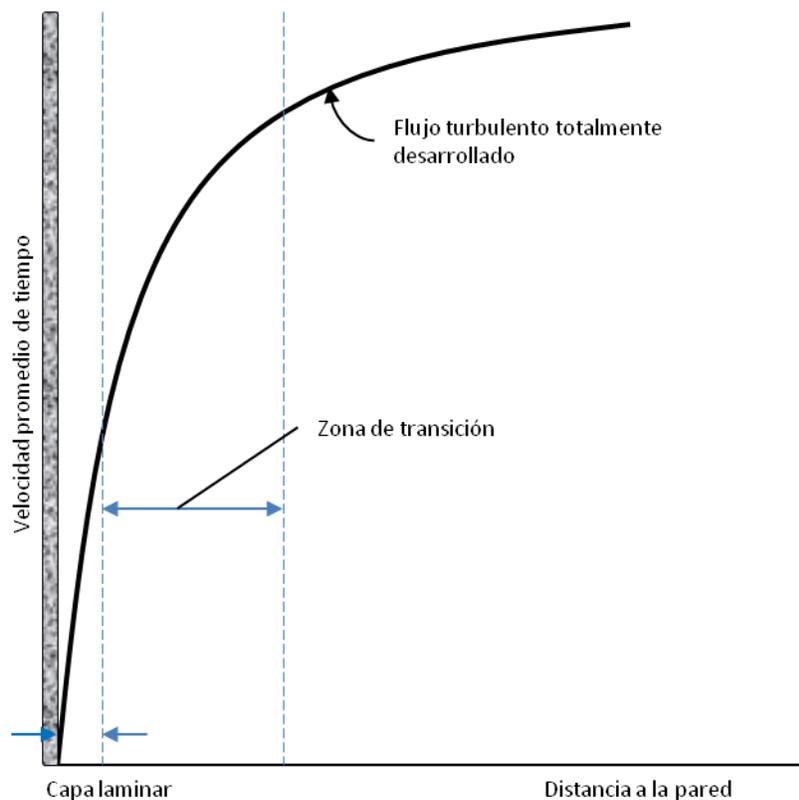


Figura: 3.10 Distribución de velocidad para el flujo turbulento en el interior de un reactor, región próxima a la pared (imagen obtenida del libro R.B Bird 2008, Fenómenos de transporte, figura 5.1-2, pagina 5-4)

De acuerdo con Bird (2008) si se produce una perturbación en el sistema apreciable, el movimiento laminar se transforma en movimiento al azar que caracteriza al flujo turbulento. La perturbación puede ser provocada por un distribuidor a la entrada de cualquier reactor haciendo que cualquier flujo tenga un movimiento al azar, y es por esta razón que sin importar el Reynolds, el fluido se trató con un patrón de flujo turbulento. Un flujo turbulento que tiene contacto con una pared desarrolla 3 regiones: (a) capa laminar, (b) zona de transición y (c) flujo turbulento. La mayoría de los modelos consideran que la región a tiene una contribución despreciable, sin embargo se observó que los resultados obtenidos con esta consideración no eran del todo satisfactorios en los modelos usados para el CFD. Por lo tanto se considerara la región cercana a la pared como una capa laminar esperando que se obtengan resultados cercanos a la realidad.

CAPÍTULO:

4

Capítulo: 4. Metodología

Las estrategias teóricas y experimentales para el análisis para el reactor FM01-LC y para el reactor FM01-LC con modificaciones en los distribuidores de entrada y salida, consistieron en 3 pasos:, (1) Determinación experimental de la Distribución de Tiempos de Residencia para el común y nuevo distribuidor del reactor, a diferentes flujos de entrada (0.5- 4.0 LPM), (2) Aproximación de las curvas de DTR experimentales usando el modelo de Dispersión Axial (MDA) y el modelo de Zonas Dinámicas y Zonas Estancadas o Modelo PDE, (3) Simulación del comportamiento hidrodinámico y de transferencia de masa (Dinámica de Fluidos Computacional o DFC) para el reactor FM01-LC modificado.

4.1. Determinación experimental de la Distribución de Tiempos de Residencia para el reactor FM01-LC y el reactor FM01-LC modificado, a diferentes flujos de entrada (0.5- 4.0 LPM)

Se mandó a construir el distribuidor propuesto, y de esta forma se realizaron experimentos en la UAM Iztapalapa con una perturbación de tipo pulso, de esta forma se obtuvieron las concentraciones de salida de cada distribuidor con respecto al tiempo.

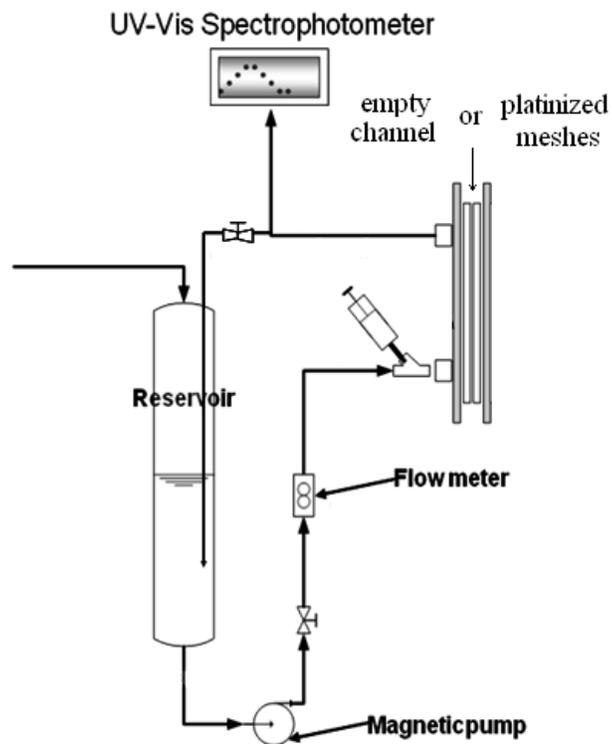


Figura 4.1. Esquema de la metodología experimental para la obtención de la concentración del trazador a la salida del reactor FM01-LC (Rivera, 2009)

El estudio experimental fue hecho con el reactor FM01-LC y el reactor FM01-LC modificado visto más adelante en la sección 4.3.1, las medidas son 0.04 metros de ancho por 0.25 metros de longitud, y la longitud efectiva o longitud del canal es de 0.16m. Los distribuidores de entrada y salida fueron construidos con polipropileno. El esquema de la metodología experimental para la obtención de la concentración del trazador a la salida del reactor FM01-LC mostrado en la figura 4.1. El experimento comienza por el líquido contenido en el “reservoir” o tanque de almacenamiento el cual alimenta al reactor FM01-LC por la parte de abajo, para la alimentación al reactor fue requerida una bomba magnética de 1/15 de hp modelo MDX-MT-3, el flujo volumétrico fue medido con un rotámetro de vidrio marca Cole Palmer, modelo F44500. A la entrada del reactor se colocó una conexión tipo Y, por donde el trazador fue inyectado en forma de pulso. A la salida del reactor fue instalada una válvula que manda el líquido saliente del reactor a un espectrofotómetro que mide la concentración del trazador. La elección del trazador tiene una importancia significativa debido a que existe la posibilidad de que algunos de los más comunes trazadores se absorban en las paredes del reactor dando como resultado una medición errónea de la concentración de salida y un diagnóstico erróneo en las curvas de DTR. Con el fin de evitar este problema se utilizó como trazador el azul de dextrana el cual es bien sabido que no se absorbe a las superficies plásticas. Las curvas de Distribución de Tiempos de Residencia se obtuvieron con la metodología presentada 3.4 para una perturbación pulso a la entrada del reactor.

4.2 Aproximación de las curvas de DTR experimentales usando el modelo de Dispersión Axial (MDA) y el modelo de Zonas Dinámicas y Zonas Estancadas o Modelo PDE

Para describir el comportamiento de las curvas experimentales de la Distribución de Tiempos de Residencia, se utilizaron dos modelos; el primero el Modelo de Dispersión Axial (MDA) y el Modelo de Zonas Dinámicas y Zonas Estancadas o Modelo PDE (Plug Dispersion Exchange). De acuerdo a Bengoa (1997), antes de que el fluido entre al reactor FM01-LC se debe considerar que lleva un patrón muy cercano a un flujo tapón, y que justo después de entrar al reactor el fluido se desarrolla, con ello se considera que la dispersión únicamente ocurre dentro del reactor, tal y como se muestra en la figura 4.2, estas condiciones de entrada y salida corresponden a las condiciones de frontera de un recipiente cerrado-cerrado.

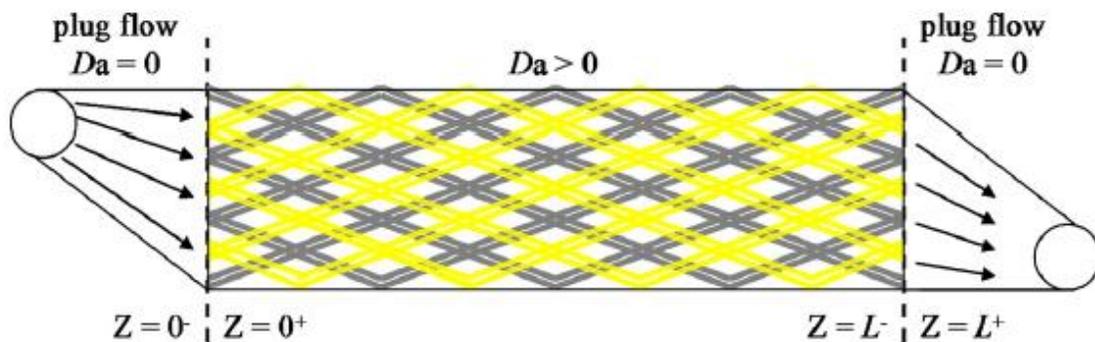


Figura 4.2. Diagrama de condiciones de frontera en un recipiente cerrado-cerrado en el reactor electroquímico FM01-LC, (figura obtenida del artículo Rivera, F, et al. *Electrochimica Acta* (2010))

Por lo tanto, las condiciones de entrada y salida corresponden a las condiciones de frontera de un recipiente cerrado-cerrado, y se presentan en la ecuación 4.1:

$$Z = 0, C = 1 + \frac{1}{Pe} \frac{\partial c(0^+, \theta)}{\partial z}; \quad Z = 1, \frac{\partial c(1^-, \theta)}{\partial z} = 0 \quad (4.1)$$

Estas ecuaciones indican que justo después de la entrada al (0⁺) reactor cuando z=0 la concentración está dada por la delta de Dirac a un tiempo adimensional dado. Justo antes del final del reactor (1⁻) del reactor cuando z=1, suponiendo que la longitud es unitaria, en esta distancia el cambio de la concentración con respecto a la distancia z en cualquier tiempo es cero.

4.2.1 Modelo de Dispersión Axial MDA

Para explicar este modelo, se considera el siguiente sistema: a) en la corriente del fluido que entra al reactor se le inyecta un trazador en forma de pulso (delta de Dirac); b) el transporte de masa en el reactor ocurre por dispersión axial y por convección axial; c) el régimen de flujo es turbulento, y por lo tanto la dispersión se modela considerando la presencia de remolinos en el flujo. De acuerdo con las características de este sistema, el balance adimensional de masa del trazador en el reactor FM01-LC está representado por la ecuación 4.2. La ecuación 4.2 es el balance de masa adimensional de un reactor con transporte de masa convectivo al que se le suma el término difusivo, la deducción es presentada después de definir el término de difusión

$$\frac{\partial c}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{\partial c}{\partial z} \quad (4.2)$$

En donde c es la concentración adimensional del trazador, Pe es el número de Peclet el cual representa la relación del transporte de masa por convección con la

velocidad del transporte de masa por difusión o dispersión, θ es el tiempo adimensional, z es la longitud del reactor.

La condición Inicial indica que antes de que el trazador entre al reactor FM01-LC no existe concentración del trazador dentro del reactor, matemáticamente la condición inicial está dada por la ecuación 4.3.

$$\theta = 0; \quad c(z, \theta) = 0 \quad (4.3)$$

Las expresiones de las variables a dimensionales se muestran a continuación:

$$c = \frac{C}{C_0}; \quad z = \frac{Z}{L_Z}; \quad \theta = \frac{tu_{int}}{L_Z}; \quad Pe = \frac{u_{int}L_Z}{D_{ax}} \quad (4.4)$$

El Modelo de Dispersión Axial acopla las curvas de DTR experimentales moviendo únicamente el Peclet. Conociendo la longitud del reactor L_Z , la concentración de entrada C_0 y la velocidad de entrada del fluido u_{int} .

Se define al Peclet (ecuación 4.5) como la relación que existe entre el flujo convectivo y el flujo difusivo en la dirección axial. Si el Peclet es mayor a uno el transporte de masa está dominado por la parte convectiva, si es menor a uno es dominado por la parte difusiva y si es igual a uno ninguno de los dos domina.

$$Pe = \frac{u_{ef}L_Z}{D_{ax}} = \frac{\text{Flujo convectivo}}{\text{Flujo Difusivo}} \text{ en la dirección axial} \quad (4.5)$$

El flux difusivo esta dado por el Coeficiente de Dispersión Axial (D_{ax}), El coeficiente de Dispersión Axial es un parámetro que indica como se está llevando a cabo la dispersión dentro del reactor, si el D_{ax} es grande es un indicador claro de que la difusión se está llevando más rápido y por lo tanto el fluido saldrá con

una concentración más homogénea. Si el valor del D_{ax} es cero entonces no hay dispersión en el reactor y su compartimento es de flujo pistón. Entre más grande sea el D_{ax} mayor dispersión tendrá un sistema.

El coeficiente de Dispersión Efectiva proviene de las dos leyes de Fick. La primera ley de Fick esta representada en la ecuación 4.6.1, en donde J_A es la densidad de flujo molar de difusión establecido por la difusión de la especie A en dirección en donde la concentración de la especie A es menor multiplicado por una constante D_{AB} o constante de difusividad de A en un medio B. La segunda ley de Fick o simplemente ecuación de difusión (ecuación 4.6.2) indica que la acumulación de A o el cambio de la concentración de A con respecto al tiempo es igual al coeficiente de difusividad o en nuestro caso el Coeficiente de Dispersión Axial (D_{ax}) por el cambio del gradiente de concentración de A en todas las direcciones.

$$J_A = D_{AB} \nabla C_A \quad (4.6.1)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{ax} \nabla^2 C_A \quad (4.6.2)$$

Pasos para obtener la ecuación de Modelo de Dispersión Axial

Antes de realizar la deducción del Modelo de Dispersión Axial era requerido conocer el Coeficiente de Dispersión Axial (D_{ax}). El balance para un reactor con transporte de masa convectivo está dado por la ecuación 4.7, señalando el cambio de la concentración con respecto al tiempo esta está definido como el cambio de la concentración en z del componente es función de la velocidad que lleva el fluido.

$$-u \frac{dc}{dz} = \frac{dc}{dt} \quad (4.7)$$

Si a la ecuación 4.7 se le agrega el término de dispersión dado por la ecuación 4.6, se obtiene la ecuación 4.8.

$$D_{ax} \frac{d^2c}{dz^2} - u \frac{dc}{dz} = \frac{dc}{dt} \quad (4.8)$$

Adimensionalizando la ecuación 4.2 con $Z = z/L_z$ (L longitud máxima del reactor)

$$\frac{D_{ax}}{L_z u} \frac{d^2 \frac{C}{C_0}}{dZ^2} - \frac{d \frac{C}{C_0}}{dZ} = \frac{dC}{dt} \frac{L_z}{u C_0} \quad (4.9)$$

Con las variables sin dimensiones de la ecuación 4.4 y el algebra correspondiente se obtiene el modelo de dispersión axial dado en la ecuación 4.2.

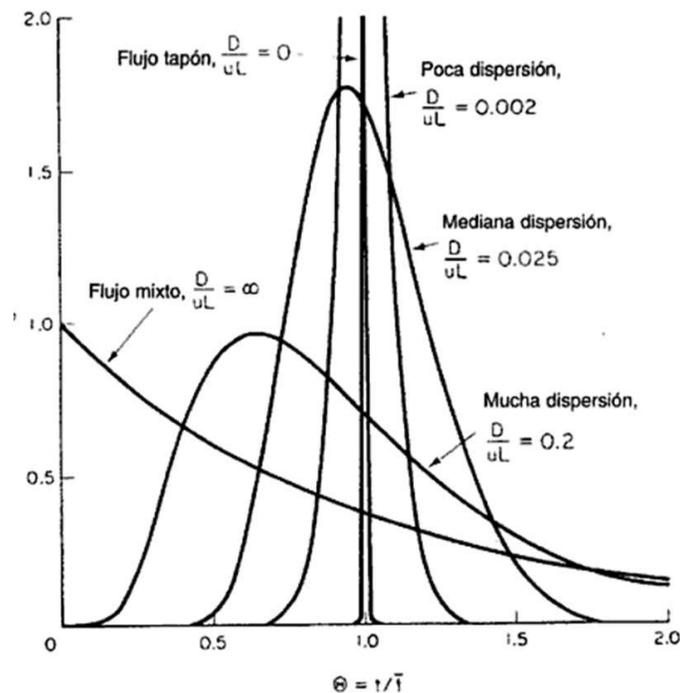


Figura 4.3, Figura Curvas C en recipientes cerrados para diversos grados de retromezcla, según predice el modelo de dispersión axial (figura obtenida de Elementos de Ingeniería de las reacciones químicas, Fogler, Cuarta edición, 2008, página 968)

La figura 4.3 muestra las curvas de Distribución de Tiempos de Residencia, para reactores con distinta dispersión, el CSTR es un flujo mixto o perfectamente mezclado ($1/Pe=D/uL =\infty$), un PFR tiene una dispersión cercana a cero ($1/Pe=D/uL \leq 0.002$), sin embargo se espera que el reactor FM01-LC modificado se encuentre entre estos dos casos ideales.

4.2.2 Modelo de Zonas Dinámicas y Zonas Estancadas o Modelo PDE

El modelo no MDA no puede aproximar todas las curvas de DTR es por esta razón que es requerido otro modelo como el modelo de Zonas Dinámicas y Zonas Estancadas o Modelo PDE por sus Siglas en Inglés (Plug Dispersión Exchange Model). El modelo PDE considera dos zonas, una zona dinámica en donde el fluido tiene dispersión axial, y una zona estancada la cual le transfiere masa a la zona dinámica ver figura 4.4, el modelo esta dado por la ecuación 4.10 y con las variables adimensionales señaladas en las ecuaciones 4.11 y 4.12.

$$\varphi \frac{\partial c_d}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe_d} \frac{\partial^2 c_d}{\partial z^2} - \frac{\partial c_d}{\partial z} - N(c_d - c_s) \quad (4.10)$$

$$c_d = \frac{c_d}{c_0}; \quad c_s = \frac{c_s}{c_0}; \quad z = \frac{Z}{L_Z}; \quad \theta = \frac{tu_{d,ef}}{L_Z} \quad (4.11)$$

$$Pe_d = \frac{u_{d,ef}L_Z}{D_{ax}}; \quad N = \frac{ka_{ef}L_Z}{u_{d,ef}}; \quad \varphi = \frac{h_d}{h_d+h_s} \quad (4.12)$$

En donde el Pe_d es el número de Peclet dinámico, φ es el hold up o el volumen de líquido desplazado por el movimiento turbulento, N es el número de unidades de transferencia de masa entre la zona dinámica y la zona estancada N actua como

un parámetro de ajuste. El valor máximo de ϕ es uno, la zona dinámica ocupara mayor parte del volumen de reactor cuando tienda a uno. El valor mínimo de N es cero, cuando se tienda a cero el intercambio entre la zona dinámica y estancada será despreciable, la razón mas importante es que la zona estancada comienza a disminuir mientras disminuye N , la razón es un mejor mezclado por mayor turbulencia causada por una mayor velocidad en el fluido. k es la constante de transferencia de masa entre la fase estancada y la dinámica como se muestra en la figura 4.4, C_0 es la concentración de entrada, C_d es la concentración en la zona dinámica, C_s es la concentración de la zona estancada, Z es la longitud en donde es válido el modelo, L_z es la longitud máxima del reactor, $u_{d,ef}$ es la velocidad efectiva o la velocidad en la zona dinámica, ϕ es el hold up total y es definido como la relación entre la suma del volumen ocupado por la zona dinámica y estancada con respecto al volumen total de la zona de reacción en el reactor FM01-LC. Los parámetros de ajuste para el modelo PDE son el hold up, D_{ax} y N .

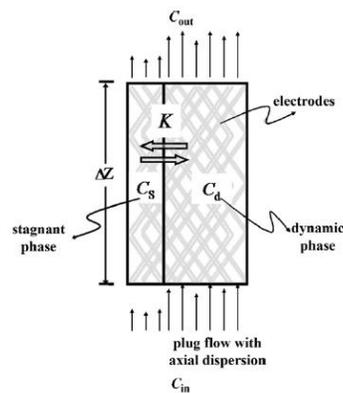


Figura 4.4. Esquema que muestra las zonas estancadas y dinámicas (Rivera, 2010)

4.3. Simulación del comportamiento hidrodinámico y de transferencia de masa (Dinámica de Fluidos Computacional o DFC) para el reactor FM01-LC modificado

La simulación del comportamiento hidrodinámico y de transferencia de masa del reactor FM01-LC modificado con el modelo de Dinámica de Fluidos Computacional o DFC. Consistió en tres etapas: (1) Modelo Geométrico del FM01-LC con modificaciones, (2) Modelo de turbulencia: $k-\varepsilon$ de número de Reynolds bajo, (3) Modelo de Transporte de Masa (Convección y Difusión)

4.3.1. Modelo geométrico del FM01-LC modificado en Comsol 4.3

Para construir la geometría propuesta en el simulador, se utilizó el constructor de geometrías dentro del mismo simulador, su interfaz es parecida a Auto CAD; sólo cuenta con geometrías predeterminadas simples como el cuadrado y el círculo. Primero se aborda dibujando en 2 dimensiones, se inició con un rectángulo de 0.15 m por 0.04 m, después se construye la geometría del distribuidor a la entrada y a la salida por medio de las figuras simples rectángulo y triángulos con las herramientas para “unión” y “restar”, así se construye una geometría en 2D; después se extruyó, es decir se pasa de una figura en dos a tres dimensiones; posteriormente, se le agregaron las entradas cilíndricas al reactor; más tarde se eliminan las uniones, con esto se evitan discontinuidades en el modelo matemático utilizado para resolver los problemas físicos de la hidrodinámica y transferencia de masa.

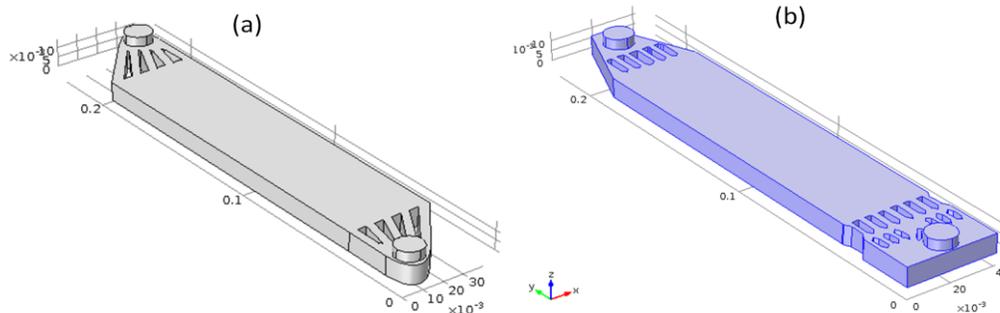


Figura 4.5: Geometría del Reactor FM01-LC (a), Geometría del reactor FM01-LC con los distribuidores de entrada y salida modificados (b)

En la figura 4.5 (b) se es mostrado el reactor FM01-LC modificado, la entrada del fluido se encuentra en la parte inferior (circulo con diámetro de $\frac{1}{2}$ “), el nuevo diseño del distribuidor en la entrada ayuda a mezclar los elementos de fluido, de tal forma que el fluido alcanza una velocidad mas homogénea a la salida del distribuidor. Por último, el arreglo geométrico del distribuidor de salida ayuda a concentrar los elementos de fluido para que salgan a la misma velocidad y disminuye las recirculaciones.

4.3.2. Modelo de turbulencia: $k-\varepsilon$ de número de Reynolds bajo

Para el estudio hidrodinámico se resolvió el balance de momentum, que está descrito por las ecuaciones de Navier-Stokes (ecuación 4.13) ajustada para un fluido turbulento (ecuación 4.14) con promedios en Reynolds (RANS) ecuación 4.15.

La ecuación de Navier-Stokes o ecuación de movimiento (ecuación 4.13) señala que la multiplicación de la masa por unidad de volumen, densidad, es igual a la

fuerza que ejerce la presión sobre el elemento más las fuerzas viscosas y la fuerza de gravedad ejercida sobre el elemento por unidad de volumen.

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (4.13)$$

La ecuación de Navier-Stokes no es suficiente para describir el movimiento de un fluido en régimen turbulento, debido a que se tiene que tomar en cuenta la formación de los remolinos en el fluido, es por eso que la ecuación de Navier-Stokes tiene que agregar un término que considere estos remolinos, la ecuación 4.13 se transforma en la ecuación 4.14 de acuerdo con Bird (2006)

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + [\nabla \cdot \bar{\tau}^{(l)}] + [\nabla \cdot \bar{\tau}^{(t)}] + \rho \mathbf{g} \quad (4.14)$$

$\bar{\tau}^{(l)}$ y $\bar{\tau}^{(t)}$ son los esfuerzos viscosos en función de los gradientes de velocidad, $\bar{\tau}^{(l)}$ son para el flujo laminar y $\bar{\tau}^{(t)}$ es definido como la densidad de flujo turbulento de cantidad de movimiento y usualmente son llamados esfuerzos de Reynolds.

Tras un reordenamiento de términos considerando que la viscosidad y la viscosidad turbulenta (μ_T) no dependen de la posición resultando la ecuación 3.25.

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \rho \mathbf{g} \quad (4.16)$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4.17)$$

La ecuación 4.17 ó ecuación de continuidad, es igual a cero debido a que el fluido es incompresible, densidad constante.

La ecuación 4.16 recibe el nombre de ecuación de Navier-Stokes con promedios en Reynolds (RANS), el nombre de promedios en Reynolds tiene que ver con la densidad de flujo turbulento de cantidad de movimiento o esfuerzos de Reynolds en donde participa la viscosidad turbulenta (μ_T), recibiendo el nombre de promedios en Reynolds por la forma de calcular la viscosidad turbulenta.

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} f_\mu(\rho, \mu, k, \epsilon, l_w) \quad (4.18)$$

C_μ : constante del modelo turbulento, valor 0.09

k : energía cinética de remolinos

ϵ : rapidez de energía disipada de remolinos

La ecuación 4.18 describe la viscosidad turbulenta (μ_T), es el resultado del producto de la densidad por una constante del modelo turbulento; y producto de la relación de la energía cinética de los remolinos con la rapidez de energía disipada de los remolinos. La constante k representa en la ecuación 4.18 y en las subsecuentes ecuaciones la constante de energía cinética turbulenta.

Condiciones a la frontera para la viscosidad turbulenta.

En las paredes, condición de no deslizamiento

$$u = 0 \quad (4.19)$$

$$k = 0, \quad \epsilon = \lim_{l_w \rightarrow 0} \frac{2\mu k}{\rho l_w^2} \quad (4.20)$$

Cuando l_w (l_w es la distancia que entre el fluido y las paredes del reactor) tiende a cero la energía disipada (ϵ) alcanza un valor muy grande, indicando que en la

región cercana a la pared la energía disipada es mucha, por el contrario al tener k un valor de cero indica que la energía cinética utilizada por los remolinos afirma la condición de no deslizamiento.

Condición en la entrada del reactor

$$u = -U_0 \times n \quad (4.21)$$

$$k = \frac{3}{2}(U_0 L_T)^2, \quad \epsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{L_T} \quad (4.22)$$

La velocidad de acuerdo con la ecuación 4.21 indica que la velocidad de entrada es un vector constante y solo depende de U_0 que está definida por el gasto volumétrico que se le inyecta al sistema, las ecuaciones en 4.22 indican que la energía cinética es el producto de dos constantes U_0 y la longitud máxima L_T por lo tanto k es una constante, y que la energía disipada (ϵ) depende de la energía cinética (k) sin embargo siendo k una constante a la entrada también lo es ϵ .

Los valores iniciales de U_0 son con respecto al gasto volumétrico suministrado al sistema son mostrados en la tabla 4.1

Tabla 4.1. Valores de U0

Q (LPM)	u_{inicial} (m/s)
0.5	0.0737
1	0.1474
1.5	0.2211
2	0.2948
2.5	0.3685
3	0.4422
3.5	0.5159

La tabla 4.1 muestra los valores iniciales de U0 considerando la velocidad de entrada al reactor, el área que se considera es el área del tubo por donde entra el fluido al reactor, el área es de 0.000113 m².

Condición en la salida del reactor

$$P = 0, [-\nabla P + \nabla \cdot (\mu + \mu_T)(\nabla u + \nabla u^T) + \rho g]n = 0 \quad (4.23)$$

$$\nabla k \cdot n = 0, \nabla \epsilon \cdot n = 0 \quad (4.24)$$

P, presión manométrica

Las ecuaciones 4.23 y 4.24 indican que el patrón de flujo ya no cambia a la salida del reactor, siendo que los gradientes energía cinética, energía disipada y fuerzas viscosas son cero.

4.3.3 Modelo de Transporte de Masa (Convección y Difusión)

Una vez resuelto el modelo hidrodinámico, se resuelve con Comsol un modelo que prediga la transferencia de masa, se utilizó para el balance de masa del trazador el modelo de especies diluidas, el cual inicia con la velocidad (u) calculada por el modelo hidrodinámico aplicado con anterioridad.

Ecuación de continuidad para el trazador en la mezcla binaria trazador-agua. Describe la variación de la concentración del trazador con respecto al tiempo para un punto fijo en el espacio. La velocidad u viene del modelo hidrodinámico utilizado por Comsol.

$$\frac{dC_i}{dt} = \nabla \cdot (D_i + D_{i,T})\nabla C_i + \mathbf{u} \cdot \nabla C_i = 0 \quad (4.25)$$

La ecuación 4.25 o ecuación de continuidad indica el cambio en la concentración con respecto al tiempo es igual al transporte convectivo $= -u \cdot \nabla C_i$ más el transporte difusivo $\nabla \cdot (D_i + D_{i,T})\nabla C_i$. La parte convectiva está definida como el producto punto entre la velocidad normal (u) y el gradiente de la concentración ∇C_i . La parte difusiva se define como la difusión laminar y turbulenta por el gradiente de concentraciones.

$$N_i = -(D_i + D_{i,T})\nabla C_i + \mathbf{u}C_i \quad (4.26)$$

En la ecuación 4.26 N_i es la velocidad de transferencia de masa del trazador en el fluido, y solamente depende de la difusión y convección en el medio.

Para resolver el modelo de transferencia de masa se utilizó en primera instancia, una función de entrada tipo pulso tal y como se realizó en los experimentos, al intentar esta condición inicial los resultados en las DTR no eran satisfactorios, debido a un problema con el simulador, es por esta razón que se optó por la condición inicial de tipo escalón, la cual más tarde se derivó para obtener la DTR tal y como se mostró anteriormente en la sección 3.3.8. Finalmente esta decisión no perjudica el resultado final debido a que la DTR es la misma ya sea por pulso o por escalón la respuesta es exactamente la misma, aunque para Comsol es mejor utilizar escalón porque de esta forma se evita la definición aproximada de una función que represente la delta de Dirac y la sintonización de los parámetros necesarios.

Condición de entrada, condición inicial

El flux de masa solamente es la velocidad de entrada por la concentración de entrada al reactor. Para explicar mejor la función escalón a la entrada se utiliza la gráfica de la figura 4.6.

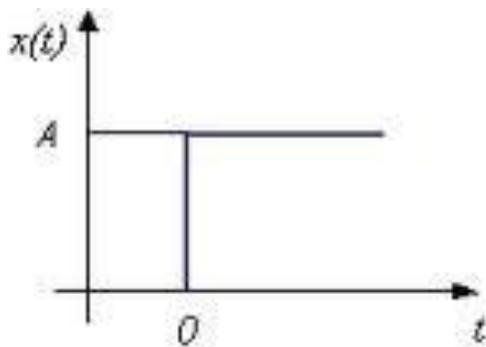


Figura 4.6. Función escalón utilizada para la describir al entrada del trazador

En dónde

$$x(t) = CA = 0, t \leq 0 \quad (4.27)$$

$$x(t) = CA = CA_0, t > 0 \quad (4.28)$$

La ecuación 4.27 indica que antes del tiempo cero la concentración a la entrada del reactor es cero; justo después del tiempo cero, la concentración a la entrada al reactor es CA_0 .

Condiciones a la frontera

Condiciones en la pared

$$-n \cdot N_i = 0 \quad (4.29)$$

La ecuación 4.29 indica que el producto del vector unitario por el flux es cero, indicando que las paredes son impermeables, dando como resultado que no hay ningún intercambio de materia entre ellas.

Condiciones a la salida del reactor

$$-n \cdot D_i \nabla c_i = 0 \quad \therefore c_i = cte \quad (4.30)$$

Ya no habrá difusión molecular a la salida del reactor de acuerdo a la ecuación 4.30, por lo tanto la concentración será constante.

4.3.4. Resumen de Ecuaciones

Modelo de Turbulencia (Hidrodinámica)

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \rho \mathbf{g} \quad (4.16)$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4.17)$$

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} f_\mu(\rho, \mu, k, \epsilon, l_w) \quad (4.16)$$

En las paredes (Condición a la frontera)

$$\mathbf{u} = 0 \quad (4.19)$$

$$k = 0, \quad \epsilon = \lim_{l_w \rightarrow 0} \frac{2\mu k}{\rho l_w^2} \quad (4.20)$$

Condición en la entrada del reactor (Condición a la frontera)

$$\mathbf{u} = -U_0 x \mathbf{n} \quad (4.21)$$

$$k = \frac{3}{2} (U_0 L_T)^2, \quad \epsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{L_T}, \quad \nabla G = 0 \quad (4.20)$$

Condición en la salida del reactor (Condición a la frontera)

$$P = 0, \quad [-\nabla P + \nabla \cdot (\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \rho \mathbf{g}] \mathbf{n} = 0 \quad (4.23)$$

$$\nabla k \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \nabla \epsilon \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (4.24)$$

Modelo de Transporte de Masa (Convección y Difusión)

$$\frac{dC_i}{dt} = \nabla \cdot (D_i + D_{i,T}) \nabla C_i + \mathbf{u} \cdot \nabla C_i = R_i \quad (4.25)$$

$$\mathbf{N}_i = -(D_i + D_{i,T}) \nabla C_i + \mathbf{u} C_i \quad (4.26)$$

Condición de entrada, (Condición a la frontera)

$$x(t) = CA = 0, t \leq 0 \quad (4.27)$$

$$x(t) = CA = CA0, t > 0 \quad (4.28)$$

Condiciones en la pared (Condición a la frontera)

$$-n \cdot N_i = 0 \quad (4.29)$$

Condiciones a la salida del reactor (Condición a la frontera)

$$-n \cdot D_i \nabla c_i = 0 \quad (4.30)$$

Para resolver las ecuaciones del modelo de Turbulencia (Hidrodinámica) y del modelo de Transporte de Masa (Convección y Difusión) se utilizó el programa Comsol Mutliphysics 4.3 que resuelve por medio de elemento finito. La computadora es una Alienware Aurora con un procesador Intel® Core™ i7 con cuatro núcleos, Windows® 7 Home Premium de 64 bit, con una memoria RAM de 16 GB a 1600 Mhz y una tarjeta de memoria de NVIDIA® GeForce® GTX 690 de 4GB. El uso de esta computadora se justifica debido a que para resolver un caso (un flujo de entrada) en una computadora de 4 GB de memoria RAM el proceso puede durar más de una semana por lo complicado de la geometría. Y con el uso de la computadora Alienware Aurora tardó la simulación alrededor de 2 días.

CAPÍTULO:

5

Capítulo: 5. Resultados

Los resultados están ordenados de la siguiente manera:

(1) Comparación de la Distribución de Tiempos de Residencia Experimentales, para el Reactor FM01-LC y el Reactor FM01-LC modificado. (2). Comparación de la Distribución de Tiempos de Residencia Experimentales y Simulados con los modelos MDA y PDE, Para el Reactor FM01-LC y el Reactor FM01-LC Modificado. (3). Comparación grafica del reactor FM01- LC y el reactor FM01-LC modificado. (4). Gráficos de la hidrodinámica y perfil de concentraciones a diferentes tiempos, obtenidos con Comsol 4.3 para el reactor FM01-LC Modificado. (5). Obtención de la curva de Distribución de Tiempos de Residencia, de una respuesta escalón en la concentración de salida del reactor FM01-LC Modificado. (6). Comparación de las DTR de los Datos Experimentales y Simulados con Comsol del reato FM01-LC Modificado. (7). Comparación de las DTR de Comsol con sus imágenes de gradientes de concentración.

5.1. Comparación de la Distribución de Tiempos de Residencia Experimentales, para el Reactor FM01-LC y el Reactor FM01-LC modificado

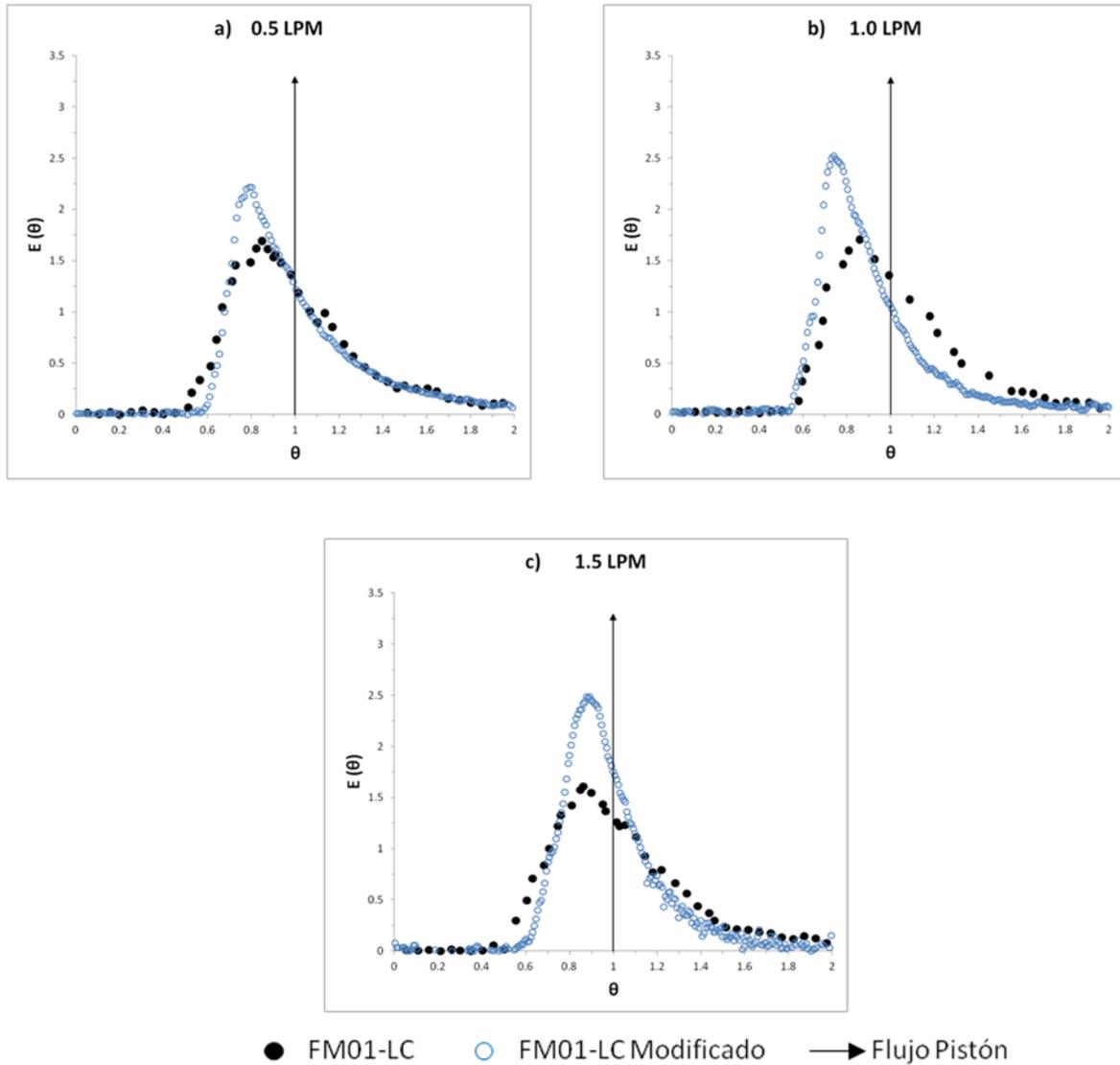


Figura.5.1. Distribución de Tiempos de Residencia experimentales, para flujos de 0.5 PM, 1.0 LPM y 1.5 LPM. Comparación del reactor FM01-LC y el reactor FM01-LC modificado

Comparando la Distribución de tiempo de Residencia experimentales en el reactor FM01-LC y el reactor FM01-LC modificado para distintos flujos, se distingue una mejoría en el patrón de flujo. En general el fluido tiene curvas más anchas, contrario a lo que sucede en el reactor FM01-LC modificado en donde la curva se vuelve más angosta, y la mayoría de la masa sale en un tiempo menor, curva más alta. Adelante se discutirán los resultados obtenidos en algunos flujos.

Para un flujo de 0.5 LPM al ser un flujo muy lento, es muy difícil que ambos reactores consigan una distribución cercana al flujo pistón, el reactor FM01-LC modificado tiene una curva mas angosta y alta que el reactor FM01-LC demostrando que tiene una mejor distribución del flujo, sin embargo las dos curvas presentan el mismo coleo, lo cual indica la presencia de zonas estancadas, principalmente en la región cercana a la pared, mas tarde se demostrara con las imágenes de la simulación en Comsol.

Para un litro por minuto, ambas curvas mantienen su valor máximo de la edad adimensional en un tiempo de residencia similar alrededor de 0.7. La diferencia notable entre las curvas de DTR del reactor FM01-LC y el FM01-LC modificado, es el mejor comportamiento de este último al exhibir una curva con un menor coleo. Por lo tanto iindica, que existen menos zonas estancadas en el reactor FM01-LC modificado, atrasando menos al fluido.

El reactor FM01-LC y el reactor FM01-LC modificado acercan su comportamiento al de un flujo pistón al aumentar el flujo de liquido a la entrada en 1.5 litros por minuto. La diferencia de alturas entre las curvas de DTR para los dos reactores se

hace más notable, donde el nuevo reactor presenta una altura mayor lo cual significa que el fluido sale en un periodo de tiempo mas corto. Ambos casos presentan zonas en donde el fluido sufre un estancamiento, sin embargo disminuyó al aumentar el flujo para los dos reactores, cumpliendo con lo previsto, debido a que a mayor flujo las zonas estancadas disminuyen y el patrón se acerca más a un flujo pistón (valor máximo de la edad adimensional $E(\theta)$ corresponde al valor de uno en la fracción del tiempo de residencia, θ).

La figura 5.2, para el flujo de 2.5 litros por minuto, presenta un patrón de flujo cercano al flujo pistón en ambos reactores. De acuerdo a la teoría, al incrementar el flujo el comportamiento hidrodinámico se aproxima al de flujo pistón. El caso del reactor FM01-LC modificado al ser una curva mas angosta indica que el fluido viaja con una velocidad homogénea, el coqueo aun sigue presente sin embargo es menor para el reactor FM01-LC modificado. El flujo resulta mucho más homogéneo para el nuevo reactor.

Se presentó un incremento notable en la edad máxima de del nuevo distribuidor al pasar de un flujo de 3.0 LPM a 3.5 LPM, en este ultimo flujo se observa la sustancial mejora en la distribución de los tiempos de residencia.

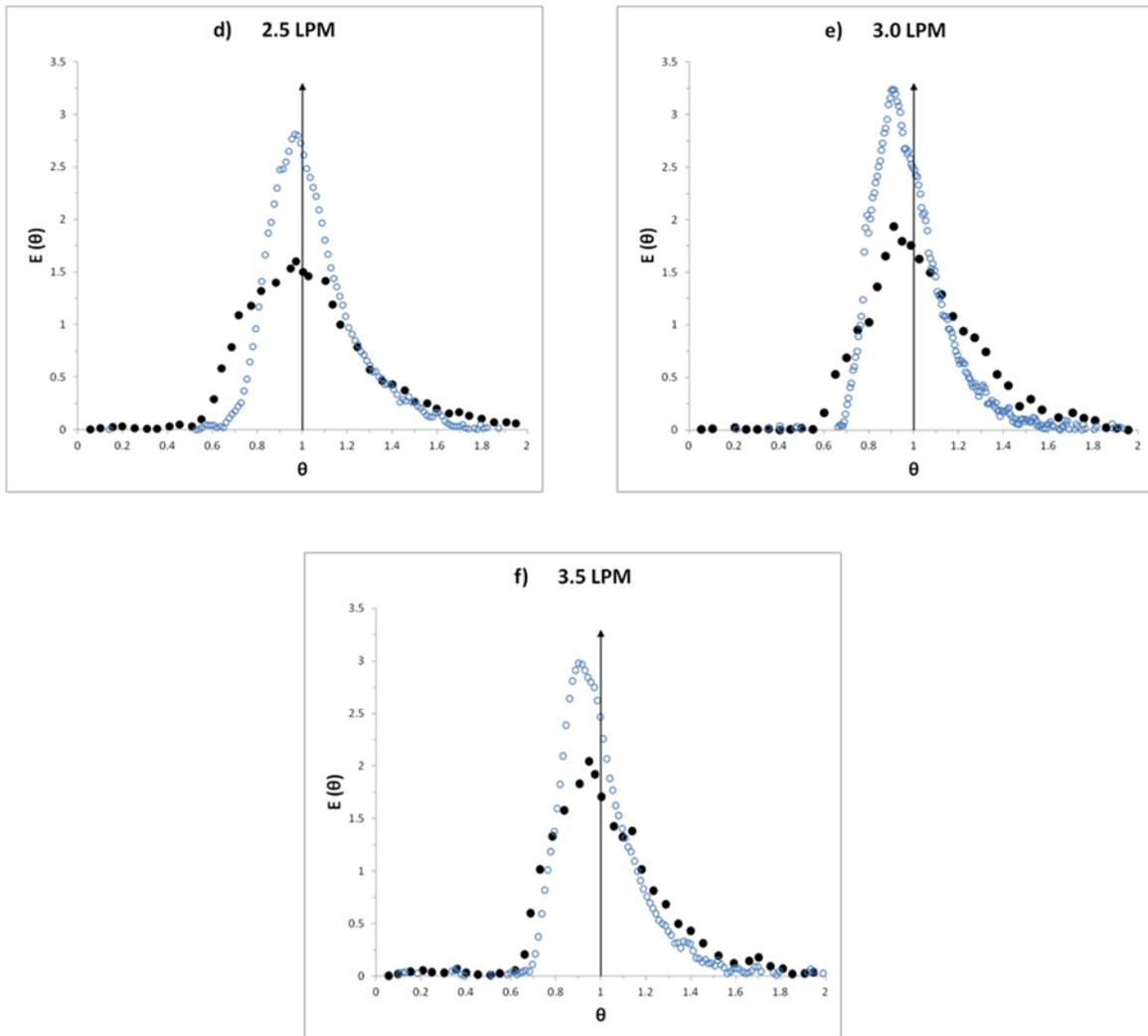


Figura.5.2. Distribución de Tiempos de Residencia experimentales, para flujos de 2.5 PM, 3.0 LPM y 3.5 LPM. Comparación del reactor FM01-LC y el reactor FM01-LC modificado

5.2. Comparación de la Distribución de Tiempos de Residencia Experimentales y Simulados con los modelos MDA y PDE, Para el Reactor FM01-LC y el Reactor FM01-LC Modificado

Para obtener un valor del coeficiente global de difusión D_{ax} se utilizaron los modelos de MDA (Modelo de dispersión Axial) y PDE (Modelo de zonas estancadas y zonas dinámicas), las curvas obtenidas con estos modelos son mostradas en las figuras 5.3 y 5.4.

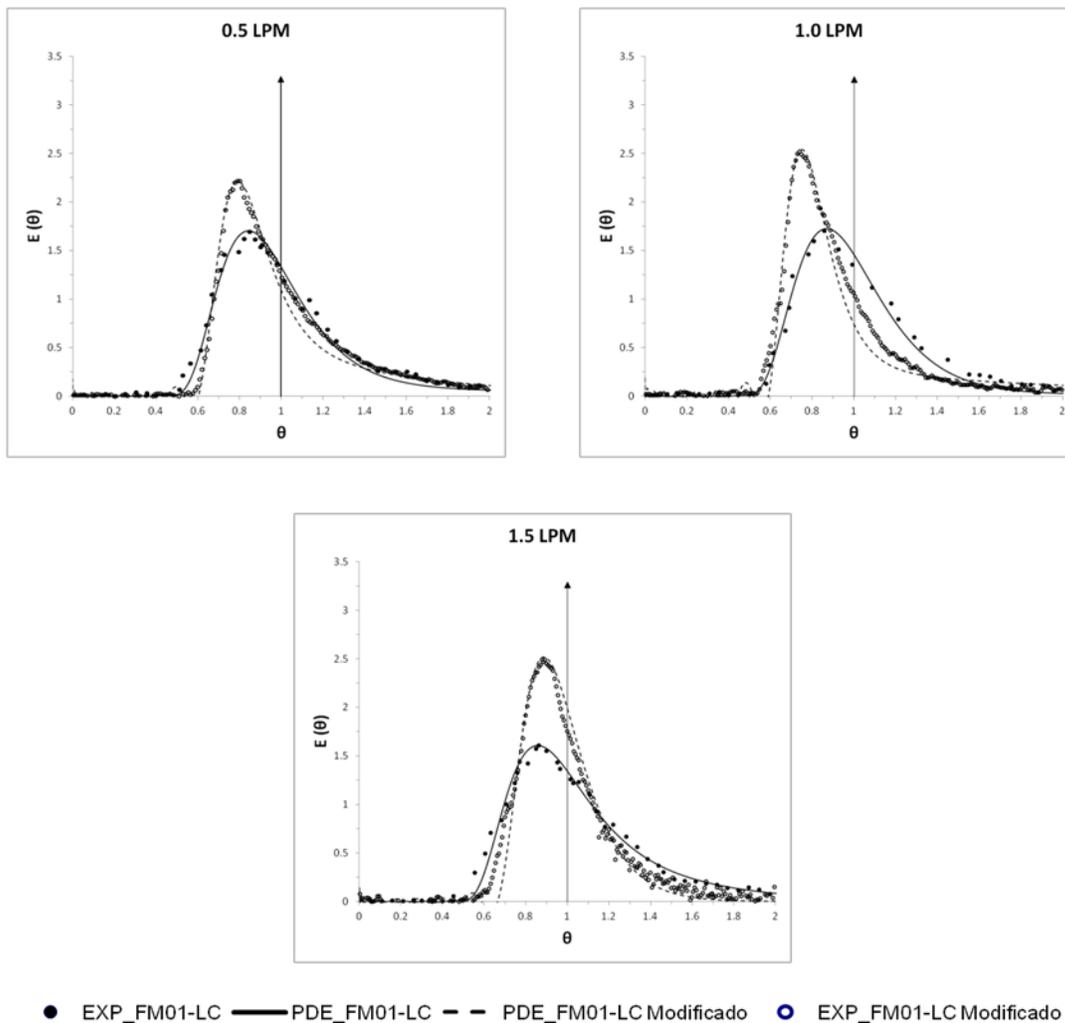


Figura 5.3. Distribución de Tiempos de Residencia Experimentales y Simulados con los modelos MDA y PDE, Para el Reactor FM01-LC y el Reactor FM01-LC Modificado, para un flujo de entrada de 0.5, 1.0 y 1.5 LPM

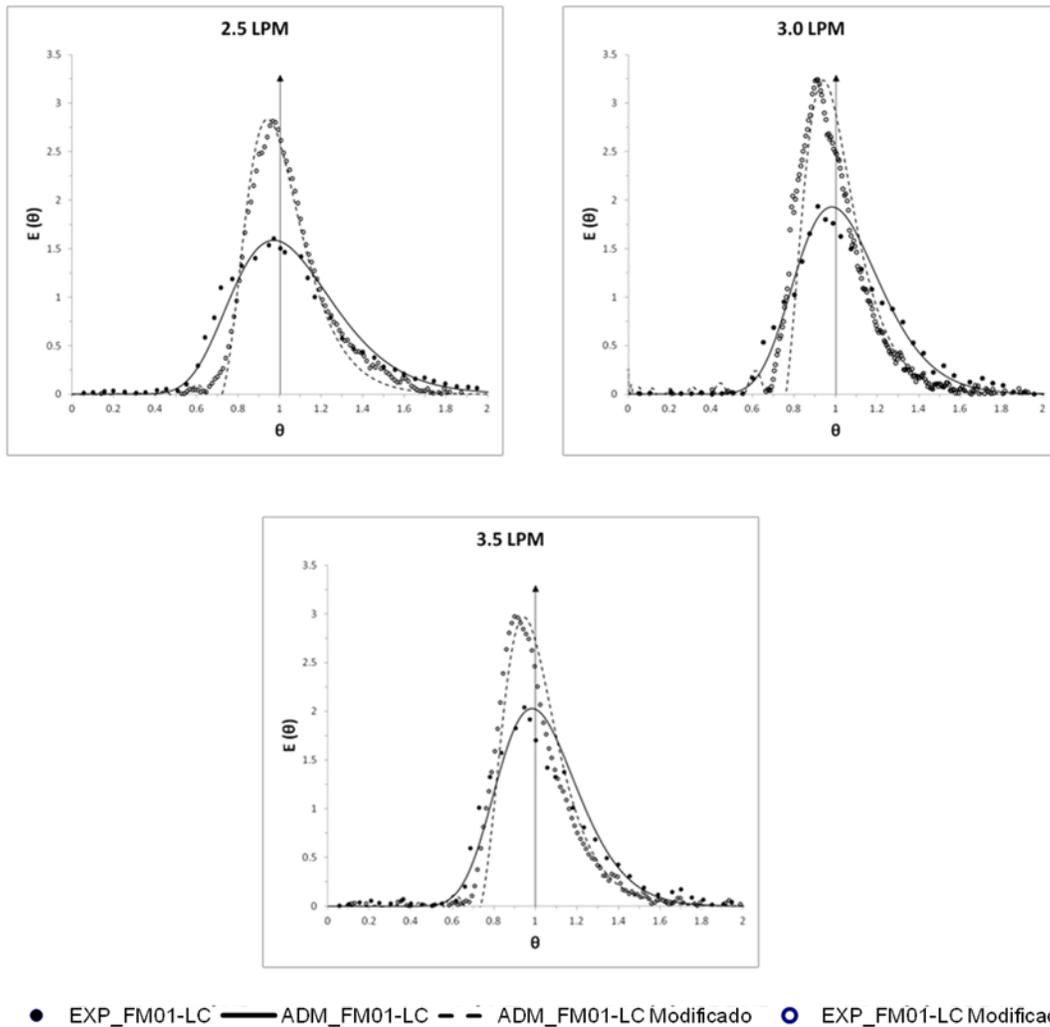


Figura 5.4 Distribución de Tiempos de Residencia Experimentales y Simulados con los modelos MDA y PDE, Para el Reactor FM01-LC y el Reactor FM01-LC Modificado, para un flujo de entrada de 2.5, 3.0 y 3.5 LPM

Las gráficas en la figura 5.3 fueron aproximadas con el modelo de zonas dinámica y zonas estancadas (PDE), la razón es que a flujo bajos como 0.5, 1.0 y 1.5 LPM el efecto de las zonas estancadas es mayor, en las DTR se refleja como un coleo prolongado. Para ambos reactores el pico máximo está alejado de la unidad, indicando que gran parte del fluido sale antes del tiempo de residencia adimensional de uno, este efecto es más fácil obtenerlo con el modelo PDE. Más

adelante se mostrara el valor numérico que genera un coleo, así como un retraso o adelanto del comportamiento de la transferencia de masa a la salida del reactor.

Se utilizó el modelo de Dispersión Axial para los flujo mostrados en la figura 5.4, cuando se incrementa el flujo de entrada al reactor, el fluido viaja una mayor velocidad, y la respuesta se acerca más a un flujo de tipo pistón, además el efecto de las zonas estancadas es menor, y la dispersión axial ocurre en la mayor parte del reactor, reflejado en las DTR con la desaparición gradual del coleo. Finalmente el modelo de Dispersión Axial está incluido en el modelo de zonas dinámicas y estancadas, en donde el valor de ϕ es uno y el de N es cero.

Q (LPM)	FM01-LC			FM01-LC Modificado		
	$10^4 D_{ax}/m^2 s^{-1}$	ϕ	N	$10^4 D_{ax}/m^2 s^{-1}$	ϕ	N
0.5	1.5	0.90	0.07	1.20	0.8	0.25
1.0	3.0	0.93	0.02	1.57	0.8	0.4
1.5	4.1	0.90	0.3	2.35	0.95	0
2.5	8.5	1.00	0	3.00	1	0
3.0	7.1	1.00	0	3.20	1	0
3.5	7.9	1.00	0	3.85	1	1

Tabla: 5.1 Coeficiente de Dispersión Efectiva (D_{ax}), ϕ hold up o el fracción de la región turbulenta y N es el número de unidades de transferencia de masa entre la zona dinámica y la zona estancada

Para el reactor FM01-LC, mientras se aumenta el flujo de entrada al reactor en los primeros tres flujo el valor del hold up o fracción de la región turbulenta encuentra

valores de 0.9 a 0.93 indicando que existe una región laminar cercana a las paredes considerable; para los mismos flujo en el reactor FM01-LC modificado los valores se encuentran entre 0.8 y 0.95, las bondades del reactor FM01-LC modificado se muestran para un flujo de entrada de 1.5 LPM en donde la fracción de la región turbulenta es 0.95, mostrando una mejor distribución a lo largo del canal del reactor gracias a la nueva configuración del distribuidor, también el valor de N tiende a cero para este último flujo, cuando el valor de unidades de transferencia es cercano o en este caso es cero, indica que existe muy poco intercambio de la zona estancada a la zona dinámica, a pesar de que la zona estancada es muy pequeña en comparación a la zona dinámica para flujo de entrada superiores a 1.0 LPM el valor de N tendiendo a cero indicando que el coleo seguirá presente en flujos superiores los elementos en zona estancada se desplazaran como una unidad al no tener interacción con la zona dinámica, la evidencia se encuentra en las DTR en donde el coleo existe a pesar de que se incrementa el flujo de entrada, por supuesto el coleo disminuye conforme el flujo se incrementa resultado de que la zona estancada se vuelva más pequeña, sin embargo al ser cada vez más pequeña la zona estancada, su interacción con la zona dinámica disminuye y por lo tanto siempre existirá el coleo.

5.3. Comparación gráfica del reactor FM01- LC y el reactor FM01-LC modificado

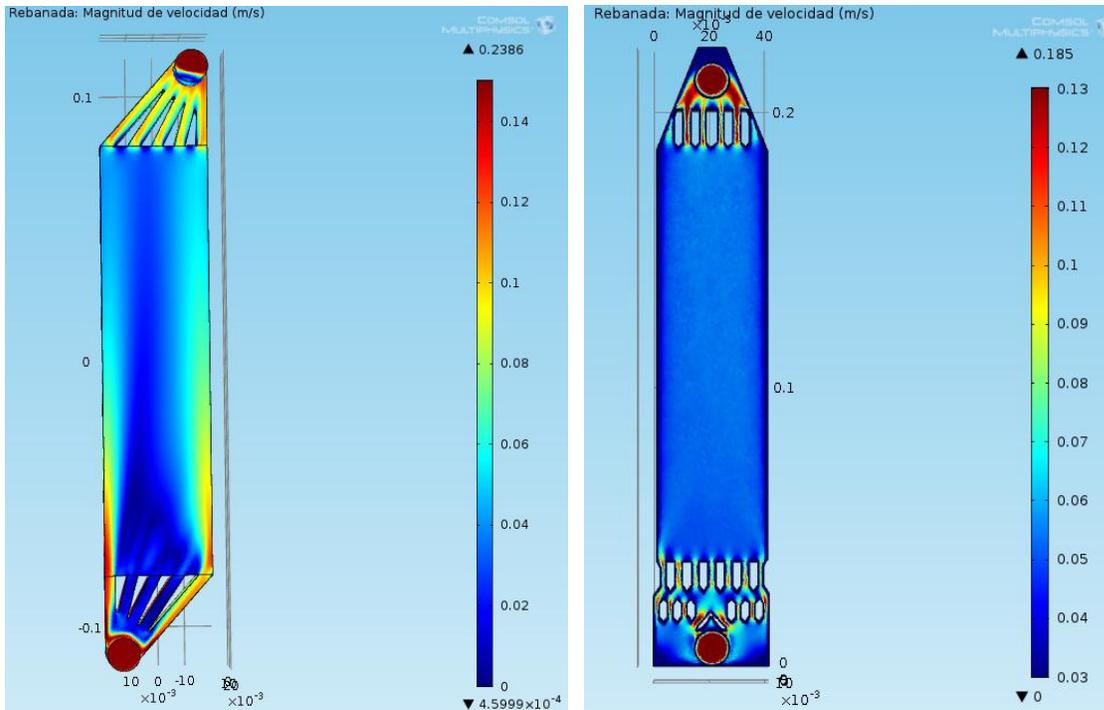


Figura 5.4.1 Comparación de la hidrodinámica entre el viejo distribuidor canal delgado (a) con el nuevo distribuidor canal delgado (b), los dos casos tiene un flujo de entrada de 1LPM. Las escalas de colores no corresponden a los mismos valores de velocidad

Se comparó la hidrodinámica del viejo distribuidor de entrada con un canal de espesor de 0.0095 m, con el nuevo distribuidor de entrada para el mismo ancho de canal (Figura 5.4.1), se observa que el viejo distribuidor presenta flujos preferenciales o de mayor velocidad en las zonas cercanas a la pared para flujos bajos.

El reactor FM01-LC modificado presenta un flujo mucho más homogéneo en el canal, en este caso se presentan flujos de menor velocidad cercanos a las paredes; sin embargo, este efecto es muy pequeño en comparación a los flujos preferenciales obtenidos en el viejo distribuidor. En la hidrodinámica el reactor FM01-LC modificado para flujos bajos y para un canal delgado cumple su función de disminuir los flujos preferenciales en el canal. Mostrando gráficamente las bondades del el reactor FM01-LC modificado.

5.4. Gráficos de la hidrodinámica y perfil de concentraciones a diferentes tiempos, obtenidos con Comsol 4.3 para el reactor FM01-LC Modificado

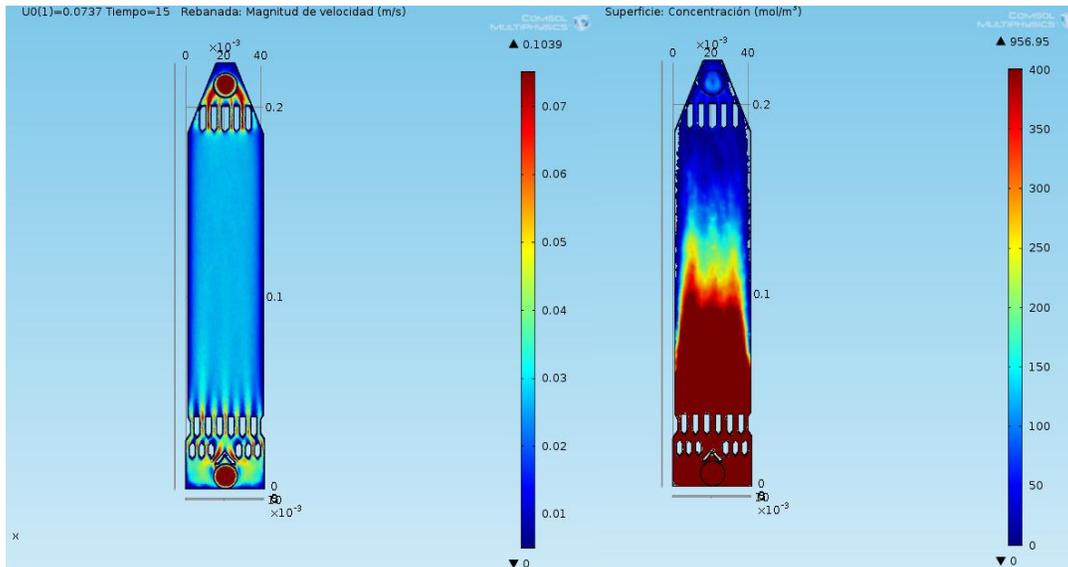


Figura 5.5. Perfil de velocidades del fluido perfil de concentraciones en el reactor FM01-LC modificado en COMSOL, para un flujo de entrada de 0.5 LPM y 7 segundos

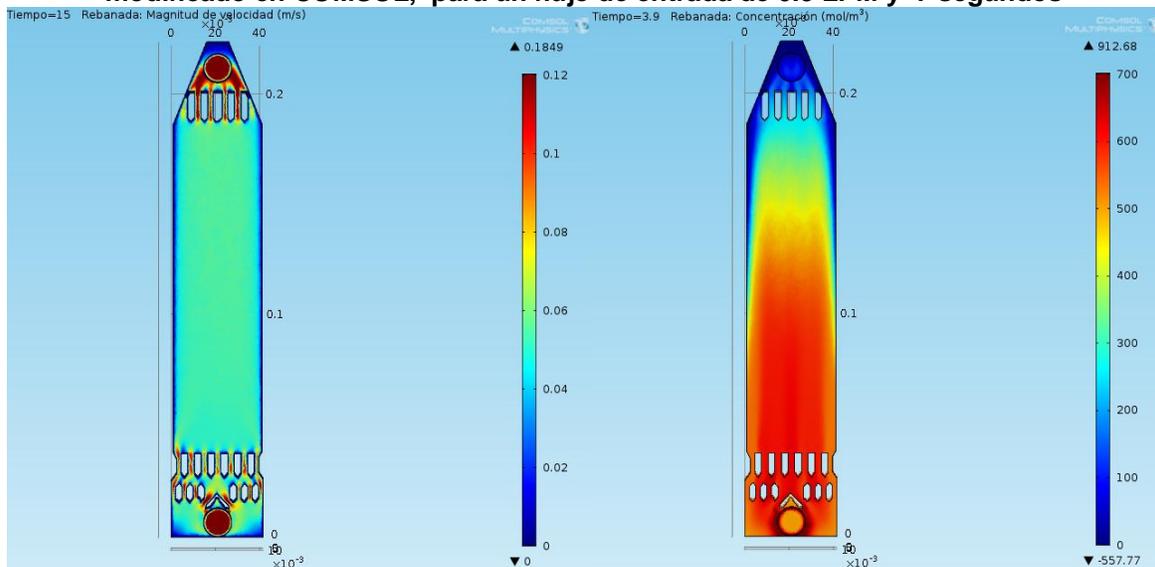


Figura 5.6. Perfil de velocidades del fluido perfil de concentraciones en el reactor FM01-LC modificado calculado con COMSOL, para un flujo de entrada de 1.0 LPM y 6.1 segundos

En las figuras mostradas en esta sección (5.4), del lado derecho se encuentra el perfil de velocidades, la escala de colores corresponde a la velocidad lineal en m/s, entre mas rojo es el color la velocidad es mayor, es de mencionarse que la escala varía dependiendo de la figura. Del lado izquierdo se encuentra el perfil de concentraciones para un tiempo dado, al igual que para el perfil de velocidades un color rojo indica una concentración mayor. Ambos perfiles se encuentran en el plano xy. .

El propósito de las imágenes obtenidas por Comsol es para relacionar la velocidad del fluido a través del reactor FM01-LC modificado con el perfil de concentraciones del trazador, respondiendo la pregunta de cómo afecta la velocidad del fluido a la concentración del trazador a través del tiempo, apuntando a una análisis cualitativo y muy claro de cómo se comporta el patrón de flujo en el reactor FM01-LC modificado, muestran más allá de las graficas de DTR, las DTR se concentran en los resultados a la salida del reactor, sin embargo estas imágenes proporcionan un estudio a lo ancho y largo del reactor.

En la figura 5.5 se observa claramente el efecto del distribuidor en la velocidad del fluido, por ejemplo a la salida del distribuidor de entrada, el fluido lleva una mayor velocidad a la salida de los pequeños canales, dicha velocidades preferente se extiende durante una proporción del largo del canal, y conforme avanza el fluido homogeniza su velocidad. Al tratarse de un flujo de entrada pequeño el efecto de las paredes se refleja en una azul oscuro, indicando una baja velocidad del fluido,

la cual se encuentra entre 0 y 0.02 m/s. la imagen derecha muestra el perfil de concentraciones del trazador a un tiempo de 7 segundos, recordando que el perfil de velocidades se encuentra en esta estacionario mientras que el perfil de concentraciones en dinámico. El efecto del distribuidor de entrada y sus velocidades preferenciales es más notorio en el perfil de concentraciones, los 3 picos a la altura de 0.1 cm son efecto de la velocidad preferencial forzada por el distribuidor. El momento en donde saldrá mayor cantidad de trazador y cuyo valor en la DTR será el pico más alto está representado por el color carmín, mientras que las concentraciones indicadas con los colores amarillo a azul celeste, y cuyos valores van de 100 a 300 mol/m³, dichas concentraciones representan en la DTR en el momento antes del pico más alto. El efecto de las paredes provoca un retraso al avance de concentración en la región cercana a las paredes, provocando un coqueo en la DTR.

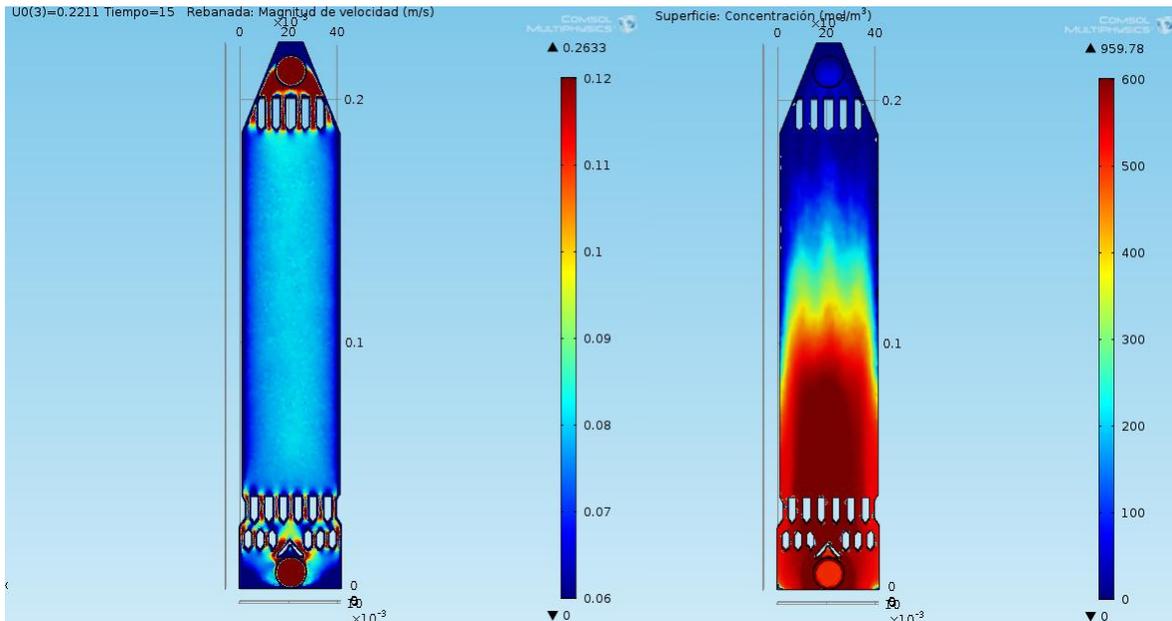


Figura 5.7. Perfil de velocidades del fluido perfil de concentraciones en el reactor FM01-LC modificado calculado con COMSOL, para un flujo de entrada de 1.5 LPM y 4.2 segundos

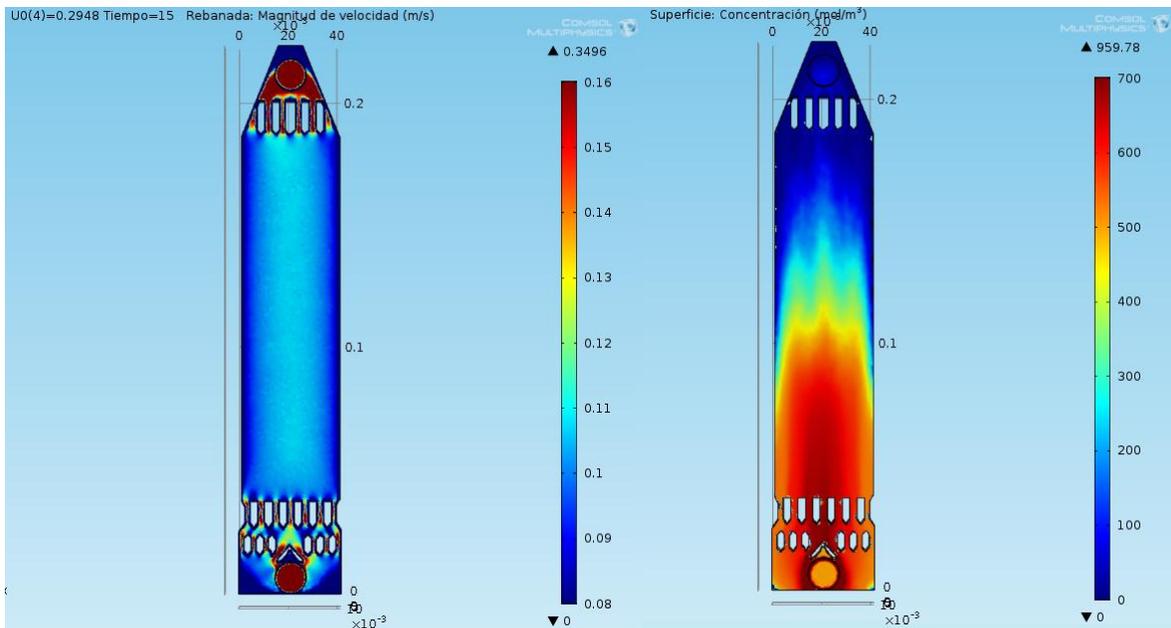


Figura 5.8. Perfil de velocidades del fluido perfil de concentraciones en el reactor FM01-LC modificado calculado COMSOL, para un flujo de entrada de 2.0 LPM y 2 segundos

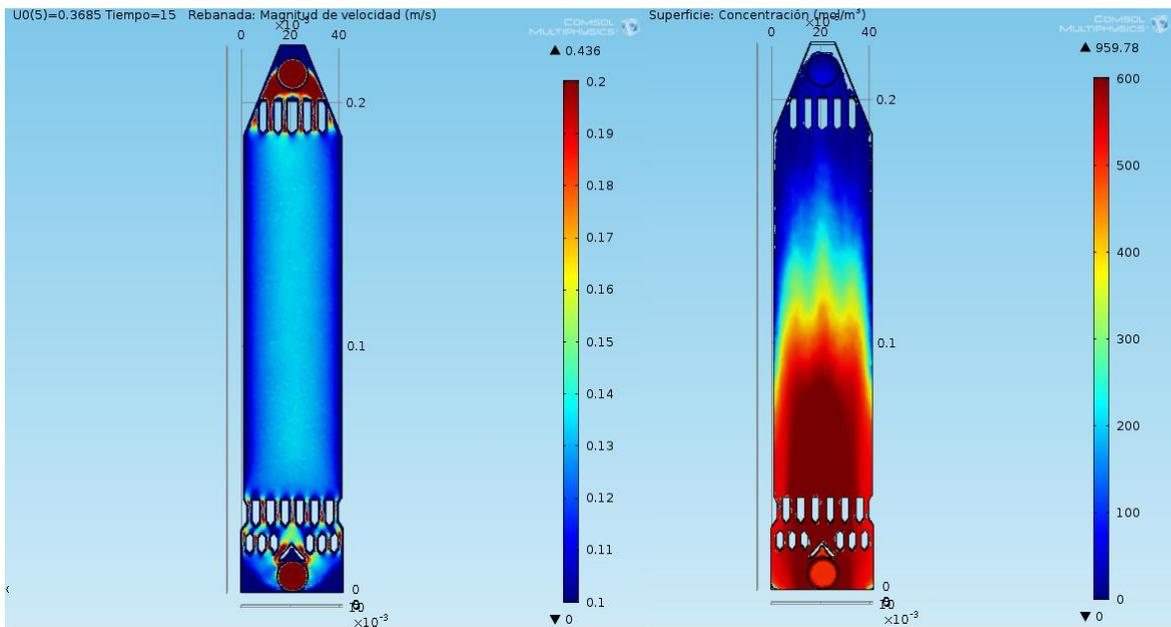


Figura 5.9. Perfil de velocidades del fluido perfil de concentraciones en el reactor FM01-LC modificado calculado con COMSOL, para un flujo de entrada de 2.5 LPM y 1.6 segundos

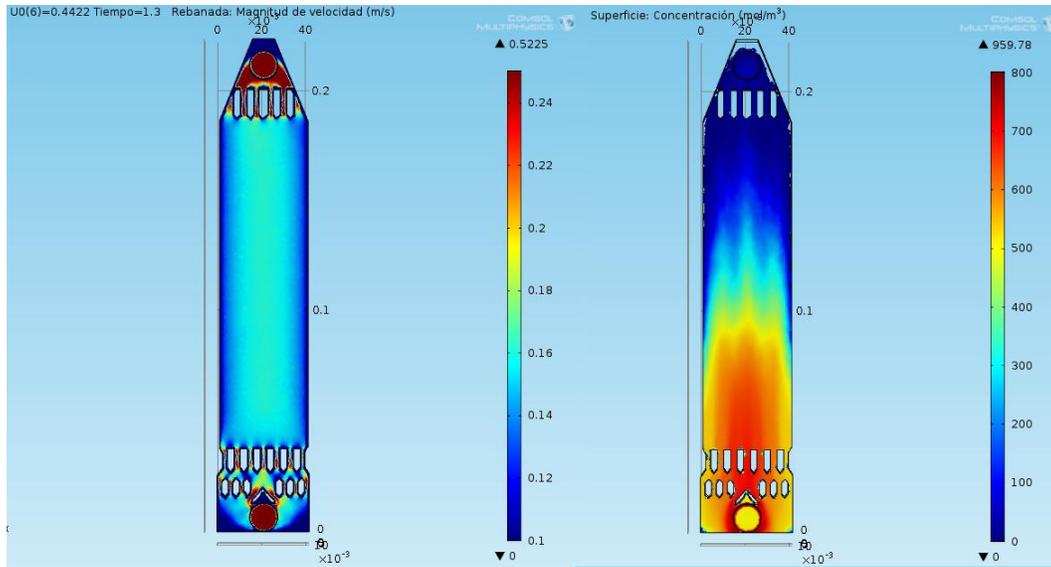


Figura 5.10. Perfil de velocidades del fluido perfil de concentraciones en el reactor FM01-LC calculado con COMSOL, para un flujo de entrada de 3.0 LPM y 1.3 segundos

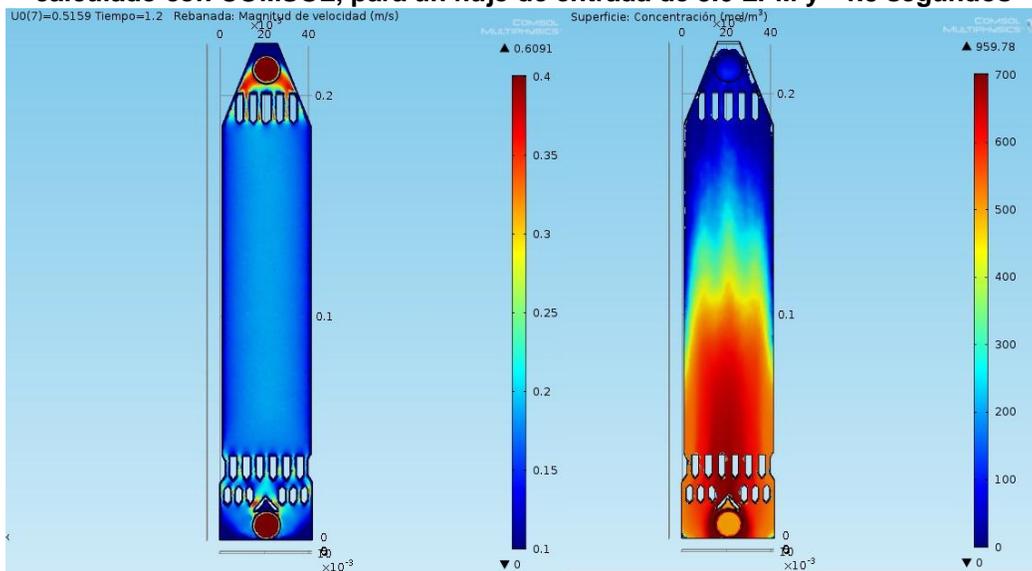


Figura 5.11. Perfil de velocidades del fluido perfil de concentraciones en el reactor FM01-LC modificado calculado con COMSOL, para un flujo de entrada de 3.5 LPM y 1.2 segundos

Para no ser reiterativos solamente se analizaran las imágenes 5.8 y 5.11 correspondientes a los flujos de entrada de 2.0 y 3.5 LPM. Para la figura 5.8 el perfil de velocidades se muestra mucho más homogéneo con respecto al perfil de la imagen 5.5, al ser un flujo más alto el efecto de los canales a la salida del

distribuidor es menor, el efecto de las paredes aun presente ahora tiene una velocidad más alta de 0.08 a 0.09 m/s, con este dato se puede suponer que la zona estancada es más fina. Para el perfil de concentraciones se muestra al centro del canal una concentración alta provocada por la colocación de la entrada al distribuidor justo al centro. Se siguen presentando los picos provocados por el distribuidor de entrada aunque dichos picos son menos pronunciados que los que aparecen con un flujo de entrada de 0.5 LPM. El efecto de las paredes en el perfil de concentraciones disminuyó, causa de una zona estancada más fina.

El ultimo flujo simulado fue el de 3.5 LPM, sus imágenes se muestran en la figura 5.11 , al ser el flujo de entrada más alto s el que presenta la capa más delgada de baja velocidad en la zona cercana a la pared, el perfil de velocidades es mucho más homogéneo con una velocidad en el canal de 0.18 a 2.0 m/s, en el perfil de concentraciones el efecto de las paredes aun presente aunque en menor proporción que en el resto de los flujo de entrada, se muestra una aceleración de la concentración justo a la mitad de canal, se debe a que aún existen flujo preferenciales, sin embargo como se muestra en la curva de DTR experimental es el resultado que más se acerca a un flujo tipo pistón, indicando que la velocidad del fluido corresponde a la velocidades de transferencia de masa conectiva.

5.5. Obtención de la curva de Distribución de Tiempos de Residencia, de una respuesta escalón en la concentración de salida del reactor FM01-LC Modificado

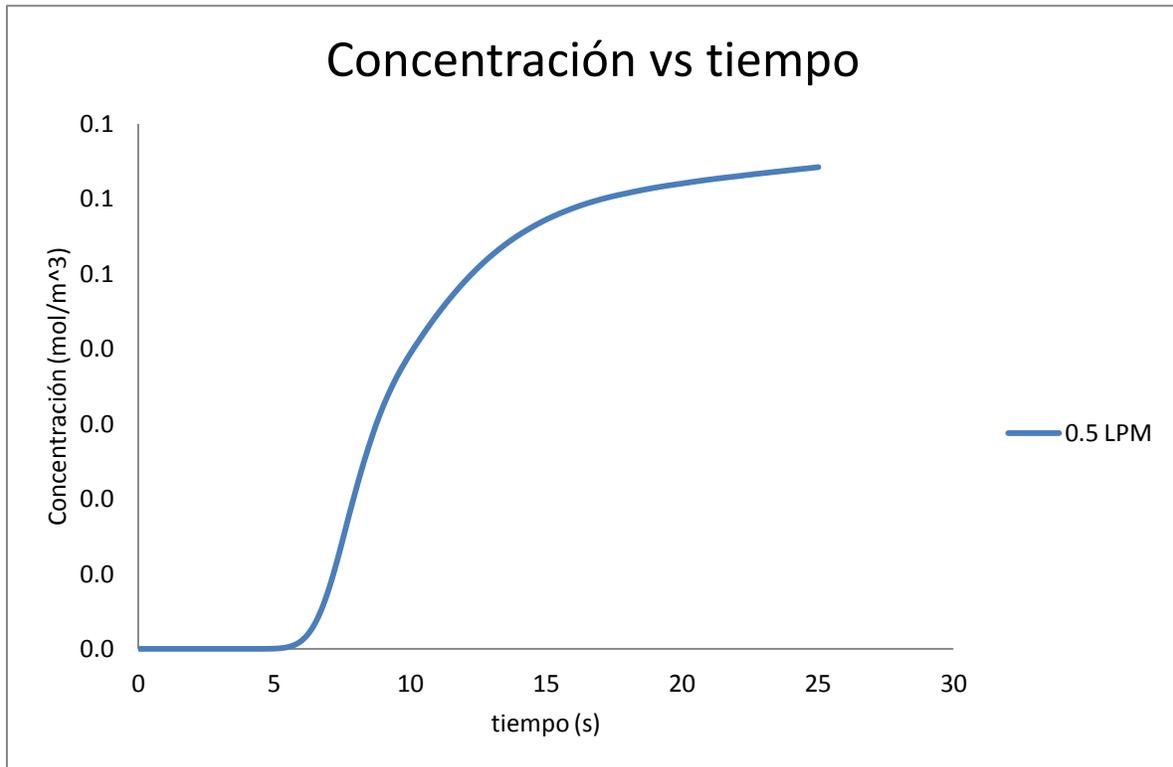


Figura 5.12. Respuesta al función escalón de entrada del trazador al reactor, con un flujo de entrada de 0.5 LPM al reactor FM01-LC modificado

Tratamiento de los datos de Salida del Simulador Cmsol

A la salida del reactor FM01-LC modificado en la simulación se obtienen los datos de concentración con respecto a cada tiempo. Estos datos corresponden a la respuesta escalón ingresada al inicio del reactor

$$CA(t) = \text{Concentración} \quad (3.10)$$

Los datos de la concentración con respecto al tiempo se muestran en la figura 5.12

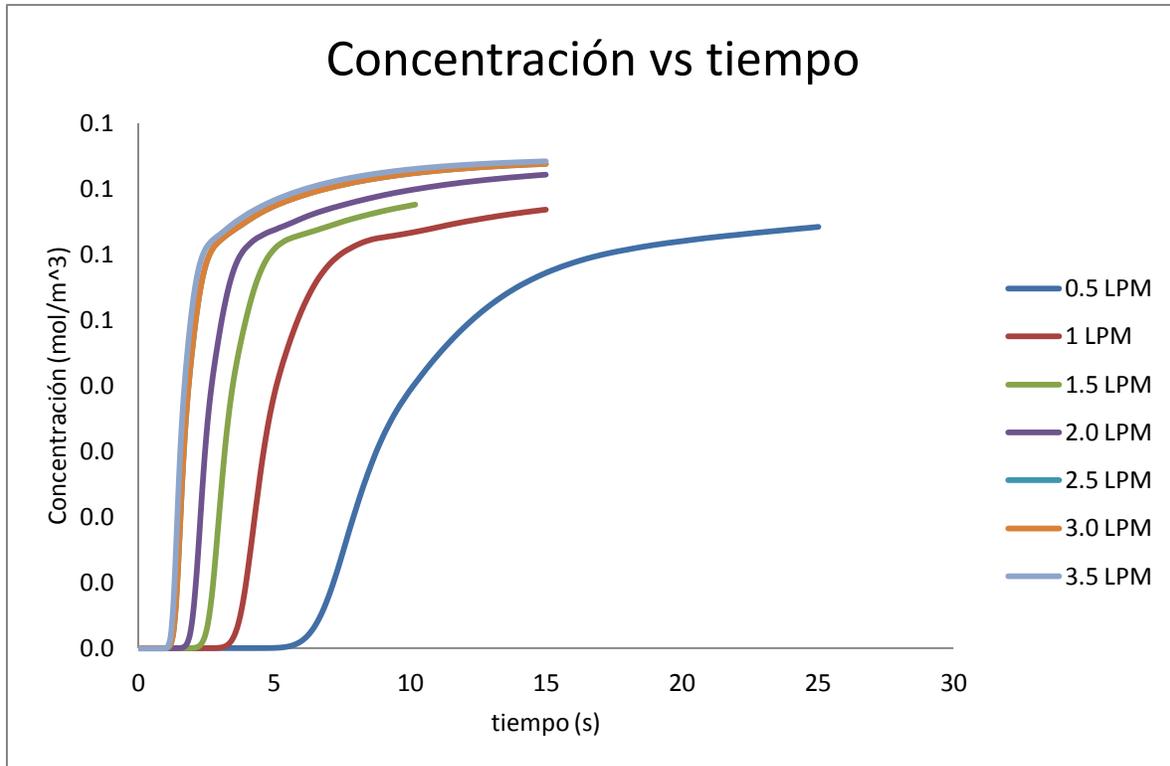


Figura 5.13: Concentración de diferentes flujos de entrada al reactor con respecto al tiempo

Para tener un parámetro de comparación, la concentración se debe volver adimensional. Para volver adimensional la concentración, primero se probó con la concentración que entra al reactor, y el resultado para todos los flujo nunca fue uno, esto se debe a que la concentración que entra al reactor nunca será la misma que saldrá en régimen permanente, porque se tiene que tomar en cuenta el volumen de liquido presente en el reactor antes de modificar la concentración de entrada. Para solucionar este problema, la concentración máxima y la que se utilizó para convertir la concentración en una magnitud adimensional, se tomó la

última concentración registrada a la salida del reactor para cada flujo, considerando que la concentración ya no cambiase con respecto al tiempo.

$$\frac{C_A}{C_{A0}} [=] \text{Concentración Adimensional} \quad (3.11)$$

Los resultados obtenidos tras volver adimensional la concentración se muestran en la figura 5.13

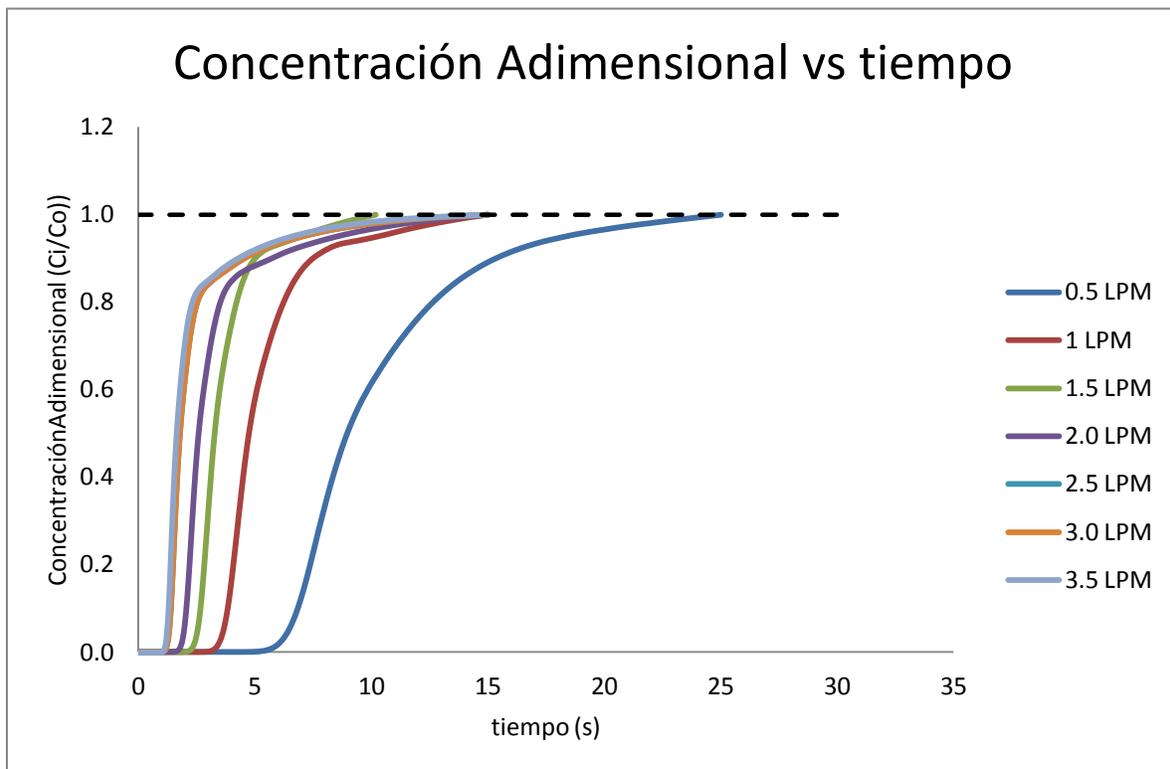


Figura 5.14: Concentración adimensional a diferentes flujos de entrada o función de distribución acumulativa F(t)

Para convertir la respuesta escalón en una respuesta tipo pulso, se llevó a cabo la derivada de la respuesta escalón para cada flujo. La derivada por definición es la pendiente de una recta, con la ayuda del programa Origin se obtuvo la pendiente de cada uno de los puntos. La figura 5.14 presenta los resultados dados tras la

derivación. La figura 5.14 muestra la función $F(t)$ función de distribución acumulativa, podemos conocer en qué tiempo que porcentaje de la concentración del trazador a cambiado, entre los flujos aumentan se alcanza mas rápidamente el 100 %, por ejemplo en 15 segundos para una flujo de 0.5 LPM ha cambiado el 80% de la concentración del trazador para una función escalón y para una función pulso a la entrada indica que el 80% de la masa del trazador ha pasado por el largo del reactor.

<u>Q(LPM)</u>	<u>F(t)</u>	<u>1-F(t)</u>
0.5	0.637	0.363
1.0	0.700	0.300
1.5	0.695	0.305
2.0	0.777	0.223
2.5	0.810	0.190
3.0	0.810	0.190
3.5	0.811	0.189

Tabla 5.1 Se muestra el valor de $F(t)$ función de distribución acumulativa, para diferentes flujos para el tiempo τ (tiempo de residencia promedio) correspondiente

La tabla 5.1 claramente muestra que al aumentar el flujo la función de distribución acumulativa aumenta significativamente hasta un valor máximo de $F(t)$ de 0.81 alcanzado en el flujo de entrada de 2.5 LPM, estos datos también muestran la función $1-F(t)$ la cual explica la magnitud del coleo provocado por zonas muerta en la Distribución de Tiempos de Residencia.

$$\frac{d\left(\frac{CA}{CA_0}\right)}{dt} = E(t) = Pendiente \quad (3.15)$$

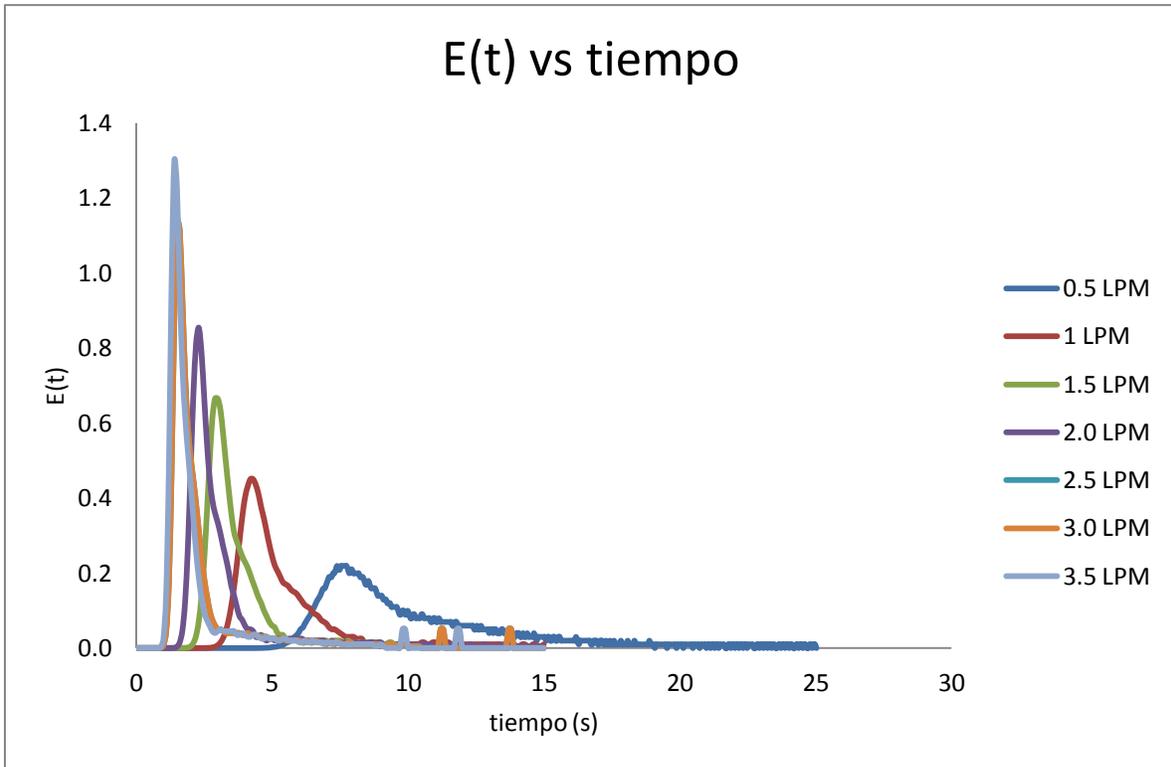


Figura 5.15 Función $E(t)$ vs el tiempo físico en segundos

La figura 5.15 muestra que conforme se aumenta el flujo de entrada al reactor, el tiempo requerido para alcanzar el estado estacionario se va acortando, este cambio se representa mediante las curvas, a partir de que la curva ya no tiene cambio, entonces se ha alcanzado el estado estacionario. El punto máximo corresponde al punto de inflexión de la curva de respuesta escalón, es el punto en donde se encuentra el mayor cambio en la concentración.

5.6. Comparación de las DTR de los Datos Experimentales y Simulados con Comsol del reactor FM01-LC Modificado

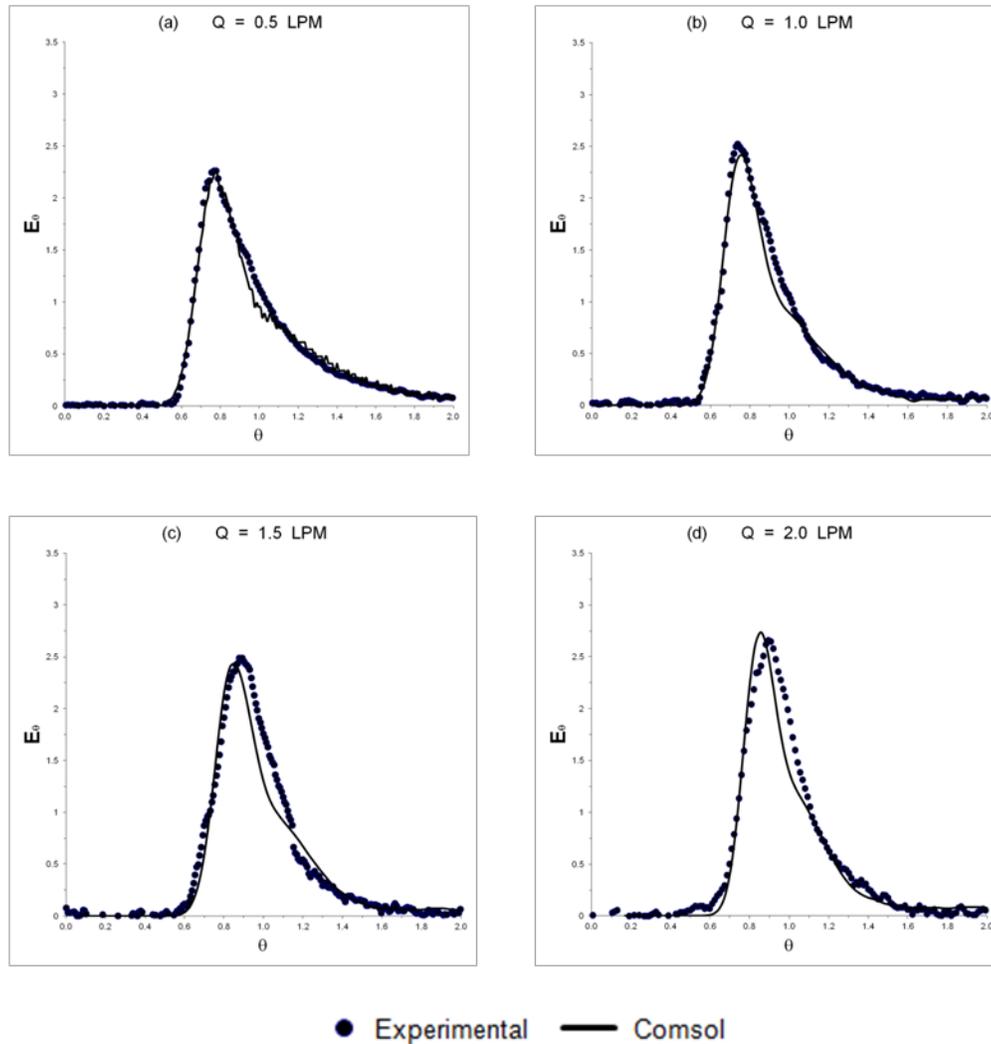


Figura 5.16. Distribución de Tiempos de Residencia experimentales (puntos) y simulados con Comsol , para flujos de 0.5 PM, 1.0 LPM, 1.5 LPM y 2.0 LPM. Para reactor FM01-LC modificado

Para el primer flujo la simulación de Comsol logra predecir la primer parte antes del valor máximo de la edad, sin embargo la recirculación en la parte experimental se da antes que en la simulación, la recirculación es representada en la gráfica

como un segundo pico en las dos curvas. Para el siguiente flujo 1 LPM representado en la grafica b, la simulación de Comsol describe perfectamente los datos experimentales aunque al igual que para el primer flujo de 0.5 LPM la recirculación ocurre antes en los datos experimentales sin embargo el fluido estancado coincide con los datos experimentales. Para el flujo de 1.5 LPM ya existe una desviación de los datos experimentales con los simulados, el valor máximo de los datos experimentales se encuentra en 2.48 y los datos simulados con Comsol de 2.4 sin embargo sigue siendo una buena aproximación, la simulación presenta un recirculación mientras que los datos experimentales ya casi no presentan recirculación. En la gráfica d se muestran los resultados experimentales y simulados para un flujo de entrada de 2.0 LPM, el valor máximo de la edad adimensional se corrigió con respecto al flujo anterior, para este flujo existe un desfase en la parte derecha de las curvas, ya no existe recirculación en los datos experimentales y aun ocurre en los datos simulados por Comsol.

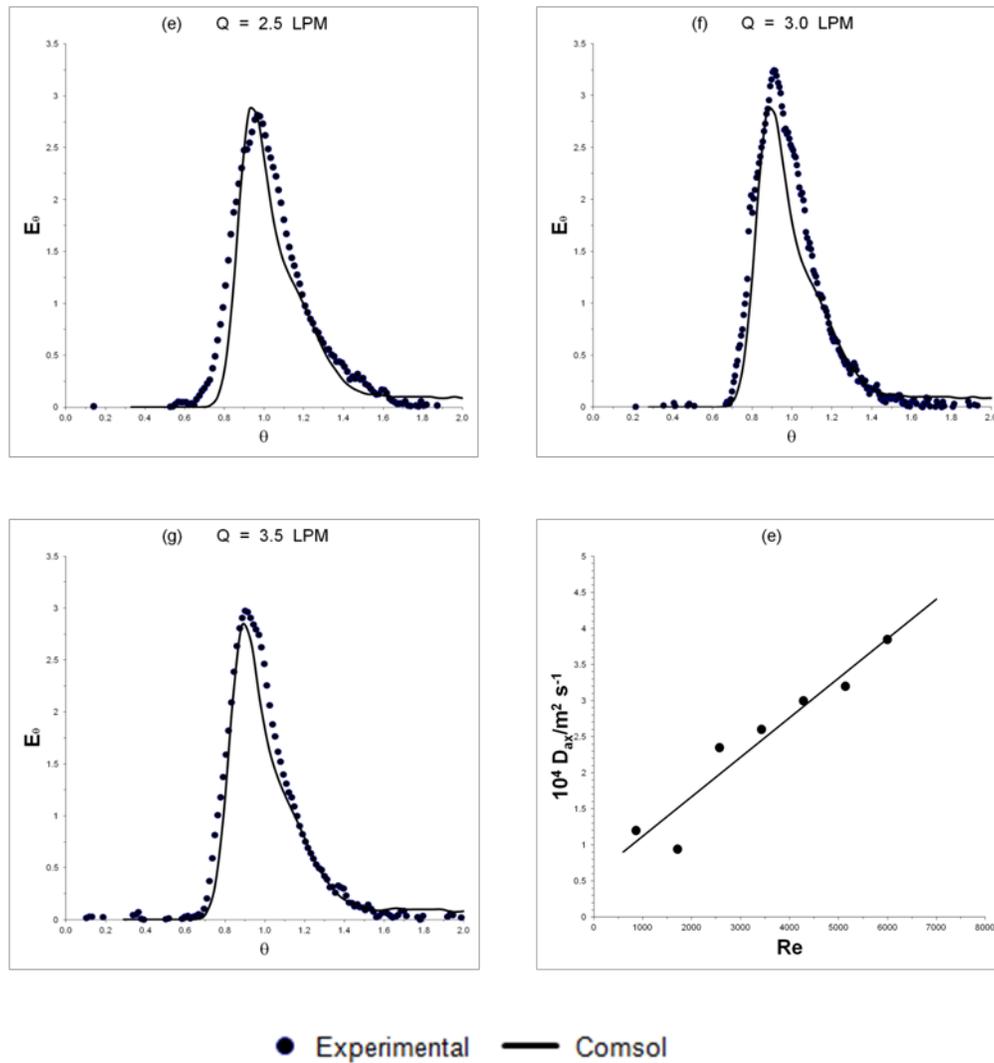


Figura 5.17. Distribución de Tiempos de Residencia experimentales (puntos) y simulados con Comsol , para flujos de 0.5 PM, 1.0 LPM, 1.5 LPM y 2.0 LPM. Para reactor FM01-LC modificado

En la figura 5.17.e se muestra la Distribución de Tiempos de Residencia para un flujo de 2.5 LMP, coinciden las edades adimensionales máximas de los datos experimentales y los datos simulados con Comsol, se observa que los datos simulados tienen una menor dispersión que los datos experimentales, curva mas angosta. Se puede distinguir una pequeña recirculación en la parte superior

derecha de los datos experimentales, mientras que el coleo se presenta a la mitad derecha de los datos simulados.

El siguiente flujo de 3.0 LPM, es el flujo con que presenta una mayor diferencia entre las Edades A dimensionales de los datos experimentales con los datos simulados, sin embargo también presenta una buena aproximación de los datos del coleo y los datos simulados entre 0 y 0.8 del tiempo adimensional. Para terminar los datos presentes en la gráfica 3.2.g figuran los datos de 3.5 LPM en el flujo de entrada al reactor, los datos simulados casi ajustan perfectamente a los datos experimentales, el coleo está muy bien aproximado, inclusive el coleo se representa en ambos datos a una edad adimensional similar.

La diferencia entre los datos experimentales y los datos simulados en los resultados para 3.0 LPM se debe a un error experimental, debido que el flujo de 3.0 LPM no continua con la tendencia del comportamiento de los demás datos experimentales, se presenta un cambio muy grande en la edad adimensional máxima lo cual no corresponde a la tendencia de los demás flujos, inclusive los datos experimentales de 3.5 LPM alcanzan una menor altura, es error se atribuye a la inyección en la parte experimental en donde apenas se está inyectando y parte del fluido ya está saliendo del reactor, causa de que el fluido viaja muy rápido a lo largo del reactor, aproximadamente el fluido tarda 2 segundos en recorrer el reactor FM01-LC, si la inyección dura 0.5 segundos, esto representa un cuarto del tiempo de residencia.

La figura 5.17.e muestra la relación que hay entre el Dax coeficiente de dispersión efectiva entre el Reynolds, la relación que existe entre ellos es lineal, indicando que a flujos mas turbulentos el coeficiente de dispersión efectiva tendrá un valor más alto, significando que el fluido viaje con una concentración más homogénea a lo largo del reactor, y traduciéndose en las DTR en una curva mas agosta.

5.7. Comparación de las DTR de Comsol con sus imágenes de gradientes de concentración.

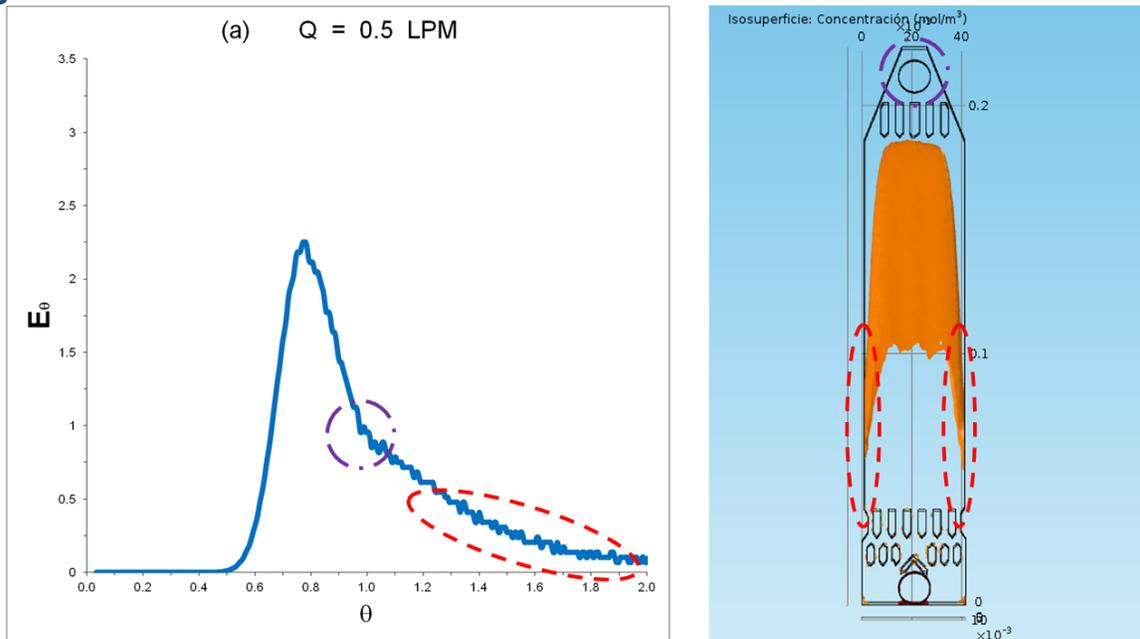


Figura 5.18. Distribución de Tiempos de Residencia y gradiente de concentración, obtenidos en Comsol para 0.5 LPM para 7 segundos

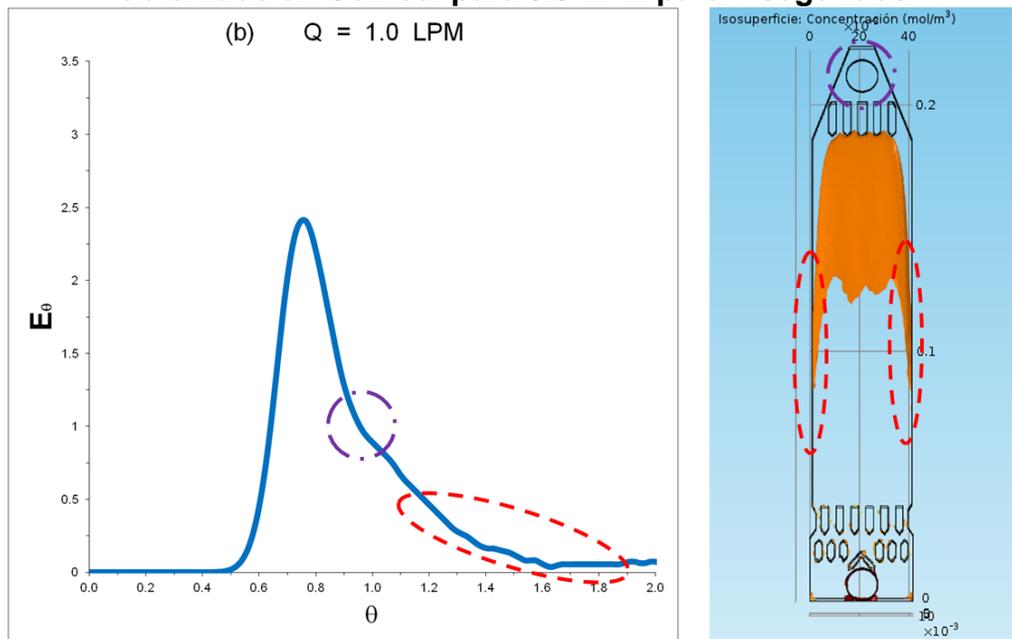


Figura 5.19. Distribución de Tiempos de Residencia y gradiente de concentración, obtenidos en Comsol para 1.0 LPM y 6.1 segundos

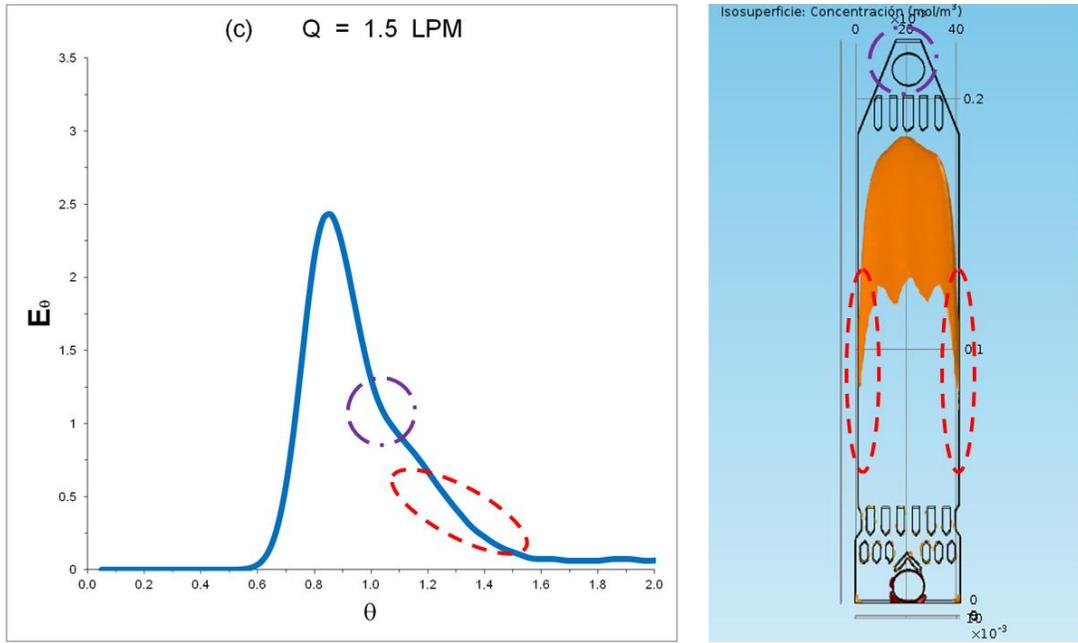


Figura 5.20. Distribución de Tiempos de Residencia y gradiente de concentración obtenidos en Comsol para 1.5 LPM y 4.2 segundos

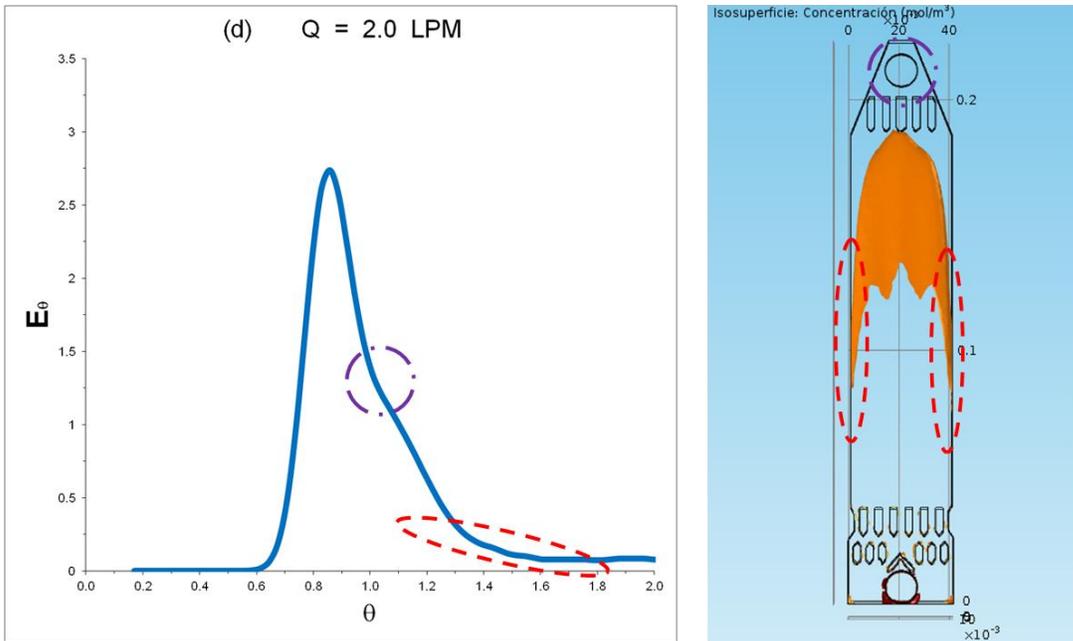


Figura 5.21. Distribución de Tiempos de Residencia y gradiente de concentración obtenidos en Colsol para 2.0 LPM y 2.0 segundos

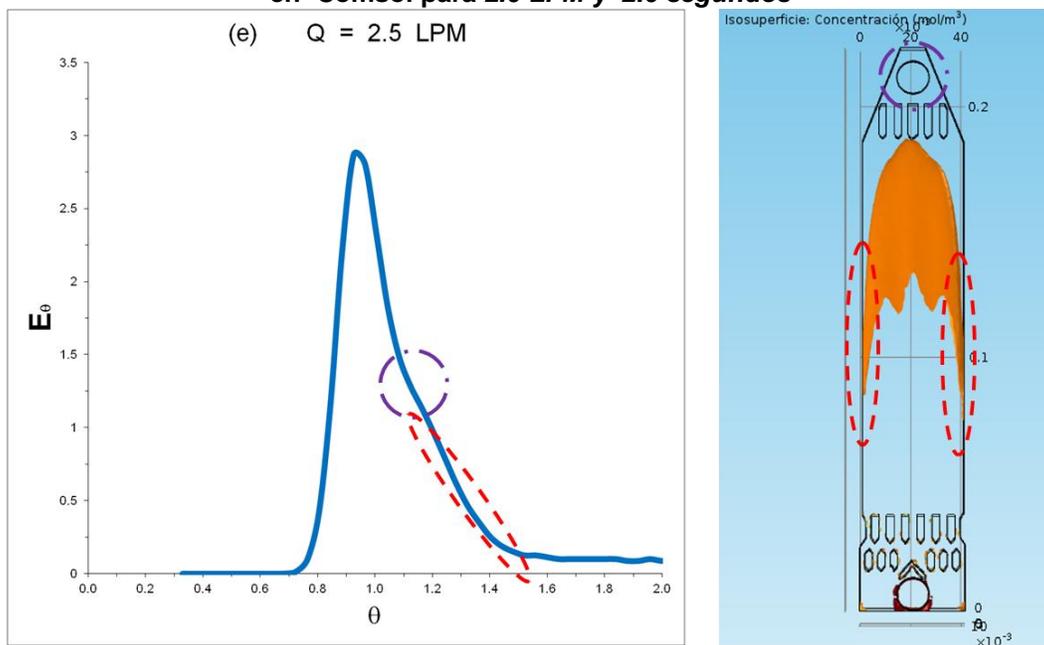


Figura 5.22. Distribución de Tiempos de Residencia y gradiente de concentración en Colsol para 2.5 LPM y 1.6 segundos

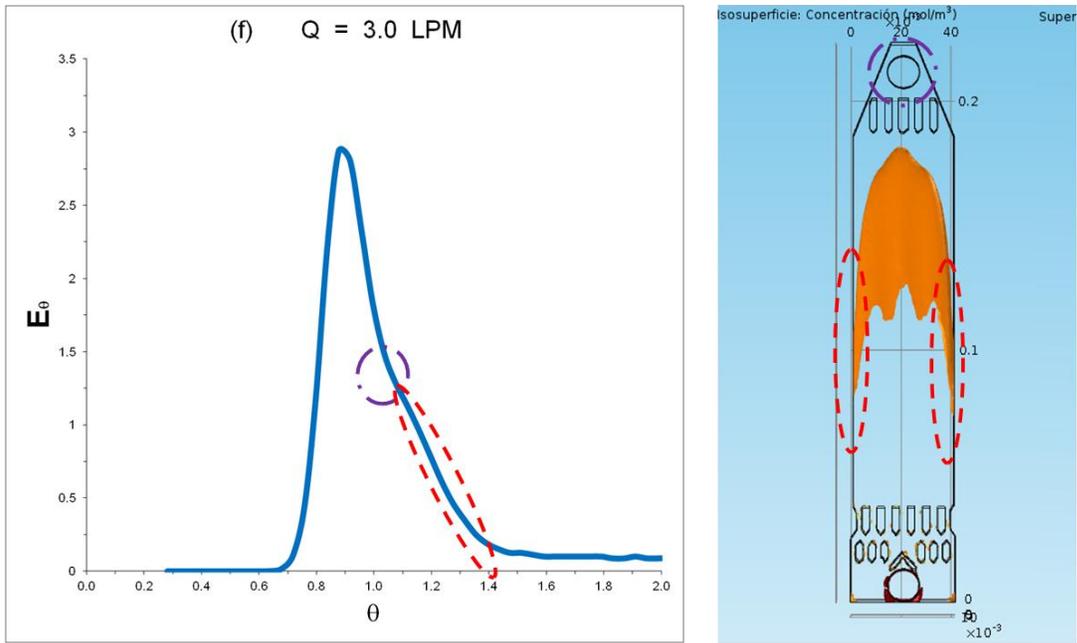


Figura 5.23. Distribución de Tiempos de Residencia y gradiente de concentración, obtenidos en Consol para 3.0 LPM Y 1.3 segundos

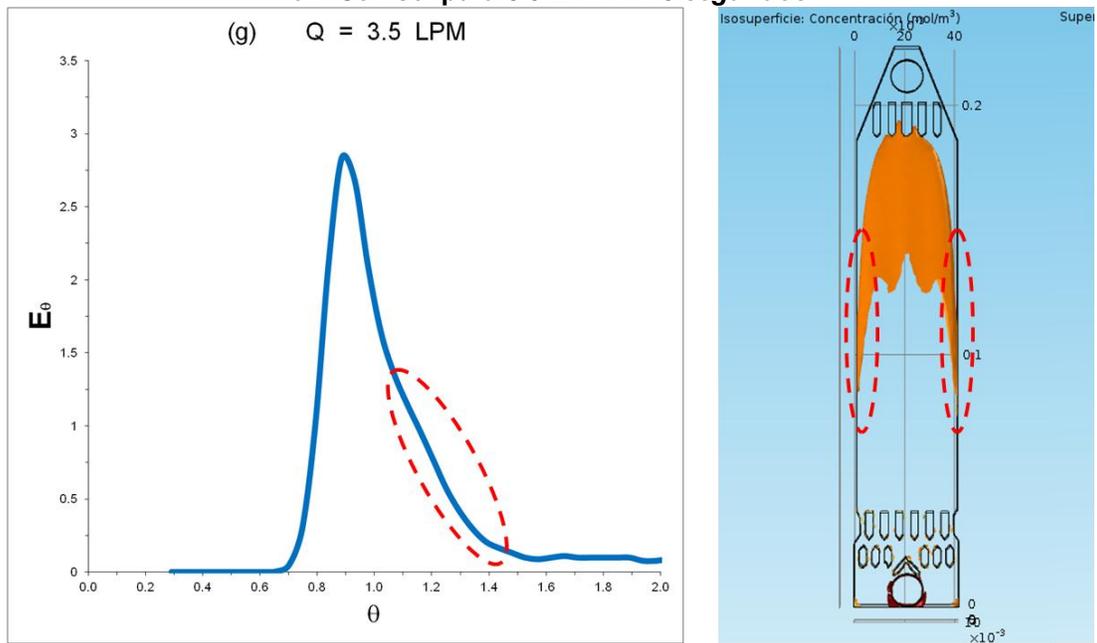


Figura 5.24. Distribución de Tiempos de Residencia y gradiente de concentración obtenidos en Consol para 3.5 LPM. y 1.2 segundos

La simulación en Comsol permite la identificación de los problemas de transferencia de masa adentro del reactor, contrario a lo que sucede con las DTR. Mostrando las DTR y las imágenes del gradiente de transferencia, permite un mejor análisis de las DTR. La zona anaranjada de la imagen de Comsol representa el gradiente de concentraciones, debido a que la entrada es una perturbación escalón la región en donde no existe color no indica que no exista presencia del trazador, indica que la concentración del trazador es homogénea, principalmente abaja del color naranja, por encima del color naranja, la concentración si es cero del trazador debida a que los tiempos representados en las diferentes figuras están justo por entrar al distribuidor de salida.

La Distribución de Tiempos de Residencia obtenidos mediante el Modelo de Dinámica de Fluidos DFC en Comsol para 0.5 LPM se presentan en la figura 5.18. Del lado derecho imagen que muestra el gradientes de concentración para 7 segundos desde que el trazador entra al reactor obtenidos de la simulación con COMSOL en el reactor FM01-LC modificado. Se encuentran señaladas las zonas estancadas en rojo, y la recirculación y la zona en donde sucede en color morado. Las zona marcada en rojo en la DTR corresponde al coleo observado en la imagen de Comsol, claramente se ve en la imagen un gran coleo, efecto de la interacción del fluido con la pared del reactor, el colero se extiende casi la mitad del total del tiempo adimensional, esto sucede porque el fluido viaja muy lento y el efecto de las paredes se incrementa provocando un coleo prolongado. La vibración mostrada en el coleo de la grafica de DTR es causa del método numérico y no tiene ninguna interpretación física, para los siguientes flujos este

efecto desaparecerá. La recirculación marcada con un círculo morado tanto en la DTR como en la imagen del gradiente de concentraciones. La recirculación es un efecto que se da a la salida del reactor, el fluido rebota en las paredes y aumentando la fracción de masa. El coleo y la recirculación se acentúan mas a flujo bajos como 0.5 LPM, también el pico más alto esta mas lejos del valor de tiempo adimensional de uno.

Para la figura 5.19. El coleo va desde 1.2 hasta 1.6 del tiempo adimensional, con respecto al flujo anterior el coleo es más pequeño sin embargo aun es considerable. el coleo como se observa en la figura de Comsol está más arriba, indicando que su tiempo es menor tal y como se refleja en la DTR, además el color anaranjada ocupa menos volumen del reactor, indicando que la concentración es mas homogénea y se logra en un menor tiempo. La recirculación aun está presente aunque ya es mucho menos visible que en el flujo de entrada de 0.5 LPM.

Para la figura 5.21 el coleo disminuye notablemente con respecto a los tres primeros flujos, este efecto también se muestra en el gradiente de concentración en donde el gradiente es más pequeño indicando una concentración más homogénea obtenida por un mayor flujo de entrada, por supuesto en menor tiempo alcanza a tocar el distribuidor de salida, alcanzándolo en solo 2 segundos. La recirculación es apenas notable, al tener concentraciones mas homogéneas y a mayor velocidad disminuye la recirculación ay que no da tiempo a que suceda esto por las concentraciones homogéneas alcanzadas en el interior del reactor.

Para un flujo de entrada de 3.0 LPM evidente en la figura 5.23 se ve la disminución de la diferencia de concentración en las zonas cercanas en la pared, esto se debe a que a mayor velocidad en el fluido la capa con una región laminar y un mezclado más deficiente que en la región turbulenta disminuye su grosor y por lo tanto su efecto en el mezclado total del fluido.

Para el último flujo simulado de 3.5 LPM, representado en la figura 5.24 el coque aun está presente, e indica que el coque por más que se quiera erradicar no se podrá, porque la interacción de la pared con el fluido siempre estará presente, por supuesto este efecto se ve disminuido a flujos más altos disminuyendo la capa laminar cercana a las paredes, ayudando a una concentración más homogénea reflejada en la DTR como un flujo cercano al patrón pistón, en donde el pico más alto se encuentra muy cercano al tiempo adimensional de uno.

CAPÍTULO:

6

Capítulo: 6. Análisis de Resultados

6.1 Calculo del error

Para tener un valor cuantitativo que permita la comparación de la Distribución de Tiempos de Residencia entre los datos experimentales y los del Modelo de Dinámica de Fluidos DFC en Comsol 4.3 se recurrió a obtener el error entre los datos experimentales y los datos simulados con DFC, con la siguiente ecuación

$$Error = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \left(\frac{E(\theta_{Exp})_i - E(\theta_{Sim})_i}{E(\theta_{Exp})_i} \right)^2}{N}} \quad (6.1)$$

$E(\theta_{Exp})_i$ [=] Datos Experimentales de la Edad Adimensional al tiempo i

$E(\theta_{Sim})_i$ [=] Datos Simulados de la Edad Adimensional al tiempo i

N [=] Numero de datos

Los resultados para cada flujo se muestran en la tabla 1

Error	
Q (L min ⁻¹)	Error
0.5	1.60
1	1.36
1.5	1.50
2	3.00
2.5	2.12
3	2.54
3.5	1.28

Tabla 6.1. Error calculado para la Distribución de tiempos de Residencia a la salida del reactor FM01-LC Modificado de los datos experimentales y simulados con Comsol, para flujo de entrada de 0.5 a 3.5 LPM

El error es muy bajo para todos los flujos desde 1.28 a 3.0, lo cual indica que la simulación está muy cercana a la descripción de la realidad, permitiéndonos una muy buena aproximación cualitativa y cuantitativa de lo sucedido en el reactor FM01-LC Modificado, de esta forma se validan los resultados obtenidos en la interfaz gráfica de Comsol, ayudándonos a entender mejor los problemas internos en este reactor. Para este tipo de calcular el error, un error pequeño se encuentra entre los valores 0 y 10.

Q ($L \text{ min}^{-1}$)	u_{sup} ($m \text{ s}^{-1}$)	Re	Pe	$10^4 D_{\text{ax}}/m^2 \text{ s}^{-1}$	τ_{exp}
0.5	0.021	856	52.47	1.20	8.914
1	0.043	1712	63.50	0.94	5.440
1.5	0.064	2567	63.64	2.35	3.260
2	0.086	3423	75.25	2.60	1.951
2.5	0.107	4279	83.08	3.00	1.876
3	0.128	5135	93.47	3.20	1.959
3.5	0.150	5991	90.64	3.85	1.817

Tabla 6.2 de izquierda a derecha, se muestra el flujo volumétrico de entrada al reactor FM01-LC Modificado, u_{sup} es la velocidad dentro del canal, Re Reynolds, Pe Peclet, D_{ax} coeficiente global de dispersión para la transferencia de masa, τ_{exp} tiempo promedio de residencia experimental, τ_{Consol}

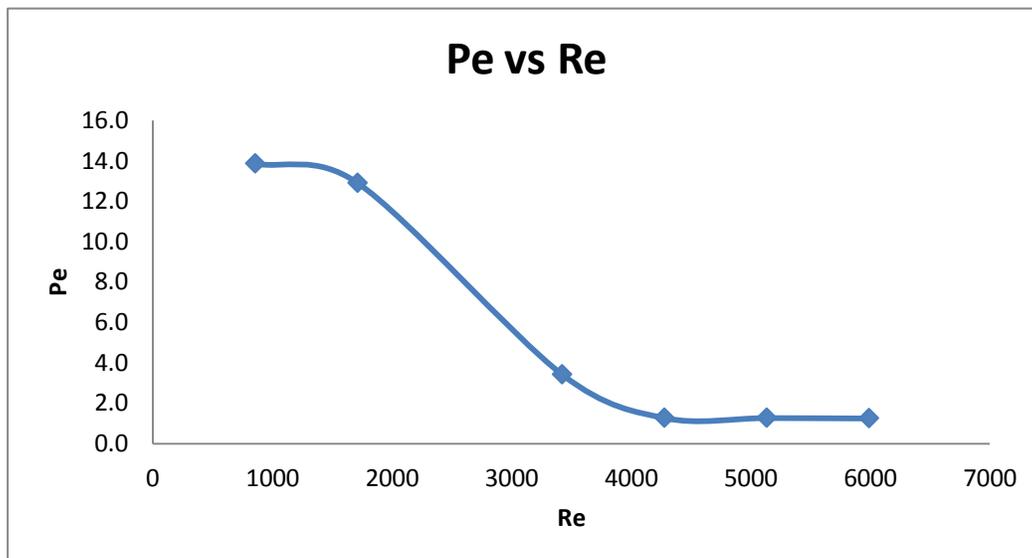


Gráfico 6.1 muestra al Peclet en el eje y, al Reynolds en el eje x

Recordando que el Peclet es $Pe = \frac{u_{int}LZ}{D_{ax}}$ cuyo valor representa el cociente entre la parte convectiva y la difusiva en la transferencia de masa, si el Peclet es mayor a uno la transferencia de masa por convección predomina, si es uno ninguna predomina, si es menor de uno la parte difusiva es la que predomina. Para valores entre 1000 y 2000 en Reynolds la parte que predomina es la parte convectiva, estos valores de Reynolds corresponde a los 3 primeros flujo de 0.5 a 1.5 LPM, al predominar la parte convectiva el comportamiento del fluido es laminar en donde no solo el valor del Reynolds nos ayuda a predecir también los altos valores del Peclet. Para valores de Reynolds entre 3000 y 6000 domina la parte difusiva representada por el D_{ax} o coeficiente de dispersión global, el hecho de que domine la parte difusiva se debe a que al aumentar el flujo que pasa a través del reactor el flujo se vuelve turbulento favoreciendo la difusión.

Sin embargo, no solo crece la parte convectiva mientras se aumenta el flujo, también lo hace la parte difusiva, como se observa en la tabla 6.2, el coeficiente de global de dispersión también aumenta, este análisis indica que al aumentar el flujo de entrada al reactor modificado la parte convectiva y difusiva incrementa, aunque la parte convectiva incrementa mas en relación a la parte difusiva. Al incrementar el flujo de entrada, el fluido tiene más interacciones entre si, haciéndose mas turbulento e incrementando la parte difusiva.

La nueva configuración geométrica de los distribuidores cumplió con tres restricciones: (a) la misma velocidad de los elementos de fluido a la salida del distribuidor de entrada (flujo pistón), así como la misma velocidad de los elementos de fluido en los ductos de entrada del distribuidor de salida, satisfacer la condición de frontera cerrado-cerrado tipo Danckwerts; (b) minimizar las zonas de alta y baja velocidad dentro del área electro-activa del reactor y (c) alcanzar un flujo completamente desarrollado dentro de la zona electro-activa.

CAPÍTULO:

7

Capítulo: 7. Conclusiones

El Modelo de Dinámica de Fluidos DFC permitió una aproximación muy cercana a los datos experimentales para el reactor FM01-LC modificado, las curvas de Distribución de Tiempos de Residencia identifican con precisión los problemas de un patrón de flujo no ideal a la salida de un reactor y su acoplamiento con las imágenes obtenidas del modelo de DFC ayudan a entender las causas del patrón flujo no ideal adentro de un reactor, siendo el modelo de DFC un complemento ideal de las curvas de DTR. La validación de las curvas de DTR simuladas por medio del modelo de DFC con los datos experimentales, es un hecho importante porque justifican cualitativamente y cuánticamente los datos del modelo de DFC. El trabajo permite que se incluya el modelo de DFC para hacer modificaciones a un reactor, que mejoren el comportamiento convectivo y difusivo en la dirección axial.

CAPÍTULO:

8

Capítulo: 8. Bibliografía.

8.1. Libros

1. Bird, B.R 2006, *Fenómenos de Transporte*, Segunda Edición, Editorial Reverté, México, pp3-11, 5-7.
2. Carberry, JJ 2001, *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*, Dover Publications, NY USA, pp. 97, 207, p. 642.
3. Charles, G. Hill Jr. 1977, *An introduction to Chemical Engineering kinetics and reactor design*, John Wiley and sons, USA, pp 245-281, p. 594.
4. Fogler, HS 2008, *Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas*, Pearson, Cuarta Edición, México, pp. 867-960.
5. Levenspiel, O 1998, *Chemical Reaction Engineering*, Wiley; Tercera Edición, USA, pp. 267- 282.

8.2 Artículos

1. Bengoa, Montillet A, Legentilhomme P, Legrand J, 1997, Characterization and Modeling of the Hydrodynamic Behavior in the Filter-Press-Type FM01-LC Electrochemical Cell by Direct Flow Visualization and Residence Time Distribution, *Journal of Applied Electrochemistry*, vol. 27, 1313 -1322.

2. Brown, J, Walsh, F. C, Pletcher, D, 1995, 'Mass transfer and pressure drop in a laboratory filterpress electrolyser', *Trans IChemE*, vol. 73, Part A, 196 – 205.
3. Colli, A.N, Bisang, J.M, 2011, 'Evaluation of the hydrodynamic behaviour of turbulence promoters in parallel plate electrochemical reactors by means of the dispersion model', *Electrochimica Acta*, vol. 56, 7312– 7318.
4. Couper, A.M, Pletcher, D, Walsh, F.C, 1990, 'Electrode materials for electrosynthesis', *Chem. Rev*, vol. 90, 837–865.
5. Frías-Ferrer, A, González-García, J, Sáez, V, Ponce de León, C, Walsh, F. C, 2008, 'The Effects of Manifold Flow on Mass Transport in Electrochemical Filter-Press Reactors, *AIChE Journal*', Vol. 54, No. 3, 811– 823.
6. Frías-Ferrer, Á, Tudela, I, Louisnard, O, Sáez, V, Esclapez, M. D, Díez-García, M. I, Bonete, P, González-García, J, 2011, 'Optimized design of an electrochemical filter-press reactor using CFD methods', *Chemical Engineering Journal*, vol. 169, 270–281.
7. González-García, J, Montiel, V, Aldaz, A, Conesa, J. A, Pérez, J R. Codina, G, 1998, 'Hydrodynamic Behavior of a Filter-Press Electrochemical Reactor with Carbon Felt as a Three-Dimensional Electrode', *Ind. Eng. Chem. Res*, vol. 37, 4501-4511.
8. González-García, J, Frías-Ferrer, A, Montiel, V, Aldaz, A, Conesa, J. A, 2002, 'Development of a model for the characterization of fluid dispersion in electrochemical reactors, *Journal of Hydroinformatics*', vol. 04.4, 281–295.
9. Jansson, R.E.W, Tomov, N.R, 1980, 'The dehydromerisation of diethyl malonate in six different designs of cell', *Electrochim. Acta* 25, 497–503.

10. Jomard, F, Feraud, J.P, Morandini, J, Du Terrail Couvat, Y, Caire, J.P, 2008, 'Hydrogen filter press electrolyser modelled by coupling fluent and flux expert codes', *J.Appl. Electrochem*, vol. 38, 297–308.
11. Nguyen, T.V, Walton, C.W, et al, 1986, 'Parallel-plate electrochemical reactor model', *J. Electrochem. Soc.* 133 81–87.
12. Pletcher D, Walsh, F.C, 'Industrial Electrochemistry, Chapman and Hall, London', 1990.
13. Rivera, F, Cruz-Díaz, M. R, Rivero, E. P, González, I, 2010, 'Analysis and interpretation of residence time distribution experimental curves in FM01-LC reactor using axial dispersion and plug dispersion exchange models with closed–closed boundary conditions', *Electrochimica Acta*, vol. 56, 361–371.
14. Rivero, P, Rivera, F. F, Cruz-Díaz, M. R, Mayena, E, González, I, 2013 'Numerical simulation of mass transport in a filter press type electrochemical reactor FM01-LC: Comparison of predicted and experimental mass transfer coefficient', *Chemical Engineering Research and Design*, in Press.
15. Trinidad, P, Ponce de León, C, Walsh, F.C, 2006, 'The application of flow dispersion models to the FM01-LC laboratory filter-press reactor', *Electrochimica Acta*, vol. 52, 604–613.
16. Walsh, F.C, Reade, G.W, 1994, 'Design and performance of electrochemical reactors for efficient synthesis and environmental treatment. Part 2. Typical reactors and their performance Analyst', vol. 119, 797–803.

ANEXO:

Anexo I Metodología Comsol 4.3

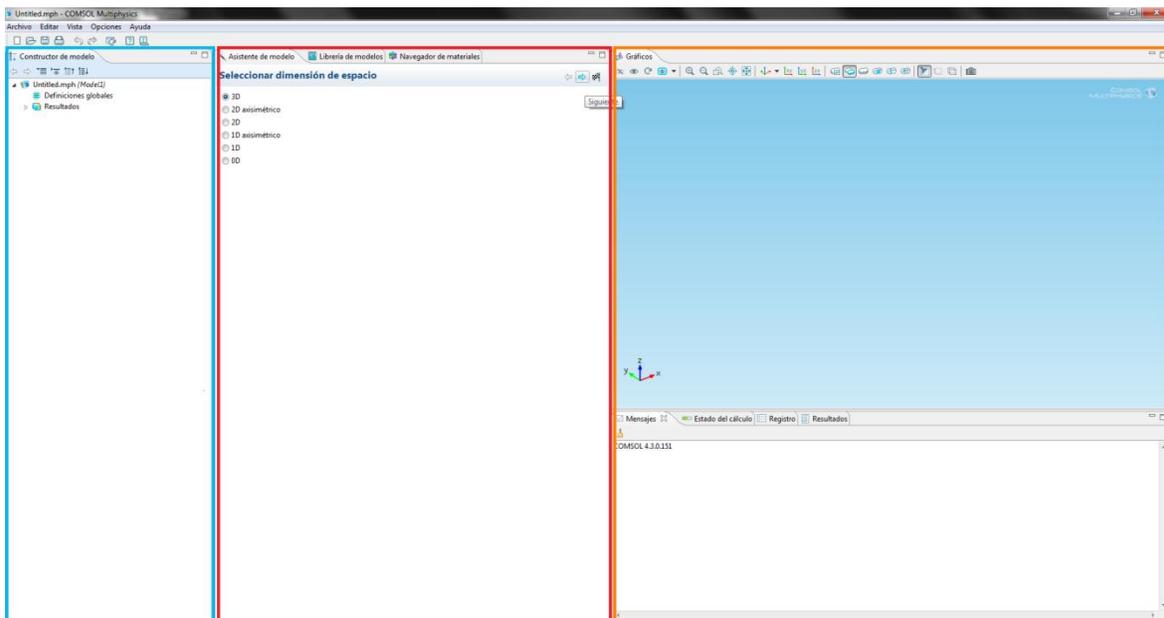


Figura AN.1 Se muestra la interfaz de Comsol 4.3, programa de cómputo utilizado para simular la hidrodinámica y transferencia de masa en el rector FM01-LC en 3 dimensiones.

La ventana inicial de Comsol, se divide en tres secciones, la primera marcada por un rectángulo azul recibe el nombre de constructor de modelo, en el constructor de modelo se muestran los pasos a seguir en la simulación del modelo, estos pasos son: (a) Definiciones Globales, (b) Modelo, (c) Estudio y Resultados, No todos aparecen al inicio sin embargo mientras se avanza aparecen o se llaman conforme se requieran.

a) Definiciones Globales, aquí se muestran las definiciones correspondientes al sistema, como puede ser la velocidad de entrada, las propiedades del fluido como densidad y viscosidad.

b) Modelo, en el modelo se encuentra la Geometría, Material (fluido a utilizar), los módulos para resolver la física del modelo y la malla del sistema. b.1) La Geometría de nuestro sistema si bien se puede construir en Comsol, también se puede construir una geometría en Auto CAD e importarla a Comsol, dependiendo de lo que se requiera la geometría puede ser en una, dos o tres dimensiones. b.2) Materia, en esta sección se cuenta con una biblioteca predeterminada de los fluidos más comunes como el agua y algunos hidrocarburos, y si la biblioteca de Materiales de Comsol no cuenta con el fluido deseado se puede especificar las propiedades que lo caracterizan. b.3) Módulos, en Comsol se puede resolver muchos fenómenos físicos y químicos y relacionarlos entre si, por ejemplo se puede resolver el esfuerzo hecho en una pieza mecánica, el comportamiento de un fluido en una tubería, un sin fin de problemas. b.4) La malla, el mallado corresponde al número de elementos o puntos que va a resolver Comsol, tomando en cuenta que una mallado muy fino requiere de más tiempo de cálculo y una mayor memoria del equipo de cómputo.

c) Estudio, el estudio consta básicamente del número de pasos que se requieran para resolver un problema, y también se encuentra la Configuración del resolvidor. c.1) Pasos, un paso puede corresponder a uno o más Módulos, por ejemplo un paso es Estacionario, no depende con respecto al tiempo y se puede definir para un modelo de hidrodinámica, entonces Comsol resolverá la

hidrodinámica en estado estacionario. c.2) Configuración del resolvidor, se puede modificar el método numérico que se utiliza para cada paso, en ocasiones un problema no llega a la solución deseada por el uso de un método incorrecto.

d) Resultados, Se muestran los resultados en imágenes en la dimensión que se encuentre el modelo, por ejemplo para un modelo de hidrodinámica, se muestra la velocidad que lleva el fluido y para cada velocidad Comsol le da un color.

La siguiente ventana rodeada en la figura AN.1 por el color rojo. Es la ventana de trabajo, es la ventana que manipula las secciones del Constructor de Modelo (ventana anterior). Se agregan y se modifican las cosas que se requieran en cada una de las secciones mostradas en Constructor de Modelo.

La última ventana o ventana “Gráfico”, es en donde se muestra la geometría del modelo, y es en donde se designa la entrada, salida y condiciones de frontera en la geometría.

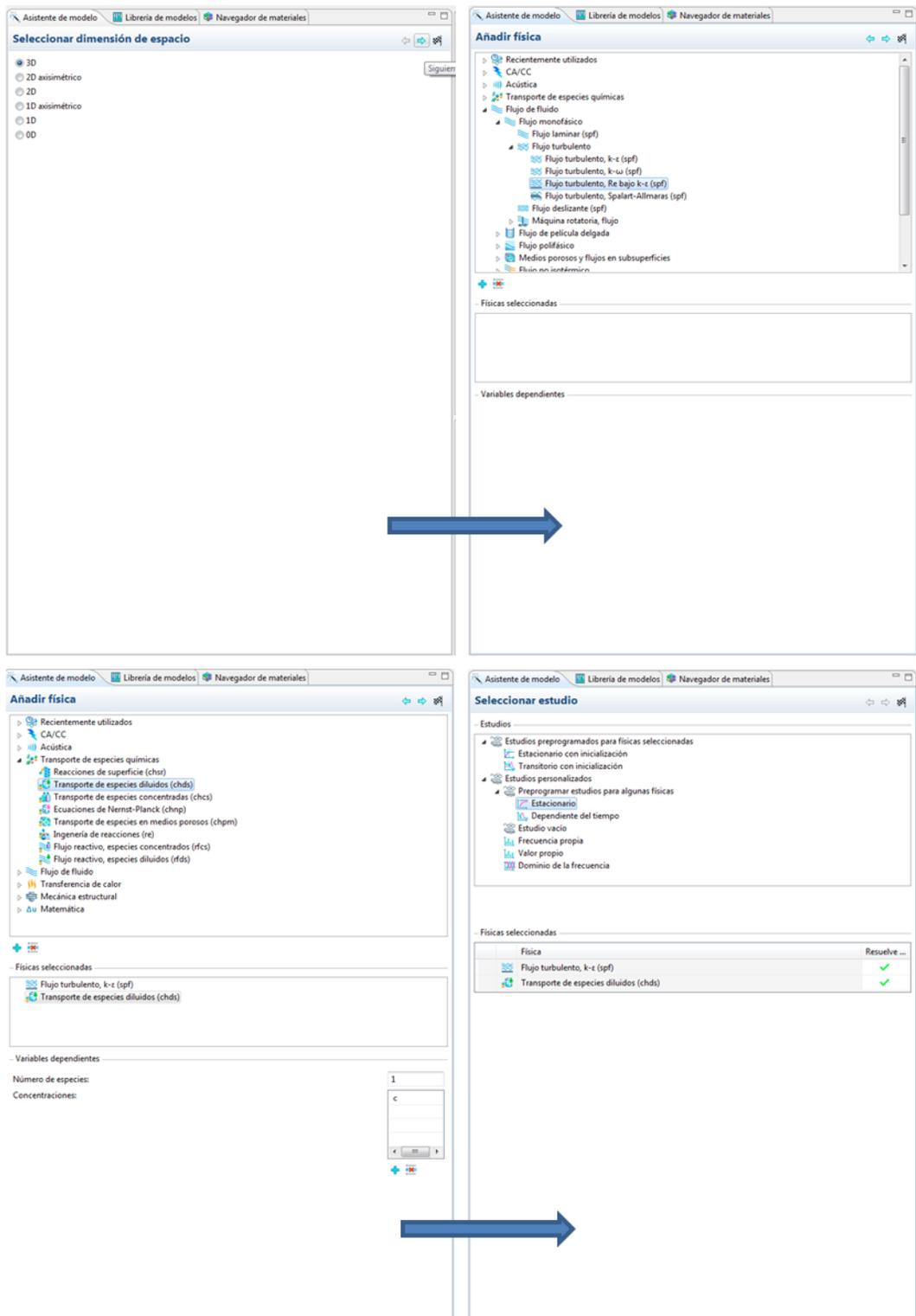


Figura AN.2 Muestra los primeros pasos para el desarrollo de la hidrodinámica y Transferencia de Masa para el rector FM01-LC en Comsol 4.3.

Primero se elige la dimensión del espacio en donde se va a trabajar, se escogió el de 3D, es muy importante elegir la dimensión debido a que la geometría que más adelante se importara tiene que estar en las dimensiones que se han elegido en este paso. Después en Añadir física se escogió para la hidrodinámica el modelo de “Flujo Turbulento, Re bajo $k-\epsilon$ ” El cual resuelve la hidrodinámica en el seno del líquido como flujo turbulento y en las paredes de la geometría como un flujo con bajos números de Reynolds. Para la Transferencia de Masa se eligió el modelo de “Transporte de especies diluidos” este modelo considerara la transferencia de masa del trazador en el reactor FM01-LC. Por último se selecciona los 2 estudio el primero es “Estacionario” no depende del tiempo y este estudio resolverá el modelo de “Flujo Turbulento, Re bajo $k-\epsilon$ ”. El segundo estudio es el “Dependiente del Tiempo” y se aplicara para el modelo de “Transporte de especies diluidos”.

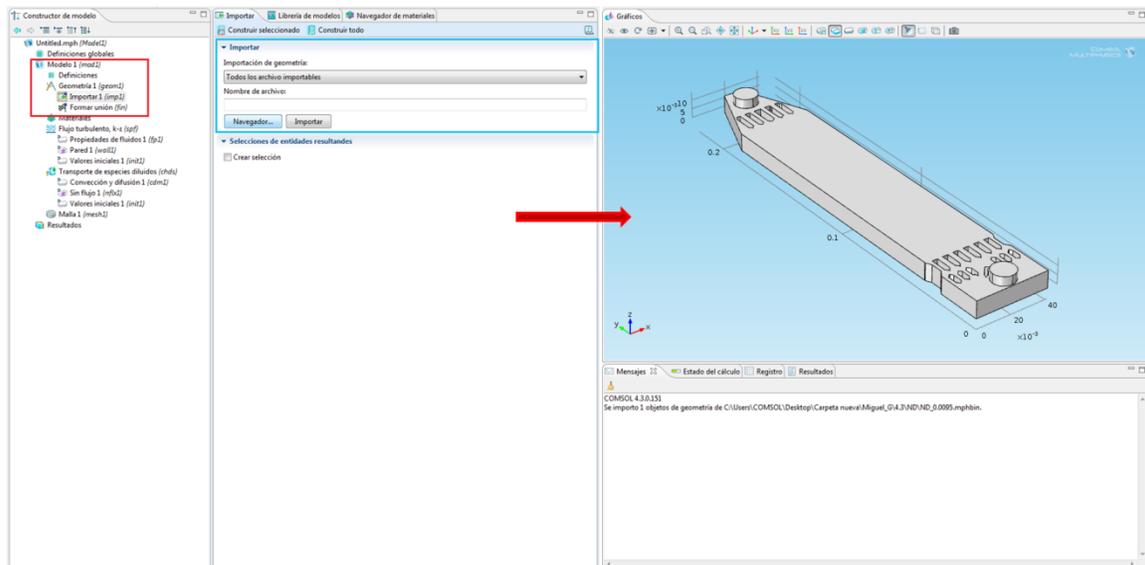


Figura: AN.3 Muestra los pasos para importar la geometría del reactor electroquímico FM01-LC en Comsol 4.3.

Para el caso del reactor FM01-LC con un ancho de canal de 0.0095 metros ya se contaba con la geometría previamente construida en una versión anterior de Comsol, para importar la geometría se da botón derecho en la sección de geometría en la ventana izquierda (Constructor de modelo) y se elige la opción de Importar, al hacer esto aparecerá en la Ventana de trabajo la opción para buscar nuestra geometría en los archivos de la maquina, teniendo en cuenta que el formato del archivo de la geometría tiene que ser .mphbin, un formato compatible con todas las versiones de Comsol y Auto CAD. Cuidando que la geometría se encuentre en las dimensiones que se eligieron al abrir Comsol, no se puede trabajar un modelo en tres dimensiones si al inicio se eligieron dos dimensiones, ya que la biblioteca de modelos físicos solo aceptara dos dimensiones.

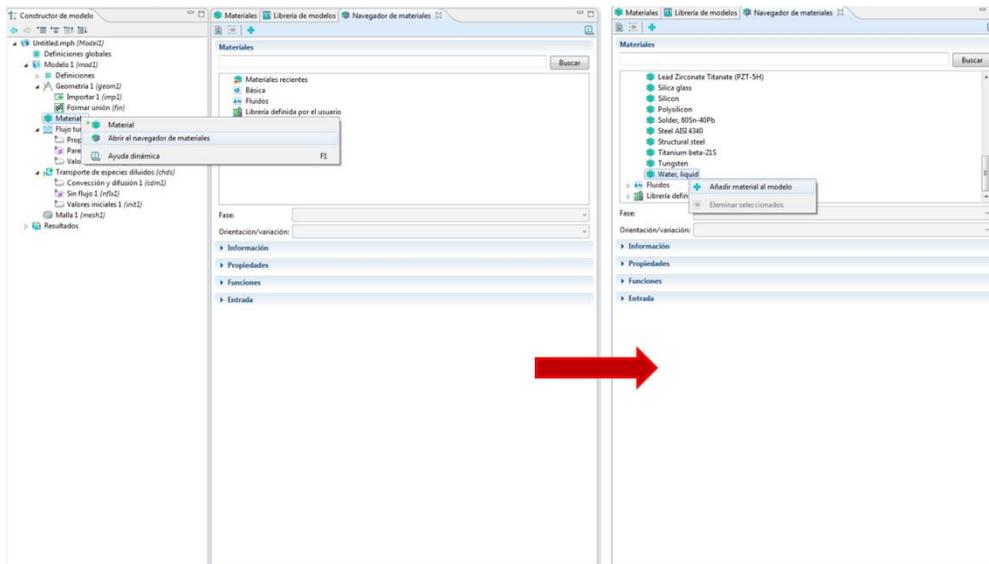


Figura AN.4 Selección del material o fluido en el reactor FM1-LC en Comsol 4.3

Comsol cuenta con una biblioteca de diferentes fluidos y materiales, para el estudio del reactor FM01-LC se utilizo agua como el fluido que acarrea al trazador. Para seleccionar al fluido se dio botón derecho en el “Constructor de modelo” en el icono de material de esta forma se despliega una ventana con las opciones: (agregar) Material y Abrir el navegador de materiales. La primera opción es por si se tiene las propiedades del fluido, en este caso se utilizo el navegador de materiales, con el fin de abrir la biblioteca de Comsol, al elegir el navegador se despliega en la “ventana de trabajo” se seleccionó el vinculo de fluidos y se buscó la opción de water, liquid, una vez hecho, Comsol lo considera que es agua el dominio de la geometría.

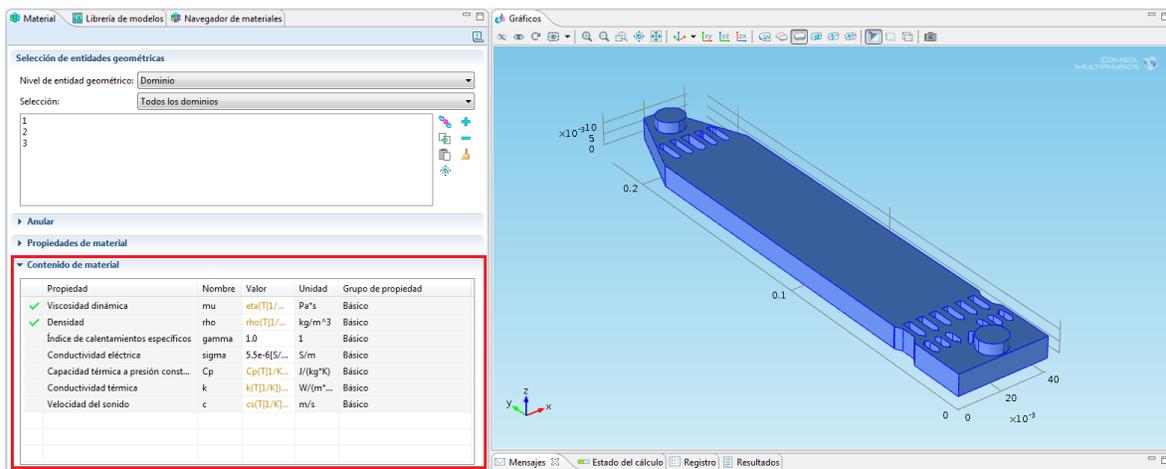


Figura AN.5 Propiedades consideradas para la resolución de la física en Comsol 4.3.

Después de elegir al agua como fluido, Comsol despliega en la “Ventana de trabajo” el dominio del fluido, el cual es toda la geometría, además muestra las propiedades del fluido (agua), incluso se palomean las propiedad que se utilizarán, siendo la viscosidad dinámica y densidad, ambas en función de la temperatura.

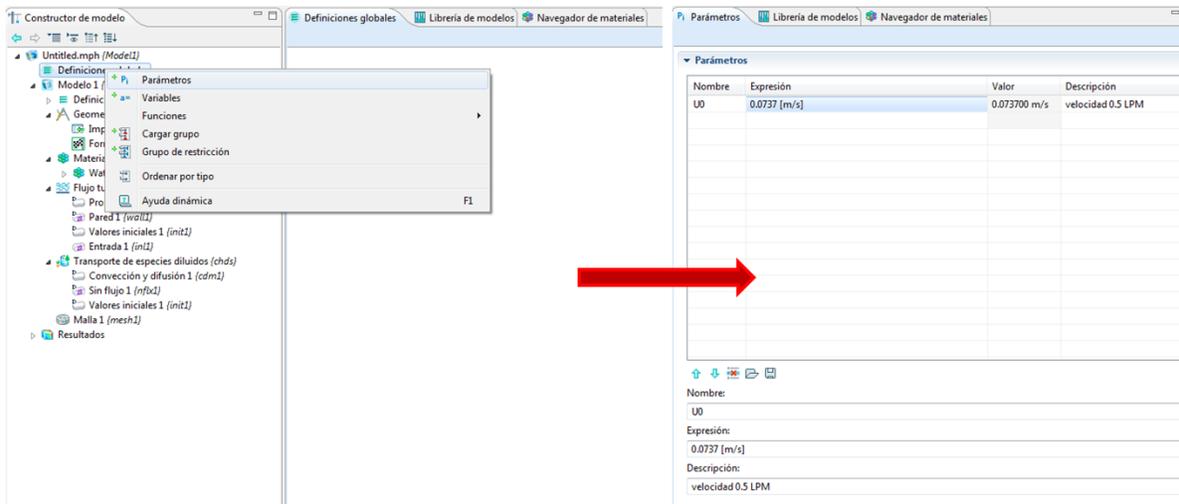


Figura:AN.6 Selección de parámetros o variables controladas por el usuario en Comsol 4.3.

Esta paso no habría sido requerido si no se va a hacer el “Barrido paramétrico” del cual se hablara más adelante, fundamentalmente consiste en la resolución del mismo problema para diferentes parámetros de entrada, para el caso del estudio del reactor el parámetro de entrada es la velocidad (U0). El parámetro inicial (U0) es de 0.0737 m/s, es la velocidad correspondiente al primer flujo de entrada al reactor, el primer flujo es 0.5 LPM.

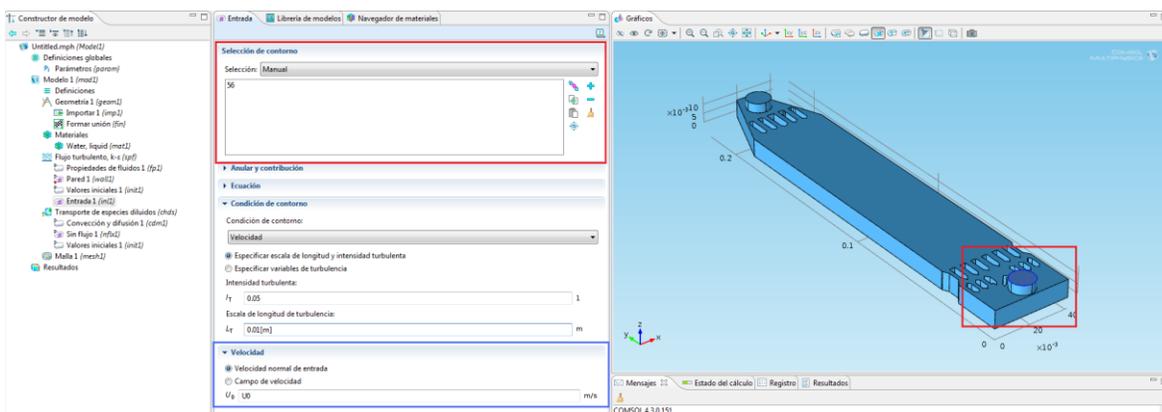


Figura AN.7: Selección de las condiciones de entrada de la hidrodinámica en Comsol 4.3.

Para indicar las condiciones de entrada en la geometría se elige en el “constructor de modelo” la opción de “Flujo Turbulento, Re bajo $k-\varepsilon$ ” se desglosó una lista y se selección “Entrada”, una vez hecho esto en la ventana del “Gráfico” se selecciona la entrada del distribuidor del FM01-LC, y se dio en el símbolo de mas en el “Espacio de trabajo”, para definir esta parte de la geometría como la entrada. Se adicionó como la velocidad inicial a U_0 . Para seleccionar la salida fue el mismo procedimiento, con lo excepción de que no se añadió ninguna velocidad ni diferencia de presión.

Una vez completado e indicado las condiciones iniciales y finales del modelo para la hidrodinámica se pasó a la transferencia de masa o al modelo de “Transporte de especies diluidas”.

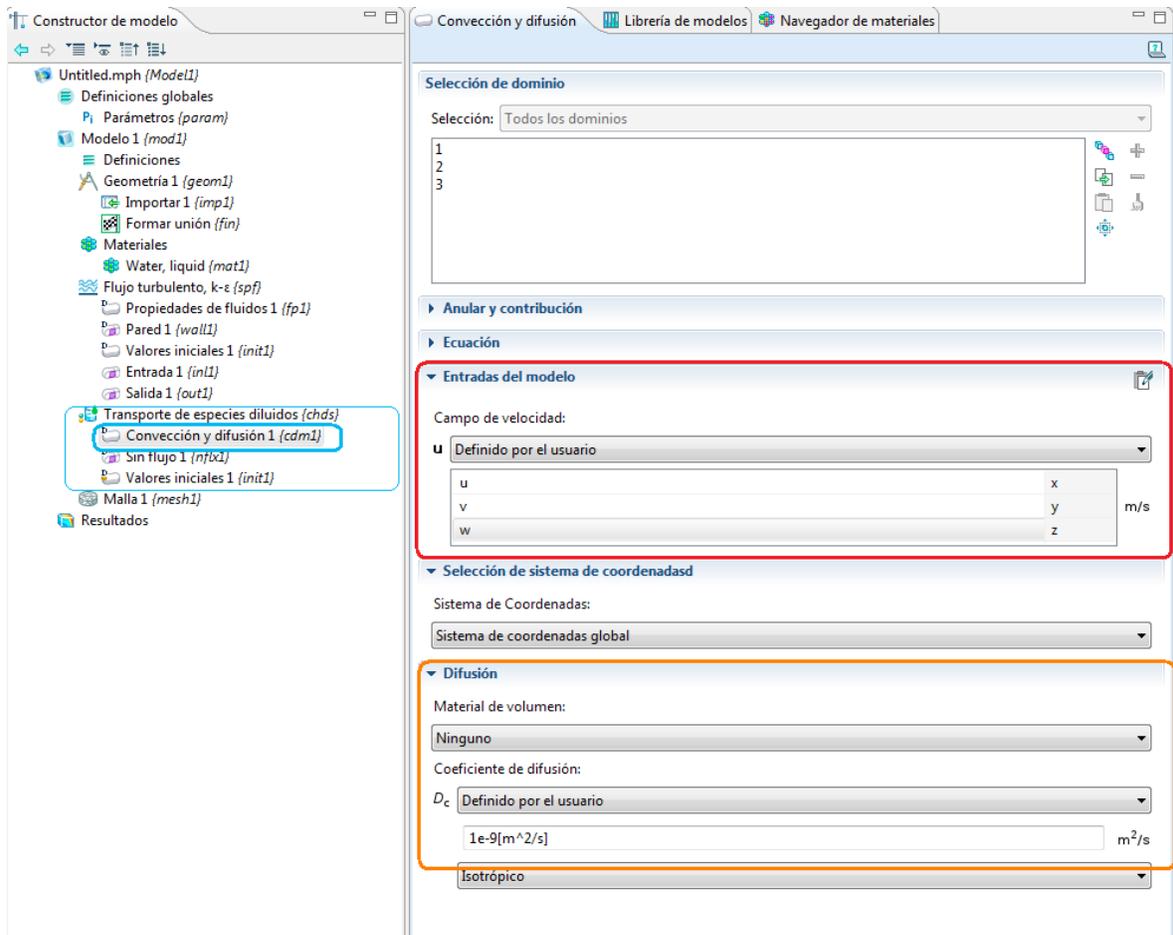


Figura AN.8: Módulo de Transporte de especies para resolver los problemas de transferencia de masa en el reactor FM01-LC a través de Comsol 4.3

Mostrado en la figura AN.8 se definen los pasos seguidos para el transporte de especies diluidas. Comenzando por la parte de convección y difusión 1 (cdm1) (en la imagen marcado por azul) , y se define la velocidad u para la dirección x, v para la y, finalmente w para z. de esta forma se logra ligar el modelo correspondiente a la hidrodinámica con el Transporte de especies diluidas. Se especifico el Coeficiente de difusión (D_c) correspondiente al trazador utilizado por la parte experimental (azul de dextrana) cuyo valor es $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$.

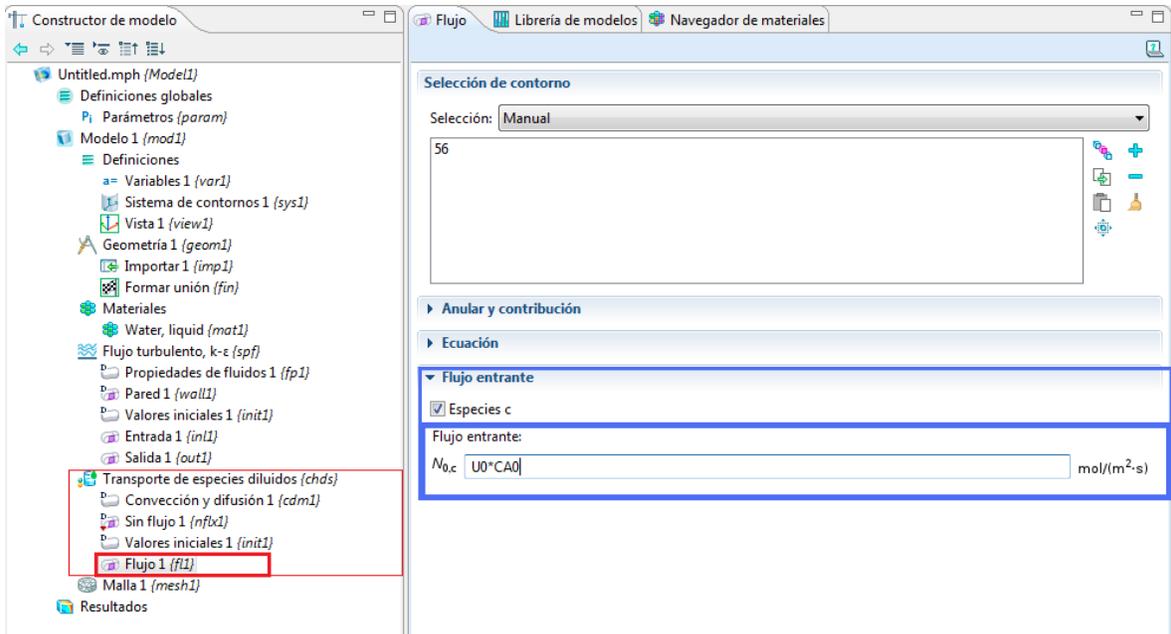


Figura: AN.9 Especifica el flujo de entrada al reactor, Comsol 4.3.

Al igual que en la entrada del modelo de hidrodinámica para el Transporte de especies diluidos se elige la entrada en la geometría. En lugar de ser solamente entrada es un flujo el que va a entrar. El flujo entrante se especifica con la velocidad U_0 , y con una concentración inicial CA_0 la cual se ha especificado como 0.5 mol/L , realmente este valor es aleatorio ya que lo que nos importa es la fracción que pasa por el reactor, además de que al pasar de escalón a pulso importa la diferencia. Además se supone que el trazador es altamente soluble en el agua por lo que no hay ninguna restricción con respecto a la concentración inicial.

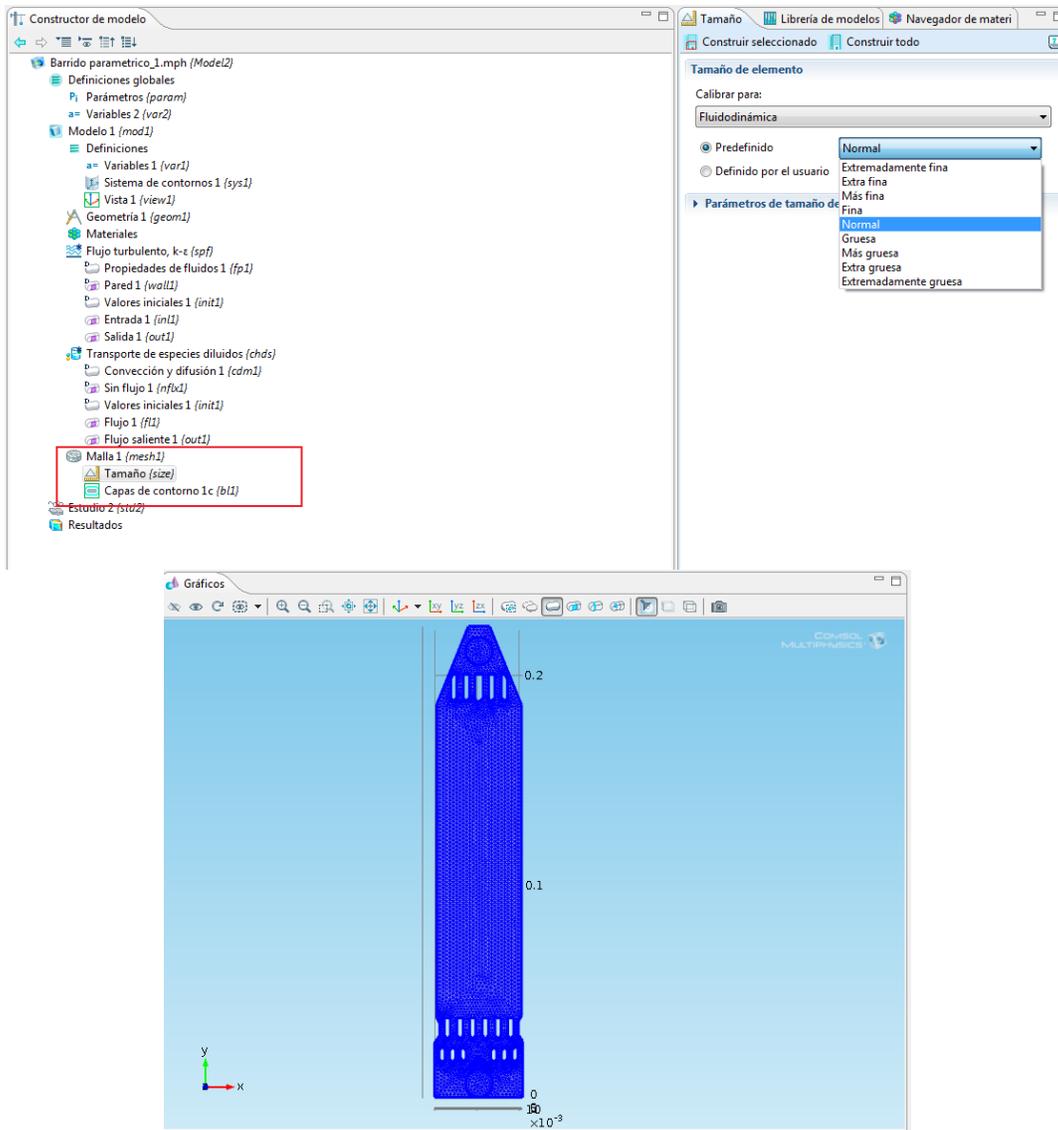


Figura: AN.10 Muestra el mallado, matriz en Comsol 4.3

La selección de la malla es muy importante debido a que definirá el número de iteraciones que se llevarán a cabo, entre más fina sea una malla más exacto será el resultado sin embargo la memoria de cálculo y el tiempo de cálculo serán mayores, para el modelo se utilizó una malla normal con algunas modificaciones en los bordes. La parte que muestra la geometría en azul representa el mallado en el plano xy.

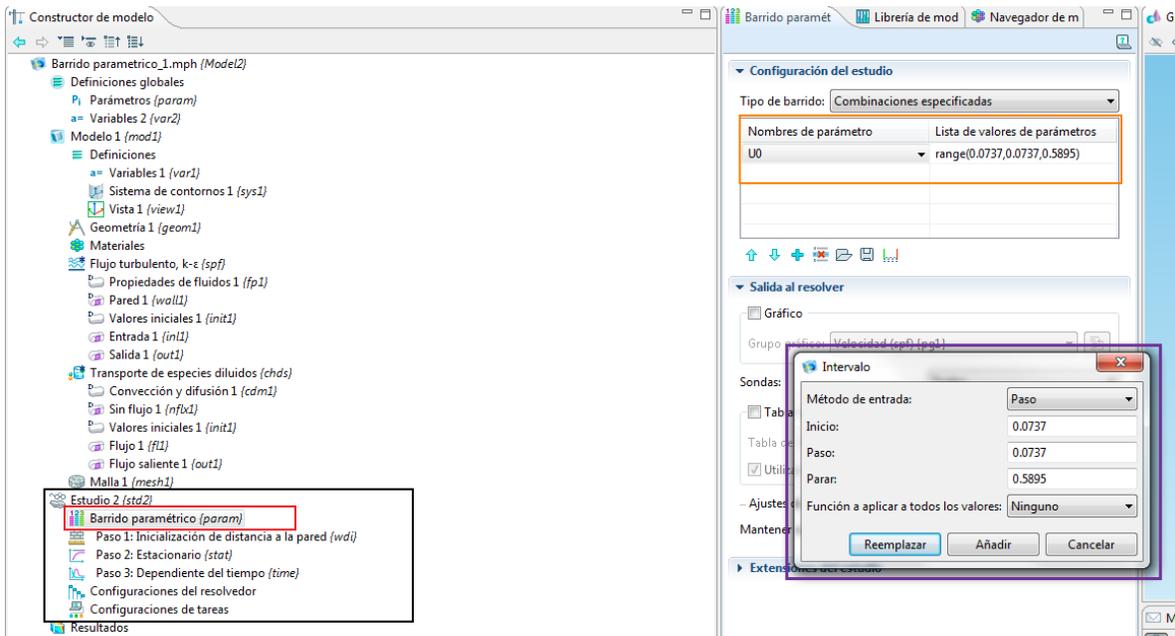


Figura: AN.11 Barrido Paramétrico para Comsol 4.3.

Antes de haber incorporado el Barrido Paramétrico al modelo se probó dicho modelo con el primer flujo de entrada, debido a que en ocasiones el resultado no se obtiene por inconsistencias en el mallado o en el método numérico, una vez modificadas estas partes se añadió el barrido paramétrico. El objetivo del Barrido paramétrico es el de realizar el mismo problema para diferentes valores de un parámetro en el caso del estudio del reactor FM01-LC el parámetro es la velocidad de entrada U_0 cuyo intervalo se encuentra desde 0.0737 m/s a 0.5895 m/s en pasos de 0.0737 m/s, estos valores corresponden a los flujos de entrada de 0.5 LPM a 3.5 LPM en intervalos de 0.5 LPM. Cabe mencionar que Comsol no realiza paralelismo, es decir que simultáneamente resuelva el modelo para todas las velocidades al mismo tiempo. El Barrido Paramétrico terminó el modelo para una velocidad finalizado el modelo con la primer velocidad paso a resolver el modelo

con la segunda velocidad así hasta finalizar por completo con todas las velocidades. Se trató de realizar el estudio la Aitzaloa la cual es la supercomputadora de la Universidad Autónoma Metropolitana (UAM) sin embargo los resultados al no existir el paralelismo los tiempos obtenidos en la maquina Alíen eran muy similares inclusive se tenían tiempos más grandes, además de que presenta el problema del uso del lenguaje de computo y de que los resultados se tiene que ver en otra máquina, de este modo que se desechó por completo el uso de la supercomputadora.

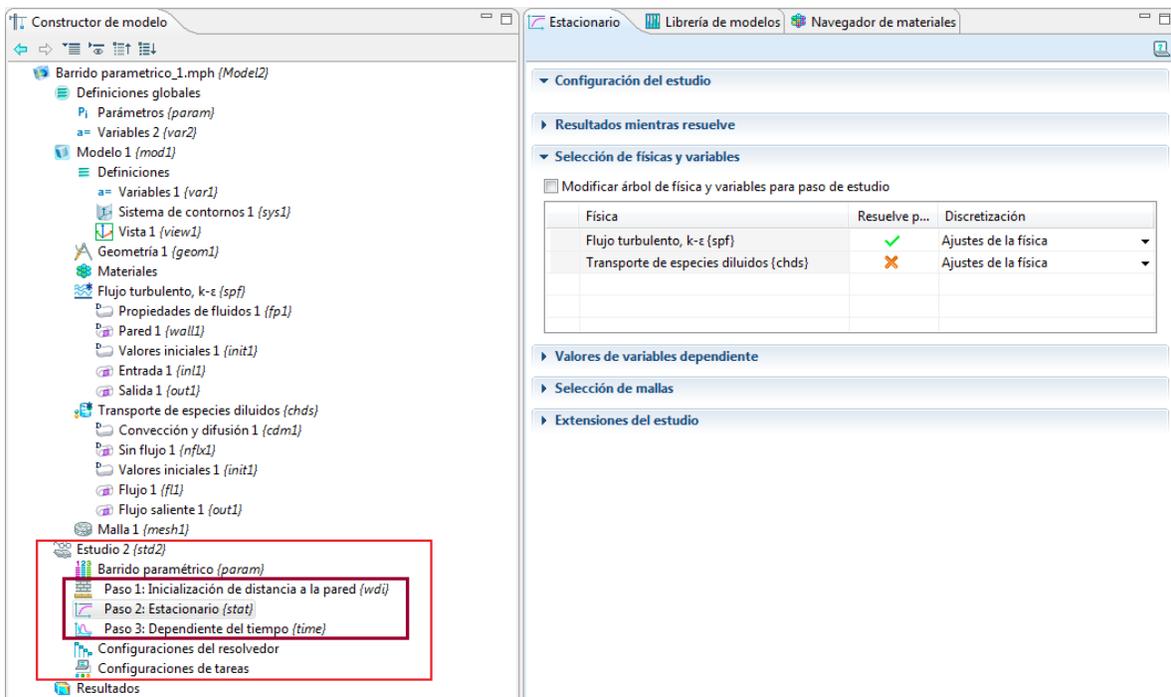


Figura: AN.12 Pasos del estudio para resolver la hidrodinámica y transferencia de masa para el reactor FM01-LC en Comsol 4.3.

Después del Barrido Paramétrico, lo siguiente es elegir los “Pasos” apropiados para resolver la física. El Paso 1: Inicialización de distancia a la pared (wdi) resuelve

el modelo hidrodinámico para la cercanía en la pared, es en donde el modelo de “Flujo Turbulento, Re bajo $k-\varepsilon$ ” considera al fluido como un fluido de bajo número de Reynolds. Una vez realizado el paso uno, el resultado obtenido en la cercanía con la pared se liga al Paso 2: Estacionario (stat), el Paso 2 resuelve el modelo de “Flujo Turbulento, Re bajo $k-\varepsilon$ ” para el seno del líquido en donde el fluido si es turbulento por la cantidad de estrangulamientos en el distribuidor del reactor FM01-LC. Los Pasos 1 y 2 no tienen dependencia con respecto al tiempo, debido a que se considera que la cantidad de trazador inyectada es muy pequeña y no modifica la hidrodinámica. El último paso que se resolvió fue el Paso 3: Dependiente del tiempo (time), como lo dice en su nombre depende del tiempo y resuelve el modelo correspondiente a la transferencia de masa (Transporte de especies diluidas) en donde liga la velocidad del fluido (u) resuelta en los dos pasos anteriores. Recordando que los tres pasos los realizó Comsol para todas las velocidades señaladas en el Barrido paramétrico. Los resultados se obtuvieron en 3 días con 11 horas, con un valor máximo de memoria RAM requerida de 8.5 GB.

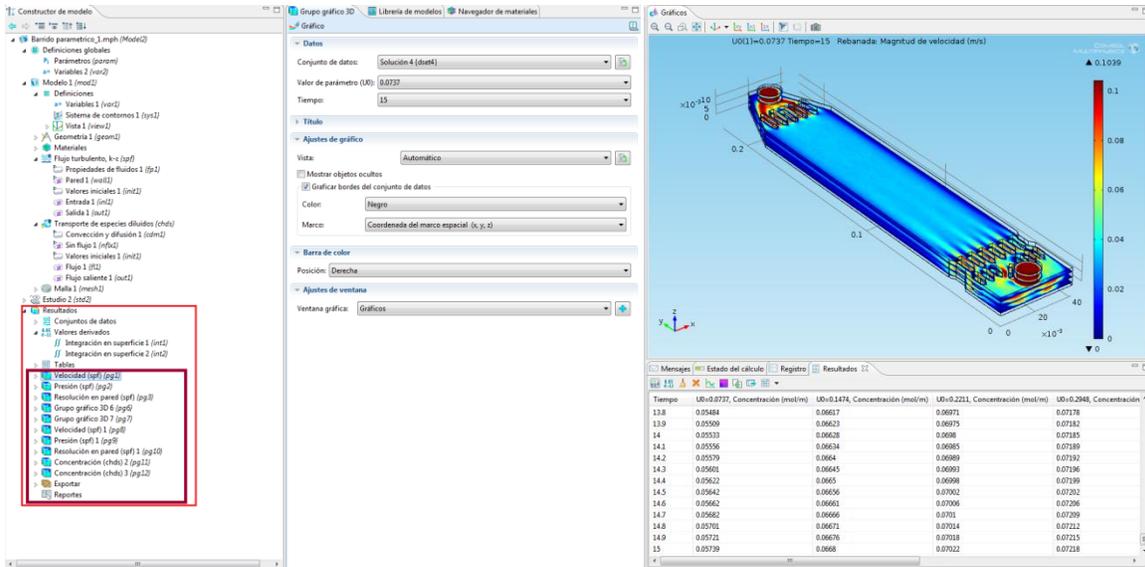


Figura: AN.13 Se muestra el abanico de resultados para visualizar en la interfaz grafica de Comsol 4.3, en la imagen se visualizan los resultados para la velocidad del fluido con una velocidad de entrada de 0.737 m/s y un tiempo de 15 segundos.

Una vez calculado el resultado de todas las velocidades, las opciones para visualizar los resultados a través de Comsol son muy bastas. Los gráficos en tercera dimensión proporcionan un análisis cualitativo y cuantitativo de los resultados tanto de la hidrodinámica como de la transferencia de masa en cualquier tiempo, y con vista desde cualquier ángulo.