



ESTUDIO DE NITRACION DE PETN EN REACTOR CONTINUO

Héctor Castro Estay

Tutor: Juan Manuel Paz García

24 de Junio de 2021



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| uma.es

Máster Propio Universitario en Simulación Numérica en Ciencia e Ingeniería con COMSOL Multiphysics



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| **uma.es**



Contenido

- Introducción
- Objetivos
- Proceso Nitración
- Modelamiento y Simulación
- Resultados
- Conclusiones
- Trabajos Futuros



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| uma.es



INTRODUCCION



INTRODUCCION

- El presente TFM estudia el proceso de nitración de PETN (Trinitato de Pentaeritritol)
- El PETN es un explosivo secundario de alta potencia.
- Es utilizado para la manufactura de productos para la industria minera: Detonadores, Booster y cordón detonante.





INTRODUCCION



Detonador

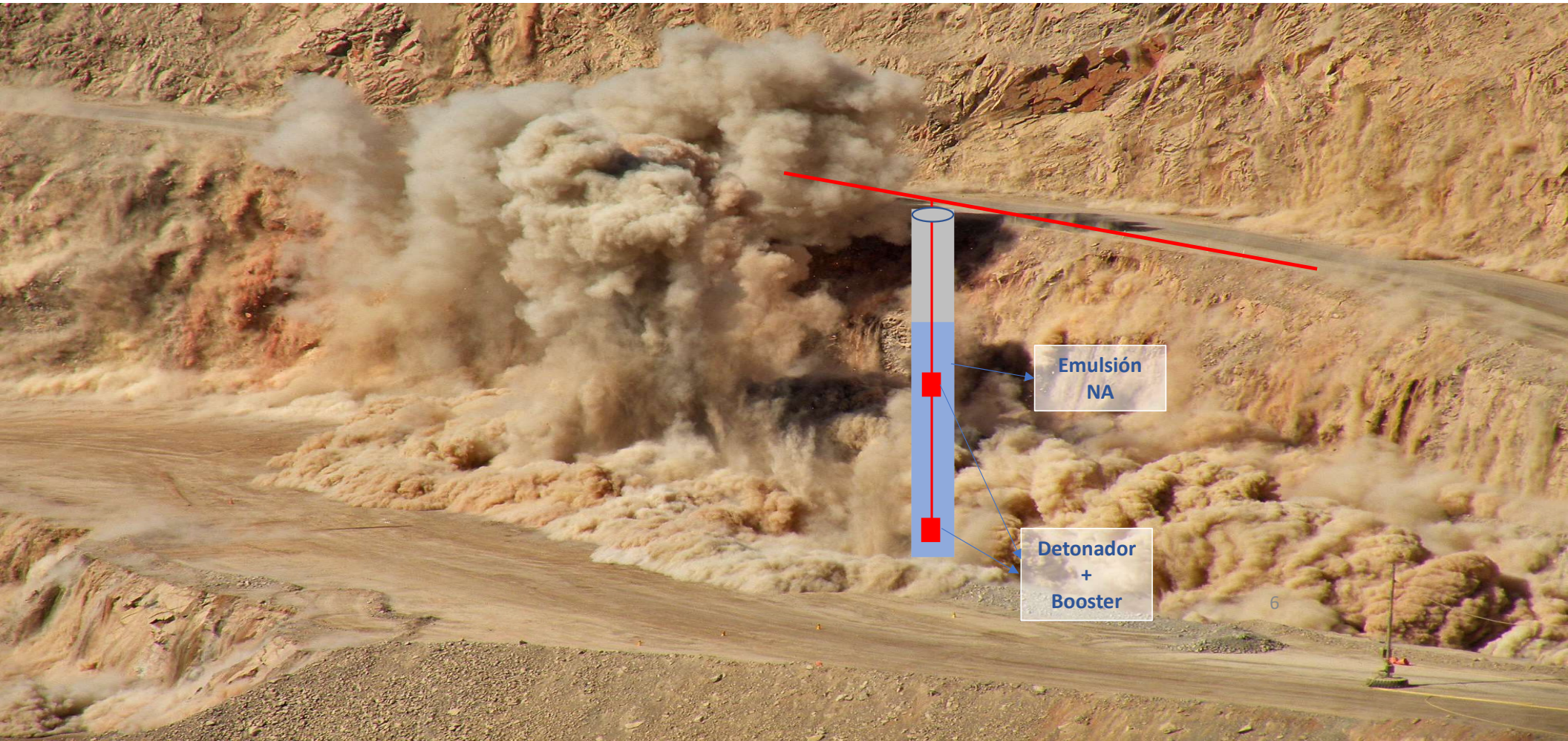


Booster
TNT+PETN



Cordón Detonante

Productos manufacturados con PETN y utilizados en la industria minera.





Importancia de la Minería en Chile

- La minería es la principal industria en Chile
- 1er productor de Cobre
- 2do productor de Molibdeno
- 6to productor de Plata
- Representa aprox el 20% PIB Nacional



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| uma.es



OBJETIVOS



OBJETIVOS

- Conocer la evolución de la reacción química, concentración y temperatura.
- Conocer la energía a retirar del proceso para mantenerlo estable.
- Conocer la dinámica de fluidos de reactor 3D
- Estimar velocidad de rotación de agitador
- Estimar temperatura de chaqueta de enfriamiento



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| uma.es



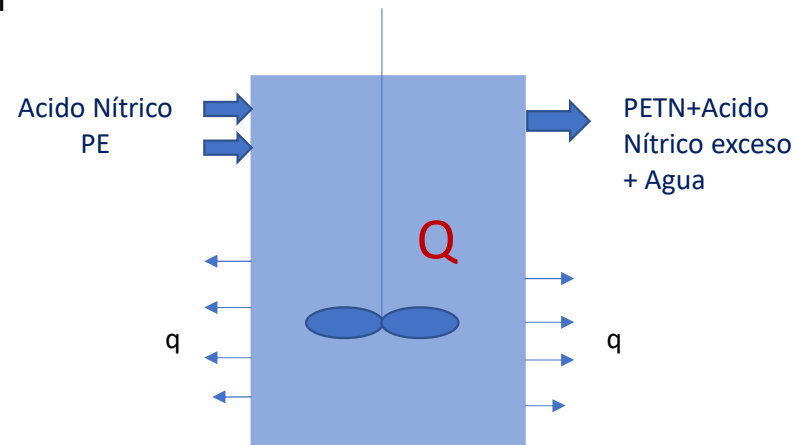
PROCESO DE NITRACION



NITRACION



PE: Pentaeritritol





UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| **uma.es**

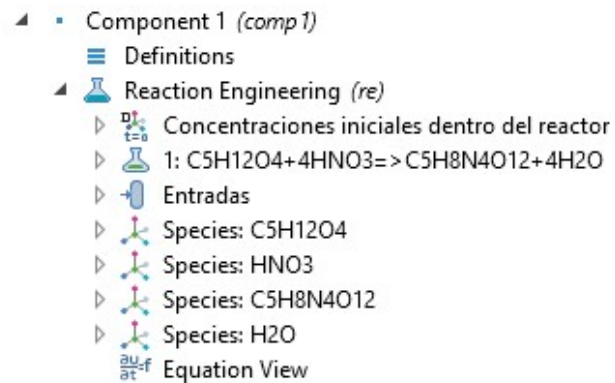


MODELAMIENTO Y
SIMULACION
*
REACCION QUIMICA



REACCION QUIMICA

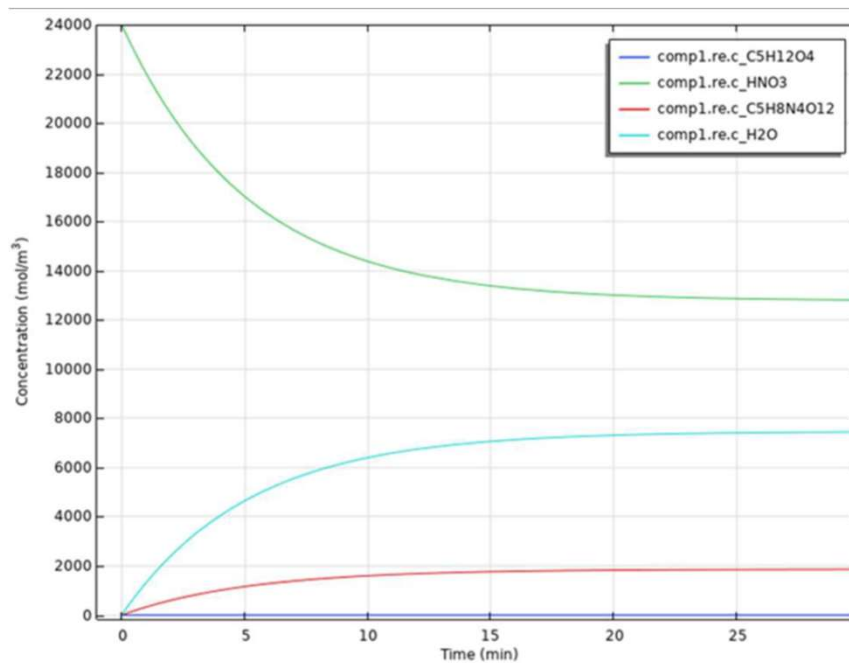
- Se utiliza la física *Reaction Engineering* para simular la reacción química en 0D.
- Se adopta el reactor tipo: *CSTR, constant volumen*
 - *CSTR= Continuous Stirred Tank Reactor*
- Condiciones no isotérmicas





RESULTADOS

Concentración de Especies

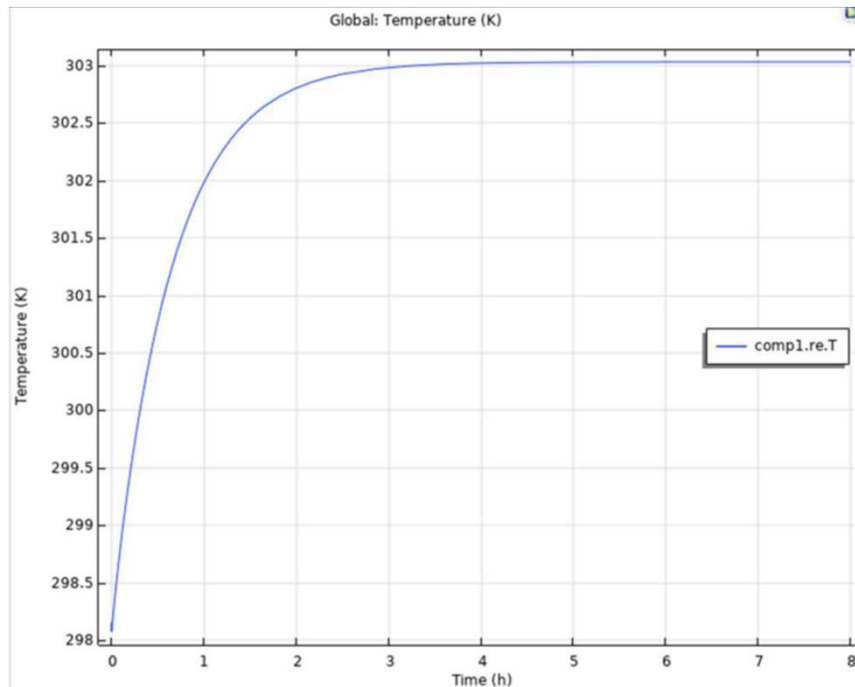


- Se alcanza una estabilidad después de 25 min.
- PE se consume 100% a medida que ingresa al reactor.
- Acido nítrico se consume hasta llegar a una concentración de 82% aprox.



RESULTADOS

Temperatura de reacción



- La temperatura se estabiliza en 303 K=30°C
- Para mantener esta estabilidad en la temperatura, es necesario enfriar con una capacidad de **5018,8 W**.



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| **uma.es**



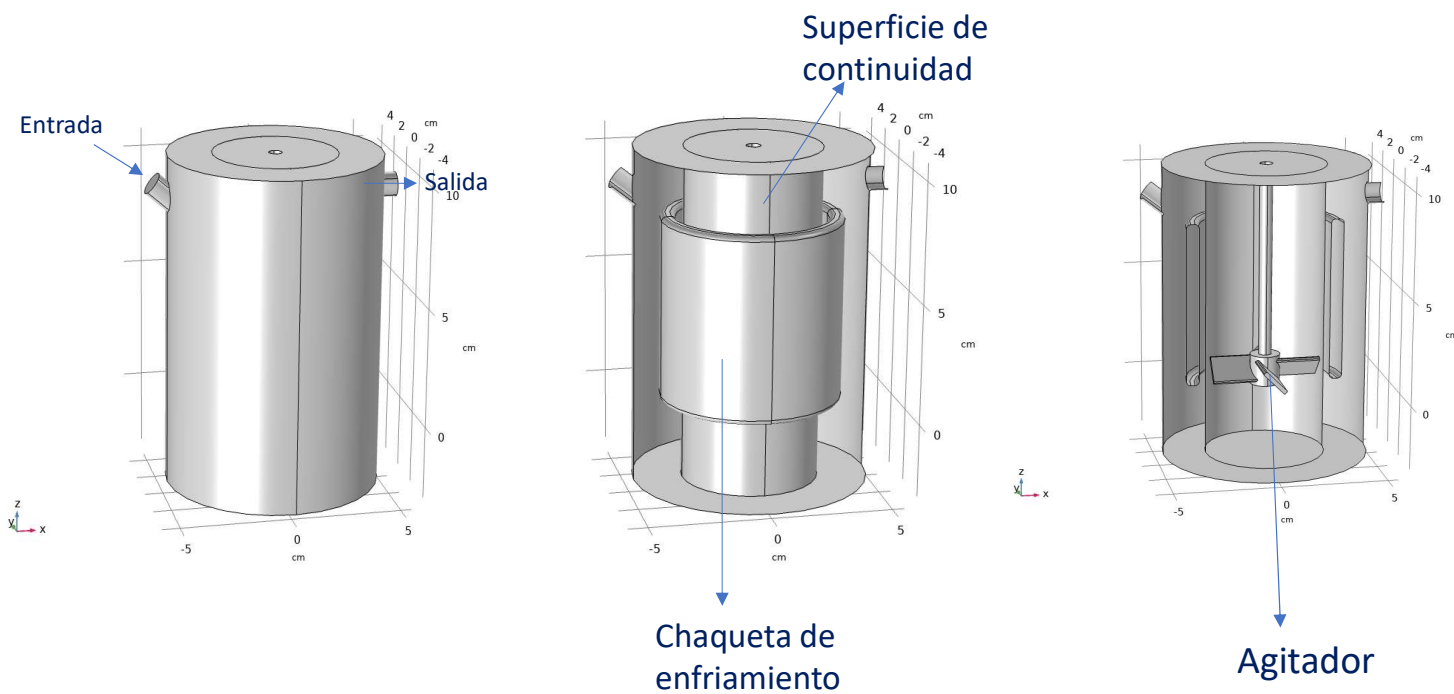
MODELAMIENTO Y SIMULACION

*

DINAMICA DE FLUIDOS Y TRANSFERENCIA DE CALOR



GEOMETRIA Estanque Reactor





FÍSICAS

- Turbulent Flow, Algebraic yPlus

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] + \mathbf{F}$$
$$\rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\mathbf{K} = (\mu + \mu_T)(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)$$

$$Re_w = \frac{\rho|u|l_w}{\mu} = \frac{|u|}{u_\tau} \cdot \frac{\rho u_\tau l_w}{\mu} = u^+ l_w^+,$$

$$u^+ = f(l_w^+)$$

$$\nabla G \cdot \nabla G + \sigma_w G (\nabla \cdot \nabla G) = (1 + 2\sigma_w)G^4,$$

$$l_w = \frac{1}{G} - \frac{l_{ref}}{2}$$

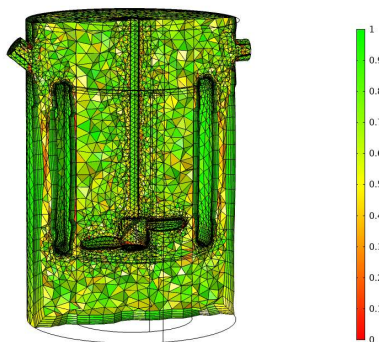
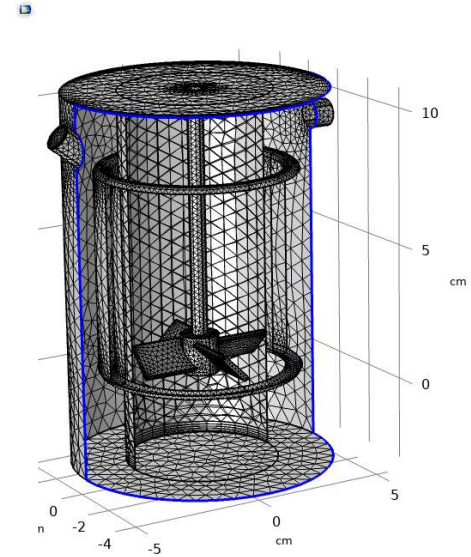
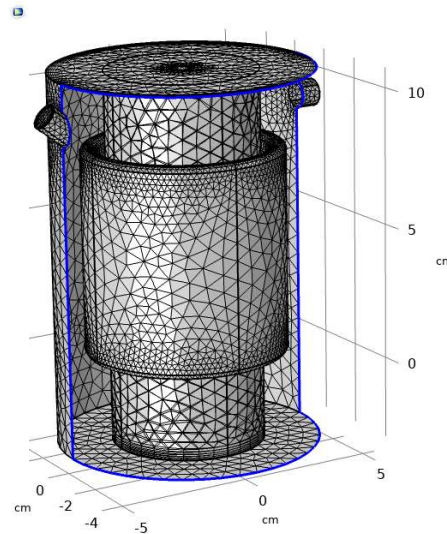
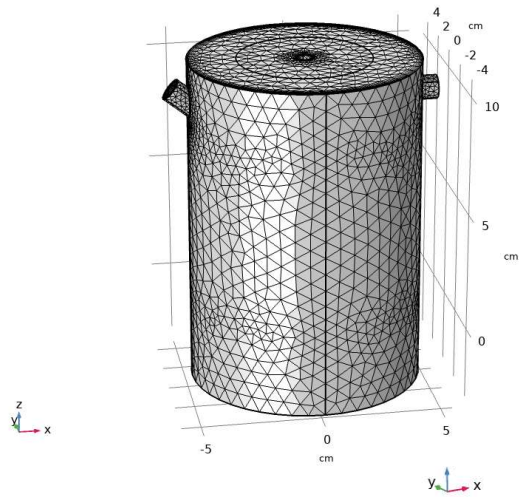
- Heat Transfer in Fluids

$$\rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q + Q_p + Q_{vd}$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla T$$



MALLA



Malla	Nº de Elementos
Coarser	119.721
Coarse	256.541
Normal	795.788



ESTUDIOS

- Study 1 solo CFD estacionario
 - Parametric Sweep → Parametric sweep: 100, 200 y 300 rpm
 - Step 1: Wall Distance Initialization
 - Step 2: Frozen Rotor
 - Solver Configurations
 - Job Configurations
- Study 2 solo TCalor estacionario → Parametric sweep: range (260,1,275) °K
 - Parametric Sweep
 - Step 1: Stationary
 - Solver Configurations
 - Job Configurations

Malla	Turbulent Flow, Algebraic yPlus	Heat Transfer in Fluids
Coarser	1h 34min 25s	14s
Coarse	2h 39min 18s	2min 40s
Normal	22h 26min 42s	25min 45s

Laptop i7-9850H, 2,6GHz



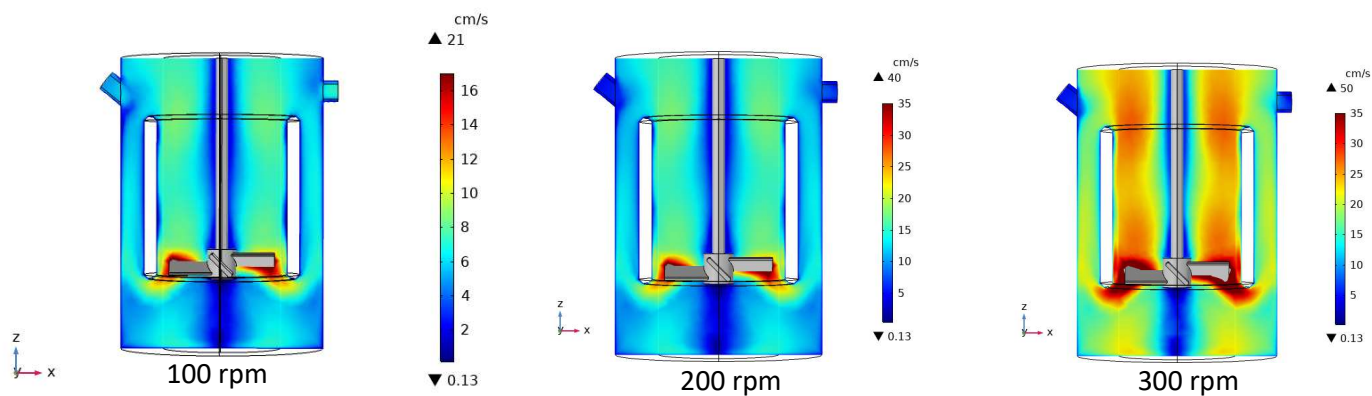
UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| **uma.es**



RESULTADOS

RESULTADOS DINAMICA DE FLUIDOS

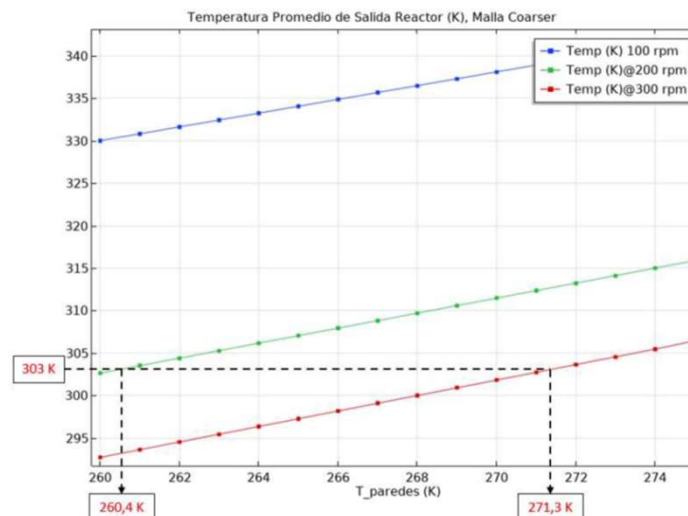
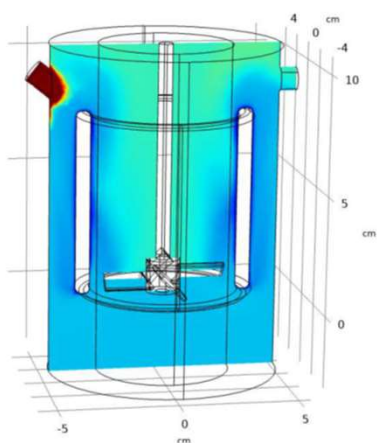


Velocidad fluido promedio

Velocidad de Rotación	Malla Coarser cm/s	Malla Coarse cm/s	Malla Normal cm/s
100 rpm	6,3	7	7,4
200 rpm	13,1	14,7	16
300 rpm	20,3	22,7	24,7

} Valores aun no convergen

RESULTADOS TRANSFERENCIA DE CALOR



Temperatura superficial necesaria en chaqueta

Velocidad de Rotación	Malla Coarser K	Malla Coarse K	Malla Normal K
100 rpm	<260	<260	<255
200 rpm	260,4	<260	<255
300 rpm	271,3	266,4	258,3



CONCLUSIONES

Generales

- Cuidado con datos de Entrada
- Conocer la teoría
- Interfaz de reacción química muy útil
- Resultados sensibles a la malla, se debe confirmar convergencia de resultados

Particulares al Diseño

- Se recomienda instalar baffles para mejorar turbulencia y romper circulación.
- Se recomienda aumentar área de transferencia para aumentar temperatura de chaqueta de calefacción.



TRABAJOS FUTUROS

- Continuar con refinamiento de malla hasta que solución converga.
- Utilizar resultados para incorporar otro modelo de turbulencia, tal como, Low Reynold ke.
- Incorporar estudio multifásico fluido-partícula.
- Acoplar estudio de reacción química al estudio 3D.

MUCHAS GRACIAS



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| uma.es



Addlink
Software Científico

 **COMSOL**