



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

**MODELADO DE UNA REACCIÓN EXOTÉRMICA EN TANQUE
AGITADO APLICANDO DINÁMICA COMPUTACIONAL DE
FLUIDOS PARA LA DETECCIÓN DE POSIBLES FUGAS
TÉRMICAS.**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR:

PATRICIO GIOVANNY SANTACRUZ SOLIS

Riobamba – Ecuador

2023



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

MODELADO DE UNA REACCIÓN EXOTÉRMICA EN TANQUE
AGITADO APLICANDO DINÁMICA COMPUTACIONAL DE
FLUIDOS PARA LA DETECCIÓN DE POSIBLES FUGAS
TÉRMICAS.

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: PATRICIO GIOVANNY SANTACRUZ SOLIS

DIRECTOR: Ing. Daniel Antonio Chuquin Vasco

Riobamba – Ecuador

2023

© 2023, Patricio Giovanni Santacruz Solis

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho de Autor.

Yo, Patricio Giovanni Santacruz Solis, declaro que el presente trabajo de integración curricular es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de integración curricular; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.




Riobamba, 22 de noviembre de 2023



Patricio Giovanni Santacruz Solis
180399418-3

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular; Tipo: Proyecto Técnico, **MODELADO DE UNA REACCIÓN EXOTÉRMICA EN TANQUE AGITADO APLICANDO DINÁMICA COMPUTACIONAL DE FLUIDOS PARA LA DETECCIÓN DE POSIBLES FUGAS TÉRMICAS**, realizado por el señor: **PATRICIO GIOVANNY SANTACRUZ SOLIS**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Daniel Antonio Chuquin Vasco PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	 _____	2023-11-22
Ing. Dario Fernando Guamán Lozada DIRECTOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR	 _____	2023-11-22
Ing. Cesar Arturo Puente Guijarro ASESOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR	 _____	2023-11-22

DEDICATORIA

El presente Trabajo de Integración curricular va para mis padres Silvia Solis y Patricio Santacruz que han sido mi apoyo incondicional durante toda mi vida con su cariño y esfuerzo para ser la persona que soy y les agradezco por todo lo que me han ayudado a conseguir en mi vida, a mi hermana Ximena que amo con todo mi corazón, a mis tíos Carmita, Giovanni y Benjamín por ser los segundos padres que siempre me han apoyado y me han querido como si fuese su hijo, a mis primos Benjamín, Cristina y Santiago que son parte fundamental de mi vida y los adoro con todo mi corazón, y por ultimo a Karla que amo con mi vida que ha sido mi motivación y fuerzas para poder afrontar los momentos difíciles, este trabajo es para ustedes, muchas gracias por ser parte de mi vida los amo.

Patricio

ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	vii
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	viii
ÍNDICE DE ANEXOS	ix
RESUMEN.....	x
SUMMARY	xi
INTRODUCCIÓN	1

CAPÍTULO I

1. DIAGNOSTICO DEL PROBLEMA.....	2
1.1. Antecedentes	2
1.2. Planteamiento del problema.....	2
1.3. Justificación	3
1.4. Objetivos	4
1.4.1. <i>Objetivo general</i>	4
1.4.2. <i>Objetivos específicos</i>	4

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO	5
2.1. Antecedentes investigativos	5
2.2. Referencias teóricas	6
2.2.1. Esterificación	6
2.2.1.1. <i>Estrificación no catalítica</i>	7
2.2.2. Reacción Exotérmica	7
2.2.3. 2-butanol	7
2.2.4. Anhídrido propanoico.....	8
2.2.5. Ácido sulfúrico.....	9
2.2.6. Catalizador	10
2.2.7. Reactor de tanque agitado.....	11
2.2.8. Fuga térmica.....	11
2.2.9. Modelado aplicando CFD.....	12
2.2.10. Simulación de procesos industriales	12

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO.....	14
3.1. Localización del proyecto	14
3.2. Ingeniería del del proyecto	15
3.2.1. Proceso estudiado	15
3.2.2. Software de modelado CFD.....	15
3.2.3. Metodología	16
3.3. Técnicas.....	18
3.4. Revisión bibliográfica	18
3.5. Variables del diseño	18
3.5.1. Dimensiones del reactor de tanque agitado	18
3.5.2. Propiedades de los reactivos y de reacción	19
3.5.3. Modelado 1d	21
3.5.4. Modelado 2D.....	23
3.5.5. Modelado 3D.....	26
3.6. Validación de los modelados	27

CAPÍTULO IV

4. RESULTADOS.....	28
4.1. Resultados del modelado 1D	28
4.2. Resultados del modelado 2D	32
4.3. Resultados del modelado 3D	35
4.4. Análisis e interpretación de resultados	36

CONCLUSIONES.....	38
--------------------------	-----------

RECOMENDACIONES.....	40
-----------------------------	-----------

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2: Propiedades físico-químicas del 2-butanol	7
Tabla 2-2: Propiedades físico-químicas del anhídrido propanoico	8
Tabla 3-2: Propiedades físico-químicas del ácido sulfúrico	10
Tabla 4-3: Datos de localización y coordenadas geográficas de la ESPOCH	14
Tabla 5-3: Dimensiones del reactor de tanque agitado	19
Tabla 6-3: Valores de propiedades físico-químicas del 2-butanol	20
Tabla 7-3: Valores de propiedades físico-químicas del anhídrido propanoico	20

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1-2: Esterificación de un ácido carboxílico y un alcohol	6
Ilustración 2-2: Reactor de tanque agitado continuo	11
Ilustración 3-3: Simulación de reactor de tanque agitado continuo	15
Ilustración 4-3: Cara inferior del tanque agitado en el software CFD.....	21
Ilustración 5-3: Adición de los reactivos con sus respectivos valores de propiedades físico- químicas	22
Ilustración 6-3: Aplicación del acero inoxidable como material del tanque agitado	22
Ilustración 7-3: Incorporación los fenómenos físicos y químicos.....	23
Ilustración 8-3: Construcción de la cara lateral del tanque agitado.....	24
Ilustración 9-3: Adición de los reactivos en el modelado 2D	24
Ilustración 10-3: Incorporación los fenómenos físicos y químicos en el modelado 2D.....	25
Ilustración 11-3: Incorporación del comando mesh	26
Ilustración 12-3: Selección del comando “3D plot group”	26
Ilustración 13-4: Resultados de velocidad del modelado 1D	29
Ilustración 14-4: Resultados de presión del modelado 1D.....	30
Ilustración 15-4: Resultados de temperatura del modelado 1D.....	31
Ilustración 16-4: Gráfico de tiempo vs temperatura del modelado 1D	32
Ilustración 17-4: Resultados de velocidad del modelado 2D	32
Ilustración 18-4: Resultados de presión del modelado 2D	33
Ilustración 19-4: Resultados de temperatura del modelado 2D.....	34
Ilustración 20-4: Gráfico de tiempo vs temperatura del modelado 2D.	34
Ilustración 21-4: Modelado 3D del tanque agitado.	35
Ilustración 22-4: Gráfico de tiempo vs temperatura del modelado 3D.	36
Ilustración 23-4: Gráfico comparativo de tiempo vs temperatura de los resultados de los 3 modelados (1D, 2D, 3D).....	37
Ilustración 24-4: Gráfico comparativo de tiempo vs temperatura de los resultados experimentales y de los 3 modelados de Rudniak et al. 2004.....	37

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A: CÁLCULOS DE VISCOCIDAD DINÁMICA DEL 2-BUTANOL

ANEXO B: CÁLCULOS DE VISCOCIDAD DINÁMICA DEL ANHÍDRIDO PROPANOICO

ANEXO C: INTERFAZ DEL SOFTWARE CFD

ANEXO D: ADICIÓN, EN MODELADO 1D, DEL 2-BUTANOL CON SUS RESPECTIVOS VALORES DE PROPIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS

ANEXO E: INCORPORACIÓN LOS FENÓMENOS FÍSICOS Y QUÍMICOS

ANEXO F: DETERMINACIÓN DE LOS RANGOS DE TIEMPO EN EL MODELADO 1D

ANEXO G: DEFINICIÓN DE LOS LIMITES DEL SISTEMA EN EL MODELADO 2D

ANEXO H: MODELADO 3D PREVIO A LA INCORPORACION DEL FENÓMENO DE TRANSFERENCIA DE CALOR

ANEXO I: MODELADO 3D

ANEXO J: MODELADO 3D VISTA TRASERA

RESUMEN

El presente trabajo de Integración Curricular tuvo como objetivo el desarrollo de un modelado, utilizando un software CFD, de una reacción exotérmica en tanque agitado aplicando dinámica computacional de fluidos para la detección de posibles fugas térmicas, debido a que su presencia podría conducir potencialmente a accidentes dentro del reactor. Se realizó un análisis de las variables y parámetros de la esterificación del 2 butanol con anhídrido propanoico para determinar los criterios y las operaciones necesarias para la simulación de la reacción. Además, se desarrolló 3 tipos de modelados de la misma reacción en 3 diferentes dimensiones: 1D, 2D y 3D. Mediante referencias bibliográficas de alto impacto, se comprobó y validó la simulación con los resultados obtenidos muy similares de las variables de temperatura y tiempo siendo éste último en el que ocurren dichas fugas térmicas. En los modelados 1D y 2D se obtuvieron resultados de fugas térmicas con temperaturas máximas de 130 °C y 127 °C respectivamente, mientras que según Rudniak et al. 2004, para los modelados 0D y 2D las temperaturas máximas de las fugas térmicas fueron 133 °C y 129 °C. Así mismo, en el modelado 3D desarrollado, la temperatura más alta registrada de fugas térmicas es de 113 °C, por otra parte en Rudniak et al. 2004 el pico más alto de temperatura es de 111 °C. Gracias a este proceso de validación, se añadió credibilidad a los resultados, reforzando la precisión de las metodologías de simulación empleadas, también se concluyó que el modelado 3D es la opción más conveniente y realista para un sistema de detección de fugas térmicas debido a que considera todos los factores y parámetros relevantes de los sistemas de tanques agitados del mundo real, debido a que mostró una similitud sustancial con los hallazgos experimentales y el modelo híbrido 2D/3D de Rudniak et al. 2004.

Palabras clave: <SOFTWARE CFD>, <ESTERIFICACIÓN>, <FUGAS TÉRMICAS>, <MODELADO>, <REACTOR>, <MODELO HÍBRIDO>.

2066-DBRA-UPT-2023



SUMMARY

The present Curricular Integration work dealt with the development of a modeling, using CFD software, of an exothermic reaction in a stirred tank applying computational fluid dynamics for the detection of possible thermal leaks, because their presence could potentially lead to accidents inside the reactor. An analysis of the variables and parameters of the esterification of 2-butanol with propane anhydride was carried out to determine the criteria and operations necessary for the simulation of the reaction. In addition, 3 types of modeling of the same reaction were developed in 3 different dimensions: 1D, 2D and 3D. By means of high impact bibliographic references, the simulation was checked and validated with very similar results obtained for the temperature and time variables, the latter being the one in which these thermal leaks occur. In the 1D and 2D modeling, thermal leakage results were obtained with maximum temperatures of 130 °C and 127 °C respectively, while according to Rudniak et al. 2004, for the 0D and 2D modeling the maximum temperatures of thermal leakage were 133 °C and 129 °C. Likewise, in the developed 3D modeling, the highest recorded thermal leakage temperature is 113 °C, on the other hand in Rudniak et al. 2004 the highest peak temperature is 111 °C. Thanks to this validation process, credibility was added to the results, reinforcing the accuracy of the simulation methodologies employed, it was also concluded that 3D modeling is the most convenient and realistic option for a thermal leak detection system because it considers all relevant factors and parameters of real world agitated tank systems, due to the fact that it showed substantial similarity with the experimental findings and the hybrid 2D/3D model of Rudniak et al. 2004.

Keywords: <CFD SOFTWARE>, <ESTERIFICATION>, <THERMAL FUGES>, <MODELING>, <REACTOR>, <HYBRID MODEL>.



Abg. Ana Gabriela Reinoso. Mgs.

Ced: 1103696132

INTRODUCCIÓN

En el campo de la industria de procesos químicos en donde se emplea reactores químicos existen diversos riesgos que deben ser tomados en cuenta para certificar el correcto procedimiento del proceso así como la seguridad de todo el personal de la planta. Kidam et al. 2013 establece que uno de los riesgos más frecuentes que plantea importantes riesgos de seguridad en reactores químicos es la existencia de fugas térmicas, las cuales podrían conducir potencialmente a accidentes dentro del reactor.

Una fuga térmica ocurre cuando la tasa de generación de calor de una reacción exotérmica supera la tasa de eliminación de calor a través de los mecanismos de enfriamiento que posea el reactor, lo que lleva a que la reacción no pueda ser controlada para garantizar la realización de un proceso seguro, por lo que si no se controla inmediatamente este incremento descontrolado de la temperatura, se podría tener consecuencias catastróficas como incendios o explosiones en el reactor. Por ende, tener sistemas óptimos y eficaces de detección de alerta temprana son indispensables para prevenir y mitigar incidentes de fugas térmicas (Kummer et al. 2020).

Una herramienta eficaz para determinar la posible existencia de fugas térmicas es realizar un modelado aplicando dinámica de fluidos computacional (CFD). Los modelados CFD permiten determinar valores locales e instantáneos de la velocidad del líquido, las concentraciones de los reactivos y la temperatura del reactor. Particularmente en el campo de la industria química el modelado CFD permite mejorar la seguridad y la eficiencia de las operaciones de los reactores químicos, así como predicciones más eficaces y precisas de fugas térmicas.

La prevención de fugas térmicas es crucial, ya que garantiza la maximización de la productividad operativa del proceso y, al mismo tiempo, mantiene niveles de seguridad óptimos para la planta y sus operadores durante los procesos químicos (Jiang et al. 2018).

Obtener varios modelos de simulación reactores de tanque agitado utilizando un software para modelado CFD, para así comprender su comportamiento dinámico gracias a que los modelados CFD pueden ayudar a identificar puntos críticos o no uniformidades de temperatura, basándose en los datos obtenidos de las simulaciones, incluidas las distribuciones de velocidad local, los perfiles de temperatura y presión, y las concentraciones, mejorando así los sistemas de detección de alerta temprana para fugas térmicas.

En el futuro, los diversos modelos desarrollados podrían servir como base para el modelado de reactores industriales en los que se produzcan reacciones exotérmicas.

CAPÍTULO I

1. DIAGNOSTICO DEL PROBLEMA

1.1. Antecedentes

Los procesos químicos a nivel industrial han venido cambiando de manera muy rápida con el pasar de los años principalmente con la aparición de nuevas tecnologías que permiten desarrollar más complejos, eficientes y rápidos procesos para la obtención de diversos productos que ayudan al desarrollo de los países y sus sociedades. Si bien el desarrollo de nuevos procesos trae consigo diversos beneficios, también presenta nuevos retos para garantizar ambientes de trabajos seguros, prediciendo posibles escenarios y como enfrentarse a ellos (Shen et al. 2020).

La dinámica de fluidos computacional es una herramienta que ha crecido su campo de aplicación en el área de procesos químicos porque emplea métodos matemáticos para resolver problemas que contienen ecuaciones no lineales acopladas, las cuales son la base de la dinámica de fluidos. De manera analítica, resolver estas ecuaciones no es posible debido a que encontrar soluciones para dichas ecuaciones es necesario tomar en cuenta de manera simultánea el impulso, en sus tres direcciones coordinadas, la conservación de masa y energía, y las ecuaciones de la reacción. Esto ocasiona que encontrar una solución sea ineficiente, tardía y sobre todo costosa (Bhattacharyya et al. 2021).

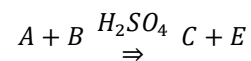
Según Bhattacharyya et al. 2021 los primeros reportes de aplicación de CFD para simulaciones, data de la década de los 40' cuando las primeras computadoras digitales fueron desarrolladas siendo la computadora digital programable ENIAC una de las primeras. En el año de 1986, el profesor D.B. Spalding dio una conferencia sobre CFD en el Rensselaer Polytechnic Institute Sadowsky Series de la ciudad de Nueva York en Estados Unidos, en donde describía los requerimientos mínimos de software y hardware para desarrollar modelados complejos que puedan resolver los sistemas de ecuaciones acopladas y encontrar soluciones a los problemas, y esto hoy en día se considera como la base de la Dinámica de Fluidos Computacional (Khalil 2012).

1.2. Planteamiento del problema

En un sistema compuesto por un reactor en donde se produce una reacción exotérmica, existen sistemas de control de temperaturas en diferentes puntos del mismo, que detectan cuando la tasa de generación de calor sobrepasa la capacidad de eliminación de calor por el sistema de enfriamiento, lo que puede resultar en la pérdida del control de temperatura del sistema y por consiguiente en fugas térmicas (Rudniak et al. 2004).

Según (Kidam y Hurme 2013), una fuga térmica en un reactor ocurre debido a problemas de transferencia de calor cuando la velocidad de reacción incrementa de manera descontrolada lo cual incrementa la temperatura de la misma entrando en un ciclo. Si no se toman medidas para mitigar el incremento descontrolado de temperatura y velocidad de reacción, podría resultar en una explosión del reactor.

Para la investigación del proyecto de titulación se ha elegido la esterificación del 2 butanol con ácido sulfúrico que actúa como catalizador para analizar en el reactor, por que como establece Rohman, 2015, esta es una reacción exotérmicamente fuerte y posee una alta sensibilidad a la temperatura del líquido refrigerante además de que presenta una ausencia de reacciones de descomposición peligrosas. Khan et al. 2021, establece que la esterificación es una reacción de síntesis orgánico que convierte el 2-butanol con anhídrido propanoico en butanona (por sus siglas en inglés, MEK: methyl ethyl ketone), el cual es un disolvente industrial utilizado para la producción de agentes de limpieza, pintura o gomas. La ecuación estequiométrica general de la reacción antes mencionada según Rudniak et al. 2004 es la siguiente ecuación:



El presente proyecto de titulación plantea el modelado de un reactor en base a una serie de simulaciones diferentes, establecido mediante la aplicación de Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD) en un software CFD para determinar los puntos específicos en donde colocar los sensores de medición de temperatura en el reactor. El software CFD ofrece un completo e integrado entorno para modelado y simulación de hidrodinámicas del flujo de un fluido en modelos de procesos químicos, así como una gran variedad de módulos útiles para la aplicación de simulación de reacciones químicas. Con el software antes mencionado y mediante la aplicación de CFD en la simulación se podrá determinar principalmente los parámetros de las velocidades de los líquidos, concentraciones, los puntos de temperaturas altas en el reactor, etc.

1.3. Justificación

El control de prevención de fugas térmicas en un reactor es necesario para maximizar la productividad de la reacción y mantener niveles de seguridad óptimos para la planta o laboratorio, y todos sus operarios.

Jiang et al. 2018, establece que una vez que existan fallas en el sistema de transferencia de calor, es muy probable que la tasa exotérmica de la reacción supere la tasa de enfriamiento del sistema, lo cual provocará un aumento de la temperatura y acelerará la reacción, lo que por consiguiente puede inducir en incendios o explosiones del mismo reactor.

Se ha elegido trabajar aplicando Dinámica de Fluido Computacional para la resolución del problema planteado en el presente proyecto de titulación en base a que Harris et al. 1996, indica que la CFD implica la solución numérica de las ecuaciones de conservación de la masa, el impulso y la energía en una geometría de flujo de interés, junto con conjuntos adicionales de ecuaciones que reflejan el problema planteado.

Una de las principales áreas de aplicación que se busca con este modelado CFD es proporcionar una predicción precisa sobre el rendimiento y la seguridad de reactores industriales. El modelado CFD puede servir como base para el análisis de reactores a niveles de laboratorio e industrial, esto es gracias a que como establece Golshan et al. 2020, la aplicación de modelos CFD para indicar puntos de calor o no uniformidades de temperatura dentro de los reactores industriales, puede posteriormente ayudar a mejorar los criterios de seguridad y eficiencia de los sistemas de detección de alerta temprana de puntos calientes o fugas térmicas.

La elección de un software CFD para el desarrollo del proyecto se basó en que un software CFD es uno de los programas más utilizados a nivel académico e industrial para simulación de procesos químicos debido a que posee una interfaz de usuario fácil de controlar y manejar, además de que también tiene una gran versatilidad en el campo de simulaciones de procesos químicos, sobre todo en el área de modelado de dinámicas de fluidos.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo general

Desarrollar un modelado de una reacción exotérmica en tanque agitado aplicando dinámica computacional de fluidos para la detección de posibles fugas térmicas.

1.4.2. Objetivos específicos

- Identificar las diferentes variables, parámetros y las operaciones necesarias para la simulación del proceso.
- Determinar los puntos en donde es posible la generación de fugas térmicas dentro del reactor durante la esterificación del 2 butanol con anhídrido propanoico.
- Validar la simulación de la esterificación del 2-butanol con anhídrido propanoico mediante referencias bibliográficas de alto impacto.
- Analizar el perfil de temperatura y presión del reactor que ayudara a la aplicación del modelado CFD.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1.1. Antecedentes investigativos

En el artículo desarrollado por Rudniak et al. 2004, realizaron simulaciones aplicando Dinámica de Fluidos Computacional para predecir la formación de fugas térmicas en un tanque reactor Batch durante una reacción exotérmica. Se aplicó un modelado de CFD para determinar los valores de velocidad del fluido, temperatura y concentraciones de los reactivos dentro del reactor considerando la problemática de la falta de uniformidad de la mezcla, siendo un factor que contribuye a no poseer la misma temperatura en todo el reactor y, por ende, la formación de fugas térmicas en determinadas zonas del reactor. Para validar los datos obtenidos del modelado, Rudniak et al. 2004 compararon con los resultados obtenidos experimentalmente de un calorímetro en un reactor Mettler-Toledo RC1 a escala.

Rudniak et al. 2004, en su modelado CFD utilizó la reacción de esterificación del 2-butanol con anhídrido propanoico y ácido sulfúrico como catalizar, la cual como establece Milewska et al. 2005, es una reacción homogénea y exotérmicamente fuerte y sensibilidad a la temperatura del líquido refrigerante.

La pérdida de control de temperatura en reactores químicos, es decir, fugas térmicas, puede ocurrir por reacciones exotérmicas, cuando por alguna razón la tasa de generación de calor por productos químicos de la reacción excede la tasa de eliminación de calor por el sistema de enfriamiento. Esta diferencia entra la generación de calor y la tasa de enfriamiento del reactor, puede provocar un aumento de la velocidad de reacción y por ende la velocidad de generación de calor, entrando en un ciclo de auto aceleración, en donde la temperatura de la reacción puede alcanzar un valor tan alto que puede terminar en un accidente grave o incluso una explosión del reactor.

La dinámica de fluidos computacional no solo se aplica para tanques reactores, también para tanques de almacenamiento, y Rudniak et al. 2011 desarrolló simulaciones para varios escenarios de fuga térmica, en donde se determinaron las distribuciones espaciales de la velocidad del líquido, la temperatura y la concentración de reactivos en función del tiempo en reactores de almacenamiento de compuestos químicos sensibles que pueden presentar una pérdida de control de la temperatura y por consecuente una fuga térmica puede ocurrir. El conocimiento de la falta de uniformidad de la temperatura dentro del reactor y los tanques de almacenamiento es crucial para la ubicación adecuada de los sensores de temperatura, lo que asegura una detección de fuga térmica tan pronto como sea posible. Los resultados obtenidos por Rudniak et al. 2011, demostraron que los modelos CFD pueden ser muy útiles para elaborar métodos eficientes y robustos para Alerta temprana en línea de fugitivo.

Jiang et al. 2018, realizó la investigación basándose en un análisis preliminar de peligros para determinar la condición de operación comparativamente segura en la fase de diseño. En la investigación se realizó una serie de escenarios de fugas térmicas en un reactor batch en donde se lleva a cabo la esterificación de propionato de isopropilo. El modelo del reactor fue establecido mediante un modelado de dinámica de fluidos computacional (CFD) que luego fue verificado mediante la prueba RC1e. La ubicación exacta de los sensores de temperatura fue determinada por el criterio de divergencia (DIV), mientras que los rendimientos de mezcla inhibidora se evaluaron mediante un criterio de mezcla global.

En un estudio realizado por Cui et al. 2019, se simuló la polimerización térmica de estireno en un reactor por lotes a escala de laboratorio aplicando dinámica de fluidos computacional (CFD). El modelo hidrodinámico de polimerización térmica de estireno se combinó con el modelo de acoplamiento fluido-sólido de un intercambiador de calor simulado para construir el modelo de reactor correspondiente. Se investigaron los efectos de la velocidad de agitación, la temperatura de enfriamiento y el caudal de enfriamiento en las condiciones desbordadas de la polimerización térmica del estireno. Los resultados que Cui et al. 2019, obtuvieron demostraron que la velocidad de agitación y el caudal de enfriamiento influyeron a gran medida en el aumento de la temperatura durante la reacción, logrando así determinar la distribución de temperatura dentro del reactor y ubicar con precisión el lugar óptimo de un monitor de temperatura empleando el criterio de divergencia (DIV).

2.2. Referencias teóricas

2.2.1. Esterificación

La esterificación es un proceso de reacción química utilizado para la síntesis orgánica, el cual consiste en calentar una mezcla de un ácido carboxílico con un alcohol en presencia de un catalizador para producir un Ester y agua. Este tipo de reacciones se caracteriza por tener una velocidad de reacción demasiado lenta, pero también exotérmicamente alta (Khan et al. 2021).

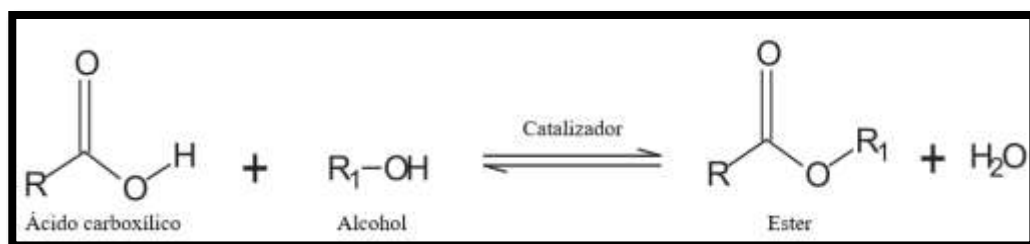


Ilustración 1-2: Esterificación de un ácido carboxílico y un alcohol

Fuente: (Khan et al. 2021)

2.2.1.1. Esterificación térmica no catalítica

Con el pasar de los años, se han desarrollado nuevos métodos de esterificación que no utilizan catalizador para evitar los costos de producción y desecho de los catalizadores. En estos procesos se llevan a cabo a altas temperaturas y presiones para reducir la energía de activación de la reacción y garantizar una mezcla completa de los reactantes y formación altamente eficiente de los productos. Uno de los factores negativos de la esterificación térmica no catalítica es que la ausencia de un catalizador reduce considerablemente la velocidad de reacción (Khan et al. 2021).

2.2.2. Reacción Exotérmica

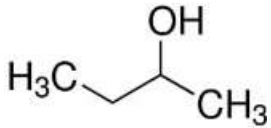
Se denomina como reacción exotérmica a una reacción química en donde se libera calor durante su proceso. En la reacción, los reactivos se convierten en productos, separándose en sus componentes individuales. A medida que se produce esta separación, se rompen los enlaces entre los átomos y se libera la energía contenida en ellos, en forma de calor (Schwolow et al. 2016).


Los reactivos necesitan ganar una cantidad de energía específica de reacción para formar con éxito el complejo activado, el cual es el punto en donde los reactivos se han reorganizado para formar una molécula que se convertirá en el producto o productos de la reacción. La energía global del sistema disminuirá notablemente de los reactivos a los productos (Schwolow et al. 2016).

2.2.3. 2-butanol

El 2-butanol es un alcohol secundario inflamable e incoloro que al ambiente se encuentra en estado líquido, y es miscible en disolventes orgánicos. Su estructura consta de isómeros que son el 1-butanol, isobutanol y el tert-butanol (Liu et al. 2013).

Tabla 1-2: Propiedades físico-químicas del 2-butanol

2-butanol	 <p>The image shows the chemical structure of 2-butanol. It consists of a four-carbon chain. The second carbon from the left is bonded to a hydroxyl group (-OH). The first carbon is bonded to three hydrogen atoms (represented as H₃C), and the fourth carbon is bonded to three hydrogen atoms (represented as CH₃).</p>
------------------	--

Modelo 3D	
Nombre IUPAC	Butan-2-ol
Nombres Alternativos	Sec-butanol 2-butyl alcohol
Fórmula Molecular	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_3$
Masa molar	74.123 g/mol
Densidad	0.808 g/cm ³
Punto de fusión	371 K – 373 K

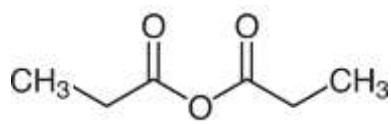
Fuente: (Russmayer et al. 2019)

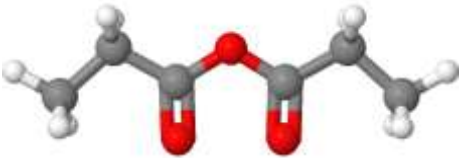
Realizado por: Santacruz, Patricio. 2023

2.2.4. Anhídrido propanoico

Es un ácido anhídrido orgánico que a temperatura y presión ambiente está en fase líquida e incoloro, utilizado principalmente como reactivo en procesos de síntesis orgánica. A nivel industrial existen 3 procesos por los cuales se puede obtener el anhídrido propanoico: deshidratación térmica eliminando el agua por destilación, carbonilación del etileno y la deshidratación del ácido propiónico (Rohman et al. 2019).

Tabla 2-2: Propiedades físico-químicas del anhídrido propanoico

2-butanol	
------------------	--

Modelo 3D	
Nombre IUPAC	Anhídrido propanoico
Nombres Alternativos	Propanoato de propanoilo
Fórmula Molecular	$(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CO})_2\text{O}$
Masa molar	130.14 g/mol
Densidad	1.015 g/cm ³
Punto de fusión	440 K – 443 K

Fuente: (Rizal et al. 2021)

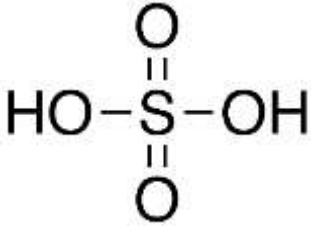
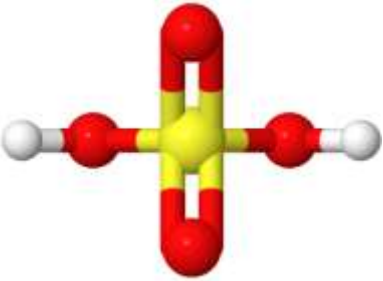
Realizado por: Santacruz, Patricio. 2023

2.2.5. *Ácido sulfúrico*

Es un ácido mineral, incoloro, inodoro y miscible en agua, compuesto por dos moléculas de hidrogeno, una de azufre y cuatro de oxígeno, principalmente utilizado en los procesos de reacciones de esterificación y catálisis como catalizador por su factor de acelerar la misma y forzar el equilibrio de la reacción hacia el lado de los productos resultando en un mayor rendimiento de producción de ésteres. El ácido sulfúrico es una sustancia corrosiva y dañina para la salud humana (Bisht y Ramana 2019).

En Ecuador, el ácido sulfúrico es una sustancia controlada por el CONSEP y su libre distribución y venta a nivel nacional está prohibida.

Tabla 3-2: Propiedades físico-químicas del ácido sulfúrico

2-butanol	
Modelo 3D	
Nombre IUPAC	Ácido sulfúrico
Nombres Alternativos	Aceite de vitriolo Sulfato de hidrógeno
Fórmula Molecular	H ₂ SO ₄
Masa molar	98.079 g/mol
Densidad	1.8302 g/cm ³
Punto de fusión	283.46 K

Fuente: (Bisht y Ramana 2019)

Realizado por: Santacruz, Patricio. 2023

2.2.6. *Catalizador*

Se conoce como catalizador a una sustancia, elemento o molécula que acelera una reacción química o aumenta la temperatura y/o presión para iniciar la misma, sin alterar y ni consumirse en la reacción.

Durante una reacción química, los enlaces entre los átomos en las moléculas se rompen, reorganizan y reconstruyen, recombinando los átomos en nuevas moléculas. Los catalizadores hacen que este proceso sea más eficiente al reducir la energía de activación, que es la barrera energética que debe superarse para que se produzca una reacción química. Como resultado, los catalizadores facilitan que los átomos se rompan y formen enlaces químicos para producir nuevas

combinaciones y nuevas sustancias. El uso de catalizadores conduce a reacciones químicas más rápidas y con mayor eficiencia energética (Marchetti y Errazu 2008).

2.2.7. *Reactor de tanque agitado*

Un reactor de tanque agitado es un modelo de reactor utilizado en el campo de la ingeniería química e ingeniería ambiental, en donde reactivos se transforman en productos por medio de mezcla de agitación continua.

Según Nienow 2014 los CSTR (Continuous Stirred Tank Reactors, en inglés) poseen una capacidad de mezcla efectiva y funcionan en estado estacionario con propiedades uniformes, en donde idealmente, la composición de salida es idéntica a la composición de los compuestos dentro del reactor, que es función del tiempo de residencia y la velocidad de reacción. En situaciones en las que una reacción es demasiado lenta o cuando hay dos líquidos inmiscibles o viscosos que requieren una alta velocidad de agitación, se pueden conectar varios reactores continuos de tanque agitado (CSTR) para formar una cascada.

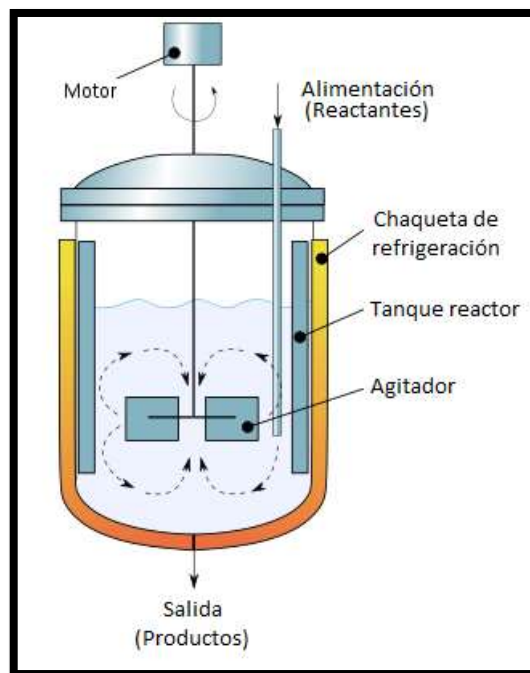


Ilustración 2-2: Reactor de tanque agitado continuo

Fuente: (Bridget Cunningham 2015)

2.2.8. *Fuga térmica*

Se describe como fuga térmica al fenómeno físico de un incremento descontrolado de la tasa de generación de calor de una reacción exotérmica dentro de un tanque reactor, que supera la tasa de

eliminación de calor a través de los mecanismos de enfriamiento que posea el tanque, lo que lleva a que la reacción no pueda ser controlada para garantizar la realización de un proceso seguro y eficiente (Kummer et al. 2020).

2.2.9. Modelado aplicando CFD

La dinámica de fluidos computacional es una herramienta utilizada para la investigación numérica de la dinámica de fluidos en sistemas compuesto de múltiples fases y reacciones, aplicando un modelado del proceso para obtener una predicción precisa de las velocidades de reacción, transferencia de calor y masa, valores de temperatura y presión, concentraciones de los reactantes y productos, y sobre todo los flujos de los compuestos. Kuipers y Van Swaaij 1998, definen a la CFD como un híbrido entre la mecánica y las matemáticas basada en las leyes de conversión de masa, momento y energía.

En el campo de la ingeniería química, CFD se aplica principalmente para la improvisación de la eficiencia térmica en reactores de mezcla, ingeniería de reacciones con énfasis en procesos de flujos monofásicos, en procesos de fundición de metales líquidos, diseño de procesos metalúrgicos y procesos petroquímicos. A pesar de tener gran importancia en el campo de la ingeniería química, CFD es una herramienta interdisciplinaria debido a sus diversas aplicaciones en todos, o la gran mayoría, de campos de la ingeniería donde el análisis del flujo de fluidos y sus fenómenos asociados son de gran importancia.

Zhong et al. 2016, describe las diferentes áreas en donde se puede aplicar la dinámica de fluidos, como por ejemplo:

- En la industria automotriz se aplica en el estudio del flujo interno y externo en motores de combustión
- En ingeniería civil, se ha encontrado aplicación en el estudio de problemas relacionados con el flujo dinámico de ríos, lagos y estuarios y corrientes de aire externas alrededor de los edificios.
- En ingeniería ambiental, se utiliza en el análisis de los patrones de flujo complejos que existen en varios tipos de hornos para optimizar el rendimiento del horno, es decir, mejorar la eficiencia térmica y reducción de emisión de contaminantes.

2.2.10. Simulación de procesos industriales

El modelado y simulación de procesos industriales con el pasar de los años se han convertido en los principales métodos tecnológicos para entender y mejorar la eficiencia y seguridad de los procesos a nivel industrial (Do Rosário et al. 2015).

La aplicación de métodos de simulación tiene beneficios significativos como los que describe Do Rosário et al. 2015, a continuación:

- Reducción del costo de capital por un mejor diseño.
- Reducción de tiempos de diseño y puesta en marcha.
- Mejora de la productividad y la eficiencia mediante la optimización de materiales y energía.
- Mayor entendimiento del proceso y confianza en las decisiones a tomar.
- Extensión de la vida útil del equipo.
- Mejora de la seguridad y la gestión ambiental.

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO

3.1. Localización del proyecto

El presente proyecto técnico fue realizado en la Provincia de Chimborazo, en la ciudad de Riobamba, en la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Escuela de Ingeniería Química de la facultad de Ciencias.

Tabla 4-3: Datos de localización y coordenadas geográficas de la ESPOCH

Límites de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo	Norte: Limita con el Barrio 24 de mayo y la Av. Canónigo Ramos.
	Sur: Limita con la Av. Pedro Vicente Maldonado y el Barrio de los Maestros.
	Este: Limita con la Av. 11 de noviembre.
	Oeste: Limita con la Av. Bypass.
Rango Altitudinal	Está ubicada a 2754 m.s.n.m (metros sobre el nivel del mar)
Localizaciones coordenadas UTM	17M 758393.95 m UTM 9817026.05 m S
Localizaciones coordenadas geográficas	78°40'39.24" de longitud occidental y a 1°39'14.58" de latitud sur
Clima	Temperatura promedio de 15° C

Fuente: Google Maps 2023

Realizado por: Santacruz, Patricio. 2023

3.2. Ingeniería del del proyecto

3.2.1. Proceso estudiado

El presente proyecto de titulación de carácter de técnico tiene como enfoque primordial el desarrollar un modelado de un tanque agitado, en donde se lleva a cabo la reacción de esterificación del 2-butanol con el anhídrido propanoico utilizando ácido sulfúrico como catalizador, aplicando Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), para predecir las zonas específicas del tanque reactor en donde se podría formas posibles fugas térmicas utilizando un software de modelado CFD.

3.2.2. Software de modelado CFD

Un software de simulación es una herramienta computacional diseñada para aplicaciones en el campo de ingeniería, que imita los efectos presentes en la realidad. Para lograr simulaciones y modelos reales, el software de modelado CFD se basa en múltiples modelos científicos que incluyen reacciones químicas, transferencia de calor y masa, campos electromagnéticos, estructuras mecánicas, flujos de fluidos.

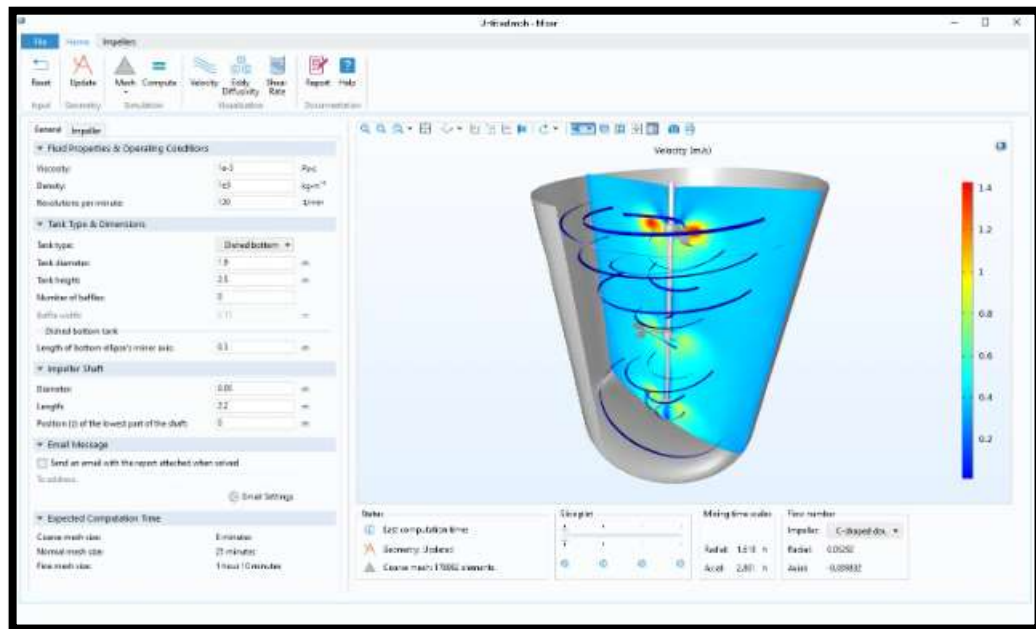


Ilustración 3-3: Simulación de reactor de tanque agitado continuo

Fuente: (Comsol Multiphysics 2023)

3.2.3. Metodología

Para cumplir los objetivos planteados del presente proyecto técnico, se aplicaron los métodos de investigación deductivo, inductivo y experimental. Basándose en artículos científicos de alto impacto, se determinó todos los parámetros de dimensionamiento para el diseño del tanque agitado, así como las variables de los reactivos necesarios para la reacción de esterificación entre el 2-butanol y el anhídrido propanoico.

3.2.3.1. Métodos

El presente trabajo de integración curricular se basa en los enfoques teóricos y experimentales para el desarrollo de un modelado válido que determine la posible existencia de fugas térmicas en un tanque agitado. Se realizó 3 modelados en diferentes dimensiones: 1D, 2D y 3D, con la finalidad de obtener diferentes perspectivas y/o resultados dependiendo como actúen los reactivos en estado líquido según las dimensiones planteadas. Los modelados fueron construidos en un software de simulación CFD que nos permiten simular múltiples fenómenos físicos y químicos necesarios para la realización de este trabajo de integración curricular siendo los más importantes la dinámica de fluidos y la transferencia de calor.

- Método deductivo

Para el desarrollo del modelado del tanque reactor agitado aplicando dinámica de fluidos computacional, el método deductivo inicia por la revisión bibliográfica de artículos científicos de alto impacto para luego en base a la experimentación de la reacción química en el software CFD analizar las diferentes variables y parámetros que mejor ayuden al diseño de los modelados en las 3 diferentes dimensiones (1D, 2D y 3D) y obtener resultados reales y precisos.

- Método inductivo

Para el diseño y desarrollo del modelado CFD de un tanque agitado se plantea un método inductivo, el cual busca adaptar los diferentes parámetros de diseño y modelado presentados en los artículos científicos, lo que nos permitirá, en base a la obtención de resultados y posterior validación de los mismos, elegir el mejor modelado CFD posible para la determinación de las fugas térmicas en el reactor de tanque agitado.

- Método experimental

Mediante la aplicación de la metodología experimental en este proyecto permite obtener datos reales, basándose en artículos científicos para la validación de estos datos obtenidos en el modelado del tanque reactor agitado aplicando dinámica de fluidos computacional. Analizando los resultados obtenidos, principalmente de temperatura, en la parte experimental se puede determinar los diferentes puntos de fugas térmicas que se pueden formar en el reactor agitado durante el proceso de esterificación del 2-butanol con el anhídrido propanoico.

3.2.3.2. Esquema metodológico

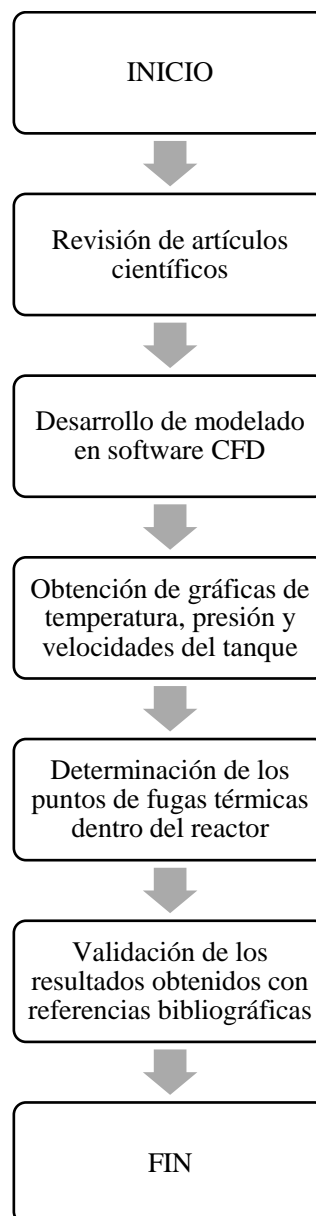


Ilustración 4-3: Esquema metodológico para el diseño de modelado CFD

Realizado por: Santacruz, Patricio. 2023

3.3. Técnicas

Para el diseño de modelado CFD de un tanque agitado para la determinación de fugas térmicas, se inició con la investigación bibliográfica de artículos científicos para analizar modelados CFD previamente diseñados, los cuales sirven para validar los resultados obtenidos en los modelos CFD del presente proyecto. En el siguiente paso, se determinó que desarrollar diversos modelados de la misma reacción pero en diferentes dimensiones provee una serie de resultados que nos permite elegir la mejor simulación posible en base a los resultados obtenidos en cada simulación y posteriormente validados en la comparación con los resultados de los artículos científicos adquiridos en la investigación bibliográfica.

3.4. Revisión bibliográfica

En el proyecto de integración curricular de diseño de modelado CFD de un tanque agitado para la determinación de fugas térmicas, se utilizaron diversos artículos científicos de alto impacto que cumplan los criterios principalmente de tipo de reacción exotérmica y de tanque de agitado continuo (CSTR).

Para la obtención de artículos científicos relacionados al modelado CFD y los criterios necesarios, se buscó bibliografías prioritariamente en inglés, debido a que en dicho idioma existe un número más amplio de investigaciones publicadas en medios de alto impacto científico de las que existen en español. Además del filtro del idioma, también se buscó los artículos científicos utilizando palabras claves en inglés como: “CFD modelling”, “CFD CSTR tank”, “CFD thermal runaway” y “industrial processes simulation”.

Al finalizar la búsqueda de artículos científicos, se llegó a la conclusión de utilizar como base de validación de datos el artículo científico “CFD modelling of stirred tank chemical reactors: homogeneous and heterogeneous reaction systems” elaborado por Rudniak et al. 2004. El artículo científico mencionado presenta datos de fugas térmicas y velocidades del fluido en una simulación de una reacción exotérmica en un reactor de tanque agitado que sirvieron como base para validar los resultados obtenidos en el presente proyecto de integración curricular.

3.5. Variables del diseño

3.5.1. Dimensiones del reactor de tanque agitado

Para el diseño del tanque agitado del presente proyecto, se utilizó como base el diseño del tanque RC1 Mettler-Toledo 2dm³ desarrollado por Rudniak et al. 2004. El reactor es de diseño simple ya que cuenta con una hélice de 4 aspas planas que gira sobre un eje en el centro del reactor y presenta una base plana. En el reactor no existe ningún tipo de deflectores.

El material seleccionado para la carcasa del tanque así como de la hélice de 4 aspas fue el acero inoxidable, debido a que el acero inoxidable es un excelente material para el diseño de tanques en donde se llevara a cabo una reacción exotérmica por su alta resistencia a la corrosión y a las altas temperaturas, así como su precio económico y alta oferta en el mercado.

Tabla 5-3: Dimensiones del reactor de tanque agitado

Propiedad	Valor	Unidad
Altura	0.182	<i>m</i>
Diámetro	0.115	<i>m</i>
Grosor pared del reactor	0.005	<i>m</i>
Altura de la hélice	0.167	<i>m</i>
Diámetro de la hélice	0.010	<i>m</i>
Altura de las aspas	0.012	<i>m</i>
Largo de las aspas	0.046	<i>m</i>
Grosor de las aspas	0.026	<i>m</i>

Fuente: (Comsol Multiphysics 2023)
 Realizado por: Santacruz, Patricio. 2023

3.5.2. Propiedades de los reactivos y de reacción

Cada reactivo utilizado en el modelado CFD posee valores de propiedades físico-químicas que son necesarias incluir en la simulación para garantizar la obtención de resultados reales y precisos, así como también existen valores constantes de la reacción como lo es la temperatura inicial que es de 293.15 K y es importante tomar en consideración que ambos reactivos se encuentran en fase líquida a dicha temperatura ambiente.

También se incluyó las propiedades físico-químicas del material del cual está hecho el reactor de tanque agitado, el cual es el acero inoxidable.

Los valores de las variables fueron obtenidos de referencias bibliográficas así como también de cálculos realizados, los cuales se pueden observar en el Anexo

3.5.2.1. 2-butanol

Tabla 6-3: Valores de propiedades físico-químicas del 2-butanol aplicadas en el modelado CFD

Propiedad	Variable	Valor	Unidad
Densidad	rho	808	$\frac{kg}{m^3}$
Conductividad Térmica	k_iso	0.1553	$\frac{W}{m \times k}$
Capacidad calorífica a presión constante	Cp	2390.7	$\frac{J}{kg \times k}$
Viscosidad dinámica	mu	0.2868	$Pa \times s$
Masa molar	n	74.123	$\frac{g}{mol}$
Concentración	n _A	5.4	mol

Fuente: (Comsol Multiphysics 2023)
Realizado por: Santacruz, Patricio. 2023

3.5.2.2. Anhídrido propanoico

Tabla 7-3: Valores de propiedades físico-químicas del anhídrido propanoico aplicadas en el modelado CFD

Propiedad	Variable	Valor	Unidad
Densidad	rho	1015	$\frac{kg}{m^3}$
Conductividad Térmica	k_iso	0.3233	$\frac{W}{m \times k}$
Capacidad calorífica a presión constante	Cp	158.6	$\frac{J}{kg \times k}$
Viscosidad dinámica	mu	0.001144	$Pa \times s$

Masa molar	n	130.14	$\frac{g}{mol}$
Concentración	n _A	5.4	mol

Fuente: (Software CFD 2023)

Realizado por: Santacruz, Patricio. 2023

3.5.3. Modelado 1d

El modelado en 1D se refiere a la simulación en donde el comportamiento físico-químico es analizado en un solo espacio con dependencia del tiempo, y en el modelado 1D desarrollado en el trabajo de integración se seleccionó la cara inferior del reactor. El modelado 1D se diseñó en base a los dimensionamientos, presentados en la Tabla 5-3, del reactor de tanque agitado obtenido del artículo científico elaborado por Rudniak et al. 2004, así como la velocidad de movimiento rotacional para las aspas de la hélice.

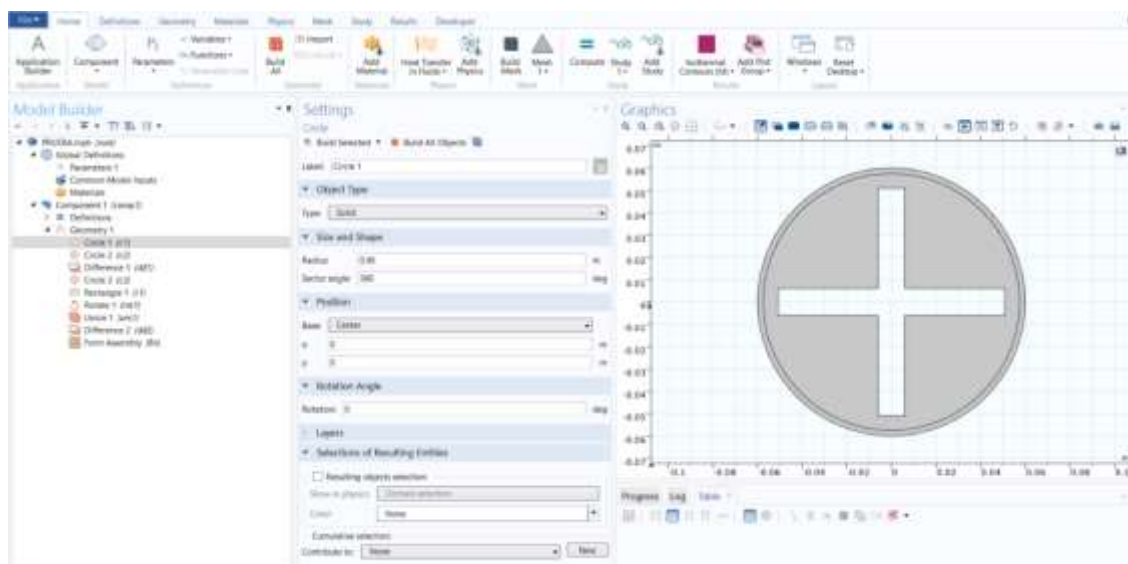


Ilustración 4-3: Cara inferior del tanque agitado en el software CFD.

Fuente: (Software CFD 2023)

Gracias a la base de datos que ofrece el software CFD, se añadió los reactivos, el 2-butanol y el anhídrido propanoico, con todas las variables necesarias de características físico-químicas, detalladas en la Tabla 6-3 y Tabla 7-3, de ambos compuestos, así como también el área del tanque en donde se encontrarán los reactivos.

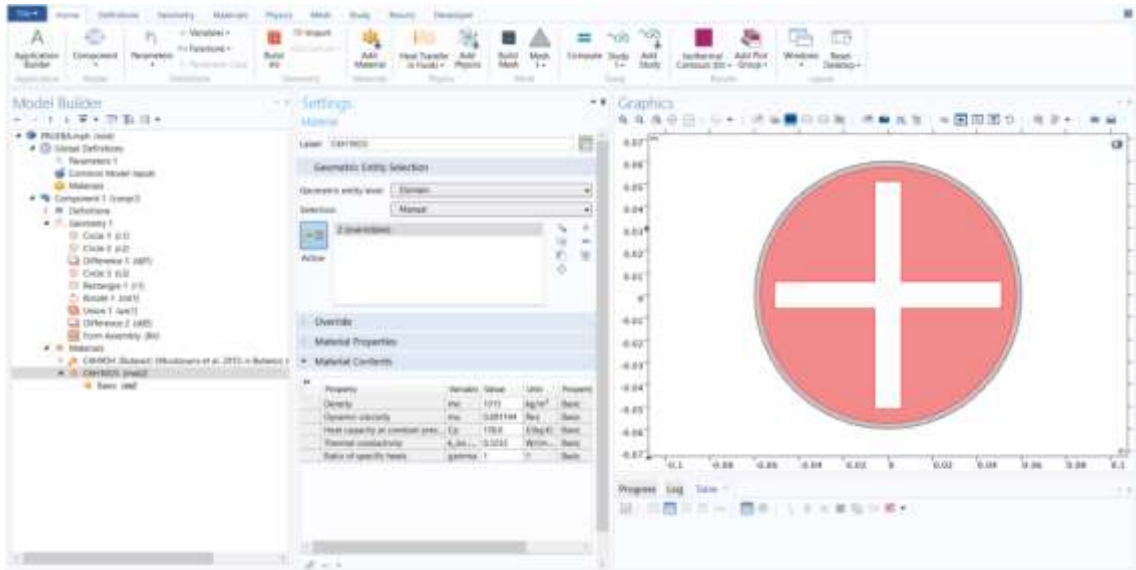


Ilustración 5-3: Adición de los reactivos con sus respectivos valores de propiedades físico-químicas.

Fuente: (Software CFD 2023)

Para el material del tanque, el acero inoxidable, también se agregó las necesarias variables y características físico-químico, como también el área del tanque en donde se encuentra dicho material, que son las paredes de las aspas y el contorno del mismo tanque.

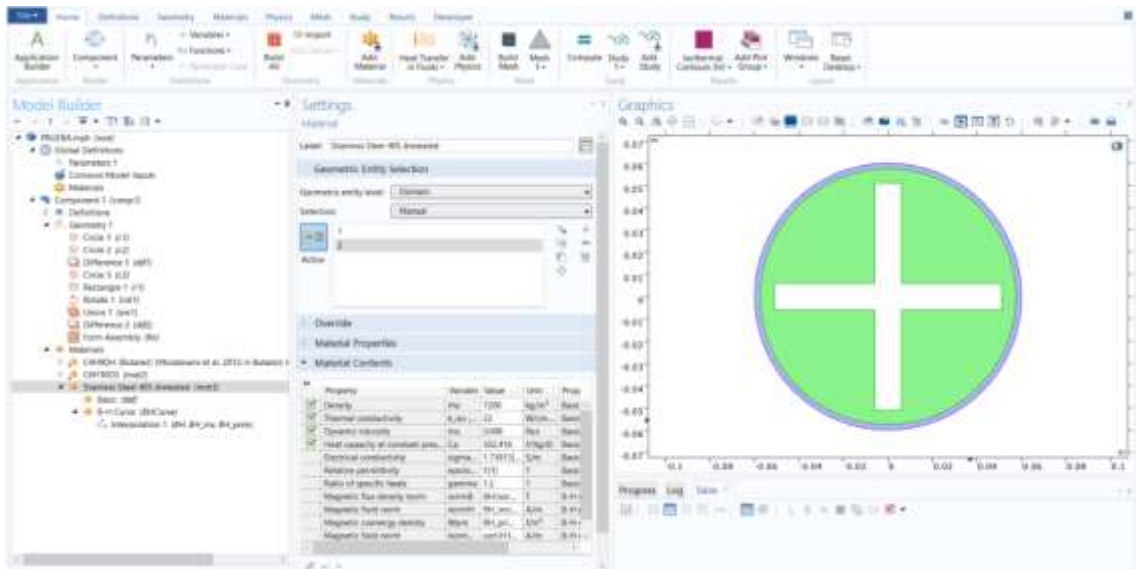


Ilustración 6-3: Aplicación del acero inoxidable como material del tanque agitado.

Fuente: (Software CFD 2023)

El siguiente paso consistió en agregar los fenómenos físicos y químicos presentes en un tipo de reacción de mezcla de dos compuestos en estado líquido, los cuales son: transferencia de calor y fluido laminar. Estos fenómenos físicos deben ser agregados al modelado porque gracias a ellos se podrá determinar las velocidades, presiones y temperaturas de la reacción en cualquier intervalo de tiempo.

Para la transferencia de calor se definió como fronteras del sistema a las paredes del tanque y las aspas de la hélice, que son objetos sólidos hechos de acero inoxidable.

Para el fenómeno físico del fluido laminar, se definió la zona interior del tanque donde el líquido interactuara con las aspas sujetas a la hélice que rotara a una velocidad definida de 30rpm.



Ilustración 7-3: Incorporación los fenómenos físicos y químicos.

Fuente: (Software CFD 2023)

El último paso consiste en determinar los rangos de tiempo, que en el caso del modelado 1D es de 2000 segundos.

Una vez computado, se obtuvo los datos de resultados y gráficos de velocidades, presiones y temperaturas del modelado 1D

3.5.4. Modelado 2D

Para el diseño del modelado 2D, se seleccionó la mitad de una cara lateral del tanque reactor, esto es debido a que facilitara el posterior diseño del modelado 3D. En simulaciones de modelados bidimensionales el espacio del tanque es mayor a la de un plano 1D y el software CFD utiliza un sistema mesh para resolver ecuaciones de dinámica de fluidos complejas de una celda a otra, lo que ocasiona en un tiempo de computación mayor a la de un modelado 1D. De la misma manera que en el modelado 1D, el modelado 2D se diseñó en base a los dimensionamientos, presentados en la Tabla 5-3.

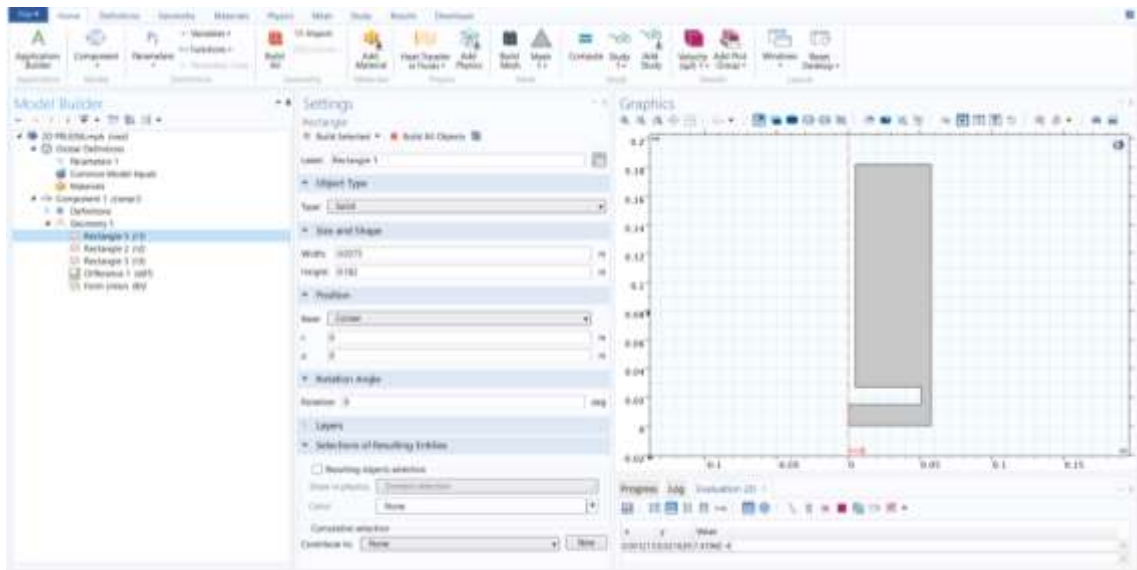


Ilustración 8-3: Construcción de la cara lateral del tanque agitado.

Fuente: (Software CFD 2023)

Utilizando la base de datos que ofrece el software CFD, se añadió todas las variables necesarias de características físico-químicas, detalladas en la Tabla 6-3 y Tabla 7-3, de los reactivos 2-butanol y el anhídrido propanoico en fase líquida, así como también el área del tanque en donde se encontrarán los reactivos.

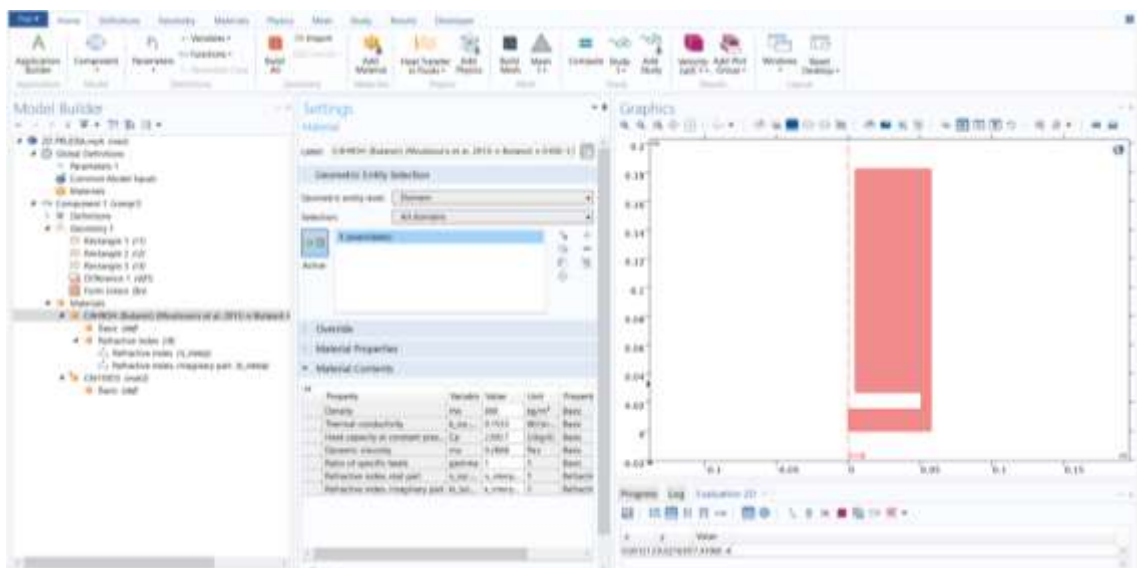


Ilustración 9-3: Adición de los reactivos en el modelado 2D.

Fuente: (Software CFD 2023)

Después se agregó los fenómenos físicos y químicos de transferencia de calor y fluido laminar para garantizar la obtención de resultados reales de las velocidades, presiones y temperaturas de la reacción en cualquier intervalo de tiempo.

Para la transferencia de calor se definió como fronteras del sistema a los objetos solidos hechos de acero inoxidable que son las paredes del tanque y el aspa de la hélice. Mientras que el fenómeno físico del fluido laminar, se definió la zona interior del tanque donde el líquido interactuara con el aspa.

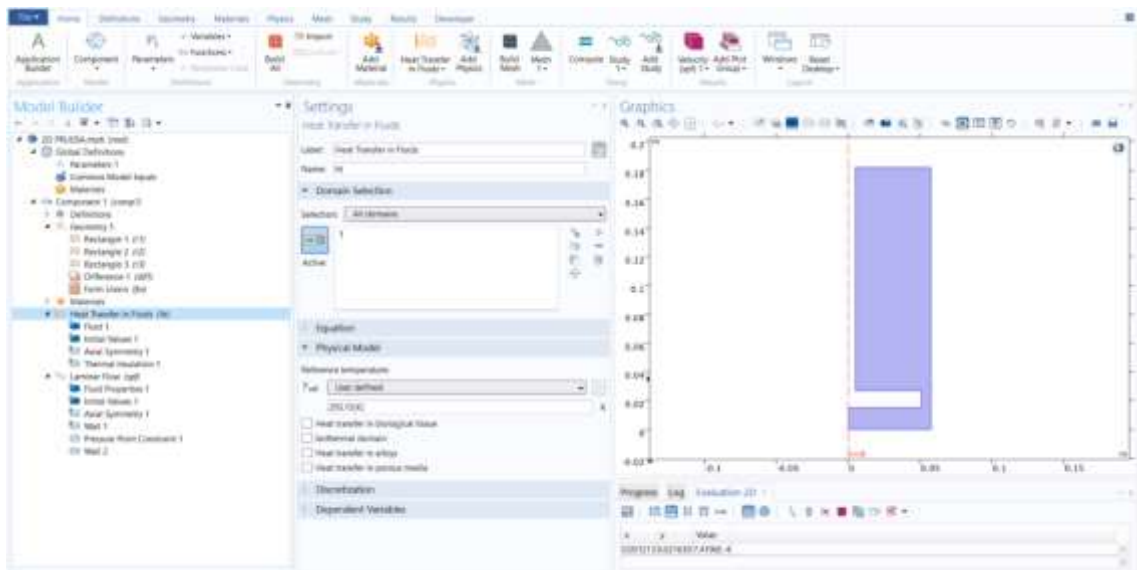


Ilustración 10-3: Incorporación los fenómenos físicos y químicos en el modelado 2D.

Fuente: (Software CFD 2023)

Antes de computar, se debe agregar el comando mesh para un ambiente físico controlado para la resolución de las ecuaciones de dinámica de fluidos del sistema.

Para la resolución de estas ecuaciones, el comando mesh aplica una red formada por celdas y puntos, de cualquier forma o tamaño, que resuelve ecuaciones diferenciales parciales, en donde cada celda de la malla representa una solución individual de la ecuación que al momento de combinar todas las celdas de la red, da como resultado una solución para todo el sistema. (Pfaff et al. 2020)

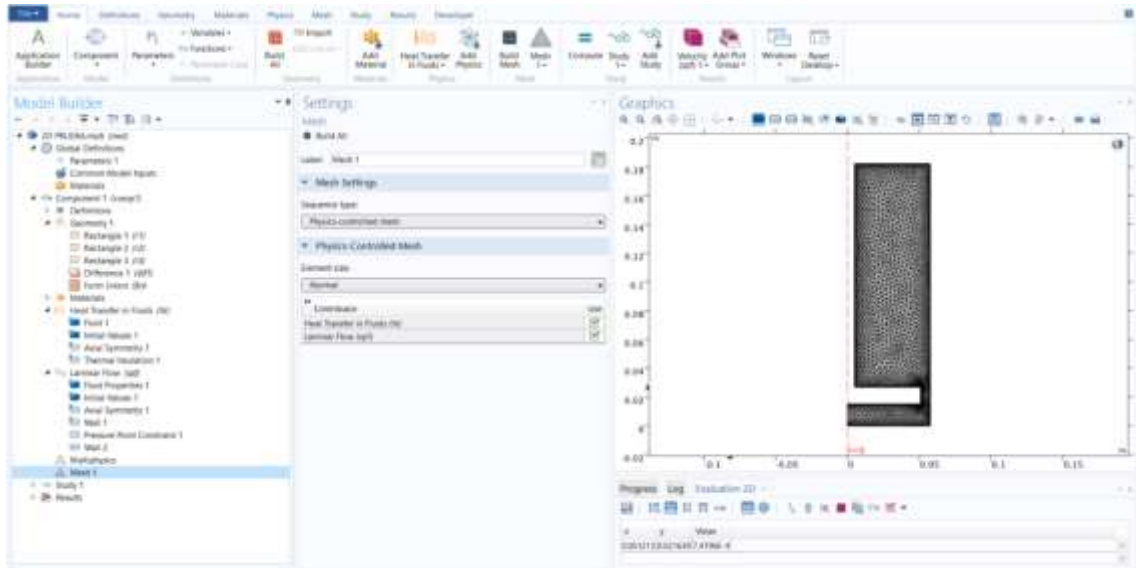


Ilustración 11-3: Incorporación del comando mesh.

Fuente: (Software CFD 2023)

Se computo la simulación y se obtuvo los datos de resultados y gráficos de velocidades, presiones y temperaturas del modelado 2D.

3.5.5. Modelado 3D

Para el diseño del modelado 3D, se partió del diseño del modelado 2D solo cambiando el plano de dimensiones y aplicando el comando “3D plot group” en el apartado de “Results” para obtener los resultados de la simulación en un plano tridimensional.

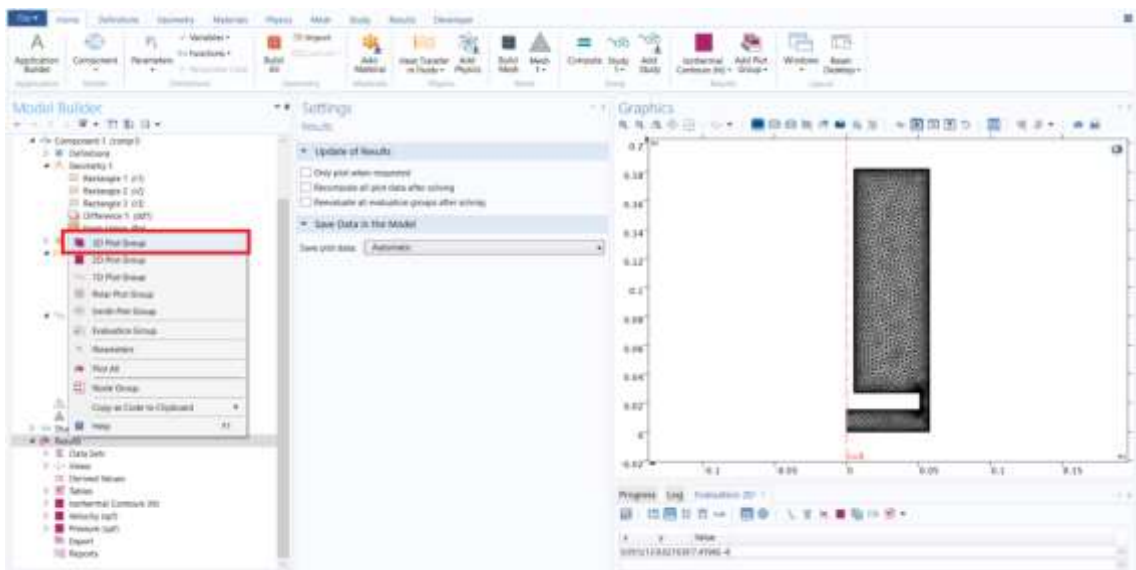


Ilustración 12-3: Selección del comando “3D plot group”.

Fuente: (Software CFD 2023)

3.6. Validación de los modelados

Con los datos obtenidos en el presente proyecto de integración curricular se puede determinar que los modelados realizados presentan resultados acordes a los publicados por Rudniak et al. 2004. Las gráficas realizadas a partir de los datos de temperatura de los 3 modelados presentan una similitud con los resultados presentados por Rudniak et al. 2004, además de que cada modelado presenta una perspectiva diferente a la misma reacción pero con valores de temperatura muy cercanos.

También cabe destacar que debido a que el software CFD ofrece una interfaz de computación en donde no es posible realizar la simulación si algún dato de los reactivos o comando es incorrecto. Pero ese no es el único factor para asumir como validos los resultados, el otro factor de suma importancia es el tiempo de computación de cada modelado, debido a que si una simulación toma demasiado tiempo, esta no podrá considerarse como eficiente y se debería buscar alternativas para tratar de menorar dicho tiempo pero sin alterar los resultados, en caso de ser correctos.

En el caso del presente proyecto, si se cumplió con el factor de tiempo de simulación, teniendo tiempos casi instantáneos, como en el caso de los modelados 2D y 3D, que el tiempo de computación fue de 4 segundos, mientras que para el modelado 1D el tiempo de computación fue de 28 segundos.

CAPÍTULO IV

4. RESULTADOS

Para la presentación de los resultados de las velocidades, presiones y temperaturas de los modelados en las tres dimensiones, se utilizó figuras que muestran el comportamiento del líquido de mezcla del 2-butanol y el anhídrido propanoico.

En el caso del modelado 1D, se presenta las figuras en 4 diferentes tiempos: 1 *segundo*, 500 *segundos*, 1000 *segundos* y 2000 *segundos*. Se eligió el rango de tiempo de 2000 *segundos* debido a que en el artículo científico de Rudniak et al. 2004 también trabajó en dicho intervalo de tiempo, igualmente para ese tiempo en el modelo del tanque a escala en el cual se realizó el modelado, la reacción ya se ha completado.

Además para el caso de los resultados de temperatura obtenidos mediante las simulaciones en los 3 planos dimensionales, también se utilizaron graficas de temperatura en función del tiempo en donde se muestra el punto de temperatura más alto en el tanque agitado en un rango de tiempo de 2000 *segundos*.

4.1. Resultados del modelado 1D

En la figura siguiente se puede observar los gráficos de velocidades del fluido de la reacción en 4 intervalos de tiempo. Para el segundo 1, la velocidad del fluido es la menor en gran parte del sistema, con ciertos picos de velocidad en las zonas donde el fluido choca con las aspás, esto se da porque es ahí en donde el fluido se empezara a moverse con cierta velocidad que incremento de manera paulatina hasta llegar a una velocidad constante de $3.0826 \times 10^{-4} \frac{m}{s}$. La velocidad llevo a un punto constante en donde no sube ni baja debido a que la velocidad del fluido es directamente proporcional a la velocidad rotacional de la hélice con las aspás, es decir, no incrementa porque las aspás se mueven a una velocidad constante de 30 *rpm*.

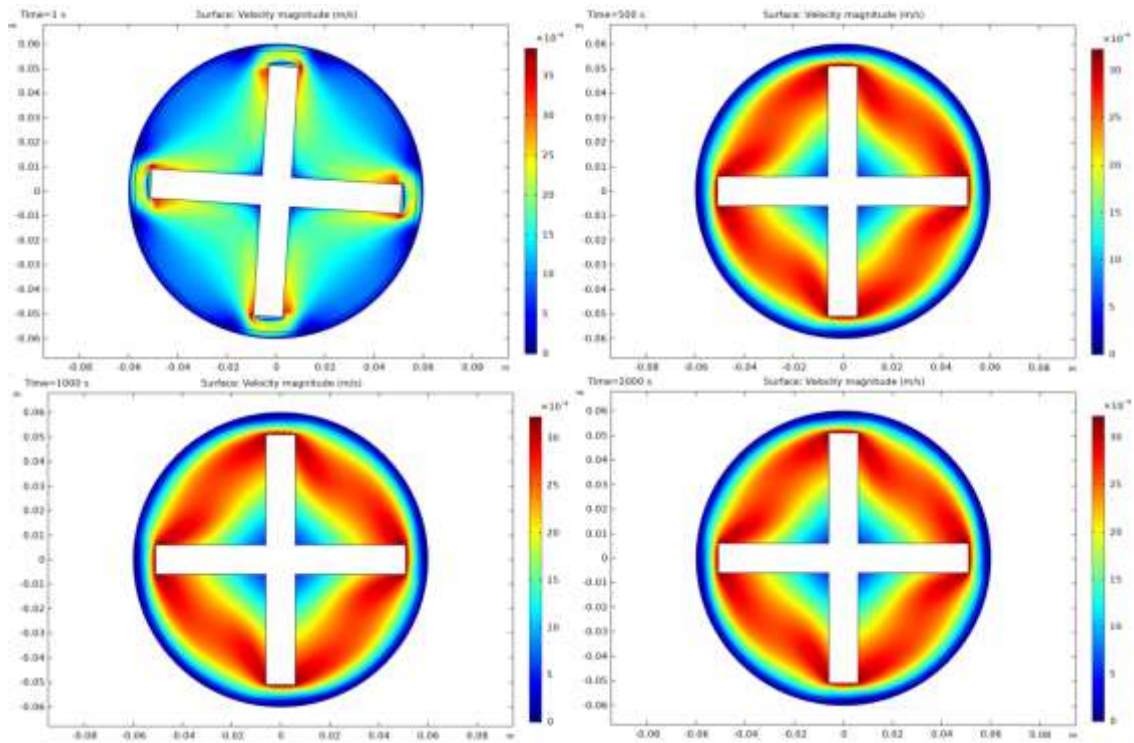


Ilustración 13-4: Resultados de velocidad del modelado 1D.

Fuente: (Software CFD 2023)

Siguiendo lo establecido con Xu et al. 2019, al momento del líquido chocar con un objeto sólido en movimiento se generará un estrés en el líquido, generando así un cambio de presión en el mismo lo cual se puede observar en la figura siguiente. En el segundo 1 del modelado la presión es más alta por lo que las aspas tienen que generar una mayor presión hacia el líquido, que en ese momento se encuentra estático, para moverlo, resultando en un valor máximo de presión de $0.09062 Pa$, en todos los vértices derechos de las aspas de la hélice que se encuentra en un movimiento en sentido horario. Con el pasar del tiempo, la presión es menor y casi constante, debido a que el fluido ya adquiere una velocidad propia y el contacto entre las aspas y el fluido no es muy intenso para moverlo. En los tres siguientes intervalos de tiempo, la presión del líquido en movimiento con las aspas decrece hasta llegar a un rango constante de entre $0.01563 Pa$ y $0.01562 Pa$.

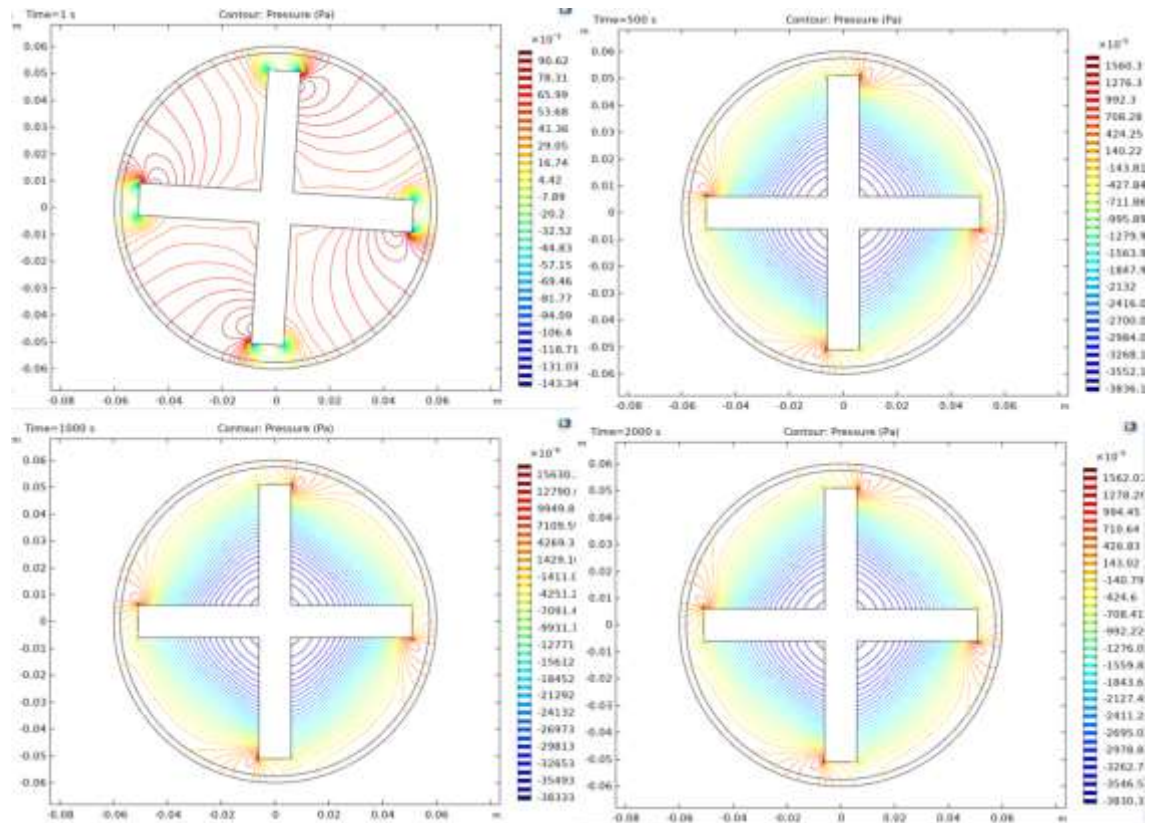


Ilustración 14-4: Resultados de presión del modelado 1D.

Fuente: (Software CFD 2023)

En el caso de la temperatura, se puede observar que los puntos donde existe la mayor probabilidad de existencia de fugas térmicas, como en el caso de la presión, es el punto donde el fluido de la mezcla topa con las aspas, debido a que en esos lugares es donde el fluido en movimiento forma olas y se deforma, lo que causa un incremento de temperatura por el movimiento del fluido y fricción que se crea debido al impacto como establece Xu et al. 2019, con la ligera diferencia de que los puntos altos de temperatura no solo se encuentran en el vértice derecho de las aspas, sino en todo el contorno del filo de las aspas, tal y cual se muestra en la figura obtenida del artículo científico de Rudniak et al. 2004.

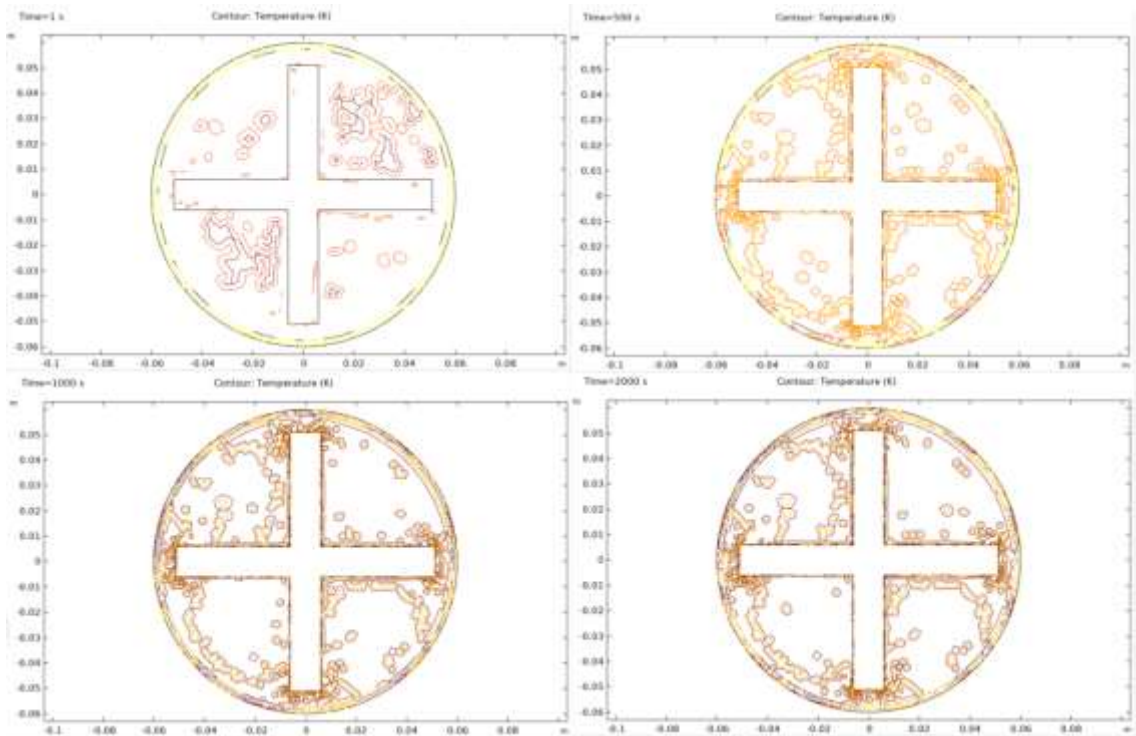


Ilustración 15-4: Resultados de temperatura del modelado 1D.

Fuente: (Software CFD 2023)

Durante el intervalo de tiempo establecido de 2000 s, la temperatura llega a un punto máximo del proceso que es 129 °C durante 7 s. El valor máximo de temperatura obtenido se puede comparar con el de Rudniak et al. 2004 y determinar que son similares, pero no exacto, ya que en el artículo científico la temperatura máxima alcanzada es de 130 °C durante 4 s. Como se puede observar en la figura, una vez culminada la reacción, la temperatura comenzara a decrecer llegando a estar cerca del valor inicial de temperatura que era de 35 °C.

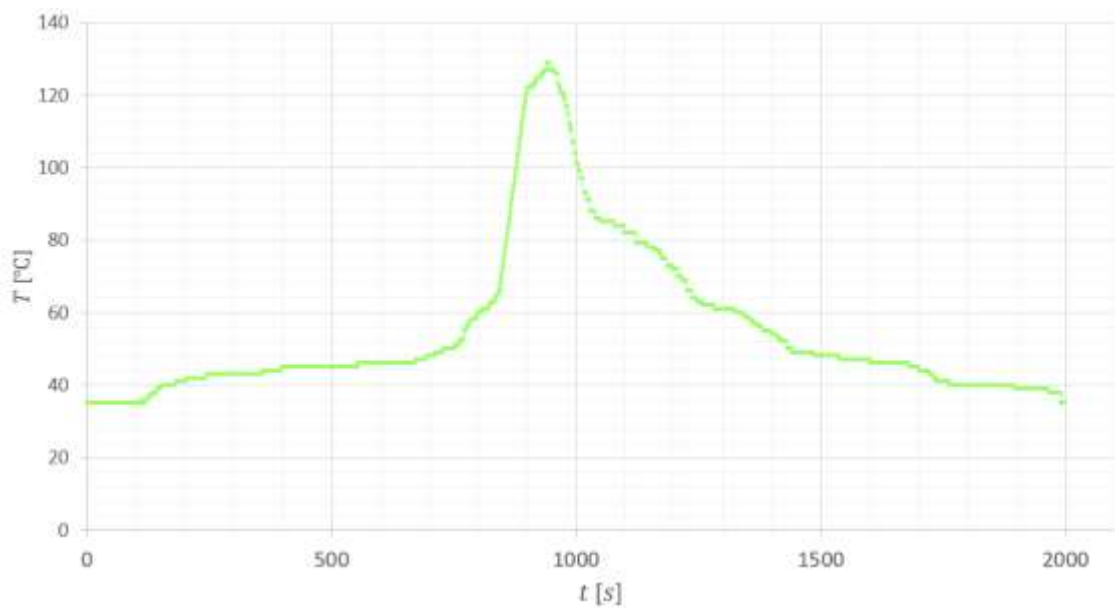


Ilustración 16-4: Gráfico de tiempo vs temperatura del modelado 1D.

Fuente: (Software CFD 2023)

4.2. Resultados del modelado 2D

En el modelado 2D, se trabajó con un tiempo estacionario, obteniendo el valor más alto para la velocidad, presión y temperatura, con este último adicionalmente siendo el único que se trabajó con un intervalo de tiempo de 2000 *segundos*.

Para la figura de velocidad se puede observar, como en el modelado 1D, que el fluido se moverá con mayor velocidad en la zona donde tiene contacto con las aspas, alcanzando una velocidad constante de $3.0514 \times 10^{-4} \frac{m}{s}$. Este modelado nos brinda una perspectiva que no era posible observar en el modelado 1D, la cual es la parte superior del tanque, en donde la velocidad del fluido es muy baja, pero esto no significa que el fluido en la parte de arriba no se encuentre en movimiento, ya que debido a la gravedad el fluido de la parte superior descenderá mezclándose con todo el fluido de la parte inferior.

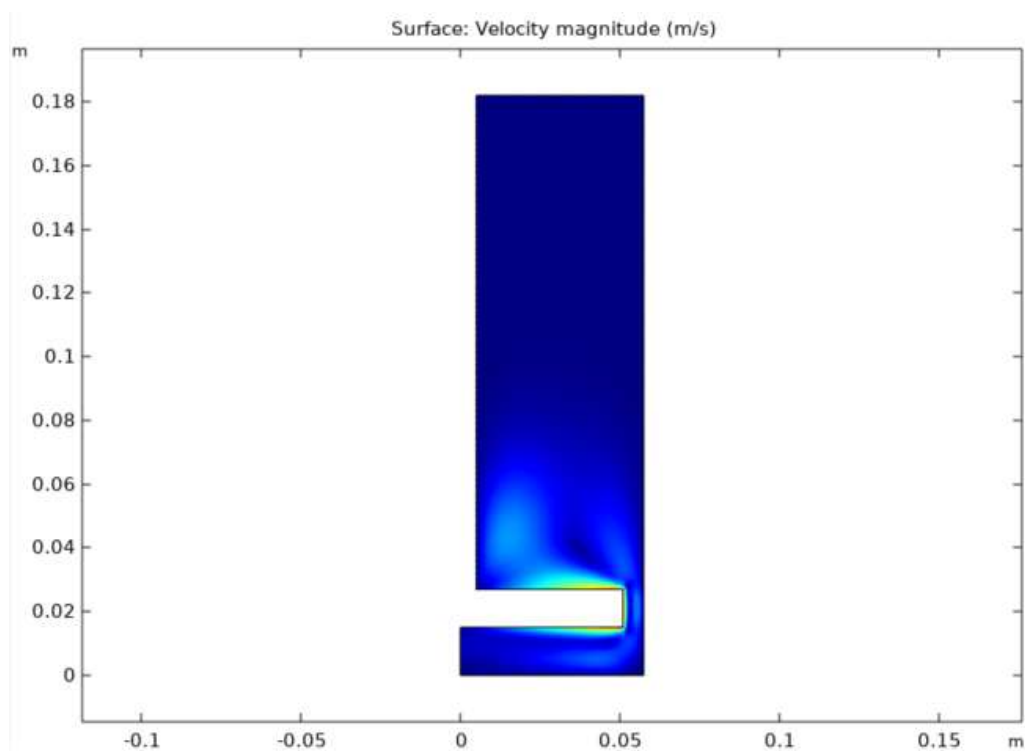


Ilustración 17-4: Resultados de velocidad del modelado 2D.

Fuente: (Software CFD 2023)

De igual manera que en la figura de la velocidad, la presión del fluido será mayor en la zona donde el fluido choca con las aspas que en comparación con la zona superior del tanque. La presión también llegó a un punto constante de $0.01376 Pa$ en el vertice superior de las aspas,

siendo este el punto máximo de presión, al momento de alcanzar una presión constante, debido a que en este modelado se toma en cuenta el peso que ejerce el fluido sobre las aspas en dicha zona. Otro punto donde la presión también es alta es en la zona de la unión de las aspas con la hélice, en donde se alcanza una presión constante de 0.01353 Pa .

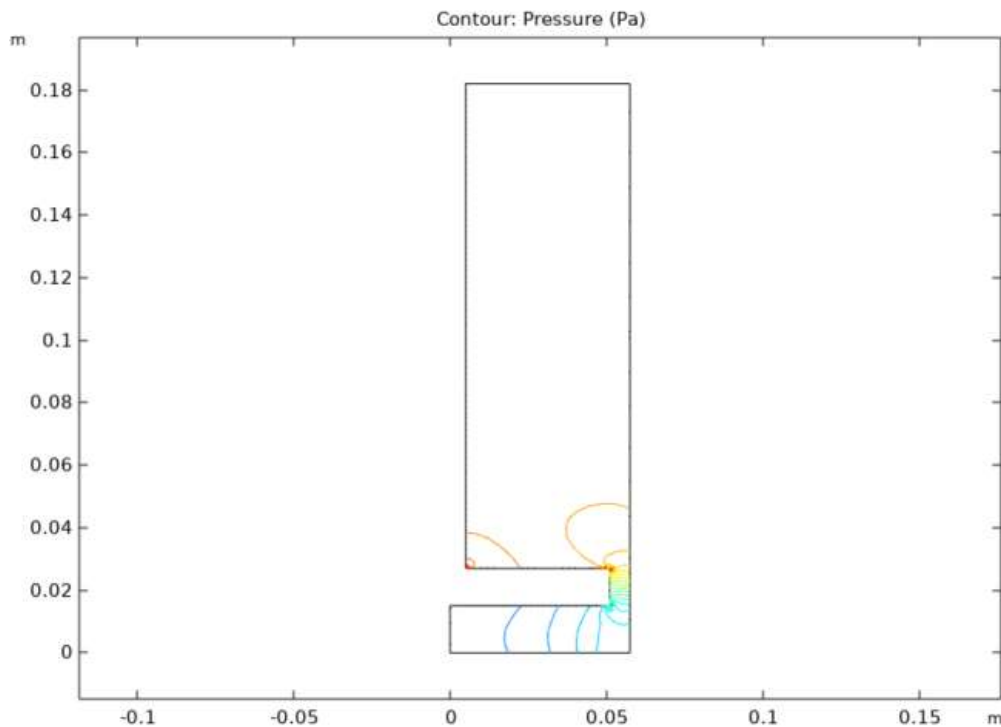


Ilustración 18-4: Resultados de presión del modelado 2D.

Fuente: (Software CFD 2023)

En la figura se puede observar, como en el mismo caso del modelado 1D, la zona de mayor temperatura será en donde el fluido tenga contacto con las aspas, y de igual manera en la parte inferior de las aspas. Estos nuevos puntos altos de temperatura debajo de las aspas se dan debido a que se puede considerar como un espacio cerrado al resto del tanque porque las aspas en movimiento crean una especie de capa de altas temperaturas del fluido en la parte superior de las mismas, y por debajo ya se tiene el límite que es el mismo tanque.

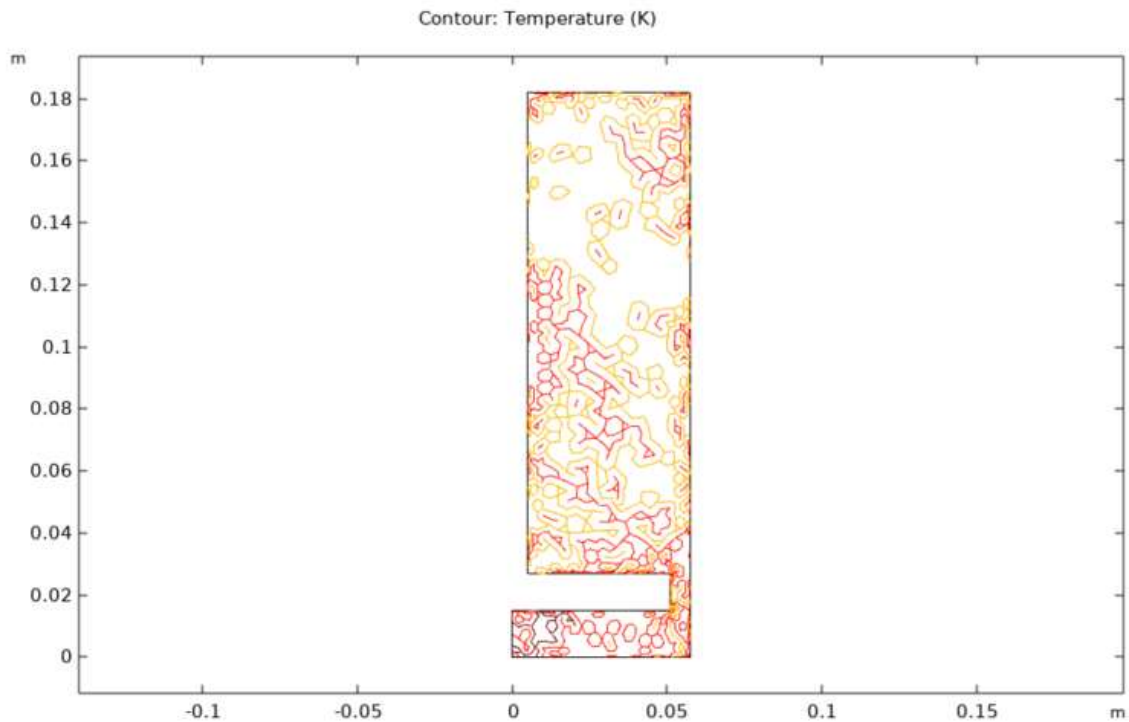


Ilustración 19-4: Resultados de temperatura del modelado 2D.

Fuente: (Software CFD 2023)

Para el intervalo de tiempo de 2000 s, se puede observar que la temperatura alcanza un punto máximo de 125 °C en el segundo 1118 hasta el 1128. Estos valores de temperatura son validados con los de Rudniak et al. 2004, teniendo una varianza mínima ya que en el artículo científico la temperatura máxima es de 127 °C.

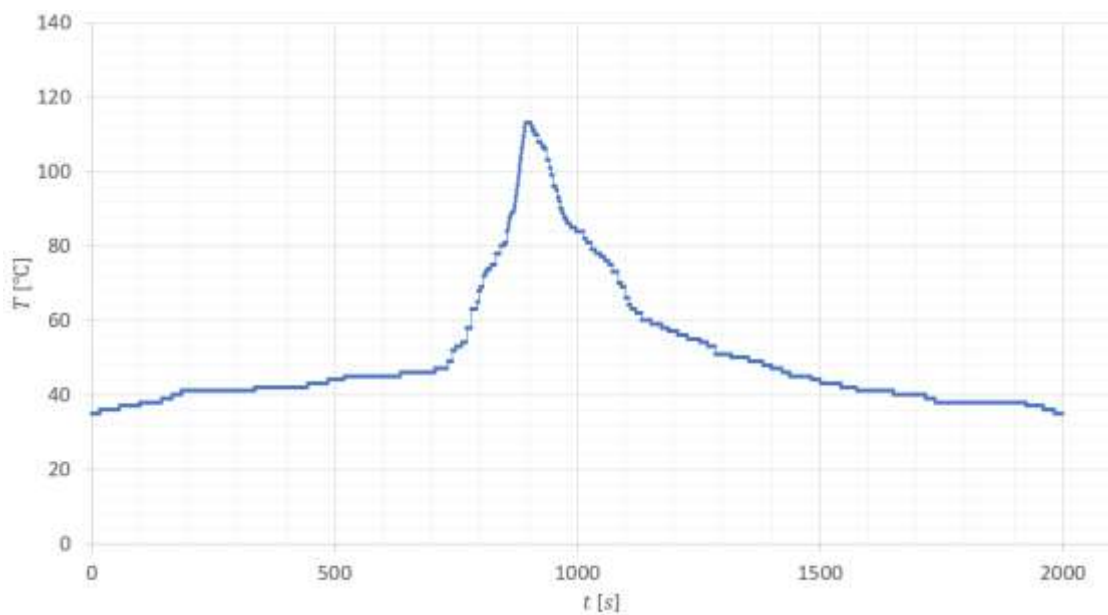


Ilustración 20-4: Gráfico de tiempo vs temperatura del modelado 2D.

Fuente: (Software CFD 2023)

4.3. Resultados del modelado 3D

El modelado 3D es el más completo en base a que cumple todos los parámetros y fenómenos físicos que están presentes en la vida real.

De igual manera que en el modelado 2D, se trabajó con un tiempo estacionario donde se obtuvo el valor más alto para la velocidad, presión y temperatura. En la figura se puede observar que los valores constantes de velocidades del fluido se encuentran en la zona de las aspas en movimiento, lo cual concuerda con los resultados obtenidos de Rudniak et al. 2004. La velocidad alcanza un valor constante de $3.0979 \times 10^{-4} \frac{m}{s}$.

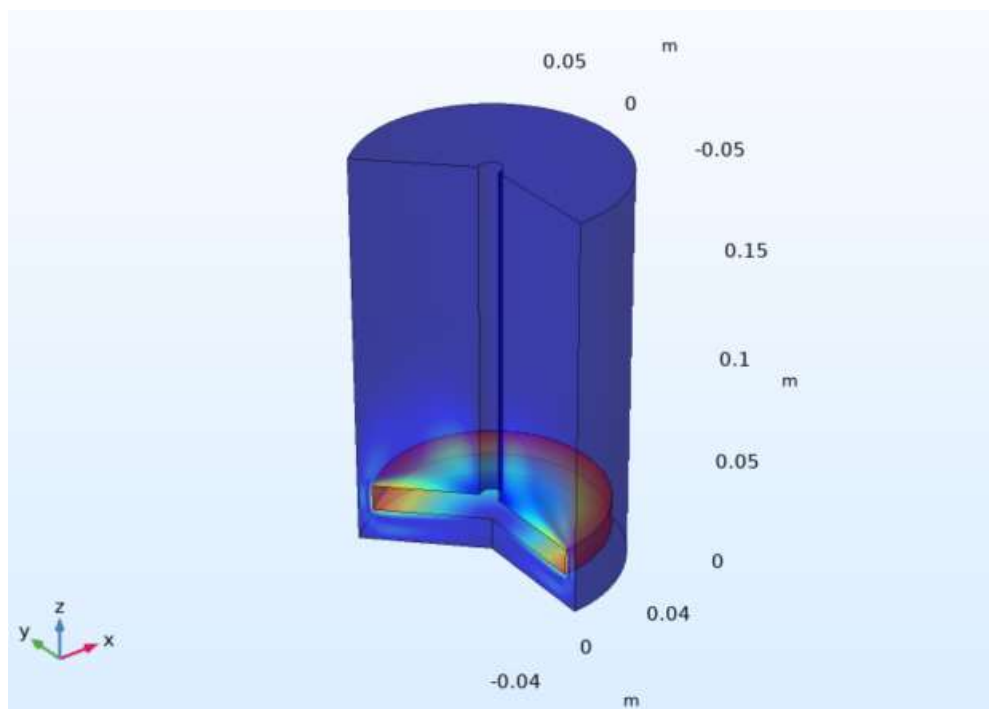


Ilustración 21-4: Modelado 3D del tanque agitado.

Fuente: (Software CFD 2023)

Debido a que este modelado es el más parecido a un real y los valores presentados por Rudniak et al. 2004 son similares, donde se obtiene un valor máximo aproximado de $111 \text{ }^\circ\text{C}$, el modelado 3D desarrollado en el presente trabajo de integración curricular, en el intervalo de temperatura de 2000 s los resultados obtenidos nos indican que la temperatura alcanza un máximo de $113 \text{ }^\circ\text{C}$ durante el segundo 894 y se mantiene constante hasta el segundo 904.

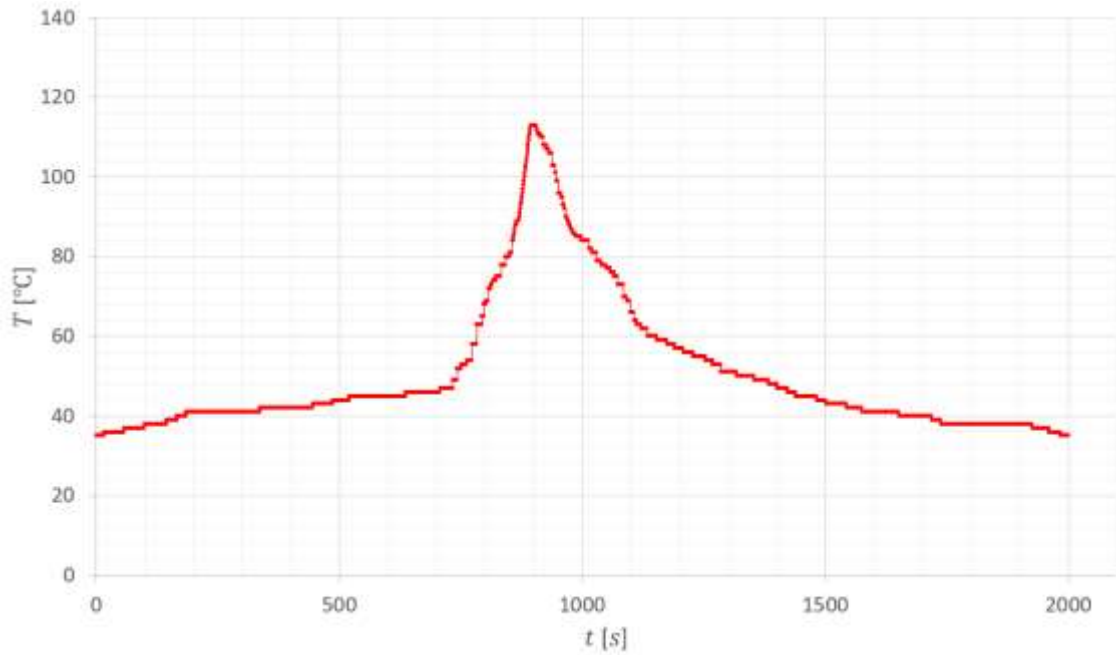


Ilustración 22-4: Gráfico de tiempo vs temperatura del modelado 3D.

Fuente: (Software CFD 2023)

4.4. Análisis e interpretación de resultados

En base a los datos obtenidos, se puede establecer que los 3 modelados presentan similitudes con los resultados de los respectivos modelados de Rudniak et al. 2004, por lo cual los resultados del presente trabajo de integración curricular son considerados como válidos.

Pero se puede determinar que el modelado 3D es la mejor opción para desarrollar un sistema de detección de fugas térmicas debido a que este modelado si toma en cuenta todos los factores y parámetros de un sistema de tanque agitado en la vida real, por su similitud a los mismos obtenidos de manera experimental y el modelado híbrido 2D/3D de Rudniak et al. 2004.

La diferencia del modelado 3D con los modelados 1D y 2D es que estos últimos son modelados ideales de reacción, que no consideran todos los parámetros físicos del mundo real y por ende dan resultados que varían por mucho con los resultados experimentales obtenidos por Rudniak et al. 2004 en su artículo científico.

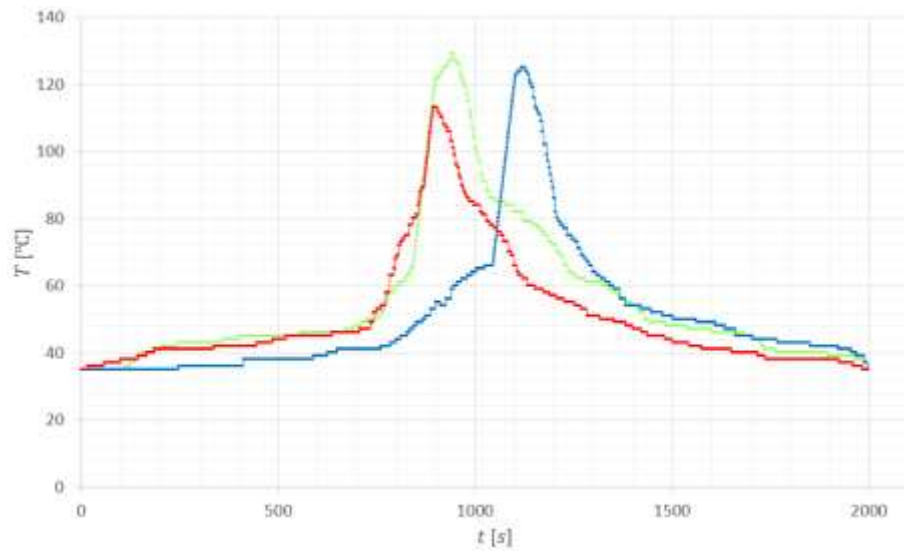


Ilustración 23-4: Gráfico comparativo de tiempo vs temperatura de los resultados de los 3 modelados (1D, 2D, 3D).

Fuente: (Software CFD 2023)

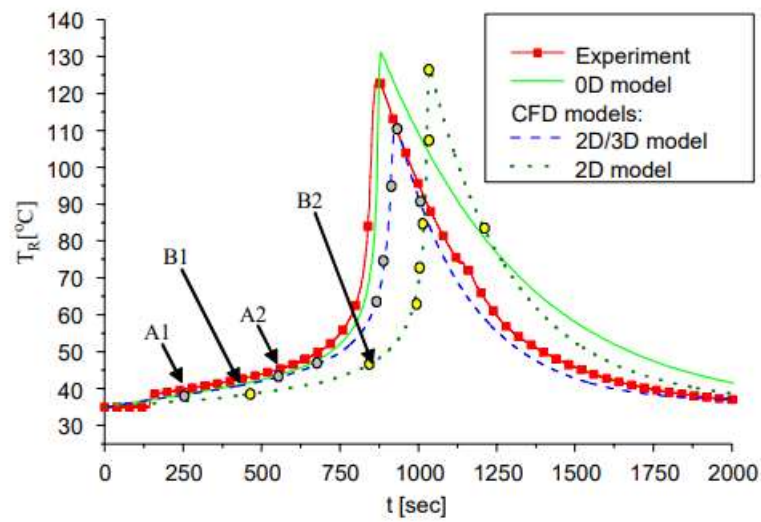


Ilustración 24-4: Gráfico comparativo de tiempo vs temperatura de los resultados experimentales y de los 3 modelados de Rudniak et al. 2004.

Fuente: (Rudniak et al. 2004)

CONCLUSIONES

- Se desarrolló exitosamente un modelado de una reacción exotérmica en tanque agitado aplicando dinámica computacional de fluidos para la detección de posibles fugas térmicas en un software CFD. Los modelados CFD presentan rigurosamente la configuración de la simulación, considerando todas las variables y parámetros relevantes necesarios para modelar con precisión la reacción exotérmica de la esterificación del 2-butanol con el anhídrido propanoico en un tanque agitado, asegurando la fiabilidad de los resultados obtenidos.
- Se identificó las diferentes variables, parámetros y las operaciones necesarias para la simulación del proceso, empezando por las variables físico-químicas de cada uno de los reactivos así como del material del tanque el cual es el acero inoxidable. Además se estableció los parámetros del rango de tiempo de la reacción, 2000 s, y de velocidad de la hélice, 30 rpm, cumpliendo con los datos de la referencia bibliográfica obtenida del artículo científico de Rudniak et al. 2004. Además se seleccionó las operaciones de transferencia de calor y de fluido laminar, las cuales son fenómenos físicos necesarios para la obtención de resultados reales y precisos de la simulación.
- Se determinó los puntos en donde es posible la generación de fugas térmicas dentro del reactor durante la esterificación del 2-butanol con anhídrido propanoico son las áreas de interacción del fluido con las aspas que son zonas donde el fluido choca con el objeto sólido en movimiento, creando fugas térmicas con picos de temperatura de hasta 113 °C por un tiempo de 10 segundos.
- Se validó la simulación de la esterificación del 2-butanol con anhídrido propanoico mediante referencias bibliográficas de alto impacto, obteniendo resultados muy similares de temperatura y en el tiempo en el que ocurren dichas fugas térmicas. En los modelados 1D y 2D se obtuvieron resultados de fugas térmicas con temperaturas máximas de 130 °C y 127 °C respectivamente, mientras que en Rudniak et al. 2004 para los modelados 0D y 2D las temperaturas máximas de las fugas térmicas son 133 °C y 129 °C. En el modelado 3D desarrollado en el presente trabajo de integración curricular, la temperatura más alta registrada de fugas térmicas es de 113 °C, mientras que en Rudniak et al. 2004 el pico más alto de temperatura es de 111 °C. Este proceso de validación añadió credibilidad a los resultados, reforzando la precisión de las metodologías de simulación empleadas.

- Se analizó el perfil de temperatura y presión del reactor que ayudara a la aplicación del modelado CFD, llegando a la conclusión de que el modelado 3D es la mejor y más real opción para un sistema de detección de fugas térmicas debido a que considera todos los factores y parámetros relevantes de los sistemas de tanques agitados del mundo real, además de que el modelo 3D mostró una similitud sustancial con los hallazgos experimentales y el modelo híbrido 2D/3D de Rudniak et al. 2004.

RECOMENDACIONES

- Antes de comenzar la simulación, analizar a fondo la reacción exotérmica de esterificación de 2-butanol con anhídrido propanoico así como la cinética de reacción y los valores de las propiedades físico-químicas de los reactivos, para que al momento de la simulación no se presente ninguno error y se pueda computar.
- Tomar en cuenta todos los fenómenos físicos presentes en el sistema y el comportamiento del flujo del fluido, debido a que esto ayudará a elegir las condiciones y entornos de sistema adecuados para el modelado.
- Realizar diversos los ajustes del solucionador, como el rango de tiempo, las velocidades de la hélice y los esquemas numéricos. El ajuste adecuado de estas configuraciones puede afectar la estabilidad y precisión de la simulación.
- Siempre validar y verificar los resultados con puntos de referencia conocidos o datos experimentales para garantizar que el modelado sea capaz de producir resultados precisos y reales.
- Asegurarse de poseer recursos computacionales eficientes, debido a que las simulaciones CFD pueden ser computacionalmente intensivas, y requieren de un gran poder de software y hardware para llevar a cabo las simulaciones de procesos químicos en un plazo razonable.
- Mantener una documentación exhaustiva de cada paso realizado en el modelado, incluidos los ajustes, los comandos y los resultados. Esta documentación será indispensable, principalmente, para compartir el proceso de desarrollo del modelado y los resultados.

BIBLIOGRAFÍA

- BHATTACHARYYA, S., ABRAHAM, J.P., CHENG, L. y GORMAN, J., [sin fecha].
Introductory Chapter: A Brief History of and Introduction to Computational Fluid
Dynamics. [en línea]. S.l.: Disponible en: www.intechopen.com.
- BISHT, K. y RAMANA, P. V., 2019. Waste to resource conversion of crumb rubber for
production of sulphuric acid resistant concrete. *Construction and Building Materials*, vol.
194, ISSN 09500618. DOI 10.1016/j.conbuildmat.2018.11.040.
- BRIDGET CUNNINGHAM, 2015. Simulating an Ideal Stirred Tank Reactor System.
COMSOL Blog [en línea]. Disponible en: <https://www.comsol.com/blogs/simulating-an-ideal-stirred-tank-reactor-system/>.
- COMSOL MULTIPHYSICS, 2023. Mixer Module. [en línea]. [consulta: 2 agosto 2023].
Disponible en: <https://www.comsol.com/mixer-module>.
- CUI, J., NI, L., JIANG, J., PAN, Y., WU, H. y CHEN, Q., 2019. Computational Fluid
Dynamics Simulation of Thermal Runaway Reaction of Styrene Polymerization. *Organic
Process Research and Development*, vol. 23, no. 3, ISSN 1520586X. DOI
10.1021/acs.oprd.9b00005.
- DO ROSÁRIO, C.R., KIPPER, L.M., FROZZA, R. y MARIANI, B.B., 2015a. *Modeling of
tacit knowledge in industry: Simulations on the variables of industrial processes*. 15
febrero 2015. S.l.: Elsevier Ltd.
- DO ROSÁRIO, C.R., KIPPER, L.M., FROZZA, R. y MARIANI, B.B., 2015b. *Modeling of
tacit knowledge in industry: Simulations on the variables of industrial processes*. 15
febrero 2015. S.l.: Elsevier Ltd.
- GOLSHAN, S., SOTUDEH-GHAREBAGH, R., ZARGHAMI, R., MOSTOUFI, N., BLAIS, B.
y KUIPERS, J.A.M., 2020. *Review and implementation of CFD-DEM applied to chemical
process systems*. 10 agosto 2020. S.l.: Elsevier Ltd.
- GOOGLE MAPS, 2022. Escuela Superior Politécnica de Chimborazo. *Google* [en línea].
[consulta: 6 noviembre 2022]. Disponible en:
<https://www.google.com.ec/maps/place/Escuela+Superior+Politécnica+de+Chimborazo/@>

[-1.659909,-](#)

[78.680228,16.75z/data=!4m5!3m4!1s0x91d307c252930ed9:0x6ad1a526f47e5b0c!8m2!3d-1.656735!4d-78.6782735?hl=es.](#)

HARRIS, C., ROEKAERTS, D., BUITENDIJK, F., DASKOPOULOS, P., VREENEGOOR, A. y WANG, H., 1996. Computational Fluid Dynamics for Chemical Reactor Engineering. *Chemical Engineering Science*. S.l.:

JIANG, J., WU, H., NI, L. y ZOU, M., 2018. CFD simulation to study batch reactor thermal runaway behavior based on esterification reaction. *Process Safety and Environmental Protection*, vol. 120, ISSN 09575820. DOI 10.1016/j.psep.2018.08.029.

KHALIL, E.E., 2009. CFD History and Applications. *Khalil CFD Letters*. S.l.:

KHAN, Z., JAVED, F., SHAMAIR, Z., HAFEEZ, A., FAZAL, T., ASLAM, A., ZIMMERMAN, W.B. y REHMAN, F., 2021. Current developments in esterification reaction: A review on process and parameters. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 103, ISSN 22345957. DOI 10.1016/j.jiec.2021.07.018.

KIDAM, K. y HURME, M., 2013. Analysis of equipment failures as contributors to chemical process accidents. *Process Safety and Environmental Protection*, vol. 91, no. 1-2, ISSN 09575820. DOI 10.1016/j.psep.2012.02.001.

KUIPERS, J.A.M. y VAN SWAAIJ, W.P.M., 1998. COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS APPLIED TO CHEMICAL REACTION ENGINEERING. S.l.:

KUMMER, A., VARGA, T. y NAGY, L., 2020. Semi-batch reactor control with NMPC avoiding thermal runaway. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 134, ISSN 00981354. DOI 10.1016/j.compchemeng.2019.106694.

LIU, H., LI, S., ZHENG, Z., XU, J. y YAO, M., 2013. Effects of n-butanol, 2-butanol, and methyl octynoate addition to diesel fuel on combustion and emissions over a wide range of exhaust gas recirculation (EGR) rates. *Applied Energy*, vol. 112, ISSN 03062619. DOI 10.1016/j.apenergy.2013.06.023.

- MARCHETTI, J.M. y ERRAZU, A.F., 2008. Comparison of different heterogeneous catalysts and different alcohols for the esterification reaction of oleic acid. *Fuel*, vol. 87, no. 15-16, ISSN 00162361. DOI 10.1016/j.fuel.2008.05.011.
- MILEWSKA, A., RUDNIAK, L. y MOLGA, E., 2005. CFD Modelling and Divergence Criterion for Safety of Chemical Reactors. . S.I.:
- NIENOW, A.W., 2014. *Stirring and stirred-tank reactors*. 1 diciembre 2014. S.I.: Wiley-VCH Verlag.
- PFAFF, T., FORTUNATO, M., SANCHEZ-GONZALEZ, A. y BATTAGLIA, P.W., 2020. Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks. [en línea], Disponible en: <http://arxiv.org/abs/2010.03409>.
- RIZAL, S., MISTAR, E.M., OYEKANMI, A.A., ABDUL KHALIL, H.P.S., ALFATAH, T., OLAIYA, N.G. y ABDULLAH, C.K., 2021. Propionic anhydride modification of cellulosic kenaf fibre enhancement with bionanocarbon in nanobiocomposites. *Molecules*, vol. 26, no. 14, ISSN 14203049. DOI 10.3390/molecules26144248.
- ROHMAN, F.S., SATA, S.A. y AZIZ, N., 2019. Online dynamic optimization studies of autocatalytic esterification in the semi batch reactor for handling disturbance and uncertainty. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 129, ISSN 00981354. DOI 10.1016/j.compchemeng.2019.106516.
- RUDNIAK, L., MACHNIEWSKI, P.M., MILEWSKA, A. y MOLGA, E., 2004. CFD modelling of stirred tank chemical reactors: Homogeneous and heterogeneous reaction systems. *Chemical Engineering Science*. S.I.: s.n., pp. 5233-5239. vol. 59. DOI 10.1016/j.ces.2004.09.014.
- RUDNIAK, L., MILEWSKA, A. y MOLGA, E., 2011. CFD simulations for safety of chemical reactors and storage tanks. *Chemical Engineering and Technology*, vol. 34, no. 11, ISSN 09307516. DOI 10.1002/ceat.201100128.
- RUSSMAYER, H., MARX, H. y SAUER, M., 2019. Microbial 2-butanol production with *Lactobacillus diolivorans*. *Biotechnology for Biofuels*, vol. 12, no. 1, ISSN 17546834. DOI 10.1186/s13068-019-1594-5.

SCHWOLOW, S., KO, J.Y., KOCKMANN, N. y RÖDER, T., 2016. Enhanced heat transfer by exothermic reactions in laminar flow capillary reactors. *Chemical Engineering Science*, vol. 141, ISSN 00092509. DOI 10.1016/j.ces.2015.11.022.

SHEN, R., JIAO, Z., PARKER, T., SUN, Y. y WANG, Q., 2020. *Recent application of Computational Fluid Dynamics (CFD) in process safety and loss prevention: A review*. 1 septiembre 2020. S.l.: Elsevier Ltd.

SOFTWARE CFD, 2023. *Software CFD*. 2023. S.l.: s.n.

XU, S., XU, F., KOMMAJOSULA, A., HSU, M.C. y GANAPATHYSUBRAMANIAN, B., 2019. Immersogeometric analysis of moving objects in incompressible flows. *Computers and Fluids*, vol. 189, ISSN 00457930. DOI 10.1016/j.compfluid.2019.05.018.

ZHONG, W., YU, A., ZHOU, G., XIE, J. y ZHANG, H., 2016. *CFD simulation of dense particulate reaction system: Approaches, recent advances and applications*. 2 febrero 2016. S.l.: Elsevier Ltd.

ANEXOS

ANEXO A: CÁLCULOS DE VISCOCIDAD DINÁMICA DEL 2-BUTANOL

2- butanol de masa molar $74.123 \frac{g}{mol}$ y densidad $\rho = 808 \frac{kg}{m^3}$

2-butanol ($\frac{v}{v}\%$)	Densidad ($\frac{kg}{m^3}$)	Viscosidad ($mm^2 s^{-1}$)
90	806.6	3.4132
x	808	y
100	814.1	4.1482

- Interpolación

$$y = 3.4132 + \frac{4.1482 - 3.4132}{814.1 - 806.6} (808 - 806.6)$$
$$y = 3.5504 mm^2 s^{-1}$$

- Conversión a *cst* y posteriormente a *poise*

$$3.5504 mm^2 s^{-1} \left(\frac{1 cst}{1 mm^2 s^{-1}} \right) = 3.5504 cst$$
$$\left(\frac{3.5504 cst \times 808 \frac{kg}{m^3}}{100} \right) = 2.8687 poise$$

- Conversión a $Pa \times s$

$$2.8687 poise \left(\frac{0.1 Pa \times s}{1 poise} \right) = 0.2868 Pa \times s$$

ANEXO B: CÁLCULOS DE VISCOSIDAD DINÁMICA DEL ANHÍDRIDO PROPANOICO

Anhídrido propanoico de masa molar $130.14 \frac{g}{mol}$ y densidad $\rho = 1015 \frac{kg}{m^3}$ a una temperatura de $20^\circ C$

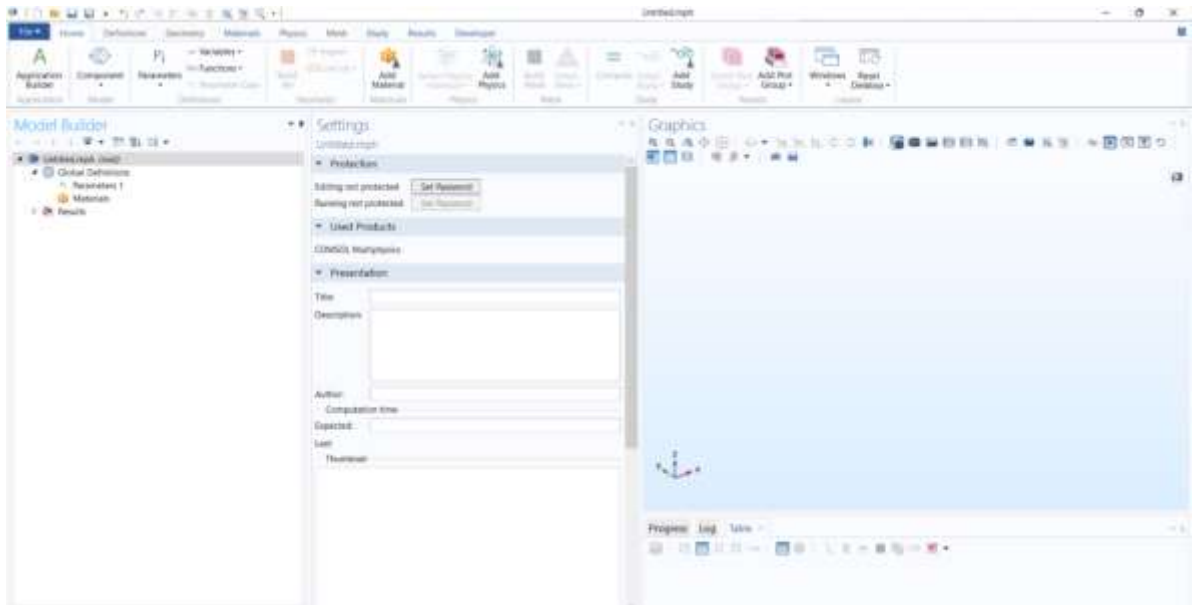
- Conversión a *poise*

$$1.144 \text{ cP} \left(\frac{0.01 \text{ poise}}{1 \text{ cP}} \right) = 0.01144 \text{ poise}$$

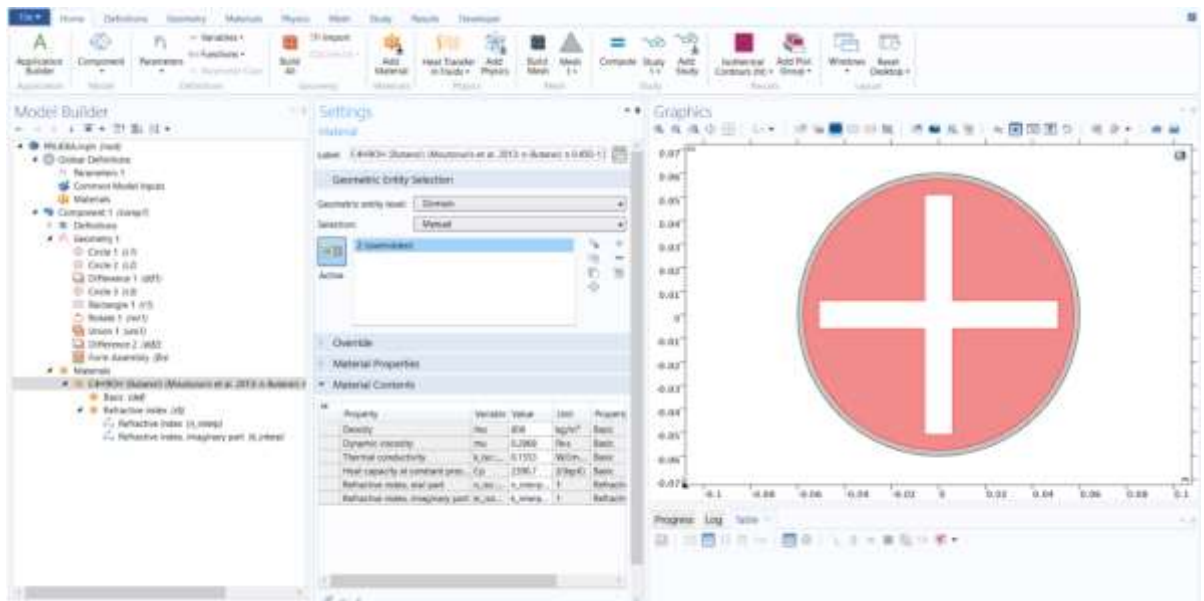
- Conversión a $Pa \times s$

$$0.01144 \text{ poise} \left(\frac{0.1 \text{ Pa} \times s}{1 \text{ poise}} \right) = 0.001144 \text{ Pa} \times s$$

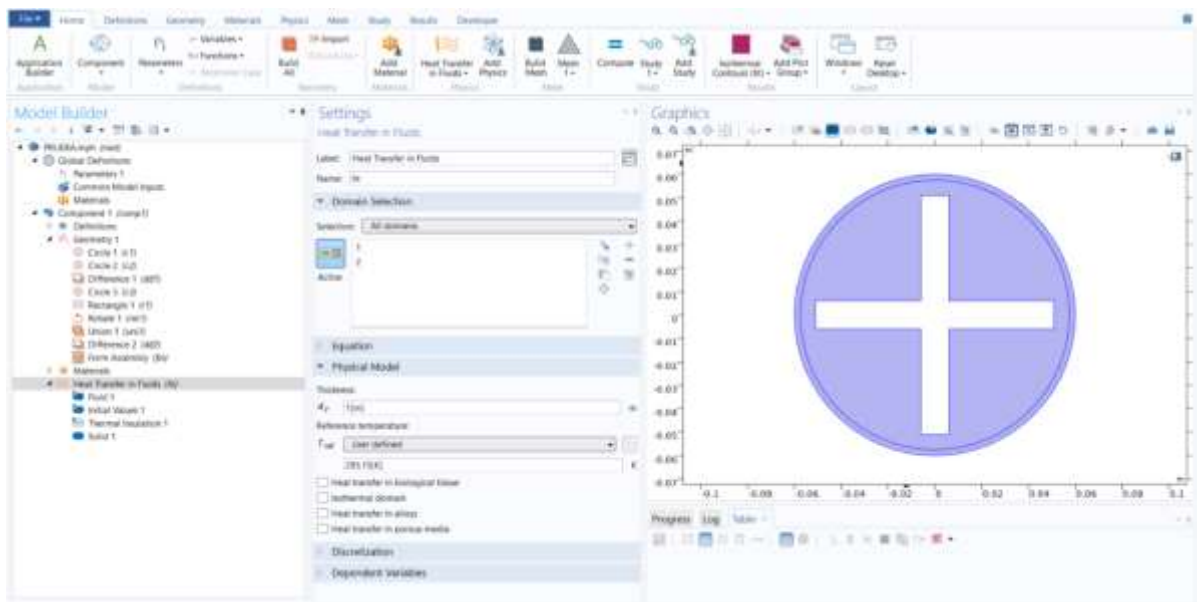
ANEXO C: INTERFAZ DEL SOFTWARE CFD



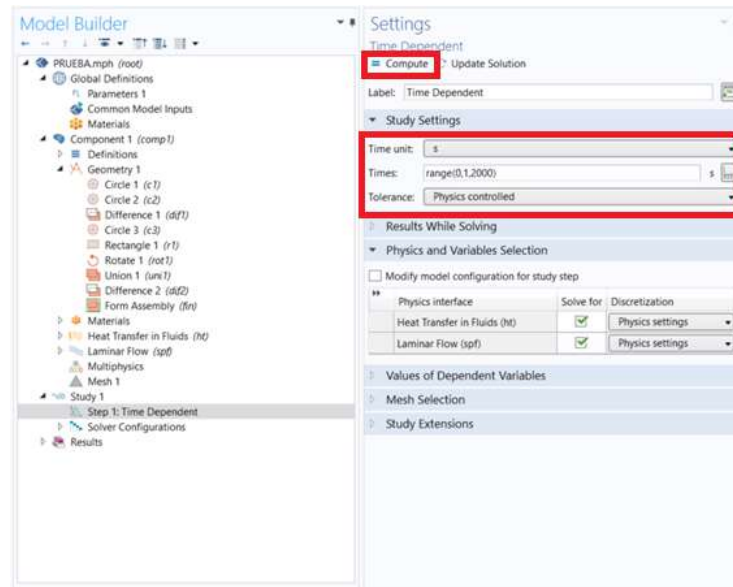
ANEXO D: ADICIÓN, EN MODELADO 1D, DEL 2-BUTANOL CON SUS RESPECTIVOS VALORES DE PROPIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS



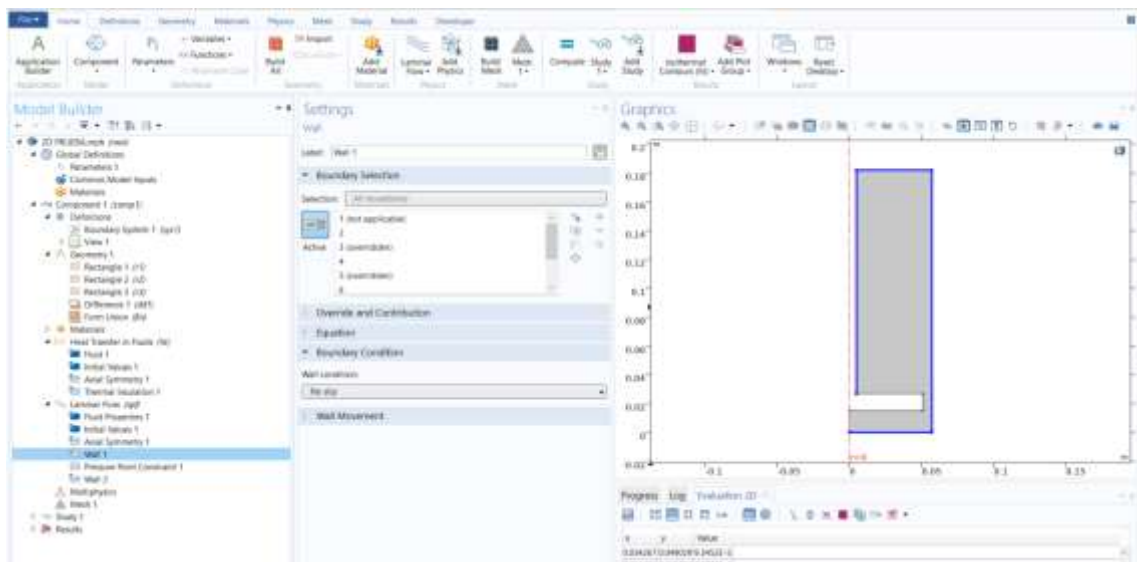
ANEXO E: INCORPORACIÓN LOS FENÓMENOS FÍSICOS Y QUÍMICOS



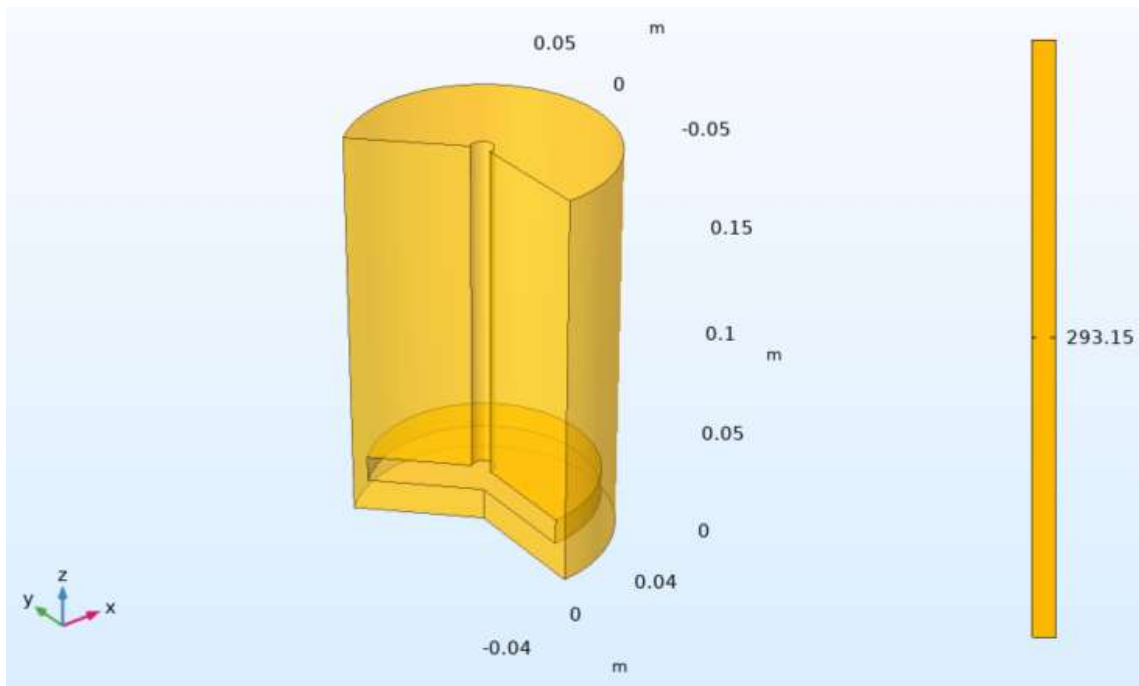
ANEXO F: DETERMINACIÓN DE LOS RANGOS DE TIEMPO EN EL MODELADO 1D



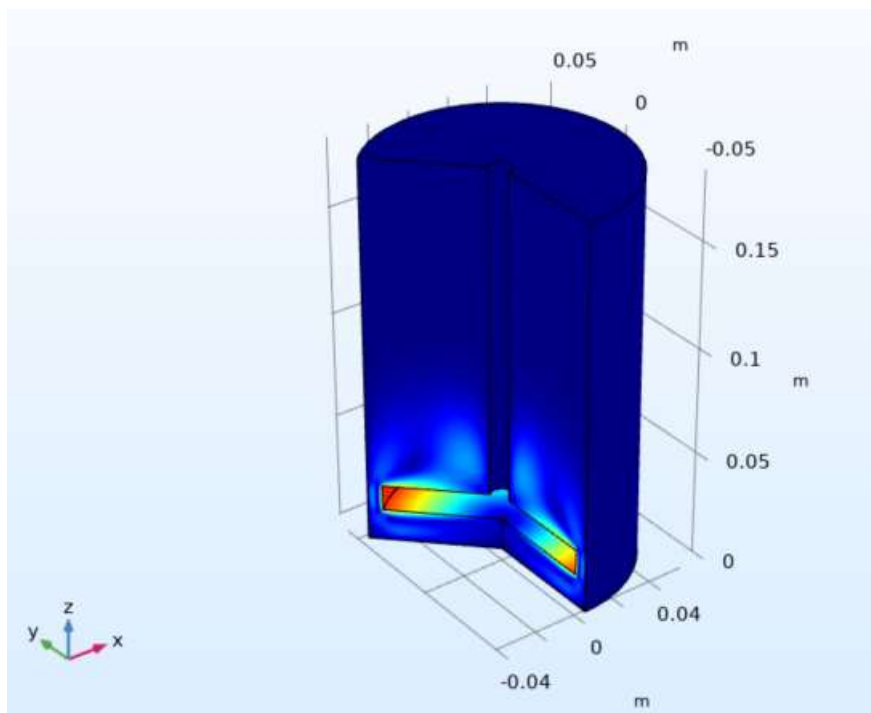
ANEXO G: DEFINICIÓN DE LOS LIMITES DEL SISTEMA EN EL MODELADO 2D



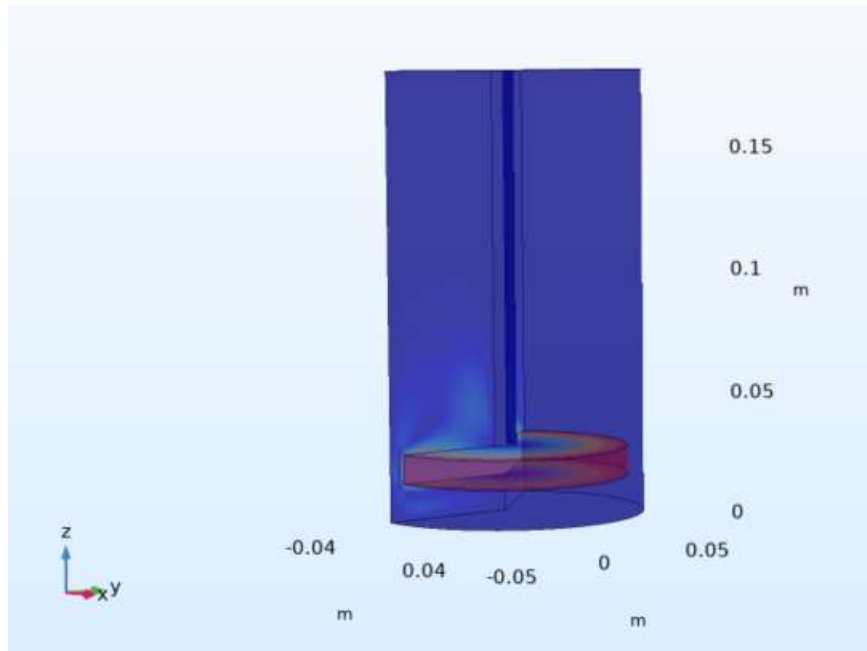
ANEXO H: MODELADO 3D PREVIO A LA INCORPORACION DEL FENÓMENO DE TRANSFERENCIA DE CALOR



ANEXO I: MODELADO 3D



ANEXO J: MODELADO 3D VISTA TRASERA





epoch

Dirección de Bibliotecas y
Recursos del Aprendizaje

UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y DOCUMENTAL

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 8 / 03 / 2024

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Patricio Giovanny Santacruz Solis
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniero Químico
f. Analista de Biblioteca responsable: Ing. Rafael Inty Salto Hidalgo

2066-DBRA-UTP-2023