



UNIVERSIDAD LA SALLE
ESCUELA DE QUIMICA
INCORPORADA A LA U.N.A.M.

300618

17
27

"ANALISIS COMPARATIVO DE DOS TIPOS DE REACTORES

PARA LA OBTENCION DE MTBE"

TESIS PROFESIONAL

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

INGENIERA QUIMICA

PRESENTA

ELSA YURIKO | TSUJI BALDERAS

ASESOR

M. EN C. JOSE LUIS GONZALEZ DIAZ

México, D.F. Junio de 1995.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

INDICE

	página
I. INTRODUCCION Y OBJETIVO	1
II. ANTECEDENTES.....	2
II.1a Contaminación e importancia del índice de octano en la gasolina	
II.1b Agotamiento de la reserva del crudo	
II.2 Ventajas y propiedades del MTBE	
II.3 Economía en la producción del MTBE	
II.3a Costo de materias primas y productos	
II.4 Obtención de MTBE	
II.4a Materias primas	
II.4b Proceso	
II.4c Reacción	
II.4d Mecanismo de reacción	
II.4e Orden de reacción	
II.4f Modelos de reacción	
III. MODELOS DE REACTORES.....	26
III.1 Reactor de lecho fijo	
III.1a Descripción	
III.1b Diseño de un reactor de lecho fijo	
III.2 Reactor de lecho fluidizado	
III.2a Fluidización	
III.2b Ventajas y desventajas de un sistema fluidizado	
III.2c Diseño de un reactor de lecho fluidizado	
IV. SIMULACION DE LOS REACTORES.....	44
IV.1 Obtención de la ecuación de rapidez de reacción	
IV.2 Datos iniciales	
IV.3 Simulación del reactor de lecho fijo	
IV.4 Simulación del reactor de lecho fluidizado	

	página
V. RESULTADOS Y ANALISIS DE RESULTADOS.....	55
V.1 Reactor de lecho fijo	
V.2 Reactor de lecho fluidizado	
V.3 Análisis comparativo de resultados para ambos reactores	
VI. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	72
VII. BIBLIOGRAFIA.....	74
APENDICE A. Nomenclatura	78
APENDICE B. Método de Runge-Kutta.....	81
APENDICE C. Comprobación de la validez de la ecuación de rapidez de reacción.....	82
APENDICE D. Programas para la simulación de los reactores.....	87
APENDICE E. Ejemplo de una corrida del programa para la simulación de cada uno de los reactores.....	111
APENDICE F. Factor de fricción para la obtención del ΔP del lecho fijo Factores de forma para partículas no esféricas	118

I. INTRODUCCION Y OBJETIVO

El problema de la contaminación ambiental causado por las emisiones de gases cuya toxicidad es alta, producida por los automóviles debido a aditivos tales como el tetraetilo de plomo, ha llevado a la búsqueda de sustitutos de dichos aditivos por compuestos que, además de no ser tóxicos, mejoren la calidad de las gasolinas.

Dentro de los sustitutos que se han estudiado, se encuentra el MTBE (Metil Terbutil Eter), el cual ha adquirido gran importancia debido a que presenta características favorables para la gasolina, es económicamente factible y su proceso de producción es prácticamente sencillo. Actualmente se adiciona MTBE a la gasolina en volúmenes de arriba del 10% en países como Francia, Alemania, Italia, Canadá Japón y E.U.A., eliminando así el contenido de plomo en la misma [Ref. No. 17].

La diferencia básica entre los métodos de producción que se han desarrollado para la producción de MTBE, radica en el tipo de reactor a utilizar. Comercialmente se utilizan dos tipos de reactores: REACTOR DE LECHO FIJO y REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO [Ref. No. 17].

La presente Tesis tiene como objetivo el hacer una comparación entre los dos tipos de reactores antes mencionados para la producción del MTBE, mediante el diseño de los mismos, y así determinar las ventajas y desventajas que presentan cada uno de ellos.

II. ANTECEDENTES

II.1a CONTAMINACION E IMPORTANCIA DEL INDICE DE OCTANO EN LA GASOLINA

Uno de los problemas de mayor actualidad es el de la conservación del ambiente. La complejidad de los problemas que crea en el ambiente el desarrollo continuo de los medios de producción, ha planteado la necesidad de abordarlos con un enfoque que integre en una sola disciplina a la economía y la ecología, encontrando los nexos óptimos entre las necesidades del desarrollo y la necesidad de protección y mejoramiento del medio habitado por el hombre.

La contaminación ambiental provocada por los automóviles es un problema grave e insoslayable que se incrementa cada día. Es por esto que se ha buscado reducir las emanaciones contaminantes que resultan del uso de los automóviles mediante la selección de un combustible adecuado.

La fracción de gasolina obtenida por destilación directa del petróleo se mejora por adición de compuestos de mayor índice de octano, es decir, de mayor tendencia antigolpe. Esto, debido a que la explosión de la mezcla combustible-aire, del motor de la gasolina, produce en el cilindro un golpeteo que reduce considerablemente la potencia del motor.

Uno de los aditivos que mejora considerablemente el índice de octano de la gasolina, si se agrega una pequeña cantidad de éste, es el tetraetilo de plomo $(CC_2H_5)_4Pb$, el cual se ha venido utilizando durante varias décadas debido a que resulta ser muy económico, sin embargo, ha provocado la emisión de toneladas de compuestos de plomo al ambiente.

En otros países, la legislación a la protección del ambiente se ha modificado para reducir la cantidad de plomo en las gasolinas. En 1985, la EPA (Environmental Protection Agency), redujo el contenido a 0.5 g de Pb/gal y en 1986 a 0.1 g de Pb/gal. Se anticipa que para el transcurso de los 90's, el plomo será eliminado totalmente.

Sin embargo, su eliminación de las gasolinas provoca una caída del octanaje desde 100.3 para una gasolina con plomo hasta 87.4 para una gasolina sin plomo, por lo que se ha buscado un sustituto que no sólo sea anticontaminante sino que además tenga un alto índice de octano.

La solución por la que han optado diversos países debido a sus propiedades, a la viabilidad del proceso de producción y a la ventaja económica frente a otras opciones, ha sido la sustitución del tetraetilo de plomo adicionado a la gasolina, por un compuesto oxigenado: el **Metil Terbutil Eter (MTBE)**.

II.1b AGOTAMIENTO DE LA RESERVA DEL CRUDO

La abundancia del crudo en la primera mitad del siglo XX y el descubrimiento del valor del tetraetilo de plomo como antidetonante, prácticamente eliminó a los compuestos oxigenados y específicamente a los alcoholes como combustibles automotivos. Fue inevitable que el automóvil se diseñara y desarrollara utilizando un combustible como la gasolina.

La reserva del crudo era abundante hasta hace unos años y se consideraba inextinguible. Ha sido con el advenimiento de los problemas de abastecimiento de crudo en la década pasada que los alcoholes han vuelto a considerarse como alternativa para combustible o componente.

El precio del crudo se ha incrementado rápidamente. Los países desarrollados continúan aumentando sus requerimientos energéticos y los países en desarrollo aumentan su demanda a pasos acelerados.

Los oxigenados como el MTBE son una opción en la solución al problema del agotamiento de la reserva del crudo debido a que una de las materias primas para su producción es el metanol (MeOH), cuya fuente de obtención puede ser independiente de los hidrocarburos provenientes del crudo, pudiéndose utilizar: granos, caña de azúcar, carbón o madera como materia prima.

Asumiendo que el MEOH para la obtención del MTBE se deriva de un recurso distinto del crudo, es posible el ahorro de 1.8 barriles (bbl) de crudo por cada 100 bbl de gasolina utilizando el 10% en volumen de MTBE.

Como ampliador de las fuentes de energía, el MTBE es una excelente alternativa, y su uso se justifica por las diversas ventajas que presenta.

Referencias sec. II.1: [7],[12],[17],[18],[19],[32], y [34].

II.2 VENTAJAS Y PROPIEDADES DEL MTBE

Numerosos factores deben ser evaluados con el fin de determinar la conveniencia de mezclar un compuesto oxigenado con la gasolina:

- * Grado de mejoramiento de octanaje.
- * Costo de procedimientos para mejorar el octanaje.
- * Aspectos energéticos.
- * Ventajas de materias primas.
- * Compatibilidad del hidrocarburo.
- * Volatilidad.
- * Solubilidad en agua.

El MTBE es un excelente componente de la gasolina. Sus ventajas son evidentes debido a sus propiedades no dañinas, ya que a diferencia de aquellos aditivos compuestos por plomo que provocan la contaminación del aire y son tóxicos, el MTBE no presenta estas desventajas.

Ofrece ventajas ecológicas ya que se reducen las cantidades emitidas de los agentes contaminantes en gases de escape, como el monóxido de carbono (CO), hidrocarburos no quemados (HC) y óxidos de nitrógeno (NO_x), como se puede observar en la tabla No.1 ; además de eliminarse por completo las emanaciones de compuestos de plomo.

La tabla No.1 muestra las emisiones producidas con una gasolina conteniendo el 15% en volumen de MTBE. Las pruebas realizadas con el

motor frío presentan una disminución del 14% en las emisiones de CO y del 21% en los óxidos de nitrógeno. Para el motor caliente, la reducción de CO llega a ser del 31%, aunque para los óxidos de nitrógeno la reducción no es muy significativa, así como para las emanaciones de hidrocarburos no quemados.

No altera las propiedades generales de la gasolina. El consumo de ésta llega a ser el mismo y no se requiere modificar o alterar el motor de combustión interna con el uso de este aditivo.

EFFECTO DEL MTBE EN EMISIONES DE ESCAPE			
	combustible ordinario (g/mla)	15% en vol. de MTBE (g/mla)	reducción (%)
prueba con motor en frío			
HIC	1.8	1.7	7%
CO	49.5	42.6	14%
NO _x	6.6	5.2	21%
prueba con motor caliente			
HIC	1.1	1.0	8%
CO	13.4	9.2	31%
NO _x	6.8	6.5	4%

TABLA 1. Ref. [25]

Pruebas toxicológicas han demostrado que el MTBE no tiene efecto sobre la salud, incluso en altos rangos de aplicación en la gasolina. Las pruebas han abarcado absorción en la piel, inhalación e irritación en los ojos, y su toxicidad ha sido equivalente al de una gasolina ordinaria sin plomo.

Estudios de laboratorio confirman que no existe la formación de peróxidos con un éter como el MTBE al estar expuesto incluso en periodos largos de tiempo, a la luz y al oxígeno.

Es estable durante su manejo y almacenamiento, en ambos casos, tanto en estado puro como después de mezclarse con la gasolina.

El MTBE es miscible en todas proporciones en la gasolina y ligeramente soluble en agua, pues la contaminación con esta última no llega a tener efectos significativos, ya que incluso no muestra problemas de separación de fases. La tolerancia máxima del contenido de agua en MTBE depende de la concentración de gasolina en la mezcla.

En realidad, el MTBE es una forma indirecta de agregar MeOH a la gasolina para aumentar el octanaje, pero sin sus inconvenientes, como son:

- * Afinidad al agua, lo que provoca problemas de separación y problemas en los sistemas de distribución de gasolina.
- * Calor latente de vaporización más alto, lo que provoca sobrecalentamiento del motor y afecta la etapa de arranque en frío.
- * El octanaje del MTBE es mayor al del MeOH y tiene un valor 10 unidades arriba para el MON (Motor Octane Number).

La tabla No.2 muestra la comparación cuantitativa entre el MTBE y el metanol.

COMPARACION ENTRE MTBE Y MeOH			
	Gasolina convencional	MTBE	Metanol
OCTANAJES			
RON	100	117	106
MON	91	101	90
(R+M)/2	95.5	109	98
ESTEQUIOMETRIA			
Oxígeno (% peso)		18.2	49.9
lb aire/lb combustible	15.1	11.7	6.4
VOLATILIDAD			
P _{sat} (F)	110/340	131	149
Calor lat.vap(BTU/lb)	141	138	474
SOLUBILIDAD			
en agua a 70 F	240 ppm	6.4 %vol	∞

TABLA 2. Ref. [25]

El MTBE es un aditivo de alto octanaje y una adición del 10 al 15% puede incrementar el número de octanos de 2 a 5 unidades.

Su rango de índice de octanos de mezcla es:

RON (Research Octane Number).....	115 - 135
MON (Motor Octane Number).....	98 - 110
(RON + MON)/2.....	106 - 122.5

A continuación se muestra en la tabla No.3 los cambios en los valores del octanaje de la gasolina dependiendo de su composición:

TABLA 3. Octanaje de la gasolina: sin aditivo, con plomo y con MTBE. Ref. [19],[25] y [27]

	RON	MON	(R+M)/2
Gasolina con Pb *	100.6	100	100.3
Gasolina sin Pb	91.8	82.9	87.4
Gasolina con 15% MTBE	113	95	104

* 1.07g de Pb por Galón.

Referencias sec. II.2: [2],[7],[18],[22],[25],[27] y [32].

II.3 ECONOMIA EN LA PRODUCCION DEL MTBE

La selección económica de un programa para mejorar el octanaje, implica tomar en consideración: inversión de capital, costos de operación, fácil adquisición de materias primas, requerimientos químico-catalíticos, requerimientos técnicos, tiempo de ejecución del proyecto y tiempo de recuperación de la inversión, entre otros puntos. La producción de MTBE se justifica ya que cumple positivamente con las consideraciones anteriores, proporciona beneficios en términos de expansión del abastecimiento de combustibles líquidos para el transporte a precios competitivos traduciéndose en beneficios económicos para el productor (Tabla No.4).

La inversión fija y los costos de operación son muy bajos en comparación con alternativas tales como la alquilación de butenos y la isomerización de pentanos-hexanos.

Se han desarrollado procesos de muy alta conversión. El proceso utiliza una amplia gama de catalizadores disponibles y temperaturas y presiones de reacción convencionales. Un sistema catalítico adecuado permite procesar flujos de baja pureza de i-butileno con alta eficiencia.

<u>COSTO DE PRODUCCION DE MTBE</u>	
INVERSION INICIAL*	millones dls
planta de proceso **	64
planta de servicios auxiliares	23
Total inversión	87
COSTO DE PRODUCCION	¢ / gal.MTBE
serv. aux., catalizador y químicos	4.9
mano de obra	1.8
mantto., seguros e impuestos	3.4
depreciación	4.5
butanos	48.9
metanol	15.0
Costo total de producción	78.5
* para una producción diaria de 9000 barriles (436.500 ton/año).	
**considerando isomerización de n-butano y dehidrogenación para obtener el i-buteno.	

TABLA 4. Ref [21]

II.3a PRECIOS DE MATERIAS PRIMAS Y PRODUCTOS

El costo de producción de MTBE depende en gran medida del costo de los hidrocarburos C4 y el valor de los subproductos. El valor de los diversos tipos de C4's varían en un amplio rango cualquier época del año dependiendo del proveedor y la demanda de los productos refinados. Sin

embargo estos precios estan relacionados con la provisión de crudo y gas natural, el costo de la alquilación y de la gasolina octanada.

El precio del MTBE está relacionado con el precio de la gasolina, e incrementa conforme aumenta el precio de la gasolina. Por ejemplo, el costo del MTBE a mediados de 1978 fue aproximadamente de ¢60 cent/gal cuando el precio del crudo era de \$13.50 dls/barril. Al incrementar el precio del crudo en 1981 a \$32 dls/barril, el costo estimado del MTBE fue de ¢124 cents/gal, sin embargo, a mediados de 1984, el precio del MTBE fue de ¢89.6 cents/gal debido a que se había reducido el precio de las materias primas.

<u>PRECIOS DE MATERIAS PRIMAS Y PRODUCTOS</u>	
Catalizador (Amberlyst 15)	\$ 10.9 USD/Kg
Mezcla de butanos	52 ¢ USD/Gal
Isobuteno	64 ¢ USD/Gal
Metanol	59 ¢ USD/Gal
MTBE	136 ¢ USD/Gal

TABLA 5. Ref 1171 y 1211.

MTBE A PARTIR DE BUTENOS DEL CRACKING CON VAPOR.-Los butenos provenientes del cracking con vapor conteniendo el 45% del isobuteno, corresponden a la fuente mas barata para la producción de MTBE.

MTBE A PARTIR DE BUTENOS DEL CRACKING CATALITICO.- Los butenos del FCC contienen aproximadamente 15% de isobuteno. El costo neto del isobuteno es ligeramente mayor que el obtenido del cracking con vapor. La producción de MTBE con butenos de FCC involucra además, el manejo de grandes volúmenes de flujos de C4's por lo que el costo del proceso es mayor.

MTBE A PARTIR DE BUTENO OBTENIDO POR ISOMERIZACION/DESHIDROGENACION DE BUTANO.- Este método es económicamente atractivo si la producción se hace a gran escala y las materias primas para la producción del buteno son de bajo costo.

Referencias sec. II.3: [4],[17],[21],[22],[24],[29] y [30].

II.4 OBTENCION DE MTBE

La práctica comercial mas común para la producción de MTBE consiste en reaccionar catalíticamente MeOH con isobuteno a temperaturas y presiones moderadas. Un pre-requisito, es por supuesto, la existencia de un proceso de conversión técnicamente viable y eficiente para la conversión del isobuteno de baja pureza en MTBE.

II.4a MATERIAS PRIMAS

METANOL

Existen varios métodos para la obtención de este tipo de alcoholes simples, vías que pueden utilizar diversas fuentes de materias primas orgánicas: petróleo, carbón y la biomasa. Algunos de estos métodos son:

- (a) Por hidrogenación catalítica del monóxido de carbono.- La mezcla de H y CO necesaria se obtiene de la reacción, a temperatura elevada, entre H₂O y CH₄, alcanos superiores o carbón.
- (b) Por fermentación de carbohidratos (caña de azúcar o granos).
- (c) De la producción del ácido acético y formaldehído con gas natural.

ISOBUTENO

Puede obtenerse de diversas fuentes y de acuerdo a éstas últimas será su grado de pureza y por lo tanto, la ruta a seguir para la producción de MTBE. Las principales fuentes de abastecimiento son:

1. Efluente de mezcla butano-buteno proveniente del cracking catalítico en la refinería.
2. Efluente de mezcla butano-buteno proveniente del cracking con vapor en la planta de etileno.
3. A partir de la isomerización/dehidrogenación de butanos obtenidos del gas natural.

El efluente de C4's (mezcla de butano-buteno) proveniente de las plantas de etileno, generalmente contiene del 45 al 50% del isobuteno; por lo que es el recurso preferido para la obtención de isobuteno, sin embargo, éstas son corrientes de volúmenes relativamente grandes, pero pequeñas en número.

En cambio, más del 85% del i-buteno producido anualmente está contenido en el subproducto de C4's de las operaciones del cracking catalítico en las refinerías. Este material se encuentra disponible en gran número, con baja pureza (10%-20%) y relativamente bajo volumen.

CATALIZADOR

Un sistema catalítico adecuado permite procesar flujos de baja pureza de i-buteno con una alta eficiencia, para lo cual se utiliza una resina catiónica ácida de intercambio iónico, el Amberlyst 15 (o el Dowex 50). Esta es una resina sulfónica con macroporos que se obtiene a partir de la sulfonación de un copolímero de poliestireno con divinilbenceno.

El Amberlyst 15 es una resina de partículas esféricas de 0.35 a 1.2 mm de diámetro. Es fuertemente ácida y fue desarrollada particularmente para ser utilizada en reacciones orgánicas catalíticas heterogéneas. El grupo funcional iónico del Amberlyst 15 es el ácido sulfónico (-SO₃H) y por lo

tanto se utiliza en el intercambio y adsorción de moléculas catiónicas o básicas en solventes no acuosos.

Entre las ventajas que presenta el Amberlyst 15 se encuentran las siguientes:

- *Facilidad de eliminación del medio de reacción.
- *Posibilidad de reutilización de la resina.
- *El tiempo de vida del catalizador es alto , generalmente de dos años, a bajas temperaturas es decir, no sobrepasando los 393 K y minimizando su envenenamiento.
- *Su costo no es significativo.
- *Siendo una resina macroporosa, tiene preferencia sobre aquéllas con microporos, especialmente en los medios no acuosos en donde éstas últimas no se expanden apreciablemente.
- *Presenta estabilidad física. El Amberlyst 15 tiene excelente resistencia al desgaste mecánico o por fricción, ya que difícilmente se fracciona.

Sin embargo, también es importante tomar en consideración las desventajas que pueden presentarse, como son, la sensibilidad a las altas temperaturas, ya que pierde su actividad arriba de los 393 K y el envenenamiento por compuestos básicos catiónicos que neutralizan los grupos activos ácidos o eliminan la acidez de la resina por intercambio iónico. Es imperativo, por lo tanto, para alargar la vida del catalizador, que aquellas trazas de cationes tales como los metales que se pueden encontrar en los líquidos debido a la corrosión por erosión de tanques, tuberías y reactores, sean eliminados antes del contacto con el catalizador, así como eliminar los peróxidos orgánicos.

El fabricante de la resina Amberlyst 15, sugiere las siguientes condiciones de operación para asegurar un buen funcionamiento de la misma:

Temperatura máxima:393K (120°C)
Profundidad mínima de lecho:..... 0.61m (24")
Velocidad espacial líquida horaria (LHSV)1 a 5 (hr)⁻¹ (*)
Límite de pH:ninguno

**NOTA: aunque la Nippon Oil Co. ha utilizado el Amberlyst 15 en sus reactores con un LHSV= 0.5 a 15 (hr)⁻¹ con buenos resultados, a una conversión de i-bu del 96%.*

REACTIVACION DEL Amberlyst 15:

La reactivación puede llevarse a cabo en el mismo reactor o se puede pasar la resina a una columna resistente al H₂SO₄ al 10%. El procedimiento es el siguiente:

Se lava la resina con agua, de manera que el lecho aumente su volumen en un 50%. Posteriormente, el lecho se deja estancar y se drena el agua hasta que llegue a un nivel de 1" a 2" arriba del tope de la resina.

Se hace pasar H₂SO₄ al 10% a través del Amberlyst, en una cantidad equivalente a 1.5 veces el volumen del lecho. Es necesario utilizar agua destilada o deionizada para enjuagar la resina hasta tener un pH arriba de 4. Después de drenar la totalidad del agua, la resina debe secarse con aire o cualquier otro procedimiento para que nuevamente pueda ser utilizada.

Referencias sec. II.4a: [3],[4],[6],[17],[20],[21] y [30].

II.4b PROCESO

El proceso que se describe a continuación es el que básicamente se ha desarrollado, aunque con algunas variantes, dependiendo de la fuente de obtención del i-buteno.

La Fig.1 muestra un diagrama típico de este tipo de procesos. Podemos encontrar tres secciones principales:

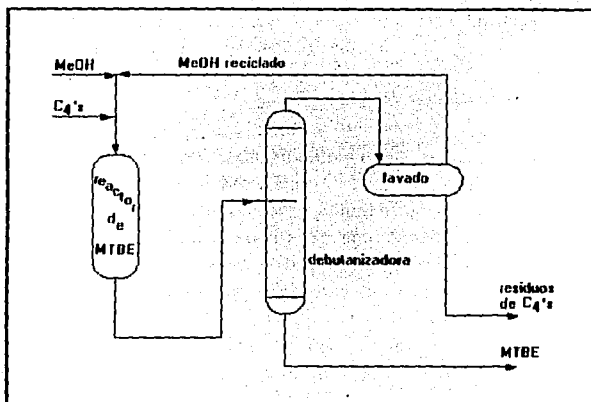


FIGURA 1. Ref [4]

1a SECCION (Reacción)

Consta del reactor que contiene el catalizador y que puede ser de lecho fijo o lecho fluidizado. A él se alimenta el efluente de C4's y de MeOH. Es importante señalar que en este caso podemos encontrar una o dos etapas en esta sección. Para un proceso en una etapa (1 solo reactor), se obtienen

conversiones del 90 al 96% de i-buteno. Para dos reactores en serie, las conversiones llegan a ser del 99%.

Si el efluente de C4's contiene un porcentaje alto de i-buteno (45% al 50%), como sucede si éste proviene del cracking con vapor de las plantas de etileno, se hace necesaria la eliminación del calor de reacción. Esto se puede lograr enfriando una porción del efluente y reciclándolo posteriormente al reactor. En caso de que se cuente con dos etapas, se coloca un enfriador antes del segundo reactor.

Si se trata de una mezcla de C4's proveniente del cracking catalítico, el enfriamiento no se requiere ya que la temperatura se eleva de 15 a 30°C. Para un lecho fluidizado se lleva a cabo la recirculación del flujo y de esta manera controlar la expansión del lecho catalítico.

2a SECCION (Recuperación del MTBE)

Esta sección incluye una torre debutanizadora donde se envía el efluente que proviene del reactor. El MeOH no reaccionado forma azeótropos de bajo punto de ebullición con los hidrocarburos que son extraídos por el domo. El contenido de MeOH en el azeótropo aumenta con la presión de operación, lo cual es una ventaja que se aprovecha incrementando la presión de la debutanizadora, especialmente en el caso en que se trate de una alimentación de C4's proveniente del cracking del vapor donde el flujo que arrastre al MeOH será menor. Cuando se utilizan C4's del cracking catalítico, la debutanizadora puede operarse a baja presión.

En los fondos de la torre se recupera el MTBE.

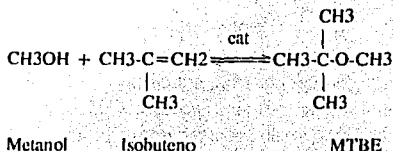
3a SECCION (Recuperación del MeOH)

En esta sección se lleva a cabo la separación de los C4's del MeOH por medio de un lavado con agua a contracorriente; y la recuperación del MeOH, en una fraccionadora que separa este compuesto del agua, para su posterior recirculación al proceso.

Referencias sec. II.4b: [5] y [14].

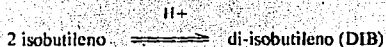
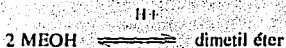
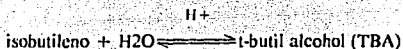
II.4c REACCION

El MTBE se obtiene a partir de la siguiente reacción:



Se trata de una reacción exotérmica, ($\Delta H = -31$ KJ/Mol), reversible, que se lleva a cabo en un rango de temperaturas comprendido entre los 308 a 340 K a presión atmosférica. Se ha confirmado que la reactividad del isobutileno con el metanol es alta respecto a otras olefinas.

Las principales reacciones secundarias son:



Los subproductos que se forman en mayor cantidad son el di-isobutileno (DIB) y el t-butil alcohol (TBA). La cantidad de TBA formado puede minimizarse eliminando agua en la alimentación.

La pureza del MTBE obtenida es generalmente del 97 al 99%, dependiendo del diseño del proceso, sin embargo, la pureza no es un factor importante

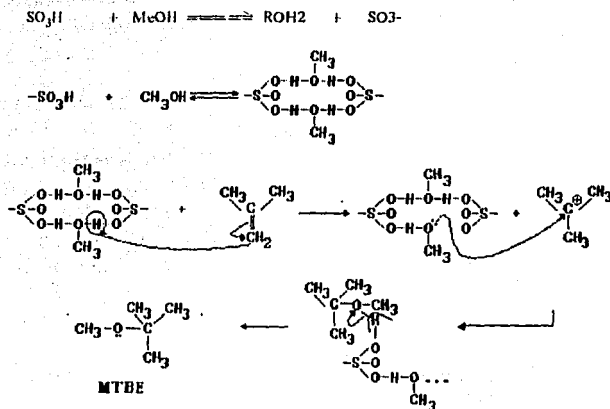
ya que los subproductos TBA y DIB tienen buen octanaje y pueden ser utilizados en la gasolina (estos componentes han sido aceptados por la U.S. Environmental Protection Agency).

II.4d MECANISMO DE REACCION

El mecanismo en presencia de la resina, depende de la polaridad del medio reaccionante. Probablemente, un ion carbonio es el intermediario, y el paso controlante es la protonación de la olefina más que la interacción con el nucleófilo.

A bajas concentraciones de MeOH, se forman puentes de hidrogeno (H+) entre la resina y el MeOH. Una alta concentración de MeOH provoca la solvatación de los protones desapareciendo los puentes de hidrógeno.

La reacción hipotética entre el MeOH y el grupo ácido es:



II.4c ORDEN DE REACCION

El orden de reacción reportado, con respecto a las concentraciones de reactivos y de grupos SO_3H , es el siguiente:

Concentraciones de	MeOH > 4 mol/lorden cero
	MeOH < 4 mol/lorden negativo
	Isobutilenoprimer orden
	Grupos ácidostercer orden

II.4f MODELOS DE REACCION

Se han desarrollado dos tipos de modelos de reacción para representar el comportamiento de la reacción en presencia del catalizador:

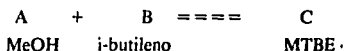
- El primero de ellos considera a la resina como un electrólito en disolución por lo que se trata de un modelo homogéneo.
- El segundo, es un modelo heterogéneo en el que se considera a la resina como un catalizador sólido, poroso.

MODELO HOMOGÉNEO

De acuerdo a la aproximación de Helfferich, un catalizador homogéneo no presenta resistencia a la difusión debido a que éste se comporta como electrólito en solución. Siendo el Amberlyst 15 un catalizador de estructura macrorreticular, podemos aplicar este modelo considerando el fácil acceso de los reactivos a los iones de hidrógeno presentes a través de la resina, por lo tanto, queda eliminada la resistencia a la difusión de los reactivos dentro de los poros así como de los productos fuera de éstos, como lo demuestran los resultados experimentales obtenidos por Subramaniam & Bhatia (The Can.J.of Ch.Eng. Vol 65 Aug. 1987).

Las concentraciones de los reactivos dentro del poro son aproximadamente iguales a las concentraciones globales de los mismos.

La reacción principal puede simplificarse como:



De esta ecuación, se obtiene la ecuación de rapidez de reacción de segundo orden reversible de la siguiente forma:

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_f C_A C_B - k_r C_C = k_f (C_A C_B - \frac{C_C}{K})$$

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{d}{dt} (C_{A0} (1 - X_A)) = -C_{A0} \frac{dX_A}{dt}$$

$$C_A = C_{A0} (1 - X_A)$$

$$C_C = C_{C0} (1 + X_C)$$

$$C_A \frac{dX_A}{dt} = k_f [C_{A0} (1 - X_A) C_B - \frac{C_{C0} (1 + X_C)}{K}]$$

$$X_C = X_A \frac{C_{A0}}{C_{C0}}$$

$$C_{A0} \frac{dX_A}{dt} = k_f [C_{A0} C_B (1 - X_A) - \frac{C_{C0}}{K} (1 - X_A \frac{C_{A0}}{C_{C0}})]$$

$$C_{A0} \frac{dX_A}{dt} = k_f [C_{A0} C_B (1 - X_A) - \frac{1}{K} (C_{C0} - X_A C_{A0})]$$

$$C_{C0} = 0$$

$$C_{A0} \frac{dX_A}{dt} = k_f [C_{A0} C_B (1 - X_A) - \frac{C_{A0}}{K} (C_{C0} - X_A C_{A0})]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k_f [C_B (1 - X_A) + \frac{X_A}{K}]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k \left[C_B - \left(C_B - \frac{1}{K} \right) X_A \right]$$

$$\frac{dX_A}{dt} = k \left[C_B + \left(\frac{1}{K} - C_B \right) X_A \right]$$

MODELO HETEROGENEO

Tomando en cuenta que el medio de reacción se encuentra distribuido entre la resina y sus poros, podemos aplicar el modelo heterogéneo de Langmuir-Hinshelwood.

Los pasos que se llevan a cabo en una reacción heterogénea para este modelo son:

- * Difusión hacia los poros.
- * Adsorción de reactivos (MeOH e i-buteno).
- * Reacción sobre el catalizador (de los reactivos adsorbidos).
- * Desorción de productos (MTBE).
- * Difusión fuera de los poros.

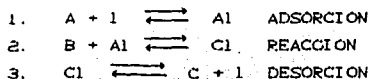
De los anteriores, podemos tener como paso controlante de la reacción la desorción de los reactivos, la reacción sobre el catalizador o la desorción de los productos.

En base a esto, tenemos que pueden existir dos posibles casos:

- (a) Un sitio activo.
- (b) Dos sitios activos.

De acuerdo al mecanismo de reacción anteriormente descrito en la sección II.4d, se debe considerar un sólo sitio activo; siendo el desarrollo para este modelo el que se muestra a continuación:

(a) Un sitio activo:



donde:

A = Metanol	C_A = conc. de A	C_{AI} = conc. A adsorbido
R = Iso-buteno	C_B = conc. de B	C_{CI} = conc. C adsorbido
C = MTBE	C_C = conc. de C	C_m = conc. tot. de sitios reactivos en el catalizador.
I = sitio activo	C_I = conc. de sitios activos libres	
AI = MeOH adsorbido		
CI = MTBE adsorbido		

1. Para el caso en que controla la adsorción, tenemos:

$$r_1 = k C_A C_I - k' C_{AI}$$

$$K_2 = \frac{C_{CI}}{C_{AI} C_B} \quad ; \quad C_{AI} = \frac{C_{CI}}{K_2 C_B}$$

$$K_3 = \frac{C_C C_I}{C_{CI}} \quad ; \quad C_{CI} = \frac{C_C C_I}{K_3} \quad ; \quad C_{AI} = \frac{C_C C_I}{K_3 K_2 C_B}$$

$$C_m = C_I + C_{CI} + C_{AI} = C_I + \frac{C_C C_I}{K_3 K_2 C_B} + \frac{C_C C_I}{K_3}$$

$$C_m = C_I \left(1 + \frac{C_C}{K_3 K_2 C_B} + \frac{C_C}{K_3} \right)$$

$$C_I = \frac{C_m}{\left(1 + \frac{C_C}{K_3 K_2 C_B} + \frac{C_C}{K_3} \right)}$$

$$r_1 = k C_A C_I - k' C_{AI} = k C_A C_I - k' \frac{C_C C_I}{K_3 K_2 C_B}$$

$$r_1 = C_I \left(k C_A - k' \frac{C_C}{K_3 K_2 C_B} \right)$$

$$r_1 = \frac{C_m C k C_A - k' \frac{C_C}{K_3 K_2 C_B}}{C_1 + \frac{C_C}{K_3 K_2 C_B} + \frac{C_C}{K_3}}$$

Un sitio activo.
Adsorción como paso controlante.

2. Para la reacción como paso controlante, tenemos el siguiente desarrollo:

$$K_1 = \frac{C_{A1}}{C_A C_1} \quad ; \quad C_{A1} = K_1 C_A C_1$$

$$r_2 = k C_B C_{A1} - k' C_{C1}$$

$$K_3 = \frac{C_C C_1}{C_{C1}} \quad ; \quad C_{C1} = \frac{C_C C_1}{K_3}$$

$$C_m = C_1 + C_{A1} + C_{C1} = C_1 + K_1 C_A C_1 + \frac{C_C C_1}{K_3}$$

$$C_m = C_1 \left(1 + K_1 C_A + \frac{C_C}{K_3} \right)$$

$$C_1 = \frac{C_m}{C_1 \left(1 + K_1 C_A + \frac{C_C}{K_3} \right)}$$

$$r_2 = k C_B C_{A1} - k' C_{C1} = k C_B C_A C_1 K_1 - k' \frac{C_C C_1}{K_3}$$

$$r_2 = C_1 \left(k C_B C_A K_1 - k' \frac{C_C}{K_3} \right)$$

$$r_2 = \frac{C_m C k C_B C_A K_1 - k' \frac{C_C}{K_3}}{C_1 + K_1 C_A + \frac{C_C}{K_3}}$$

Un sitio activo.
Reacción como paso controlante.

3. Si la desorción del MIBE es el paso controlante, la ecuación se obtiene de la siguiente forma:

$$r_1 = \frac{C_{Al}}{C_{A_1} C_L} \quad ; \quad C_{Al} = K_1 C_A C_L$$

$$r_2 = \frac{C_{Al}}{C_{Al} C_B} \quad ; \quad C_{Al} = K_2 C_{Al} C_B = K_1 K_2 C_A C_L C_B$$

$$r_3 = k_3' C_L + k_3 C_{Cl}$$

$$C_m = C_L + C_{Cl} + C_{Al} = C_L + K_1 K_2 C_A C_L C_B + K_1 C_A C_L$$

$$C_m = C_L (1 + K_1 K_2 C_A C_B + K_1 C_A)$$

$$C_L = \frac{C_m}{C_L (1 + K_1 K_2 C_A C_B + K_1 C_A)}$$

$$r_3 = k_3 C_{Cl} - k_3' C_L = k_3 K_1 K_2 C_A C_L C_B - k_3' C_L$$

$$r_3 = C_L (k_3 K_1 K_2 C_A C_B - k_3')$$

$$r_3 = \frac{C_m (k_3 K_1 K_2 C_A C_B - k_3')}{C_L (1 + K_1 K_2 C_A C_B + K_1 C_A)}$$

Un sitio activo.
Desorción como paso controlante.

Se ha comprobado que, ambos modelos, homogéneo y heterogéneo, cumplen satisfactoriamente con los datos experimentales (Ref [30]), lo cual demuestra que no existe resistencia a la difusión en el catalizador y que se puede asumir que la reacción ocurre en solución. Incluso el valor de la Energía de activación para ambos modelos es similar, de acuerdo a las investigaciones de C. Subramaniam & S. Bhatia. Utilizando el modelo homogéneo, se encontró una energía de activación de $79+3.0$ KJ/mol, mientras que para el modelo heterogéneo, el valor fue de $76.2+2.0$ KJ/mol; sin embargo, para el presente trabajo se considerará únicamente el modelo heterogéneo debido a que se cuenta con información mas completa de este último, para el diseño del reactor.

De acuerdo a los resultados experimentales obtenidos para el modelo heterogéneo por Subramaniam & Bhatia (Ref[30]), la ecuación de rapidez de reacción desarrollada para la reacción como paso controlante Ec.(II.1) es la que aplica satisfactoriamente. Según Gicquel y Torck, esta ecuación puede reducirse a la Ec.(II.2), asumiendo que la constante de equilibrio del MeOH, K_1 es alta y por lo tanto el término $1/K_1$ es muy pequeño y puede despreciarse.

$$r = \frac{C_m C_A C_B K_1 - k' \frac{C_C}{K_3}}{C(1 + K_1 C_A + \frac{C_C}{K_3})} \quad \dots \text{Ec. (II.1)}$$

$$K = \frac{k}{k'}$$

$$r = \frac{C_m k C_A C_B K_1 - \frac{1}{K_1} \frac{C_C}{K_3}}{C(1 + K_1 C_A + \frac{C_C}{K_3})}$$

Multiplicando la ecuación anterior por K_1/K_1 :

$$r = \frac{\frac{Cmk}{K_1} C_A C_B K_1 - \frac{Cmk}{K_1 K} \frac{C_C}{K_3}}{C \left(\frac{1}{K_1} + \frac{K_1 C_A}{K_1} + \frac{1}{K_1} \frac{C_C}{K_3} \right)}$$

Para $\frac{1}{K} \cong 0$:

$$r = \frac{Cmk C_A C_B - \frac{Cmk}{K} \frac{C_C}{K_3}}{C \left(C_A + \frac{C_C}{K_1 K_3} \right)}$$

Si $k_3 = Cmk$, $k_4 = Cmk/K$ y $R = \frac{1}{K_1 K_3}$ ∴

$$r = \frac{k_3 C_A C_B - k_4 R C_C}{C_A + R C_C} \quad \dots \text{Ec. (II.2)}$$

Esta ecuación sólo es válida cuando se tiene un exceso de MeOH.

REFERENCIA SEC. II. 4c,d,e y f (11),(4),(5),(12),(20) Y (31).

III. MODELOS DE REACTORES

III.1 REACTOR DE LECHO FIJO

III.1a DESCRIPCION

Uno de los reactores catalíticos más comunes es el del tipo de lecho fijo. Los reactores de lecho fijo (o empacado) se refieren a sistemas de dos fases en los que el fluido reaccionante fluye a través de un tubo lleno de partículas o gránulos catalíticos estacionarios.

En estos reactores, habrá regiones cerca de la superficie externa de las partículas en las que la velocidad del fluido será muy baja. En estas regiones, que resultan especialmente evidentes cerca de los puntos de contacto entre las partículas, la transferencia de masa y energía entre el fluido global y la superficie del gránulo se produce primordialmente por conducción. A medida que aumenta la distancia entre la superficie, el mecanismo dominante será la convección.

La complejidad de las trayectorias de flujo alrededor de un gránulo individual suspendido en una corriente de fluido es considerable. Por tanto, las velocidades de transporte se definen por lo general en términos de un coeficiente promedio de transferencia de calor o de masa. Aun cuando los datos experimentales muestran que existen variaciones, se puede suponer que el coeficiente promedio puede aplicarse a toda la superficie del gránulo. Con estas suposiciones es posible usar un solo valor del coeficiente de transferencia de calor o de masa, para describir las velocidades de transferencia entre el fluido global y la superficie de los gránulos.

El error que se introduce al usar un coeficiente promedio no es tan serio como podría suponerse, pues las correlaciones entre el coeficiente de transferencia de masa y el coeficiente de transferencia de calor están basadas en datos experimentales para lechos de partículas. Es decir, los resultados

experimentales son, por lo general, para valores promedio de los coeficientes.

Los resultados de los estudios que se han llevado a cabo, con relación a la variación del coeficiente de transmisión de calor con respecto a la posición del gránulo en el lecho, han mostrado que el valor de éste es más bajo para las primeras dos capas de gránulos (medidas desde la entrada) que en el resto del lecho. Además, el coeficiente resulta mayor cerca de la pared del lecho que en la sección central del tubo cilíndrico, debido probablemente a la mayor velocidad que existe a una distancia aproximadamente igual al tamaño de un gránulo desde la pared. Los coeficientes locales también varían con la posición en la superficie del gránulo; los valores más altos se han obtenido en la superficie perpendicular a la dirección del flujo global en el lecho.

III.1b DISEÑO DE UN REACTOR DE LECHO FIJO MODELO UNIDIMENSIONAL

Para predecir el funcionamiento de un reactor de lecho fijo se utilizan la cinética y las velocidades de transporte, en donde las condiciones de diseño que deben fijarse son: la temperatura inicial, la presión y la composición de la corriente de alimentación, las dimensiones de los gránulos catalíticos, y los datos de los alrededores que permitan evaluar el flujo de calor a través de las paredes del reactor, así como presuponer las dimensiones del reactor.

La rapidez total de reacción indica el grado de verificación de la reacción en cualquier punto del reactor, en términos de las concentraciones y temperaturas globales. Para evaluar temperaturas y concentraciones, se formulan ecuaciones de conservación de la masa y la energía para el fluido que se desplaza a través del lecho de gránulos catalíticos. La resolución de estas ecuaciones proporciona la temperatura y las concentraciones en cualquier punto, incluyendo la salida del reactor. En el diseño de reactores de lecho fijo, se supone que todas las propiedades son constantes en un elemento de volumen asociado con un solo gránulo catalítico. Esto significa

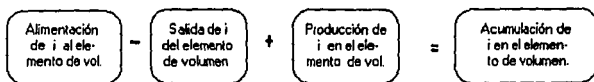
que la velocidad total es la misma dentro del elemento de volumen. El enfoque más común para resolver las ecuaciones de conservación consiste en suponer que el elemento de volumen es suficientemente pequeño con respecto a la totalidad del reactor. Entonces la temperatura y las concentraciones se consideran como funciones continuas de la posición en el reactor y las expresiones de conservación se transforman en ecuaciones diferenciales.

La complejidad del problema de diseño depende primordialmente del tipo (radial y/o axial) y la magnitud de la variación de la temperatura en el reactor. Los reactantes suelen entrar al lecho catalítico a temperatura y composición uniformes, pero a medida que se desplazan por el lecho y se verifica la reacción, el calor de reacción resultante y el intercambio de calor con el medio circundante puede causar variaciones de temperatura, tanto longitudinales como radiales. La severidad de estas variaciones depende de la magnitud del calor de reacción y del intercambio calorífico con los alrededores.

El modelo unidimensional supone que no existe variación de la velocidad axial en la dirección radial, y que, así mismo, las concentraciones sólo varían en la dirección axial. Considerando un reactor de lecho fijo no isotérmico-no adiabático con este modelo, la resistencia a la transferencia de energía en la dirección radial se concentra en la pared del reactor, donde se presenta un cambio en la temperatura de la mezcla reaccionante, así como también un perfil de temperaturas a lo largo del reactor. Es decir, el modelo unidimensional desprecia las dispersiones radiales tanto de masa como de energía, constituyendo así, un procedimiento rápido y simplificado para la estimación del tamaño del reactor y para poder predecir el efecto de algunas variables tales como el diámetro del tubo para una temperatura inicial dada, eliminando la necesidad de conocer las conductividades y difusividades efectivas, pero que proporciona una predicción razonable de la temperatura promedio a lo largo del lecho.

OBTENCION DE LA ECUACION DE BALANCE DE MASA:

El principio de conservación para cualquier reactor, exige que la masa de la especie "i" en un elemento de reactor de volumen ΔV obedezca el siguiente enunciado:



Aplicando esta ecuación para obtener una expresión de conservación de la masa del reactante en el elemento de volumen, tenemos en forma diferencial la siguiente ecuación:

$$\underbrace{\frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} (r (D_e)_R \frac{\delta C_A}{\delta r})}_{\substack{\text{Dispersión} \\ \text{radial} \\ \text{(Ley de Fick)}}} + \underbrace{\frac{\delta}{\delta z} ((D_e)_L \frac{\delta C_A}{\delta z})}_{\substack{\text{Dispersión} \\ \text{axial} \\ \text{(Ley de Fick)}}} - \underbrace{\frac{\delta}{\delta z} (u C_A)}_{\substack{\text{Término} \\ \text{convectivo}}} - \underbrace{r_A}_{\substack{\text{Reacción} \\ \text{Acumulación}}} = 0$$

Ec. (III.1)

donde:

$(D_e)_R$ y $(D_e)_L$ = difusividades efectivas

r_A = rapidez de reacción

u = flujo superficial en la dirección axial

z = distancia a lo largo del reactor

Para el modelo unidimensional, el término que involucra el gradiente radial es despreciable debido a que es muy pequeño.

La importancia del término de dispersión longitudinal en la Ec.(1) depende de la longitud del reactor, la difusividad efectiva y de la velocidad. Para velocidades muy bajas ($Re < 1$) en reactores muy cortos, la dispersión longitudinal puede ser significativa cuando la conversión no es muy baja.

Con otras condiciones, la dispersión puede despreciarse. Entonces, la Ec.(III.1) toma la siguiente forma:

$$-u \frac{dC_A}{dz} + (-r_A) = 0 \quad \dots \text{Ec (III.2)}$$

Expresando la Ec.(III.2) por medio de números adimensionales, tenemos:

$$C_A = C_{A0} (1 - x_A)$$

$$dC_A = -C_{A0} dx_A$$

$$z^* = \frac{z}{L} ; \quad dz^* = \frac{dz}{L} ; \quad dz = L dz^*$$

$$\frac{u(C_{A0} dx_A)}{L dz^*} + (-r_A) = 0$$

$$\frac{dx_A}{dz^*} = \frac{L (-r_A)}{uC_{A0}}$$

Número de Damköhler = $\beta = L \frac{(r_{A0})}{G}$... Ec.(III.3)
para transferencia de masa

$r_{jA} = R_A (r_{A0})$ donde: (r_{A0}) cuando: $C_A = C_{A0}$
 $C_B = C_{B0}$
 $C_C = C_{C0}$

$$\frac{dx_A}{dz^*} = \frac{L}{G} (r_{A0}) R_A ; \quad G = uC_{A0}$$

$$\frac{dx_A}{dz^*} = \frac{L}{G} r_{A0} R_A$$

$$\frac{dx_A}{dz^*} = \beta R_A \quad \text{Ec. (III.4)}$$

Ecuación de balance de materia para el modelo unidimensional

OBTENCION DE LA ECUACION DE BALANCE DE ENERGIA

La ecuación bidimensional de conservación de la energía es la siguiente:

$$\underbrace{(k_e)_r \left(\frac{1}{r} \frac{\delta T}{\delta r} + \frac{\delta^2 T}{\delta r^2} \right)}_{\text{Transferencia radial de calor}} + \underbrace{(k_e)_L \frac{\delta^2 T}{\delta z^2}}_{\text{Transferencia axial de calor}} - \underbrace{(u\rho)C_p \frac{\delta T}{\delta z}}_{\text{Término convectivo}} + \underbrace{(-r) \Delta H_D}_{\text{Reacción}} = \underbrace{\alpha(T - T_w)}_{\text{Resistencia en la pared}}$$

Ec. C.III.5)

Esta ecuación es análoga a la Ec.(2) para la transferencia de masa, e implica los mismos tipos de suposiciones. Las cantidades $(k_e)_r$ y $(k_e)_L$ son conductividades térmicas efectivas en las direcciones radial y axial y son análogas a $(D_e)_r$ y $(D_e)_L$.

Para el problema en cuestión, consideraremos el modelo unidimensional para un reactor no isotérmico-no adiabático, en donde la única variación radial de la temperatura se localiza cerca de la pared del reactor; por lo tanto el término de dispersión radial desaparece. Siguiendo con este razonamiento, si se supone que toda la resistencia a la transferencia de calor se localiza en una película muy delgada cercana a la pared, el perfil de la temperatura debe ser como lo muestran en la Fig.2 las líneas punteadas. La línea continua representa la curva real de la variación de temperatura y la línea punteada representa la temperatura media obtenida por la integración de los datos representados por la línea continua.

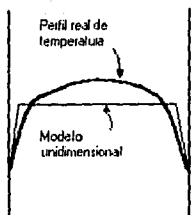


Fig.2 Comparación del perfil de temperatura del modelo unidimensional con un perfil real.

Ref [28]

El término de dispersión axial en la ecuación de la conservación de la energía puede ser más importante que la dispersión axial en la ecuación de conservación de la masa. Sin embargo, para las velocidades relativamente altas y las grandes profundidades de lechos que existen en los reactores comerciales, es normal que se desprece la dispersión axial tanto del calor como de la masa, con lo que la Ec.(III.5) se reduce a:

$$-u_0 C_p \frac{dT}{dz} + (-\Delta H)(-r_A) = \alpha(T - T_w) \quad \text{Ec.(III.6)}$$

donde el término $\alpha(T - T_w)$ representa la resistencia a la transferencia de calor en la pared y esta definido en términos del coeficiente global de transferencia de calor como sigue:

$$\alpha = \frac{4UL}{\pi C_p d_p \epsilon} \quad \dots \text{Ec.(III.7)}$$

U = coeficiente global de transferencia de calor ($\text{J/m}^2\text{h}^\circ\text{K}$)

L = longitud del reactor (cm)

G = flujo masico pasado en el area vacia del reactor ($\text{gmol/m}^2\text{h}$)

C_p = capacidad calorifica del fluido ($\text{J/gmol}^\circ\text{K}$)

ϵ = fraccion hueca del reactor

Estableciendo la Ec. (III.5) en terminos adimensionales:

$$T^* = \frac{T - T_0}{T_0} \quad ; \quad dT^* = \frac{1}{T_0} dT$$

$$z^* = \frac{z}{L} \quad ; \quad dz^* = \frac{1}{L} dz$$

$$R_A = \frac{r_A}{r_{A0}}$$

$$-\frac{u_0 C_p T_0}{L} \frac{dT^*}{dz^*} + (-\Delta H)(-r_A) R_A - \alpha(T^* - T_w) T_0 = 0$$

$$\frac{dT^*}{dz^*} + \frac{LC - \Delta H D C - r_A^* R_A}{u \rho C_p T_o} = \alpha (T^* - T_w^*)$$

$$G = u \rho$$

$$\beta' = \frac{L(C - r_A^*) R_A}{G C_p T_o} = \text{número de Damköhler para transferencia de calor} \quad \text{Ec.(III.8)}$$

$$\frac{dT^*}{dz^*} = \beta' R_A - \alpha (T^* - T_w^*) \quad \text{Ec.(III.9)}$$

Ecuación de balance de energía para el modelo unidimensional de un reactor no isotérmico-no adiabático.

La velocidad espacial líquida horaria (LHSV), también denominada en forma simplificada como velocidad espacial, se usa con frecuencia en la práctica para describir el efecto de la velocidad de alimentación sobre el funcionamiento del reactor de flujo.

El LHSV es igual al tiempo de residencia de un reactor de flujo tapón y tiene unidades de tiempo⁻¹:

$$\text{LHSV} = Q_i / V$$

donde: Q_i = velocidad del flujo en la alimentación (lt/h)

V = volumen del reactor (lt)

La caída de presión a través de un lecho granular de sólidos, está en función del material y forma de los gránulos de dicho lecho. Este valor puede predecirse por medio de la correlación de Leva, misma que se expresa a continuación:

$$\Delta P = \frac{2f_m G^2 L (1-\epsilon)^{3-n}}{D_p g_c \rho \phi_s^{3-n} \epsilon^3} \quad \dots \text{Ec.(III.10)}$$

donde:

ΔP = caída de presión

L = profundidad del lecho

g_c = cte. dimensional

D_p = diam. promedio part.

G = vel. masica superfi.

ρ = densidad del fluido

ϵ = espacio hueco

n = exponente en función del Re (fig.13 Apéndice F)

f_m = factor de fricción modificado (fig.13 Apéndice F)

ϕ_s = factor de forma de partícula (Tabla 13 Apéndice F)

III.2 REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO

III.2a FLUIDIZACION

El término fluidización se utiliza para designar aquel proceso en el que las partículas de un sólido finamente dividido, son agitadas y levantadas por medio del flujo de un fluido, que puede ser un líquido o un gas.

La fluidización tiene lugar cuando las fuerzas dispersoras se equilibran con aquéllas que tienden a mantener el lecho en forma compacta. Estas fuerzas son, en el caso sólido-líquido: el peso del lecho que actúa hacia abajo manteniendo un lecho compacto y la fuerza de arrastre del fluido que tiende a dispersar las partículas del lecho. Esta última depende de la velocidad del fluido y de sus propiedades así como del diámetro de las partículas.

Un sistema fluidizado sólido-líquido se considera estable, con relación a un sistema sólido-gas y se le denomina fluidización "particular". Este presenta características de expansión uniformes, por lo cual se le conoce como expansión homogénea.

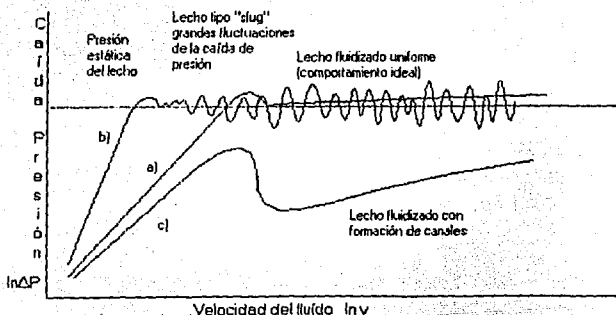


fig. 3 Gráfica de caída de presión contra velocidad para un lecho fluidizado. Ref [23]

La Fig.3 muestra tres formas de comportamiento de un lecho fluidizado. La curva a) tiene la figura ideal P vs velocidad, que representa a un lecho empacado constituido en todas sus partes de partículas de tamaño y formas similares, con relleno uniforme y despreciando los efectos de la pared. La curva b) presenta un lecho denominado tipo "slug", con una fluctuación en la caída de presión al llegar al punto de fluidización (el concepto de "punto de fluidización" se explica en párrafos posteriores). La curva c) muestra un lecho con "canalizaciones", cuya caída de presión está muy por debajo del valor de la presión estática del lecho en condiciones ideales. Podemos interpretar la curva a) del lecho ideal, ahora mostrada en la fig.4, de la siguiente forma:

La sección recta A-B representa el flujo del fluido a través del lecho fijo antes del punto de fluidización.

La desviación de la linealidad en el punto B es característico de un menor movimiento y reajuste de las partículas en el lecho, para obtener una mayor área axial libre para el paso del fluido.

Conforme se incrementa la velocidad, tiene lugar un mayor reajuste, hasta llegar al punto C en donde, con un aumento de velocidad, algunas de las partículas dejan de estar en contacto permanente con otras partículas y se mantienen en estado constantemente agitado. A esta velocidad se le conoce como velocidad mínima de fluidización y corresponde a la mínima velocidad requerida para iniciar el estado fluidizado.

Del punto B al punto C, la altura del lecho se incrementa un máximo del 5 al 10%. C es un punto de transición entre dos regímenes. A éste se le denomina "punto de fluidización" y a la velocidad en este punto se le conoce como "velocidad de fluidización".

En el punto D, la fluidización es completa, y cada partícula, aunque cercana una de otra, se encuentra en estado agitado.

El estado de fluidización completa representado en la gráfica por la sección de D a E se caracteriza por una caída de presión aproximadamente constante a través de todo el lecho, al incrementar la velocidad.

El incremento de velocidad, conlleva a una expansión del lecho hasta llegar a un límite, en donde las partículas están tan separadas que se comportan individualmente, más que como parte del lecho. Esta característica del lecho fluidizado se demuestra en la Fig 5 la cual representa una gráfica de ϵ (% espacio hueco) vs Re (Número de Reynolds), siendo éste último proporcional a la velocidad.

La sección vertical de la curva representa la condición inicial del lecho antes del punto de fluidización. El punto A es el punto de fluidización. Mas allá de este punto, el espacio hueco aumenta en forma exponencial con el Número de Reynolds.

Resultados experimentales, han demostrado que estos valores son independientes de la altura inicial del sólido en la columna de operación y del efecto de entrada del fluido.

También se ha encontrado experimentalmente, una circulación aparente de partículas, así como colisiones entre éstas, con un "camino libre medio" que se incrementa conforme se expande el lecho.

Un sistema sólido-líquido como éste, se comporta en forma análoga a una mezcla de gases, caracterizado por la tendencia de las partículas a separarse.

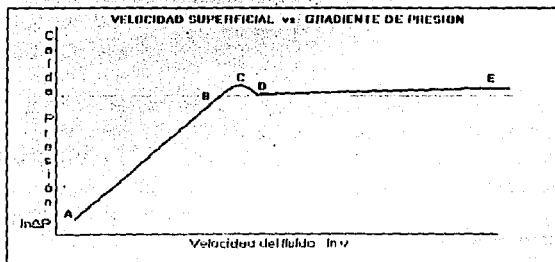


FIGURA 4. Curva típica de fluidización. (Chemical Engineering Progress, Marzo 1940).

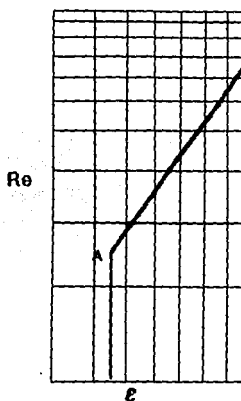


FIGURA 5.
Gráfica de espacio hueco
vs número de Reynolds
en un lecho fluidizado.

Ref [33]

III.2b VENTAJAS Y DESVENTAJAS DE UN SISTEMA FLUIDIZADO

VENTAJAS

Un sistema fluidizado puede utilizarse para poner en contacto un fluido con las partículas sólidas de un catalizador para llevar a cabo una reacción, con las siguientes ventajas:

- * **CONTROL DE TEMPERATURA:** el lecho fluidizado puede aproximarse a un sistema isotérmico lo cual es una gran ventaja en procesos de reacción, ya que de las diversas variables de reacción, la temperatura es una de las más importantes. La rapidez de reacción varía en forma exponencial con la temperatura. Comúnmente varias reacciones compiten entre sí y la variación de algunos grados en la temperatura puede alterar el balance de la rapidez de reacción de las diversas reacciones.

Tres factores fundamentales en el control de temperatura de un lecho fluidizado, en orden de importancia son:

1) Agitación turbulenta de las partículas sólidas, dispersando cualquier zona caliente o fría que se llegara a formar a través del lecho. La formación de estas zonas es común ya que la actividad catalítica no es uniforme en todas las partículas de catalizador, y aquellas cuya actividad es mayor, aceleran la reacción también en las partículas vecinas; consecuentemente, la temperatura difiere en esta zona de la temperatura en lugares donde encontramos partículas de baja actividad.

2) La capacidad calorífica alta del lecho es relativo al fluido en él. Este factor estabiliza la temperatura del lecho, permitiendo absorber cantidades relativamente grandes de calor con pequeños cambios en la temperatura.

3) Velocidad de transferencia de calor alta, debido a que el área de contacto por unidad de volumen del lecho también es alto. Esto permite una rápida homogenización de la temperatura del lecho.

* **TRANSFERENCIA DE CALOR:** el proceso de fluidización es un método conveniente para la transferencia de calor, ya sea suministrando calor en reacciones exotérmicas o removiendo calor en reacciones endotérmicas en forma continua; así mismo puede utilizarse en conjunto con otras operaciones además de la catálisis, como en el transporte de sólidos y fluidos.

* **OBTENCIÓN DE UNA ACTIVIDAD UNIFORME DEL CATALIZADOR:** La mayoría de los catalizadores pierden gradualmente su actividad con el uso por envenenamiento, ya que su superficie activa se cubre de una capa de sub-productos u otras sustancias. Debido a que su actividad decrece, se hace necesario parar el proceso para reactivar el catalizador o alterar las condiciones de operación en los reactores catalíticos convencionales, como por ejemplo, aumentar la temperatura de operación; sin embargo esto incrementa los costos de operación.

Por medio de un sistema fluidizado se hace posible mantener un nivel definido de actividad catalítica pues una cantidad de catalizador envenenado es removido continuamente del reactor, mientras que, al mismo tiempo se adiciona catalizador reactivado.

- * **CONTINUIDAD EN LA OPERACION:** la fluidización puede adaptarse a procesos de operación continua con lo que se obtiene un mejor control y más preciso, de las variables de proceso, los productos son removidos continuamente, se realizan menores maniobras manuales y se obtiene mayor uniformidad en la calidad del producto.

DESVENTAJAS

- * Aquellos sólidos que no fluyen libremente o tienden a aglomerarse, no pueden procesarse en un reactor de lecho fluidizado.
- * Ocasionalmente puede suceder que se desee obtener un gradiente de temperatura en el reactor catalítico; por ejemplo, una temperatura más alta a la salida del reactor para que reaccione todo el reactivo residual. Este gradiente de temperatura no se puede lograr en un reactor de lecho fluidizado convencional. Sin embargo, se podría obtener colocando serpentines en el reactor.
- * La caída de presión en un reactor de este tipo es mucho mayor que en un reactor de lecho fijo.

III.2c DISEÑO DE UN REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO

Un parámetro básico asociado con los sistemas de lecho fluidizado está representado por la fracción hueca del mismo a las condiciones requeridas para obtener el estado de fluidización. El contar con información respecto a esta propiedad es esencial para establecer la eficiencia de contacto fluido-sólido.

El método más común para predecir el espacio hueco (ϵ), es expresarlo en función de la velocidad del fluido o alguna forma modificada de la misma. De las características de cualquier sistema fluidizado' (gas-sólido o líquido-sólido), está claro que no existe cambio en la altura del lecho hasta que la velocidad exceda la mínima velocidad de fluidización, a partir de la cual, la porosidad o espacio hueco se incrementa continuamente con la velocidad de fluidización y, la máxima expansión del lecho ocurre cuando " ϵ " se aproxima a la unidad y se alcanza la velocidad terminal de la partícula. El máximo gradiente de velocidad, responsable de la expansión del lecho es, por lo tanto igual a:

$$(V_t - V_{mf})$$

mientras que el gradiente responsable de la altura del lecho expandido a cualquier valor de velocidad de fluidización es:

$$(V_f - V_{mf})$$

El resultado del último gradiente entre el primero fue denominado por Bernek & Sokol como "velocidad relativa" o "relación de velocidades", y describe la expansión del lecho a través del rango completo de velocidades de fluidización y se expresa de la siguiente manera:

$$U_v = (V_f - V_{mf}) / (V_t - V_{mf}) \quad \dots \text{Ec. (III. 11)}$$

donde $V_f = V_{mf}$, cuando $U_v = 0$ (inicio de la expansión)

$V_f = V_t$, cuando $U_v = 1$ (máxima expansión posible, $\epsilon \rightarrow 1.0$)

Sin embargo, como vemos, para conocer el comportamiento de las características de expansión del lecho, es indispensable conocer la velocidad mínima de fluidización, ya que " U_v " se encuentra en función de " V_{mf} ", que corresponde a la mínima velocidad requerida para iniciar el estado fluidizado, como se mencionó anteriormente.

Este valor puede obtenerse a partir de la ecuación sugerida por Kunii & Levenspiel a través del Número de Reynolds de la siguiente forma:

$$\frac{1.75}{\epsilon_{mf}^3} \text{Remf}^2 + 150 \frac{(1 - \epsilon_{mf})}{\epsilon_{mf}^3} \text{Remf} = \frac{D_p^3}{\mu^2} \frac{\rho(\rho_s - \rho) g}{\mu^2} \quad \dots \text{Ec. (III.12)}$$

con lo cual tenemos una ecuación de segundo grado y, resolviéndola obtenemos el valor de Remf, para obtener posteriormente el valor de Vmf como sigue:

$$V_{mf} = (\text{Remf } \mu) / (D_p \rho)$$

De la misma forma, es necesario conocer el valor de la velocidad terminal, para lo cual podemos utilizar la siguiente correlación también desarrollada por Kunii & Levenspiel:

$$V_t = \frac{g (\rho_s - \rho) D_p^2}{18 \mu} \quad \text{para } \text{Ret} < 0.4$$

$$V_t = \left[\frac{4 (\rho_s - \rho)^2 g^2}{225 \rho \mu} \right]^{1/3} D_p \quad \text{para } 0.4 < \text{Ret} < 500$$

$$V_t = \left[\frac{3.1 (\rho_s - \rho) g D_p}{\rho} \right]^{1/2} \quad \text{para } 500 < \text{Ret} < 200,000$$

Para predecir la expansión del lecho en función de "U", U.P. Ganguly desarrolló una correlación sencilla de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$Le = 1.27 W / \left[\rho_s D_t^2 (1 - 1.762U + 0.95U^2) \right] \quad \dots \text{Ec. (III.13)}$$

donde: Le = longitud del lecho expandido

W = masa del lecho

ρ_s = densidad del lecho

D_t = diámetro interno del reactor

U_v = relación de velocidades.

Una vez encontrada la longitud del lecho expandido, podemos deducir el valor del espacio hueco de la siguiente ecuación:

$$\epsilon = 1 - (L/L_e)$$

donde: L_e = lecho expandido
 L = lecho no expandido.

El valor de la altura del lecho a la mínima fluidización $L_{mf} = L$, corresponde a la altura del lecho cuando éste se encuentra estático y está dado por:

$$L = W / (S \rho_s)$$

El espacio hueco (ϵ) será el que se utilice en las ecuaciones de balance. En el reactor de lecho fluidizado, consideramos un nivel de agitación o mezclado de la fase líquida. Por esta razón, y como se mencionó anteriormente, el lecho fluidizado puede considerarse como un sistema isotérmico y sólo nos ocuparemos de la ecuación de transferencia de masa, en donde se toman en cuenta los efectos de dispersión axial, por lo tanto se involucra el valor de la difusividad axial (D). Este modelo supone que la concentración radial es uniforme en el reactor. La ecuación de balance de masa queda como sigue:

$$D \epsilon \frac{\partial^2 C_B}{\partial z^2} - u \frac{\partial C_B}{\partial z} - r \frac{W}{S L} = 0 \quad \dots \text{Ec(III.14)}$$

La ecuación integrada proporciona los valores de conversión a lo largo del reactor. Para la caída de presión se puede utilizar la Ecuación de Ergun tanto para flujo laminar como turbulento, en donde se consideran, el tamaño y forma de las partículas del catalizador así como la fracción

hueca. La ecuación se expresa de la siguiente forma:

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{150(1-\epsilon)\mu}{D_p} + 1.75G \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3} \frac{G}{D_p \rho_s \epsilon_c} \quad \dots \text{Ec. (III.15)}$$

donde: $D_p = 6v_p/a_p$

siendo v_p = volumen de una partícula de catalizador

a_p = área superficial de una partícula de catalizador

Con estas ecuaciones queda definido el comportamiento del reactor de lecho fijo y de lecho fluidizado para poder llevar a cabo la simulación de cada uno de ellos y así poder decidir si el reactor propuesto es el adecuado y cumple con las necesidades o requerimientos.

Referencias sec. III.2: [6],[8],[11],[13],[15],[16],[23],[28] y [33].

IV. SIMULACION

El diseño de los reactores, requiere conocer las velocidades de los procesos tanto físicos como químicos, por medio del establecimiento de ecuaciones de conservación de la masa y la energía, como las obtenidas en el capítulo anterior, para cada tipo de reactor. En estas ecuaciones de conservación aparecen dos clases de términos:

- 1) Términos que expresan procesos físicos, esto es, velocidades de transferencia de masa y energía de especies químicas.
- 2) Términos que expresan rapidez de conversión de una especie química en otra.

Este último se refiere a la rapidez de reacción, es decir, a la cinética química del sistema.

El primer problema del diseño de un reactor consiste en obtener, a partir de mediciones experimentales, una expresión cuantitativa de la rapidez de reacción, en base a datos de laboratorio.

Una vez obtenida la ecuación de rapidez en un centro catalítico, ésta se combina con las resistencias físicas correspondientes a las condiciones del reactor a gran escala, en las ecuaciones de balance. La resolución de estas ecuaciones, permite obtener el tamaño del equipo necesario para lograr el grado deseado de verificación de la reacción y determinar las condiciones de operación que se requieren: temperaturas, presiones, flujos, concentraciones iniciales, etc.

Ref. [28]

IV.1 OBTENCION DE LA ECUACION DE RAPIDEZ DE REACCION

Según datos reportados en la literatura, el modelo cinético propuesto por Gicquel & Torck (Ref11), es el que más se ajusta a la reacción en estudio. Este corresponde al modelo heterogéneo con un solo sitio activo y la reacción como paso controlante, descrito anteriormente en el capítulo II.4f "Modelos de Reacción". El modelo es el siguiente:

$$r = \frac{k_3 C_A C_B - k_4 C_C R}{C_A + R C_C} \quad \dots \text{Ec. (II.2)}$$

donde los valores de las constantes k_3 , k_4 y R están dados en la Tabla 6, y que han sido obtenidos a partir de resultados experimentales por A. Ali & Bathia. A partir de estos valores y utilizando la ecuación de Arrhenius, podemos obtener la ecuación de rapidez de reacción en función de la conversión y la temperatura, de la siguiente forma:

$$k = k_0 e^{-E_a/R_g T} \quad \dots \text{Ec. de Arrhenius}$$

$$\ln k = \ln k_0 + \left(\frac{-E_a}{R_g} \right) \frac{1}{T}$$

	T(K)	$1/T \times 10^{-3}$	$\ln k_3$	$\ln k_4$	$\ln R$
1	328	3.049	-1.6094	-12.3407	6.9149
2	333	3.003	-1.0272	-11.4873	6.8872
3	338	2.959	-0.6520	-10.5245	6.4742
4	343	2.915	-0.1543	- 8.8203	5.7718

Tabla 6

REF (11)

A partir de los valores reportados en la Tabla 6, obtenemos la ecuación de Arrhenius para cada constante de rapidez:

$$\ln k_3 = 30.85 - 10,635.2 \frac{1}{T}$$

$$k_3 = 2.49 \times 10^{13} e^{(-10635.2/T)} \quad \dots \text{Ec. (IV.2)}$$

$$\ln k_4 = 66.13 - 25,799 \frac{1}{T}$$

$$k_4 = 8.23 \times 10^{28} e^{(-25799/T)} \quad \dots \text{Ec. (IV.3)}$$

$$\ln R = -7.85 + 4,863.3 \frac{1}{T}$$

$$R = 3.9 \times 10^{-4} e^{(4863.3/T)} \quad \dots \text{Ec. (IV.4)}$$

Para la reacción: $A + B \rightleftharpoons C$

$$C_A = C_{A0} (1 - X_B) = C_{A0} \left(1 - \frac{C_{B0} X_B}{C_{A0}}\right)$$

$$C_A = C_{B0} \left(\frac{C_{A0}}{C_{B0}} - X_B\right)$$

$$C_B = C_{B0} (1 - X_B) \quad ; \quad X_A = \frac{C_{B0} X_B}{C_{A0}} \quad ; \quad X_C = \frac{C_{B0} X_B}{C_{C0}}$$

$$C_C = X_B C_{B0}$$

Sustituyendo las ecuaciones anteriores en la Ec. (IV.1) :

$$r = \frac{k_3 C_{B0} \left(\frac{C_{A0}}{C_{B0}} - X_B\right) C_{B0} (1 - X_B) + k_4 X_B C_{B0} R}{C_{B0} \left(\frac{C_{A0}}{C_{B0}} - X_B\right) + R C_{B0} X_B}$$

$$r = \frac{k_3 C_{Bo} (1 - X_B) C_{Ao} - X_B + k_4 R X_B}{C_{Bo} (C_{Ao} - X_B) + R X_B} \quad \dots \text{Ec. CIV. 5)}$$

$$r = \frac{(k_3 C_{Bo} - k_3 C_{Bo} X_B) C_{Ao} - X_B + k_4 R X_B}{C_{Bo} (C_{Ao} - X_B) + R X_B}$$

$$r = \frac{k_3 C_{Ao} - k_3 X_B C_{Ao} - k_3 C_{Bo} X_B + k_3 C_{Bo} X_B^2 + k_4 R X_B}{C_{Bo} (C_{Ao} - X_B) + R X_B}$$

$$r = \frac{k_3 C_{Bo} X_B^2 - X_B (k_3 C_{Ao} + k_3 C_{Bo} - k_4 R) + k_3 C_{Ao}}{C_{Bo} (C_{Ao} - X_B) + R X_B} \quad \dots \text{Ec. CIV. 6)}$$

$$\text{Si } M = k_3 C_{Bo}$$

$$N = C_{Ao} - C_{Bo}$$

$$D = k_4 R$$

$$E = R$$

$$r = \frac{M X_B^2 - X_B (C_N + 1 + \frac{D}{M}) + N}{N + X_B (E - 1)}$$

$$r = \frac{X_B^2 - X_B (C_N + 1 + \frac{D}{M}) + N}{\frac{N}{M} + X_B (\frac{E - 1}{M})} \quad \dots \text{Ec. CIV. 7)}$$

El desarrollo para demostrar que la Ec. (CIV.7) es valida, de acuerdo a los datos experimentales reportados en la literatura, se encuentra descrito en el Apéndice C de este trabajo.

REFERENCIAS SEC. IV. I: (1) Y (28).

IV.2 DATOS INICIALES

Para la simulación de los reactores se consideraron los siguientes datos reportados en la literatura (la capacidad y la conversión son valores supuestos), para así partir de estos mismos y construir las ecuaciones de conservación de masa y energía de acuerdo al modelo propuesto.

Capacidad de producción considerando el diseño de un reactor de una planta piloto*: $F_c = 100 \text{ ton / año}$

Relación alimentación MeOH/i-Bu: 4 g/mol MeOH/gmol i-Bu

Conversión de i-Bu: 90%

* Una vez determinado el reactor óptimo a nivel de planta piloto, se podrá llevar a cabo la escalación del mismo.

	MEOH (A)	I-BUTENO (B)	MTBE (C)
PM (g^3/gmol)	32.04	56.1	88
μ_{328} (cP)	0.39	0.0090	
δ_{203} (g/cm^3)	0.792	0.0025	0.74
Cp_{328} ($\text{J}/\text{gmol} \text{ } ^\circ\text{R}$)	48.16	95.89	

REF. (1) y (23)

$T_o = T_w$ temp. inic. = temp. de la pared

$P = 1 \text{ ATM}$ presión

$E_a = 76.7 \text{ KJ/mol}$ energía de activación

$(-\Delta H_R) = 37 \text{ KJ/mol}$ calor de reacción

REF. (31)

$\rho_c = 48 \text{ lb}/\text{ft}^3$ ($769 \text{ kg}/\text{m}^3$) densidad catalizador

$d_p = 0.42 \text{ mm}$ diámetro de partícula

$\epsilon = 0.38$ espacio hueco

REF. (1) y (26)

IV.3 MODELO UNIDIMENSIONAL
SIMULACION DEL REACTOR DE LECHO FIJO PARA LA OBTENCION DE
MTBE

De acuerdo al modelo descrito en el capítulo III.1b, las ecuaciones de balance de masa y energía son:

$$\frac{dX}{dz} = \beta R \quad \dots \text{Ec. (III.4)}$$

$$\frac{dT}{dz} = \beta' R - \alpha(T - T_w) \quad \dots \text{Ec. (III.9)}$$

Sustituyendo la ecuación de rapidez de reacción (IV.7) en las ecuaciones anteriores, tenemos:

$$R = \frac{r_g}{F_o}$$

$$r_g = \frac{k_3 C_A C_B - k_4 C_C P_C}{C_A + R_C C_C} = \frac{X_B^2 - X_B C_N + 1 + \frac{D_1}{M}}{\frac{N}{M} + X_B C \frac{E-1}{M}} + N \quad \text{Ec. (IV.7)}$$

Para r_o :

$$C_A = C_{Ao}$$

$$C_B = C_{Bo}$$

$$C_C = C_{Co} = 0$$

$$r_o = \frac{k_3 C_{Ao} C_{Bo} - k_4 C_{Co} P_C}{C_{Ao} + R_C C_{Co}} = \frac{k_3 C_{Ao} C_{Bo}}{C_{Ao}}$$

$$r_o = k_3 C_{Bo}$$

$$R = \frac{r_g}{r_o} = \frac{\frac{X_B^2 - X_B C_N + 1 + \frac{D_1}{M}}{\left(\frac{N}{M} + X_B C \frac{E-1}{M}\right)} + N}{k_3 C_{Bo}}$$

$$R = \frac{r_g}{r_o} = \frac{X_B^2 - X_B \left(\frac{N}{M} + 1 + \frac{D}{M} \right) + N}{k_3 C_{Bo} \left[\frac{N}{M} + X_B \left(\frac{E-1}{M} \right) \right]}$$

$$\beta = \frac{L r_o}{G} \quad \dots \text{Ec. (III. 3)}$$

$$\beta = \frac{L k_3 C_{Bo}}{G}$$

$$\beta' = \frac{L r_o (-\Delta H)}{G C_p T_o} \quad \dots \text{Ec. (III. 8)}$$

$$\beta' = \frac{L (-\Delta H)}{G C_p T_o} k_3 C_{Bo}$$

$$\alpha = \frac{4UL}{G C_p d_i e} \quad \dots \text{Ec. (III. 7)}$$

El coeficiente global de transferencia de calor se puede obtener a partir de la correlación de Yagi & Kunii, mostrada en la fig. 6.

El sistema de ecuaciones diferenciales a resolver para la simulación del reactor de lecho fijo, es el siguiente:

$$\frac{dX}{dz} = \frac{L k_3 C_{Bo}}{G} \frac{X_B^2 - X_B \left(\frac{N}{M} + 1 + \frac{D}{M} \right) + N}{k_3 C_{Bo} \left[\frac{N}{M} + X_B \left(\frac{E-1}{M} \right) \right]} \quad \dots \text{Ec. (IV. 8)}$$

$$\frac{dT^*}{dz} = \frac{L (-\Delta H)}{G C_p T_o} k_3 C_{Bo} \frac{X_B^2 - X_B \left(\frac{N}{M} + 1 + \frac{D}{M} \right) + N}{k_3 C_{Bo} \left[\frac{N}{M} + X_B \left(\frac{E-1}{M} \right) \right]} - \frac{4UL}{G C_p d_i e} (T^* - T_w^*)$$

... Ec. (IV. 9)

Este sistema se puede resolver numéricamente por el método de Runge-Kutta, descrito en el apéndice B. Para la resolución de las ecuaciones, se desarrolló un programa en DBase mismo que se muestra en el apéndice D, y que simula el reactor a partir de los datos iniciales que se alimentan al programa. El apéndice E muestra un ejemplo de una corrida.

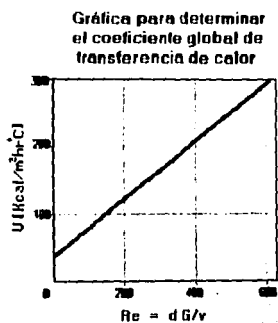


Fig. 6 Correlación de Yagi & Kunii
Ref (10)

IV.4 MODELO PROPUESTO PARA LA SIMULACION DEL REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO EN LA OBTENCION DE MTBE

De acuerdo a lo expresado en el punto III.2c, la ecuación ha desarrollar para la simulación del reactor de lecho fluidizado es:

$$(D_0)_L \epsilon \frac{\delta^2 C_B}{\delta z^2} - u \frac{\delta C_B}{\delta z} - r \frac{W}{S L} = 0$$

Expresándola en función de x_B la ecuación se modifica de la siguiente forma:

$$(D_0)_L \epsilon \frac{d^2 C_{B0}(1 - X_B)}{dz^2} - v \frac{dC_{B0}(1 - X_B)}{dz} - r \frac{W}{S L} = 0$$

$$\frac{dC_{B0}(1 - X_B)}{dz} = - C_{B0} \frac{dX_B}{dz}$$

$$\frac{d^2 C_{B0}(1 - X_B)}{dz^2} = d[- C_{B0} \frac{dX_B}{dz}] = - C_{B0} \frac{d^2 X_B}{dz^2}$$

$$-(D_0)_L \epsilon C_{B0} \frac{d^2 X_B}{dz^2} + v C_{B0} \frac{dX_B}{dz} - r \frac{W}{S L} = 0$$

$$W/S L = \rho cat$$

$$-(D_0)_L \epsilon C_{B0} \frac{d^2 X_B}{dz^2} + v C_{B0} \frac{dX_B}{dz} - r \rho cat = 0$$

Llevando a cabo las sustituciones correspondientes, se obtiene la ecuación anterior en términos adimensionales:

$$dz^* = \frac{dz}{L} \quad ; \quad dz^{*2} = \frac{dz^2}{L^2} \quad ; \quad dz^2 = dz^{*2} L^2$$

$$-(D_0)_L \epsilon \frac{C_{B0}}{L^2} \frac{d^2 X_B}{dz^{*2}} + \frac{v C_{B0}}{L} \frac{dX_B}{dz^*} - r \rho cat = 0$$

Sustituyendo la ecuación de rapidez de reacción:

$$-C_0 \frac{v C_{B0}}{L^2} \frac{d^2 X_B}{dz^2} + \frac{v C_{B0}}{L} \frac{dX_B}{dz} - \frac{X_B^2 - X_B(C_N + D/M + 1) + N}{N/M + X_B(C_E - 1)} \rho_{cat} = 0$$

Ec. CIV. 10)

Para obtener la longitud y el diámetro óptimo del reactor al nivel de conversión deseado, habrá que integrar esta ecuación ya sea analítica o numéricamente.

Encontrar el método de resolución requiere de conocer la clasificación de la ecuación diferencial. Para facilitar el análisis simplificamos la ecuación de la siguiente forma:

$$a_1 \frac{d^2 X_B}{dz^2} + b_1 \frac{dX_B}{dz} - c_1 \frac{X_B^2 - AX_B + C}{D + EX_B} = 0$$

La derivada de mayor orden que interviene en la ecuación es $d^2 X_B/dz^2$, por lo tanto, la ecuación es de segundo orden.

Contiene una sola variable dependiente que es X_B y una variable dependiente que es X_B . La ecuación es ordinaria.

La ecuación es no lineal debido a que la potencia de la variable dependiente X_B es diferente a 1 en el tercer término; así también, el tercer término depende de la variable dependiente X_B y no de la variable independiente z como sucedería en una ecuación diferencial lineal.

La ecuación es homogénea debido a que no contiene un término independiente de la variable X_B .

Finalmente, podemos decir que la ecuación es diferencial ordinaria, de segundo orden, no lineal, homogénea.

Revisando la literatura (Ref [35], [36] y [37]) encontramos métodos para la solución de ecuaciones diferenciales sólo aplicables a ecuaciones lineales homogéneas, generalmente de primer orden, o no lineales parciales.

Una solución podría ser utilizar el método de reducción de orden, con lo cual obtendríamos la siguiente ecuación:

$$\text{Si: } \frac{dX_B}{dz} = p \quad \text{y} \quad \frac{d^2 X_B}{dz^2} = p \frac{dp}{dX_B}$$

Entonces tenemos:

$$a_1 p \frac{dp}{dX_B} + b_1 p - c_1 \frac{X_B^2 - AX_B + C}{D + EX_B} = 0$$

Se convierte en una ecuación de 1^{er} orden. Podemos tener dos opciones para su resolución. Una es utilizar el método de separación de variables, pero como vemos, la ecuación es "no separable" debido a que el 3^{er} término impide llevar a cabo esta operación. La segunda opción es reducir a lineal la ecuación, pero también el tercer término no lo permite.

Sin embargo, en una ecuación diferencial no necesariamente podemos encontrar una fórmula explícita o una función que satisfaga la ecuación. Esto sucede en muchos casos y particularmente en ecuaciones no lineales (Ref [35]). En estos casos se hace uso de procedimientos numéricos con lo cual se obtienen aproximaciones de una solución. Un requisito indispensable para utilizar cualquier método numérico es el de conocer las condiciones iniciales, que en nuestro caso serían:

$$X_B(0) = 0; \quad z^*(0) = 0 \quad \text{y} \quad \frac{dX_B}{dz}(0) = ?$$

El problema consistiría ahora en obtener el valor de la primera derivada a las condiciones iniciales. Debido a la dificultad que presenta la solución de este problema, consideraremos entonces que en realidad, los efectos de eliminar el término de dispersión axial no son tan significativos, puesto que los valores del Reynolds con los que estamos trabajando son muy pequeños, lo cual significa que tenemos un flujo laminar donde la dispersión axial es mínima. Esto simplifica y facilita en gran medida la solución de la ecuación, que queda de la siguiente forma:

$$\frac{v C_{B0}}{L} \frac{dX_B}{dz} = \frac{X_B^2 - X_B C_N + D/M + 1}{N/M + X_B C_E - 1} + N \rho_{cat} = 0$$

Ec. (IV.11)

El tratamiento para resolver esta ecuación se realizó en forma similar al que se llevo a cabo para el lecho fijo, por medio del método de Runge-Kutta y a través de un programa en DBase con el que se obtuvo toda la simulación. El programa se enlistó en el Apéndice D y la simulación se ejemplifica en el Apéndice E.

V. RESULTADOS Y ANALISIS DE RESULTADOS

V.1 RESULTADOS Y ANALISIS DE RESULTADOS PARA EL REACTOR DE LECHO FIJO

Por medio de un programa de computación elaborado en DBase (ver programa "Rfijo.prg" del anexo D) y utilizando el modelo unidimensional descrito en el capítulo IV.3, se hicieron diversas simulaciones variando el número de tubos del reactor de lecho fijo, la temperatura inicial y el diámetro de cada tubo (considerando únicamente diámetros comerciales de tubería en acero inoxidable 316).

Para facilitar la comprensión de los resultados, se optó por utilizar unidades que se manejan en la práctica en lugar de las unidades del Sistema Internacional.

La tabla No. 7 muestra los reactores que se simularon. A partir de los datos mostrados en dicha tabla, podemos hacer las siguientes observaciones:

- Conforme aumenta el diámetro de los tubos del reactor, la temperatura se incrementa e incluso llega a dispararse. (En la tabla no se muestran aquellos reactores en los que la temperatura se disparó en forma pronunciada).
- A menor número de tubos en el reactor, el diámetro de los mismos tiene que incrementarse y, por lo tanto también la temperatura. Es por esta razón por la que hay menores opciones de reactores con pocos tubos.
- Un reactor de un sólo tubo tendría que ser demasiado largo, pues si fuera corto, sería necesario que el diámetro fuera grande y provocaría un incremento excesivo de la temperatura.
- El número de Reynolds en todos los casos es muy pequeño. El flujo es laminar. (la literatura también reporta Reynolds pequeños).

Para seleccionar el reactor más adecuado, se han considerado ciertas limitantes que pueden afectar a la reacción o al proceso, como a continuación se indica:

TEMPERATURA INICIAL MINIMA = 308K (35°C). Abajo de esta temperatura, la reacción es muy lenta y se requeriría de un tiempo de residencia muy largo y por lo tanto, un reactor de gran longitud.

TEMPERATURA MAXIMA = 340K (67°C). El metanol tiene su punto de ebullición a los 70°C a presión atmosférica, por lo que una temperatura mayor provocaría que gran parte del reactivo fuera gaseoso modificando el comportamiento del reactor que se ha considerado a presión atmosférica y la reacción en estado líquido, por ser las condiciones encontradas en la literatura, y por lo tanto a las que se manejaron los datos que se tienen.

0.6 m < LONGITUD DEL LECHO < 10 m. El fabricante de la resina Amberlyst 15, recomienda un lecho mínimo de 0.6 m (Ref[26]). Se ha limitado en el presente trabajo la longitud máxima, ya que el diámetro de los tubos es más pequeño conforme el reactor se hace más largo, lo que podría causar problemas en la operación en caso de que se obturaran los tubos. También se dificulta el mantenimiento, se requiere mayor espacio para alojar el equipo y se incrementa el problema del deterioro de los tubos provocado por la acción abrasiva de las partículas sólidas, puesto que con diámetros menores se incrementa la velocidad de las partículas.

0.1 < LHSV* < 15 hr⁻¹. Aunque el fabricante de la resina recomienda que el valor de LHSV fluctúe entre 1 y 5 hr⁻¹, se ha encontrado en la literatura que el rango aquí propuesto ha funcionado en reactores comerciales (Ref[17]).

CAIDA DE PRESION < 10 psig. La caída de presión máxima recomendada para un equipo de este tipo es de 10 psig.

*Ver sección III.16

De todos los reactores obtenidos, se eliminaron aquéllos que se encontraban fuera de los límites anteriormente establecidos y la lista se redujo a 13 reactores posibles, agrupados en la tabla No. 8. Con los datos de estos reactores, se han generado las figuras No's. 7 y 8 para facilitar la interpretación del comportamiento de cada reactor.

La caída de presión no es un punto de discusión ya que en todos estos reactores su valor es muy pequeño.

Como podemos ver, todos los reactores de 100 tubos presentan un valor de LHSV muy alto. Podemos considerar dos de ellos cuyo LHSV se encuentra en el límite. La ventaja de estas opciones es la cantidad de catalizador que es baja, en comparación con la mayoría de los reactores. Sin embargo, uno de ellos es muy largo, (6.14 m) y ambos tienen el inconveniente en la cantidad de tubos que los constituyen, pues conforme se incrementa el número de tubos el mantenimiento se hace más difícil y por lo mismo, opciones de reactores con menor número de tubos son mejores. Proseguimos por lo tanto, a analizar los reactores de 50 tubos.

Se cuenta con cuatro opciones de 50 tubos. Los valores de LHSV y del volumen del catalizador son muy similares razón por la cual no se toman en consideración para el análisis de estos reactores.

El reactor de 6.73 m de longitud tiene el menor incremento de temperatura, sin embargo es muy largo. El reactor de 2.79 m es el de menor longitud y, el incremento de temperatura es relativamente pequeño, por lo que podemos considerarlo como la mejor opción entre los cuatro reactores.

En seguida haremos la selección del reactor más conveniente de 40 tubos para compararlo con éste último de 50 tubos. El reactor de 2.12 m de longitud es corto pero incrementa su temperatura de manera considerable y corre un mayor riesgo de que ocurra un disparo en la temperatura. El reactor de 5.03 m presenta un perfil de temperaturas adecuado pero es muy largo. El reactor de 3.48 m es más conveniente por el comportamiento de su temperatura y su longitud menor. Este reactor está conformado por un número menor de tubos que aquél de 50 tubos y el volumen de catalizador es ligeramente más bajo. En cuanto a la temperatura máxima y la longitud, éstos valores son ligeramente menores en el reactor de 50 tubos, pero la diferencia no es realmente importante, sobre todo en lo que respecta a

TABLA 6. Reactores de lecho fijo más viables.

NOM TUBOS	PROG. TUBO (TON/AÑO)	TMC (t)	TMAX (t)	RAM NOM (D)	CEN	RAM INVENTOR (M)	LONG (M)	NRE	CAVALIZ POR TUBO (M)	CAVALIZADOR TOTAL (M)	IBSV (HR-1)	DP/M (PSIG)	DP/PT (PSIG)
100	1.0	313	316.0	3/4"	40	0.0209	6.14	0.27	2.11	210.64	15.47	0.16	1.01
100	1.0	313	317.2	1"	40	0.0266	3.76	0.17	2.09	208.95	15.59	0.10	0.38
50	2.0	308	311.5	1 1/2"	40	0.0409	6.73	0.12	8.84	442.10	7.37	0.08	0.53
50	2.0	308	312.6	2"	80	0.0493	4.59	0.08	8.76	438.09	7.44	0.04	0.21
50	2.0	308	313.1	2"	40	0.0525	4.03	0.07	8.72	436.20	7.47	0.05	0.21
50	2.0	308	314.8	2 1/2"	40	0.0627	2.79	0.05	8.61	430.72	7.56	0.03	0.09
40	2.5	308	313.1	2"	40	0.0525	5.03	0.11	10.89	435.55	7.48	0.06	0.28
40	2.5	308	315.1	2 1/2"	40	0.0627	3.48	0.08	10.74	429.80	7.58	0.04	0.14
40	2.5	308	324.4	3"	40	0.0779	2.12	0.05	10.10	404.17	8.06	0.03	0.06
20	5.0	308	315.1	2 1/2"	40	0.0627	6.96	0.15	21.49	429.80	7.58	0.09	0.64
20	5.0	308	328.3	3"	40	0.0779	4.15	0.10	19.78	395.59	8.24	0.06	0.24
10	10.0	308	328.3	3"	40	0.0779	8.30	0.20	39.56	395.59	8.24	0.12	0.96
10	10.0	303	312.9	5"	40	0.1282	7.20	0.07	92.94	929.39	3.51	0.04	0.32




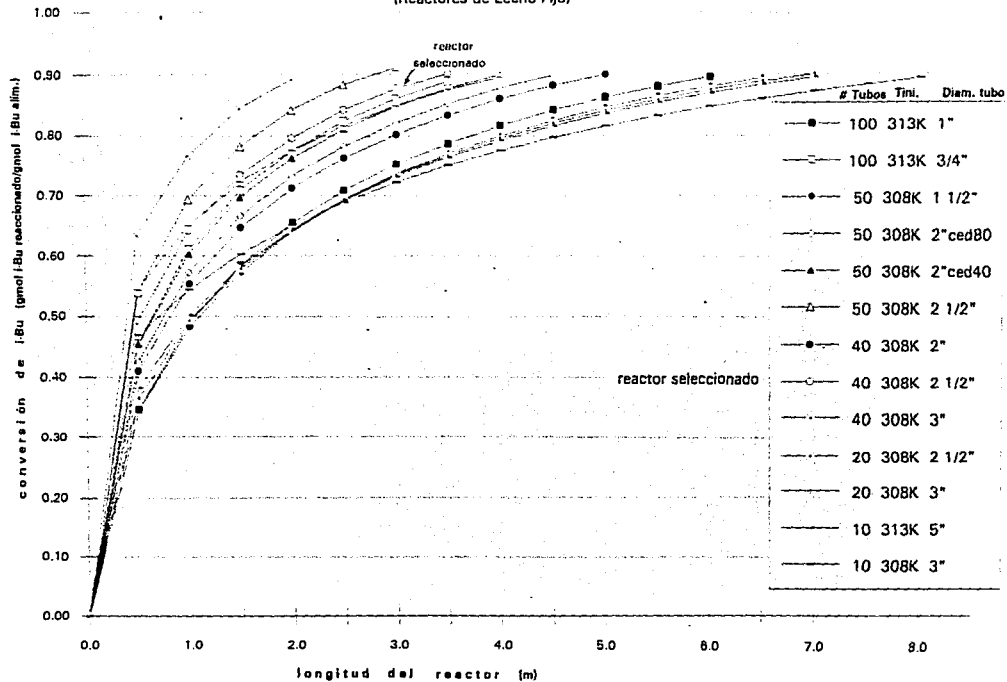
-  El valor sobrepasa el límite permitido
-  El valor representa una desventaja
-  Reactor óptimo seleccionado

FIG 7. Gráfica: Longitud vs Conversión de i-Bu

(Reactores de Lecho Fijo)



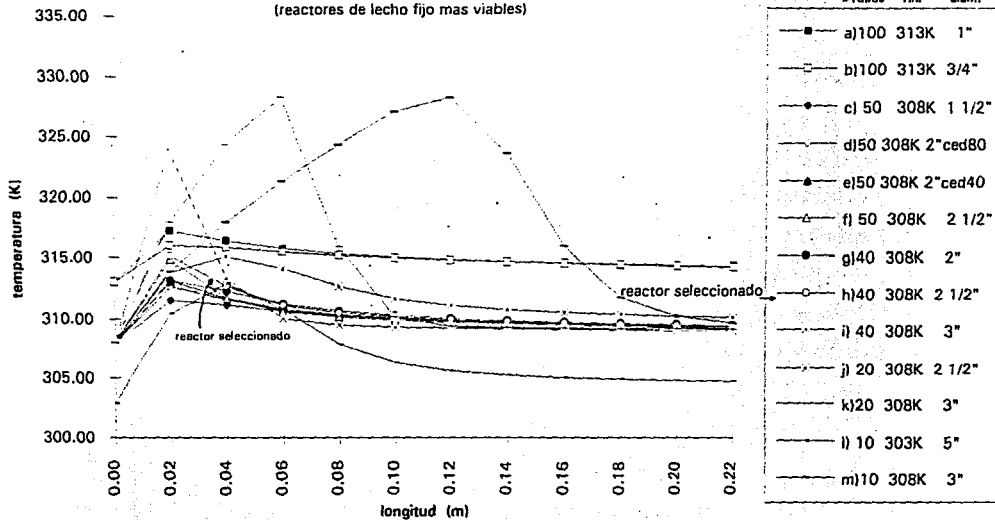
DATOS UTILIZADOS PARA LA ELABORACION DE LA FIG. 7

Longitud	Tubo 211K 1"	Tubo 211K 1 1/4"	Tubo 211K 1 1/2"	Tubo 211K 2"	Tubo 211K 2 1/2"	Tubo 211K 3"	Tubo 211K 3 1/2"	Tubo 211K 4"
0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.5	0.35	0.45	0.35	0.43	0.45	0.54	0.41	0.41
1.0	0.49	0.61	0.48	0.57	0.60	0.69	0.55	0.55
1.5	0.58	0.71	0.57	0.67	0.70	0.78	0.65	0.65
2.0	0.65	0.77	0.64	0.73	0.74	0.84	0.71	0.71
2.5	0.71	0.82	0.69	0.78	0.81	0.86	0.76	0.76
3.0	0.75	0.86	0.74	0.82	0.85	0.91	0.80	0.80
3.5	0.79	0.89	0.77	0.85	0.88		0.83	0.83
4.0	0.82		0.80	0.88	0.90		0.86	0.86
4.5	0.84		0.83	0.90			0.88	0.88
5.0	0.86		0.85				0.90	0.90
5.5	0.88		0.86					
6.0	0.90		0.88					
6.5			0.89					
7.0								

Longitud	40 208K 2 1/2"	40 208K 3"	20 208K 2 1/2"	20 208K 3"	10 211K 3"	10 208K 3"
0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.5	0.49	0.63	0.36	0.55	0.38	0.47
1.0	0.64	0.77	0.49	0.65	0.50	0.55
1.5	0.73	0.84	0.58	0.72	0.58	0.60
2.0	0.80	0.89	0.64	0.78	0.64	0.65
2.5	0.84		0.69	0.82	0.69	0.69
3.0	0.88		0.73	0.85	0.73	0.72
3.5	0.90		0.77	0.87	0.76	0.75
4.0			0.80	0.89	0.79	0.76
4.5			0.82		0.82	0.80
5.0			0.84		0.84	0.82
5.5			0.86		0.85	0.83
6.0			0.88		0.87	0.85
6.5			0.89		0.88	0.86
7.0			0.90		0.90	0.87
7.5						0.88
8.0						0.89

Fig 8. Gráfica: Longitud vs Temperatura

(reactores de lecho fijo mas viables)



DATOS UTILIZADOS PARA LA ELABORACION DE LA FIG. 8

Longitud	Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.	
	100	313K 1'	100	313K 3.4'	50	308K 1.12'	50	308K 2'cos80	5	308K 2'cos40	150	308K 2.12'
0.00	313.00	313.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00
0.02	317.24	316.04	311.54	312.63	313.09	314.82	313.12	313.12	313.12	313.12	313.12	313.12
0.04	316.41	315.84	311.18	311.60	311.69	311.69	312.29	312.29	312.29	312.29	312.29	312.29
0.06	315.74	315.48	310.66	310.78	310.78	310.63	311.25	311.25	311.25	311.25	311.25	311.25
0.08	315.32	315.20	310.29	310.32	310.30	310.16	310.66	310.66	310.66	310.66	310.66	310.66
0.10	315.05	314.99	310.03	310.03	310.00	309.87	310.30	310.30	310.30	310.30	310.30	310.30
0.12	314.84	314.82	309.84	309.82	309.79	309.67	310.06	310.06	310.06	310.06	310.06	310.06
0.14	314.68	314.69	309.69	309.65	309.63	309.51	309.87	309.87	309.87	309.87	309.87	309.87
0.16	314.55	314.57	309.57	309.52	309.49	309.38	309.72	309.72	309.72	309.72	309.72	309.72
0.18	314.44	314.48	309.47	309.41	309.39	309.28	309.60	309.60	309.60	309.60	309.60	309.60
0.20	314.34	314.40	309.38	309.32	309.30	309.19	309.50	309.50	309.50	309.50	309.50	309.50
0.22	314.26	314.32	309.30	309.25	309.22	309.11	309.41	309.41	309.41	309.41	309.41	309.41
0.24	314.19	314.26	309.24	309.18	309.15	309.05	309.33	309.33	309.33	309.33	309.33	309.33
0.26	314.13	314.20	309.18	309.12	309.09	308.99	309.26	309.26	309.26	309.26	309.26	309.26
0.28	314.08	314.15	309.13	309.06	309.04	308.94	309.20	309.20	309.20	309.20	309.20	309.20
0.30	314.03	314.10	309.08	309.02	308.99	308.89	309.15	309.15	309.15	309.15	309.15	309.15

Longitud	Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.		Tubo 1ml diam.	
	40	308K 2.12'	40	308K 3'	20	308K 2.12'	20	308K 3'	10	308K 6'	10	308K 3'
0.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00	308.00
0.02	315.11	323.96	313.76	317.94	310.45	313.85	313.85	313.85	313.85	313.85	313.85	313.85
0.04	312.67	313.29	315.07	324.36	312.85	317.94	317.94	317.94	317.94	317.94	317.94	317.94
0.06	311.12	309.99	314.10	328.26	310.84	321.32	321.32	321.32	321.32	321.32	321.32	321.32
0.08	310.51	309.47	312.69	315.90	307.82	324.36	324.36	324.36	324.36	324.36	324.36	324.36
0.10	310.16	309.30	311.71	310.15	306.31	327.06	327.06	327.06	327.06	327.06	327.06	327.06
0.12	309.93	309.20	311.12	309.35	305.67	328.26	328.26	328.26	328.26	328.26	328.26	328.26
0.14	309.74	309.12	310.76	309.22	305.35	323.67	323.67	323.67	323.67	323.67	323.67	323.67
0.16	309.60	309.06	310.51	309.17	305.15	315.90	315.90	315.90	315.90	315.90	315.90	315.90
0.18	309.48	309.00	310.32	309.13	305.00	311.75	311.75	311.75	311.75	311.75	311.75	311.75
0.20	309.38	308.95	310.17	309.10	304.88	310.15	310.15	310.15	310.15	310.15	310.15	310.15
0.22	309.30	308.90	310.04	309.06	304.78	309.57	309.57	309.57	309.57	309.57	309.57	309.57
0.24	309.22	308.85	309.93	309.03	304.69	309.35	309.35	309.35	309.35	309.35	309.35	309.35
0.26	309.16	308.82	309.83	309.00	304.61	309.26	309.26	309.26	309.26	309.26	309.26	309.26
0.28	309.10	308.78	309.75	308.98	304.55	309.22	309.22	309.22	309.22	309.22	309.22	309.22
0.30	309.05	308.75	309.67	308.95	304.48	309.19	309.19	309.19	309.19	309.19	309.19	309.19

temperatura máxima. Por esta razón elegimos como óptima la opción del reactor de 40 tubos con una longitud de 3.48 m y T_{max} de 315 K.

Ahora comparamos esta alternativa con la de 20 tubos. El reactor de 4.15 m tiene un incremento de temperatura muy marcado, razón por la cual queda descartado. El reactor de 6.96 m tiene un incremento de temperatura moderado, sin embargo, la temperatura máxima para este reactor es ligeramente mayor al seleccionado anteriormente con 40 tubos y mucho más largo, por lo que sigue siendo mejor la opción elegida de 40 tubos.

Por último, tenemos dos reactores de 10 tubos, cuya única ventaja es la cantidad de tubos de la que están constituidos. Ambos aumentan su temperatura aproximadamente en 10 K; la longitud es dos veces mayor que la del reactor sugerido de 40 tubos, y para el reactor de 7.20 m de longitud, cuya temperatura máxima es ligeramente menor a la del reactor sugerido, presenta un valor del volumen de catalizador de más del doble. Por lo tanto, seguimos recomendando la opción del reactor de 40 tubos debido a estas desventajas.

REACTOR DE LECHO FIJO	
Número de tubos:	40
Volumen de catalizador:	429.88 kg
Capacidad total:	188 ton/año
Dimensiones:	
longitud:	3.58 m
diámetro total:	25" (0.635 m) aprox.
diámetro/tubo:	2 3/4" (0.627 m) cad. 40
Condiciones de operación:	
T_{ini}	= 300 K (35 °C)
T_{max}	= 315.1 K (42.1 °C)
ΔP_{tot}	= 0.14 psig
NRe	= 0.98
$LHSV$	= 7.58 hr ⁻¹

TABLA 9. Características del reactor de lecho fijo.

V.2 RESULTADOS Y ANALISIS DE RESULTADOS PARA EL REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO

Una vez definido el reactor de *lecho fijo*, se tomó el valor del volumen de catalizador y la temperatura inicial (429.80 Kg de catalizador y una temperatura de 308 K = 35°C), simulando los posibles reactores de *lecho fluidizado* que se pudieron obtener con estos valores, utilizando el modelo propuesto en el capítulo IV.4 (se utilizó el programa "fluid.prg" elaborado en Dbase que se lista en el apéndice D). Los resultados se muestran en la tabla 10 .

En la misma forma en la que se analizaron los resultados para el reactor de lecho fijo, así también se consideran ciertos límites para el reactor de lecho fluidizado, los que se explican a continuación:

- La caída de presión máxima permitida es de 10 psig, aunque en el arranque del reactor este valor podría ser mayor al llegar a alcanzar el punto de fluidización.
- La longitud máxima será de 10 m por las razones ya explicadas para el reactor de lecho fijo, por lo tanto, los reactores que rebasen este valor no serán tomados en cuenta.
- La tabla 10 muestra la simulación de un reactor desde uno, hasta cuarenta tubos. En un reactor de lecho fluidizado se recomienda una relación $d_p/D < 1/100$ debido a que la presencia de la pared cerca de la partícula afecta el valor de la velocidad terminal. Por lo tanto, incrementar el número de tubos del reactor implica aumentar la relación d_p/D , razón por la cual se proponen reactores no más allá de cuarenta tubos. El diámetro de cada tubo no podrá ser menor a 3" porque sobrepasaría el valor recomendado :

$$\text{Para } D_1 = 3" = 0.0762 \text{ m} \quad d_p = 0.00042/0.0762 = 0.006 < 1/100 \text{ cumple}$$

$$\text{Para } D_2 = 2 \frac{1}{2}" = 0.0635 \text{ m} \quad d_p = 0.00042/0.0635 = 0.0103 > 1/100 \text{ no cumple}$$

-También se han eliminado aquellos reactores que no alcanzaron una conversión al 90% de iso-buteno; misma condición considerada para el reactor de lecho fijo.

Para elegir el reactor más adecuado de la tabla 10, debemos dirigir nuestra atención básicamente a la longitud del reactor, a la caída de presión a la velocidad de mínima fluidización y al número de tubos.

La caída de presión en el punto de operación que se ha seleccionado para cada reactor es similar en todos los reactores, por lo que no es un punto de análisis.

Podemos percibir que el reactor con mayores puntos a favor es el de 20 tubos con un diámetro de tubo de 4". Presenta la menor longitud (6.22 m) y la menor caída de presión a la V_{mf} (12.14 psig). El punto en contra que se puede argumentar para este reactor es la cantidad de tubos que lo constituyen. Sin embargo, podríamos inclinarnos por el reactor de 6.87m, cuestión que puede parecer atractiva por el hecho de que está constituido por un sólo tubo y su longitud es sólo un poco mayor al reactor de 20 tubos. El inconveniente es que, además del valor de longitud tan grande, se requerirían varias boquillas de alimentación o un distribuidor para lograr la fluidización, ya que el diámetro del reactor es de 18" (0.43 m). El diseño de este aditamento debe ser muy cuidadoso pues hay que considerar que existe una caída de presión a través del mismo que puede llegar a ser significativa, puede provocar efectos de retro-mezclado que afectan el comportamiento del reactor y que llegan a disminuir su eficiencia, debe estar diseñado estructuralmente para que soporte el peso del catalizador en el momento de un paro y por lo tanto, hay un incremento en el costo del equipo. Así también, puede resultar un reactor con un comportamiento no totalmente isotérmico, fenómeno que se presenta conforme aumentamos el diámetro del tubo.

Por todas las razones expuestas con anterioridad que soportan nuestra recomendación, sostenemos que la mejor opción para el reactor de lecho fluidizado corresponde a un reactor de 6.22m de longitud con 20 tubos y 4" de diámetro para cada tubo.

El comportamiento de este reactor a lo largo de los diferentes niveles de expansión se puede observar en las figs. 9 y 10. La fig.9 muestra la

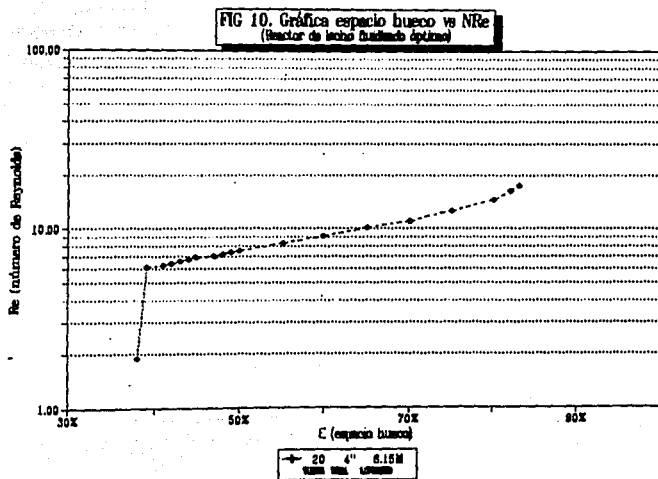
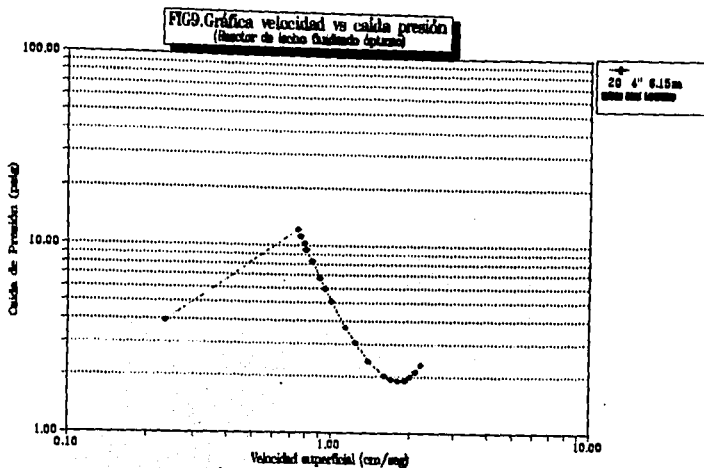
TABLA 10. Reactores de lecho fluidizado obtenidos.

NUM. TUBOS	PROD./TUBO (TON/AÑO)	VOL.CAT. POR TUBO (KG)	DIAM. NOM. (D _v)	DIAM. INTERIOR (M)	LONGITUD L _e (M)	LONGITUD @ XB=0.9 (M)	RELACION VELOC. U _v	ESPACIO HUSCO	DP TOTAL (PSIG)	DP @ V _{mf} (PSIG)	NRe TERMINAL	LHSV (HR ⁻¹)
1	100.0	429.80	18"	0.4287	6.87	6.45	0.30	0.44	9.57	13.13	6.72	3.28
2	50.0	214.90	12"	0.3048	7.06	6.45	0.30	0.44	9.83	13.49	6.72	3.16
4	25.0	107.45	8"	0.2027	8.20	7.20	0.32	0.47	9.61	15.18	7.04	3.04
8	12.5	53.77	6"	0.1282	10.48	8.20	0.35	0.50	9.41	17.97	7.52	3.01
8	12.5	53.77	5"	0.1541	7.06	6.45	0.30	0.44	9.83	13.50	6.72	3.09
10	10.0	42.98	5"	0.1282	7.88	6.75	0.31	0.45	9.74	14.37	6.88	3.29
20	5.0	21.49	4"	0.1023	6.22	6.15	0.29	0.43	9.52	12.14	6.56	3.19
40	2.5	10.75		0.0627	9.82	7.85	0.34	0.49	9.38	18.86	7.36	2.74

 El valor sobrepasa el límite permitido

 El valor representa una desventaja

 Reactor seleccionado como el más óptimo



REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO	
Número de tubos:	20
Volumen de catalizador:	429.00 kg
Capacidad total:	100 ton/año
Dimensiones:	
longitud:	6.2 m
diámetro total:	34" (0.90 m)aprox.
diámetro/tubo:	4" ced. 40
Condiciones de operación:	
Espacio hueco:	0.43
T =	300 K (35 °C) isotérmico
ΔP_{tot}	= 9.52 psig
NRe	= 6.56
LHSV	= 3.19 hr ⁻¹

TABLA 11. Características del reactor de lecho fluidizado.

variación de la caída de presión al ir incrementándose la velocidad del fluido, misma que podemos comparar con la gráfica de la fig.3 (sec. III.2), reportada en la literatura. La gráfica obtenida se asemeja a la curva c) que corresponde a un lecho fluidizado con "canalizaciones". Este comportamiento se puede explicar debido a que el Reynolds del reactor cae en la región de flujo laminar lo cual puede ocasionar la formación de canales.

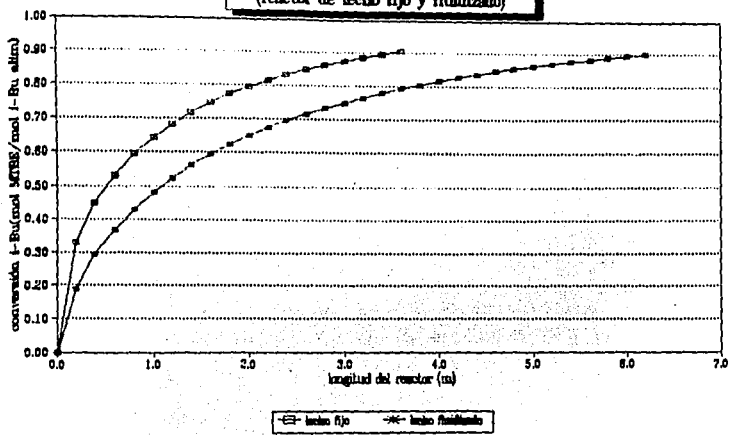
La gráfica de la fig.10 es comparable con la fig.5 (sec.II.2) en donde podemos observar una sección casi vertical que representa la región antes de empezar la fluidización; el punto de mínima fluidización que corresponde a un valor de espacio hueco de 38% y, posteriormente, un marcado incremento de la expansión conforme se incrementa el Reynolds.

V.3 ANALISIS DE RESULTADOS PARA AMBOS

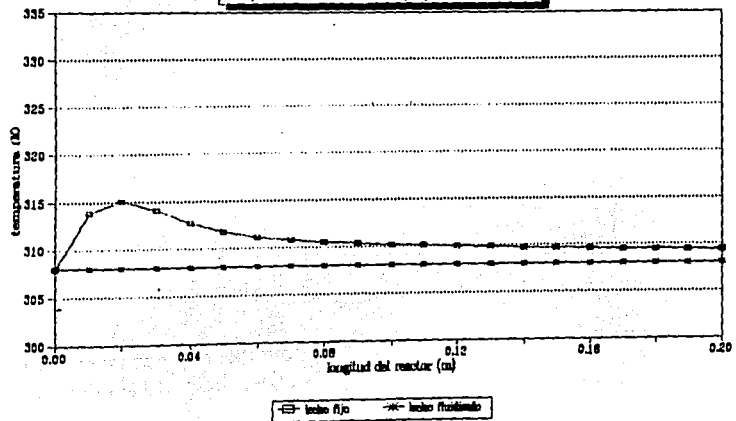
REACTORES

La tabla 12 y las figuras 11 y 12 muestran en forma comparativa y cuantitativa algunos de los valores importantes de cada reactor.

**FIG 11. Gráfica: longitud vs conversión
(reactor de lecho fijo y fluidizado)**



**FIG 12. Gráfica: longitud vs temperatura
(reactores de lecho fijo y fluidizado)**



Como podemos ver, el reactor de lecho fijo es más pequeño. La variación, tanto del espacio requerido como del costo fijo del reactor por la diferencia en dimensiones y número de tubos entre un reactor y otro, se incrementará significativamente al escalar el reactor a dimensiones industriales.

La caída de presión, como se mencionó en capítulos anteriores, es mucho mayor en el reactor de lecho fluidizado, tal como lo muestran los resultados. A pesar de eso, podemos ver que en el reactor de lecho fluidizado se logró encontrar una configuración en donde el valor de la caída de presión en el punto de operación está dentro de un rango aceptable aunque se sobrepasa en el arranque del reactor para iniciar la fluidización. Esto no es una limitante puesto que un equipo de bombeo convencional puede superar este valor para lograr la fluidización requerida. Por supuesto, la caída de presión para el reactor de lecho fijo es insignificante.

	REACTOR DE LECHO FIJO	REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO
Capacidad total (ton/año):	100	100
Volúmen de catalizador (Kg):	429.88	429.88
Número de tubos:	40	20
Dimensiones:		
longitud:	3.58m	6.2m
diámetro total:	0.65m	0.98m
diámetro/tubo :	2 1/2"	4"
Condiciones de operación:		
T _{inicial} :	300K	300K
T _{max} :	315K	300K
ΔP_{tot} (psig):	0.14	9.5

TABLA 12. Comparación entre el reactor de lecho fijo y el reactor de lecho fluidizado.

El lecho fluidizado tiene la enorme ventaja de presentar un comportamiento isotérmico. En el lecho fijo es importante tener un control cuidadoso de éste parámetro, a pesar de que el incremento de la temperatura es de tan sólo 7 K.

VI. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Probablemente uno de los aspectos más importantes para decidir entre un reactor de lecho fijo o uno fluidizado, bajo las condiciones de reacción estudiadas en la presente tesis, es el de la temperatura. La reacción exotérmica para la obtención del MTBE llega a dispararse con facilidad, según se vió en las simulaciones. El control de la temperatura debe ser muy estricto, ya que de otra forma, se corre un gran riesgo. Este problema se evita en el reactor de lecho fluidizado, sobre todo porque el reactor resultante tiene gran cantidad de tubos de diámetros pequeños. Si en pruebas experimentales a nivel planta piloto, resultara algún incremento de temperatura en los tubos, podría considerarse un sistema de eliminación de calor en la pared de los tubos, haciendo pasar un fluido a menor temperatura, logrando así un reactor con un comportamiento altamente isotérmico.

El argumento anterior justifica el gasto fijo adicional que se tendría que hacer para adquirir un reactor del lecho fluidizado en lugar de uno de lecho fijo, debido a que es de mayores dimensiones. Asimismo, este gasto podría estar recompensado con el de un sistema de control de temperatura automático que se necesitaría hacer para el reactor de lecho fijo.

Adicionalmente, se tienen las demás ventajas que presenta el lecho fluidizado, como la operación del reactor y en forma simultánea la regeneración de la resina en forma continua, con lo que se evitan paros o disminución en la eficiencia del reactor por envenenamiento paulatino del catalizador. La eliminación de paros también disminuye los costos de operación y de mano de obra. Hay que recordar sin embargo, que estos puntos no son tan relevantes puesto que el tiempo de vida del catalizador es de dos años.

La caída de presión no resulta un punto de objeción para elegir este tipo de reactor pues está dentro de los rangos definidos.

Por todos estos puntos se puede concluir que el reactor de lecho fluidizado es una opción más atractiva que la del lecho fijo, para la obtención de MTBE.

Trabajos posteriores al presente, deberán ocuparse de llevar a cabo el escalamiento del reactor debido a que el reactor recomendado fue desarrollado teóricamente a nivel planta piloto. Se recomienda sin embargo, antes de proseguir, verificar experimentalmente las constantes de reacción que se reportan en la referencia [1], pues uno de los datos de "R" (constante de reacción del modelo heterogéneo reducido de Gicquel & Tork), se dispara marcadamente ocasionando la alteración de los valores en la ecuación de Arrhenius. El valor de "R" a $T=343\text{ K}$ fue descartado para los cálculos realizados en esta tesis.

También es conveniente encontrar un método de resolución para la ecuación (IV.10), pues esta ecuación ayudará a obtener valores más reales o más exactos al considerar el término de dispersión axial.

La modificación que se pudiera dar tanto de los valores reportados en la ref.[1] como de los que se obtengan con la ec.(IV.10), llevarán a la obtención de un reactor con otras dimensiones y otro comportamiento, por lo que podría llegarse a una conclusión distinta.

También se recomienda revisar otro método de obtención de MTBE denominado CDTECH (Catalytic Distillation Technologies), patentado por dos compañías: Chemical Research & Licensing Co. y Lummus Crest, Inc. El método consiste en llevar a cabo simultáneamente en el mismo equipo, la reacción para la obtención del MTBE y la separación del producto por destilación en una torre empacada. La presente tesis no abarca el análisis del método mencionado por la dificultad en la obtención de información suficiente para el desarrollo del trabajo.

VII. BIBLIOGRAFIA

- [1] A. Ali & S. Bhatia. "MTBE formation in catalytic bed reactor-kinetic and modelling study". The Chem. Eng. Journal, 44. 1990.
- [2] Ancillotti F. & Pescarollo E. "Fuel blends create solubility problems". Hydrocarbon Processing. Nov. 1977.
- [3] B.P. Trading Limited "C₄ isomerization". Hydrocarbon Processing. 1980
- [4] Bitar L.S., Hazbun E.A. & Piel W.J. "MTBE production and economics". Hydrocarbon Processing. Oct 1984.
- [5] Chase J.D. & Galvez B.B. "Maximize blend ethers with MTBE and TAME". Hydrocarbon Processing. March 1981.
- [6] Convers A., Tork B., Euzen J.P. & Amigues P. "Use of an expanded resin bed in the MTBE synthesis process" Chemistry and Industry. August 1982.
- [7] Csikos R., Pally I., et al. "Low-lead fuel with MTBE and C₄ alcohols". Hydrocarbon Processing. July 1976.
- [8] Kirk-Othmer. "Enciclopedia de Tecnología Química". Vol. 10. 3ª edición. 1962.
- [9] Finlayson B.A. "Packed bed reactor analysis by orthogonal collocation". Chemical Eng. Science. Vo. 26. 1971.
- [10] Froment G.F. "Fixed bed catalytic reactors". Industrial & Eng. Chemistry. Vol. 59, No. 2. Feb 1967.
- [11] Ganguly U.P. "Direct method for the prediction of expanded bed height in liquid-solid fluidization". The Canadian J. of Ch. Eng. Vol. 58. Oct. 1980.

- [12] Gates B.C. & Johanson L.N. "Langmuir-Hinshelwood kinetics of the dehydration of methanol catalyzed by cation exchange resin" *AICHE Journal*. Vol. 17. No. 4. July 1971.
- [13] Hamdane M., Wilhelm A.M. & Riba J.P. "Modelling of a fluidized bed immobilized enzyme reactor". *The Chemical Eng. Journal* 39. 1988.
- [14] Herwig J., Schieppinghoff B. & Schulwitz S. "New low energy process for MTBE and TAME". *Hydrocarbon Processing*. June 1984.
- [15] Hsiung T. & Thodos G. "Expansion Characteristics of Gas-Fluidized Beds" *The Canadian J. of Ch. Eng.* Vol. 55. April 1977.
- [16] Joshi J.B. "Solid/liquid fluidized beds; some design aspects". *Chem Engineering Research & Design*. Vol. 61. May 1983.
- [17] Lee K.K. & Al-Jarallah A. "MTBE production technologies and Economics" *Chem. Economy and Eng. Review*. Vol. 18, No. 9 Sept. 1986.
- [18] "Methyl tertiary butyl ether process can help separate all C₄ fractions". *Oil & Gas Journal*. Jan 1, 1979.
- [19] Morris E. "Gasoline compositions in no-lead era". *Oil & Gas Journal*. Mar 18, 1985.
- [20] Mudarris G.R. & Pettman M.J. "Now MTBE from butane" *Hydrocarbon Processing*. Oct 1980.
- [21] Paper presented at the API 50th midyear refining meeting. Kansas City. May 13-16, 1985. "Economic rights for MTBE from field butanes" *Oil & Gas Journal*. May 27, 1985.
- [22] Pecci G. & Floris T. "Ether ups antiknock of gasoline". *Hydrocarbon Processing*. Dec 1977.

- [23] Perry's Chemical Engineers' Handbook. McGraw Hill. 5th edition. 1984.
- [24] Pierce V.E. & Logwinuk A.K. "Which route to more octane?". Hydrocarbon Processing. Sept. 1985.
- [25] Reynolds R.W., Smith J.S. & Steinmetz I. "Methyl ether (MTBE) scores well as high-octane gasoline component". The Oil & Gas Journal. June 16, 1975.
- [26] Rohm & Haas Company. "Amberlyst 15, Ion exchange resin for catalyst brochure". 1990.
- [27] Ring T.A., Bowers K.E. & McGovern L.J. "MTBE could compete with alkylate for isobutylene". Oil & Gas Journal. Apr. 30, 1984.
- [28] Smith J.M. "Ingeniería de la cinética química" CECSA. 1986.
- [29] Smith L.A. & Huddleston M.N. "New MTBE design now commercial". Hydrocarbon Processing. March 1982.
- [30] Smith L.A. & Parker K.E. "MTBE aids efficiency of refinery C₄'s". Oil & Gas Journal. Aug. 11, 1980.
- [31] Subramaniam L. & Bhatia S. "Liquid phase synthesis of MTBE catalyzed by ion exchange resin". The Can J. of Chem. Eng. Vol. 65. Aug. 1987.
- [32] Unzelman G.H. "Value of oxygenates in blending, octane improvements for mogas are appraised". Oil & Gas Journal. June 1, 1981.
- [33] Wilhelm R.H. & Kwauk M. "Fluidization of solid particles" Chemical Eng. Progress. Vol. 44 No. 3. March 1948.
- [34] Yepson G.L., Culberson S.F. & Bartholomew K.D. "Refiners mull no-lead options". Oil & Gas Journal. March 18 1985.

- [35] Zill d. "Ecuaciones diferenciales con aplicaciones". Gpo. Editorial Iberoamérica. México D.F. 1986.
- [36] Rainville E. & Bedient P. "Elementary Differential Equations". 6th edition. Mcmillan Publishing Co. N.Y. 1980.
- [37] Cunningham W. "Introduction to non-linear analysis". McGraw Hill. New York. 1958.

APENDICE A

NOMENCLATURA

SIMBOLO	DEFINICION	UNIDAD
a_p	Area superficial de una partícula de catalizador	m^2
A	MeOH	molécula
Al	MeOH adsorbido	molécula
B	Iso-buteno	molécula
C	MTBE	molécula
C_A	Concentración de MeOH	gmol/lit
C_{A0}	Concentración inicial de MeOH	gmol/lit
C_B	Concentración de Iso-buteno	gmol/lit
C_{B0}	Concentración inicial de Iso-buteno	gmol/lit
C_C	Concentración de MTBE	gmol/lit
C_{C0}	Concentración inicial de MTBE	gmol/lit
C_l	Concentración de sitios activos libres	gmol/lit
C_m	Concentración total de sitios reactivos en el catalizador	gmol/lit
Cl	MTBE adsorbido	molécula
C_p	Capacidad calorífica	J/gmolK
D	Parámetro definido en la sec. IV.1	lit/gcat h
ΔH	Calor de reacción	J/Kg
ΔP	Caída de presión	N/m ² ó psig
$(De)_L$	Difusividad efectiva axial	m ² /seg
$(De)_R$	Difusividad efectiva radial	m ² /seg
D_p	Diámetro promedio de partícula de catalizador	m
D_t	Diámetro del reactor	m
E	Parámetro definido en la secc. IV.1	adimensional
E_a	Energía de activación	J/gmol
f_m	Factor de fricción modificado	adimensional
F_A	Flujo de alimentación de MeOH	gmol/h
F_B	Flujo de alimentación de Iso-buteno	gmol/h
F_C	Flujo de alimentación de MTBE	gmol/h
F_T	Flujo de alimentación total al reactor	gmol/h
g	Aceleración de la gravedad	m/seg ²

ESTA TESIS NO DEBE SALIR DE LA BIBLIOTECA

g_c	Constante adimensional	$kg\ m/N\ seg^2$
G	Flujo másico superficial	$gmol/m^2\ seg$
k	Constante de rapidez de reacción	$lit^2/gmol\ cat\ h$
k'	Constante de rapidez de reacción inversa	$lit^2/gmol\ cat\ h$
k_3	Cte. de rapidez de reacción modelo Gickel & Turk	$lit/gcat\ h$
k_4	Cte. de rapidez de reacción modelo Gickel & Turk	$lit/gcat\ h$
$(ke)_L$	Conductividad efectiva axial	$J/(h\ m^2)(K/m)$
$(ke)_R$	Conductividad efectiva radial	$J/(h\ m^2)(K/m)$
K	Constante de equilibrio	adimensional
K_1	Constante de equilibrio definida como $C_{A1}/C_A C_1$	adimensional
K_2	Constante de equilibrio definida como $C_{C1}/C_A C_B$	adimensional
K_3	Constante de equilibrio definida como $C_C C_1/C_{C1}$	adimensional
l	Sitio activo	
L	Longitud del reactor	m
LHSV	Velocidad espacial líquida horaria	hr^{-1}
L_e	Longitud del lecho expandido	m
M	Parámetro definido en la secc. IV.1	$gmol/gcat\ h$
n	Exponente en la ec. (III.10)	adimensional
N	Parámetro definido en la secc. IV.1	$gmol\ de\ A/gmol\ de\ B$
PM	Peso molecular	$g/gmol$
Q	Gasto	lit/h
Q_i	Gasto en la alimentación	lit/h
r	Rapidez de reacción	$gmol/gcat\ h$
r_1	Rapidez de reacción cuando controla la adsorción	$gmol/gcat\ h$
r_2	Rapidez de reacción cuando controla la reacción	$gmol/gcat\ h$
r_3	Rapidez de reacción cuando controla la desorción	$gmol/gcat\ h$
r_0	Rapidez de reacción inicial	$gmol/gcat\ h$
r_g	Rapidez de reacción global	$gmol/gcat\ h$
R	$1/K_1 K_3$	adimensional
R_A	Relación r_g/r_0	adimensional
R_g	Constante de los gases en la ecuación de Arrhenius	$J/molK$
Re ó NRe	Número de Reynolds	adimensional
Re_{mf}	Reynolds a la velocidad de mínima fluidización	adimensional
Re_t	Reynolds a la velocidad terminal	adimensional
S	Area transversa del reactor	m^2
t	Tiempo	seg

ESTA TESIS NO DEBE SALIR DE LA BIBLIOTECA

ρ_c	Constante adimensional	kg m/N seg ²
G	Flujo másico superficial	gmol/m ² seg
k	Constante de rapidez de reacción	l ² /gmol geat h
k'	Constante de rapidez de reacción inversa	l ² /gmol geat h
k ₃	Cte. de rapidez de reacción modelo Gickel & Turk	l/geat h
k ₄	Cte. de rapidez de reacción modelo Gickel & Turk	l/geat h
(ke) _L	Conductividad efectiva axial	J/(h m ²)(K/m)
(ke) _R	Conductividad efectiva radial	J/(h m ²)(K/m)
K	Constante de equilibrio	adimensional
K ₁	Constante de equilibrio definida como C _{A1} /C _A C ₁	adimensional
K ₂	Constante de equilibrio definida como C _{C1} /C _A C _B	adimensional
K ₃	Constante de equilibrio definida como C _C C ₁ /C _{C1}	adimensional
l	Sitio activo	
L	Longitud del reactor	m
LHSV	Velocidad espacial líquida horaria	hr ⁻¹
Le	Longitud del lecho expandido	m
M	Parámetro definido en la secc. IV.1	gmol/geat h
n	Exponente en la ec. (III.10)	adimensional
N	Parámetro definido en la secc. IV.1	gmol de A/gmol de B
PM	Peso molecular	g/gmol
Q	Gasto	l/h
Q _i	Gasto en la alimentación	l/h
r	Rapidez de reacción	gmol/geat h
r ₁	Rapidez de reacción cuando controla la adsorción	gmol/geat h
r ₂	Rapidez de reacción cuando controla la reacción	gmol/geat h
r ₃	Rapidez de reacción cuando controla la desorción	gmol/geat h
r ₀	Rapidez de reacción inicial	gmol/geat h
r _g	Rapidez de reacción global	gmol/geat h
R	1/K ₁ K ₃	adimensional
R _A	Relación r _g /r ₀	adimensional
R _g	Constante de los gases en la ecuación de Arrhenius	J/molK
Re ó NRe	Número de Reynolds	adimensional
Re _{mf}	Reynolds a la velocidad de mínima fluidización	adimensional
Re _t	Reynolds a la velocidad terminal	adimensional
S	Area transversa del reactor	m ²
t	Tiempo	seg

T	Temperatura	K
T_0	Temperatura inicial	K
T^*	Parámetro definido como T/T_0	adimensional
T_w	Temperatura de la pared del reactor	K
u	Flujo superficial en la dirección axial	m/seg ó m/h
U	Coefficiente global de transferencia de calor	J/m^2hK
U_v	Velocidad relativa o relación de velocidades	adimensional
V_p	Volumen de una partícula de catalizador	m^3
V	Volumen del reactor	lt
V_f	Velocidad terminal	m/seg
V_{mf}	Velocidad de mínima fluidización	m/seg
V_t	velocidad de fluidización	m/seg
W	Masa del catalizador	Kg ó g
X	Conversión	gmol reaccionado/gmol alimentado
z	Distancia a lo largo del reactor	m
z^*	Parámetro definido como z/L	adimensional
α	Parámetro definido en la ec.(III.7)	adimensional
β	Número de Dahmkoler para transferencia de masa	adimensional
β'	Número de Dahmkoler para transferencia de calor	adimensional
c	Fracción hueca del reactor	adimensional
c_{mf}	Fracción hueca del reactor a la mínima fluidización	adimensional
Φ	Factor de forma del catalizador	adimensional
μ	Viscosidad	$N\text{ seg}/m^2$
ρ	Densidad del fluido	Kg/m^3 ó g/cm_3
ρ_s	Densidad del sólido	Kg/m^3 ó g/cm_3

APENDICE B

METODO DE RUNGE-KUTTA PARA LA RESOLUCION DE UN SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES

Considerando el sistema conformado por las ecuaciones (IV.8) y (IV.9) a resolver, podemos expresar el método de Runge-Kutta como sigue:

$$\frac{dX}{dz} = f_1(X, T, z)$$

$$\frac{dT}{dz} = f_2(X, T, z)$$

$$K_{11} = \Delta z \cdot f_1(X_i, T_i, z_i)$$

$$K_{12} = \Delta z \cdot f_2(X_i, T_i, z_i)$$

$$K_{21} = \Delta z \cdot f_1\left(X_i + \frac{K_{11}}{2}, T_i + \frac{K_{12}}{2}, z_i + \frac{\Delta z}{2}\right)$$

$$K_{22} = \Delta z \cdot f_2\left(X_i + \frac{K_{11}}{2}, T_i + \frac{K_{12}}{2}, z_i + \frac{\Delta z}{2}\right)$$

$$K_{31} = \Delta z \cdot f_1\left(X_i + \frac{K_{21}}{2}, T_i + \frac{K_{22}}{2}, z_i + \frac{\Delta z}{2}\right)$$

$$K_{32} = \Delta z \cdot f_2\left(X_i + \frac{K_{21}}{2}, T_i + \frac{K_{22}}{2}, z_i + \frac{\Delta z}{2}\right)$$

$$K_{41} = \Delta z \cdot f_1(X_i + K_{31}, T_i + K_{32}, z_i + \Delta z)$$

$$K_{42} = \Delta z \cdot f_2(X_i + K_{31}, T_i + K_{32}, z_i + \Delta z)$$

$$X_{i+1} = X_i + \frac{1}{6} (K_{11} + 2CK_{21} + K_{31} + K_{41})$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{1}{6} (K_{12} + 2CK_{22} + K_{32} + K_{42})$$

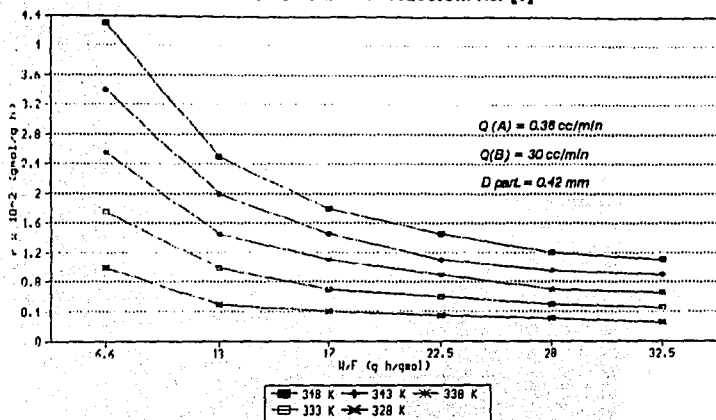
$$z_{i+1} = z_i + \Delta z$$

APENDICE C

COMPROBACION DE LA VALIDEZ DE LA ECUACION DE RAPIDEZ DE REACCION

Para llevar a cabo la comprobación de la validez de la Ec.(IV.7), que corresponde a la ecuación de velocidad de reacción para la obtención del MTBE, a continuación se muestran los valores encontrados experimentalmente reportados en la literatura, para su posterior comparación con los valores obtenidos con la ecuación antes mencionada.

**Fig.14.1 Valores experimentales
de velocidad de reacción. Ref [1]**



A continuación se muestra el cálculo de los valores con la ecuación (IV.7) para la obtención de la gráfica teórica:

$$r = \frac{X_R^2 - X_B(N + 1 + \frac{D_p}{M}) + N}{\frac{N}{M} + X_B(\frac{E-1}{M})} \quad \dots \text{Ec. (IV.7)}$$

$$\begin{aligned} \text{SI: } M &= k_2 C_{B0} \\ N &= C_{A0} / C_{B0} \\ D &= k_4 R \\ E &= R \end{aligned}$$

$$C_1 = N + \frac{D}{M} + 1) \quad C_2 = \frac{CE - 1}{M}$$

$$r = \frac{X_B^2 - C_1 X_B + N}{\frac{N}{M} + C_2 X_B} \quad \dots \text{Ec. (C.1)}$$

Para mediciones efectuadas en un reactor de flujo tubular empacado con granulos cataliticos, el balance de masa es, suponiendo un flujo tapon,

$$r_R dW = F dX_B$$

donde: r_R = rapidez total de reacción por unidad de masa de catalizador ($\text{gmol/g}_{\text{cat}} \text{ h}$)

W = masa de catalizador (g_{cat})

F = velocidad de alimentación de i-buteno (gmol/h)

X_B = conversión de i-buteno

Integrando la ecuación anterior, obtenemos:

$$\frac{W}{F} = \int \frac{dX_B}{r_R} \quad \dots \text{Ec. (C.2)}$$

Sustituyendo la Ec. (C.1) en la Ec. (C.2):

$$\frac{W}{F} = \int \frac{dX_B}{\frac{X_B^2 - C_1 X_B + N}{\frac{N}{M} + C_2 X_B}}$$

$$\frac{W}{F} = \int \frac{(\frac{N}{M} + C_2 X_B) dX_B}{X_B^2 - C_1 X_B + N} \quad \dots \text{Ec. (C.3)}$$

$$d(W/F) = \frac{(C_M^N + C_2 X_B) dX_B}{X_B^2 - C_1 X_B + N}$$

$$\frac{dX_B}{d(W/F)} = \frac{X_B^2 - C_1 X_B + N}{(C_M^N + C_2 X_B)}$$

Para resolver la ecuación anterior, se utiliza el método de Runge-Kutta como se muestra a continuación:

Para X_i , $(W/F)_i$:

$$k_1 = \Delta(W/F) f(C, X_i)$$

$$k_2 = \Delta(W/F) f(C, X_i + \frac{k_1}{2})$$

$$k_3 = \Delta(W/F) f(C, X_i + \frac{k_2}{2})$$

$$k_4 = \Delta(W/F) f(C, X_i + k_3)$$

$$X_{i+1} = X_i + \frac{1}{5}(k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4)$$

$$(W/F)_{i+1} = (W/F)_i + \Delta(W/F)$$

$$f(C, X_i) = \frac{X_B^2 - C_1 X_B + N}{C_M^N + C_2 X_B}$$

Los valores iniciales son:

$$X_0 = 0, \quad (W/F)_0 = 0 \quad \text{y} \quad \Delta(W/F) = 5$$

$$C_{A0} = 24.68 \text{ gmol/l}$$

$$C_{B0} = 0.0446 \text{ gmol/l}$$

Los valores obtenidos resolviendo la integral con el método anteriormente descrito, son:

T = 328 K

		(W/H)	X	r
M	0.0082	5	0.0458	0.0082
N	553.3800	10	0.0824	0.0074
D	0.0039	15	0.1174	0.0084
E	1.073.8900	20	0.1484	0.0081
CI	554.7800	25	0.1788	0.0057
C2	115.792.4700	30	0.2081	0.0053
		35	0.2318	0.0048

T = 333 K

		(W/H)	X	r
M	0.0150	5	0.0687	0.0128
N	553.3800	10	0.1237	0.0109
D	0.0101	15	0.1788	0.0088
E	859.5811	20	0.2243	0.0088
CI	555.0380	25	0.2652	0.0078
C2	57.237.4000	30	0.3024	0.0071
		35	0.3385	0.0065

T = 338 K

		(W/H)	X	r
M	0.0241	5	0.1068	0.0180
N	553.3800	10	0.1828	0.0157
D	0.0257	15	0.2648	0.0133
E	882.5480	20	0.3284	0.0115
CI	555.4200	25	0.3883	0.0101
C2	28.730.7400	30	0.4278	0.0080
		35	0.4701	0.0080

T = 343 K

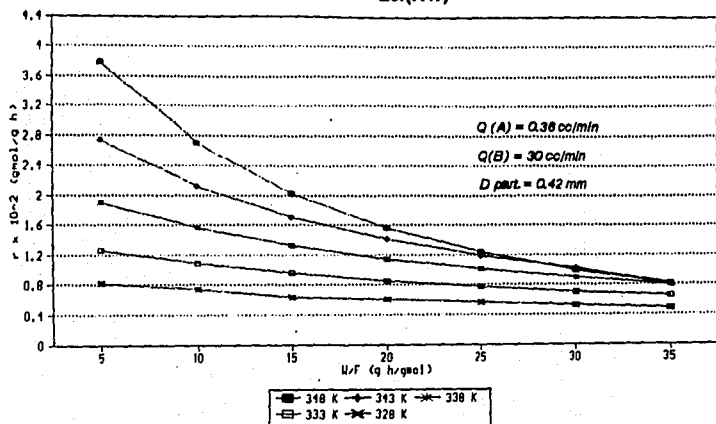
		(W/H)	X	r
M	0.0381	5	0.1610	0.0274
N	553.3800	10	0.2815	0.0212
D	0.0834	15	0.3788	0.0171
E	581.5128	20	0.4547	0.0142
CI	556.0250	25	0.5187	0.0118
C2	14.723.2151	30	0.5748	0.0102
		35	0.6221	0.0081

T = 348 K

		(W/H)	X	r
M	0.0594	5	0.2381	0.0379
N	553.3800	10	0.3987	0.0270
D	0.1524	15	0.5125	0.0202
E	458.0220	20	0.6016	0.0157
CI	5.588.9257	25	0.6714	0.0124
C2	7.683.8700	30	0.7373	0.0100
		35	0.7722	0.0081

Graficando los valores anteriores para cada temperatura, obtenemos curvas similares a las experimentales mostradas en la Fig.A1, con lo cual demostramos la validez aproximada de la ecuación IV.7

Fig. 14.2 Valores calculados con la Ec.(IV.7)



APENDICE D

PROGRAMAS PARA LA SIMULACION DE LOS REACTORES

Los siguientes programas fueron desarrollados para facilitar la simulación de los reactores de lecho fijo no adiabático, no isotérmico y de lecho fluidizado, para la obtención de MTBE. Dichos programas en DBase, crean bases de datos en las cuales se almacenan los valores del reactor obtenido para posteriormente poder utilizar dicha información para la elaboración de las gráficas correspondientes e interpretar los valores obtenidos.

PROGRAMAS PARA LA SIMULACION DEL REACTOR DE LECHO FIJO

```
****PROGRAMA RFIJO.PRG
****PROGRAMA P/ALMACENAR LOS DATOS NECESARIOS PARA EL DISEÑO DEL
REACTOR DE LECHO FIJO
***DEFINICION DE VARIABLES
***A=MEOH; B=i-BUTILENO; C=MTBE
***OPCI=(Y) INDICA QUE DESEA MODIFICAR COND.DE REAC.
***CONV=% DE CONVERSION
***REL=RELACION ISO-B/MEOH
SET TALK OFF
SET SAFETY OFF
SET CONSOLE OFF
SET BELL OFF
SET COLOR TO W/B,W+/B,N
PUBLIC FA,FB,FT,DA,DB,DCAT,QA,QB,QT,CA,CB,CT,YA,YB,PMA,PMB
PUBLIC PMPROM,CPROM,DPROM,MPROM,DT,DP,TMAXI,CAP
PUBLIC MA,MB,ALFA,US,U,L,BETA,BETAP,EPSILON
PUBLIC RE,K301,K302,K401,K402,RC01,RC02
PUBLIC E3,E4,ER,T0,T,TW,M,D,E,N,DXDZ,DTDZ
PUBLIC DHNEG,BB1,BB2,EBB,DCAT,MM,DD1,DD2,DDE,TITULO
PUBLIC X,Z,R,R0,GT,GB,BETAL,BETAPL,ALFAL,OPCK,ABIERTO
STORE 0 TO FA,FB,FA,FT,DA,DB,QA,QB,QT,CA,CB,CT
STORE 0 TO YA,YB,PMPROM,CPROM,DPROM,MPROM,CONV
STORE 0 TO DT
STORE '' TO OPC1,OPCK
STORE .9 TO CONV
DEFINE WINDOW VENT1 FROM 7,21 TO 17,58
DEFINE WINDOW VENT2 FROM 5,21 TO 20,58

**PESOS MOLECULARES
PMA=32.04
PMB=56.1
PMC=88
```

****DENSIDADES (g/cm³)**

DA=0.792

DB=0.0025

DCAT=0.770

****VISCOSIDADES (N seg/m²)**

MA=0.39E-3

MB=900E-7

****CAPACIDADES CALORIFICAS(J/gmol K)**

CPA=48.16

CPB=95.89

****ENERGIA DE ACTIVACION (KJ/gmol)**

EA=76.7

****CALOR DE REACCION (KJ/gmol)**

DHNEG=37

*******CONDICIONES DE REACCION*******

STORE 1 TO P

STORE 328 TO T0

STORE 328 TO TW

STORE 0.0 TO DP

STORE 100 TO CAP

STORE 4 TO REL

CLEAR

DO PANTT

@2,20 SAY 'CONDICIONES DE REACCION'

ACTIVATE WINDOW VENT1

SET COLOR TO W+/N,W+/N,N

@0,1 SAY 'INTRODUZCA LAS CONDICIONES DESEFADAS'

@2,1 SAY 'T inicial.....' GET TO PICTURE '###.#'

@2,COL() SAY '(K)'

@3,1 SAY 'T pared.....' GET TW PICTURE '###.#'

@3,COL() SAY '(K)'

@4,1 SAY 'Diam. Particula...' GET DP PICTURE '#.###'

@4,COL() SAY '(mm)'

@5,1 SAY 'Capacidad de'

@6,1 SAY 'Produccion MTBE...' GET CAP PICTURE '###,###.###'

@6,COL() SAY '(TON/Año)'

@7,1 SAY 'Conversion.....' GET CONV PICTURE '###'

@7,COL() SAY '%'

@8,1 SAY 'Rel. Peso MeOH/i-Bu' GET REL PICTURE '###.###'

@8,COL() SAY '/1'

READ SAVE

****DIAMETRO DE PARTICULA (m)**

DP=DP*10E-4

****FLUJOS (gmol/h)**

FC=CAP*1000000/(PMIC*365*24)

FB=FC/(CONV/100)

FA=FB*REL.

FT=FA+FB
YA=FA/FT
YB=1-YA

**CAPACIDADES (l/h)
QA=FA*PMA/(DA*10³)
QB=FB*PMB/(DB*10³)
QT=QA+QB

**CONCENTRACIONES (g/mol/l)
CA=FA/QA
CB=FB/QB
CT=CA+CB

**PROMEDIOS
MPROM=PMA*YA+PMB*YB
CPPROM=CPA*YA+CPB*YB
MPROM=MA*YA+MB*YB
DPROM=DA*YA+DB*YB

ACTIVATE WINDOW VENT2

@1,I SAY '**FLUJO DE ALIMENTACION (g/mol/h)**'
@2,I SAY 'FA = '
@2,COL() SAY FA PICTURE '###,###.#'
@3,I SAY 'FB = '
@3,COL() SAY FB PICTURE '###,###.#'
@4,I SAY '*****GASTO INICIAL (l/h)*****'
@5,I SAY 'QA = '
@5,COL() SAY QA PICTURE '###,###.#'
@6,I SAY 'QB = '
@6,COL() SAY QB PICTURE '###,###.#'
@7,I SAY 'QTOT = '
@7,COL() SAY QT PICTURE '###,###.#'
@8,I SAY '**CONCENTRACIONES INIC.(g/mol/l)**'
@9,I SAY 'CA = '
@9,COL() SAY CA PICTURE '###,##'
@10,I SAY 'CB = '
@10,COL() SAY CB PICTURE '###,##'
@11,I SAY '****FRACCIONES MOL INICIALES*****'
@12,I SAY 'YA = '
@12,COL() SAY YA PICTURE '##,####'
@13,I SAY 'YB = '
@13,COL() SAY YB PICTURE '##,####'
WAIT
DEACTIVATE WINDOW VENT2
DEACTIVATE WINDOW VENTI
DO UNIDIM

```

****PROGRAMA UNIDIM.PRG
*****DISEÑO DEL REACTOR DE L.FIJO POR MEDIO DEL MODELO UNIDIMENSIONAL
***DEFINICION DE VARIABLES
SET CONSOLE ON
STORE 0 TO
G,GT,GB,RE,U, EPSILON,ALFA,BETA,BETAP,US,DT,E3,E4,ER,E,DXDZ,DTDZ,###
STORE 0 TO K301,K302,K401,K402,RC01,RC02,MM,DD1,DD2,DDE,N,M,D,BB1,BB2,BBB
STORE 0 TO COL,R0
STORE 1 TO L,,X,DCAT
T=TO
STORE 2.49 TO K301
STORE 13 TO K302
STORE 5.23 TO K401
STORE 28 TO K402
STORE 3.905 TO RC01
STORE -4 TO RC02
STORE -10635.2 TO E3
STORE -25799 TO E4
STORE 4863.3 TO ER
CLEAR
DO PANTT
@2,20 SAY 'MODELO UNIDIMENSIONAL'
TEXT

```

MODELO UNIDIMENSIONAL

$$\begin{aligned}
 dx &= \text{beta} \cdot R \\
 dL^* &= \text{beta} \cdot R \cdot \frac{4UL \cdot (T^* - Tw^*)}{dt^*Us \cdot Dg \cdot Cp \cdot \text{epsilon}}
 \end{aligned}$$

ECUACION DE VELOCIDAD DE REACCION (MODELO HETEROGENEO)

$$r = \frac{k3 \cdot CA \cdot CB - k4 \cdot CC \cdot RC}{CA + RC \cdot CC}$$

```

ENDTEXT
@14.5 TO 20,70
SET CONSOLE OFF
@23,10 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAJT
@23,0 CLEAR TO 23,70
@15,6 CLEAR TO 19,69
@16,7 SAY 'Diametro del Reactor (m):' GET DT PICTURE '##.###'
READ
@17,7 SAY 'Espacio Hueco _ : ' GET EPSILON PICTURE '###'
READ
**GASTO (gmol/m^2seg)**
GT = FT/(PI()*(DT/2)^2)*3600

```

GB=FB/(PI()*((DT/2)^2)*3600)
US=QB/(3600*1000*PI()*((DT/2)^2))
G=GB

**Reynolds

RE=(DP*GT*PMPROM/1000)/MPROM

@18,7 SAY 'Reynolds = '
@18,COL() SAY LTRIM(STR(RE,6,4))
@19,7 SAY 'Coeficiente global de transferencia de Calor:' GET U PICTURE '###.#'
READ
@20,7 SAY 'Velocidad superficial: '
@20,COL() SAY US PICTURE '###.###'
@23,10 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,0 CLEAR TO 23,70

@15,6 CLEAR TO 19,69
@15,28 SAY 'CONSTANTES DE REACCION'
@17,22 SAY 'k3=' GET K301 PICTURE '##.##'
@17,COL() SAY 'x10'' GET K302 PICTURE '##'
@17,COL() SAY 'e(' GET E3 PICTURE '#####.##'
@17,COL() SAY 'T)'
@18,22 SAY 'k4=' GET K401 PICTURE '##.##'
@18,COL() SAY 'x10'' GET K402 PICTURE '##'
@18,COL() SAY 'e(' GET E4 PICTURE '#####.##'
@18,COL() SAY 'T)'
@19,22 SAY 'Rc=' GET RC01 PICTURE '##.##'
@19,COL() SAY 'x10'' GET RC02 PICTURE '##'
@19,COL() SAY 'e(' GET ER PICTURE '#####.##'
@19,COL() SAY 'T)'
READ SAVE

**OBTENCION DE LA ECUACION DE _ (BETA)

@15,6 CLEAR TO 19,69
@15,30 SAY 'ECUACION DE _ ''
BETA=(L/(GB*EPSILON*3600))*((K301*(10^K302)*EXP(E3/T0))*CB*1000*1000*DCAT)
@17,12 SAY ' L L'
@18,12 SAY ' = - k3 * CB0 = - ('
@18,COL() SAY K301 PICTURE '###.##'
@18,COL() SAY 'x10''
@18,COL() SAY K302 PICTURE '##'
@18,COL() SAY 'e(''
@18,COL() SAY E3 PICTURE '#####.##'
@18,COL() SAY 'T0) * CB0)
@19,12 SAY ' G G'
@23,12 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60

**OBTENCION DE LA ECUACION DE R

@15,6 CLEAR TO 19,69


```

@15,14 SAY 'ECUACION DE *R*'
@17,7 SAY 'rg X^2-(1+N+(D/M))X+N'
@18,7 SAY 'R=-----'
@19,7 SAY 'ro ((N/M)+((E-1)/M)X)*k3*CB0'
@16,40 SAY 'M='
MM=K301*CB
M=MM*(10^K302)*EXP(E3/T)
R0=M
@16,COL() SAY MM PICTURE '###.##'
@16,COL() SAY 'x10''
@16,COL() SAY K302 PICTURE '##'
@16,COL() SAY 'e('
@16,COL() SAY E3 PICTURE '#####.#'
@16,COL() SAY 'T)'
@17,40 SAY 'N='
N=CA/CB
@17,COL() SAY N PICTURE '###.##'
@18,40 SAY 'D='
DD1=K401*RC01
DD2=K402+RC02
DDE=I3+ER
D=DD1*(10^DD2)*EXP(DDE/T)
@18,COL() SAY DD1 PICTURE '##.##'
@18,COL() SAY 'x10''
@18,COL() SAY DD2 PICTURE '##'
@18,COL() SAY 'e('
@18,COL() SAY DDE PICTURE '#####.#'
@18,COL() SAY 'T)'
@19,40 SAY 'E='
**R=I**
E=RC01*(10^RC02)*EXP(ER/T)
@19,COL() SAY RC01 PICTURE '##.##'
@19,COL() SAY 'x10''
@19,COL() SAY RC02 PICTURE '#'
@19,COL() SAY 'e('
@19,COL() SAY ER PICTURE '#####.#'
@19,COL() SAY 'T)'
R=(X^2-(1+N+(D/M))*X+N)/(((N/M)+((E-1)/M)*X)*R0)
@23,10 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60

**ECUACION _x/_z*
@15,6 CLEAR TO 19,69
@15,25 SAY 'ECUACION DE _x/_z*'
@17,7 SAY '_x X^2-(1+N+(D/M))X+N'
@18,7 SAY '_z=-----'
@19,7 SAY '_z* ((N/M)+((E-1)/M)X)*k3*CB0'
@17,37 SAY 'L'
@18,37 SAY 'L'
@18,COL() SAY K301 PICTURE '##.##'
@18,COL() SAY 'x10''
@18,COL() SAY K302 PICTURE '##'
@18,COL() SAY 'e('

```

```

@18,COL() SAY E3 PICTURE '#####.#'
@18,COL() SAY ' /T0)*CB0)'
@19,37 SAY 'G'
@23,12 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60
@6,5 SAY 'x      X^2-(1+N+(D/M))X+N'
@7,5 SAY '--- = R =----- *'
@8,5 SAY 'z* ((N/M)+((E-1)/M)X)*k3*CB0'
@6,40 SAY 'L'
@7,40 SAY '- ('
@7,COL() SAY K301 PICTURE '##.##'
@7,COL() SAY 'x10''
@7,COL() SAY K302 PICTURE '##'
@7,COL() SAY 'e('
@7,COL() SAY E3 PICTURE '#####.#'
@7,COL() SAY ' /T0)*CB0)'
@8,40 SAY 'G'
@23,12 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60

```

```

**CALCULO DE ALFA
ALFA=(4*U*4184*L)/(GB*DT*CPB*EPSILON*3600)

```

```

**OBTENCION DE LA ECUACION DE _(BETAP)
@15,6 CLEAR TO 19,69
@15,30 SAY 'ECUACION DE '---'
@17,16 SAY ' L (-DH)'
@18,16 SAY ' = -k3*CB0 ----='
@19,16 SAY ' G CpT0'
BB1=(L*K301*(10^K302)*CB*1000*1000*DHNEG*1000)/(GB*EPSILON*3600*CPB*T0)
BB1=INT(BB1)
BBB=100
DO WHILE BBB<BB1 .OR. BBB=BB1
COL=COL+1
BBB=BBB*10
ENDDO
BB1=BB1/(10^COL)
BB2=COL
EBB=E3
BETAP=(BB1*(10^BB2))*(EXP(EBB/T0))
@18,34 SAY BB1 PICTURE '##.##'
@18,COL() SAY 'x10''
@18,COL() SAY BB2 PICTURE '##'
@18,COL() SAY 'e('
@18,COL() SAY EBB PICTURE '#####.#'
@18,COL() SAY ' /T0)'
@23,12 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60

**ECUACION _T/z*
@14,5 CLEAR TO 20,70

```

```

@14,3 TO 20,75
@15,25 SAY 'ECUACION DE _Tl_ z*'
@17,5 SAY '_x X^2-(1+N+(D/M))X+N'
@18,5 SAY '-- = ----- *'
@19,5 SAY '_Z* ((N/M)+((E-1)/M)X)*k3*CB0'
@18,34 SAY BBI PICTURE '###.##'
@18,COL() SAY 'x10''
@18,COL() SAY LTRIM(STR(BB2))
@18,COL() SAY 'e'
@18,COL() SAY EBB PICTURE '#####.#'
@18,COL() SAY '/T0)-'
@18,COL() SAY ALFA PICTURE '#####.#'
@18,COL() SAY '(T*-Tw*)'
@23,12 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60
@10,0 CLEAR TO 11,79
@10,5 SAY '_x X^2-(1+N+(D/M))X+N'
@11,5 SAY '-- = ----- *'
@12,5 SAY '_Z* ((N/M)+((E-1)/M)X)*k3*CB0'
@11,34 SAY BBI PICTURE '###.##'
@11,COL() SAY 'x10''
@11,COL() SAY LTRIM(STR(BB2))
@11,COL() SAY 'e'
@11,COL() SAY EBB PICTURE '#####.#'
@11,COL() SAY '/T0)-'
@11,COL() SAY ALFA PICTURE '#####.#'
@11,COL() SAY '(T*-Tw*)'
@23,12 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60
@14,3 CLEAR TO 20,75
DO RUNGE-K

```

****PROGRAMA RUNGE-K

```

****RESOLUCION DE UN SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES POR EL METODO
DE RUNGE-KUTTA
***DEFINICION DE VARIABLES
***TAS=T CON ASTERISCO
***TMAXI=TEMPERATURA MAXIMA
SET STATUS OFF
SET SAFETY OFF
SET CONSOLE OFF
SET TALK OFF
SET COLOR TO W/B,W+/BG,N
CLEAR
DEFINE WINDOW VENT3 FROM 3,5 TO 8,75
STORE 0 TO I,DZ,AA,DZA,RR,TMAXI
STORE 1 TO TWA
STORE 'N' TO ABIERTO
REN=10
@2,8 SAY 'RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES POR EL METODO DE RUNGE-
KUTTA'

```

```

@6,3 SAY 'DZ=' GET DZ PICTURE '#.####'
READ
@7,3 SAY 'L(m)=' GET L PICTURE '##.##'
READ
AA=L/DZ
DECLARE ZZ(AA)
DECLARE TT(AA)
DECLARE XX(AA)
STORE 0 TO XX(1),ZZ(1),TT(1)
@4,3 SAY 'X(1)=' GET XX(1) PICTURE '#.####'
READ
@5,3 SAY 'Z(1)=' GET ZZ(1) PICTURE '##.##'
READ
STORE XX(1) TO X
STORE T0 TO T,TT(1),TMAX)
STORE ZZ(1) TO Z
TA=T/T0
ZA=ZZ(1)/L
DZA=DZ/L
  BETA:=BETA*L
  BETAPL:=BETAP*L
  ALFAL=ALFA*L
@4,40 SAY '_='
@4,COL() SAY BETA.
@5,40 SAY '._='
@5,COL() SAY BETAPL
@6,40 SAY '_='
@6,COL() SAY ALFAL
@7,40
I=1
  DO WHILE I<AA
    TAS=TT(1)/T0
    DO DXDZ
    DO DTDZ
    STORE R TO RR
    K11=DZA*DXDZ
    K21=DZA*DTDZ
    X=XX(1)+K11/2
    TAS=TT(1)/T0+K21/2
    T=TAS*T0
    DO DXDZ
    DO DTDZ
    K12=DZA*DXDZ
    K22=DZA*DTDZ
    X=XX(1)+K12/2
    TAS=TT(1)/T0+K22/2
    T=TAS*T0
    DO DXDZ
    DO DTDZ
    K13=DZA*DXDZ
    K23=DZA*DTDZ
    X=XX(1)+K13
    TAS=TT(1)/T0+K23
    T=TAS*T0

```

```

DO DXDZ
DO DTDZ
K14=DZA*DXDZ
K24=DZA*DTDZ
I=I+1
XX[I]=XX[I-1]+(1/6)*(K11+2*(K12+K13)+K14)
TA=TA+(1/6)*(K21+2*(K22+K23)+K24)
ZA=ZA+DZA
TT[I]=TA*T0
ZZ[I]=ZA*L
T=TT[I]
X=XX[I]
Z=ZZ[I]
IF TT[I]>TT[I-1]
  TMAXI=TT[I]
ENDIF
@REN,5 SAY 'X'
@REN,COL() SAY LTRIM(STR(I))
@REN,COL() SAY 'I='
@REN,COL() SAY XX[I] PICTURE '#.####'

@REN,40 SAY 'T'
@REN,COL() SAY LTRIM(STR(I))
@REN,COL() SAY 'I='
@REN,COL() SAY TT[I]

@REN,60 SAY 'Z'
@REN,COL() SAY LTRIM(STR(I))
@REN,COL() SAY 'I='
@REN,COL() SAY ZZ[I] PICTURE '##.####'

@REN,20 SAY 'R'
@REN,COL() SAY LTRIM(STR(I))
@REN,COL() SAY 'I='
@REN,COL() SAY RR PICTURE '##.####'
DO TLX

REN=REN+1
IF REN=21
  WAIT
  @10,0 CLEAR TO 23,79
  REN=10
ENDIF

ENDDO
@23,10 SAY 'DESEA CALCULAR LA CAIDA DE PRESION EN EL REACTOR?' GET OPCK
PICTURE 'L'
READ
IF OPCK='Y'
DO DP
ENDIF

```

```

*****PROGRAMA DP.PRG
*****PROGRAMA PARA CALCULAR LA CAIDA DE PRESION EN EL REACTOR DE L. FIJO
***REP= NUM REYNOLDS MODIFICADO (NRc')
***DELTAP= CAIDA DE PRESION [KGF/M2]
***DELTAPP= CAIDA DE PRESION [PSI]
***FM=FACTOR DE FRICCION (FIG 5-67 PERRY)
***I=AREA ESFERICA/SUPERFICIE REAL DE LA PARTICULA I(NRc').
***NRE= EXPONENCIAL I(NRc')
***OPCL= OPCION P/VOLVER A CORRER ESTE PROGRAMA
***NT= NUMERO DE TUBOS DEL REACTOR
***PROD= TONELADAS DE PRODUCTO POR A-O POR REACTOR
***CAP= TONELADAS DE PRODUCTO EN CADA TUBO DEL REACTOR [TON/A-O]
***DPM= CAIDA DE PRESION POR METRO [PSIG/M]
***WCA'TT= MASA DE CATALIZADOR POR TUBO [KG]
***WCA'TR= MASA DE CATALIZADOR POR REACTOR [KG]
***VOL= VOLUMEN DEL REACTOR [LT]
***LIIS= LHSV [Hr-1]
STORE 0 TO DELTAP,FM,NDP,DELTAP,DPM
STORE 0 TO NT,PROD,WCA'TT,WCA'TR,VOL,LIIS
STORE 0.89 TO FI
STORE ' ' TO OPCL.
@2,1 CLEAR TO 24,75
@2,12 SAY 'CALCULO DE LA CAIDA DE PRESION (CORRELACION DE LEVA)'

@5,10 SAY 'Re' = '
@5,COL() SAY RE PICTURE '#####.##'
@7,10 SAY 'L=' GET L PICTURE '##.##'
READ

@10,10 SAY ' 2fm G^2 L(1- )^(3-n)'
@11,10 SAY 'DP = -----'
@12,10 SAY ' Dp gc _^(3-n) _^3'
@10,40 SAY 'fm= f(NRc)' = ' GET FM PICTURE '##.###.####'
@11,40 SAY ' _ = area esf/superf real partic=' GET FI PICTURE '##.##'
@12,40 SAY 'n= f(NRc)' = ' GET NDP PICTURE '##.##'
READ SAVE

DELTAP= 2*FM*((GT*PMPROM/1000)^2)*L*(1-EPSILON)^(3-
NDP)/(DP*9.81*DPROM*1000*FI^(3-NDP)*EPSILON^3)
@16,10 SAY 'DELTAP='
@16, COL() SAY DELTAP PICTURE '###.###.####'
@16,COL() SAY '[kgf/m2]'
DELTAPP= DELTAP*14.7/((100^2)*1.0333)
@18,10 SAY 'DELTAP='
@18,COL() SAY DELTAPP PICTURE '###.####'
@18,COL() SAY '[psig]'
@18,40 SAY 'DELTAP/M='
DPM = DELTAPP/L
@18,COL() SAY DPM PICTURE '###.####'
@18,COL() SAY '[psig]'

@23,5 SAY 'DESEA CALCULAR OTRO VALOR DP CON UNA LONGITUD DIFERENTE?' GET
OPCL PICTURE 'L'
READ

```

```

IF OPCL = 'Y'
DO DP
ENDIF

USE REACTFJ
APPEND BLANK
REPLACE REACT WITH TITULO
REPLACE DINT WITH DT
REPLACE LONG WITH L
REPLACE PRODTUB WITH CAP

NT = 100/CAP
REPLACE NUMTUB WITH NT
REPLACE TINIC WITH TO
REPLACE TMAX WITH TMAXI
REPLACE NRE WITH RE

REPLACE DPMETRO WITH DPM
REPLACE DPTOT WITH DELTAPP

WCATT = PI()*(DT/2)^2*L*DCAT*1000
WCATR = WCATT*NT
REPLACE WCATTUB WITH WCATT
REPLACE WCATTOT WITH WCATR

VOL = PI()*(DT/2)^2*1000*L
LHS = QT/VOL
REPLACE LHSV WITH LHS
RETURN

****PROGRAMA DXDZ.PRG
****CALCULO DE LA ECUACION _x/_z
***DEFINICION DE VARIABLES
***N = CA/CB
***MM = K301*CB
***DD1 = K401*RCO1
***DD2 = K401 + RCO1
***DDE = E4 + ER
SET CONSOLE ON
STORE 0 TO DXDZ,R
E = RCO1*(10^RCO2)*EXP(ER/T)
M = MM*(10^K302)*EXP(E3/T)
D = DD1*(10^DD2)*EXP(DDE/T)
R = (X^2 - (1 - N + (D/M))*X + N)/(((N/M) + ((E-1)/M)*X)*R0)
DXDZ = BETAL*R
RETURN

****PROGRAMA DTDZ.PRG
****OBTENCION DEL VALOR DE LA ECUACION DTDZ
***DEFINICION DE VARIABLES
SET CONSOLE ON
TWA = 1
DTDZ = BETAPL*R*(ALFAL*(TAS-TWA))
RETURN

```

PROGRAMAS PARA LA SIMULACION DEL REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO

```
*****PROGRAMA RFLUID.PRG
*****PROGRAMA P/ALMACENAR LOS DATOS NECESARIOS PARA EL DISEÑO DEL
REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO
***DEFINICION DE VARIABLES
***A=MEOH; B=i-BUTILENO; C = MTBE
***OPC1 = (Y) INDICA QUE DESEA MODIFICAR COND.DE REAC.
***CONV = % DE CONVERSION
***REL= RELACION ISO-B/MEOH
CLOSE ALL
CLEAR ALL
SET TALK OFF
SET SAFETY OFF
SET CONSOLE OFF
SET COLOR TO W/R, W +/R,N
PUBLIC FA,FB,FT,DA,DB,QA,QB,QT,CA,CB,CT, YA, YB
PUBLIC PMPROM,CPPROM,DPRM,M PROM,DT,DP
PUBLIC MA,MB,ALFA,US,U,L,BETA,BETAP,EPSILON
PUBLIC RE,K301,K302,K401,K402,RC01,RC02
PUBLIC E3,E4,ER,TO,T,TW,M,D,E,N,DXDZ,DTDZ
PUBLIC DHNEG,BB1,BB2,EBB,DCAT,MM,DD1,DD2,DDE
PUBLIC X,Z,R,R0,GT,GB,BETAL,BETAPL,ALFAL,OPCK
PUBLIC Vml,REmf,Emf,VI,REI,VI,REI,Le,RU,QQ,DPFL
STORE 0 TO FA,FB,FA,FT,DA,DB,QA,QB,QT,CA,CB,CT
STORE 0 TO YA, YB,PMPROM,CPPROM,DPRM,M PROM,CONV
STORE 0 TO DT,WCAT
STORE ' ' TO OPC1,OPCK,OPC2
STORE .9 TO CONV
DEFINE WINDOW VENT1 FROM 7.21 TO 17.58
DEFINE WINDOW VENT2 FROM 5.21 TO 20.58

**PESOS MOLECULARES
PMA = 32.04
PMB = 56.1
PMC = 88

**DENSIDADES (g/cm3)
DA = 0.792
DB = 0.0025
DCAT = 0.770

**VISCOSIDADES (N seg/m2)
MA = 0.39E-3
MB = 900E-7

**CAPACIDADES CALORIFICAS(J/gmol K)
CPA = 48.16
CPB = 95.89
```


**ENERGIA DE ACTIVACION (KJ/gmol)
EA = 76.7

**CALOR DE REACCION (KJ/gmol)
DHNEG=37

*****CONDICIONES DE REACCION*****

STORE I TO P
STORE 328 TO TO
STORE 328 TO TW
STORE 0.0 TO DP
STORE 100 TO CAP
STORE 4 TO REL
CLEAR
DO PANTT
@2,20 SAY 'CONDICIONES DE REACCION'
ACTIVATE WINDOW VENT1
SET COLOR TO W F/N,W+/N,N
@0,I SAY 'INTRODUZCA LAS CONDICIONES DESEADAS'
@2,I SAY 'T' GET TO PICTURE '###.#'
@2,COL() SAY '(K)'
@3,I SAY 'Diam. Part.cula...' GET DP PICTURE '#.###'
@3,COL() SAY '(mm)'
@4,I SAY 'Capacidad de'
@5,I SAY 'Produccion MTBE...' GET CAP PICTURE '###.###.###'
@5,COL() SAY '(TON/A±0)'
@6,I SAY 'Peso catalizador...' GET WCAT PICTURE '###.###'
@6,COL() SAY '(Kg)'
@7,I SAY 'Conversion.....' GET CONV PICTURE '###'
@7,COL() SAY '%'
@8,I SAY 'Rel.Peso MeOH/i-Bu' GET REL PICTURE '###.##'
@8,COL() SAY '/1'
READ SAVE

**DIAMETRO DE PARTICULA (m)
DP= DP*10E-4

**FLUJOS (gmol/h)
FC= CAP*1000000/(PMC*365*24)
FB= FC/(CONV/100)
FA= FB*REL
FT= FA + FB
YA= FA/FT
YB= 1-YA

**CAPACIDADES (lt/h)
QA= FA*PMA/(DA*10³)
QB= FB*PMB/(DB*10³)
QT= QA + QB

**CONCENTRACIONES (gmol/l)
CA= FA/QA
CB= FB/QB
CT= CA + CB

```

**PROMEDIOS
MPROM = PMA*YA + PMB*YB
CPPROM = CPA*YA + CPB*YB
MPROM = MA*YA + MB*YB
DPROM = DA*YA + DB*YB

```

```

ACTIVATE WINDOW VENT2
@1,1 SAY '**FLUJO DE ALIMENTACION (gmol/h)**'
@2,1 SAY 'FA = '
@2,COL() SAY FA PICTURE '###.###.#'
@3,1 SAY 'FB = '
@3,COL() SAY FB PICTURE '###.###.#'
@4,1 SAY '*****GASTO INICIAL (l/h)*****'
@5,1 SAY 'QA = '
@5,COL() SAY QA PICTURE '###.###.#'
@6,1 SAY 'QB = '
@6,COL() SAY QB PICTURE '###.###.#'
@7,1 SAY 'QTOT = '
@7,COL() SAY QT PICTURE '###.###.#'
@8,1 SAY '**CONCENTRACIONES INIC.(gmol/l)**'
@9,1 SAY 'CA = '
@9,COL() SAY CA PICTURE '###.##'
@10,1 SAY 'CB = '
@10,COL() SAY CB PICTURE '###.##'
@11,1 SAY '****FRACCIONES MOL INICIALES*****'
@12,1 SAY 'YA - '
@12,COL() SAY YA PICTURE '##.####'
@13,1 SAY 'YB = '
@13,COL() SAY YB PICTURE '##.####'
WAIT
DEACTIVATE WINDOW VENT2
DEACTIVATE WINDOW VENT1
DO FLUID

```

*****FLUID.PRG

```

*****PROGRAMA P/OBTENER Vmf, Vt, Long.de lecho exp. y espacio hueco
***DEFINICION DE VARIABLES
***Vmf= VELOCIDAD DE MINIMA FLUIDIZACION
***Emf= ESPACIO HUECO A LA MINIMA FLUID.
***Vt= VELOCIDAD TERMINAL
***Rei= REYNOLDS A LA VEL.TERM.
***OPCVt= OPCION DE CALCULO DE LA VEL.TERM.
***OPC2= OPCION PARA ELEGIR LA EC.CORRECTA P/Vt
***VF= VELOCIDAD DE FLUIDIZACION
***U*: RELACION DE VELOCIDADES

```

```

STORE 0 TO Vmf,REmfA,REmfB,REmfC,REmf,Emf
STORE 0 TO Vt,Rei
STORE ' ' TO OPCVt
STORE 'N' TO OPC2

```

```
@ 5,5 TO 11,74
```

```

@ 5,18 SAY '*****VELOCIDAD DE MINIMA FLUIDIZACION*****'
@ 8,10 SAY ' _mf = ' GET Emf PICTURE '#.####'
READ
REmfA=(1.75)/(Emf)^3
REmfB=150*(1-Fmf)/(Emf*REmfA)
REmfC=-(((DP*100)^3)*DPROM*(DCAT-DPROM)*980)/(((MPROM*10)^2)*REmfA)
@ 7,9 SAY 'REmf^2 = '
@ 7,COL() SAY REmfB PICTURE '####.##'
@ 7,COL() SAY 'REmf = '
@ 7,COL() SAY REmfC PICTURE '#####.##'
@ 7,COL() SAY ' = 0'
@ 9,10 SAY 'REmf = ' GET REmf PICTURE '#.####'
READ
Vmf = REmf*MPROM*10/(DP*100*DPROM)
@ 10,10 SAY 'Vmf = '
@ 10,COL() SAY Vmf PICTURE '##.####'
@ 10,COL() SAY 'cm/seg'

@ 12,5 TO 20,74
@ 12,23 SAY '*****VELOCIDAD TERMINAL*****'
DO WHILE OPC2='N'
@ 14,7 SAY 'A) REI < 0.4'
@ 14,25 SAY 'B) 0.4 < REI < 500'
@ 14,50 SAY 'C) 500 < REI < 200,000'
SET COLOR TO W/B,W+/BG,B
@ 15,30 SAY 'Elija su opci_n (A-C) ' GET OPCV1 PICTURE 'A'
READ
DO CASE
CASE OPCV1='A'
Vt=(980*(DCAT-DPROM)*(DP*100)^2)/(18*MPROM*10)
CASE OPCV1='B'
Vt=((4*((DCAT-DPROM)^2)*(980^2)/(225*DPROM*MPROM*10))^(1/3))*DP*100
CASE OPCV1='C'
Vt=SQRT(3.1*980*(DCAT-DPROM)*DP*100/DPROM)
ENDCASE
STORE ' ' TO OPCV1
@ 17,10 SAY 'Vt = '
@ 17,COL() SAY Vt PICTURE '####.##'
REI=(DP*100*DPROM*Vt)/(MPROM*10)
@ 18,10 SAY 'REI = '
@ 18,COL() SAY REI PICTURE '####.##'
@ 19,10 SAY 'Elija _correctamente la opci_n anterior?' GET OPC2 PICTURE 'L'
READ
ENDDO

DO LFLUID

```

```

*****PROGRAMA LFLUID.PRG
*****CALCULO DE LA LONGITUD EXPANDIDA DEL REACTOR
***DEFINICION DE VARIABLES
***Lc= LECIHO EXPANDIDO
***RELU= RU= RELACION DE VELOCIDADES 'U'

```

```

***REN = NUMERO DE RENGLON
***REI = REYNOLDS DE FLUIDIZACION
***QQ = CONTADOR
***QQQ = NUMERO DE VECES QUE REALIZARA EL CALCULO
***LHSV = HR-1
***DU = INCREMENTO EN LA VEL.RELATIVA U
***RELU = VALOR DE RELU QUE DESEA CORRER CON UNIDIMFL
CLEAR
DO PANTT
STORE 0 TO DT, L, QQ, REN, RU, GT, FT, RELUA, RELUB, RELUU, QQQ, DU, RELU1, Le1, RELUD
@4, 10 SAY 'Dilmetro del reactor (m): ' GET DT PICTURE '##.####'
READ
@5, 10 SAY 'Gradiente de velocidad relativa: ' GET DU PICTURE '##.####'
READ

*****[INICIO DE LA EXPANSION*****
L = 1.27*WCAT/(DCAT*1000*(DT2))
Le1 = L/(1-Emf)
****CALCULO DE RELU1****
RELUU = SQRT((1.85472)-4*(1.0526-1.3368*WCAT/(Le1*DCAT*1000*DT2)))
RELUA = (1.8547 + RELUU)/2
RELUB = (1.8547 - RELUU)/2
IF RELUA >= 0 .AND. RELUA <= 1
    RELU1 = RELUA
ELSE
    RELU1 = RELUB
ENDIF
QQQ = 1 + (.02/DU)
QQQ = INT(QQQ)
DECLARE RELU[QQQ]
DECLARE Le[QQQ]
DECLARE EP[QQQ]
DECLARE V[QQQ]
DECLARE DPFL[QQQ]
DECLARE REFI[QQQ]
DECLARE GGT[QQQ]
DECLARE FFT[QQQ]
DECLARE LHSV[QQQ]
EP[1] = Emf
V[1] = Vmf
REF[1] = REmf
Le[1] = Le1
LHSV[1] = QT/(PI()*((DT/2)2)*Le[1]*1000)
RELU[1] = RELU1

*****MAXIMA EXPANSION*****
RELU[QQQ] = 1
EP[QQQ] = 1
V[QQQ] = Vt
Le[QQQ] = 1.27*WCAT/(DCAT*1000*((FLOAT(DT))2)*(1-
1.762*RELU[QQQ] + .95*(RELU[QQQ]2)))
REF[QQQ] = REt
LHSV[QQQ] = QT/(PI()*((DT/2)2)*Le[QQQ]*1000)

```

```

STORE 2 TO QQ
DO WHILE QQ < QQQ
  RELU[QQ] = RELU[QQ-1] - DU
  Lc[QQ] = 1.27 * WCAT / (DCAT * 1000 * (DT^2) * (1 - 1.762 * RELU[QQ] + .95 * (RELU[QQ]^2)))
  EP[QQ] = 1 - Lc[QQ]
  V[QQ] = RELU[QQ] * (Vt - Vmf) + Vmf
  RE[QQ] = DP * 100 * DPROM * V[QQ] / (MPROM * 10)
  LHSV[QQ] = Q / (P(1) * (DT/2)^2 * Lc[QQ] * 1000)
  QQ = QQ + 1
ENDDO

```

****CREAR BASE DE DATOS****

```

STORE ' ' TO TITFL, TITULFL
STORE ' ' TO TITULOFL, TITULFLR, TITULFLL
DO CASE
CASE WCAT > 99
  TITFL = STR(WCAT, 3.0)
CASE WCAT > 9.5 .AND. WCAT < 100
  TITFL = STR(WCAT, 2.0)
  TITFL = '0' + TITFL
CASE WCAT < 10
  TITFL = STR(WCAT, 1.0)
  TITFL = '00' + TITFL
ENDCASE
TITULOFL = 'FF' + TITFL
TITULFL = STR(DT, 4.2)
TITULFLL = LEFT(TITULFL, 1)
TITULFLR = RIGHT(TITULFL, 2)
TITULOFL = TITULOFL + TITULFLL + TITULFLR
USE MODELFL
COPY STRUCTURE TO &TITULOFL
USE &TITULOFL

```

****EDICION EN PANTALLA****

```

@6,4 SAY 'U'
@6,9 SAY 'EPSILON'
@6,14 SAY 'Le(m)'
@6,20 SAY '(cm/seg)'
@6,31 SAY 'REF'
@6,38 SAY 'DPL[seg2]'
@6,46 SAY '(gmol/segm2)'
@6,59 SAY 'LHSV(hr^-1)'
STORE 6 TO REN
STORE 0 TO QQ
DO WHILE QQ < QQQ
  REN = REN + 1
  QQ = QQ + 1
  DO DPFLUID
    @REN, 2 SAY RELU[QQ] PICTURE '#.##'
    @REN, 8 SAY EP[QQ] PICTURE '#.##'
    @REN, 12 SAY Lc[QQ] PICTURE '###.###'
    @REN, 19 SAY V[QQ] PICTURE '##.####'
    @REN, 28 SAY RE[QQ] PICTURE '####.##'
    @REN, 36 SAY DPL[QQ] PICTURE '###.###.##'
  
```

```

@REN,46 SAY GGT|QQ| PICTURE '###,###,##'
@REN,60 SAY LHSV|QQ| PICTURE '###,###,##'
IF REN > 20
  @23,20 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar'
  WAIT
  @7.2 CLEAR TO 23,70
  STORE 6 TO REN
ENDIF

```

```

****GUARDAR EN BASE DE DATOS****
APPEND BLANK
REPLACE COEFU WITH RELU|QQ|
REPLACE EHUECO WITH EPI|QQ|
REPLACE LEXP WITH Le|QQ|
REPLACE VTERM WITH VI|QQ|
REPLACE RETERM WITH RE|QQ|
REPLACE CAIDAP WITH DPF|QQ|
REPLACE VELHSV WITH LHSV|QQ|
REPLACE FLUJO WITH FFT|QQ|
REPLACE GASTO WITH GGT|QQ|
ENDDO

```

```

STORE 'Y' TO CONTINUA
DO WHILE CONTINUA = 'Y'
  GOTO TOP
  @23,1 CLEAR TO 23,79
  @23,20 SAY 'Qué valor de U desea correr? ' GET RELUD PICTURE '#,##'
  READ
  LOCATE FOR COEFU = RELUD
  EPSILON = EHUECO
  I = LEXP
  US = VTERM/100
  RU = COEFU
  FT = FLUJO
  GT = GASTO
  DO ECUACION
  @23,10 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar'
  WAIT
  IF X > 0.9
    REPLACE LAX9 WITH Z
  ELSE
    REPLACE XALMAX WITH X
  ENDIF
  @23,1 CLEAR TO 23,79
  @23,20 SAY 'Desea correr otro valor de "U" ?' GET CONTINUA PICTURE 'L'
  READ
ENDDO

```

****PROGRAMA ECUACION.PRG

****OBTENCION DE LA ECUACION PARA EL DISEÑO DEL REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO

***DEFINICION DE VARIABLES

STORE 0 TO G,GB,RE,U,BETA,E3,E4,ER,E,DXDZ,DTDZ,BBB

STORE 0 TO K301,K302,K401,K402,RC01,RC02,MM,DD1,DD2,DDE,N,M,D,BB1,BB2,EBB
 STORE 0 TO COL,R0
 T=10
 STORE 2.49 TO K301
 STORE 13 TO K302
 STORE 5.23 TO K401
 STORE 28 TO K402
 STORE 3.905 TO RC01
 STORE -4 TO RC02
 STORE -10635.2 TO E3
 STORE -25799 TO E4
 STORE 4863.3 TO ER
 CLEAR
 DO PANTT
 TEXT

ECUACION DE VELOCIDAD DE REACCION (MODELO HETEROGENEO)

$$r = \frac{k_3 \cdot CA \cdot CB - k_4 \cdot CC \cdot RC}{CA + RC \cdot CC}$$

ENDTEXT
 SET CONSOLE OFF
 @23,10 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
 WAIT
 @14,5 TO 20,70
 @23,0 CLEAR TO 23,79
 @15,6 CLEAR TO 19,69

GASTO (gmol/m²seg)
 GB = US*CB*1000
 G = GB

**Reynolds
 RE = DP*US*DPROM*1000/MPROM

@16,7 SAY 'Velocidad superficial: '
 @16,col() say US PICTURE '###.####'
 @16,col() say 'm/seg'
 @17,7 SAY 'Reynolds = '
 @17,COL() SAY Re picture '###.####'
 @18,7 SAY 'GB = '
 @18,COL() SAY GB PICTURE '###.####'
 @18,40 SAY 'GT = '
 @18,COL() SAY GT PICTURE '###.###.####'
 @23,10 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
 WAIT
 @23,0 CLEAR TO 23,79

@15,6 CLEAR TO 19,69

```

@15,28 SAY 'CONSTANTES DE REACCION'
@17,22 SAY 'k3=' GET K301 PICTURE '##.##'
@17,COL() SAY 'x10' GET K302 PICTURE '##'
@17,COL() SAY 'e'(' GET E3 PICTURE '#####.#'
@17,COL() SAY 'T)'
@18,22 SAY 'k4=' GET K401 PICTURE '##.##'
@18,COL() SAY 'x10' GET K402 PICTURE '##'
@18,COL() SAY 'e'(' GET E4 PICTURE '#####.#'
@18,COL() SAY 'T)'
@19,22 SAY 'Rc=' GET RC01 PICTURE '##.##'
@19,COL() SAY 'x10' GET RC02 PICTURE '##'
@19,COL() SAY 'e'(' GET ER PICTURE '#####.#'
@19,COL() SAY 'T)'
READ SAVE

```

****OBTENCION DE LA ECUACION DE BETA**

```

@15,6 CLEAR TO 19,69
@15,30 SAY 'ECUACION DE "beta"'
BETA = (1/(GB*EPSILON*3600))*((K301*(10^K302)*EXP(E3/T0))*CB*1000+1000*DCAT)
@17,12 SAY ' L. L.'
@18,12 SAY 'beta = - k3 + CBo = - ('
@18,COL() SAY K301 PICTURE '##.##'
@18,COL() SAY 'x10'
@18,COL() SAY K302 PICTURE '##'
@18,COL() SAY 'e'('
@18,COL() SAY E3 PICTURE '#####.#'
@18,COL() SAY 'T0)' * CBo)'
@19,12 SAY ' G G'
@23,12 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60

```

****OBTENCION DE LA ECUACION DE R**

```

@15,6 CLEAR TO 19,69
@15,14 SAY 'ECUACION DE "R"'
@17,7 SAY ' rg X^2-(1+M)+(D/M))X + N'
@18,7 SAY 'R = -----'
@19,7 SAY ' r0 ((N/M) + ((E-1)/M)X)*k3*CB0'
@16,40 SAY 'M='
MM = K301*CB
M = MM*(10^K302)*EXP(E3/T)
R0 = M
@16,COL() SAY MM PICTURE '##.##'
@16,COL() SAY 'x10'
@16,COL() SAY K302 PICTURE '##'
@16,COL() SAY 'e'('
@16,COL() SAY E3 PICTURE '#####.#'
@16,COL() SAY 'T)'
@17,40 SAY 'N = '
N = CA/CB
@17,COL() SAY N PICTURE '##.##'
@18,40 SAY 'D = '
DD1 = K401 * RC01
DD2 = K402 * RC02

```



```

DDE = E4 + ER
D = DD1*(10^DD2)*EXP(DDE/T)
@18,COL() SAY DD1 PICTURE '##.##'
@18,COL() SAY 'x10^'
@18,COL() SAY DD2 PICTURE '##'
@18,COL() SAY 'e^('
@18,COL() SAY DDE PICTURE '#####.#'
@18,COL() SAY ')/T)'
@19,40 SAY 'E:= '
**R = E**
E = RC01*(10^RC02)*EXP(ER/T)
@19,COL() SAY RC01 PICTURE '##.##'
@19,COL() SAY 'x10^'
@19,COL() SAY RC02 PICTURE '##'
@19,COL() SAY 'e^('
@19,COL() SAY ER PICTURE '#####.#'
@19,COL() SAY ')/T)'
@23,10 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60

**ECUACION dx/dz*
@15,6 CLEAR TO 19,69
@15,25 SAY 'ECUACION DE dx/dz*'
@17,7 SAY 'dx = X^2-(1+N+(D/M))X+N'
@18,7 SAY '- = ----- *'
@19,7 SAY 'dz* ((N/M)+((E-1)/M)X)*k3*CB0'
@17,37 SAY 'L'
@18,37 SAY '-('
@18,COL() SAY K301 PICTURE '##.##'
@18,COL() SAY 'x10^'
@18,COL() SAY K302 PICTURE '##'
@18,COL() SAY 'e^('
@18,COL() SAY E1 PICTURE '#####.#'
@18,COL() SAY ')/T0)*CB0)'
@19,37 SAY 'G'
@23,12 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60
@6,5 SAY 'dx = X^2-(1-N+(D/M))X+N'
@7,5 SAY '- = Rbeta = ----- *'
@8,5 SAY 'dz* ((N/M)+((E-1)/M)X)*k3*CB0'
@6,40 SAY 'L'
@7,40 SAY '-('
@7,COL() SAY K301 PICTURE '##.##'
@7,COL() SAY 'x10^'
@7,COL() SAY K302 PICTURE '##'
@7,COL() SAY 'e^('
@7,COL() SAY E3 PICTURE '#####.#'
@7,COL() SAY ')/T0)*CB0)'
@8,40 SAY 'G'
@23,12 SAY 'Oprima cualquier tecla para continuar...'
WAIT
@23,10 CLEAR TO 23,60

```

@14,3 CLEAR TO 20,75
DO RUNGEFL.

```
****PROGRAMA RUNGEFL.PRG
****RESOLUCION DE UNA ECUACION DIFERENCIAL POR EL METODO DE RUNGE-KUTTA
***DEFINICION DE VARIABLES
***TAS= T CON ASTERISCO
SET STATUS OFF
SET SAFETY OFF
SET CONSOLE OFF
SET TALK OFF
SET COLOR TO W/B,W+/BG,N
CLEAR
DEFINE WINDOW VENTJ FROM 3,5 TO 8,75
STORE 0 TO I,DZ,AA,DZA,RR,X,Z
REN=10
@2,8 SAY 'RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES POR EL METODO DE RUNGE-
KUTTA'
@4,3 SAY 'L(m)='
@4,COL() SAY L.PICTURE '###.##'
@4,40 SAY 'U='
@4,COL() SAY RU.PICTURE '##.##'
@5,3 SAY 'DZ=' GET DZ.PICTURE '#.###'
READ
AA=L/DZ
DECLARE ZZ[AA+1]
DECLARE XX[AA+1]
DECLARE ZA[AA+1]
STORE 0 TO XX[1],ZZ[1]
@6,3 SAY 'X[1]=' GET XX[1].PICTURE '#.##'
READ
@7,3 SAY 'Z[1]=' GET ZZ[1].PICTURE '#.##'
READ
STORE XX[1] TO X
STORE ZZ[1] TO Z
ZA[1]=ZZ[1]/L
DZA=DZ/L
BETA=L*BETA
@4,40 SAY 'beta='
@4,COL() SAY BETA.
I:=1
DO WHILE I<AA
DO DXDZFL
STORE R TO RR
K11=DZA*DXDZ
X=XX[I]+K11/2
DO DXDZFL
K12=DZA*DXDZ
X=XX[I]+K12/2
DO DXDZFL
K13=DZA*DXDZ
```

```

X=XX[I]+K13
DO DXDZFL
K14=DZA*DXDZ
I=I+1
  XX[I]=XX[I-1]+(1/6)*(K11+2*(K12+K13)+K14)
  ZA[I]=ZA[I-1]+DZA
  ZZ[I]=ZA[I]*L
  Z=ZZ[I]
  X=XX[I],
  @REN,5 SAY 'X|'
  @REN,COL() SAY LTRIM(STR(I))
  @REN,COL() SAY '|='
  @REN,COL() SAY XX[I] PICTURE '#.####'

  @REN,60 SAY 'Z|'
  @REN,COL() SAY LTRIM(STR(I))
  @REN,COL() SAY '|='
  @REN,COL() SAY ZZ[I] PICTURE '##.##'

  @REN,35 SAY 'R|'
  @REN,COL() SAY LTRIM(STR(I))
  @REN,COL() SAY '|='
  @REN,COL() SAY RR PICTURE '##.####'

REN=REN+1
IF REN=21
  WAIT
  @10,0 CLEAR TO 23,79
  REN=10
ENDIF
IF X>0.9 OR AA>=1
EXIT
ENDIF
ENDDO
RETURN

```

```

*****PROGRAMA DXDZFL.PRG
*****CALCULO DE LA ECUACION dx/dz PARA UN SISTEMA ISOTERMICO
***DEFINICION DE VARIABLES
***N=CA/CB
***MM=K301*CB
***DD1=K401*RC01
***DD2=K401+RC01
***DDE=E4+ER
SET CONSOLE ON
STORE 0 TO DXDZ,R
R=(X^2-(1+N+(D/M))*X+N)/((N/M)+((E-1)/M)*X)*R0)
DXDZ=BETAL*R
RETURN

```

APENDICE E

EJEMPLO DE UNA CORRIDA PARA LA SIMULACION DE LOS REACTORES DE LECHO FIJO Y FLUIDIZADO

REACTOR DE LECHO FIJO :

SIMULACION DEL REACTOR PARA LA OBTENCION DE "MTBE" REACTOR DE LECHO FIJO	E.Y.T.B. TESIS
---	-------------------

<p style="text-align: center;">INTRODUZCA LAS CONDICIONES DESEADAS</p> <p>T inicial..... 300.0 (K) T pared..... 300.0 (K) Diam. Particula... 0.420 (mm) Capacidad de Produccion MTBE... 2.5(TON/año) Conversion..... 90% Rel.Peso MeOH/i-Bu 4.00/1</p>
--

<p>==FLUJO DE ALIMENTACION (qmol/h)==</p> <p>FA = 14.4 FB = 3.6 *****GASTO INICIAL (lt/h)*****</p> <p>QA = 0.6 QB = 00.9 QTOT = 01.4 ==CONCENTRACIONES INIC.(qmol/lt)==</p> <p>CA = 24.72 CB = 0.04 ****FRACCIONES MOL INICIALES****</p> <p>YA = 0.0000 YB = 0.2000</p>

SIMULACION DEL REACTOR PARA LA OBTENCION DE "MTBE"
 REACTOR DE LECHO FIJO

E. Y. T. B.
 TESIS

MODELO UNIDIMENSIONAL

$$\frac{\delta x}{\delta z} = RR$$

$$\delta z =$$

$$\frac{\delta T}{\delta z} = \frac{R \cdot A}{dt} \cdot \frac{4UL}{C_p} (T - T_w)$$

$$\delta z = \frac{dt \cdot U_s}{Dg \cdot C_p} \cdot f$$

Diametro del Reactor (m): 0.0627
 Espacio Hueco ϵ : 0.30
 Reynolds = 0.0760
 Coeficiente global de transferencia de Calor: 35.0
 Velocidad superficial: 0.0073

CONSTANTES DE REACCION

$$k_3 = 2.49 \times 10^4 \cdot 13e^{(-10635.2/T)}$$

$$k_4 = 5.23 \times 10^4 \cdot 20e^{(-25799.0/T)}$$

$$R_c = 3.91 \times 10^4 \cdot -4e^{(4863.3/T)}$$

ECUACION DE "R"

$R = \frac{r_g \cdot X^2 - (1 + M + (D/M))X + N}{r_o \cdot ((N/M) + ((E-1)/M)X) + k_3 + C_B D}$	$M = 0.11 \times 10^4 \cdot 13e^{(-10635.2/T)}$ $N = 554.70$ $D = 20.42 \times 10^4 \cdot 24e^{(-20935.7/T)}$ $E = 3.91 \times 10^4 \cdot e^{(4863.3/T)}$
---	---

ECUACION DE $\delta x / \delta z$

$$\frac{\delta x}{\delta z} = \frac{X^2 - (1+M+(D/M))X + M}{((N/M)+((E-1)/M)X) + k_3 = CBo} \cdot \frac{L}{\delta z} * (-2.49 \times 10^4 13e^{(-10635.2/To)} = CBo)$$

ECUACION DE $\delta T / \delta z$

$$\frac{\delta T}{\delta z} = \frac{X^2 - (1+M+(D/M))X + M}{((N/M)+((E-1)/M)X) + k_3 = CBo} * 31.35 \times 10^4 14e^{(-10635.2/To)} - 219.7(T - T_{amb})$$

RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES POR EL METODO DE RUNGE-KUTTA

X(1)= 0.0000
Z(1)= 0.00
DZ= 0.0050
L(m)= 0.10

β = 0.25
 β' 0.32
 α = 21.97

X(2)=0.0153	R(2)= 1.0000	T(2)=311.60	Z(2)= 0.0050
X(3)=0.0344	R(3)= 1.3909	T(3)=313.76	Z(3)= 0.0100
X(4)=0.0652	R(4)= 1.6185	T(4)=314.81	Z(4)= 0.0150
X(5)=0.0750	R(5)= 1.6633	T(5)=315.07	Z(5)= 0.0200
X(6)=0.0940	R(6)= 1.5791	T(6)=314.75	Z(6)= 0.0250
X(7)=0.1114	R(7)= 1.4134	T(7)=314.18	Z(7)= 0.0300
X(8)=0.1258	R(8)= 1.2273	T(8)=313.37	Z(8)= 0.0350
X(9)=0.1304	R(9)= 1.0618	T(9)=312.69	Z(9)= 0.0400
X(10)=0.1495	R(10)= 0.9300	T(10)=312.14	Z(10)= 0.0450
X(11)=0.1595	R(11)= 0.8322	T(11)=311.71	Z(11)= 0.0500
X(12)=0.1687	R(12)= 0.7585	T(12)=311.30	Z(12)= 0.0550

X(46)=0.9990	R(46)= 0.0182	T(46)=300.00	Z(46)= 3.4750
X(47)=0.9901	R(47)= 0.0182	T(47)=300.00	Z(47)= 3.4000
X(48)=0.9003	R(48)= 0.0181	T(48)=300.00	Z(48)= 3.4050
X(49)=0.9005	R(49)= 0.0181	T(49)=300.00	Z(49)= 3.4900
X(50)=0.9000	R(50)= 0.0181	T(50)=300.00	Z(50)= 3.4950
X(51)=0.9010	R(51)= 0.0180	T(51)=300.00	Z(51)= 3.5000
X(52)=0.9012	R(52)= 0.0180	T(52)=300.00	Z(52)= 3.5050
X(53)=0.9014	R(53)= 0.0179	T(53)=300.00	Z(53)= 3.5100
X(54)=0.9017	R(54)= 0.0179	T(54)=300.00	Z(54)= 3.5150
X(55)=0.9019	R(55)= 0.0178	T(55)=300.00	Z(55)= 3.5200
X(56)=0.9021	R(56)= 0.0178	T(56)=300.00	Z(56)= 3.5250

CALCULO DE LA CAIDA DE PRESION (CORRELACION DE LEVA)

$$Re^* = 0.076$$

$$L = 3.40$$

$$DP = \frac{2fm G^2 L(1-\epsilon)^{(3-n)}}{Dp \rho c \delta \epsilon^{(3-n)} \epsilon^3}$$

$$\begin{aligned}
 fm &= f(NRe^*) = 1,200.0000 \\
 \delta &= \text{area esf/superf real partic} = 0.09 \\
 n &= f(NRe^*) = 1.00
 \end{aligned}$$

$$DELTA P = 100.0770 \text{ [kgf/m}^2\text{]}$$

$$DELTA P = 0.1435 \text{ [psia]}$$

$$DELTA P = 0.0112 \text{ [psia]}$$

DESEA CALCULAR OTRO VALOR DP CON UNA LONGITUD DIFERENTE?

APENDICE E
(Cont.)

REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO

SIMULACION DEL REACTOR PARA LA OBTENCION DE "MTBE" REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO	E.Y.T.B. TESIS
---	-------------------

INTRODUZA LAS CONDICIONES DESEADAS

T 300.0 (K)
Diam. Particula... 0.420 (mm)
Capacidad de
Produccion MTBE... 5.00(TON/Año)
Peso catalizador.. 21.490(Kg)
Conversion..... 90%
Rel.Peso MeOH/i-Bu 4.00/1

FLUJO DE ALIMENTACION (gmo1/h)
FA = 20.0
FB = 7.2
*****GASTO INICIAL (lt/h)*****
QA = 1.2
QB = 161.7
QDT = 162.9
CONCENTRACIONES INIC.(gmo1/lt)
CA = 24.72
CB = 0.04
****FRACCIONES MOL INICIALES****
YA = 0.0000
YB = 0.2000

SIMULACION DEL REACTOR PARA LA OBTENCION DE "MRE"
 REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO

E.Y.T.B.
 TESIS

*****VELOCIDAD DE MINIMA FLUIDIZACION*****

$$RE_{mf}^2 + 7.67RE_{mf} + -18.02 = 0$$

$$e_{mf} = 0.3800$$

$$RE_{mf} = 1.8858$$

$$U_{mf} = 0.2337 \text{ cm/seg}$$

*****VELOCIDAD TERMINAL*****

A) $RE < 0.4$ B) $0.4 < RE < 500$ C) $500 < RE < 200,000$
 Elija su opción (A-C) #

$U_t = 2.24$
 $RE_t = 18.04$

Elijo correctamente la opción anterior? Y

Díámetro del reactor (m): 0.1023

Gradiente de velocidad relativa: 0.0100

U	t	Le(m)	(cm/seg)	REF	DP/Lpsig(gmol/seg ²)	LHSU(hr ⁻¹)	
0.25	0.38	5.72	0.2337	1.89	3.94	40.21	3.47
0.26	0.39	5.84	0.7523	6.87	12.14	129.44	3.39
0.27	0.41	5.96	0.7723	6.23	11.16	132.88	3.32
0.28	0.42	6.09	0.7923	6.39	10.29	136.33	3.26
→ 0.29	0.43	6.22	0.8123	6.56	9.52	139.77	3.19
0.30	0.44	6.35	0.8323	6.72	8.84	143.22	3.12
0.31	0.45	6.49	0.8523	6.88	8.23	146.66	3.06
0.32	0.47	6.63	0.8724	7.04	7.69	150.10	2.99
0.33	0.48	6.78	0.8924	7.20	7.20	153.55	2.92
0.34	0.49	6.93	0.9124	7.36	6.76	156.99	2.86
0.35	0.50	7.08	0.9324	7.52	6.35	160.43	2.80
0.36	0.51	7.24	0.9524	7.69	5.99	163.88	2.74
0.37	0.52	7.40	0.9724	7.85	5.66	167.32	2.68
0.38	0.53	7.57	0.9924	8.01	5.36	170.76	2.62
0.39	0.54	7.74	1.0124	8.17	5.08	174.21	2.56

RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES POR EL METODO DE RUNGE-KUTTA

L(m)= 6.22

 $\beta = 9.60$

DZ= 0.500

X(1)= 0.00

Z(1)= 0.00

X(2)=0.3681

R(2)= 1.0000

Z(2)= 0.50

X(3)=0.5826

R(3)= 0.2204

Z(3)= 1.00

X(4)=0.5942

R(4)= 0.1401

Z(4)= 1.50

X(5)=0.6623

R(5)= 0.1010

Z(5)= 2.00

X(6)=0.7155

R(6)= 0.0774

Z(6)= 2.50

X(7)=0.7582

R(7)= 0.0614

Z(7)= 3.00

X(8)=0.7931

R(8)= 0.0490

Z(8)= 3.50

X(9)=0.8221

R(9)= 0.0411

Z(9)= 4.00

X(10)=0.8465

R(10)= 0.0344

Z(10)= 4.50

X(11)=0.8671

R(11)= 0.0290

Z(11)= 5.00

X(12)=0.8846

R(12)= 0.0246

Z(12)= 5.50

X(13)=0.8996

R(13)= 0.0210

Z(13)= 6.00

APENDICE F

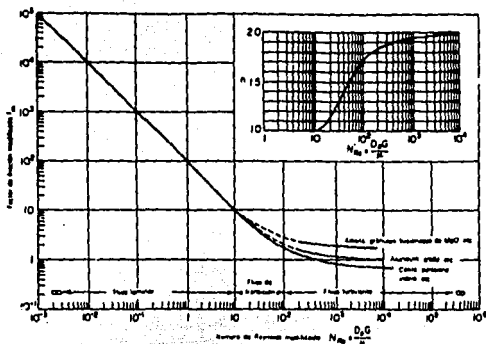


FIG 13. Factor de fricción para lechos sólidos. Ref [23].

Mátemal	Naturaleza del grano	ϕ_s
Espéritos de tambore de Arnd		0.2
Albáridas Berl		.3
Petro de carbón mineral (hasta 3/8 pulg)		.65
Petro de carbón mineral pulverizado		.73
Cerezo		.89
Petro de conductos de humo	Fundido, esférico	.89
Petro de conductos de humo	Fundido, no conglomerado	.55
Fibras de Fuxin		.38
Vidrio triturado	Denso	.83
Hojas de mica		.38
Anillos de Raschig		.3
Arena		
Promedio para varios tipos		.73
Arena de padernal	Denso	.85
Arena de padernal	Hojas dentadas	.43
Arena de Oitona	Cilindros	.85
Arena	Redondeado	.83
Arena	Angular	.73
Aguas de Wilcox	Denso	.80
Petro de longitudo		.89

*Valores tomados de Carman, *Trans Inst Chem Engn. (London)* 13, 130-146 (1937), excepto el valor de los anillos de Raschig que se tomó de Brown y colaboradores (*Unit Operations*, pág. 216, Wiley, Nueva York, 1950).

TABLA 13. Factores de forma para partículas no esféricas Ref[23].