

**UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ**

**Colegio de Ciencias e Ingeniería**

**Desarrollo de un microreactor fotoquímico de bajo costo impreso en  
3D con un control de temperatura incorporado**

**Juan Martin Aguas Mogrovejo**

**Ingeniería Química**

Trabajo de fin de carrera presentado como requisito  
para la obtención del título de Ingeniería Química

Quito, 25 de mayo de 2021

# **UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ**

**Colegio de Ciencias e Ingeniería**

## **HOJA DE CALIFICACIÓN DE TRABAJO DE FIN DE CARRERA**

**Desarrollo de un microreactor fotoquímico de bajo costo impreso en 3D  
con un control de temperatura incorporado**

**Juan Martin Aguas Mogrovejo**

**Nombre del profesor, Título académico**

**Sebastián Ponce, Ph. D.**

**Nombre del profesor, Título académico**

**Juan Diego Fonseca, Ph. D.**

Quito, 25 de mayo de 2021

## © DERECHOS DE AUTOR

Por medio del presente documento certifico que he leído todas las Políticas y Manuales de la Universidad San Francisco de Quito USFQ, incluyendo la Política de Propiedad Intelectual USFQ, y estoy de acuerdo con su contenido, por lo que los derechos de propiedad intelectual del presente trabajo quedan sujetos a lo dispuesto en esas Políticas.

Asimismo, autorizo a la USFQ para que realice la digitalización y publicación de este trabajo en el repositorio virtual, de conformidad a lo dispuesto en la Ley Orgánica de Educación Superior del Ecuador.

Nombres y apellidos: Juan Martin Aguas Mogrovejo

Código: 00118650

Cédula de identidad: 1716720360

Lugar y fecha: Quito, 25 de mayo de 2021

## **ACLARACIÓN PARA PUBLICACIÓN**

**Nota:** El presente trabajo, en su totalidad o cualquiera de sus partes, no debe ser considerado como una publicación, incluso a pesar de estar disponible sin restricciones a través de un repositorio institucional. Esta declaración se alinea con las prácticas y recomendaciones presentadas por el Committee on Publication Ethics COPE descritas por Barbour et al. (2017) Discussion document on best practice for issues around theses publishing, disponible en <http://bit.ly/COPETHeses>.

## **UNPUBLISHED DOCUMENT**

**Note:** The following capstone project is available through Universidad San Francisco de Quito USFQ institutional repository. Nonetheless, this project – in whole or in part – should not be considered a publication. This statement follows the recommendations presented by the Committee on Publication Ethics COPE described by Barbour et al. (2017) Discussion document on best practice for issues around theses publishing available on <http://bit.ly/COPETHeses>.

## RESUMEN

Los microreactores mejoran la eficiencia, selectividad, conversión y rendimiento de los procesos químicos a comparación de medios de reacción convencionales. Adaptar estos microsistemas a cadenas de manufactura masiva exige un alto grado de especialización industrial, aumentando significativamente los costos por equipo, y limitando el estudio de reacciones y síntesis de materiales. Mediante la adaptación de procesos de manufactura aditiva es posible generar microreactores plásticos altamente personalizables, pero con ineficiencias en transferencia de calor. En este proyecto se adaptan procesos de manufactura aditiva por medio de filamentos de PLA con el propósito de diseñar un microreactor de bajo costo con un sistema de control de temperatura que sofoque los problemas de transferencia de calor en una fotorreacción. Mediante el uso del modelado y simulación computacional, se modificaron una serie de prototipos de microreactores en los cuales se evaluó distintos métodos de calentamiento. Debido a las condiciones de flujo, la mayoría de los prototipos mostraron resultados aceptables de calentamiento, diferenciados únicamente por la facilidad de implementación de sus sistemas de control de temperatura. Este proyecto muestra a la impresión 3D como una alternativa para la manufactura de microreactores plásticos; sin embargo, las condiciones de reacción y temperatura máxima del medio están limitadas por las propiedades de los materiales que conforma al microreactor. El campo de la tecnología de manufactura aditiva está en etapas de desarrollo tempranas, aun con muchas limitaciones técnicas; este trabajo presenta la base de diseño la cual puede optimizarse con estas tecnologías en un futuro.

**Palabras clave:** impresión 3D, simulación computacional, microsistemas, calentamiento, modelado computacional, fotorreacción, software, SolidWorks.

## ABSTRACT

Microreactors improve the efficiency, selectivity, yield, and performance of chemical processes compared to conventional reaction media. The adaptation of these microsystems to mass-manufacturing chains entails a high degree of industrial specialization; this significantly increases equipment costs, greatly limiting the study of reactions and synthesis of materials using microreactors. However, by adapting additive manufacturing processes, it is possible to generate highly customizable plastic microreactors, but with an inefficient heat transfer. This project seeks to adapt additive manufacturing processes using PLA as a thermoformable filament to manufacture a low-cost microreactor coupled with a temperature control system that quells heat transfer problems in a photoreaction environment. Using computational modeling and simulations, a series of microreactor prototypes were modified in which different heating methods were evaluated. Due to the flow conditions of the microreactors, most of the models showed acceptable heating, differentiated only by the ease of implementation of their heating control systems. This project shows the feasibility of 3D-printing as a low-cost method for the manufacture of highly customizable microreactors. However, the reaction conditions and maximum temperature of the medium are limited by the properties of the materials that make up the reactors. The field of additive manufacturing technology is in the early stages of development, even with many technical limitations; this work presents the design basis which can be optimized with these technologies in the future.

**Key words:** 3D-printing, computer simulation, microsystems, heating, computer modeling, photoreaction, software, SolidWorks.

## TABLA DE CONTENIDO

Resumen.....	5
Abstract.....	5
Capítulo 1: Introducción .....	12
1.1 Antecedentes .....	12
1.2 Justificación del proyecto .....	13
1.3 Objetivo general.....	14
1.4 Objetivos Específicos.....	14
1.5 Resultados esperados .....	14
Capítulo 2: Fundamentos TEÓRICOS.....	16
2.1 Principios fundamentales.....	16
2.1.1 Parámetros fluídicos importantes.....	16
2.1.2 Ecuación de Navier – Stokes .....	17
2.2 Sistemas microfluídicos.....	18
2.2.1 Modos de transporte.....	18
2.2.2 Geometrías características .....	20
2.2.3 Características generales de los microreactores.....	22
2.2.4 Materiales para la manufactura y construcción de microreactores .....	23
2.3 Manufactura aditiva .....	24
2.4 Software de modelado (SolidWorks).....	24
2.5 Consideraciones generales del sistema .....	25
2.6 Modelos de microreactores desarrollados.....	26
2.7 Limitaciones del sistema.....	27
Capítulo 3: Resultados del proceso de diseño.....	29
3.1 Modelo base (MB) .....	29
3.1.1 Prototipo de tuberías transversales (TT).....	30
3.1.2 Prototipo Peltier a contacto directo (PCD) .....	33
3.1.3 Prototipo Peltier a contacto indirecto (PCI).....	35
3.1.4 Prototipo baño de agua (BA) .....	38
3.2 Consideraciones de precalentado.....	40
Capítulo 4: DEFINICIÓN del prototipo final.....	43
4.1 Consideraciones generales de los prototipos .....	43
4.2 Prototipo final (PF) .....	46
4.3 Ensamblaje final.....	47

Capítulo 5: Conclusiones y recomendaciones .....	49
Capítulo 6: Referencias.....	51
Agradecimientos .....	55
Capítulo 7: Anexo A - Metodologías de modelado y simulación.....	56
7.1 Modelado de los prototipos.....	56
7.1.1 Modelado detallado MB .....	56
7.1.2 Modelado detallado TT .....	58
7.1.3 Modelado detallado PCI y PCD.....	59
7.1.3 Modelado detallado BA .....	60
7.2 Metodología de la simulación .....	61
Capítulo 8: Anexo B - Resultados .....	65

## ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.- Técnicas de fabricación de acuerdo con el material implementado. ....	23
Tabla 2.- Conductividad térmica de los materiales implementados .....	26
Tabla 3.- Temperaturas máximas y de salida del reactor de los prototipos a 1 ml h <sup>-1</sup> .....	40
Tabla 4.- Temperaturas máximas y de salida del reactor de los prototipos a 100 ml h <sup>-1</sup> .....	40
Tabla 5.- Temperaturas máximas y de salida del reactor de los prototipos a 100 ml h <sup>-1</sup> .....	47

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.- Perspectiva general de un microcanal. ....	21
Figura 2.- Perfiles comunes de cavidades en microsistemas. ....	22
Figura 3.- Modelado computacional del MB con sus respectivas dimensiones en milímetros. ....	29
Figura 4.- Modelado computacional del prototipo TT. ....	30
Figura 5.- Simulación computacional del prototipo TT a 1 ml h <sup>-1</sup> . ....	31
Figura 6.- Simulación computacional del prototipo TT a 100 ml h <sup>-1</sup> . ....	32
Figura 7.- Modelado computacional del prototipo PCD. ....	33
Figura 8.- Simulación computacional del prototipo PCD a 1 ml h <sup>-1</sup> . ....	33
Figura 9.- Simulación computacional del prototipo PCD 100 ml h <sup>-1</sup> . ....	34
Figura 10.- Modelado computacional del prototipo PCI. ....	35
Figura 11.- Simulación computacional del prototipo PCI 1 ml h <sup>-1</sup> . ....	36
Figura 12.- Simulación computacional del prototipo PCI 100 ml h <sup>-1</sup> . ....	37
Figura 13.- Modelado computacional del prototipo BA. ....	38
Figura 14.- Simulación computacional del prototipo BA a 1 ml h <sup>-1</sup> . ....	39
Figura 15.- Simulación computacional del prototipo BA a 100 ml h <sup>-1</sup> . ....	39
Figura 16.- Modelado computacional de canalizaciones de cobre en serpentín. ....	41
Figura 17.- Simulación computacional de canalizaciones de cobre en serpentín a 100 ml h <sup>-1</sup> . ....	42
Figura 18.- Simulación computacional del prototipo PF a 1 ml h <sup>-1</sup> . ....	46
Figura 19.- Simulación computacional del prototipo PF a 100 ml h <sup>-1</sup> . ....	46

## ÍNDICE DE FIGURAS ANEXO

Figura 20.- Herramienta “Sketch”.....	56
Figura 20.- “Fillet” de las canalizaciones del microreactor.....	56
Figura 21.- Modelado computacional del MB.....	57
Figura 22.- Modelado computacional del MB.....	57
Figura 22.- Circunferencia lateral del modelo TT.....	58
Figura 23.- Trayecto de la tubería del modelo TT.....	58
Figura 24.- Generación de las canalizaciones del modelo TT.....	59
Figura 25.- Celdas Peltier modeladas en SolidWorks.....	59
Figura 26.- Opción de ensamblaje de la pieza en SolidWorks.....	60
Figura 27.- Ensamblaje computacional del prototipo PCD.....	60
Figura 28.- Tina de agua.....	61
Figura 29.- Ensamblaje computacional del prototipo BA.....	61
Figura 30.- Opción de creación de tapas en SolidWorks.....	62
Figura 31.- Opción de determinación de los dominios del fluido.....	62
Figura 32.- Opción de determinación de las condiciones de borde en SolidWorks.....	63
Figura 33.- Cara interior de las tapas generadas en SolidWorks.....	63
Figura 34.- Determinación de las metas del sistema en SolidWorks.....	63
Figura 35.- Opción de generación de calor en SolidWorks.....	64
Figura 36.- Puntos de temperatura máxima a condiciones de flujo mínimo y máximo para el prototipo TT.....	65
Figura 37.- Puntos de temperatura máxima a condiciones de flujo mínimo y máximo para el prototipo PCD.....	66
Figura 38.- Puntos de temperatura máxima a condiciones de flujo mínimo y máximo para el prototipo PCI.....	67
Figura 39.- Puntos de temperatura máxima a condiciones de flujo mínimo y máximo para el prototipo BA.....	68

## CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN

### 1.1 Antecedentes

La industria química, ha pasado por una serie de renovaciones constantes a través de las décadas; recientemente, la crisis energética y el deterioro del medio ambiente han obligado a los procesos industriales de síntesis química a optimizarse. Dentro de la química tradicional, muchas de estas optimizaciones mejoran las condiciones de reacción manejando nuevos solventes, reactantes o catalizadores. [1]

Por otra parte, desde los inicios de 1990 se ha generado un enfoque en el estudio de los procesos y los principios de los microsistemas. Estos dispositivos o microchips se caracterizan por el manejo de escalas de longitud y tiempos característicos inferiores a cientos de micrones y milisegundos. Al manejar sistemas de dimensiones tan pequeñas, el área de superficie específica aumenta, mejorando los efectos de transporte de masa y calor. Procesos se pueden realizar en secciones de canal diminutas y manteniendo un flujo continuo; además, distintas canalizaciones pueden implementarse para diferentes operaciones unitarias de mezclado, separación, reacción, detección y síntesis. Debido al espacio microscópico de estas canalizaciones, reacciones químicas se logran realizar de manera rápida. Por último, dado que las reacciones ocurren a través de un flujo unidireccional, es improbable que reactantes en el punto de partida reaccionen con los productos generando productos secundarios. En sí, la implementación de esta tecnología aumenta en gran medida la eficiencia de los procesos tradicionales reduciendo su volumen y masa [1].

Cabe recalcar que, debido a la geometría diminutiva que existen en los microsistemas, los microreactores conllevan procesos de manufactura sumamente especializados [2]. Ya que un microreactor se caracteriza por una serie de canalizaciones estrechas y maneja cantidades de volumen bajas, la síntesis de algún compuesto en cantidades considerables por medio de microreactores requiere el uso de varias unidades. Sin embargo, actualmente producir suficiente cantidad de microreactores bajo procesos de manufactura masiva en industrias tradicionales se muestra imposible, ya que se requiere un alto grado de especialización industrial acompañado de un alto costo. Por este motivo, se observa una baja disponibilidad y reproducibilidad de

microreactores, lo que limita su uso a aplicaciones académicas enfocadas al estudio de reacciones, síntesis de materiales y el enfoque de producción industrial de químicos [3].

El proceso de manufactura actualmente ha entrado en un cambio tecnológico; los nuevos métodos de manufactura pueden generar geometrías complejas que métodos tradicionales no son capaces ya que están limitados por procesos de fabricación restrictivos. En 1981, mediante técnicas de prototipado rápidas, resinas fotosensibles se polimerizaron mediante luz UV, conceptualizando el primer proceso de manufactura aditiva. Seguido, en 1988 la primera impresora de modelado por deposición de material fundido se automatizó mediante el uso de un software de controlado numérico el cual es implementado actualmente por muchas impresoras 3D [4].

Actualmente, la fabricación digital o impresión 3D genera geometrías físicas complejas al añadir capas de material de manera sucesiva. Hoy en día esta tecnología permite la personalización y producción de una serie de diseños en áreas de investigación ya sea de aviación, automovilística, salud, agricultura o ingeniería. Adaptar estos procesos de manufactura aditiva a la producción de microreactores muestra resultados favorables con respecto a su reproducibilidad y bajos costos de producción [5].

## **1.2 Justificación del proyecto**

Varios estudios ya han implementado la manufactura aditiva para la fabricación de microreactores. La gran libertad de diseño que existe dentro de estos sistemas habilita la optimización y personalización de microreactores, con la capacidad de realizar una serie de prototipos de bajo costo y consumo de materia prima, obteniendo sistemas que se logran acoplar con gran facilidad a cualquier proceso deseado. [6]

Sin embargo, dado que el material de impresión se conforma de polímeros y resinas sintéticas, la transferencia de calor en el microsistema polimérico es sumamente limitado a comparación a un microreactor elaborado de un material más tradicional y mejor conductor; por este motivo, muchos estudios omiten el control de temperatura incorporado en el sistema y se basan en procesos a temperatura ambiente. Este problema genera una barrera que afecta la investigación de reacciones lentas, las cuales no pueden acelerarse empleando temperaturas más altas, o reacciones muy exotérmicas, las cuales pueden intensificarse rápidamente dado a la mezcla acelerada en las canalizaciones; aquí, la baja eficiencia térmica limita el enfriamiento del microsistema, lo cual

podría conducir a la degradación rápida de las canalizaciones con la posibilidad de la destrucción parcial o completa del microreactor.

Debido a que la impresión por deposición mediante el uso de filamentos termoformables refleja una alta gama de personalización, bajos costos y tiempos de manufactura, la producción de microreactores impresos en 3D se muestra sumamente prometedora. Por este motivo, es de gran interés el desarrollo de un sistema que incorpore un control de temperatura a un microreactor sencillo de armar y fácilmente reproducible, por lo que se plantea este como el objetivo general de este trabajo.

### **1.3 Objetivo general**

Desarrollar un sistema de fotoreactor impreso en 3D con control de temperatura mediante el uso de un microcontrolador.

### **1.4 Objetivos Específicos**

Realizar el modelado computacional del microreactor prototipo mediante el uso de programas computacionales.

Realizar el modelado computacional de la transferencia de calor de diferentes prototipos de fotoreactor.

A partir del sistema más eficiente diseñar un prototipo final con un sistema de control de temperatura.

Ensamblar la configuración del sistema final del fotoreactor con todos sus elementos integrados.

Realizar la prueba de concepto de la instalación final del fotoreactor.

### **1.5 Resultados esperados**

Se espera implementar el modelado computacional mediante el uso de SolidWorks, la impresión 3D por deposición de material fundido, y un sistema de control de temperatura controlado por un microcontrolador para generar un microreactor prototipo como una alternativa de bajo costo a microreactores tradicionales.

Debido a la flexibilidad que permite el modelado computacional, es decir, la libertad de diseño y el control de temperatura incorporado al sistema, se espera que el microreactor se pueda adaptar a

diferentes aplicaciones en otras áreas de la ingeniería mediante modificaciones al modelo base del reactor, o a las condiciones de temperatura del experimento.

Por último, mediante el sistema de control de temperatura acoplado se podrá acoplar al prototipo de microreactor en la síntesis de materiales y reacciones químicas que no interactúen con el material que conforma el reactor, así evitando taponamientos.

## CAPÍTULO 2: FUNDAMENTOS TEÓRICOS

### 2.1 Principios fundamentales

#### 2.1.1 Parámetros fluidicos importantes

Los sistemas de flujo en la escala que se aplica en los microreactores se comportan de manera diferente a los flujos existente en sistemas a macro escala. Uno de los factores ausentes en un microsistema es el flujo turbulento, en el cual es remplazado completamente por flujo laminar; por otro lado, la inercia se considera insignificante, mientras que la viscosidad se torna sumamente importante. La superficie del sistema se debe considerar con mayor detalle dada la relación que hay entre superficie y volumen, la cual incrementa drásticamente a medida que el sistema se reduce en escala. [7] Existe una serie de parámetros importantes que describen los fluidos en general, pero a continuación se describen algunos con un enfoque a las particularidades de estos parámetros en los microsistemas y sus diferencias en comparación a sistemas macro. Uno de los parámetros más importantes para lograr la caracterización del flujo de un fluido es la densidad ( $\rho$ ) de este:

$$\rho = \frac{m}{V}$$

La presión del líquido depende únicamente de la altura de la columna de líquido, dejando de ser relevante en microsistemas cerrados; por otro lado, en sistemas abiertos una gradiente de presión inducida podrá afectar el flujo del fluido dentro del microsistema. Presión (P), fuerza (F) y área (A). [7]

$$P = \frac{F}{A}$$

En los microsistemas, los reservorios y la altura de llenado se implementan para controlar la presión del sistema y, por ende, el caudal de fluido en este. Al tener flujo dentro del sistema, se

generará una resistencia al movimiento determinado por la viscosidad ( $\eta$ ) del fluido, la cual se determina por la relación entre el esfuerzo cortante y la velocidad de corte. En microsistemas es comúnmente implementada la viscosidad cinética ( $\nu$ ), la cual describe la relación entre viscosidad y densidad del fluido. [7]

$$\nu = \frac{\eta}{\rho}$$

Al tomar la razón entre las fuerzas viscosas e inerciales se obtiene el número de Reynolds, el cual es una expresión adimensional que permite estimar el régimen de flujo que ocurrirá en un sistema. Valores del número de Reynolds bajos, es decir menores a 2000, describen un sistema de flujo laminar, mientras que números altos, es decir mayores a 3000, reflejan un flujo turbulento; valores entre 2300 a 3000 indican que el sistema se considera en transición. Dentro de los microsistemas con diámetros de 100  $\mu\text{m}$  llenos de agua a velocidades promedio ( $\nu$ ) de 1 cm/s, se obtiene un número de Reynolds igual a 1.

$$Re = \frac{\rho d \nu}{\eta}$$

En general, el flujo en los microsistemas siempre se considerará laminar, recalando que en microsistemas no circulares se requiere utilizar el diámetro hidráulico ( $D_H$ ), el cual da la razón entre el área de la sección transversal ( $A$ ) y el perímetro mojado ( $P$ ). [7]

$$D_H = \frac{4A}{P}$$

### 2.1.2 Ecuación de Navier – Stokes

Para describir el movimiento de los fluidos dentro de un micro reactor es importante tener en cuenta que estos cuerpos se conforman por materiales continuos. Por lo tanto, propiedades como

la masa y fuerza deben ser remplazadas con sus contrapartes continuas, es decir, la densidad y la densidad de fuerza ( $f$ ), definidas por unidad de volumen. Para evaluar el comportamiento de todo el sistema, se divide la densidad de fuerza en varios elementos de fluidos infinitesimales, evaluando las fuerzas que actúan sobre cada uno de ellos. Posteriormente, a partir de estas evaluaciones, es posible inferir las propiedades medias en el sistema. En sí, las fuerzas que actúan sobre cada elemento de fluido se deben a las tensiones del fluido en sus superficies y a las fuerzas externas ( $f$ ) sobre la mayor parte del elemento. El campo de velocidad resultante  $u$ , está regido por la ecuación de Navier-Stokes si el fluido es newtoniano, es decir, si su viscosidad no cambia con la velocidad. [8]

$$\rho \left( \frac{\delta u}{\delta t} + u \cdot \nabla u = \nabla \cdot \vec{\sigma} + f \right)$$

Dentro de los microsistemas, las fuerzas de inercia son insignificantes en comparación con las fuerzas viscosas; por lo tanto, se puede despreciar el termino no lineal de la ecuación anterior. No obstante, es importante mencionar que, con esta aproximación, las ecuaciones de Navier-Stokes se pueden resolver analíticamente solo en unos pocos casos particulares definidos por sus condiciones de frontera. [8]

## **2.2 Sistemas microfluídicos**

### **2.2.1 Modos de transporte**

La manera en la que se transporta la materia dentro de los sistemas de microfluidos puede ser directa o estadística. El transporte directo se controla mediante trabajo inducido sobre el fluido, el cual causa un flujo volumétrico con una dirección y perfil. Este trabajo puede generarse mediante un impulso por presión o eléctricamente mediante flujo electro osmótico. Por otra parte, el transporte estadístico es un transporte impulsado por la entropía. Generalmente, los modos de

transporte más importantes en los microsistemas son la advección o convección, migración, y difusión [7].

En el caso de la difusión, la dirección del movimiento de partículas es desde regiones de alta concentración a regiones de menor concentración. Este fenómeno se debe a los movimientos brownianos, los cuales siguen la existencia de colisiones entre partículas donde se transfiere una cierta cantidad de movimiento en cada colisión, forzando al resto de partículas a continuar con el movimiento aleatorio similar o a difundirse a través del fluido. La cantidad de momento transferido por impacto y el número de impactos por unidad de tiempo dependerán del tamaño, forma y masa de las moléculas, al igual que de su temperatura. A microescala, el mezclado depende principalmente de la difusión debido al comportamiento laminar del flujo; esto es contrario a lo que se observa en sistemas a macroescala donde el mezclado se consigue mediante un sistema turbulento caracterizado por números de Reynolds mayores a 3000 [7].

A pesar de que los mecanismos de transporte directos y estadísticos son profundamente distintos, es posible que estos coexistan bajo ciertas circunstancias; por esto es importante definir la tasa relativa entre estos dentro del sistema de microfluidos. Mediante la ecuación de convección - difusión en su forma adimensional se puede obtener una constante llamada número de Péclet, la cual se define como la razón entre ambos mecanismos de transporte anteriormente mencionados.

$$Pe = \frac{\text{Transporte advectivo}}{\text{Transporte Difusivo}} = \frac{lv}{D}$$

Donde ( $l$ ), ( $v$ ) describe la longitud y velocidad característica del sistema y ( $D$ ) el coeficiente de difusión de la especie transportada. Generalmente, si el número de Péclet es superior a 1000 la

difusión se vuelve insignificante, mientras que, si este es menor a 10, la advección puede despreciarse. [9]

Debido al rápido desarrollo de micro dispositivos, la comprensión del flujo de fluidos y la transferencia de calor han sido puntos de creciente interés [10]. Además, se ha logrado demostrar que la miniaturización de un sistema facilita el intercambio térmico donde tiempos característicos de difusión térmica se acortan y los intercambios de calor a una temperatura fija son más grandes; estas propiedades son ventajosas para mantener un mayor control en reacciones químicas, ya sean exotérmicas o endotérmicas, al igual que la implementación de procesos biológicos que requieren ciclos térmicos [11].

La conductividad térmica se considera una propiedad de transporte promedio definida por la Ley de Fourier, la cual está relacionada con la difusión natural del transporte de calor en gases, sólidos y líquidos. En los microsistemas,  $K$  depende no solamente del tipo de material y el nivel de temperatura, sino que también influyen parámetros como la microestructura del material y la escala longitudinal del sistema [12].

$$q = -K\nabla T$$

### **2.2.2 Geometrías características**

En general, en los microsistemas es común encontrar geometrías que incluyen pozos, orificios, membranas y canales. Como un ejemplo básico de estas estructuras que conforman los microsistemas, se puede apreciar dos de los tipos más sencillos de geometrías: un canal abierto que conecta dos pozos (ver figura 1). [13]

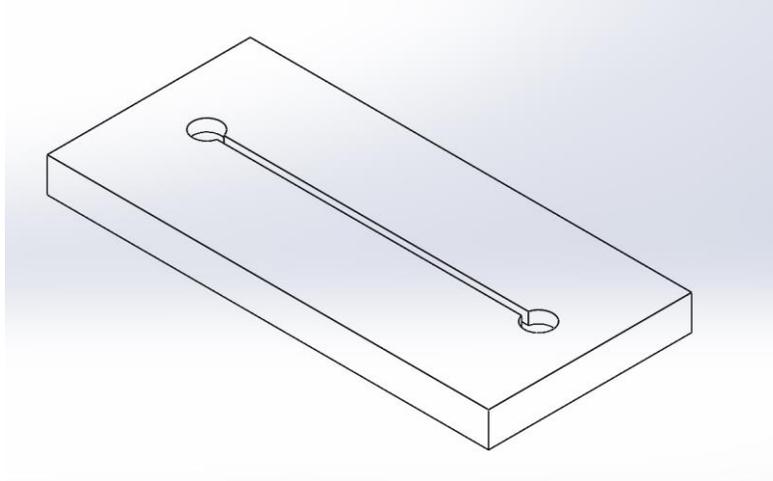


Figura 1.- Perspectiva general de un microcanal.

Existe una gran variedad geométrica que es implementada en dispositivos microfluídicos; no obstante, la construcción básica de estos sistemas implementa bloques que se adaptan para alcanzar varias funciones esenciales en su microfluídica. Muchas de estas geometrías son prismáticas, generando una sección transversal que se mantiene constante a través un eje o canalización.

Las cavidades de estos sistemas son proyectadas a lo largo del eje perpendicular al plano del sustrato. Su fabricación se puede realizar mediante una serie de técnicas como: perforación laser, ataque químico, mecanizado por descarga eléctrica, chorro abrasivo, o como es el caso de este proyecto, por deposición de material.

Los micro canales se caracterizan geoméricamente por tener una dimensión significativamente mayor otras dos dimensiones; es decir, es común encontrar que la longitud de una canalización será significativamente más grande que su ancho y altura. En los microsistemas, las canalizaciones cumplen papeles significativos y no solo el rol de conducir el fluido de un punto a otro. Los perfiles comunes de cavidades microfabricadas se pueden observar en la figura 2 [13].

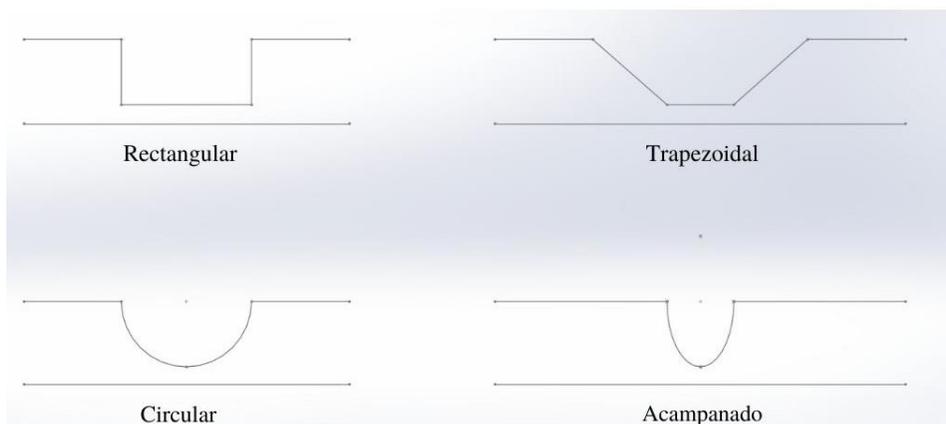


Figura 2.- Perfiles comunes de cavidades en microsistemas.

### 2.2.3 Características generales de los microreactores

La microfluídica, referido al comportamiento, manipulación y control preciso de fluidos a escalas submilimétricas en la cual fuerzas superficiales dominan las fuerzas volumétricas, ha surgido como un nuevo enfoque para mejorar la funcionalidad y el rendimiento de las pruebas bioquímicas y médicas. Los efectos de miniaturización y microescala también prometen sistemas de soluciones completamente nuevos en estas áreas. Por ejemplo, la reducción de dimensiones conduce a procesos más rápidos y con menor consumo de reactivos; además, permite un procesamiento paralelo que permite sintetizar y analizar compuestos a la vez. Los dispositivos de microfluidos que han evolucionado en el campo de la ciencia y la química incluyen: microfiltros, micromezcladores, microdispensadores, microseparadores y microreactores [14].

Los microreactores son sistemas con baja inercia térmica, lo cual permite llevar a cabo procesos a condiciones de temperatura uniforme, al igual que un control directo, preciso y fácil de este parámetro, contrario a los reactores tradicionales. El tamaño de un microreactor conduce a altas tasas de transferencia de masa y calor, por lo cual es posible llevar a cabo reacciones bajo condiciones más agresivas sin aumentar el peligro latente que habría en un reactor convencional.

Cabe recalcar que el tiempo de residencia en un reactor disminuye debido al tamaño de las canalizaciones, por lo cual productos intermediarios inestables pueden transferirse rápidamente a un proceso distinto. Estas propiedades de los microreactores permiten nuevas alternativas de reacciones anteriormente inaccesibles bajo condiciones de reacción dentro de reactores tradicionales. [14]

#### 2.2.4 Materiales para la manufactura y construcción de microreactores

Las técnicas actuales utilizadas para la fabricación de dispositivos de microfluidos incluyen el micro mecanizado, la litografía blanda, el estampado, la construcción in situ, el moldeo por inyección, y ablación láser, cada técnica tiene ciertas ventajas y desventajas, donde el método más adecuado de fabricación de dispositivos a menudo depende de la aplicación específica del microreactor. Se puede esperar que los materiales implementados de acuerdo con su técnica de fabricación se distribuyan de la siguiente manera (ver tabla 1):

Tabla 1.- Técnicas de fabricación de acuerdo con el material implementado.

<b>Técnica de fabricación</b>	<b>Material</b>
Ataque químico y cortado con laser	Vidrio
Cortado con laser	Capas poliméricas
Litografía	Polidimetilsiloxano
Inyección en molde (impresión 3D)	Termoplásticos
Fotopolimerización	Hidrogeles
Ataque químico	Silicon

Cabe recalcar que los polímeros son ampliamente utilizados en la fabricación de estos dispositivos debido a su alto rendimiento bioquímico y su bajo costo comercial [15].

### **2.3 Manufactura aditiva**

Esta técnica de manufactura es sumamente prometedora para la fabricación de microreactores dado a que este representa el menor costo entre los diferentes métodos. Los materiales implementados son plásticos termosensibles, lo cuales son calentados por encima de su temperatura de ablandamiento, lo cual causa que el filamento se torne blando y flexible, y así extruirse mediante una boquilla a una placa que se mantiene a temperaturas más bajas, produciendo un enfriamiento rápido del plástico y su consecuente endurecimiento. Este método de manufactura consiste en depositar finas capas del plástico moldeable una tras otra hasta completar la pieza deseada [16]. Las limitaciones del moldeo por inyección incluyen la resolución de la pieza y la elección de los materiales. Debido a que la boquilla de extrusiones es fija, la precisión de la pieza dependerá del diámetro de la apertura; estructuras muy finas tienen a formar pequeñas imperfecciones. [17]

Es necesario mencionar a la estereolitografía como un proceso de manufactura aditiva alternativa al proceso de impresión 3D, ya que es capaz de crear prototipos con un alto grado de precisión y detalles. Mediante una reacción fotoquímica y por medio de un reservorio líquido de resina, un fotón de luz retícula monómeros y oligómeros químicos y se forman polímeros que se endurecen dando forma a la pieza deseada. [18]

### **2.4 Software de modelado (SolidWorks)**

Simulaciones computacionales en dinámica de fluidos pueden llevarse a cabo para optimizar el diseño de los microcanales, mejorar la distribución del flujo dentro del microreactor, y reducir la caída de presión en el sistema [19]. Para este fin, se han desarrollado programas computacionales que permiten modelar en detalle procesos de transporte en una variedad de sistemas [20].

Para el desarrollo del modelo de microreactor de este proyecto, se optó por utilizar el programa SolidWorks debido a que este incorpora el modelado y la simulación de flujo dentro del mismo sistema, manteniendo la fidelidad geométrica de las piezas, mallado automatizado, detección del régimen de flujo, y análisis multivariado que optimiza los diseños rápidamente. Por otro lado, el programa maneja una interfaz intuitiva de la simulación de flujo que reduce los tiempos de configuración y de análisis [21].

## **2.5 Consideraciones generales del sistema**

En primer lugar, el propósito del microreactor en este proyecto es el habilitar una serie de reacciones fotoquímicas, por lo cual una adaptación de algún material transparente era necesario. Dado que por cuestiones de disponibilidad y costo no fue posible adaptar filamentos plásticos transparentes al proceso de impresión, se incluyó a los distintos prototipos una tapa de acrílico que permita el paso de luz hacia las canalizaciones del reactor. Por otra parte, al trabajar con filamentos de PLA como material de impresión, la transferencia del calor en el sistema se mostró ineficiente. Por este motivo, mediante el modelado computacional del modelo base fue posible generar distintos prototipos de microreactores los cuales presentaban características favorables al proceso. Hay que recordar que las dimensiones del modelo base se mantuvieron constantes en las simulaciones de los distintos prototipos de microreactores.

Las simulaciones de los prototipos se realizaron en el programa computacional SolidWorks a condiciones no adiabáticas, considerando una temperatura ambiente de 20.5 °C, con un coeficiente de transferencia de calor por convección de 10 W m<sup>-2</sup> k<sup>-1</sup>. El fluido que circuló por las canalizaciones del microreactor se encontraba a 20.5 °C y se calentó al sistema a 60 °C. En ambos

casos el fluido se consideró como agua; sin embargo, no todos los prototipos se calentaron por medio de un fluido caliente, en distintos prototipos el calentamiento se realizó mediante la generación de calor por parte de celdas Peltier. Las condiciones de flujo del reactivo fueron de 1 y 100 l h<sup>-1</sup> representando un tiempo de residente de 12.5 horas y 8 minutos, respectivamente. Estos valores representaron parámetros de flujo mínimo y máximo establecidos para los microsistemas. En la Tabla 2 se muestra la conductividad térmica de cada material implementado en la simulación y construcción de los distintos prototipos.

Tabla 2.- Conductividad térmica de los materiales implementados.

<b>Material</b>	<b>Conductividad térmica W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup></b>
PLA	0.13
acrílico	0.20
cerámica – alúmina 94%	18
aluminio	240
cobre	401

## 2.6 Modelos de microreactores desarrollados

Los resultados se obtuvieron a partir de una serie de prototipos, los cuales presentaban distintas alternativas de transferencia de calor al microreactor. En la tabla 3 se muestra una visión general de estos prototipos de microreactores, los cuales fueron modelados y evaluados con respecto a su eficiencia térmica.

Tabla 3.- Observaciones generales de las variantes de los microreactores.

<b>Prototipo</b>	<b>Nomenclatura</b>	<b>Materiales</b>	<b>Observaciones Generales</b>
Modelo base	MB	PLA	Construcción básica de las canalizaciones del micro reactor.
Tuberías transversales	TT	PLA,acrílico	Construcción sólida acoplada con tuberías internas y una cobertura deacrílico.
Peltier a contacto directo	PCD	PLA, cobre, cerámica	Ensamblaje del MB y una lámina de cobre que distribuye el calor generado por celdas Peltier directamente al fluido.

Peltier a contacto indirecto	PCI	PLA, acrílico, cobre, cerámica	Adaptación del PCD a una distribución de calor indirecta con una cobertura de acrílico
Baño de agua	BA	PLA, aluminio	Calentamiento del MB a partir de un reservorio de agua caliente echa de aluminio.
Prototipo final	PF	PLA, cobre, aluminio	Ensamblaje final basándose en facilidad de control de temperatura y construcción física del modelo

## 2.7 Limitaciones del sistema

El sistema impreso en 3D presenta limitaciones de transferencia y control de calor dado que filamentos termomoldeables de PLA conforman la estructura completa del microreactor. [22]

De igual manera, la impresión 3D presenta limitaciones geométricas atribuidas a la extrusión del filamento debido a la apertura de la boquilla de la impresora. Por este motivo, se podrá realizar canalizaciones de impresión sumamente estrechas y se trabajará entre un límite aceptable de precisión de impresión donde se garantice un alto grado de reproducibilidad del microreactor a diseñar. [16]

En la impresión 3D por filamentos depositados es posible que se generen fugas del fluido por pequeños imperfectos en el proceso de impresión donde capas de filamentos no se podrán adherir completamente; sin embargo, la aplicación posterior al proceso de impresión de sellante en toda la superficie de la pieza manufacturada evitara fugas en el microreactor y sus canalizaciones. [23]

Por otro lado, la transparencia del material utilizado en la impresión es ineficiente, limitando así las aplicaciones en reacciones foto activadas (fotoreactor), por lo cual acrílico se implementará como material en el ensamblaje de los prototipos, permitiendo el paso de luz a las canalizaciones del microreactor.

Por último, las aplicaciones del reactor impreso se ven limitadas en procesos en los cuales acetona, etanoato de etilo, tetrahidrofurano, butanona o hidróxido de sodio en altas concentraciones sean necesarios ya que estos agentes químicos disuelven al equipo impreso conformado por filamentos de PLA [24].

### CAPÍTULO 3: RESULTADOS DEL PROCESO DE DISEÑO

#### 3.1 Modelo base (MB)

A partir de las capacidades de impresión de una impresora por deposición de filamentos de bajo costo, el primer prototipo de micro reactor se desarrolló con dimensiones de ancho, largo y grosos de 7, 14, y 0.5 cm, respectivamente (ver figura 3). Estas dimensiones se definieron con el objetivo de producir un reactor cuya impresión no tome cantidades de tiempo considerables; por otra parte, se tomó en consideración la necesidad de optimizar la geometría de las canalizaciones según su límite de separación de manera que se garantice una alta precisión de impresión de las canalizaciones y que estas se mantengan separadas y paralelas una tras otra. Los primeros prototipos de microreactor manufacturado por impresión por deposición polimérica mostraron una alta reproducibilidad trabajando con una separación entre canalizaciones no mayor a 2 mm, dando como resultado el denominado modelo base (MB), con una capacidad volumétrica de 12.6 ml.

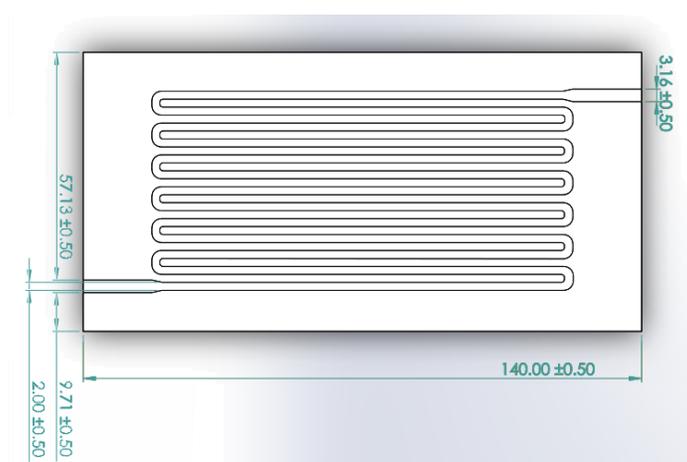


Figura 3.- Modelado computacional del MB con sus respectivas dimensiones en milímetros.

### 3.1.1 Prototipo de tuberías transversales (TT)

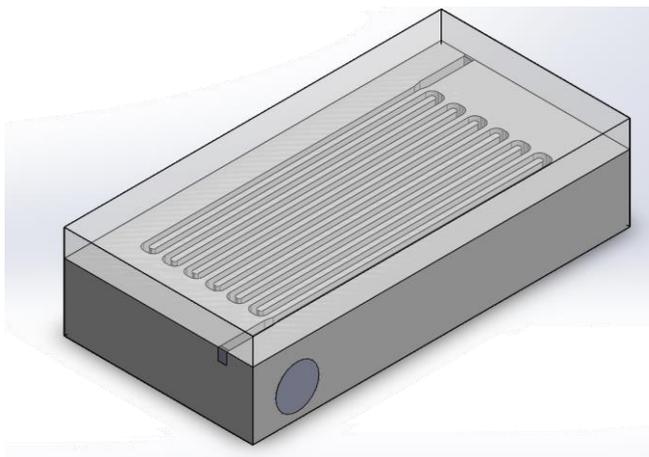


Figura 4.- Modelado computacional del prototipo TT.

Las modificaciones realizadas al modelo MB en esta variante se basaron a partir de intercambiadores de calor tradicionales y microreactores [25]. La base se extendió permitiendo la incorporación de una tubería interna transversal a través de toda la pieza; por esta tubería se circuló el fluido caliente a 60 °C. Como se observa en la figura 4, se realizó los cortes en las paredes del prototipo a una separación tolerable de 2 mm con las canalizaciones del reactor. El diámetro de tubería interna se definió en 12 mm, con su punto de salida en la cara opuesta al de entrada cerca de la salida del reactivo del MB, así permitiendo la circulación de fluido caliente a través del modelo TT.

El modelado computacional del prototipo se realizó con una tapa de acrílico de 4 mm de grosor, sellando a las canalizaciones del microreactor y así permitiendo la evaluación térmica del sistema representada en la figura 5.

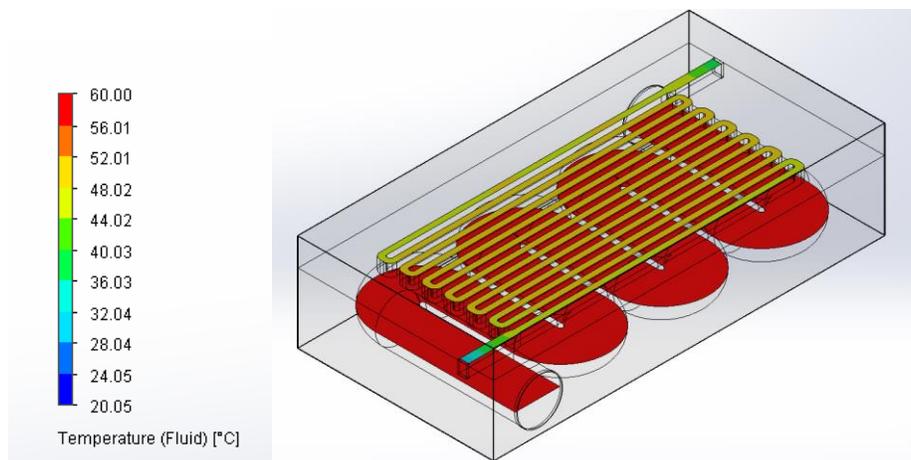


Figura 5.- Simulación computacional del prototipo TT a  $1 \text{ ml h}^{-1}$ .

Observando la figura 5, para un tiempo de residencia de 12 horas, la tubería transversal con fluido caliente a  $60^\circ\text{C}$  transferiría la cantidad de calor al reactivo dentro de las canalizaciones del microreactor para subir su temperatura de  $20^\circ\text{C}$  a  $44^\circ\text{C}$  antes de ingresar a las canalizaciones más estrechas del microreactor. En la salida del reactor, se observó como el fluido perdió una cantidad considerable de calor; esto se dio ya que la tubería no logró cubrir por completo la base del prototipo TT. Dado que las condiciones de la simulación computacional no son adiabáticas, se espera que, al calentarse el reactivo, este imparta su energía calentando la tapa de acrílico, y esta a su vez disipe el calor a sus alrededores. La temperatura máxima obtenida por el fluido en las canalizaciones del microreactor, y la temperatura a la salida del mismo fueron de  $51.45$  y de  $38.63^\circ\text{C}$ , respectivamente.

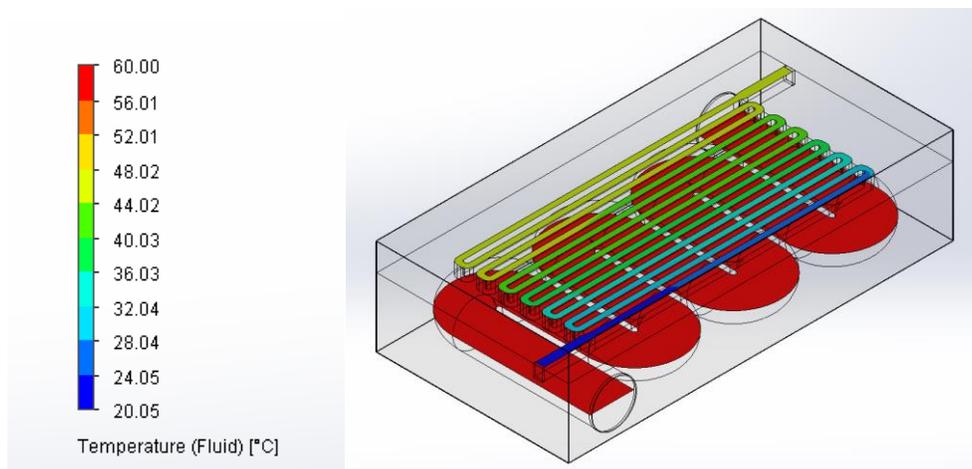


Figura 6.- Simulación computacional del prototipo TT a 100 ml h<sup>-1</sup>.

Observando la figura 6, para un tiempo de residencia de 8 minutos, el calentamiento del reactivo no se realizó de manera inmediata antes de ingresar a las canalizaciones más estrechas, como lo visto en la figura 5 para un tiempo de residencia de 12 minutos. El tiempo de residencia más corto resultó en un calentamiento distribuido a través de todo el reactor. El reactivo se movió de manera rápida por los puntos fríos del microreactor sin perder una cantidad significativa de calor a los alrededores manteniendo un aumento constante de su temperatura hasta alcanzar una temperatura máxima de 46.01 °C y una temperatura de salida del microreactor de 45.83°C.

Al comparar las figuras 5 y 6, se puede observar que el flujo del reactivo alcanzó temperaturas más altas en el sistema a 1 ml h<sup>-1</sup> que a 100 ml h<sup>-1</sup> ya que el reactivo se encontraba en contacto con la base caliente del modelo TT por una mayor cantidad de tiempo. No obstante, en los puntos de salida del reactor (ver figura 5), la carencia de una fuente de calor consistente causó un enfriamiento del reactivo de 7.2 °C a comparación del sistema que se simuló a condiciones máximas de flujo.

### 3.1.2 Prototipo Peltier a contacto directo (PCD)

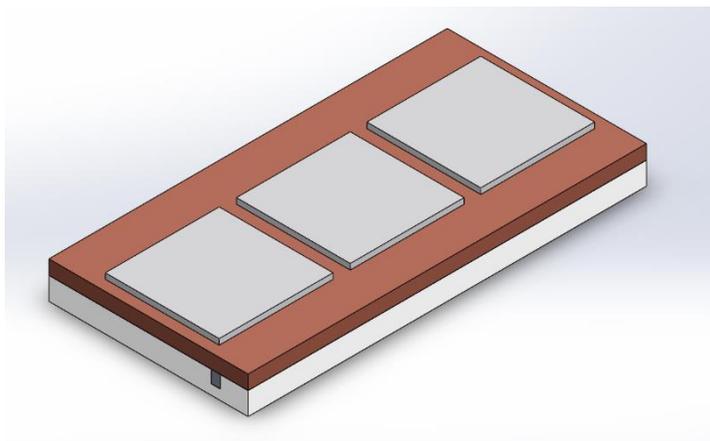


Figura 7.- Modelado computacional del prototipo PCD.

Al impartir una corriente eléctrica a través de una celda Peltier es posible generar un gradiente de calor entre las caras de las celdas. Como se observa en la figura 7, este prototipo PCD implementó una lámina de cobre de 3 mm de grosor, la cual se colocó a contacto directo con las canalizaciones del fluido sellando, al microreactor y permitiendo una distribución de calor directa por parte de las celdas Peltier. Las celdas Peltier se dimensionaron de acuerdo con unidades comercialmente disponibles de 40 x 40 mm de largo y ancho, con un espesor de 0.5 mm, con una potencia sugerida de 60 W.

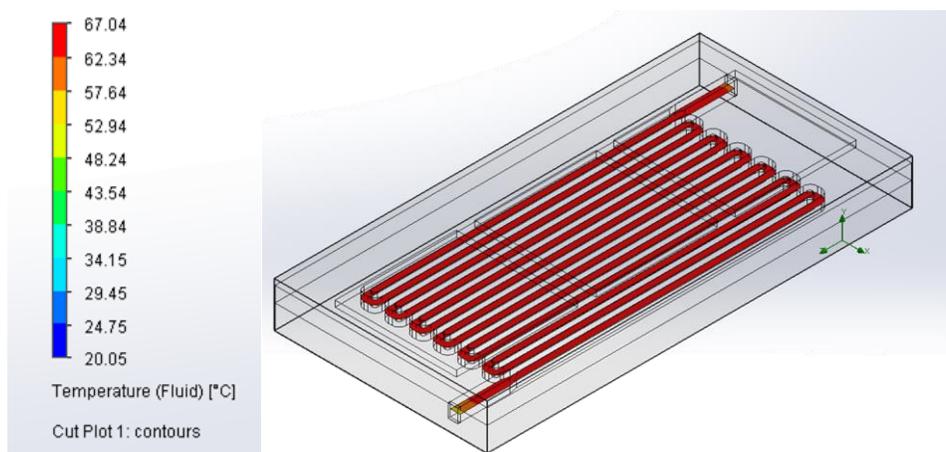


Figura 8.- Simulación computacional del prototipo PCD a 1 ml h<sup>-1</sup>.

La simulación del prototipo PCD bajo condiciones mínimas de flujo se realizó con celdas que trabajaron con una potencia constante de 10 W, y a una temperatura de celdas de 67 °C, contrario a su potencia de trabajo sugerida de 60 W. Se tomó esta consideración ya que no se logró agregar un sistema de control de las celdas que controlen la potencia de trabajo de estas trabajando a 60 W, donde los resultados a la potencia sugerida aumentaban la temperatura del reactor sobre su punto de moldeo, consecuentemente derritiendo al microreactor. En la figura 8 se puede observar como la lámina de cobre, al estar en contacto con el fluido, logró calentar al reactivo de manera inmediata alcanzando una temperatura máxima de 64.88 °C y una temperatura de salida de 61.70 °C.

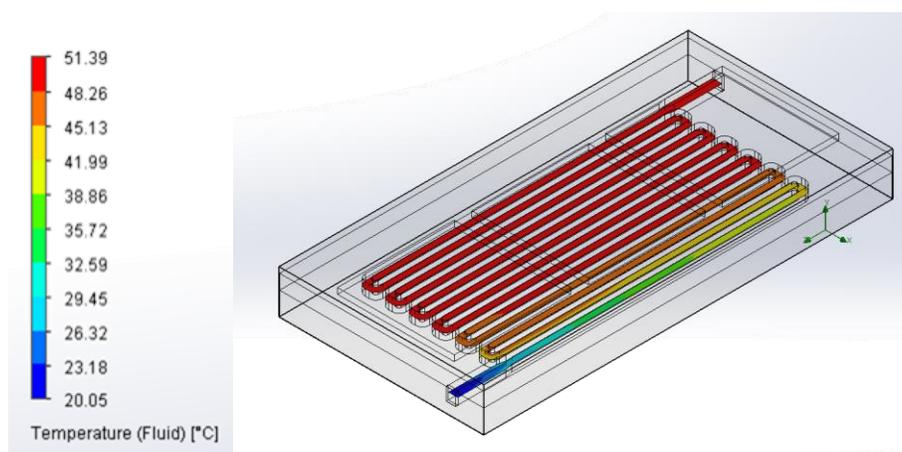


Figura 9.- Simulación computacional del prototipo PCD 100 ml h-1.

Las celdas del prototipo PCD se simularon bajo las condiciones máximas y mínimas de flujo y con una potencia constante de 10 W. En la figura 9, se puede observar como el aumento de flujo representó un menor grado de calentamiento. Sin embargo, debido a la alta eficiencia de transferencia de calor por parte de la lámina de cobre, el reactivo logró alcanzar una temperatura máxima de 49.43 °C y una temperatura de salida del reactor de 48.93 °C.

Similar a lo observado en las simulaciones del prototipo TT, bajo condiciones mínimas de flujo (ver figura 5), el sistema calentó al reactivo a una temperatura más alta que bajo condiciones máximas de flujo (ver figura 6). Una ventaja clara del prototipo PCD sobre el prototipo TT es la distribución homogénea de calor por parte de la lámina de cobre. Al ver la figura 4, el prototipo TT no contiene una fuente homogénea de calor en toda su base por lo cual el reactivo pierde una cantidad considerable de calor en su punto de salida. Al ver la figura 7, en el prototipo PCD este problema se soluciona ya que la lámina de cobre se calienta homogéneamente, y este calor se imparte directamente al reactivo en las canalizaciones del microreactor.

### 3.1.3 Prototipo Peltier a contacto indirecto (PCI)

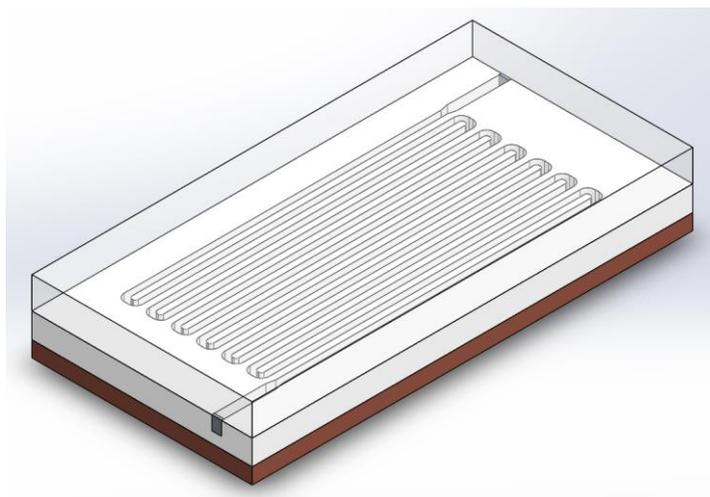


Figura 10.- Modelado computacional del prototipo PCI.

El prototipo PCI, como se observa en la figura 10, se ensambló con una cobertura de acrílico y los mismos elementos que conformaron al prototipo PCD, considerando una potencia reducida de trabajo de 10 W, con la diferencia de que estos elementos se colocaron en la base del microreactor.

Por este motivo, la lámina de cobre y las canalizaciones del reactor se encontraban separadas por una lámina de 3.5 mm de grosor de PLA que conforma la base del microreactor.

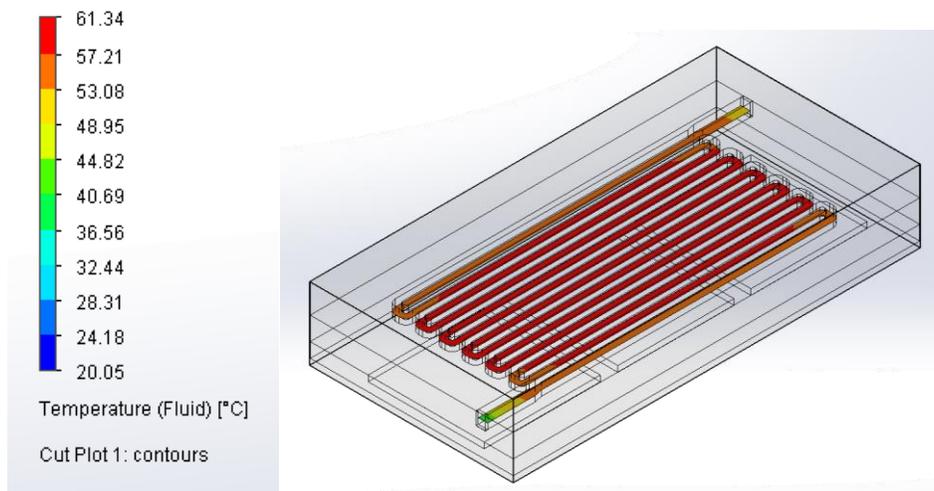


Figura 11.- Simulación computacional del prototipo PCI 1 ml h-1.

En la figura 11, se puede observar como la lámina de cobre, al estar separada de las canalizaciones del microreactor, generó un calentamiento tal que el reactivo alcanzó temperaturas menores a las observadas en el sistema PCD (ver figura 8). Los bordes y salida del microreactor fueron puntos en los cuales el reactivo disipó su calor a sus alrededores, similar a lo observado en el prototipo TT (ver figura 5). Por esta razón, la temperatura de salida del microreactor fue de 49.78 °C, a comparación de la temperatura máxima de 59.51 °C.

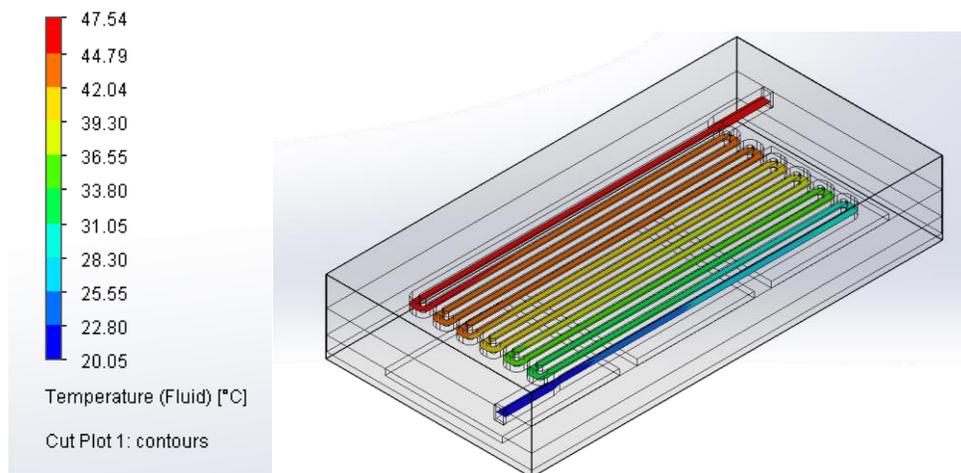


Figura 12.- Simulación computacional del prototipo PCI 100 ml h<sup>-1</sup>.

Como se muestra en la figura 12, la transferencia de calor mostró una mayor distribución a través de las canalizaciones del microreactor. El reactivo alcanzó una temperatura máxima cerca del punto de salida del microreactor de 45.19 °C y una temperatura de salida de 44.75 °C. Al comparar esto con lo observado en la figura 9, la temperatura que se obtuvo a condiciones mayores de flujo (ver figura 12) fue menor; no obstante, en los puntos de salida a 1 ml h<sup>-1</sup>, al igual que en los bordes del microreactor, el reactivo disipó una cantidad considerable de calor a los alrededores. Esto no se observó en las simulaciones bajo condiciones máximas de flujo dado que el reactivo no permaneció en estos puntos fríos del microreactor por más de un minuto. Por otro lado, el prototipo PCI presentó mejores resultados de calentamiento a comparación al prototipo TT, pero un menor calentamiento que el prototipo PCD.

### 3.1.4 Prototipo baño de agua (BA)

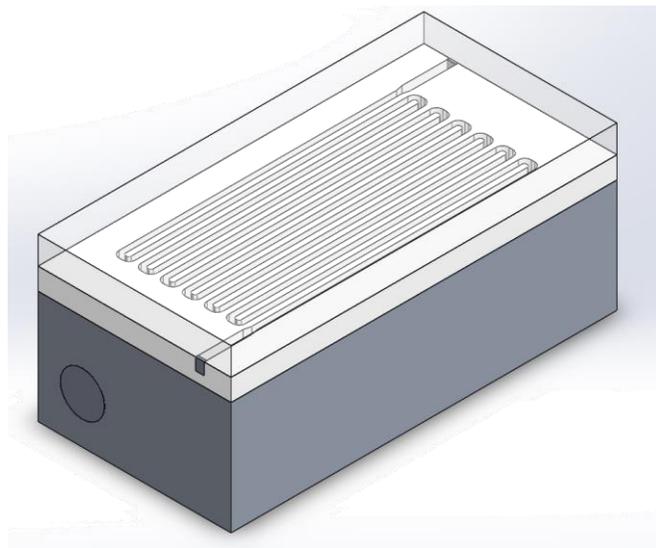


Figura 13.- Modelado computacional del prototipo BA.

El prototipo BA se basó en los resultados positivos obtenidos del prototipo PCI (ver figura 10). Al tener un calentamiento homogéneo a través de toda la base del microreactor, el calentamiento del reactivo aumentó y alcanzó una mayor temperatura, a la vez que perdió menor cantidad calor en los bordes y puntos de salida del reactor a condiciones mínimas de flujo. Como se muestra en la figura 13, el prototipo BA se ensambló computacionalmente con una cobertura de acrílico y un reservorio de aluminio hueco, el cual permitió el contacto del fluido caliente a la base del microreactor de manera directa.

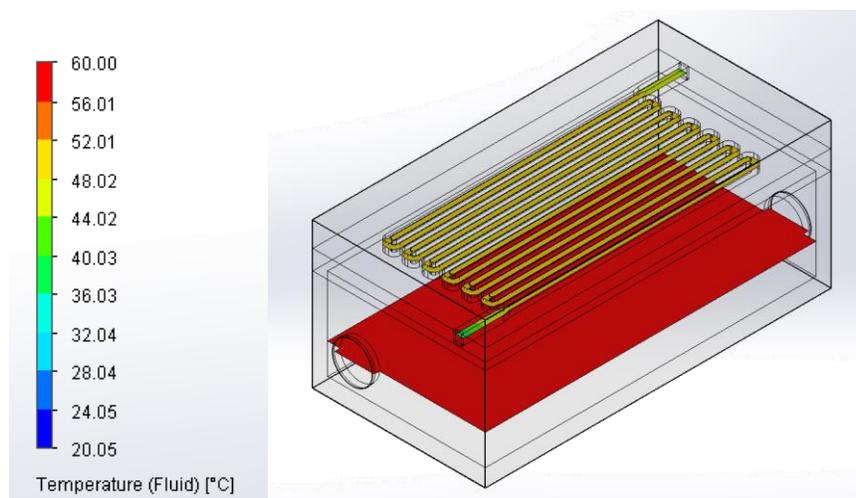


Figura 14.- Simulación computacional del prototipo BA a  $1 \text{ ml h}^{-1}$ .

Observando la gradiente de temperatura en la figura 14, la temperatura del fluido se vio homogeneizada a través de las canalizaciones del microreactor, alcanzando una temperatura máxima de  $51.37 \text{ }^\circ\text{C}$  y una temperatura de salida de  $43.79 \text{ }^\circ\text{C}$ . Al comparar con los resultados que se obtuvieron en el prototipo TT a las mismas condiciones de flujo (ver figura 5), el prototipo BA no mostró puntos fríos en el microreactor, y la temperatura de salida perdió una menor cantidad de calor que la que se observó en el prototipo TT.

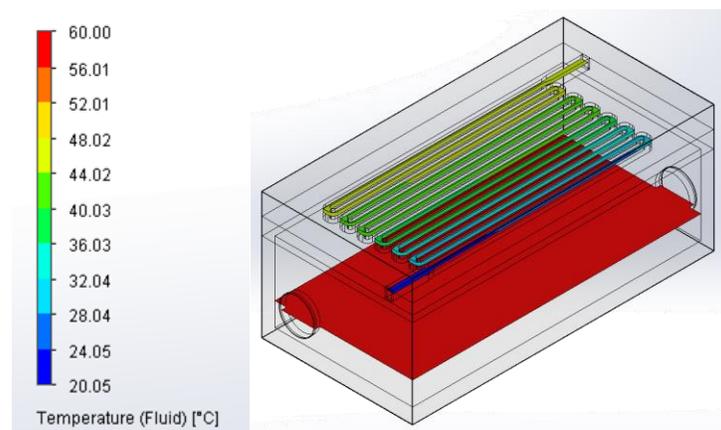


Figura 15.- Simulación computacional del prototipo BA a  $100 \text{ ml h}^{-1}$ .

Al observar la gradiente de temperatura en la figura 15 se puede ver que el reactivo se calentó a través de las canalizaciones del microreactor. La temperatura máxima que se obtuvo en la simulación fue de 45.10 °C y una temperatura de salida de 44.82 °C. A continuación, se puede observar la temperatura máxima y temperatura de salida de los prototipos realizados bajo condiciones de flujo mínimo y máximo (ver tabla 3 y tabla 4 respectivamente).

Tabla 3.- Temperaturas máximas y de salida del reactor de los prototipos a 1 ml h<sup>-1</sup>

Prototipo	Nomenclatura	Temperatura máxima °C	Temperatura de salida °C
Tuberías transversales	TT	51	39
Peltier a contacto directo	PCD	65	62
Peltier a contacto indirecto	PCI	60	50
Baño de agua	BA	51	44

Tabla 4.- Temperaturas máximas y de salida del reactor de los prototipos a 100 ml h<sup>-1</sup>

Prototipo	Nomenclatura	Temperatura máxima °C	Temperatura de salida °C
Tuberías transversales	TT	46	46
Peltier a contacto directo	PCD	49	49
Peltier a contacto indirecto	PCI	45	45
Baño de agua	BA	45	45

### 3.2 Consideraciones de precalentado.

Al observar los resultados resumidos en las tablas 3 y 4, se aprecia que todos los prototipos lograron calentar al reactivo considerablemente; sin embargo, las temperaturas máximas alcanzadas por el reactivo en los prototipos se obtuvieron después de haber fluido por más de la mitad del trayecto de las canalizaciones del microreactor. Por otro lado, a condiciones mínimas de flujo, todos los prototipos perdieron una cantidad significativa calor a los alrededores en los puntos de salida de los prototipos. Por este motivo se debería prever que la reacción se haya concluido antes de llegar a estos puntos. Al Considerar que el tiempo de residencia que tarda el reactivo en

alcanzar su temperatura óptima es considerado como tiempo perdido dentro del microreactor. Por este motivo, se optó por implementar un sistema de precalentado, con el propósito de asegurar una temperatura de entrada al microreactor.

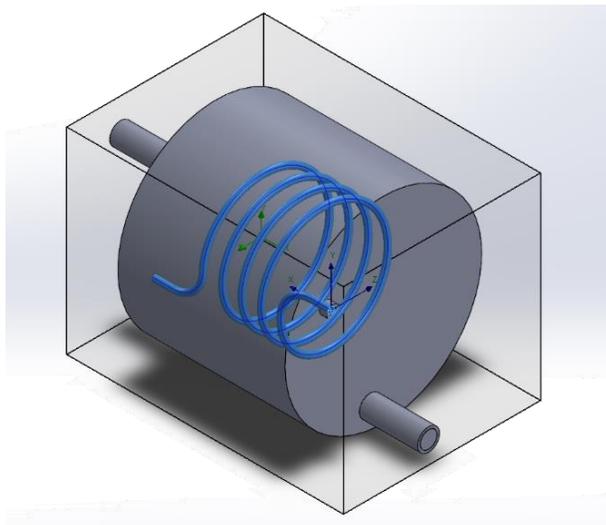


Figura 16.- Modelado computacional de canalizaciones de cobre en serpentin.

Para comprobar la efectividad del sistema de precalentamiento, se realizó el modelado de una tubería que se sumergió en un reservorio que contenía fluido caliente. Al observar la figura 16, se puede identificar como la tubería de cobre se modeló en serpentin con el propósito de ocupar la menor cantidad de espacio posible. El modelo se realizó a partir de una tubería de cobre de 30 cm de longitud con un diámetro externo de 3.2 mm y un diámetro interno de 1.6 mm. La tubería se encontraba encerrada dentro de un cilindro, el cual simuló al reservorio de fluido caliente. De igual manera que las simulaciones de los varios prototipos, se simuló al sistema de precalentamiento ente 1 a 100 ml h<sup>-1</sup>.

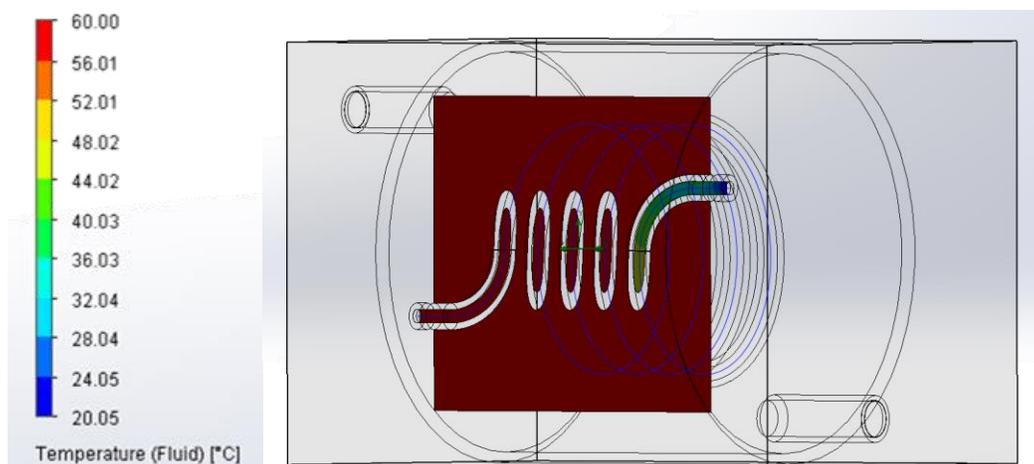


Figura 17.- Simulación computacional de canalizaciones de cobre en serpentín a  $100 \text{ ml h}^{-1}$ .

La transferencia de calor al reactivo se realizó de manera inmediata, donde cabe recalcar que los resultados que se obtuvieron a condiciones mínimas de flujo son muy similares a las mostradas en la figura 17. El reactivo logró calentarse rápidamente hasta alcanzar la temperatura del medio en el que estaba sumergido ( $60 \text{ }^\circ\text{C}$ ) a solo  $30 \text{ mm}$  de los  $30 \text{ cm}$  de tubería de cobre, por lo cual será posible reducir la longitud de tubería necesaria en el sistema de precalentamiento.

## CAPÍTULO 4: DEFINICIÓN DEL PROTOTIPO FINAL

### 4.1 Consideraciones generales de los prototipos

Al observar los resultados obtenidos por parte del prototipo TT, se observa como la tubería transversal carece cobertura cerca de los bordes, puntos de entrada y salida del reactivo dentro del microreactor; estos puntos fríos causan un que el reactivo pierda una cantidad significativa de calor a bajas condiciones de flujo (ver figura 3). En puntos del trayecto dentro de las canalizaciones, el reactivo impartirá su energía a los alrededores, en especial a los bordes y tapa de acrílico del prototipo TT. Debido a esto, el prototipo TT muestra carencias de distribución de calor en el sistema ya que, al trabajar con PLA, un material con un bajo coeficiente de transferencia de calor, es necesario maximizar y distribuir la fuente de calor a través de todo el microreactor.

Como es esperado al implementar una cobertura de cobre sobre las canalizaciones del reactor como es el caso del prototipo PCD, la transferencia de calor se vio sumamente optimizada. Al trabajar con celdas Peltier, fue posible generar una gradiente de temperatura que permitió calentar la lámina de aluminio y, por consiguiente, el reactivo dentro de las canalizaciones del microreactor. Al manejar una distribución de calor a través de toda la placa de cobre y está, al estar en contacto directo con el reactivo, el sistema mostró una tendencia a alcanzar cualquier temperatura deseada de manera rápida. El problema que surge al trabajar con el prototipo PCD es que, para nuestras aplicaciones, el prototipo queda excluido como un fotoreactor ya que se impide el paso de luz hacia las canalizaciones. No obstante, una solución a este problema podría ser la adaptación de filamentos transparentes como material de impresión; de igual manera, al tener acceso a este tipo de filamentos se podría generar distintos prototipos a partir del MB que utilizan esta propiedad a nuestro favor.

Realizando una simple modificación al prototipo PCD se consiguió el prototipo PCI, el cual permitió el paso de luz a las canalizaciones del microreactor. La única desventaja en comparación al modelo PCD es la separación que se generó entre la lámina de cobre y las canalizaciones. Esta separación no provocó grandes fluctuaciones en los resultados, mostrando una menor temperatura de la anteriormente obtenida (ver tabla 3). En general, los sistemas Peltier muestran buenos resultados impartiendo calor al fluido ya que implementa materiales con alta eficiencia de transferencia de calor. Los problemas que surgen en estos equipos es el manejo de las celdas Peltier. Estas celdas generan una gradiente de calor donde una cara de la celda se calentará, pero la cara opuesta se enfriará; este fenómeno podría ser causa de problemas en sistemas implementados en laboratorios.

Otra dificultad encontrada en estos sistemas es el control de temperatura y las pérdidas de calor a través de las celdas. El momento de controlar estas celdas, su potencia de funcionamiento debe controlarse con mayor grado de precisión. En las simulaciones, se tomó solo una fracción de la potencia total de las celdas (10 W) ya que no fue posible generar un sistema de apagado automático de las celdas Peltier en la simulación. Si fuera el caso de tomar la potencia sugerida de funcionamiento (60 W), dentro de las simulaciones el calor emitido por parte de las celdas sobrepasaba temperaturas tolerables para el microreactor (150 °C – 180 °C), derritiendo la pieza. Otro punto de dificultad es el monitoreo de la temperatura del fluido en el reactor físico. Teniendo canalizaciones tan estrechas, implementar una termocupla de bajo costo sería imposible; otra alternativa es la implementación de sensores de temperatura infrarrojos.

En el caso de implementar un sistema de monitoreo y control de temperatura del fluido, el calor impartido por la celda calentaría primero al reactor y luego al fluido. Puede ser posible que la base del reactor alcance temperaturas mayores a las deseadas hasta calentar al fluido frío, comprometiendo la integridad del reactor. Por otro lado, la modificación BA (ver figura 12) permitió distribuir el calor por parte del fluido caliente a través de toda la base del microreactor, similar a lo observado en el modelo PCI. En esta variante, se obtuvo temperaturas razonables de calentamiento, mejores a las que se obtuvo en el prototipo TT. La ventaja del modelo BA es que el control de temperatura en un modelo físico es sumamente sencillo de incorporar; en primer lugar, una termocupla de bajo costo se puede adaptar a un reservorio, calentándolo mediante el uso de una resistencia eléctrica. De esta manera se evita sobrecalentar el reactor y se garantiza la temperatura del fluido caliente de manera segura. De igual manera, tener un reservorio de agua permite sumergir al microreactor, generando un pseudo aislamiento, así reduciendo pérdidas de calor por parte de los bordes del microreactor y por parte de la tapa de acrílico.

A partir de los resultados obtenidos en la figura 17, se adaptó los principios del prototipo BA como el prototipo final al ensamblar el sistema de precalentamiento con un microreactor con nuevas dimensiones, las cuales se realizaron extendiendo el ancho y largo del MB de 7 x 14 cm a 16 x 16 cm.

## 4.2 Prototipo final (PF)

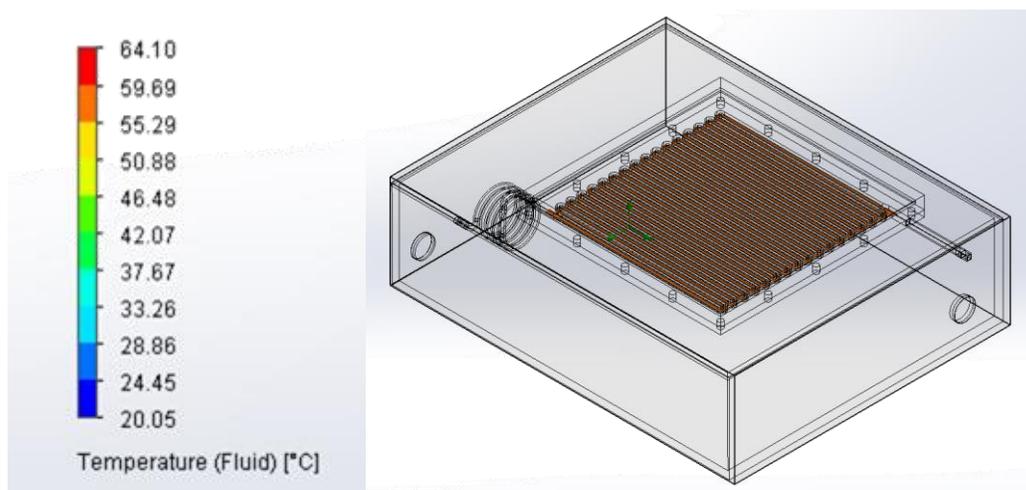


Figura 18.- Simulación computacional del prototipo PF a  $1 \text{ ml h}^{-1}$ .

Al ver la figura 18, se aprecia que la temperatura del sistema se mantuvo cerca a los  $60 \text{ }^\circ\text{C}$  a través de las canalizaciones del microreactor. La temperatura de salida del PF fue de  $57.32 \text{ }^\circ\text{C}$ , mientras que la temperatura mínima fue de  $57 \text{ }^\circ\text{C}$ . En esta simulación se probó la capacidad de retener calor en el sistema, por lo cual fue más útil encontrar la temperatura mínima del reactivo en las canalizaciones que la temperatura máxima la cual se obtuvo en la sección de precalentamiento.

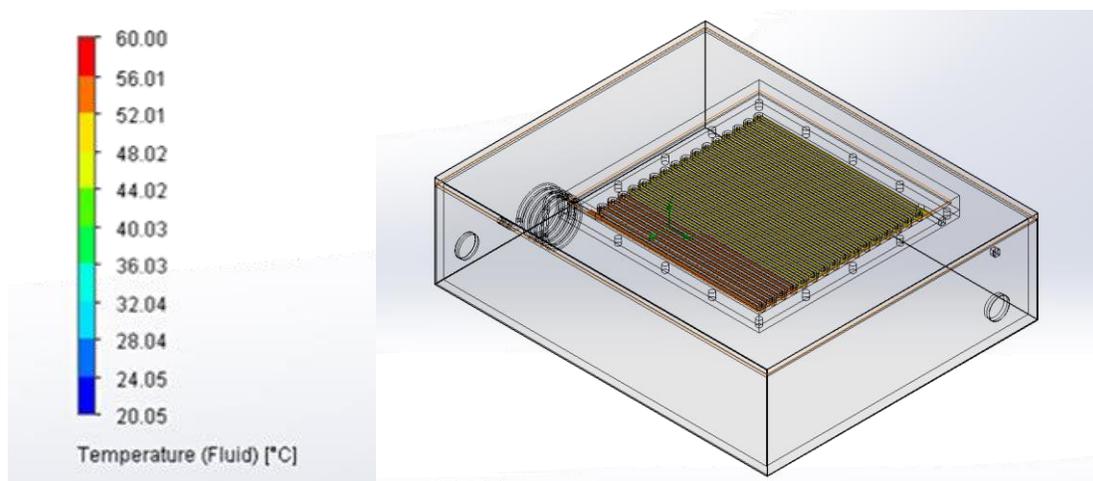


Figura 19.- Simulación computacional del prototipo PF a  $100 \text{ ml h}^{-1}$ .

Al observar los resultados de la simulación (ver figura 19), se evidencia que el reactivo no logró mantener una temperatura constante a través de las canalizaciones del microreactor. No obstante, la temperatura mínima que se obtuvo fue de 53.88 °C y una temperatura de salida de 54.44 °C. A continuación, se puede observar la temperatura mínima y de salida de prototipo final a ambas condiciones de flujo (ver tabla 5).

Tabla 5.- Temperaturas máximas y de salida del reactor de los prototipos a 100 ml h<sup>-1</sup>

<b>Caudal de flujo ml h<sup>-1</sup></b>	<b>Temperatura mínima °C</b>	<b>Temperatura de salida °C</b>
1	55	57
100	54	54

### **4.3 Ensamblaje final**

El ensamblaje del prototipo final se realizó mediante la adaptación de un reservorio de agua fría, la cual fue calentada por medio de una resistencia eléctrica con una potencia de 1000 W que se controlaría por medio de un sistema relé – Arduino. De esta manera, fue factible generar un código computacional que determino las condiciones de temperatura deseadas a llegar, es decir, 60 °C en el reservorio de agua fría. Al calentar el reservorio, se empujó el fluido por medio de bombas de pecera a un segundo recipiente el cual se ensambló de manera similar a la observada en la figura 18. Fácilmente, se imprimió soportes de PLA que elevaron al microreactor a cualquier nivel deseado por encima o sumergido en el segundo recipiente.

Dado la situación actual de confinamiento debida a la Pandemia del coronavirus, fue imposible adaptar bombas de jeringa encontradas en el laboratorio de la universidad, por lo cual las pruebas

de concepto se realizaron a condiciones de flujo mucho más altas de las simuladas; esto se realizó con el propósito de comprobar el flujo dentro del microreactor y comprobar la factibilidad del equipo. Es recomendable realizar estudios futuros donde se trabaje con distintas reacciones químicas para comprobar o refutar el funcionamiento químico del equipo, ya que este estudio se enfocó en las posibilidades térmicas del sistema.

## CAPÍTULO 5: CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Este proyecto se enfocó en el desarrollo de un microreactor impreso en 3D de bajo costo debido a que existen una serie de ventajas de estos microsistemas a comparación medios de reacción tradicionales. Al adaptar el modelado y simulación computacional, fue posible generar un prototipo con un sistema de control de temperatura incorporado; este impartió un alto grado de versatilidad al sistema.

Mediante el modelado computacional del microreactor, con el manejo del SolidWorks como programa computacional, se logró diseñar un modelo base (MB) de manera eficiente. Gracias a la facilidad de manejo y ambiente amigable, incluso para principiantes que piensen usar el programa, el desarrollo fue exitoso, donde pequeños cambios y mejoras al microreactor se lograron de manera inmediata dentro del programa.

De manera similar al desarrollo del MB, la elaboración de las distintas variantes y su configuración bajo diferentes condiciones de transferencia de calor fue exitosa. Mediante el manejo del programa computacional, la determinación de distintos materiales y el ensamblaje de varios componentes como las celdas Peltier o las coberturas de acrílico, se logró generar los distintos modelos y prototipos a partir del modelo básico. A partir de estos prototipos, la determinación de los parámetros de simulación fue similar en todos los casos, donde las fronteras del sistema, es decir, la entrada y salida de los fluidos, fueron los parámetro más importante y clave para una correcta simulación.

Fue claro observar que las condiciones de flujo y parámetros de la simulación arrojaron resultados coherentes, por lo cual la simulación de transferencia de calor en los distintos prototipos se consideró como exitosa. Observando los resultados obtenidos bajo las condiciones mínimas y máximas de flujo (ver tabla 3 y 4, respectivamente), muchos de los prototipos mostraron en algunos casos un calentamiento máximo considerable desde 45 °C hasta 62 °C; sin embargo, el calentamiento del reactivo dentro de las canalizaciones no se realizó de manera inmediata por lo cual se consideró adaptar un sistema de precalentamiento que aseguró la temperatura de ingreso del reactivo al microreactor.

Ya que el prototipo BA se consideró como el sistema más sencillo de integrar a una prueba de concepto real, mediante adaptación de código, un microcontrolador, relé y una resistencia, se definió el prototipo final de microreactor (PF). Se debe recordar que existen variables que pueden cambiar la efectividad de los modelos. Al implementar distintos filamentos termomoldeables, es posible obtener mayores o menores temperaturas de calentamiento del reactivo. Adicionalmente, la manufactura aditiva es una tecnología que sigue desarrollándose y donde nuevos procesos de impresión, al igual que el desarrollo de nuevos materiales, podrían reducir las limitaciones de impresión actuales.

Este trabajo representa una base de diseño que puede optimizarse con estas tecnologías en un futuro; por medio de este procedimiento y los resultados obtenidos, se logró desarrollar un microreactor adaptado para fotorreacciones con un control de temperatura incorporado de bajo costo y alta reproducibilidad.

## CAPÍTULO 6: REFERENCIAS

- [1] “MICRO-CHEMICAL TECHNOLOGY-- 《Journal of Chemical Industry and Engineering(China)》 2003年04期”. [https://en.cnki.com.cn/Article\\_en/CJFDTotals-HGSZ200304003.htm](https://en.cnki.com.cn/Article_en/CJFDTotals-HGSZ200304003.htm) (accedido feb. 11, 2021).
- [2] “Microreactor”. <https://store.micronit.com/microreactor.html> (accedido feb. 03, 2021).
- [3] P. J. Kitson, M. H. Rosnes, V. Sans, V. Dragone, y L. Cronin, “Configurable 3D-Printed millifluidic and microfluidic ‘lab on a chip’ reactionware devices”, *Lab. Chip*, vol. 12, n° 18, p. 3267, 2012, doi: 10.1039/c2lc40761b.
- [4] “The History of 3D Printing: From the 80s to Today”, *Sculpteo*. <https://www.sculpteo.com/en/3d-learning-hub/basics-of-3d-printing/the-history-of-3d-printing/> (accedido feb. 11, 2021).
- [5] “Industrial Applications of 3D Printing: The Ultimate Guide”, *AMFG*. <https://amfg.ai/industrial-applications-of-3d-printing-the-ultimate-guide/> (accedido feb. 03, 2021).
- [6] X. Yao, Y. Zhang, L. Du, J. Liu, y J. Yao, “Review of the applications of microreactors”, *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 47, pp. 519–539, jul. 2015, doi: 10.1016/j.rser.2015.03.078.
- [7] W. E. Svendsen, “Basic Microfluidics Theory”, en *Lab-on-a-Chip Devices and Micro-Total Analysis Systems*, J. Castillo-León y W. E. Svendsen, Eds. Cham: Springer International Publishing, 2015, pp. 17–26.
- [8] “Microfluidics applications: a short review - Elveflow”. <https://www.elflow.com/microfluidic-reviews/general-microfluidics/microfluidics-applications-a-short-review/> (accedido mar. 06, 2021).

- [9] M. Z. Bazant y T. M. Squires, “Induced-Charge Electrokinetic Phenomena: Theory and Microfluidic Applications”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 92, n° 6, p. 066101, feb. 2004, doi: 10.1103/PhysRevLett.92.066101.
- [10] M. H. Matin y W. A. Khan, “Entropy generation analysis of heat and mass transfer in mixed electrokinetically and pressure driven flow through a slit microchannel”, *Energy*, vol. 56, n° C, pp. 207–217, 2013.
- [11] P. Tabeling, *Introduction to Microfluidics*. OUP Oxford, 2005.
- [12] “Microfluidics and Nanofluidics: Theory and Selected Applications | Wiley”, *Wiley.com*.  
<https://www.wiley.com/en-us/Microfluidics+and+Nanofluidics%3A+Theory+and+Selected+Applications-p-9781118415276> (accedido mar. 06, 2021).
- [13] “ARTECH HOUSE USA : Microfabrication for Microfluidics”.  
<https://us.artechhouse.com/Microfabrication-for-Microfluidics-P1360.aspx> (accedido mar. 06, 2021).
- [14] “ARTECH HOUSE USA : Fundamentals and Applications of Microfluidics, Third Edition”. <https://us.artechhouse.com/Fundamentals-and-Applications-of-Microfluidics-Third-Edition-P1999.aspx> (accedido mar. 06, 2021).
- [15] “2.1.4. Bombeo de microfluidos - Capítulo Fundamentos de los Microprocesos”.  
<https://med.se-todo.com/himiya/31226/index.html?page=2> (accedido mar. 06, 2021).
- [16] “FDM vs. SLA: Compare the Two Most Popular Types of 3D Printers”, *Formlabs*.  
<https://formlabs.com/blog/fdm-vs-sla-compare-types-of-3d-printers/> (accedido feb. 03, 2021).

- [17] D. J. Beebe, G. A. Mensing, y G. M. Walker, “Physics and Applications of Microfluidics in Biology”, *Annu. Rev. Biomed. Eng.*, vol. 4, n° 1, pp. 261–286, ago. 2002, doi: 10.1146/annurev.bioeng.4.112601.125916.
- [18] “Guía sobre impresión 3D por estereolitografía (SLA) de 2020”, *Formlabs*.  
<https://formlabs.com/es/blog/guia-definitiva-estereolitografia-sla-impresion-3d/> (accedido feb. 03, 2021).
- [19] J. P. McMullen y K. F. Jensen, “Integrated microreactors for reaction automation: new approaches to reaction development”, *Annu. Rev. Anal. Chem. Palo Alto Calif*, vol. 3, pp. 19–42, 2010, doi: 10.1146/annurev.anchem.111808.073718.
- [20] R. Srinivasan *et al.*, “Micromachined Reactors for Catalytic Partial Oxidation Reactions”, *AIChE J.*, vol. 43, n° 11, pp. 3059–3069, nov. 1997, doi: 10.1002/aic.690431117.
- [21] “Flow-BuyersGuide-SourceFiles-Push22-041718.pdf”. Accedido: abr. 14, 2021. [En línea].  
Disponible en: <https://www.solidworks.com/sw/images/content/Flow-BuyersGuide-SourceFiles-Push22-041718.pdf>.
- [22] S. Farah, D. G. Anderson, y R. Langer, “Physical and mechanical properties of PLA, and their functions in widespread applications — A comprehensive review”, *Adv. Drug Deliv. Rev.*, vol. 107, pp. 367–392, dic. 2016, doi: 10.1016/j.addr.2016.06.012.
- [23] “Fused Deposition Modeling vs Selective Laser Sintering Watertightness Test”.  
<https://www.xometry.com/blog/sls-vs-fdm-3d-printing-watertightness-test/> (accedido feb. 03, 2021).
- [24] “Can You Dissolve Polylactic Acid (PLA)? Is it Possible? | 3D Printing Spot”.  
<https://www.3dprintingspot.com/post/can-you-dissolve-polylactic-acid-pla-is-it-possible> (accedido feb. 03, 2021).

- [25] D.-H. Ko, K.-W. Gyak, y D. Kim, “Emerging Microreaction Systems Based on 3D Printing Techniques and Separation Technologies”, *J. Flow Chem.*, vol. 7, pp. 1–10, oct. 2017, doi: 10.1556/1846.2017.00013.

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco mucho a mi familia, quienes a pesar de todo siempre estuvieron y están presentes apoyándome y dirigiéndome a cumplir mis metas. Entre mi familia, está mi pareja, quien ha sido un cambio en mi vida, impulsándome a ser una mejor persona en todos los aspectos. También agradezco mucho a mis tutores de tesis, quienes fueron una gran ayuda en el transcurso de este proyecto, así como a mis amigos más cercanos, por siempre estar cerca apoyándonos y dándonos la mano...

## CAPÍTULO 7: ANEXO A - METODOLOGÍAS DE MODELADO Y SIMULACIÓN

### 7.1 Modelado de los prototipos

#### 7.1.1 Modelado detallado MB

Mediante el programa computacional SolidWorks se desarrollará los dibujos conceptuales. El desarrollo en 2D mediante herramientas “Sketch” (ver figura 20) escoger la opción de línea dibujando el contorno de la pieza de acuerdo con las dimensiones de impresión de prueba 7 x 14 cm de ancho y largo respectivamente.

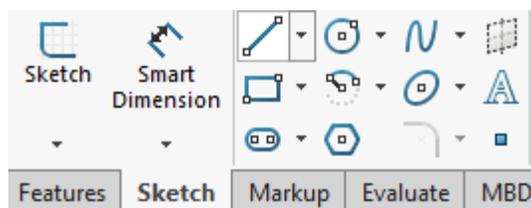


Figura 20.- Herramienta “Sketch”.

Dibujar el contorno interno de la pieza con la herramienta de línea realizando una apertura de 3.16 mm la cual se acoplará a la alimentación de reactivos de 18 mm de largo. Las canalizaciones del sistema se dibujarán con un ancho de 2 mm y serán rectangulares con un largo de 10 cm con una separación de 2 mm entre canalizaciones. Mediante herramientas “Features” escoger “Fillet” y determinar el parámetro radial a 60.00 mm en las esquinas externas del canalizado rectangular. Repetir el paso anterior y determinar el parámetro radial a las esquinas internas del canalizado a 20.00 mm (ver figura 21).

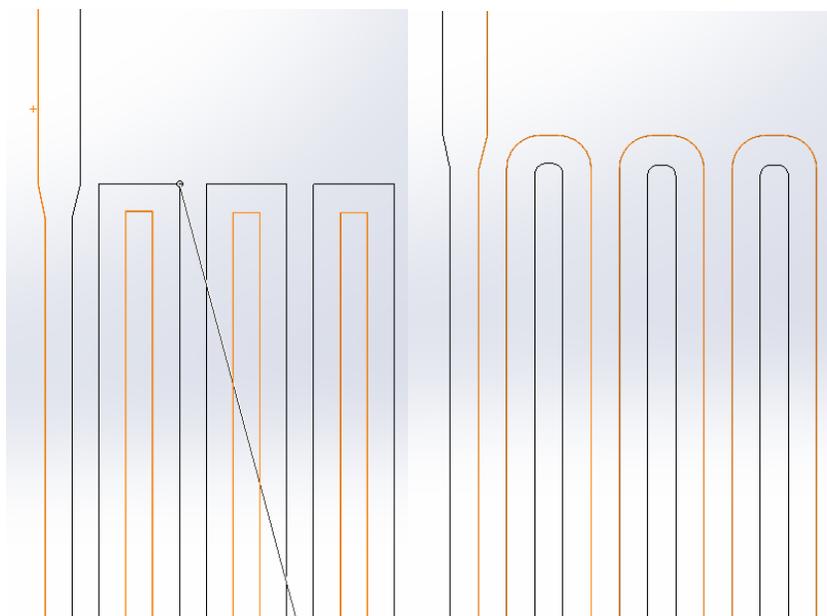


Figura 20.- “Fillet” de las canalizaciones del microreactor.

Mediante herramientas “Features” escoger “Extrude” seleccionando el contorno de la pieza (omitiendo las canalizaciones) a un grosor de 5 mm. Repetir el paso anterior escogiendo el parámetro de las canalizaciones a un grosor de 1.16 mm obteniendo una canalización de 3.84 mm de profundidad (ver figura 21).

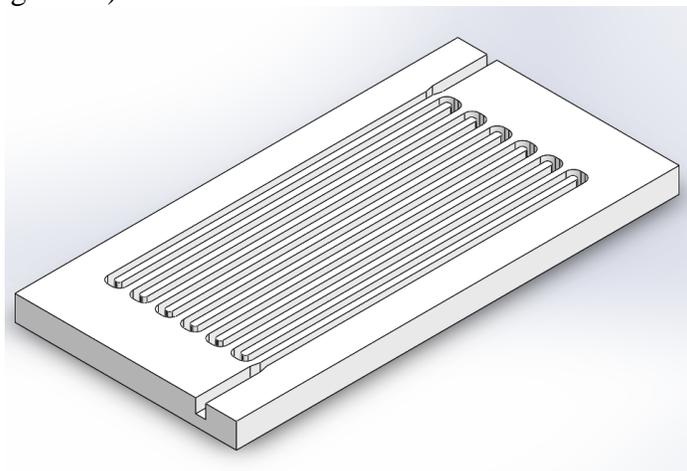


Figura 21.- Modelado computacional del MB.

Mediante el modelo terminado se realizarán pruebas de impresión. Aprobado el modelo pequeño se adaptará a las condiciones de impresión máximas de la impresora acoplada al proyecto, cambiando dimensiones del equipo de largo y ancho a 16 x 16 cm (ver figura 22) manteniendo las dimensiones de canalización, grosor, entrada y salida del reactivo únicamente aumentando el largo de las canalizaciones y el número total de estas. Realizado las nuevas dimensiones del equipo en 3D, mediante herramientas “Features” Escoger “circle” y dibujar una serie de 5 circunferencias distribuidas equitativamente alrededor de los bordes del reactor con un diámetro de 2 mm con 5 mm de separación de los bordes de la pieza. Mediante herramientas “Features” escoger “Extrude” seleccionar todas las circunferencias y extraerlas hacia a dentro de la pieza perforándola, obteniendo una serie de perforaciones del reactor.

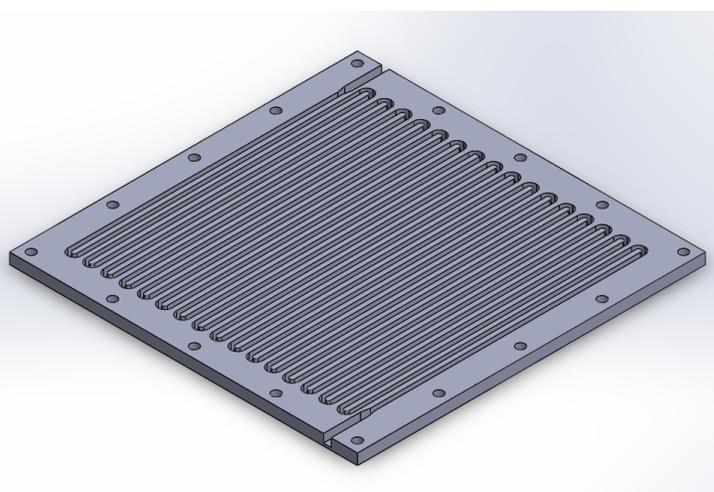


Figura 22.- Modelado computacional del MB.



Definido la canalización y apertura de la tubería escoger en las herramientas “Features” escoger “Swept Cut” escoger dentro de la categoría de perfil y camino la opción de perfil de boceto y seleccionar la circunferencia en la primera categoría y en la segunda el boceto en 3D de la canalización de la tubería (ver figura 24).

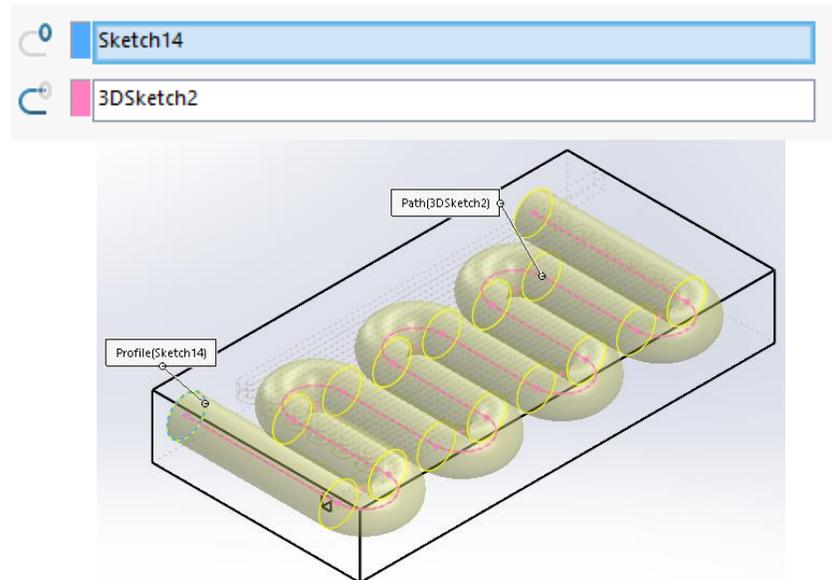


Figura 24.- Generación de las canalizaciones del modelo TT

### 7.1.3 Modelado detallado PCI y PCD

Abrir un archivo nuevo en SolidWorks. Mediante las herramientas “Sketch” escoger la opción de rectángulos y realizar cuadrados semejantes a las dimensiones de celdas Peltier comercialmente disponibles de 4 x 4 cm y extruirlas 3 mm mediante las herramientas “Features” y “Extrude” Repetir el paso anterior hasta obtener 3 celdas pequeñas (ver figura 25).

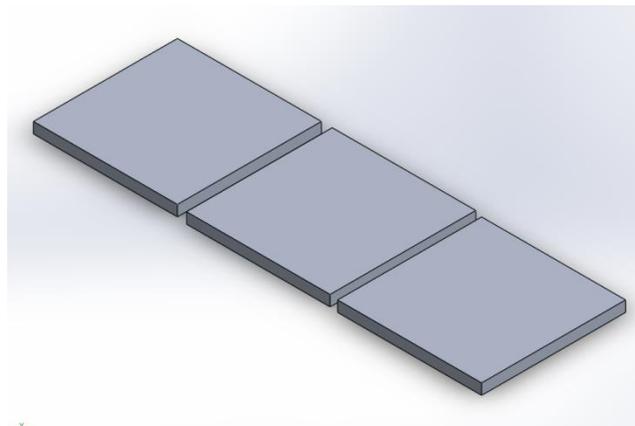


Figura 25.- Celdas Peltier modeladas en SolidWorks.

Realizar una cobertura rectangular que cubra el reactor prototipo pequeño de manera semejante a pasos anteriores. Abrir un nuevo documento en SolidWorks escogiendo la opción de ensamblaje (ver figura 26).

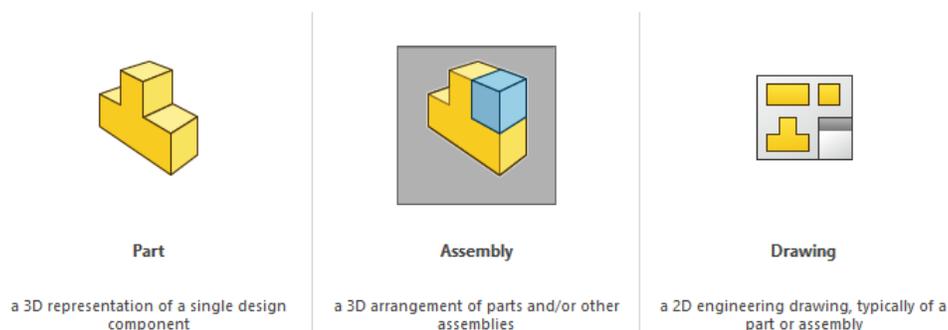


Figura 26.- Opción de ensamblaje de la pieza en SolidWorks

Abrir los tres archivos de trabajo, es decir, el prototipo de reactor pequeño, la tapa del reactor y las celdas Peltier. Mover las tres piezas mediante el uso de coordenadas y la determinación de coincidencias entre las caras de las distintas figuras para realizar contacto entre las piezas como se observa en la figura 27.

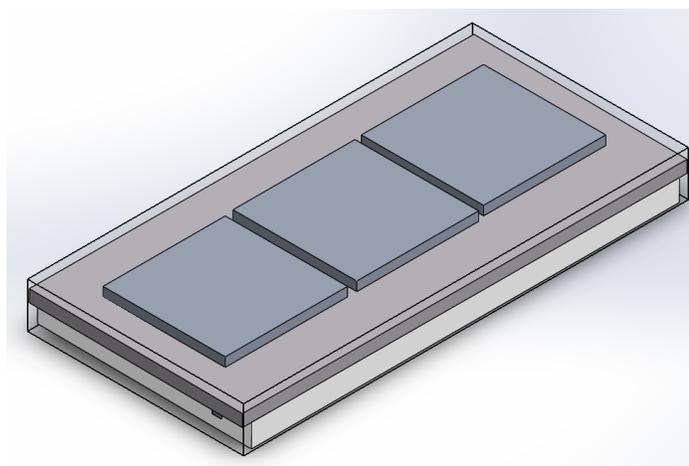


Figura 27.- Ensamblaje computacional del prototipo PCD.

### 7.1.3 Modelado detallado BA

Abrir un archivo nuevo en SolidWorks. Mediante herramientas “Sketch” escoger la opción de línea dibujando un rectángulo de 46 x 28 cm de ancho y largo. A partir de la base realizada en el paso mediante herramientas “Features” escoger “Extrude” y extender el grosor de la base a 1 cm de ancho. Mediante herramientas “Sketch” escoger la opción de línea dibujando un rectángulo concéntrico a la base extruida de 45 x 27 cm de ancho y largo. Escoger el bordeado que se realizó en el paso anterior y extruir la figura mediante herramientas “Features” y “Extrude” generando las paredes de la pieza elevándola unos 46 mm (ver figura 28).

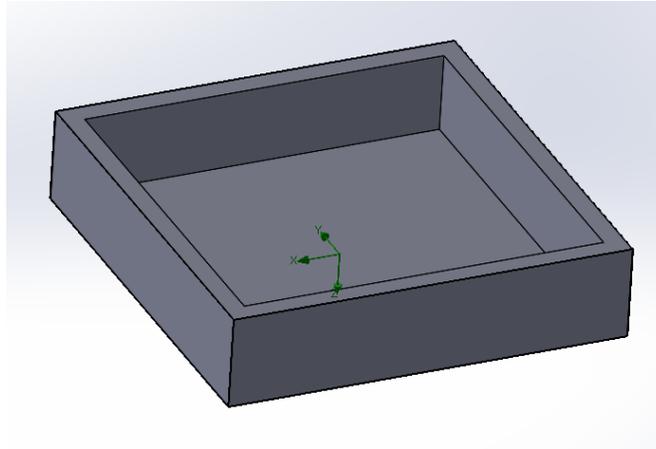


Figura 28.- Tina de agua.

Escoger una cara lateral de la pieza, mediante herramientas “Features” y “circle” dibujando un círculo con una circunferencia de 12 [mm] de radio y extruir esta pieza con la opción “Extruded cut” traspasando la pieza generando una perforación en esta. Abrir el archivo del reactor prototipo pequeño y en su base dibujar circunferencias mediante herramientas “Sketch” escoger la opción de circunferencias para simular los soportes para el reactor. Extruir las circunferencias generando pequeñas columnas de soporte de 33 mm de alto. Abrir un nuevo documento en SolidWorks escogiendo la opción de ensamblaje y escoger la tina realizada con el reactor y sus nuevas columnas de soporte. Ensamblar ambas piezas obteniendo el sistema acoplado (ver figura 29).

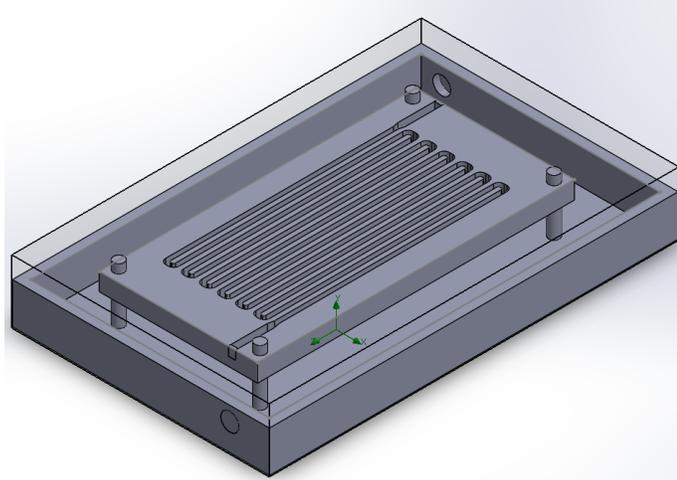


Figura 29.- Ensamblaje computacional del prototipo BA.

## 7.2 Metodología de la simulación

Todos los sistemas se manejarán con el mismo desarrollo de simulación. Se requiere que todos los modelos sean impermeables por lo cual mediante las herramientas “Flow Simulation” “Tools” escoger “Create lids” (ver figura 30) y escoger todas las superficies planas de entradas y salidas de fluidos en los prototipos generando tapas automáticamente sellando los modelos.

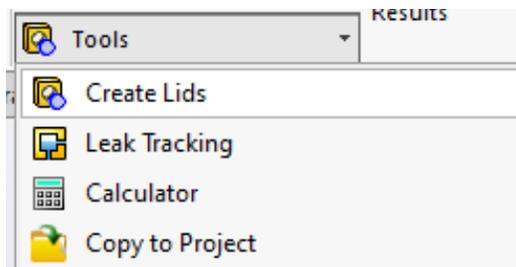


Figura 30.- Opción de creación de tapas en SolidWorks

En las herramientas “Flow Simulations” Escoger el modelo de wizard para empezar a definir el sistema de simulación cada paso estará descrito a continuación.

- Nombrar al proyecto.
- Escoger las unidades del sistema (métricas o imperiales).
- Excluir las cavidades sin condiciones de flujo, análisis de tipo interno y escoger la transferencia de calor en sólidos.
- Escoger los fluidos dentro del sistema, para las simulaciones se utilizará agua.
- Escoger el material del reactor, dentro de polímeros escoger la opción de PLA.
- Aplicar condiciones adiabáticas al sistema.

Definido el sistema será necesario crear los subdominios de fluidos mediante clic derecho en la categoría “Fluid Subdomains” (ver figura 31), creando un nuevo subdominio y escogiendo el fluido y temperatura del mismo definido en pasos anteriores.

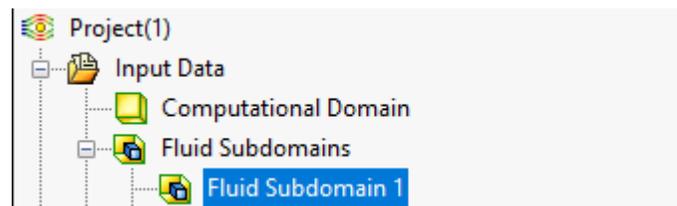


Figura 31.- Opción de determinación de los dominios del fluido.

Continuado será necesario crear 4 condiciones de borde (ver figura 32) similares a la creación de los subdominios de fluidos. 2 de estas condiciones de borde se definirán como entradas de fluidos y 2 como condiciones de presión en los puntos de salida.

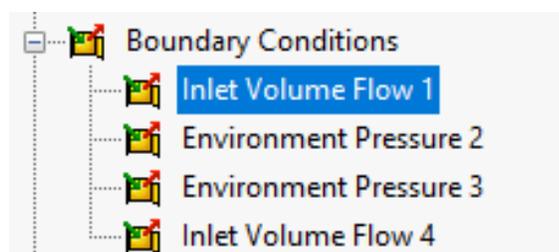


Figura 32.- Opción de determinación de las condiciones de borde en SolidWorks.

En las condiciones de borde de entrada se definirá el caudal y temperatura que se deseen simular. Al escoger las caras en las condiciones de entrada es sumamente importante escoger la cara interior de la tapa (ver figura 33) generada automáticamente por la opción “Create Lids” descrita anteriormente.

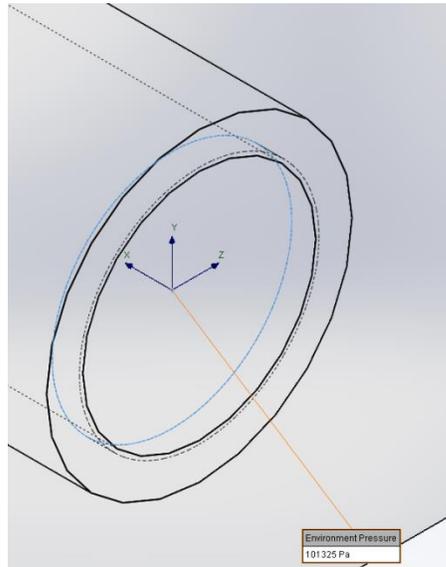


Figura 33.- Cara interior de las tapas generadas en SolidWorks.

De igual manera que el paso anterior la cara para definir las condiciones de presión de salida deben ser las internas a las tapas generadas escogiendo la opción “Environment Pressure”. Las condiciones para evaluar se definen mediante la creación de metas donde se deberán escoger las caras interiores de los puntos de salida de los fluidos y habilitar los parámetros que se deseen observar, ya sean puntos mínimos, promedio o máximos. Se creará 2 metas para cada uno de los fluidos de los distintos prototipos del sistema (ver figura 34).



Figura 34.- Determinación de las metas del sistema en SolidWorks.

Para el caso del sistema Peltier se deberá optar por una distinta configuración agregando una fuente de calor la cual se caracteriza por los Watts generados por celdas Peltier comercialmente disponibles (ver figura 35).

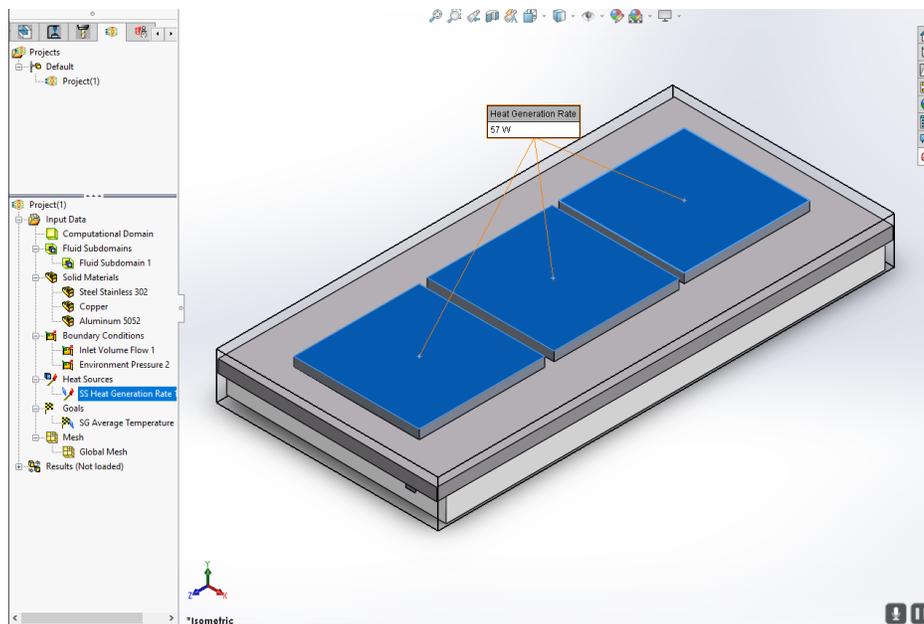


Figura 35.- Opción de generación de calor en SolidWorks

Ya definidas las condiciones del sistema el mallado se realizará automáticamente y se procederá a correr la simulación y observar los resultados obtenidos.

## CAPÍTULO 8: ANEXO B - RESULTADOS

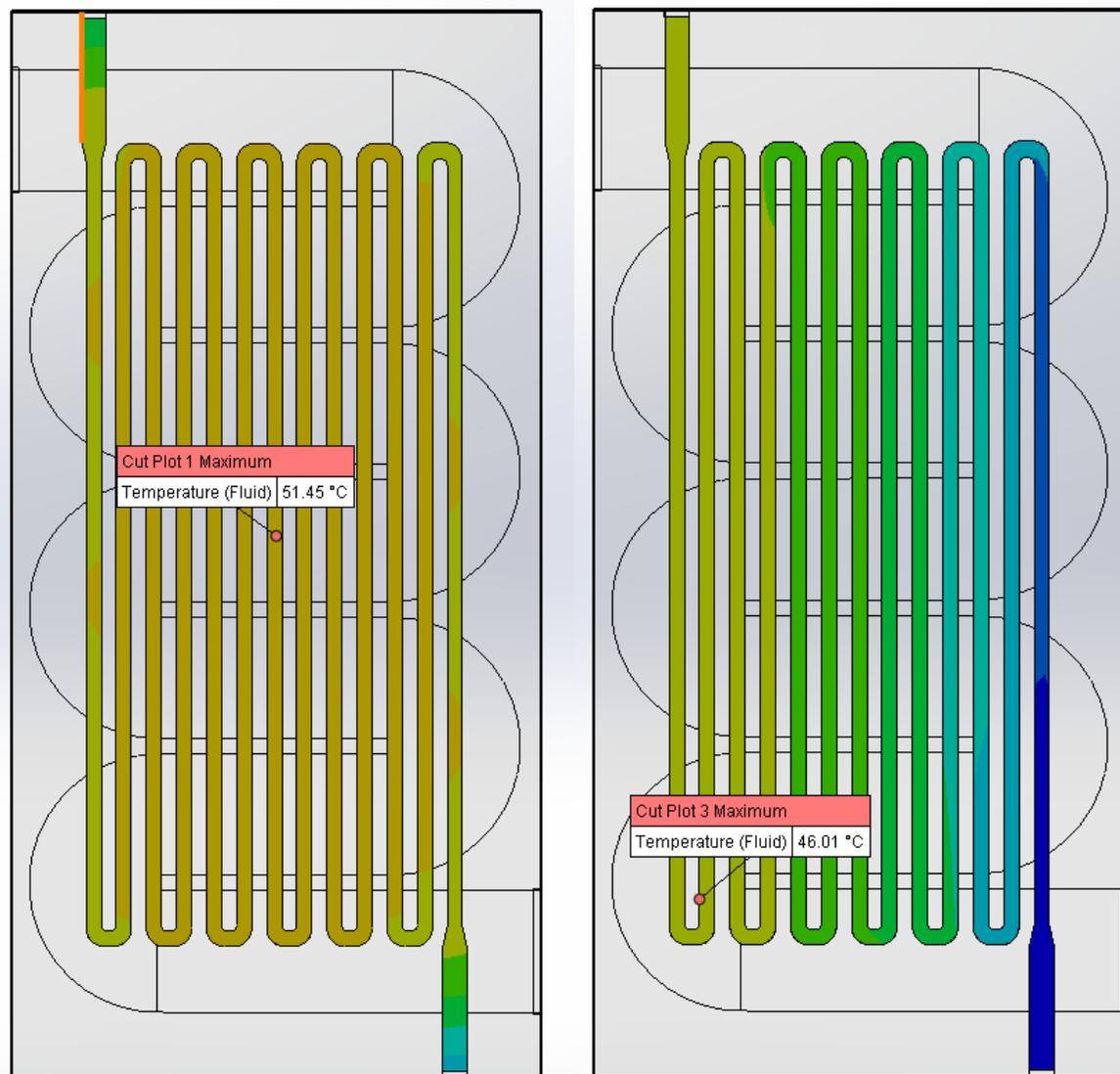


Figura 36.- Puntos de temperatura máxima a condiciones de flujo mínimo y máximo para el prototipo TT

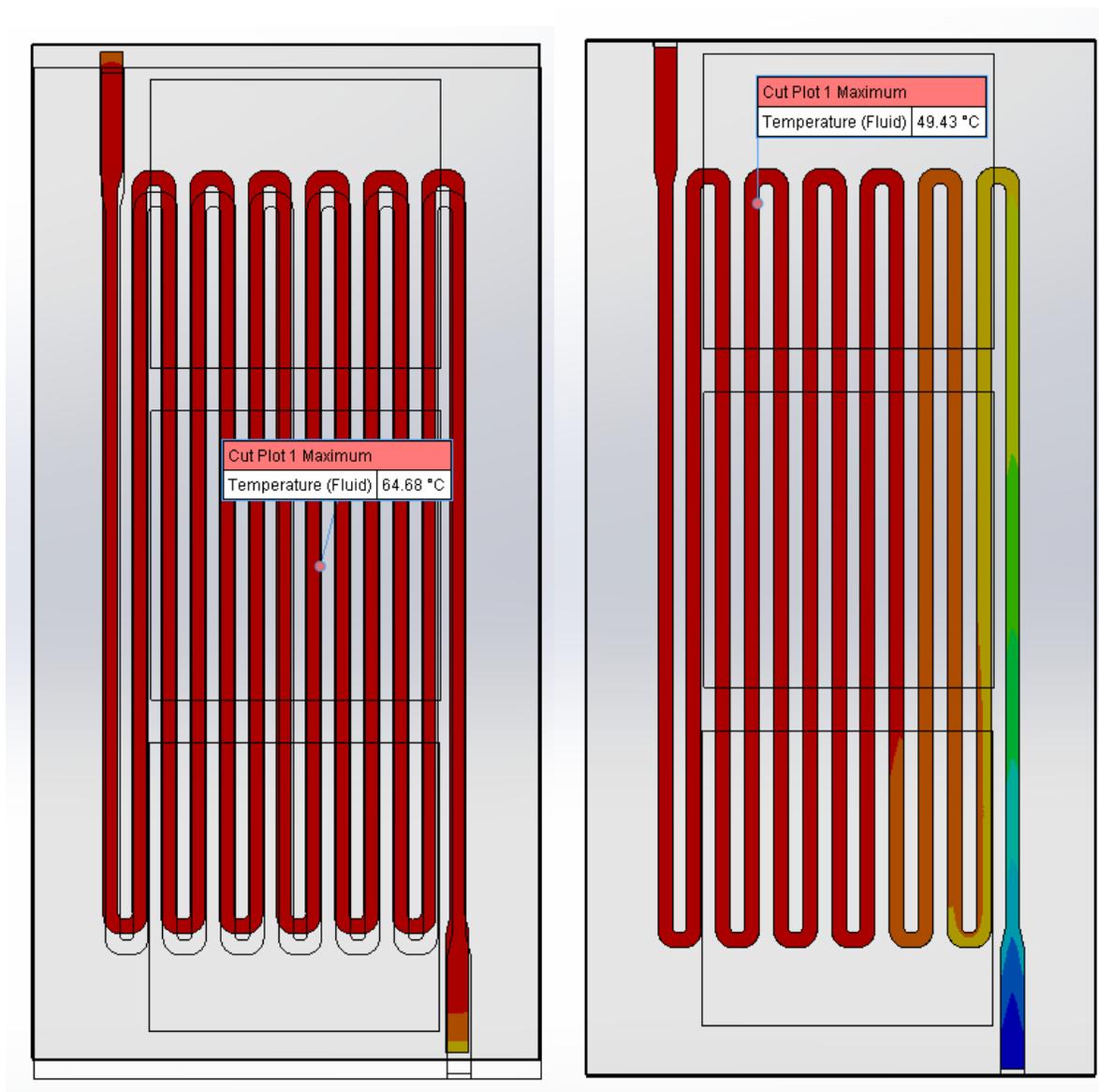


Figura 37.- Puntos de temperatura máxima a condiciones de flujo mínimo y máximo para el prototipo PCD

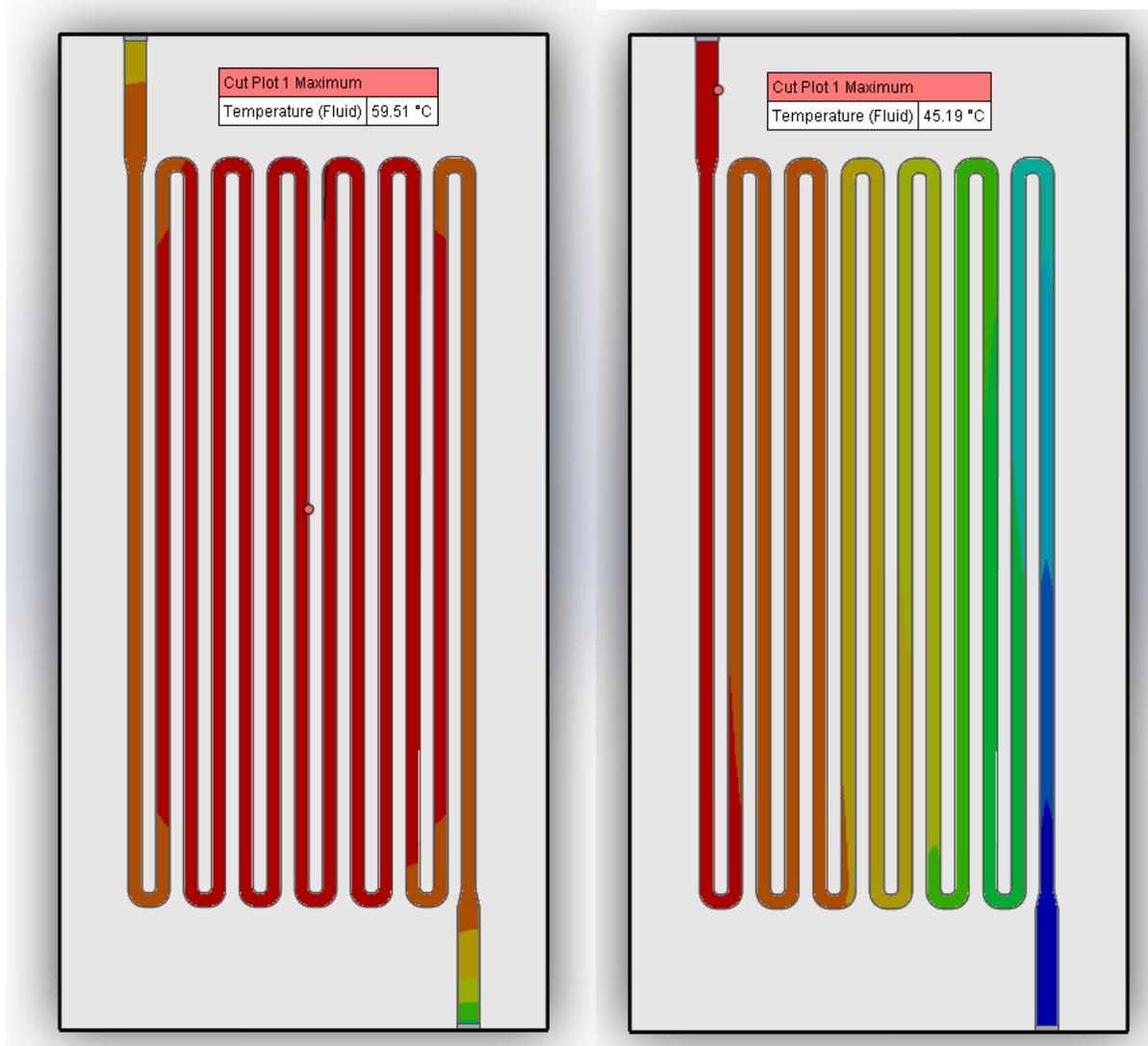


Figura 38.- Puntos de temperatura máxima a condiciones de flujo mínimo y máximo para el prototipo PCI

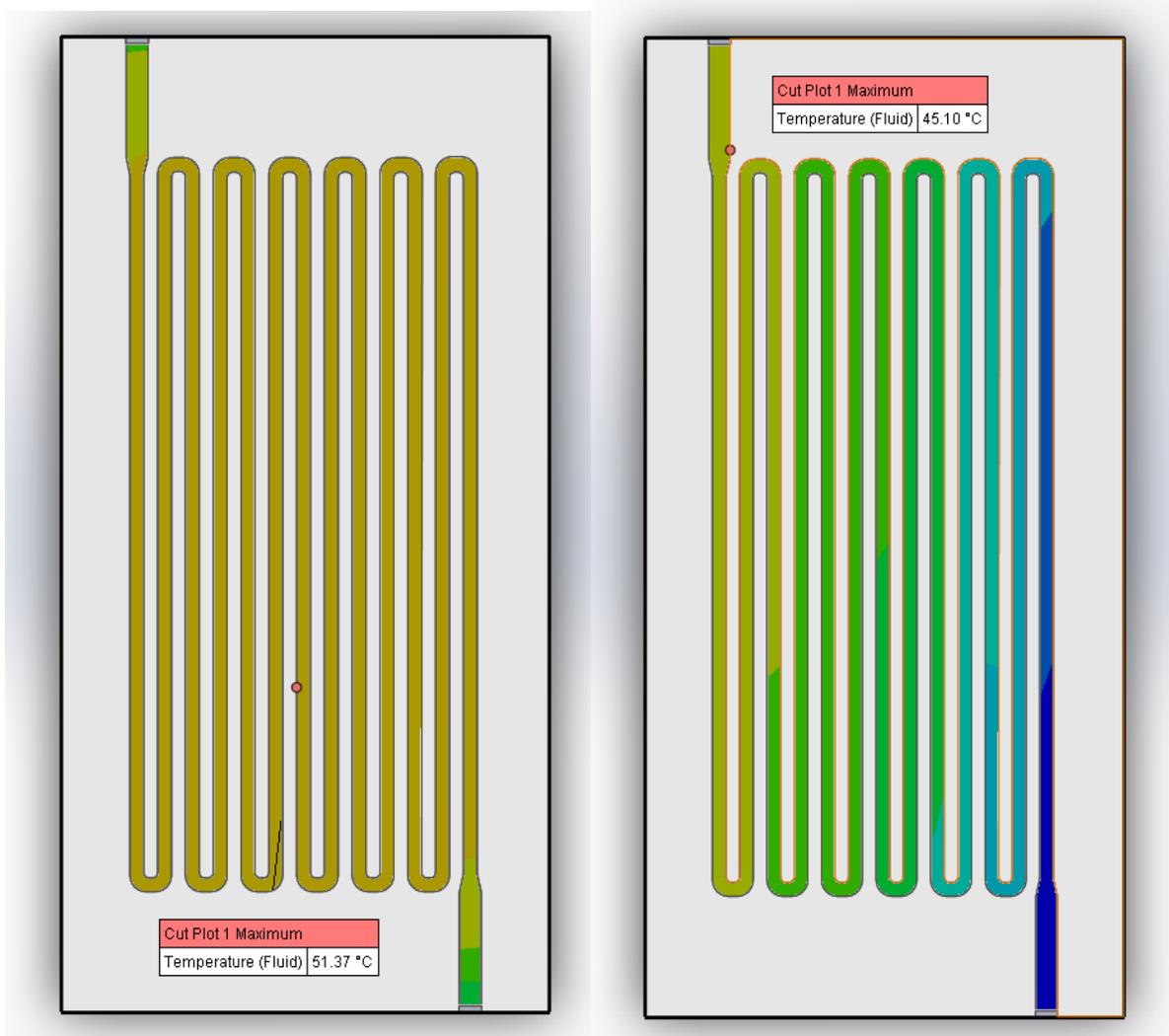


Figura 39.- Puntos de temperatura máxima a condiciones de flujo mínimo y máximo para el prototipo BA