

1720j

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA



DESARROLLO DE UN MODELO DE REACTOR CATALITICO DE CAMA FIJA Y
SIMULACION CON VARIABLES DE OPERACION

T E S I S

Que, para obtener el título de :

INGENIERO QUIMICO

P r e s e n t a :

GILBERTO CABALLERO GARCIA

MEXICO, D.F.

1990

FALLA DE ORIGEN



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.

CONTENIDO

- CAPITULO I. INTRODUCCION.
- CAPITULO II. DESARROLLO DE LOS MODELOS MATEMATICOS QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR CATALITICO DE CAMA FIJA.
- CAPITULO III. PRESENTACION DEL METODO NUMERICO EMPLEADO PARA RESOLVER LAS ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL REACTOR EN ESTUDIO.
- CAPITULO IV. FORMA DE EVALUAR CADA UNO DE LOS ELEMENTOS QUE INTERVIENEN EN LAS ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL REACTOR
- CAPITULO V. EJEMPLIFICACION DEL PROCESO DE ELABORACION DE UN PROGRAMA PARA COMPUTADORA QUE PERMITE PREDECIR EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR CATALITICO DE CAMA FIJA, MEDIANTE LA APLICACION DE LOS MODELOS DESARROLLADOS EN LOS CAPITULOS II, III Y IV. EJEMPLO ESPECIFICO: REACCION DE LA OXIDACION CATALITICA EN FASE GASEOSA DEL ANHIDRIDO SULFUROSO.
- CAPITULO VI. CAMBIOS QUE SE PRESENTAN EN UN REACTOR TUBULAR CATALITICO DE CAMA FIJA, CUANDO SE MODIFICA ALGUNA DE LAS VARIABLES DE OPERACION (SIMULACION).

CAPITULO VII. CONCLUSIONES.

CAPITULO VIII. BIBLIOGRAFIA.

CAPITULO I
INTRODUCCION

EN ESTE DOCUMENTO SE PRESENTA UN PROCEDIMIENTO DE ELABORACION DE UN PROGRAMA PARA COMPUTADORA EN LENGUAJE BASIC QUE PERMITE PREDECIR EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR CATALITICO DE CAMA FIJA, DENTRO DEL CUAL SE LLEVA A CABO UNA REACCION QUIMICA EN FASE GASEOSA SOBRE LA SUPERFICIE DE UN CATALIZADOR SOLIDO POROSO DE GEOMETRIA DEFINIDA, CON EL OBJETIVO DE PROPORCIONAR UN MATERIAL DE APOYO ACADEMICO PARA LOS ESTUDIANTES.

EL TRABAJO SE INICIA CON LA OBTENCION DE LOS MODELOS MATEMATICOS QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL TIPO DE REACTOR EN ESTUDIO, A PARTIR DE LA APLICACION DE LOS CORRESPONDIENTES BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA SOBRE ELEMENTOS DIFERENCIALES DE LOS TUBOS CONTENIDOS DENTRO DEL REACTOR, LOS CUALES, TOMAN EN CUENTA ALGUNAS SUPOSICIONES IMPORTANTES (FLUJO TIPO TAPON DE LOS GASES, PARTICULAS CATALITICAS OPERANDO EN CONDICIONES ISOTERMICAS Y OPERACION ADIABATICA EN CADA UNO DE LOS TUBOS DEL REACTOR).

UNA VEZ OBTENIDOS DICHOS MODELOS MATEMATICOS, SE PRESENTA EL METODO NUMERICO ELEGIDO PARA SU RESOLUCION, DESCRIBIENDOSE DETALLADAMENTE SU FORMA DE EMPLEO Y SE COMPRUEBA SU ROBUSTEZ MEDIANTE LA REALIZACION DE VARIAS CORRIDAS DE CALCULO, UTILIZANDO DIFERENTES TAMAOS PARA EL INTERVALO DE INTEGRACION DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES QUE NOS DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL REACTOR. TAMBIEN, SE PROPORCIONA EN FORMA DETALLADA, EL PROCEDIMIENTO DE CALCULO DE LAS CONDICIONES DE LA MEZCLA DE REACCION Y LOS AVANCES LOGRADOS POR LA REACCION EN LOS EXTREMOS FINALES DE LOS TRES PRIMEROS INCREMENTOS DE LA PRIMERA CAMA, LO CUAL, CONSTITUYE UNA GUIA QUE PERMITE LA COMPRENSION DEL PROCESO DE CALCULO, INCLUYENDOSE LOS ASPECTOS PROPIOS DE LA REACCION QUIMICA SELECCIONADA (CINETICA Y TERMODINAMICA) Y LA FORMA DE CONOCER EL VALOR DE LAS PROPIEDADES FISICAS DE LA MEZCLA DE REACCION A LAS CONDICIONES DE TRABAJO A LO LARGO DE LOS TUBOS DEL REACTOR.

EL TRABAJO INCLUYE CONCEPTOS DE GRAN IMPORTANCIA, COMO LO SON EL DE LA RAPIDEZ DE REACCION Y EL FACTOR DE EFECTIVIDAD DE LAS PARTICULAS CATALITICAS POROSAS.

EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO, SE ELABORO PARA EL CASO PARTICULAR DE LA REACCION DE OXIDACION DEL ANHIDRIDO SULFUROSO EN PRESENCIA DE OXIGENO SOBRE LA SUPERFICIE DE UN

CATALIZADOR SOLIDO POROSO DE PENTOXIDO DE VANADIO. TAL REACCION TIENE UNA GRAN IMPORTANCIA EN LA INDUSTRIA QUIMICA, YA QUE ES LA BASE PARA LA PRODUCCION DEL ACIDO SULFURICO. UNA VEZ ELABORADO EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO, ES UTILIZADO PARA ILUSTRAR LOS CAMBIOS QUE SE PRESENTAN DENTRO DEL REACTOR CUANDO SE MODIFICA ALGUNA DE LAS VARIABLES DE OPERACION; TODO ESTO A MANERA DE SIMULACION. LOS RESULTADOS ARROJADOS SE PRESENTAN EN FORMA DE TABLAS Y SUS CORRESPONDIENTES GRAFICOS DE TAL MANERA QUE SE PUEDAN APRECIAR CLARAMENTE LAS INFLUENCIAS DE LOS CAMBIOS DE ALGUNA DE LAS VARIABLES DE OPERACION DEL EQUIPO, SOBRE LOS FENOMENOS FISICOS DE TRANSPORTE DENTRO DE LAS PARTICULAS CATALITICAS Y EN GENERAL, SOBRE LA REACCION QUIMICA SELECCIONADA Y DE ESTA MANERA PODER OBTENER CONCLUSIONES IMPORTANTES A MANERA DE FORMACION ACADEMICA COMO OBJETIVO PRINCIPAL DEL PRESENTE TRABAJO.

AL FINAL SE PRESENTAN LAS CONCLUSIONES PERTINENTES, EN ESPERA DE PROPORCIONAR AL ALUMNO O AL LECTOR, UN MATERIAL QUE FACILITE LA COMPRESION DE LOS FENOMENOS QUE OCURREN DENTRO DE ESTE TIPO DE REACTOR, TODO LO ANTERIOR CON EL PROPOSITO DE PONER A DISPOSICION DE LOS ESTUDIANTES DE INGENIERIA QUIMICA VIII EN ESPECIAL, UN MATERIAL DE APOYO ACADEMICO, EN DONDE ESTOS EQUIPOS JUEGAN EL PAPEL PRINCIPAL.

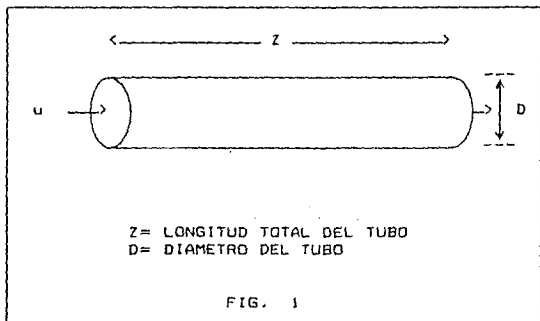
CAPITULO II

DESARROLLO DE LOS MODELOS MATEMATICOS QUE DESCRIBEN
EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR
CATALITICO DE CAMA FIJA

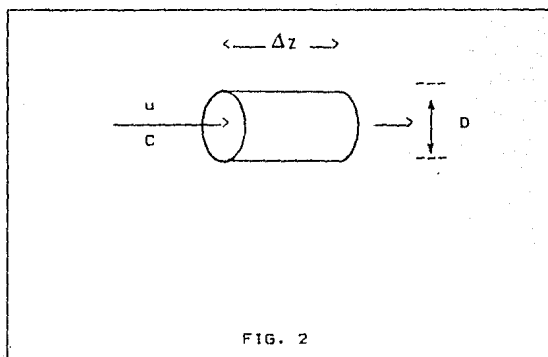
EN ESTA PRIMERA ETAPA DEL TRABAJO, SE OBTENDRAN LAS ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR CATALITICO DE CAMA FIJA, MEDIANTE LA APLICACION DE LOS PRINCIPIOS DE LA CONSERVACION DE LA MASA Y LA ENERGIA EN EL SISTEMA DE ESTUDIO.

EL TIPO DE REACTOR QUE SE ANALIZARA, CONSISTE EN UN HAZ DE TUBOS DE GEOMETRIA CILINDRICA, CUYO INTERIOR SE ENCUENTRA EMPACADO CON PARTICULAS SOLIDAS DE UN CATALIZADOR POROSO. PARA LA OBTENCION DE LOS MODELOS SE ANALIZARA SOLO UN TUBO, PARTIENDO DE LA BASE QUE LA DESCRIPCION DE LOS PROCESOS EN ESE TUBO SERA LA MISMA QUE EN TODOS LOS DEMAS.

LOS REACTIVOS ESTAN CONSTITUIDOS POR UNA MEZCLA GASEOSA, LA CUAL, PUEDE CONTENER ALGUNOS COMPONENTES INERTES (AQUELLOS QUE NO INTERVIENEN EN LA REACCION QUIMICA). TALES REACTIVOS DEBEN PASAR A TRAVES DEL LECHO EMPACADO CON LAS PARTICULAS DEL CATALIZADOR, EN CUYA SUPERFICIE INTERNA SE VERIFICA LA REACCION QUIMICA (VER FIG. 1).



AHORA, VAMOS A APLICAR EL BALANCE DE MASA EN UN ELEMENTO DIFERENCIAL DEL TUBO EN EL REACTOR, DE LONGITUD dz Y DIAMETRO D (FIG. 2).



u = VELOCIDAD DE LA MEZCLA GASEOSA DE REACTIVOS A TRAVES DEL LECHO EMPACADO (cm/s).

C = COMPOSICION DE LA MEZCLA GASEOSA.

EL PRINCIPIO DE CONSERVACION PARA CUALQUIER REACTOR, EXIGE QUE LA MASA DE CUALQUIER ESPECIE i EN UN ELEMENTO DE TUBO DE VOLUMEN dV , OBEDEZCA AL SIGUIENTE ENUNCIADO:

$$\left[\begin{array}{l} \text{GASTO DE} \\ \text{ALIMENTACION} \\ \text{DE "i" AL} \\ \text{ELEMENTO DE} \\ \text{VOLUMEN} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{GASTO DE} \\ \text{PRODUCCION} \\ \text{DE "i" EN EL} \\ \text{ELEMENTO DE} \\ \text{VOLUMEN} \end{array} \right] = \quad (2.1)$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{GASTO DE} \\ \text{ACUMULACION} \\ \text{DE "i" EN EL} \\ \text{ELEMENTO DE} \\ \text{VOLUMEN} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{GASTO DE} \\ \text{SALIDA DE "i"} \\ \text{DEL ELEMENTO} \\ \text{DE VOLUMEN} \end{array} \right]$$

ENTONCES, EL BALANCE DE MASA APLICADO AL ELEMENTO DIFERENCIAL DEL TUBO, ES EL SIGUIENTE:

$$\frac{-d(uCi)}{dz} = r_{si}/\rho B \quad (2.2)$$

DONDE r_{si} REPRESENTA LA RAPIDEZ MOLAR DE DESAPARICION DEL COMPONENTE i POR UNIDAD DE TIEMPO Y POR UNIDAD DE MASA DE CATALIZADOR; ρ_B ES LA DENSIDAD DE LA CAMA EN UNIDADES DE MASA DE CATALIZADOR POR UNIDAD DE VOLUMEN DE CAMA Y C_i ES LA CONCENTRACION MOLAR DEL COMPONENTE i EN LA MEZCLA GASEOSA.

LA CONCENTRACION DEL COMPONENTE i , LA PODEMOS EXPRESAR COMO:

$$C_i = Gq_i \quad (2.3)$$

EN DONDE G ES LA MASA VELOCIDAD DE LOS GASES, EXPRESADA EN UNIDADES DE MASA DE GAS POR UNIDAD TIEMPO Y DE SUPERFICIE TRANSVERSAL DE LA CAMA, MIENTRAS QUE q_i ES LA FRACCION MASA DEL COMPONENTE i EN LA MEZCLA.

SUSTITUYENDO LA EC. (2.3) EN LA (2.2) Y CUIDANDO DE MANTENER LA CONSISTENCIA EN LAS UNIDADES, OBTENEMOS:

$$\frac{d(Gq_i)}{dz} + M_i r_{si} / \rho_B = 0 \quad (2.4)$$

DONDE M_i REPRESENTA EL PESO MOLECULAR DEL COMPONENTE i . SE CONSIDERARA QUE LA MASA VELOCIDAD DE LOS GASES SERA CONSTANTE A LO LARGO DEL REACTOR, POR LO TANTO

$$\frac{dG}{dz} = 0 \quad (2.5)$$

AHORA, DEFINIMOS UNA CONVERSION VOLUMETRICA ξ COMO:

$$\xi = \left(\frac{q_i - q_{i0}}{M_i \rho_i} \right) \rho \quad (2.6)$$

LA CUAL, ESTA EXPRESADA EN MOLES DEL COMPONENTE i POR UNIDAD DE TIEMPO, POR UNIDAD DE MASA DE CATALIZADOR Y POR UNIDAD DE PRESION. AQUI, ρ Y ρ_i , REPRESENTAN LA DENSIDAD DE LA MEZCLA GASEOSA Y EL VALOR DEL COEFICIENTE ESTEQUIOMETRICO DEL COMPONENTE i , RESPECTIVAMENTE.

LA EC. (2.6) LA PODEMOS ARREGLAR EN LA FORMA

$$\xi \frac{M_i \rho_i}{\rho} = (q_i - q_{i0})$$

SI DIFERENCIAMOS LA EC. ANTERIOR SE OBTIENE

$$d\left(\frac{M_i v_i}{\rho}\right) = dq_i \quad (2.7)$$

AHORA, SUSTITUYENDO LA EC. (2.7) EN LA (2.4)

$$G \left(\frac{M_i v_i}{\rho}\right) \frac{d^2}{dz} + M_i r_{si} / \rho B = 0 \quad (2.8)$$

CANCELANDO TERMINOS COMUNES E INTEGRANDO

$$\frac{G v_i}{\rho B} \int_{z_0}^z \frac{d^2}{dz} = \int_{z_0}^z dz = z \quad (2.9)$$

$z =$ LONGITUD TOTAL DEL TUBO.

LA SOLUCION A LA EC. (2.9) NOS INDICA EL COMPORTAMIENTO DE LA VARIACION DE LA CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 A LO LARGO DEL TUBO.

AHORA, APLICAMOS EL BALANCE DE ENERGIA AL MISMO ELEMENTO DIFERENCIAL DEL TUBO.

PARA LA CONSERVACION DE LA ENERGIA EN LOS REACTORES, SE PUEDE ESCRIBIR UN ENUNCIADO SIMILAR AL DE LA CONSERVACION DE LA MASA, EN LA FORMA GENERAL:

$$\left[\begin{array}{l} \text{ENERGIA EN LAS} \\ \text{CORRIENTES DE} \\ \text{ENTRADA AL} \\ \text{ELEMENTO DE} \\ \text{VOLUMEN} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{ENERGIA TRANSFERIDA} \\ \text{DE LOS ALREDEDORES} \\ \text{AL ELEMENTO} \\ \text{DE VOLUMEN} \end{array} \right] = \quad (2.10)$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{ENERGIA EN LAS} \\ \text{CORRIENTES} \\ \text{QUE SALEN DEL} \\ \text{ELEMENTO DE} \\ \text{VOLUMEN} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{ACUMULACION DE} \\ \text{ENERGIA EN} \\ \text{EL ELEMENTO} \\ \text{DE VOLUMEN} \end{array} \right]$$

SE CONSIDERARA QUE EL REACTOR EN ESTUDIO OPERA EN CONDICIONES ADIABATICAS, LO CUAL IMPLICA QUE

$$\frac{dH}{dz} = 0 \tag{2.11}$$

DONDE H REPRESENTA LA ENTALPIA MOLAR DE LA MEZCLA GASEOSA

$$H = \Sigma(h_i n_i) \tag{2.11A}$$

h_i = ENTALPIA MOLAR DEL COMPONENTE i.
n_i = NUMERO DE MOLES DEL COMPONENTE i EN LA MEZCLA.

$$g_i = \frac{n_i M_i}{\Sigma(n_i M_i)}$$

ARREGLANDO

$$\begin{aligned} n_i &= \frac{g_i}{M_i} \Sigma(n_i M_i) \\ n_i &= \frac{g_i}{M_i} \bar{M} \end{aligned} \tag{2.11B}$$

ENTONCES

$$H = \bar{M} \Sigma(h_i g_i / M_i)$$

SUSTITUYENDO LA EC. ANTERIOR EN LA (2.11) SE OBTIENE

$$\frac{dH}{dz} = \bar{M} \left[\Sigma \frac{h_i}{M_i} \left(\frac{dg_i}{dz} \right) + \Sigma \frac{g_i}{M_i} \left(\frac{dh_i}{dz} \right) \right] = 0 \tag{2.12}$$

APLICANDO LA REGLA DE LA CADENA AL ULTIMO TERMINO DEL LADO DERECHO DE LA EC. (2.12), TENEMOS QUE

$$\frac{dH}{dz} = \bar{M} \left[\Sigma \frac{h_i}{M_i} \left(\frac{dg_i}{dz} \right) + \Sigma \frac{g_i}{M_i} \left(\frac{\partial h_i}{\partial T} \right) \left(\frac{dT}{dz} \right) \right] = 0 \tag{2.13}$$

SI DEFINIMOS QUE $x_i = \frac{V_i}{V} = \frac{n_i - n_{i0}}{n_i}$, USANDO (2.11B) Y SUSTITUYENDO EN (2.13) SE OBTIENE

$$\frac{dH}{dz} = \bar{M} \left[\Sigma \frac{h_i}{M_i} n_i \left(\frac{dx_i}{dz} \right) + \Sigma \frac{g_i}{M_i} \left(\frac{\partial h_i}{\partial T} \right) \frac{dT}{dz} \right] = 0 \tag{2.14}$$

SABEMOS QUE

8

$$\frac{\partial h_i}{\partial T} = C_{pi} = \text{CAPACIDAD CALORIFICA DEL COMPONENTE } i$$

Y TAMBIEN QUE

$$\Sigma(h_i \nu_i) = \text{ENTALPIA DE LA REACCION QUIMICA.}$$

SUSTITUYENDO AMBOS CONCEPTOS EN (2.14) Y ARREGLANDO TERMINOS

$$\frac{dx}{dz} (-\Delta H_r) + \frac{dT}{dz} \frac{\Sigma q_i C_{pi}}{M_i} = 0 \quad (2.15)$$

UTILIZANDO LA EC. (2.8) Y SABRIENDO QUE

$$\frac{q_i}{M_i} = \frac{C_i}{\rho}$$

LA EXPRESION (2.15) QUEDA COMO

$$\frac{r_{si} \rho B}{G_{vi}} (-\Delta H_r) + \frac{1}{\rho} \left(\frac{dT}{dz} \right) \Sigma(C_{pi} C_i) = 0 \quad (2.16)$$

SI $\Sigma(C_{pi} C_i) = C_{pC}$ E INTEGRANDO (2.16), OBTENEMOS

$$\frac{C_{pC} G_{vi}}{\rho \rho B \Delta H_r} \int_{T_0}^T \frac{dT}{-r_{si}} = \int_{Z_0}^Z dz = Z \quad (2.17)$$

FINALMENTE, HEMOS OBTENIDO LAS ECS. (2.9) Y (2.17) QUE NOS DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL REACTOR. DEBE OBSERVARSE QUE AMBAS EXPRESIONES DERIVAN DE ECUACIONES DIFERENCIALES Y QUE EN AMBAS APARECE EL TERMINO DE LA RAPIDEZ DE REACCION, EL CUAL, ES FUNCION DE LA CONVERSION VOLUMETRICA Y DE LA TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE INTERNA DEL CATALIZADOR T_s DONDE SE VERIFICA LA REACCION, POR TAL MOTIVO, LA SOLUCION DE LAS ECS. (2.9) Y (2.17) DEBERA SER EN FORMA SIMULTANEA Y DEBIDO A SU COMPLEJIDAD, SE DEBE RECURRIR A LA APLICACION DE UN METODO NUMERICO ADECUADO PARA LA INTEGRACION DE DICHAS ECUACIONES.

DEBE SEÑALARSE QUE SE SUPONDRÁ QUE LA PARTICULA
CATALITICA OPERARA ISOTERMICAMENTE.

CAPITULO III

METODO NUMERICO EMPLEADO PARA RESOLVER LAS
ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL
REACTOR

EN EL CAPITULO ANTERIOR YA SE HAN OBTENIDO LAS ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DE LA REACCION QUIMICA DENTRO DE LOS TUBOS DEL REACTOR EN ESTUDIO (ECS. 2.9 Y 2.17), A LAS QUE LLAMAREMOS TAMBIEN COMO "LAS ECUACIONES DE DISEÑO DEL REACTOR". ADEMÁS, SE HA DETECTADO QUE LA SOLUCION DE AMBAS DEBE SER EN FORMA SIMULTANEA MEDIANTE LA APLICACION DE UN METODO NUMERICO ADECUADO A LAS CARACTERISTICAS DE LAS MISMAS.

LAS ECUACIONES DE DISEÑO DEL TIPO DE REACTOR EN ESTUDIO, CONSTITUYEN UN SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES DE PRIMER ORDEN CON CONDICIONES INICIALES Y PARA SU SOLUCION, SE PUEDE EMPLEAR EL METODO DE RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN [1], CUYO ALGORITMO APLICADO A DICHAS ECUACIONES PARA UN ELEMENTO DIFERENCIAL DEL TURO ES EL SIGUIENTE :

LAS ECS. (2.9) Y (2.17) SE PUEDEN EXPRESAR EN LA FORMA

$$\Delta \dot{z} = \frac{\rho \rho_B r_{si}}{r_{ig}} (\Delta z) \quad (3.1)$$

$$\Delta T = \frac{\rho \rho_B r_{si} (-\Delta H_r)}{r_{ig} C_p C} (\Delta z) \quad (3.2)$$

SI DIVIDIMOS LA LONGITUD TOTAL DEL REACTOR Z EN "n" ELEMENTOS FINITOS Z, ENTONCES

$$\Delta z = z(n) - z(n-1) \quad ; \quad \Delta T = T_b(n) - T_b(n-1)$$

$$(n=1, 2, 3, \dots, N)$$

NOTA : LAS REFERENCIAS SEÑALADAS ENTRE CORCHETES ESTAN ANOTADAS AL FINAL DE CADA CAPITULO.

SUSTITUYENDO EN (3.1) Y (3.2) RESPECTIVAMENTE Y DESPEJANDO A $\xi(n)$ Y $T_b(n)$, SE OBTIENE

$$\xi(n) = \xi(n-1) + \frac{\rho P_B r_{si}}{v_i G} (\Delta Z) \quad (3.3)$$

$$T_b(n) = T_b(n-1) + \frac{\rho P_B r_{si} (-\Delta H_r)}{v_i G C_p C} (\Delta Z) \quad (3.4)$$

EL CALCULO DE $\xi(n)$ Y $T_b(n)$, SE PUEDE LOGRAR APLICANDO LAS SIGUIENTES EXPRESIONES QUE REQUIEREN CONTAR CON LAS CONDICIONES INICIALES DE LA CONVERSION VOLUMETRICA $\xi(0)$ Y DE LA TEMPERATURA EN EL SENDE DE MEZCLA GASEOSA $T_b(0)$, PARA EL PRIMER INCREMENTO:

$$\xi(n) = \xi(n-1) + (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) / 6 \quad (3.5)$$

$$T_b(n) = T_b(n-1) + (M_1 + 2M_2 + 2M_3 + M_4) / 6 \quad (3.6)$$

EN LAS DOS EXPRESIONES ANTERIORES, CADA CONSTANTE $K_1, K_2, K_3, K_4, M_1, M_2, M_3, M_4$ SE CALCULAN MEDIANTE

$$K_1 = \frac{\rho P_B r_{si}(\xi(0), T_b(0))}{v_i G} (\Delta Z) \quad (3.7)$$

$$M_1 = \frac{\rho P_B r_{si}(\xi(0), T_b(0)) (-\Delta H_r)}{v_i G C_p C} (\Delta Z) \quad (3.8)$$

$$K_2 = \frac{\rho P_B r_{si}(\xi(0) + k_1/2, T_b(0) + M_1/2)}{v_i G} (\Delta Z) \quad (3.9)$$

$$M_2 = \frac{\rho P_B r_{si}(\xi(0) + k_1/2, T_b(0) + M_1/2) (-\Delta H_r)}{v_i G C_p C} (\Delta Z) \quad (3.10)$$

$$K_3 = \frac{\rho P_B r_{si}(\xi(0) + k_2/2, T_b(0) + M_2/2)}{v_i G} (\Delta Z) \quad (3.11)$$

$$M_3 = \frac{\rho P_B r_{si}(\xi(0) + k_2/2, T_b(0) + M_2/2) (-\Delta H_r)}{v_i G C_p C} (\Delta Z) \quad (3.12)$$

$$K_4 = \frac{\rho P_B r_{si}(\xi_0 + k_3 T_b(0) + M_3)}{v_{iG}} (\Delta Z) \quad (3.13)$$

$$M_4 = \frac{\rho P_B r_{si}(\xi_0 + k_3 T_b(0) + M_3)}{v_{iG} C_{pC}} (-\Delta H_r) (\Delta Z) \quad (3.14)$$

CON LO ANTERIOR, PODEMOS PLANTEAR UNA SECUENCIA PARA LA SOLUCION EN FORMA NUMERICA DE LAS ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL REACTOR, DE LA SIGUIENTE MANERA:

- a) FIJAR LAS CONDICIONES INICIALES DE CONVERSION VOLUMETRICA ξ_0 Y TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA T_{b0} EN EL EXTREMO INICIAL DEL PRIMER ELEMENTO DE TUBO A CONSIDERAR .
- b) FIJAR UNA LONGITUD ΔZ PARA EL ELEMENTO DE TUBO A CONSIDERAR.
- c) FIJAR EL VALOR DE LA VELOCIDAD DE LA DE LA MEZCLA DE GASES QUE PASAN A TRAVES DEL TUBO Y LA DENSIDAD DE LA CAMA EMPACADA CON PARTICULAS DEL CATALIZADOR (g/cm^3).
- d) CALCULAR EL VALOR DE LA DENSIDAD DE LA MEZCLA DE GASES.
- e) CALCULAR EL VALOR DE LA RAPIDEZ DE REACCION PARA EL INCREMENTO DE TUBO A CONSIDERAR.
- f) CALCULAR EL VALOR DE $K_1, K_2, K_3, K_4, M_1, M_2, M_3, M_4$ PERTENECIENTES AL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTTA, MEDIANTE LA APLICACION DE LAS ECS. (3.2) A (3.14).
- g) OBTENER LOS VALORES DE CONVERSION VOLUMETRICA ξ_n Y TEMPERATURA DE LOS GASES T_{bn} EN EL EXTREMO FINAL DEL ELEMENTO DE TUBO QUE SE ESTE CONSIDERANDO, MEDIANTE LA APLICACION DE LAS ECS. (3.5) Y (3.6).
- h) TOMAR EL SIGUIENTE ELEMENTO DE TUBO A CONSIDERAR, ASIGNANDOLE COMO CONDICIONES INICIALES DE CONVERSION VOLUMETRICA Y TEMPERATURA DE LOS GASES, LOS VALORES CORRESPONDIENTES OBTENIDOS EN EL INCISO g.
- i) REPETIR EL PROCESO REGRESANDO AL INCISO c.

LA SECUENCIA ANTERIOR, FINALIZA CUANDO SE ALCANZA LA CONVERSION FRACCIONAL DE EQUILIBRIO QUE ESTABLECE LA TERMODINAMICA DE LA REACCION, O BIEN, HASTA ALCANZAR UN VALOR PREESTABLECIDO PARA LA PROFUNDIDAD DE LA CAMA Z, SEÑALÁNDOSE QUE

$$z = \sum_{j=1}^n (\Delta z_j) \quad ; \quad f_A = \frac{n_{i0} - n_i}{n_{i0}}$$

LOS VALORES QUE SE OBTIENEN DE CADA $\xi(n)$ Y $T_b(n)$ A LO LARGO DEL REACTOR, NOS INDICARAN EL PERFIL DE LA CONVERSION VOLUMETRICA ALCANZADA POR LA REACCION Y LA TEMPERATURA EN EL SENO DE LA CORRIENTE GASEOSA, RESPECTIVAMENTE.

REFERENCIAS PARA EL CAPITULO III

(1) ANALISIS NUMERICO
RICHARD L. BURDEN
GRUPO EDITORIAL IBEROAMERICA
pp. 249.

INGENIERIA DE LA CINETICA QUIMICA
J.M. SMITH
TERCERA EDICION EN ESPANOL
EDITORIAL C.E.C.S.A.
pp. 270.

CAPITULO IV

FORMA DE EVALUAR CADA UNO DE LOS TERMINOS
QUE INTERVIENEN EN LAS ECUACIONES QUE
DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL REACTOR

PRIMERO, SE PRESENTA UNA TABLA QUE CONTIENE CADA UNO DE LOS TERMINOS QUE INTERVIENEN EN LAS ECUACIONES QUE NOS DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL REACTOR, INDICANDOSE SUS UNIDADES EN EL SISTEMA CGS (TABLA 4.1).

PARA EL CALCULO DE ALGUNOS TERMINOS PERTENECIENTES A LAS ECUACIONES DE DISEÑO DEL REACTOR EN ESTUDIO, ES NECESARIO REALIZAR LA EVALUACION PREVIA DE OTROS, LOS CUALES APARECEN COMO INCISOS ADICIONALES AL PRINCIPAL, ESTO EN LA TABLA 4.1.

TABLA 4.1

- 4.1 RAPIDEZ DE REACCION PARA LA TOTALIDAD DEL GRANULO DE CATALIZADOR r_{pi} ; (gmol i / (s * gcat)).
- 4.1.1 TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR T_s ; (GRADOS CENTIGRADOS).
- 4.1.2 COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR HACIA LA PARTICULA DE CATALIZADOR h_i ; (cal/s * gcat * °C).
- 4.1.3 COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA HACIA LA PARTICULA DE CATALIZADOR K_m ; (gmol i / s * gcat * atm).
- 4.1.4 COEFICIENTE DE DIFUSIVIDAD DEL TIPO KNUDSEN $D_{K,eff}$; (cm²/s).
- 4.1.5 COEFICIENTE DE DIFUSIVIDAD ORDINARIA DENTRO DE LOS POROS DE LA PARTICULA DE CATALIZADOR D_i ; (cm²/s).
- 4.1.6 COEFICIENTE DE DIFUSIVIDAD EFECTIVA DENTRO DE LOS POROS DE LA PARTICULA DE CATALIZADOR $D_{i,eff}$; (cm²/s).
- 4.1.7 CONSTANTE DE EQUILIBRIO DE LA REACCION QUIMICA K_p ; (SUS UNIDADES SE DISCUTIRAN MAS ADELANTE).
- 4.1.8 MODULO TIPO THIELE ϕ_s ; (ADIMENSIONAL).
- 4.1.9 FACTOR DE EFECTIVIDAD DE LA PARTICULA DEL CATALIZADOR η ; (ADIMENSIONAL).

- 4.2 CONSTANTE CINETICA DE LA REACCION QUIMICA K_c ;
($\text{gmol l}^{-1}\text{s}^{-1}\text{qcat}^{-1}\text{atm}$).
- 4.3 DENSIDAD DE LA MEZCLA GASEOSA ρ ; (g/cm^3).
- 4.4 DENSIDAD DE LA CAMA EMPACADA CON LAS PARTICULAS DEL
CATALIZADOR ρ_B ; (g/cm^3).
- 4.5 MASA VELOCIDAD DE LOS GASES G ; ($\text{g/cm}^2\text{s}$).
- 4.6 VALOR DEL COEFICIENTE ESTEQUIOMETRICO DEL COMPONENTE i .
- 4.7 ENTALPIA DE REACCION ΔH_r ; (cal/gmol).
- 4.8 CALOR ESPECIFICO MEDIO DE LA MEZCLA GASEOSA $\overline{C_{pC}}$;
($\text{cal/cm}^3\text{C}$).

EVALUACION DE LA RAPIDEZ GLOBAL DE REACCION PARA LA
TOTALIDAD DE UNA PARTICULA DE CATALIZADOR r_{pi}

PRACTICAMENTE TODA LA SUPERFICIE ACTIVA DE LOS GRANULOS CATALITICOS POROSOS, ES INTERNA. LA REACCION QUIMICA QUE SE VERIFICA DENTRO DEL GRANULO CONSUME REACTIVOS Y DESPRENDE (O ABSORBE) EL CALOR DE REACCION. ESTE A SU VEZ, INDUCE GRADIENTES INTERNOS DE CONCENTRACION Y TEMPERATURA QUE PUEDEN SER DE MAGNITUD SUFICIENTE PARA CAUSAR UNA VARIACION SIGNIFICATIVA DE LA RAPIDEZ DE REACCION CON RESPECTO A LA POSICION EN EL INTERIOR DEL GRANULO.

A REGIMEN PERMANENTE, LA RAPIDEZ DE REACCION PROMEDIO PARA LA TOTALIDAD DEL GRANULO SERA IGUAL A LA RAPIDEZ TOTAL EN EL PUNTO DE LOCALIZACION DE DICHO GRANULO EN EL INTERIOR DEL LOS TUBOS DEL REACTOR. LA CONCENTRACION Y LA TEMPERATURA DEL FLUIDO GLOBAL EN ESTE PUNTO PUEDEN NO SER IGUALES A LAS QUE EXISTEN EN LA SUPERFICIE EXTERIOR DEL GRANULO. LO QUE SE DESEA ES EVALUAR UNA RAPIDEZ REPRESENTATIVA PARA LA TOTALIDAD DEL GRANULO, EN TERMINOS DE LAS PROPIEDADES GLOBALES CONOCIDAS DEL FLUIDO.

PUESTO QUE EXISTE UNA VARIACION CONTINUA DE LA CONCENTRACION Y LA TEMPERATURA CON EL RADIO DEL GRANULO, SE REQUIEREN ECUACIONES DIFERENCIALES DE CONSERVACION PARA DESCRIBIR LOS PERFILES DE CONCENTRACION Y TEMPERATURA. ESTOS PERFILES SE USAN CON LA ECUACION DE RAPIDEZ INTRINSECA PARA INTEGRAR CON RESPECTO AL DIAMETRO DEL GRANULO Y OBTENER ASI UNA RAPIDEZ REPRESENTATIVA PARA EL GRANULO.

LA TRANSFERENCIA INTRAGRANULAR DE MASA, GENERA UNA REDUCCION DE LA CONCENTRACION DEL REACTIVO EN EL INTERIOR DEL GRANULO. POR LO TANTO, LA RAPIDEZ GLOBAL ES MENOR A LA QUE EXISTIRIA SI NO HUBIERA UN GRADIENTE INTERNO DE CONCENTRACION. EL INCREMENTO DE TEMPERATURA AUMENTA LA RAPIDEZ DE LAS REACCIONES EXOTERMICAS. ESTO SE DEBE A QUE LAS TEMPERATURAS INTRAGRANULARES SERAN MAYORES QUE LAS SUPERFICIALES. PARA LAS REACCIONES ENDOTERMICAS, TANTO LOS GRADIENTES DE TEMPERATURA COMO LOS DE CONCENTRACION, REDUCEN LA RAPIDEZ DE REACCION A NIVELES INFERIORES A LOS QUE SE DETERMINAN PARA LA SUPERFICIE EXTERNA.

PARA UNA REACCION EN FASE GASEOSA QUE VAYA ACOMPAÑADA DE UN CAMBIO EN EL NUMERO DE MOLES, TAMBIEN SE DESARROLLA (A REGIMEN PERMANENTE) UN GRADIENTE INTRAGRANULAR DE PRESION TOTAL. SI EL NUMERO DE MOLES DISMINUYE, HABRA UN FLUJO DE REACTIVO HACIA EL CENTRO DEL GRANULO, CAUSADO POR ESTE GRADIENTE DE PRESION TOTAL. ESTO INCREMENTA LA DIFUSION DEL REACTIVO AL INTERIOR Y HACIA EL CENTRO DEL GRANULO, Y RETARDA LA DIFUSION DEL PRODUCTO HACIA EL EXTERIOR. A MENOS QUE LA DISMINUCION DEL NUMERO DE MOLES SEA MUY CONSIDERABLE, LO CUAL ES POCO PROBABLE EN LA MAYORIA DE LAS REACCIONES, EL EFECTO SOBRE LA RAPIDEZ PROMEDIO ES MUY PEQUEÑO. ADEMAS, DEBE RECORDARSE QUE LOS EFECTOS DEL TRANSPORTE INTRAGRANULAR SE VUELVEN IMPORTANTES A MEDIDA QUE AUMENTA EL TAMAÑO DEL GRANULO.

EL FACTOR DE EFECTIVIDAD DE LAS PARTICULAS CATALITICAS, INVOLUCRA LOS EFECTOS ANTES MENCIONADOS, Y POR LO TANTO, PRESENTAREMOS A CONTINUACION LA FORMA DE SU EVALUACION:

PRIMERO SE DEFINE FORMALMENTE AL FACTOR DE EFECTIVIDAD COMO

$$\eta = \frac{r_{pi}}{r_{si}} \quad (4.1)$$

LA RAPIDEZ DE REACCION LOCAL POR UNIDAD DE MASA DE CATALIZADOR r_{si} , PUEDE EXPRESARSE FUNCIONALMENTE COMO $r=f(C,T)$, DONDE C REPRESENTA SIMBOLICAMENTE LA CONCENTRACION DE TODOS LOS COMPONENTES INVOLUCRADOS, ENTONCES LA ECUACION PARA r_{pi} ES

$$r_{pi} = \eta f(C_s, T_s) \quad (4.2)$$

HABIENDO FORMULADO LA EC. ANTERIOR, EL OBJETIVO AHORA PASA A SER LA EVALUACION DE η PARA CONOCER EL VALOR DE r_{pi} . UNA VEZ QUE SE CONOZCA η , LA EC. (4.2) DARA LA RAPIDEZ PARA LA TOTALIDAD DEL GRANULO EN TERMINOS DE LA TEMPERATURA Y LA CONCENTRACION EN SU SUPERFICIE EXTERNA, ENTONCES, SE PUEDE EXPRESAR LA RAPIDEZ DE REACCION r_{si} EN TERMINOS DE LA TEMPERATURA Y LA CONCENTRACION DE CADA ESPECIE DEL FLUIDO GLOBAL, TOMANDO EN CUENTA LAS RESISTENCIAS EXTERNAS A LA TRANSFERENCIA DE MASA Y CALOR.

VAMOS A HACER PRIMERO EL ANALISIS PARA UNA REACCION IRREVERSIBLE DE PRIMER ORDEN A ----> B, COMO APOYO, PARA LUEGO LLEGAR AL CASO QUE NOS OCUPARA, EL CUAL, ES EL DE UNA REACCION REVERSIBLE.

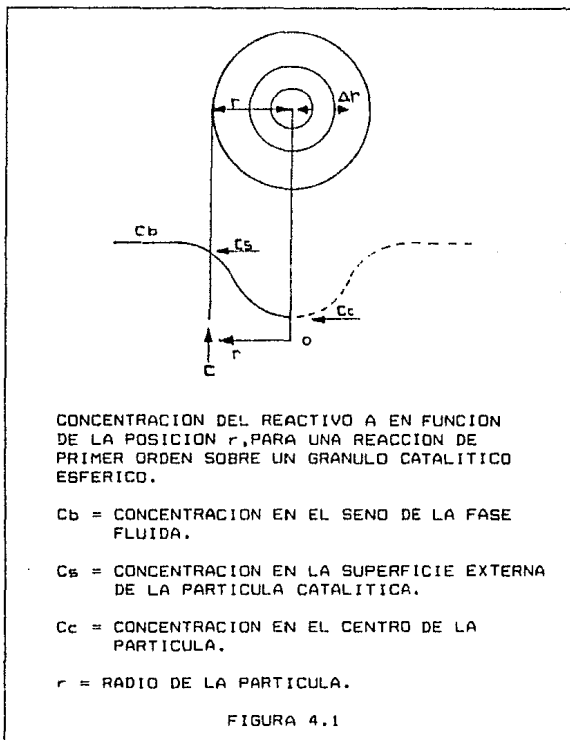
HAREMOS LAS SIGUIENTES CONSIDERACIONES:

- a) LA PARTICULA POROSA DEL CATALIZADOR TIENE UNA GEOMETRIA ESFERICA.
- b) LA PARTICULA DEL CATALIZADOR SE MANTIENE BAJO CONDICIONES ISOTERMICAS.
- c) LA DIFUSION DE LAS DIFERENTES ESPECIES INVOLUCRADAS EN LA REACCION, PUEDE SER REPRESENTADA POR UNA EXPRESION SIMILAR A LA PRIMERA LEY DE FICK CON UN COEFICIENTE DE DIFUSIVIDAD EFECTIVA GLOBAL, OSEA [1]

$$\text{FLUX} = -D_{eff} \frac{dc}{dr} \quad (4.3)$$

d) HAY CONDICIONES DE ESTADO ESTACIONARIO DE TRANSPORTE DE MASA Y CALOR EN LA PARTICULA.

AHORA, EL PRIMER PASO CONSISTE EN DETERMINAR EL PERFIL DE CONCENTRACIONES DE LA ESPECIE A DENTRO DEL GRANULO DE CATALIZADOR, LO CUAL SE MUESTRA EN LA FIGURA 4.1



LA ECUACION DIFERENCIAL QUE EXPRESA EL VALOR DE LA CONCENTRACION DE A EN FUNCION DE RADIO r , SE OBTIENE ESCRIBIENDO UN BALANCE DE MASA PARA EL VOLUMEN DE UNA CAPA ESFERICA DE ESPESOR IGUAL A Δr . A REGIMEN PERMANENTE, LA VELOCIDAD DE DIFUSION DE ENTRADA AL ELEMENTO, MENOS LA RAPIDEZ DE DIFUSION DE SALIDA DEL MISMO, SERA IGUAL A LA

RAPIDEZ DE DESAPARICION DEL REACTIVO DENTRO DEL ELEMENTO. ESTA RAPIDEZ SERA $\rho_D k_c c_A$ POR UNIDAD DE VOLUMEN, DONDE ρ_D ES LA DENSIDAD DEL GRANULO. POR LO TANTO, EL BALANCE PUEDE ESCRIBIRSE OMITIENDO EL SUBINDICE A DE C EN LA SIGUIENTE FORMA

$$-4\pi r^2 D_{eff} \left(\frac{dc}{dr} \right)_r - 4\pi r^2 D_{eff} \left(\frac{dc}{dr} \right)_{(r+\Delta r)} = 4\pi r^2 \rho_D \Delta r k_c c \quad (4.4)$$

SI TOMAMOS EL LIMITE COMO $\Delta r \rightarrow 0$ Y SUPONEMOS QUE LA DIFUSIVIDAD EFECTIVA ES INDEPENDIENTE DE LA CONCENTRACION DEL REACTIVO, ESTA ECUACION DIFERENCIAL SE TRANSFORMA EN

$$\left(\frac{d^2c}{dr^2} \right) + \frac{2}{r} \left(\frac{dc}{dr} \right) - \frac{k_c \rho_D c}{D_{eff}} = 0 \quad (4.5)$$

EN EL CENTRO DEL GRANULO, LA SIMETRIA REQUIERE QUE

$$\left(\frac{dc}{dr} \right) = 0 \quad \text{A} \quad r = 0 \quad (4.6)$$

Y EN LA SUPERFICIE EXTERIOR

$$c = c_s \quad \text{A} \quad r = r_s \quad (4.7)$$

LA ECUACION DIFERENCIAL LINEAL (4.5) CON LAS CONDICIONES LIMITE (4.6) Y (4.7), PUEDE RESOLVERSE POR MEDIO DE METODOS CONVENCIONALES [2] PARA OBTENER

$$\frac{c}{c_s} = \frac{r}{r_s} \left[\frac{\text{senh}(3\varphi_s r/r_s)}{\text{senh}(3\varphi_s)} \right] \quad (4.8)$$

DONDE φ_s ES UN GRUPO ADIMENSIONAL LLAMADO MODULO TIPO "THIELLE" PARA UN GRANULO ESFERICO, DEFINIDO POR

$$\varphi_s = \frac{r_s}{3} \sqrt{\frac{k_c \rho_D c_s}{D_{eff}}} \quad (4.9)$$

DONDE S_g ES EL AREA ESPECIFICA DE LA PARTICULA POROSA EN UNIDADES DE SUPERFICIE POR UNIDAD DE MASA DE CATALIZADOR.

EL SEGUNDO PASO CONSISTE EN USAR EL PERFIL DE CONCENTRACIONES TAL COMO LO DA LA EC. (4.8), PARA EVALUAR LA RAPIDEZ DE REACCION PARA LA TOTALIDAD DEL GRANULO, CALCULANDO LA VELOCIDAD DE DIFUSION DEL REACTIVO HACIA EL INTERIOR DE LA PARTICULA POROSA EN $r=r_s$. ENTONCES

$$r_{pi} = \frac{1}{m_p} 4\pi r_s^2 D_{eff} \left(\frac{dc}{dr} \right)_{r=r_s} = \frac{3}{r_s \rho_p} D_{eff} \left(\frac{dc}{dr} \right)_{r=r_s} \quad (4.10)$$

DONDE LA MASA DE LA PARTICULA ES, $m_p = 4/3 \pi r_s^3 \rho_p$

AHORA BIEN, DE LA EC. (4.1)

$$\eta = \frac{3 D_{eff}}{r_s \rho_p k_c C_s} \left(\frac{dc}{dr} \right)_{r=r_s} \quad (4.11)$$

DIFERENCIANDO LA EC. (4.8), EVALUANDO LA DERIVADA A $r=r_s$ Y SUSTITUYENDO EN LA EC. (4.1) SE OBTIENE

$$\eta = \frac{1}{\phi_s} \left[\frac{1}{\tanh(3\phi_s)} - \frac{1}{3\phi_s} \right] \quad (4.12)$$

PARA NUESTRO CASO DE ESTUDIO QUE ES EL DE UNA REACCION REVERSIBLE, SE HA LLEGADO A LA SIGUIENTE EXPRESION PARA EL MODULO TIPO THIELLE [3]

$$\phi_s = dp/6 \sqrt{\frac{K_c S_g \rho_p (K_p + 1)}{D_{eff} K_p}} \quad (4.13)$$

DONDE

dp = DIAMETRO DE LA PARTICULA.

K_c = CONSTANTE CINETICA, EVALUADA A LA TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR.

S_g = AREA ESPECIFICA DE LA PARTICULA POR UNIDAD DE MASA DE CATALIZADOR.

FINALMENTE, EL VALOR DEL FACTOR DE EFECTIVIDAD SE OBTIENE EVALUANDO ϕ_s MEDIANTE LA EC. (4.13) Y LUEGO SUSTITUYENDO EN (4.12).

EN EL ESTADO ESTACIONARIO DE TRANSPORTE DE MASA Y CALOR
EN LA PARTICULA, SE CUMPLEN LOS CORRESPONDIENTES BALANCES:

"BALANCE DE ENERGIA"

$$T_s - T_b = \frac{K_{mam}(C_b - C_s)(-\Delta H_r)}{h_{am}} \quad (4.14)$$

SI SE APROXIMA QUE $P_b \approx P_s$ Y CANCELANDO TERMINOS SE OBTIENE

$$T_s - T_b = \frac{K_m}{h} (P_b - P_s)(-\Delta H_r) \quad (4.15)$$

A REGIMEN PERMANENTE, LA RAPIDEZ DE REACCION ES IGUAL AL
TRANSPORTE DE MASA EN LA INTERFASE PARTICULA-FLUIDO, ENTONCES

"BALANCE DE MASA"

$$K_c P_s = K_{mam}(P_b - P_s)$$

DESPEJANDO A P_s

$$P_s = \frac{K_{mam} P_b}{K_{mam} + K_c} \quad (4.16)$$

SUSTITUYENDO (4.16) EN (4.15)

$$T_s - T_b = \frac{K_{mam}}{h_{am}} \left(P_b - \frac{K_{mam} P_b}{K_{mam} + K_c} \right) (-\Delta H_r) \quad (4.17)$$

SI SE ARREGLA EL LADO DERECHO DE LA ECUACION ANTERIOR

$$T_s - T_b = \frac{K_m}{h} \left(\frac{P_b(K_{mam} + K_c) - K_{mam} P_b}{K_{mam} + K_c} \right) (-\Delta H_r)$$

$$T_s - T_b = \frac{K_m}{h} \left(\frac{P_b K_c}{K_m + K_c} \right) (-\Delta H_r)$$

SI $C_b \approx C_s$, ENTONCES

$$T_s = T_b + \left(\frac{K_m}{h} \right) \left(\frac{P_b K_c}{K_m + K_c} \right) (-\Delta H_r) \quad (4.18)$$

EL PROCEDIMIENTO PARA UTILIZAR LA EC. (4.18) CON EL FIN DE ENCONTRAR LA TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR, ES EL SIGUIENTE:

- a) CONOCIENDO LA TEMPERATURA EN EL SENDO DE LA FASE FLUIDA T_b , SE SUPONE UNA TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR, OSEA

$$\Delta T_{sup} = T_s - T_b$$

- b) SE OBTIENE UNA TEMPERATURA MEDIA $T_m = (T_s + T_b) / 2$.
- c) SE EVALUA K_c Y K_p A LA TEMPERATURA SUPUESTA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR.
- d) SE CALCULA EL VALOR DE LOS COEFICIENTES DE TRANSPORTE DE MASA (K_m) Y CALOR (h) A LA TEMPERATURA MEDIA OBTENIDA EN EL INCISO b.
- e) SE CALCULA EL VALOR DE ΔT_{calc} , MEDIANTE LA EC. (4.18)

$$\Delta T_{calc} = \left(\frac{K_m}{h} \right) \left(\frac{K_c P_b}{K_m + K_c} \right) (-\Delta H_r)$$

- f) SE COMPARAN LOS VALORES DE ΔT_{sup} CON ΔT_{calc} , Y SI SON IGUALES O MUY CERCANOS ENTRE SI, ENTONCES LA TEMPERATURA SUPUESTA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR SERA LA CORRECTA. EN CASO CONTRARIO, SE SUPONE OTRA TEMPERATURA Y SE REPITE EL PROCESO ANTERIOR HASTA SATISFACER QUE $\Delta T_{sup} \approx \Delta T_{calc}$.

COMO SE PUEDE OBSERVAR, LO ANTERIOR IMPLICA UN PROCESO ITERATIVO, EL CUAL ESTARA CONTENIDO EN EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO.

UNA VEZ ENCONTRADA LA TEMPERATURA CORRECTA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR, YA SE PUEDE CALCULAR EL VALOR DEL COEFICIENTE DE DIFUSIVIDAD EFECTIVA EN LOS POROS DE LA PARTICULA MEDIANTE [4]:

$$D_{eff} = \frac{1}{(1/DK_{,eff}) + (1/D12_{,eff})} \quad (4.19)$$

DONDE

$DK_{,eff}$ = COEFICIENTE DE DIFUSIVIDAD EFECTIVA DEL TIPO KNUDSEN, PROCESO QUE SE PRESENTA DENTRO DE LOS POROS PEQUEÑOS DEL CATALIZADOR.

$D12_{,eff}$ = COEFICIENTE DE DIFUSIVIDAD EFECTIVA ORDINARIA DENTRO DE LOS POROS DEL CATALIZADOR.

PARA EL CALCULO DE $DK_{,eff}$ Y $D12_{,eff}$, SE CUENTA CON LAS SIGUIENTES EXPRESIONES [5]

$$DK_{,eff} = 19400 \frac{\theta^2}{\tau Sg \rho_p} \sqrt{\frac{T}{M}} \quad (4.20)$$

$$D12_{,eff} = D12 \frac{\theta}{\tau} \quad (4.21)$$

AQUI,

θ = POROSIDAD DEL CATALIZADOR O VOLUMEN HUECO DEL MISMO.

τ = FACTOR DE TORTUOSIDAD, EL CUAL INVOLUCRA EL EFECTO DE LA VARIACION DE LA SECCION TRANSVERSAL DE LOS POROS INDIVIDUALES DEL CATALIZADOR.

T = TEMPERATURA ABSOLUTA.

$D12$ = COEFICIENTE DE DIFUSION ORDINARIA.

$$D12 = \frac{0.0018583 T^{(3/2)}}{P_T} \frac{(1/\sigma_A + 1/\sigma_B)^{(1/2)}}{\sigma_{AB} \Omega_{AB}} \quad (4.22)$$

σ_A, σ_B = PARAMETROS LENARD-JONES (A).

$$\sigma_{AB} = (\sigma_A + \sigma_B)/2$$

Ω_{AB} = INTEGRAL DE COLISION, QUE DEBE SER IGUAL A LA UNIDAD SI LAS MOLECULAS FUERAN ESFERAS RIGIDAS.

$$\frac{k_{BT}}{\epsilon_{AB}} = \left[\frac{T(^{\circ}K)}{(\epsilon/kB)A * (\epsilon/kB)B} \right]$$

(ϵ/kB) SE OBTIENE EN LAS TABLAS QUE CONTIENEN PARAMETROS DE LENARD-JONES [6].

UNA VEZ OBTENIDO EL VALOR DE (k_{BT}/ϵ_{AB}) , SE LEE EL CORRESPONDIENTE A Ω_{AB} EN LA MISMA TABLA A QUE SE HIZO REFERENCIA ARRIBA.

FINALMENTE, CONOCIENDO LOS VALORES DE D_{eff} , K_c , S_g , ρ_p Y K_p SE PUEDE CALCULAR EL MODULO TIPO THIELLE MEDIANTE LA EC. (4.9) Y POR CONSIGUIENTE, EL VALOR DEL FACTOR DE EFECTIVIDAD, NECESARIO PARA CONOCER LA MAGNITUD DE LA RAPIDEZ DE REACCION.

CALCULO DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA

PARA UN REACTOR DE CAMA FIJA, UN FLUIDO QUE PASA BARRIENDO LA SUPERFICIE DE UNA PARTICULA, DESARROLLA UNA CAPA EN LA FRONTERA, EN LA CUAL, LA VELOCIDAD PARALELA A LA SUPERFICIE VARIA RAPIDAMENTE CON LA DISTANCIA NORMAL A LA SUPERFICIE. LA VELOCIDAD DEL FLUIDO ES CERO EN LA SUPERFICIE DEL SOLIDO, PERO EN UN PLANO NO MUY LEJANO DE LA SUPERFICIE (USUALMENTE MENOS DE UN MILIMETRO) LA VELOCIDAD DEL FLUIDO ES APROXIMADAMENTE LA DE LA CORRIENTE DE BULTO Y TANTO REACTIVOS COMO PRODUCTOS SON TRANSPORTADOS A UNA RAPIDEZ QUE DEPENDE DE LA NATURALEZA DEL FLUJO (NR_e).

MUY CERCA DE LA SUPERFICIE, LA VELOCIDAD DEL FLUIDO ES BAJA Y HAY POCO MEZCLADO; EL TRANSPORTE NORMAL A LA SUPERFICIE ES POR DIFUSION MOLECULAR. EN LA CORRIENTE PRINCIPAL DEL FLUIDO, LA TRANSFERENCIA DE MASA ES INDEPENDIENTE DEL VALOR DEL COEFICIENTE DE DIFUSION MOLECULAR D_{12} , PERO MUY CERCA DE LA SUPERFICIE, LA RAPIDEZ ES PROPORCIONAL A DICHO COEFICIENTE. DEBE ANTICIPARSE QUE EL PROCESO GLOBAL DE TRANSPORTE ENTRE LA PARTICULA Y EL FLUIDO, ES ENCONTRADO EXPERIMENTALMENTE PARA SER PROPORCIONAL A $(D_{12})^n$, DONDE n ESTA ENTRE CERO Y LA UNIDAD [7].

LOS DATOS SOBRE TRANSFERENCIA DE MASA DEL FLUIDO AL SOLIDO, SON COMUNMENTE EXPRESADOS EN TERMINOS DE UN COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA DEFINIDO POR

$$N = K(C_b - C_s) \quad (4.23)$$

DONDE N ES EL FLUX DE DIFUSION DEL ELEMENTO EN CUESTION, FLUIDO A SOLIDO ($\text{mol/s} \cdot \text{cm}^2$). C_s ES LA CONCENTRACION EN LA SUPERFICIE Y C_b ES LA CONCENTRACION EN EL SENO DEL FLUIDO.

EN SISTEMAS GASEOSOS, EL POTENCIAL SE TOMA COMO LA DIFERENCIA DE LAS PRESIONES PARCIALES DE LA SUSTANCIA QUE SE DIFUNDE Y ES CONVENIENTE DEFINIR UN COEFICIENTE KG MEDIANTE

$$N = KG(P_b - P_s)$$

DONDE $KG = (K/RT)$

LAS CONSIDERACIONES DIMENSIONALES SUGIEREN LAS SIGUIENTES COMO LAS BASES PARA LA CORRELACION DE DATOS SOBRE TRANSFERENCIA DE MASA

$$\frac{K d_p}{D_{12}} = f(N_{Re}, N_{Sc})$$

d_p ES UNA DIMENSION ASOCIADA AL PASAJE DEL FLUIDO (TOMADA COMO EL DIAMETRO O DIAMETRO EQUIVALENTE DE LAS PARTICULAS DE UNA CAMA FIJA).

LOS NUMEROS ADIMENSIONALES DE REYNOLDS (N_{Re}) Y DE SCHMIDT (N_{Sc}), ESTAN DEFINIDOS POR

$$N_{Re} = (d_p G / \mu) \quad (4.24)$$

$$N_{Sc} = [(\mu / \rho D_{12})] \quad (4.25)$$

AQUI, μ Y ρ SON LA VISCOSIDAD Y LA DENSIDAD, RESPECTIVAMENTE DEL FLUIDO; D_{12} ES EL COEFICIENTE DE DIFUSION MOLECULAR PARA LAS ESPECIES QUE SE DIFUNDEN Y G ES LA VELOCIDAD DE LA MASA DEL FLUIDO EN UNIDADES DE MASA POR UNIDAD DE TIEMPO Y DE SUPERFICIE DE LA SECCION TRANSVERSAL NORMAL AL FLUJO.

EXPERIMENTALMENTE SE HA PRESENTADO QUE j_K ES APROXIMADAMENTE PROPORCIONAL A $(D_{12})^{(2/3)}$ EN UN AMPLIO RANGO DE VALORES DEL NUMERO DE SCHMIDT, LA ECUACION CORRESPONDIENTE SE REDUCE ENTONCES A

$$\frac{j_K \rho}{G} N_{Sc}^{(2/3)} = f(N_{Re}) \quad (4.26)$$

O BIEN

$$\frac{KGP}{GM} N_{Sc}^{(2/3)} = f(N_{Re}) \quad (4.27)$$

DONDE P ES LA PRESION TOTAL Y GM ES LA VELOCIDAD MOLAR DE LOS GASES.

LAS FORMAS (4.26) Y (4.27) FUERON PROPUESTAS POR CHILTON Y COLBURN EN 1934 COMO UNA BASE PARA LA CORRELACION DE DATOS SOBRE TRANSFERENCIA DE MASA Y HAN SIDO USADAS AMPLIAMENTE PARA REPRESENTAR LOS RESULTADOS CON MUCHOS SISTEMAS DIFERENTES, INVOLUCRANDO VARIAS GEOMETRIAS Y CONDICIONES DE FLUJO. ES MUY COMUN PRESENTAR EL GRUPO JD CONTRA EL NUMERO DE REYNOLDS, DONDE

$$jD = \frac{j_K \rho}{G} N_{Sc}^{2/3} = \frac{KGP}{GM} N_{Sc}^{2/3} \quad (4.28)$$

CALCULO DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR

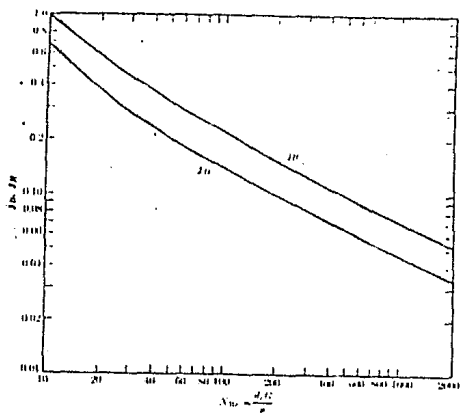
EL CALOR Y LA MASA SON TRANSFERIDOS ENTRE UN SOLIDO Y UN FLUIDO POR MECANISMOS SIMILARES, Y LOS DATOS SOBRE TRANSFERENCIA DE CALOR EN CAMAS FIJAS SON CORRELACIONADOS EN LA MISMA FORMA QUE QUE LOS DATOS DE TRANSFERENCIA DE MASA. LA FIG. 4.2 PRESENTA LOS RESULTADOS DE MEDICIONES EXPERIMENTALES SOBRE TRANSFERENCIA DE CALOR EN CAMAS FIJAS, COMO UNA FORMA RESUMIDA HECHA POR deACETIS Y THODOS, EN LA FORMA DE UN GARFICO DE j_h CONTRA N_{Re} , DONDE

$$j_h = \frac{h}{C_{pG}} N_{Pr}^{2/3}$$

$$h = \frac{q}{(T_s - T_b)}$$

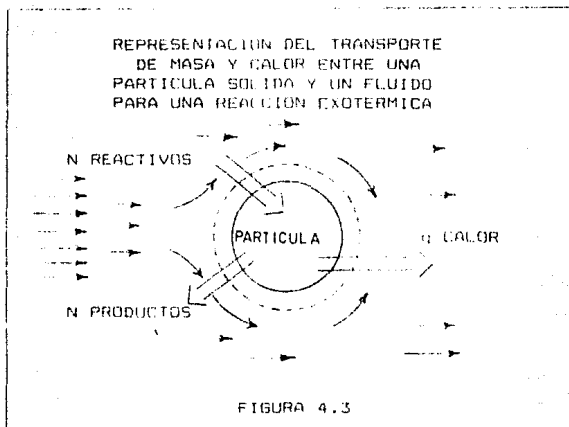
$$N_{Pr} = (C_p \mu / K)$$

AQUI, h ES EL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR, q ES EL FLUX DE CALOR (POR UNIDAD DE SUPERFICIE DE PARTICULA), C_p ES LA CAPACIDAD CALORIFICA POR UNIDAD DE MASA DE FLUIDO, N_{Pr} ES EL NUMERO ADIMENSIONAL DE PRANDTL, T_s ES LA TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE DE LA PARTICULA, T_b ES LA TEMPERATURA EN EL SENO DE LA CORRIENTE GASEOSA Y K ES LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DEL FLUIDO.



Variation of J_h and $J_{h'}$ with Reynolds number in fixed beds

FIGURA 4.2



PROPIEDADES FISICAS

* CALCULO DE LA DENSIDAD DE LA MEZCLA GASEOSA *

LA VARIACION DE LA DENSIDAD MOLAR DE LOS GASES SE DEBE AL CAMBIO EN EL NUMERO DE MOLES TOTALES EN LA MEZCLA, PROVOCADO POR EL AVANCE DE LA REACCION QUIMICA, AL CAMBIO EN LA COMPOSICION Y AL CAMBIO EN LA TEMPERATURA, QUE SE VERIFICAN A LO LARGO DE LOS TUBOS.

1) EFECTO DEL CAMBIO DE LA TEMPERATURA SOBRE LA DENSIDAD.

LA DENSIDAD DE LA MEZCLA SE PUEDE EXPRESAR MEDIANTE

$$\rho = \sum (q_i \rho_i)$$

EN DONDE ρ_i ES LA DENSIDAD DEL COMPONENTE i A UN VALOR DE TEMPERATURA DADO.

SI SE SUPONE QUE LA MEZCLA DE GASES SE COMPORTA EN FORMA IDEAL, ENTONCES

$$g_1 = g_{10}(1-f_A)$$

SE OBSERVA QUE SE NECESITA CONTAR CON LOS VALORES CORRESPONDIENTES DE FRACCION MASA Y DENSIDAD DE LOS DIFERENTES COMPONENTES DE LA MEZCLA A LAS TEMPERATURAS Y CONVERSIONES DE INTERES.

11) EFECTO DEL CAMBIO DEL NUMERO DE MOLES PRODUCIDO POR EL AVANCE DE LA REACCION SOBRE LA DENSIDAD.

EL CAMBIO DEL NUMERO DE MOLES EN LA MEZCLA DE REACCION, SE PUEDE CUANTIFICAR MEDIANTE

$$\delta = (n_{f=1} - n_0)/n_0 \quad \text{Y} \quad \rho_1 = \rho_1(T)$$

DONDE

δ = CAMBIO DE MOLECULARIDAD

$n_{f=1}$ = NUMERO DE MOLES TOTALES EN LA MEZCLA CUANDO LA CONVERSION ES DEL 100%.

n_0 = NUMERO DE MOLES TOTALES INICIALES.

SE DEBE TOMAR EN CUENTA EL CAMBIO EN LA MOLECULARIDAD DEBIDO A QUE ESTO AFECTA DIRECTAMENTE AL VOLUMEN TOTAL DE LA MEZCLA Y COMO CONSECUENCIA, A LA DENSIDAD: DE ESTA MANERA, SE EXPRESA EL VOLUMEN MOLAR COMO

$$V = V_0(1 + \delta f_A)$$

EN LA EXPRESION ANTERIOR, EL PRODUCTO δf_A SE PUEDE INTERPRETAR COMO UN FACTOR DE COMPRESION O EXPANSION DE LA MEZCLA GASEOSA Y DEBERA SER CONSIDERADO PARA OBSERVAR SU INFLUENCIA SOBRE LA DENSIDAD.

EVALUACION DE LA DENSIDAD DE LA CAMA EMPACADA CON
PARTICULAS DEL CATALIZADOR ρ_B .

PRIMERO SE TIENE QUE SELECCIONAR UN TIPO DE PARTICULA CATALITICA DE GEOMETRIA DEFINIDA Y DENSIDAD ρ_p CONOCIDAS.

DESPUES, SE DEBE INVESTIGAR O DETERMINAR EN FORMA EXPERIMENTAL LA FRACCION HUECA ϵ DE UNA COLUMNA EMPACADA CON LAS PARTICULAS CATALITICAS. FINALMENTE, LA DENSIDAD DE LA CAMA SE DETERMINA MEDIANTE LA EXPRESION

$$\rho_B = \rho_p(1 - \epsilon)$$

VELOCIDAD DE LA MASA DE LOS GASES

ESTA SE ESCOGE PARA MINIMIZAR LAS RESISTENCIAS EXTERNAS AL TRANSPORTE.

ENTALPIA DE LA REACCION

ESTE VALOR ES ESPECIFICO DE CADA REACCION Y SE BUSCA EN LA LITERATURA; SUS UNIDADES SON DE ENERGIA POR MOLES TRANSFORMADOS.

VALOR DEL COEFICIENTE ESTEQUIOMETRICO ν_i .

EL VALOR DEL COEFICIENTE ESTEQUIOMETRICO ν_i PARA CADA ESPECIE i QUE INTERVIENE EN UNA REACCION, SERA NEGATIVO PARA LOS REACTIVOS Y POSITIVO PARA LOS PRODUCTOS.

FORMA DE EVALUAR LA CAPACIDAD CALORIFICA PROMEDIO C_{pC}
DE LA MEZCLA DE GASES

EL VALOR DE LA CAPACIDAD CALORIFICA DE LOS GASES \bar{C}_{pC} VARIA A LO LARGO DE LOS TUBOS, TANTO CON LA COMPOSICION DE LA MEZCLA GASEOSA COMO CON LA TEMPERATURA EN EL SENO DE LA FASE FLUIDA, LO CUAL, ES EL RESULTADO DE LA INTEGRACION DE LAS ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DE LA REACCION Y NO SE CONOCE DE ANTEMANO, SIN EMBARGO, SE PUEDEN UTILIZAR DATOS DE PLANTA QUE INDIQUEN EL VALOR DE LA TEMPERATURA Y CONVERSION EN LOS EXTREMOS DE CADA CAMA.

ASI, $C_{pC} = \sum(\nu_i C_{p_i})$

$$C_i = C_i(\xi, t) \quad ; \quad C_{pi} = C_{pi}(T)$$

EVALUACION DE LA CONVERSION
VOLUMETRICA ξ .

EL VALOR DE LA CONVERSION VOLUMETRICA DE LA REACCION SE VA OBTENIENDO CONFORME SE VAN INTEGRANDO LAS ECUACIONES DE DISERO.

LA FORMA DE OBTENER LA CONVERSION FRACCIONAL f_A A PARTIR DE LA CONVERSION VOLUMETRICA, ES LA SIGUIENTE:

$$\text{SE DEFINE } f_A = (n_{i0} - n_i) / n_{i0} = (q_{i0} - q_i) / q_{i0} \quad (4.28)$$

$$\text{Y TAMBIEN } \xi = \frac{q_i - q_{i0}}{M_i v_i} \rho \quad (4.29)$$

DESPEJANDO A q_i DE LA EC. (4.28)
 $q_i = q_{i0}(1 - f_A)$

SUSTITUYENDO EN LA EC. (4.29)

$$\xi = \left(\frac{q_{i0} - q_{i0}f_A - q_{i0}}{M_i v_i} \right) \rho$$

$$\xi = - \left(\frac{q_{i0}f_A}{M_i v_i} \right) \rho$$

FINALMENTE SE DESPEJA A f_A

$$f_A = - \frac{\xi M_i v_i}{q_{i0} \rho} \quad (4.30)$$

COMO SE PUEDE OBSERVAR, LA EC. (4.30) PROPORCIONA DIRECTAMENTE EL VALOR DE LA CONVERSION FRACCIONAL f_A A PARTIR DE LA CONVERSION VOLUMETRICA ξ .

REFERENCIAS PARA EL CAPITULO IV

- [1] MASS TRANSFER IN HETEROGENEOUS CATALYSIS
C.N. SATTERFIELD
pp. 9

- [2] INGENIERIA DE LA CINETICA QUIMICA
J.M. SMITH
ED. CECSA
pp. 55

- [3] MASS TRANSFER IN HETEROGENEOUS CATALYSIS
C.N. SATTERFIELD
pp. 194

- [4] MASS TRANSFER IN HETEROGENEOUS CATALYSIS
C.N. SATTERFIELD
pp. 43

- [5] MASS TRANSFER IN HETEROGENEOUS CATALYSIS
C.N. SATTERFIELD
pp. 42,43

- [6] INGENIERIA DE LA CINETICA QUIMICA
J.M. SMITH
ED. CECSA
pp. 532

- [7] MASS TRANSFER IN HETEROGENEOUS CATALYSIS
C.N. SATTERFIELD
pp. 79

CAPITULO V

EJEMPLIFICACION DEL PROCESO DE ELABORACION DE UN PROGRAMA PARA COMPUTADORA QUE PERMITA PREDECIR EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR CATALITICO DE CAMA FIJA, MEDIANTE LA APLICACION DE LOS MODELOS DESARROLLADOS EN LOS CAPITULOS II, III Y IV DEL PRESENTE TRABAJO. EJEMPLO ESPECIFICO: REACCION DE LA OXIDACION CATALITICA EN FASE GASEOSA DEL ANHIDRIDO SULFUROSO SOBRE PARTICULAS ESFERICAS DE UN CATALIZADOR POROSO

LA PREDICCIÓN DEL FUNCIONAMIENTO DE UN REACTOR HETEROGENEO DE GRAN TAMAÑO, UTILIZANDO LA CINÉTICA DE LA REACCIÓN QUÍMICA Y TOMANDO EN CUENTA LOS FENÓMENOS DE TRANSPORTE DE MASA Y CALOR, SE REALIZA PARTIENDO DE UN CONJUNTO DE CONDICIONES ESPECÍFICAS QUE DEBEN FIJARSE Y QUE SON: LA TEMPERATURA, LA PRESIÓN, LA COMPOSICIÓN Y LA VELOCIDAD DE ENTRADA AL REACTOR DE LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN, ASÍ COMO LAS CARACTERÍSTICAS DE LOS GRANULOS CATALÍTICOS Y LOS DATOS DE LAS CONDICIONES DE LOS ALREDEDORES QUE PERMITAN EVALUAR EL CALOR TRANSFERIDO A TRAVÉS DE LAS PAREDES DEL REACTOR. DADO LO ANTERIOR, COMENZAREMOS A ABORDAR EL CASO QUE EN ESTA OCASIÓN SE HA ELEGIDO.

PRINCIPIOS DE LA REACCIÓN

EN EL DISEÑO Y OPERACIÓN DE REACTORES PARA LA OXIDACIÓN CATALÍTICA DEL DIOXIDO DE AZUFRE, LAS RESTRICCIONES PROVIENEN DE LA CAPACIDAD DEL CATALIZADOR Y LA TERMODINÁMICA DE LA REACCIÓN. AMBAS LIMITACIONES SON IMPORTANTES.

LA REACCIÓN $\text{SO}_2 + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{SO}_3$, INVOLUCRA UNA CONSIDERABLE LIBERACIÓN DE CALOR CUANDO ESTA PROCEDE HACIA LA DERECHA.

COMO ES DE ESPERARSE CON UNA REACCIÓN EXOTÉRMICA, LA

CONSTANTE DE EQUILIBRIO SERA MAS DESFAVORABLE PARA LA FORMACION DEL TRIOXIDO DE AZUFRE CONFORME SE INCREMENTA LA TEMPERATURA DEL SISTEMA.

CINETICA

DESDE UN PUNTO DE VISTA PRACTICO, LA CINETICA PROPORCIONA UNA RELACION CUANTITATIVA ENTRE LA RAPIDEZ DE REACCION, TEMPERATURA Y CONCENTRACION DE LAS ESPECIES QUE INTERVIENEN EN LA REACCION. LAS CONCLUSIONES TEORICAS, A MENUDO ARROJAN EL MECANISMO DE UNA REACCION O CATALISIS, PERO ESTE TOPICO NO SERA TRATADO EN EL PRESENTE TRABAJO.

LAS TECNICAS EXPERIMENTALES DE CINETICA PARA CATALISIS HETEROGENEA ESTAN BASADAS SOBRE MEDICIONES "DIFERENCIALES" DE LA RAPIDEZ DE REACCION EN UN SISTEMA QUE FLUYE; ESTO ES, CONDUCIR LA REACCION DE TAL MANERA QUE LA TEMPERATURA Y COMPOSICIONES DE LAS DIFERENTES ESPECIES INVOLUCRADAS NO CAMBIEN SIGNIFICATIVAMENTE ENTRE LOS ESTADOS INICIAL Y FINAL.

LA APLICACION DE LA CINETICA SE ENCUENTRA CON ALGUNOS OBSTACULOS. EN LOS CONVERTIDORES CATALITICOS COMERCIALES, LA TEMPERATURA DE LOS GASES Y LA CONCENTRACION DE CADA ESPECIE INVOLUCRADA EN LA REACCION NO SON CONSTANTES. CONSECUENTEMENTE, SE DEBE PRACTICAR UNA INTEGRACION O APROXIMACION POR ETAPAS UTILIZANDO DIFERENTES VALORES DE RAPIDEZ DE REACCION PARA CADA CONDICION INCREMENTAL. TAL OPERACION CONSUME UN TIEMPO PROHIBITIVO SI ES REALIZADO MANUALMENTE, POR LO QUE LO MAS RECOMENDABLE ES ELABORAR PROGRAMAS QUE PUEDAN SER MANEJADOS POR LOS MODERNOS SISTEMAS DE COMPUTO.

UN GRAN NUMERO DE ESTUDIOS CINETICOS DE LA OXIDACION CATALITICA DEL DIOXIDO DE AZUFRE HAN SIDO REPORTADOS EN LA LITERATURA. DESAFORTUNADAMENTE, HAY UN CONSIDERABLE DESACUERDO (PARTICULARMENTE EN EL CASO DE LOS CATALIZADORES DE VANADIO) EN CUANTO A LAS MAGNITUDES DE LA RAPIDEZ DE REACCION E INCLUSO EN LA FORMA DE LA ECUACION CINETICA. INDUDABLEMENTE, ALGUNOS DE ESTOS DESACUERDOS OCURREN POR LAS DIFERENCIAS EN LA COMPOSICION DEL CATALIZADOR UTILIZADO, ESTRUCTURA FISICA Y/O TAMAÑO DE LA PARTICULA. LOS EFECTOS DE LA RESISTENCIA DIFUSIONAL ENTRE LA CORRIENTE DEL GAS Y LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR PUEDEN SER IMPORTANTES SI LA VELOCIDAD EXPERIMENTAL DEL GAS ES BAJA.

LA RESISTENCIA DIFUSIONAL DENTRO DE LA PARTICULA DE UN CATALIZADOR POROSO, HA RECIBIDO MENOR ATENCION, PERO TIENE GRAN SIGNIFICADO PARA LA PRACTICA. THIELLE FUE UNO DE LOS

PRIMEROS EN CONSIDERAR EL PROBLEMA GENERAL Y CONCLUYE QUE PARA CUALQUIER CATALIZADOR HABRA CIERTO TAMAÑO DE PARTICULA POR DEBAJO DEL CUAL, EL VOLUMEN DEL CATALIZADOR CONTROLARA LA RAPIDEZ DE REACCION Y POR ENCIMA DEL CUAL LA SUPERFICIE EXTERNA DEL CATALIZADOR SERA LA QUE CONTROLA.

UNA SITUACION QUE ES ANALOGA AL CASO ANTERIOR PARA LA TRANSFERENCIA DE MASA, LO ES LA TRANSFERENCIA DE CALOR. AQUI, TAMBIEN HAY RESISTENCIA A LA TRANSFERENCIA DE CALOR DENTRO DE UNA PARTICULA POROSA E INCLUSO HAY RESISTENCIA ENTRE LA SUPERFICIE DE LA PARTICULA Y LA CORRIENTE DEL GAS.

APLICACION DE LA CINETICA

ESTUDIOS CINETICOS CON CATALIZADORES DE VANADIO HAN SIDO HECHOS POR BARON, BORESKOV Y COLABORADORES, COLETTE Y SHEEPERS, EKLUND, GOLDMAN, KRICHEVSKAYA, KUSTER Y MAKAKOV-ARKHIPOV. UNICAMENTE EL TRABAJO DE EKLUND PARECE APLICABLE PARA CATALIZADORES COMERCIALES NORMALES. LA ECUACION CINETICA PARA LA OXIDACION CATALITICA DEL DIOXIDO DE AZUFRE PROPUESTA POR EKLUND ES [1]

$$r = K_c \sqrt{\frac{P_{SO_2}}{P_{SO_3}}} \left[P_{O_2} - \left(\frac{P_{SO_3}}{P_{SO_2} K_p} \right)^2 \right] \quad (5.1)$$

DONDE r = RAPIDEZ DE REACCION; (gmo1 SO₂/s*g cat)

K_c = CONSTANTE CINETICA; (gmo1 SO₂/g cat*s*atm)

P = PRESION PARCIAL DE LAS DEFERENTES ESPECIES;
(atm)

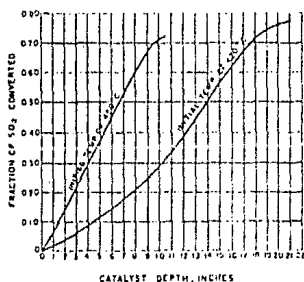
K_p = CONTANTE DE EQUILIBRIO DE LA REACCION.

EL DISEÑADOR Y OPERADOR DE UNA PLANTA DE PRODUCCION DE ACIDO SULFURICO, DEBEN CONTAR CON GRAFICOS QUE PRESENTEN EL PORCENTAJE DE OXIDACION (CONVERSION) EN FUNCION DE LA PROFUNDIDAD DE LA CAMA DE CATALIZADOR, A VARIAS VELOCIDADES DE ALIMENTACION DE GAS, TEMPERATURAS DEL GAS Y COMPOSICIONES A LA ENTRADA DEL CONVERTIDOR O REACTOR. LA RAPIDEZ DE REACCION ESTA DADA POR LOS DATOS CINETICOS COMO UNA FUNCION DE LA TEMPERATURA Y LA COMPOSICION DEL GAS, PERO LA CONVERSION QUE SE PRESENTA EN CUALQUIER CAPA DE LA CAMA CATALITICA ES DEPENDIENTE DE LA VELOCIDAD DEL GAS. USUALMENTE EN LA PRACTICA COMERCIAL, LA MASA VELOCIDAD SE

MANTIENE EN EL RANGO DE 300-500 lb/hr/ft². LA CAIDA DE PRESION EN LAS CAMAS DE CATALIZADOR ES EL FACTOR LIMITANTE A ALTAS VELOCIDADES DE FLUJO DEL GAS.

LA FIG. 5.1 PRESENTA EL GRAFICO DE CONVERSION CONTRA LA PROFUNDIDAD DE LA CAMA EMPACADA CON EL CATALIZADOR, PARA UNA COMPOSICION INICIAL PARTICULAR, VELOCIDAD DE FLUJO DE LOS GASES Y TAMAÑO DE CATALIZADOR, BASADO SOBRE LOS DATOS DE EKLUND (2). UNA CURVA TIPICA EN FORMA DE "S" ES OBTENIDA PARA UNA TEMPERATURA DE ENTRADA DE 420 C, PERO SE DEBE OBSERVAR QUE PARA UNA TEMPERATURA DE ENTRADA DE 450 C, LA RAPIDEZ DE REACCION SE HA INCREMENTADO HASTA EL PUNTO QUE LA PARTE BAJA DE RAPIDEZ RETARDADA DE LA CURVA "S" HA SIDO PRACTICAMENTE ELIMINADA. EKLUND PROPONE QUE LA REACCION DEBE SER DETENIDA ANTES DE LLEGAR A LA PARTE SUPERIOR DE RAPIDEZ RETARDADA DE LA CURVA "S", YA QUE ESTAS PORCIONES SON PRESUMIBLEMENTE DESPERDICIOS DE CATALIZADOR. EN LA PRACTICA COMERCIAL, ESTE PROCEDIMIENTO NO PUEDE SER APLICABLE YA QUE SE DA UN MARGEN DE SEGURIDAD PARA EL VOLUMEN DE CATALIZADOR QUE SE REQUIERE, PARA COMPENSAR LOS CAMBIOS GRADUALES EN LA ACTIVIDAD DEL CATALIZADOR, CONDICIONES DE OPERACION IMPREVISTAS, ETC.

GENERALMENTE SE CONSIDERA QUE LA PORCION INERTE Y EL VAPOR DE AGUA PRESENTES EN LA CORRIENTE QUE ENTRA EN CONTACTO CON EL CATALIZADOR, NO AFECTAN A LA REACCION, EXCEPTO COMO UN DILUYENTE DE LOS COMPONENTES ACTIVOS.



Adiabatic conversion of sulfur dioxide to sulfur trioxide versus depth of catalyst bed. (Total gas mass velocity of 300 lb/hr/sq ft and initial gas composition 7 per cent sulfur dioxide, 10.9 per cent oxygen, and 82.1 per cent nitrogen by volume.)

FIGURA 5.1

CONSTANTE CINETICA Kc

EKLUND REPORTA LOS SIGUIENTES VALORES DE LA CONSTANTE DE RAPIDEZ DE REACCION A VARIAS TEMPERATURAS PARA LA REACCION DE OXIDACION DEL DIOXIDO DE AZUFRE SOBRE UN CATALIZADOR DE VANADIO [3], CUYAS DIMENSIONES SON 8mm DE DIAMETRO Y 25mm DE LONGITUD.

TABLA 5.1

TEMPERATURA (°C)	CONSTANTE DE RAPIDEZ DE REACCION (mol SO ₂ /s* <i>q</i> cat*atm)*10 ⁶
420	2.0
440	5.1
460	10.3
480	18.0
500	27.0
520	37.5
540	48.0
560	59.0
580	69.0
600	77.0

PARA OBTENER LA RELACION QUE LIGA A LA CONSTANTE DE RAPIDEZ DE REACCION CON LA TEMPERATURA, UTILIZAMOS LA ECUACION DE ARRHENIUS Y VANT HOFF [4]

$$K_c = A \exp(-E_a/RT)$$

DONDE R ES LA CONSTANTE DE LOS GASES IGUAL A 1.986 CALORIAS POR GRADO Y MOL, "A" SE CONOCE COMO FACTOR DE FRECUENCIA DE LA REACCION Y E_a ES LA ENERGIA DE ACTIVACION DE LA REACCION, LA CUAL, SE DETERMINA EXPERIMENTALMENTE PRESENTANDO EL LOGARITMO DE LA CONSTANTE DE RAPIDEZ DE REACCION FRENTE AL INVERSO DE LA TEMPERATURA, OSEA

$$\ln(K_c) = \ln(A) - \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} \right)$$

LA ECUACION ANTERIOR REPRESENTA UNA LINEA RECTA CUYA PENDIENTE ES IGUAL A (-E_a/RT) Y LA ORDENADA AL ORIGEN ES

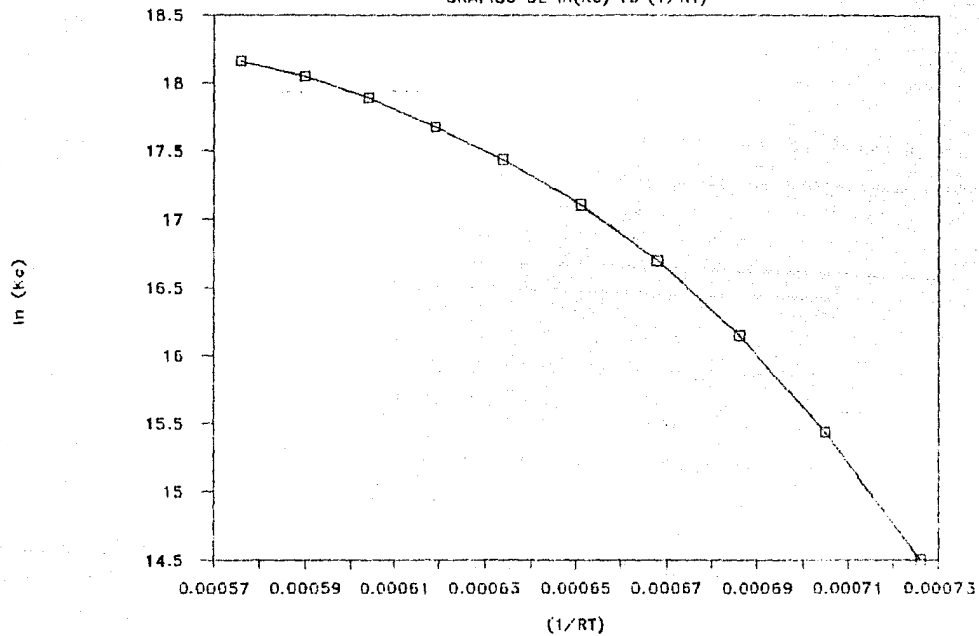
IGUAL A $\ln(A)$.

APLICANDO LO ANTERIOR A LOS DATOS CONTENIDOS EN LA TABLA 5.1 ,SE OBTIENE EL GRAFICO CORRESPONDIENTE.

TEMPERATURA (°C)	$(1/RT)*10^4$	$\ln(Kc)$
420	7.26	14.50
440	7.05	15.44
460	6.86	16.15
480	6.68	16.70
500	6.51	17.11
520	6.34	17.44
540	6.19	17.68
560	6.04	17.89
580	5.90	18.05
600	5.76	18.16

CONSTANTE CINETICA k_c

GRAFICO DE $\ln(k_c)$ VS $(1/RT)$



MODELO DE EKLUND

SE PUEDE VER EN LA FIGURA ANTERIOR QUE LA PENDIENTE DE LA LINEA ES VARIABLE, POR LO TANTO LA ENERGIA DE ACTIVACION SERA TAMBIEN VARIABLE, INDICANDO UN CAMBIO DE MECANISMO DE REACCION COMO CONSECUENCIA DE LA VARIACION DE LA TEMPERATURA DEL SISTEMA. YA QUE EL CAMBIO DE LA PENDIENTE DE ESTA LINEA NO ES MUY GRANDE, LA APROXIMAREMOS A UNA LINEA RECTA A MANERA DE SIMPLIFICACION APLICANDO UNA REGRESION LINEAL A TODOS LOS PUNTOS. DE ESTA MANERA SE OBTIENE

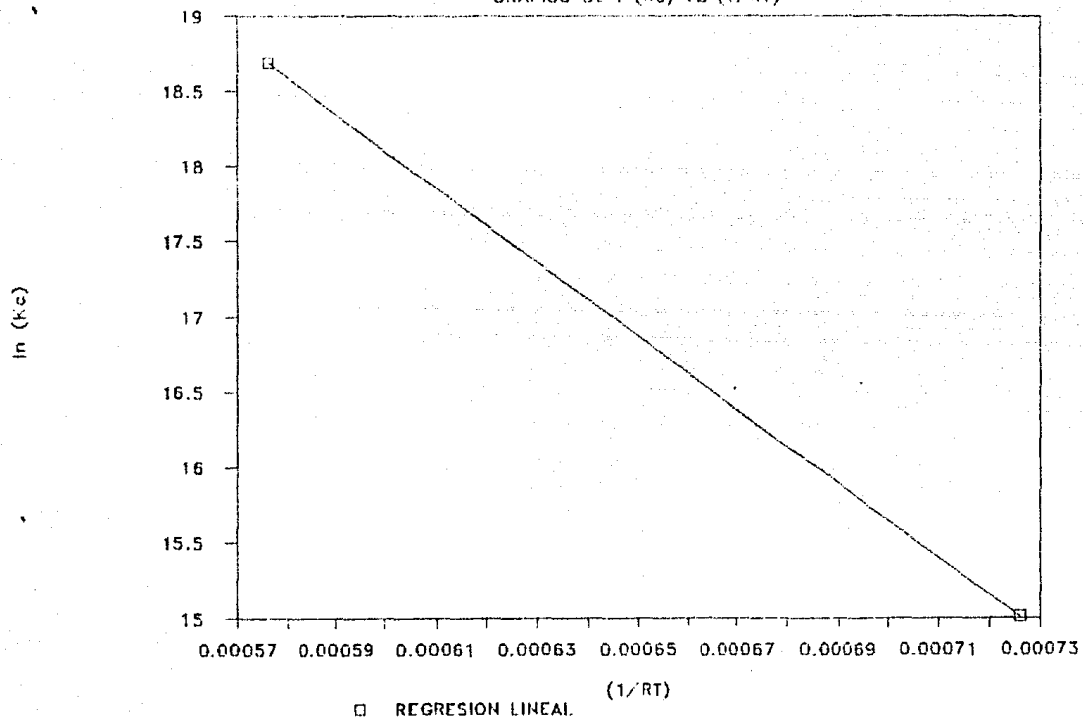
$$\ln K_c = 32.12524 - 23552.016/(RT)$$

$$K_c = \exp(-11853.053/T + 3.4696)$$

ESTA ULTIMA EXPRESION PARA K_c ES LA QUE SERA UTILIZADA EN EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO.

CONSTANTE CINETICA k_c

GRAFICO DE $\ln(k_c)$ VS $(1/RT)$



TERMODINAMICA

LA TERMODINAMICA DE LA REACCION $\text{SO}_2 + 1/2 \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{SO}_3$ HA SIDO OBJETO DE ALGUNAS PUBLICACIONES. LA TABLA 5.2 PRESENTA VALORES DEL CALOR DE FORMACION DEL TRIOXIDO DE AZUFRE Y VALORES EXPERIMENTALES DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO A DIFERENTES TEMPERATURAS, PARA LAS CUALES, ALGUNOS INVESTIGADORES ESTAN DE ACUERDO CON ELLOS (5).

SE CUENTA DE ANTEMANO CON DATOS DE PLANTA QUE INDICAN QUE EL RANGO DE TEMPERATURAS PRESENTADO POR LA MEZCLA DE REACCION QUE ES DE 440-608 °C, POR LO CUAL, EN LA TABLA 5.2 APARECEN LOS VALORES DEL CALOR DE FORMACION DEL SO_3 Y DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO DE LA REACCION PARA LAS TEMPERATURAS DE INTERES.

TABLA 5.2

TEMPERATURA (°K)	CALOR DE FORMACION DE DEL SO_3 (Kcal/gmol)	CONSTANTE DE EQUILIBRIO $K_p(\text{atm}^{-1/2})$
700	-23.27	237.00
800	-23.08	32.00
900	-22.87	6.47

PARA OBTENER LA EXPRESION QUE RELACIONA A LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO CON LA TEMPERATURA, SE CONSTRUYE UN GRAFICO QUE PRESENTA AL LOGARITMO DEL VALOR DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO FRENTE AL INVERSO DE LA TEMPERATURA ABSOLUTA.

TEMPERATURA (°K)	$K_p(\text{atm}^{-1/2})$	$(1/T) \cdot 10^3$	$\log(K_p)$
700	237.00	1.43	2.410
800	32.00	1.25	1.505
900	6.47	1.11	0.811

APLICANDO UN AJUSTE DE REGRESION LINEAL A LOS DATOS DE $\log(K_p)$ CONTRA $(1/T)$ SE OBTIENE

$$\log (K_p) = 4998.316/T - 4.739$$

LA EXPRESION ANTERIOR SERA UTILIZADA EN EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO.

PARA EL CALOR DE FORMACION DEL SO₃, SE TOMARA EL PROMEDIO DE LOS TRES VALORES CORRESPONDIENTES CONTENIDOS EN LA TABLA 5.2, YA QUE LA DIFERENCIA ENTRE ELLOS NO ES MUY GRANDE, OSEA $\Delta H_f = -23073$ cal/gmol.

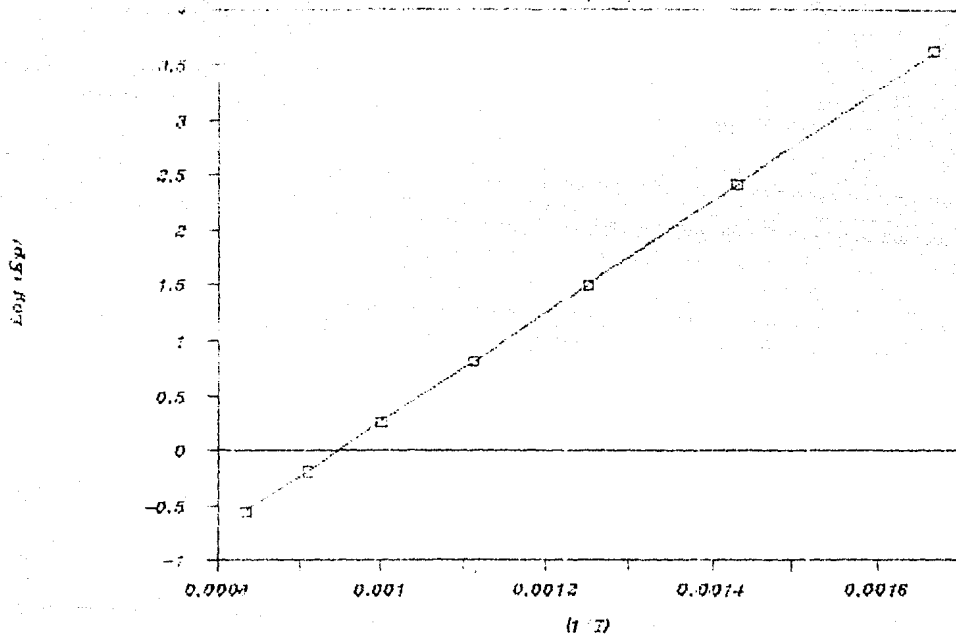
LAS UNIDADES DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO SON (atm^{-1/2}) YA QUE

$$K_p = \frac{P_{SO_3}}{P_{SO_2} P_{O_2}^{1/2}} = \frac{(atm)}{(atm)(atm^{1/2})}$$

$$K_p = (atm)^{-1/2}$$

CONSTANTE DE EQUILIBRIO K_p

GRÁFICO DE $\log K_p$ VS $1/T$



BALANCE DE MATERIALES

PARA PODER REALIZAR EL BALANCE DE MATERIALES EN LOS TUBOS DEL REACTOR, SE TOMARAN LOS DATOS DE UNA PLANTA TIPICA, LOS CUALES, SE PRESENTAN A CONTINUACION:

TABLA 5.3

* PRIMERA CAMA *

COMPONENTE	ALIMENTACION (mol/hr)	SALIDA (mol/hr)
O ₂	1663	1219
N ₂	12164	12164
SO ₂	1571	683
SO ₃	0	888
TOTAL	15398	14954

TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA EN LA ALIMENTACION = 440°C

TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA A LA SALIDA = 608°C

* SEGUNDA CAMA *

COMPONENTE	ALIMENTACION (mol/hr)	SALIDA (mol/hr)
O ₂	1219	1040
N ₂	12164	12164
SO ₂	683	325
SO ₃	887	1245
TOTAL	14953	14774

TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA EN LA ENTRADA = 443°C

TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA A LA SALIDA = 512°C

* TERCERA CAMA *

COMPONENTE	ALIMENTACION (mol/hr)	SALIDA (mol/hr)
O ₂	1040	907
N ₂	12164	12164
SO ₂	325	58
SO ₃	1245	1513
TOTAL	14774	14642

TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA EN LA ENTRADA = 443°C

TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA A LA SALIDA = 494°C

* CUARTA CAMA *

COMPONENTE	ALIMENTACION (mol/hr)	SALIDA (mol/hr)
O ₂	907	878
N ₂	12164	12164
SO ₂	58	2
SO ₃	1513	1569
TOTAL	14642	14613

TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA EN LA ENTRADA = 447°C

TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA A LA SALIDA = 458°C

BALANCE DE MATERIALES PARA LA PRIMERA CORRIENTE

	SO2	+ 1/2 O2	+ N2	---->	SO3	+ N2
FA=0	1571	1663	12164		0.0	12164
0 < FA < 1	1571(1-fA)	1663(1-fA/2)	12164		(1571)fA	12164

n_t = NUMERO DE MOLES TOTALES A CUALQUIER VALOR DE FA.

$$n_t = 1571(1-fA) + 1663(1-fA/2) + 12164 + (1571)fA$$

$$n_t = 15398 - (831.5)fA$$

y_i = FRACCION MOL DEL COMPONENTE i EN LA MEZCLA DE REACCION.

$$y_i = n_i/n_t$$

P_i = PRESION PARCIAL DEL COMPONENTE i .

$$P_i = y_i(P_T)$$

$$P_{SO_2} = \frac{1571(1-fA)}{15398-831.5fA} \quad P_T = \frac{1-fA}{9.8-0.53fA} \quad P_T$$

$$P_{SO_2} = \frac{1663(1-0.5fA)}{15398-831.5fA} \quad P_T = \frac{1-0.5fA}{9.25-0.5fA} \quad P_T$$

$$P_{SO_2} = \frac{1571fA}{15398-831.5fA} \quad P_T = \frac{1-fA}{9.8-0.53fA} \quad P_T$$

VAMOS AHORA A SUSTITUIR LO ANTERIOR EN LA EXPRESION DE FKLUND PARA OBTENER LA EXPRESION DE RAPIDEZ DE REACCION PARA LA PRIMERA CAMA DEL REACTOR.

$$r_p = \eta K_c \sqrt{\frac{P_{SO_2}}{P_{SO_3}}} \left[P_{O_2} - \left(\frac{P_{SO_2}}{(1-fA)K_p} \right)^2 \right]$$

$$r_p = \eta K_c \sqrt{\frac{1-fA}{fA}} \left[\left(\frac{1-0.5fA}{9.26-0.5fA} \right) P_T - \left(\frac{fA}{(1-fA)K_p} \right)^2 \right]$$

SI LA PRESION TOTAL DENTRO DEL SISTEMA ES DE 0.875 atm Y SUSTITUYENDO, SE OBTIENE FINALMENTE LA EXPRESION PARA LA RAPIDEZ DE REACCION EN LA PRIMERA CAMA DEL REACTOR, LA CUAL, SERA UTILIZADA EN EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO:

$$r_p = \eta K_c \sqrt{\frac{1-fA}{fA}} \left[\frac{1-0.5fA}{10.58-0.5fA} - \left(\frac{fA}{(1-fA)K_p} \right)^2 \right]$$

**PROPIEDADES FISICAS DE LA MEZCLA DE
REACCION, COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA
DE MASA Y CALOR A LO LARGO DE LOS TUBOS DEL REACTOR**

PARA EVALUAR LAS PROPIEDADES FISICAS DE LA MEZCLA GASEOSA DE REACCION Y LOS COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA Y CALOR HACIA LAS PARTICULAS DEL CATALIZADOR, NOS APOYAREMOS SOBRE LOS DATOS YA PRESENTADOS DE UN CONVERTIDOR TIPICO EN DONDE SE LLEVA A CABO LA OXIDACION CATALITICA DEL DIOXIDO DE AZUFRE.

DENSIDAD DE LA MEZCLA GASEOSA A LO LARGO
DE LOS TUBOS DEL REACTOR.

a) EFECTO DEL CAMBIO DEL NUMERO DE MOLES CONFORME EVOLUCIONA LA REACCION:

UTILIZANDO LA INFORMACION CON QUE SE CUENTA, SE OBTIENEN LAS SIGUIENTES TABLAS QUE PRESENTAN LOS EFECTOS DEL CAMBIO DEL NUMERO DE MOLES SOBRE LA DENSIDAD DE LA MEZCLA DE REACCION.

TABLA 5.4

	1a CAMA $f_A=0.565$	2a CAMA $f_A=0.525$	3a CAMA $f_A=0.825$	4a CAMA $f_A=0.965$
ALIMENTACION (MOLES)	15398	14954	14775	14642
SALIDA (MOLES)	14954	14775	14642	14613

CAMA	δ	δf_A	$(1+\delta f_A)$
1	-.02883	-.01629	.98371
2	-.01197	-.00628	.99372
3	-.00900	-.00743	.99257
4	-.00198	-.00191	.99809

OBSERVANDO QUE LOS VALORES DE LA COLUMNA $(1+\delta f_A)$ DE LA TABLA ANTERIOR SON TAN CERCANOS A LA UNIDAD, SE PUEDE CONSIDERAR QUE EL CAMBIO QUE SUFRE LA DENSIDAD DE LA MEZCLA DE GASES ATRIBUIBLE AL CAMBIO EN EL NUMERO DE MOLES TOTALES COMO PRODUCTO DEL AVANCE DE LA REACCION, ES DESPRECIABLE.

b) EFECTO DEL CAMBIO EN LA TEMPERATURA SOBRE LA DENSIDAD DE LA MEZCLA GASEOSA.

PARA EL EXTREMO INICIAL DE LA PRIMERA CAMA, SE TIENEN LAS SIGUIENTES CONDICIONES:

TEMPERATURA DE LOS GASES = 440°C

TABLA 5.5

COMPONENTE	q_1	ρ (g/l) 0.0°C	ρ (g/l) 440°C
N2	0.6889	1.26	0.4824
O2	0.1076	1.434	0.5475
SO2	0.2034	2.938	1.1219
SO3	0.0000	3.600	1.3822

$$\rho_{440^\circ\text{C}} = 0.6194 \text{ g/l}$$

SALIDA DE LA PRIMERA CAMA

COMPONENTE	q_1	ρ (g/l) 608°C
N2	0.6889	0.3904
O2	0.0789	0.4431
SO2	0.0884	0.9079
SO3	0.1437	1.1186

$$\rho_{608^\circ\text{C}} = 0.5449 \text{ g/l}$$

EL CAMBIO EN LA DENSIDAD DEBIDO A LA VARIACION DE LA TEMPERATURA ENTRE LOS EXTREMOS INICIAL Y FINAL DE ESTA PRIMERA CAMA ES DE 12%, POR LO TANTO, UNA RELACION LINEAL ENTRE LOS VALORES CORRESPONDIENTES A LA ENTRADA Y LA SALIDA, SERA SATISFACTORIA. DE ESTA MANERA SE OBTIENE LA EXPRESION Y GRAFICO PARA LA PRIMERA CAMA:

$$= (-4.43 \cdot 10^{-7}) T_b + 8.145 \cdot 10^{-4} \quad (5.2)$$

VARIACION DEL CALOR ESPECIFICO PROMEDIO $\overline{C_pC}$

EL TERMINO $\overline{C_pC}$ QUE YA HEMOS DEFINIDO Y LLAMADO CALOR ESPECIFICO PROMEDIO, VARIA TANTO CON LA COMPOSICION DE LA MEZCLA COMO CON LA TEMPERATURA. LA RELACION ENTRE LA CONVERSION Y LA TEMPERATURA, ES EL RESULTADO DE LA INTEGRACION DE LAS ECUACIONES DE DISEÑO Y NO LA CONOCEMOS DE ANTEMANO, SIN EMBARGO, UTILIZANDO LOS DATOS DE PLANTA QUE YA SE HAN PRESENTADO, PODEMOS EVALUAR $\overline{C_pC}$ EN LAS POSICIONES EXTREMAS DE CADA CAMA DEL REACTOR.

$$\overline{C_pC} = \sum (C_i \cdot C_{p_i}) \quad (5.3)$$

$$C_i = C_i(T, \xi) ; \quad C_{p_i} = C_{p_i}(T)$$

LOS CALCULOS SE PRESENTAN EN LA SIGUIENTE TABLA:

TABLA 5.6

* PRIMERA CAMA *

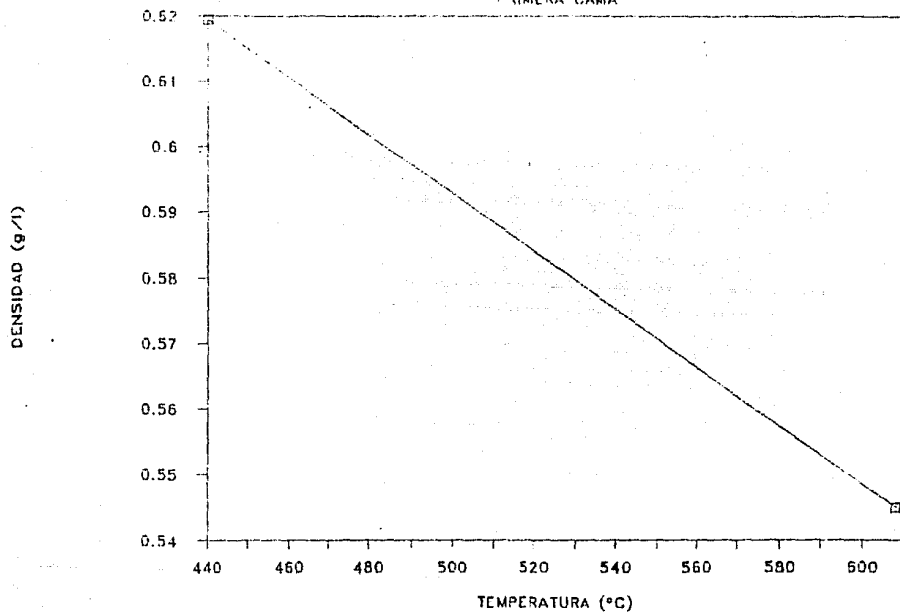
ENTRADA

$F_A=0$; $T_b=440^\circ\text{C}$; $V_T=111.5 \cdot 10^5 \text{ ft}^3/\text{hr.}$

	C_i (q/cm ³)	C_{p_i} (cal/q*°C)	$\overline{C_{p_i}C_i}$
SO2	1.45E-4	0.190	
O2	0.765E-4	0.250	
N2	0.492E-3	0.268	1.7867E-4
SO3	0.	0.230	

DENSIDAD VS TEMPERATURA DE LOS FASES

PRIMERA CAMA



SALIDA

fA=0.565 ; Tb=608 °C ; VT= 134.1*10⁵ ft³/hr.

	C _i (g/cm ³)	C _p i (cal/g*°C)	C _p iC _i
SO ₂	5.21E-5	0.195	
O ₂	4.63E-5	0.260	
N ₂	4.06E-4	0.275	1.3573E-4
SO ₃	0.847E-3	0.235	

T (°C)	C _p iC _i *10 ⁻⁴
440	1.7867
608	1.3573

LA DIFERENCIA ENTRE AMBOS VALORES PARA C_pC ES PEQUERA Y UNA RELACION LINEAL ENTRE AMBAS ES SUFICIENTEMENTE EXACTA;SABIENDO QUE LA VARIACION DE fA ESTA IMPLICITA EN LA DE LA TEMPERATURA,LA RELACION ESTARA SOLO EN FUNCION DE ESTA VARIABLE. ENTONCES

$$C_{pC} = (178.67 - 0.2556 * (T_b - 440)) * 10^{-6} \quad (5.4)$$

T_b EN °C.

* SEGUNDA CAMA *

ENTRADA

$t_A=0.565$; $T_b=443^\circ\text{C}$; $V_T= 109.1 \cdot 10^5 \text{ ft}^3/\text{hr.}$

	C_i (g/cm ³)	C_{pi} (cal/g*°C)	$C_{pi}C_i$
SO ₂	6.38E-5	0.190	
O ₂	5.67E-5	0.250	1.6187E-4
N ₂	49.72E-5	0.268	
SO ₃	1.037E-5	0.230	

SALIDA

$t_A=0.763$; $T_b=512^\circ\text{C}$; $V_T= 118.0 \cdot 10^5 \text{ ft}^3/\text{hr.}$

	C_i (g/cm ³)	C_{pi} (cal/g*°C)	$C_{pi}C_i$
SO ₂	0.28E-4	0.192	
O ₂	0.449E-4	0.255	1.7136E-4
N ₂	1.3462E-4	0.268	
SO ₃	0.847E-3	0.232	

T (°C)	$C_{pi}C_i \cdot 10^{-4}$
443	1.6187
512	1.7136

LA VARIACION ES AUN MENOR QUE EN LA PRIMERA CAMA Y ES TODAVIA MAS JUSTIFICABLE EL USO DE UNA RELACION LINEAL.

PARA LA SEGUNDA CAMA OBTENEMOS ENTONCES

$$C_{pC2} = (161.87 + 0.1375 \cdot (T_b - 443)) \cdot 10^{-6} \quad (5.5)$$

DE LOS RESULTADOS ANTERIORES PODEMOS VER CLARAMENTE, COMPARANDO LAS ENTRADAS EN LAS DOS CAMAS ANALIZADAS, QUE LA COMPOSICION NO AFECTA FUNDAMENTALMENTE Y AL COMPARAR LAS SALIDAS DE AMBAS CAMAS, SE PUEDE APRECIAR UNA DIFERENCIA NOTABLE A TEMPERATURAS DIFERENTES; ES DECIR, QUE LA VARIABLE CUYO EFECTO ES MAYOR, ES LA TEMPERATURA (EN ESTE CASO). ESTAS OBSERVACIONES NOS DAN LA RAZON EN CUANTO A LA MANERA DE PRESENTAR LAS ECUACIONES PARA LA VARIACION DE $\dot{C}_P C$ A LO LARGO DE LAS CAMAS CATALITICAS.

CALCULO DE K_m Y h

SELECCIONANDO UNA PASTILLA DE CATALIZADOR CILINDRICA DE 1/8" DE DIAMETRO Y 1/8" DE LARGO, PROCEDEMOS A CALCULAR SU DIAMETRO EQUIVALENTE d_p Y EL NRe BASADO EN ESE DIAMETRO. SUPONIENDO UNA ESFERA DE IGUAL SUPERFICIE QUE LA PASTILLA CILINDRICA, OBTENEMOS $d_p = 0.39$ cm; LUEGO, OBTENEMOS μ , ρ , C_p Y K COMO FUNCIONES DE LA TEMPERATURA PARA CALCULAR $NRe = NRe(T)$, UTILIZANDO G COMO PARAMETRO.

i) VISCOSIDAD μ , CALOR ESPECIFICO C_p , DENSIDAD ρ .

CONSIDERAMOS AIRE A 1 atm Y LAS OBTENEMOS DE LA LITERATURA (6) EN EL RANGO DE TEMPERATURAS DESEADO.

T(°C)	C_p (cal/g°C)	ρ (g/cm ³)
400	0.250	5.24E-4
500	0.260	4.57E-4
600	0.265	4.04E-4
650	0.270	3.82E-4

ii) DIFUSIVIDAD D : CONSIDERAMOS DIFUSION BINARIA DE SO₂ EN AIRE (7)

UTILIZAMOS LA EXPRESION SIGUIENTE

$$D = \left[BT^{(3/2)} \sqrt{1/M_1 + 1/M_2} \right] (P \quad r_{12} \quad 10)^2$$

$$P = 1 \text{ atm.}$$

$$1/M_1 + 1/M_2 = 1/29 + 1/64 = .05013 \quad ; \quad P = 1 \text{ atm.}$$

$$r_{12} = (r_1 + r_2)/2 = (3.617 + 4.29)\text{\AA} = 3.954\text{\AA}$$

$$B = 0.826 \times 10^{(-4)}$$

$$E_{12}/K = (E_1/K)(E_2/K) = \sqrt{(97)(252)} = 156.2$$

CON LAS CONSTANTES DE LA ECUACION DE DIFUSIVIDAD CONOCIDAS, CALCULAMOS LA INTEGRAL DE COLISION ID A DIFERENTES TEMPLATURAS A LA D CORRESPONDIENTE

TABLA 5.7

T(°C)	EET/ 12	ID	D(cm/s ²)
400	4.31	0.4349	0.662
500	4.95	0.4220	0.744
600	5.59	0.4122	0.832
650	5.91	0.4076	0.864

11) CONDUCTIVIDAD TERMICA K. SABEMOS QUE EL NUMERO DE PRANDTL (NPr) PARA EL AIRE, NO ES FUNCION DE LA TEMPERATURA EN LOS RANGOS QUE NOS INTERESAN Y CONSIDERAMOS COMO BUENO EL VALOR DE 0.7; SOLO NECESITAMOS SABER QUE A 400°C, K=0.03045 (Btu/hr °F).

CON LOS VALORES ANTERIORES PODEMOS CALCULAR AHORA LOS NUMEROS DE REYNOLDS, PARA DOS VALORES DE LA MASA VELOCIDAD COMUNES, 0.0407 Y 0.0678 (g/s*cm²); CON NRe OBTENEMOS POR EL PROCESO GRAFICO DE CHILTON-COLBURN, VALORES DE LOS GRUPOS JD Y JH, PARA FINALMENTE CONOCER Em Y h, COMO SE DESCRIBIO EN EL CAPITULO IV.

T(°C)	G (g/s*cm ²)	NRe	JD	JH
400	0.0407	49.6	0.22	0.33
	0.0678	82.7	0.15	0.23
500	0.0407	45.9	0.23	0.34
	0.0678	76.7	0.16	0.24
600	0.0407	41.7	0.24	0.37
	0.0678	69.6	0.17	0.26
650	0.0407	40.7	0.24	0.38
	0.0678	67.8	0.17	0.27

T(°C)	G	Kq	Km*10 ⁻²	h*10 ⁻⁵
400	0.0407	17.95	0.3485	38.6
	0.0678	29.41	0.3963	44.7
500	0.0407	20.20	0.3415	48.7
	0.0678	23.50	0.3974	57.5
600	0.0407	22.30	0.3340	54.0
	0.0678	26.23	0.3927	63.1
650	0.0407	23.31	0.3301	56.3
	0.0678	27.52	0.3896	66.6

$$KM = \text{gmol SO}_2/(\text{s qcat atm}) ; h = \text{cal}/(\text{s qcat } ^\circ\text{C})$$

TOMAMOS LOS VALORES DE LAS TABLAS ANTERIORES K_m Y h EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA Y OBTENEMOS ENTONCES LOS GRAFICOS CORRESPONDIENTES.

OBSERVAMOS QUE UNA APROXIMACION LINEAL ES SUFICIENTE PARA OBTENER EXPRESIONES DEL TIPO $K_m = K_m(T)$ Y $h = h(T)$:

$$G = 0.0407 : K_m = 0.3781E-2 + 7.359E-7*(T(^{\circ}\text{C}))$$

$$G = 0.0678 : K_m = 0.4088E-2 + 2.766E-7*(T(^{\circ}\text{C}))$$

$$G = 0.0407 : h = 0.01187 + 6.9830E-5*(T(^{\circ}\text{C}))$$

$$G = 0.0678 : h = 0.01229 + 8.4983E-5*(T(^{\circ}\text{C}))$$

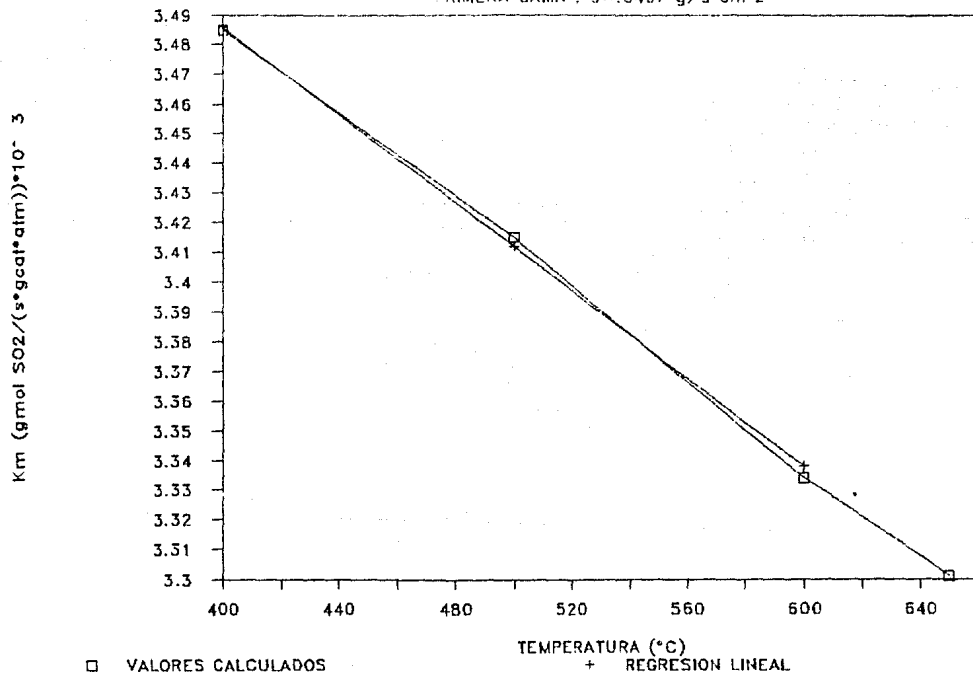
$$KM = \text{gmol SO}_2/(\text{s qcat atm}) ; h = \text{cal}/(\text{s qcat } ^\circ\text{C})$$

VER LOS GRAFICOS CORRESPONDIENTES.

OBSERVACION: EN EL GRAFICO QUE PRESENTA LOS VALORES DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA, PARA UN FLUJO DE GASES DENTRO DE LOS TUBOS IGUAL A $0.0678 \text{ q}/(\text{s cm}^2)$, NO SE OBSERVA A SIMPLE VISTA UNA TENDENCIA LINEAL ENTRE LOS PUNTOS. SIN EMBARGO, LA DIFERENCIA ENTRE LOS VALORES DE DICHO COEFICIENTE PARA LOS EXTREMOS DE TEMPERATURAS DE INTERES ($400-600^{\circ}\text{C}$), ES DE SOLO 0.9% Y EL TERCER PUNTO ES INTERMEDIO A LOS ANTERIORES. LO ANTERIOR NOS PERMITE PRACTICAR CON CONFIANZA EL ANALISIS DE REGRESION LINEAL PARA OBTENER LA EXPRESION DESIADO $K_m = K_m(T)$.

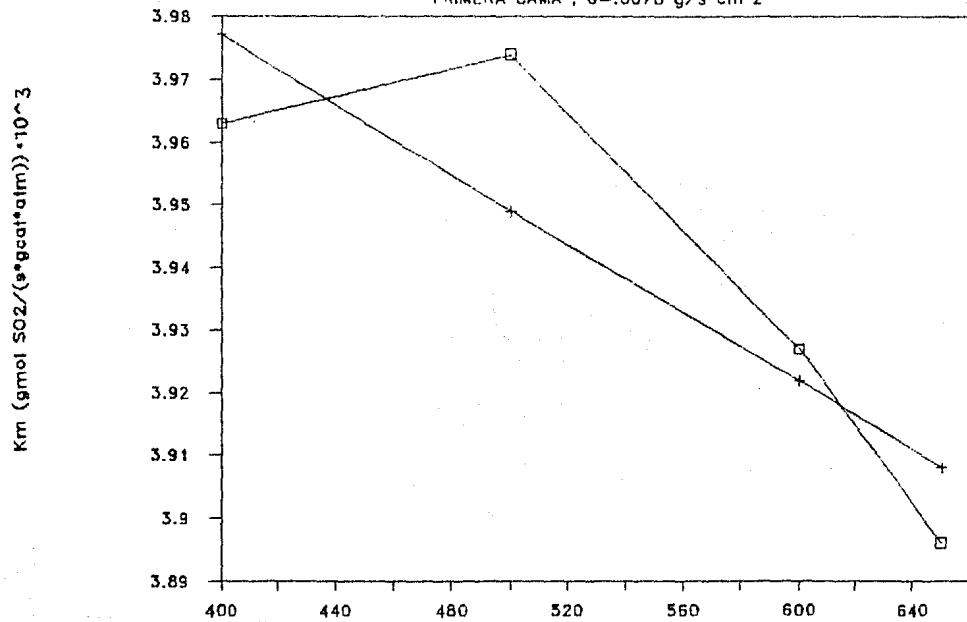
COEF.DE TRANSF.DE MASA Km

PRIMERA CAMA : $G=0.0407 \text{ g/s}\cdot\text{cm}^2$



COEF.DE TRANSF.DE MASA K_m

PRIMERA CAMA ; $G=0.0678 \text{ g/s}\cdot\text{cm}^2$

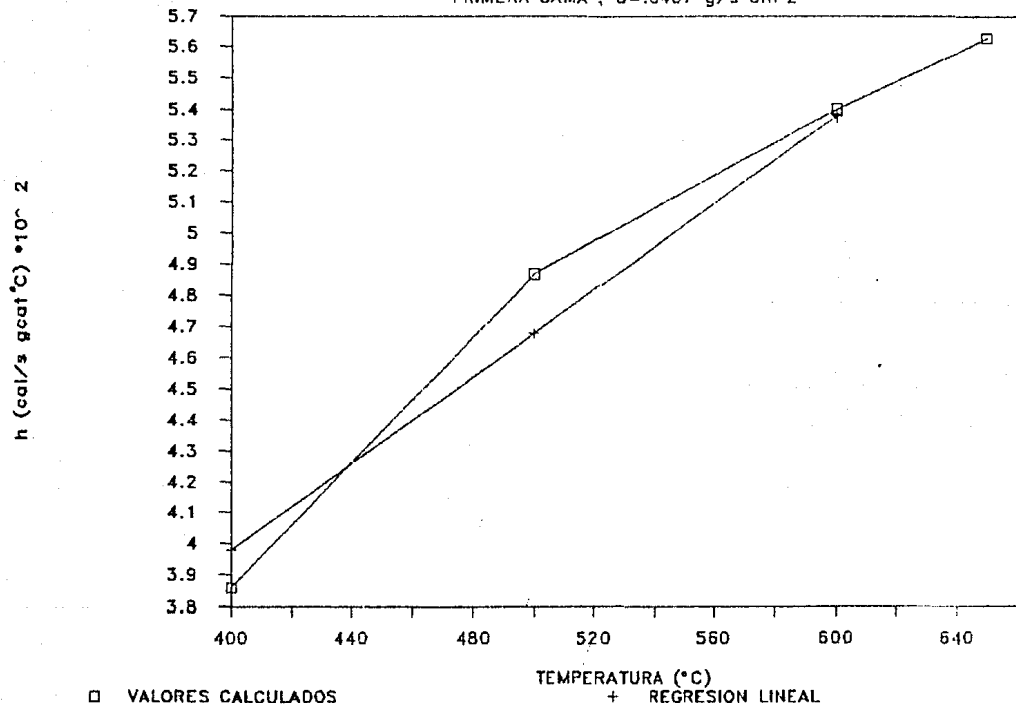


□ VALORES CALCULADOS

+ REGRESION LINEAL

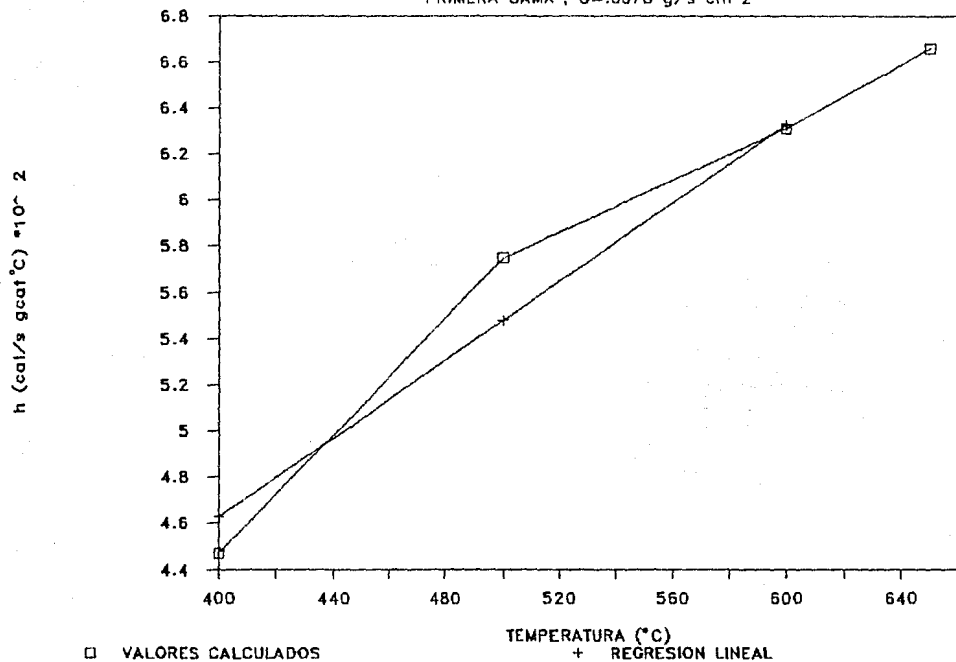
COEF.DE TRANSF.DE CALOR h

PRIMERA CAMA ; G=.0407 g/s*cm²



COEF.DE TRANSF.DE CALOR h

PRIMERA CAMA ; $G=0.0678 \text{ g/s}\cdot\text{cm}^2$



EJEMPLO ILUSTRATIVO DEL PROCEDIMIENTO DE CALCULO DE LAS CONDICIONES DE LA MEZCLA DE REACCION EN EL EXTREMO FINAL DE CADA ELEMENTO DIFERENCIAL DE LOS TUBOS

REALIZAREMOS ESTE CALCULO ILUSTRATIVO PARA LOS TRES PRIMEROS ELEMENTOS DE LOS TUBOS DE LA PRIMERA CAMA DEL REACTOR, MANEJANDO UNA VELOCIDAD DE LA MASA DE LOS GASES DE $0.0407 \text{ (g/s cm}^2\text{)}$ Y UNA TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LA MEZCLA GASEOSA DE REACCION DE 440°C . LO ANTERIOR SIGNIFICA QUE CONTAMOS CON LAS SIGUIENTES CONDICIONES INICIALES:

$$T_b = 440^\circ\text{C} ; \quad \xi = 0.0 \text{ mol SO}_2/\text{cm}^3 ; \quad f_A = 0.0$$

SE HAN SELECCIONADO LAS SIGUIENTES PROPIEDADES FISICAS TIPICAS PARA LAS PARTICULAS CATALITICAS:

$$d_p = 0.39 \text{ cm}$$

$$\rho_p = 1.56 \text{ g/cm}^3 \text{ [8]}$$

$$\tau = \text{FACTOR DE TORTUOSIDAD} = 8.7 \text{ [9]}$$

$$V_g = \text{VOLUMEN DE LOS POROS} = 0.24 \text{ cm}^3/\text{g} \text{ [10]}$$

$$\theta = \text{POROSIDAD} = V_g * \rho_p = 0.37$$

$$S_g = \text{SUPERFICIE TOTAL DE LAS PARTICULAS POROSAS}$$

$$S_g = 22E4 \text{ cm}^2/\text{gcat} \text{ [11]}$$

$$\epsilon = \text{FRACCION HUECA DE LA CAMA EMPACADA CON EL CATALIZADOR} = 0.426$$

$$\rho_B = \text{DENSIDAD DE LA CAMA CATALITICA}$$

$$\rho_B = \rho_p * (1 - \epsilon) = 0.89 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{ESPECIFICAMOS QUE } \Delta Z = 2.54 \text{ cm}$$

SI SE SUSTITUYE EL VALOR DE $f_A = 0.0$ EN LA EXPRESION DE RAPIDEZ DE REACCION PROPUESTA POR EKLUND, SE OBTENDRA UN ERROR MATEMATICO AL DIVIDIR POR CERO, POR LO TANTO, ES NECESARIO ESTIMAR EL VALOR DE LA RAPIDEZ DE REACCION PARA ESTE PRIMER INCREMENTO DE TUBO. ASI, ESTIMAMOS QUE LA RAPIDEZ DE REACCION TENDRA UN VALOR DE $1.2E-6 \text{ mol SO}_2/(\text{s} * \text{gcat})$.

*PROPIEDADES FISICAS DE LA MEZCLA GASEOSA.

$$\rho_{440^\circ\text{C}} = 0.6194E-3 \text{ g/cm}^3$$

$$C_p C = 440^\circ C = 1.7867E-4 \text{ cal}/(^{\circ}C \cdot \text{cm}^3)$$

$$r_1 \text{ SO}_2 = -1$$

$$\text{CALOR DE REACCION } \Delta H_r = -23073 \text{ cal/gmol SO}_2$$

PARA CONOCER LAS CONDICIONES AL FINAL DE ESTE PRIMER ELEMENTO DE TUBO ξ_1, T_{b1} , UTILIZAMOS LAS ECUACIONES (3.1) Y (3.2)

$$\xi_1^1 = \xi_1^0 + \frac{\rho \rho_B r_{pi}}{\rho_i G} (\Delta Z) \quad (3.1)$$

$$T_{b1}^1 = T_{b1}^0 + \frac{\rho \rho_B (-\Delta H_r) r_{pi}}{\rho_i G C_p C} (\Delta Z) \quad (3.2)$$

SUSTITUYENDO LOS VALORES CON QUE YA CONTAMOS EN LAS ECS. ANTERIORES SE OBTIENE

$$\xi_1^1 = 4.12E-4 \text{ gmol SO}_2/\text{cm}^3$$

$$T_{b1}^1 = 445.33^\circ C$$

EL VALOR DE LA CONVERSION FRACCIONAL ALCANZADA POR LA REACCION QUIMICA AL FINAL DE ESTE PRIMER ELEMENTO DE TUBO, SE CALCULA MEDIANTE LA EC. (4.30)

$$f_{A1} = - \frac{M_{\text{SO}_2} v_i}{q_i \text{SO}_2 \rho}$$

$$f_{A1}^1 = \frac{-(4.12E-8 \text{ gmol SO}_2/\text{cm}^3)(64 \text{ g/gmol SO}_2)(-1)}{(0.2034)(0.6194E-3 \text{ g/cm}^3)}$$

$$fA1 = 0.021$$

AHORA, SE TOMA EL SIGUIENTE ELEMENTO DE TUBO A CONSIDERAR ΔZ_2 , PARA EL CUAL, SE ASIGNAN COMO CONDICIONES EN SU EXTREMO INICIAL, LAS OBTENIDAS EN EL EXTREMO FINAL DEL ELEMENTO ANTERIOR, OSEA

$$T_{b2}^0 = 445.33^\circ\text{C}$$

$$S_2^0 = 4.12E-8 \text{ gmol SO}_2/\text{cm}^3$$

$$fA2 = .021$$

A PARTIR DE ESTE ELEMENTO DE TUBO, YA SE PUEDE UTILIZAR EL METODO DE INTEGRACION DE RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN PARA LAS ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DE CADA TUBO DEL REACTOR.

! CALCULO DE LOS INCREMENTOS K1, K2, K3, K4, M1, M2, M3, Y M4 PERTENECIENTES AL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTTA.

PRIMERO SE DEBE ENCONTRAR LA TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE EXTERNA DE LA PARTICULA CATALITICA, EN LA FORMA SIGUIENTE!

SECUENCIA.

- a) SUPONEMOS QUE $T_s = 445.44^\circ\text{C}$, POR LO TANTO,
 $\Delta T_{\text{sup}} = 0.05^\circ\text{C}$
- b) $T_m = (T_s + T_b)/2 = (445.33 + 445.44)/2 = 445.38^\circ\text{C}$
- c) $R_m(445.38^\circ\text{C}) = 3.45E-3 \text{ gmol SO}_2/(\text{segcat} \cdot \text{atm})$
- d) $h(445.38^\circ\text{C}) = 4.29E-2 \text{ cal}/(\text{segcat} \cdot ^\circ\text{C})$
- e) $K_c = \exp(-11853.05/(T_s + 273)) + 3.4696$
 $K_c(445.44^\circ\text{C}) = 2.19E-6 \text{ gmol SO}_2/(\text{segcat} \cdot \text{atm})$
- f) $P \text{ SO}_2 = P_T \cdot y \text{ SO}_2 + (1-fA)$
 $P \text{ SO}_2 = 0.875 \cdot 0.1020 \cdot (1-0.021) = 0.873 \text{ atm}$

$$g) \Delta T_{\text{calc}} = \frac{PSO_2 K_c}{K_m + K_c} \left(\frac{K_m}{h} \right) (-\Delta H_r)$$

$$\Delta T_{\text{calc}} = 0.10^\circ\text{C}$$

h) COMPARACION ENTRE ΔT_{sup} Y ΔT_{calc} .

$$|\Delta T_{\text{sup}} - \Delta T_{\text{calc}}| = 0.05^\circ\text{C}$$

COMO SE PUEDE OBSERVAR, LA DIFERENCIA ENTRE ΔT_{sup} Y ΔT_{calc} ES DE SOLO 0.05°C , POR LO QUE SE TOMARA COMO CORRECTA A LA TEMPERATURA SUPUESTA PARA LA SUPERFICIE DE LA PARTICULA CATALITICA. AHORA, EL SIGUIENTE PASO ES CALCULAR EL VALOR DE LA RAPIDEZ DE REACCION:

* CALCULO DEL VALOR DEL FACTOR DE EFECTIVIDAD η .

VAMOS A CALCULAR EL VALOR DE LA DIFUSIVIDAD EFECTIVA $D_{12, \text{eff}}$ DENTRO DE LOS POROS DEL CATALIZADOR.

σ_i = PARAMETROS DE LENARD-JONES

$$\sigma_{SO_2} = 3.617 \text{ \AA} \quad ; \quad PM_{SO_2} = 64.07 \text{ g/gmol}$$

$$\sigma_{\text{AIRE}} = 4.29 \text{ \AA} \quad ; \quad PM_{\text{AIRE}} = 28.97 \text{ g/gmol}$$

$$\sigma_{SO_2-\text{AIRE}} = (3.617 + 4.29) / 2 = 3.953 \text{ \AA}$$

CALCULO DE $\Omega_{SO_2-\text{AIRE}}$.

$$(K_B T / \epsilon_{AB}) = \frac{T_s}{[(\epsilon / K_B) A * (\epsilon / K_B) B]^{(1/2)}}$$

$$(\epsilon / K_B)_{\text{AIRE}} = 97.0 \quad ; \quad (\epsilon / K_B)_{SO_2} = 252.0 \quad [12]$$

$$(K_B T / \epsilon_{AB}) = T_s / 156.34$$

SABEMOS QUE LA TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR VARIA DE $700-1000^\circ\text{K}$.

TOMANDO $T_s = 700^\circ\text{K}$ Y SUSTITUYENDO EN LA EC. ANTERIOR

$$(K_B T / \epsilon_{AB}) = 4.48$$

DE LA TABLA 11-3 [13] SE LEE QUE

$$\Omega_{\text{SO}_2\text{-AIRE}} = 0.863$$

SI $T_s = 1000^\circ\text{K}$, ENTONCES

$$k_{BT}/(\epsilon_{AB}) = 6.413$$

$$\Omega_{\text{SO}_2\text{-AIRE}} = 0.80$$

SE OBSERVA QUE EL VALOR DE $\Omega_{\text{SO}_2\text{-AIRE}}$ NO VARIA MUCHO EN EL RANGO DE TEMPERATURAS PARA T_s , POR LO CUAL, TOMAREMOS UN VALOR PROMEDIO DE LOS OBTENIDOS PARA $\Omega_{\text{SO}_2\text{-AIRE}}$, OSEA

$$\Omega_{\text{SO}_2\text{-AIRE}} = 0.831$$

AHORA

$$D_{12} = \frac{0.0018583 * T_s^{(3/2)} * (1/28.97 + 1/64.07)^{(1/2)}}{P_T (3.953)^2 (0.837)}$$

$$D_{12} = \frac{3.204E-5 T_s^{(3/2)}}{P_T} \quad ; \quad (\text{atm})$$

$$D_{12, \text{eff}} = D_{12} \frac{\theta}{T}$$

$$D_{12, \text{eff}} = \frac{3.204E-5 (445.44 + 273)^{(1.5)} (0.37/8.7)}{0.875 \text{ atm}}$$

$$D_{12, \text{eff}} = 0.0299 \text{ cm}^2/\text{s}$$

UTILIZANDO LA EC. (4.20) SE OBTIENE

$$DK_{,eff} = (19400)/(8.7 \times 22E4 \times 1.56) (445.44+273)/964.07)$$

$$DK_{,eff} = 0.00298 \text{ cm}^2/\text{s}$$

EL VALOR DE LA DIFUSIVIDAD EFECTIVA SE PUEDE CONOCER UTILIZANDO LA EC. (4.19)

$$Deff = \frac{1}{(1/0.0299) + (1/0.00298)} = 0.0027 \text{ cm}^2/\text{s}$$

* CONSTANTE DE EQUILIBRIO K_p .

$$K_p = 10^{(4998.316/(T_s+273)) - 4.7391}$$

$$K_p = 165.26 \text{ atm}^{(-1/2)}$$

* MODULO TIPO THIELLE ϕ_s .

$$\phi_s = D_p/6 \sqrt{\frac{K_c P_p S_p (K_p+1)}{K_p Deff}}$$

$$\phi_s = 1.0892$$

* FACTOR DE EFECTIVIDAD η .

$$\eta = 1/\phi_s \left[\frac{1}{\tanh(3\phi_s)} - \frac{1}{3\phi_s} \right]$$

$$\eta = 0.6398$$

* RAPIDEZ DE REACCION.

$$r_p = \eta K_c \sqrt{\frac{1-f_A}{f_A}} \left[\frac{1-0.5f_A}{10.58-0.5f_A} - \left(\frac{f_A}{(1-f_A)K_p} \right)^2 \right]$$

$$r_{pi} = 8.969E-7 \text{ gmolSO}_2/\text{s gcat atm}$$

* PROPIEDADES FISICAS DE LA MEZCLA GASEOSA, ρ Y C_p .

$$\rho(445.33^\circ\text{C}) = 6.17E-4 \text{ g/cm}^3$$

$$C_p(445.33^\circ\text{C}) = 1.77E-4 \text{ cal/(cm}^3 \cdot ^\circ\text{C)}$$

SUSTITUYENDO EN LAS ECS. 3.7 Y 3.8

$$K1 = 7.073 \text{ gmol SO}_2/\text{cm}^3$$

$$M1 = 4.006^\circ\text{C}$$

EN LA MISMA FORMA SE OBTIENE

$$K2 = 3.20E-8 \text{ gmolSO}_2/\text{cm}^3$$

$$M2 = 4.17^\circ\text{C}$$

$$K3 = 3.20E-8 \text{ gmolSO}_2/\text{cm}^3$$

$$M3 = 4.18^\circ\text{C}$$

$$K4 = 3.30E-8 \text{ gmolSO}_2/\text{cm}^3$$

$$M4 = 4.33^\circ\text{C}$$

SUSTITUYENDO EN LAS ECS. (3.5) Y (3.6)

$$T_{b2} = 449.5^\circ\text{C}$$

$$\xi_2^1 = 7.31E-8 \text{ gmolSO}_2/\text{cm}^3$$

$$\rho(449.5^\circ\text{C}) = 6.15E-4 \text{ g/cm}^3$$

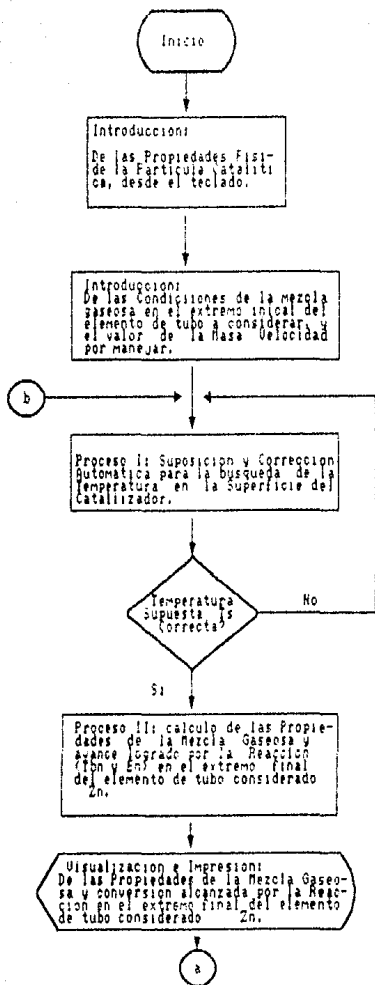
$$fA_2^1 = 0.0374$$

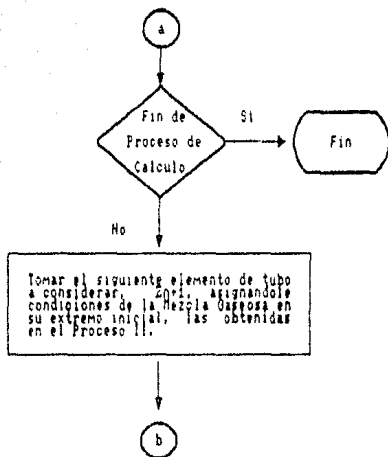
LA SIGUIENTE TABLA MUESTRA LOS RESULTADOS OBTENIDOS MEDIANTE LA INTEGRACION DE LOS TRES PRIMEROS ELEMENTOS DE LOS TUBOS DE LA PRIMERA CAMA DEL REACTOR.

TABLA 5.9

PROFUNDIDAD DE LA CAMA (pulgadas)	TEMPERATURA DE LOS GASES ($^\circ\text{C}$)	CONVERSION FRACCIONAL ALCANZADA POR LA REACCION fA
0.0	440.00	0.0000
1.0	445.33	0.0210
2.0	449.50	0.0374

EL EJEMPLO ANTERIOR NOS AYUDA A VISUALIZAR LA SECUENCIA DE CALCULO QUE DEBE SEGUIR EL PROGRAMA GENERAL. DADO LO ANTERIOR, SE PRESENTA A CONTINUACION EL DIAGRAMA DE FLUJO Y EL LISTADO DEL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO EN LENGUAJE BASIC, PARA EL CUAL, SE ANEXA UN CUADRO DE IDENTIFICACION DE VARIABLES PARA UNA MAYOR COMPRESION DEL MISMO.





```

LIST
2 CLS
3 COLOR 2,0,0
4 DIM A1(190),A2(190),A3(190),A4(190),A5(190),A6(190),A7(190)
5 DIM AB(190),A9(190)
6 DP=.39:CORR=1
7 RP=1.56
10 SG=220000'
11 PORO=.37
13 TORT=8.7
15 PT=.075
16 FMOLI=.102
17 FMA5I=.2034
18 G1=.0407
19 DZ=2.54
20 DH=23073
21 N=150
22 RB=.89
40 DIM F(3),R(5),L(2),M(2),Q(2),T(4),E(4),X(3),P(4),B(3),Y(5),O(2)
50 TB=420
55 E(0)=0
57 ID=1
60 T(0)=TB:F0=E(0):TB00=TB
70 FOR J=1 TO N
75 IF J=1 THEN FA=0
80 S=1:GOTO 400
90 GOTO 1000
100 L(1)=F(1):L(2)=F(2)
110 TB=T(0)+L(2)/2:E(0)=F0+L(1)/2
120 S=2:GOTO 400
130 GOTO 1000
140 M(1)=F(1):M(2)=F(2)
150 TB=T(0)+M(2)/2:E(0)=F0+M(1)/2
160 S=3:GOTO 400
170 GOTO 1000
180 Q(1)=F(1):Q(2)=F(2)
190 TB=T(0)+Q(2):E(0)=F0+Q(1)
200 S=4:GOTO 400
210 GOTO 1000
220 O(1)=F(1):O(2)=F(2)
230 E(4)=F0+(L(1)+2*M(1)+2*Q(1)+O(1))/6
240 T(4)=T(0)+(L(2)+2*M(2)+2*Q(2)+O(2))/6
250 TB=T(4):T(0)=T(4):F0=E(4)
262 RO= -4.43E-07*TB+.0008145
265 FA=E(4)*64/(FMA5I*RO)
268 PQ=PT*FMOLI*(1-FA)
270 R(5)=(R(1)+R(2)+R(3)+R(4))/4
271 Y(5)=(Y(1)+Y(2)+Y(3)+Y(4))/4
276 A1(J)=KC:A2(J)=KM:A3(J)=H:A4(J)=F1:A5(J)=Y(5):A6(J)=R(5)
277 A7(J)=E(4):AB(J)=FA:A9(J)=TB
290 NEXT J
295 GOSUB 3000
300 END
Ok

```

```

LIST
400 IF J=1 THEN DT=5.
405 TS=TB+DT
410 TM=(TS+TB)/2
420 KC=EXP(-11853.05/(TS+273))+3.4696)
430 GOSUB 2000
440 H=.01187+6.983E-05*TM
450 PP=PT*FMDLI*(1-FA)
460 DC=((PP*KC)/(KM+KC))*(KM/H)*DH
470 A=DT-DC
480 IF (ABS(A)) <= .1 THEN 540
490 IF A>0 THEN 500 ELSE 520
500 DT=DT-(ABS(A))
510 TS=TB+DT:GOTO 405
520 DT=DT+(ABS(A))
530 TS=TB+DT:GOTO 405
540 TS=TB+DC
545 N1=((3.204E-05*(TS+273)^(3/2)/PT*PORO/TORT))
550 N2=19400*(PORO)^2/(TORT*SG*RP)*SQR((TS+273)/64)
551 N3= 1/((1/N1)+(1/N2))
552 KP=10^(4998.316/(TS+273)-4.739)
560 F1=DP/6*SQR(KC*RP*SG*(KP+1)/(KP*N3))
561 F11=3*F1
563 F12=(EXP(F11)-EXP(-F11))/(EXP(F11)+EXP(-F11))
570 Y(S)=1/F1*(1/(F12)-1/(F11))
576 IF FA=0 THEN 577 ELSE 585
577 IF J=1 THEN R(S)=.0000009:GOTO 590
585 R(S)=Y(S)*KC*SQR((1-FA)/FA)*((1-.5*FA)/(1.58-.5*FA)-(FA/((1-FA)*KP))^2)
590 D=.44E-07*TB+.0008145
600 G1=1.786/E-04-2.566E-07*(TB-440)
640 ON S GOTO 90,130,170,210
1000 F(1)=(D*RB*R(S)/G1)*DZ
1010 F(2)=(D*RB*R(S)*DH/(G1*C1))*DZ
1020 ON S GOTO 100,140,180,220
1030 IF J=1 THEN 1040 ELSE 1070
1040 L(1)=F(1):M(1)=F(1):O(1)=F(1):Q(1)=F(1)
1050 L(2)=F(2):M(2)=F(2):O(2)=F(2):Q(2)=F(2)
1055 R(S)=R(S)
1060 GOTO 230
1070 ON S GOTO 100,140,180,220
2000 IF G1=.0407 THEN 2010 ELSE 2040
2010 KM=.00378-7.359E-07*TM
2020 H=.01187+6.983E-05*TM
2030 RETURN
2040 IF G1=.0678 THEN 2050 ELSE 300
2050 KM=.004088-2.766E-07*TM
2060 H=.01229+8.4983E-05*TM
2070 RETURN
3000 PRINT "                CORRIDA #"
3010 PRINT "                PRIMERA CAMA"
3020 PRINT "                TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES=";TB00;" C"
3030 PRINT "                MASA VELOCIDAD DE LOS GASES=";G1;"(g/s cm^2)"
3040 PRINT "                LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION=";DZ;"cm"
3042 PRINT " "
3045 PRINT " "
3050 ON ID GOTO 3060,3110,3160
3060 PRINT "                Z                Km                h"
3065 PRINT " "
OK

```

```
LIST
3080 FOR J=5 TO N STEP 5
3090 PRINT " ";J;" ";A1(J);" ";A2(J);" ";A3(J)
3100 NEXT J
3105 GOTO 300
3110 PRINT " Z rpi"
3115 PRINT " "
3120 FOR J=5 TO N STEP 5
3130 PRINT " ";J;" ";A4(J);" ";A5(J);" ";A6(J)
3150 NEXT J
3155 RETURN
3160 PRINT " Z fA Tb"
3165 PRINT " "
3170 FOR J=5 TO N STEP 5
3180 PRINT " ";J;" ";A7(J);" ";A8(J);" ";A9(J)
3190 NEXT J
3195 RETURN
3200 RETURN
Ok
```

TABLA 5.10

CUADRO DE IDENTIFICACION DE VARIABLES UTILIZADAS
POR EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO

TB=TEMPERATURA EN EL SENO DE LA FASE GASEOSA.
PT=PRESION TOTAL PROMEDIO DENTRO DEL REACTOR.
D,RO=DENSIDAD DE LA MEZCLA DE GASES.
K_m=COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA HACIA LAS
PARTICULAS CATALITICAS.
PP,PO=PRESION PARCIAL DEL SO₂ EN LA MEZCLA.
XO=FRACCION MOL INICIAL DEL SO₂ EN LA MEZCLA.
FA=CONVERSION FRACCIONAL f_A.
DH=ENTALPIA DE LA REACCION.
DC=DIFERENCIA DE TEMPERATURA CALCULADA,ENTRE LA
SUPERFICIE DEL CATALIZADOR Y EL SENO DE LA FASE
GASEOSA.
TS=TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR.
N₃=DIFUSIVIDAD EFECTIVA MOLECULAR U ORDINARIA.
N₂=DIFUSIVIDAD DEL TIPO KNUDSEN.
N₁=DIFUSIVIDAD EFECTIVA.
PORO=POROSIDAD DE LA PARTICULA CATALITICA.
TORT=FACTOR DE TORTUOSIDAD DE LAS PARTICULAS POROSAS.
KP=CONSTANTE DE EQUILIBRIO DE LA REACCION QUIMICA.
FI=MODULO TIPO THIELLE.
DP=DIAMETRO DE LA PARTICULA CATALITICA.
ROP= DENSIDAD DE LAS PARTICULAS CATALITICAS.
Y()=FACTOR DE EFECTIVIDAD
G₁=VELOCIDAD DE LA MASA DE LOS GASES DENTRO DE LOS
TUBOS DEL REACTOR.

FMOLI=FRACCION MOL INICIAL DEL SO2 EN LA MEZCLA.

FMASI=FRACCION MASA INICIAL DEL SO2 EN LA MEZCLA GASEOSA.

DZ=LONGITUD DEL INTERVALO DE INTEGRACION.

E(0),E0=CONVERSION VOLUMETRICA EN EL EXTREMO INICIAL DE CADA ELEMENTO DE TUBO A CONSIDERAR.

L(1)=K1 DEL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTA.

L(2)=M1 DEL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTA.

M(1)=K2 DEL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTA.

M(2)=M2 DEL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTA.

Q(1)=K3 DEL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTA.

Q(2)=M3 DEL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTA.

O(1)=K4 DEL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTA.

O(2)=M4 DEL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTA.

E(4)=CONVERSION VOLUMETRICA EN EL EXTREMO FINAL DE CADA ELEMENTO DE TUBO CONSIDERADO.

T(4)=TEMPERATURA EN EL SENO DE LOS GASES EN EL EXTREMO FINAL DE CADA ELEMENTO DE TUBO CONSIDERADO.

R()=RAPIDEZ DE REACCION.

KC=CONSTANTE CINETICA.

C1=CAPACIDAD CALORIFICA MEDIA DE LA MEZCLA GASEOSA.

H=COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR.

UNA VEZ QUE CONTAMOS CON EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO, VAMOS A VERIFICAR LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO SELECCIONADO PARA LA INTEGRACION DE LAS ECUACIONES DE DISEÑO DEL REACTOR, MEDIANTE LA REALIZACION DE LAS CORRIDAS PARA DIFERENTES TAMAÑOS DEL INTERVALO DE INTEGRACION Δz . SELECCIONAMOS QUE $\Delta z = 0.5, 1, 2.5$ Y $5''$ DE LONGITUD Y TOMAMOS DOS VALORES PARA LA VELOCIDAD DE LA MASA DE LOS GASES G DE 0.0407 Y 0.0678 $g/(g \cdot cm^2)$. A CONTINUACION, SE PRESENTAN LOS RESULTADOS DE DICHA TAREA, EN FORMA DE TABLAS Y LOS GRAFICOS CORRESPONDIENTES.

COMPROBACION DE LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES = 440°C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES = 0.0407 g/s cm²

LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION = 1.27 cm

Z (in)	TB (°C)	FA
0	440	0
5	457.96	0.0706
10	470.11	0.1184
15	481.33	0.1625
20	492.23	0.2053
25	503.05	0.2479
30	513.87	0.2904
35	524.74	0.3332
40	535.71	0.3762
45	546.68	0.4193
50	557.6	0.4623
55	568.3	0.5043
60	578.54	0.5445
65	587.9	0.5813
70	595.85	0.6125
75	601.94	0.6365
80	606.08	0.6527
85	608.58	0.6625
90	609.96	0.6679
95	610.67	0.6707
100	611.03	0.6722

ESTE LIBRO NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

COMPROBACION DE LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO
 PRIMERA CAMA
 TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES = 440°C
 MASA VELOCIDAD DE LOS GASES = 0.0407 g/s cm²
 LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION = 2.54 cm

Z (in)	TB (°C)	FA
0	440	0
5	458.41	0.0724
10	470.69	0.1207
15	482	0.1651
20	492.98	0.2083
25	503.88	0.2511
30	514.78	0.294
35	525.74	0.337
40	536.76	0.3804
45	547.79	0.4237
50	558.77	0.4669
55	569.51	0.5091
60	579.74	0.5492
65	589.02	0.5857
70	596.82	0.6163
75	602.7	0.6394
80	606.6	0.6548
85	608.91	0.6638
90	610.15	0.6687
95	610.78	0.6712
100	611.09	0.6724

COMPROBACION DE LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO

PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES = 440°C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES = 0.0407 g/s cm²

LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION = 6.35 cm

Z (in)	TB (°C)	FA
0	440	0
5	460.85	0.082
10	473.4	0.1313
15	484.94	0.1767
20	496.16	0.2208
25	507.29	0.2645
30	518.43	0.3083
35	529.62	0.3523
40	540.86	0.3965
45	552.09	0.4406
50	563.21	0.4843
55	573.99	0.5267
60	584.09	0.5663
65	593	0.6013
70	600.12	0.6293
75	605.14	0.649
80	608.2	0.661
85	609.85	0.6675
90	610.66	0.6707
95	611.05	0.6722
100	611.23	0.6729

COMPROBACION DE LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO

PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES = 440°C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES = 0.0407 g/s cm²

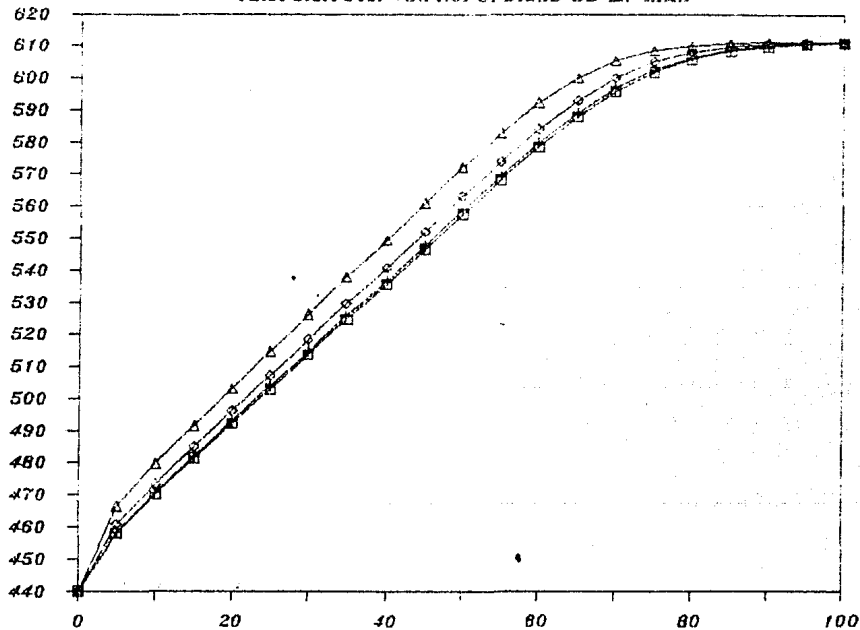
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION = 12.7 cm

Z (in)	TB (°C)	FA
0	440	0
5	466.5	0.1047
10	479.7	0.1561
15	491.59	0.2078
20	503.2	0.2485
25	514.74	0.2938
30	526.3	0.3342
35	537.89	0.3848
40	549.51	0.4305
45	561.03	0.4757
50	572.28	0.5199
55	582.93	0.5618
60	592.43	0.5991
65	600.12	0.6293
70	605.5	0.6505
75	608.66	0.6629
80	610.22	0.669
85	610.91	0.6717
90	611.19	0.6728
95	611.3	0.6732
100	611.35	0.6734

PRIMERA CAMA ; $G = 0407 \text{ g}/(\text{s} \cdot \text{cm}^2)$

TEMPERATURA VS. PROFUNDIDAD DE LA CAMA

TEMPERATURA (°C)



□ ΔZ=.5''

+ ΔZ=1''

◇ ΔZ=2.5''

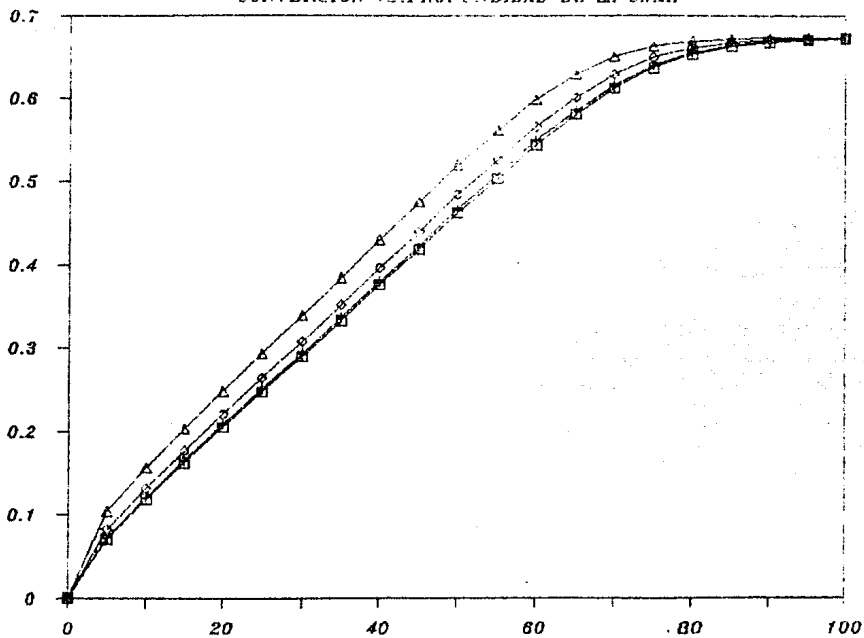
△ ΔZ=5''

PROFUNDIDAD DE LA CAMA (pulgadas)

PRIMERA CAMA ; $G = 0.407 \text{ g. / (s} \cdot \text{cm}^2)$

CONVERSION VS. PROFUNDIDAD DE LA CAMA

CONVERSION FRACCIONAL



□ ΔZ=0.5" + ΔZ=1" ◇ ΔZ=2.5" △ ΔZ=5"

COMPROBACION DE LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES = 440°C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES = 0.0678 g/s cm²

LONGITUD DEL ELEMENTO DE INTEGRACION = 1.27 cm

l (μ)	T_l (°C)	F_l
0	440	0
5	452.45	0.0409
10	460.49	0.0806
15	467.71	0.1089
20	474.55	0.1358
25	481.2	0.162
30	487.74	0.1877
35	494.23	0.2132
40	500.7	0.2386
45	507.17	0.2641
50	513.65	0.2896
55	520.16	0.3151
60	526.64	0.3408
65	533.24	0.3665
70	539.81	0.3923
75	546.38	0.4182
80	552.93	0.4439
85	559.43	0.4695
90	565.85	0.4947
95	572.13	0.5194
100	578.2	0.5432
105	583.95	0.5658
110	589.28	0.5867
115	594.09	0.6056
120	598.25	0.622
125	601.71	0.6356
130	604.46	0.6464
135	606.56	0.6546
140	608.09	0.6606
145	609.17	0.6649
150	609.92	0.6678
155	610.43	0.6698
160	610.77	0.6711

COMPROBACION DE LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO
 PRIMERA CAMA
 TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES = 440°C
 MASA VELOCIDAD DE LOS GASES = 0.0678 g/s cm²
 LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION = 2.54 cm

Z (in)	TB (°C)	FA
0	440	0
5	452.83	0.0504
10	460.92	0.08229
15	468.1	0.1108
20	475	0.1378
25	481.7	0.164
30	488.2	0.1899
35	494.8	0.2155
40	501.3	0.241
45	507.8	0.2666
50	514.23	0.2922
55	520.85	0.3178
60	527.4	0.3436
65	533.98	0.3694
70	540.57	0.3953
75	547.16	0.4213
80	553.74	0.4471
85	560.26	0.4727
90	566.68	0.498
95	572.097	0.5226
100	579.02	0.5464
105	584.75	0.5689
110	590.04	0.5897
115	594.78	0.6083
120	598.86	0.6243
125	602.23	0.6376
130	604.88	0.648
135	606.88	0.6559
140	608.33	0.6616
145	609.35	0.6656
150	610.05	0.6683
155	610.52	0.6702
160	610.83	0.6714

COMPARACION DE LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES = 440°C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES = 0.0678 g/s cm²

LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION = 6.35 cm

Z (in)	FB (°C)	FA
0	440	0
5	454.9	0.0585
10	463.01	0.0905
15	470.32	0.1192
20	477.26	0.1465
25	484	0.173
30	490.65	0.1991
35	497.24	0.225
40	503.82	0.2509
45	510.4	0.2768
50	517	0.3027
55	523.62	0.3287
60	530.26	0.3548
65	536.91	0.381
70	543.58	0.4072
75	550.24	0.4333
80	556.86	0.4594
85	563.42	0.4851
90	569.96	0.5104
95	576.11	0.535
100	582.09	0.5585
105	587.68	0.5805
110	592.77	0.6004
115	597.23	0.618
120	600.98	0.6327
125	603.98	0.6445
130	606.27	0.6535
135	607.94	0.66
140	609.11	0.6646
145	609.91	0.6678
150	610.44	0.6698
155	610.79	0.6712
160	611.01	0.6721

COMPROBACION DE LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES = 440°C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES = 0.067H g/s cm²

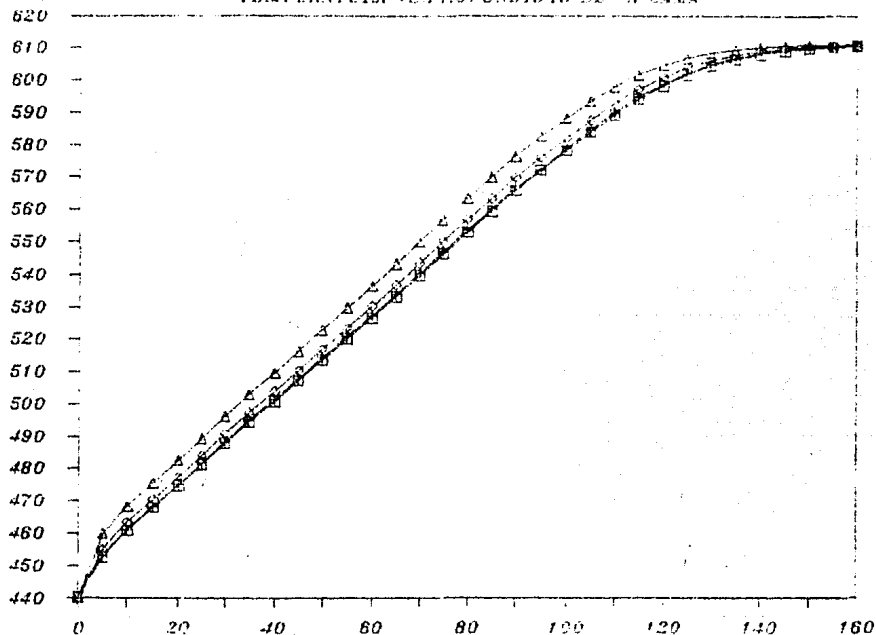
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION = 12.7 cm

Z (in)	TB (°C)	FA
0	440	0
5	459.83	0.078
10	469.09	0.1104
15	475.39	0.1391
20	482.4	0.1667
25	489.25	0.1936
30	496.02	0.2202
35	502.75	0.2467
40	509.47	0.2731
45	516.2	0.2995
50	522.94	0.3261
55	529.71	0.3527
60	536.49	0.3793
65	543.28	0.406
70	550.06	0.4326
75	556.82	0.4592
80	563.5	0.4858
85	570.07	0.5113
90	576.45	0.5363
95	582.55	0.5603
100	588.25	0.5827
105	593.42	0.603
110	597.93	0.6207
115	601.59	0.6355
120	604.66	0.6471
125	606.88	0.6558
130	608.45	0.662
135	609.52	0.6662
140	610.22	0.669
145	610.67	0.6707
150	610.95	0.6719
155	611.13	0.6726
160	611.24	0.673

PRIMERA CAMA $G = 0.678 \text{ g. (s*cm}^{-2}\text{)}$

TEMPERATURA VS PROFUNDIDAD DE LA CAMA

TEMPERATURA (C)

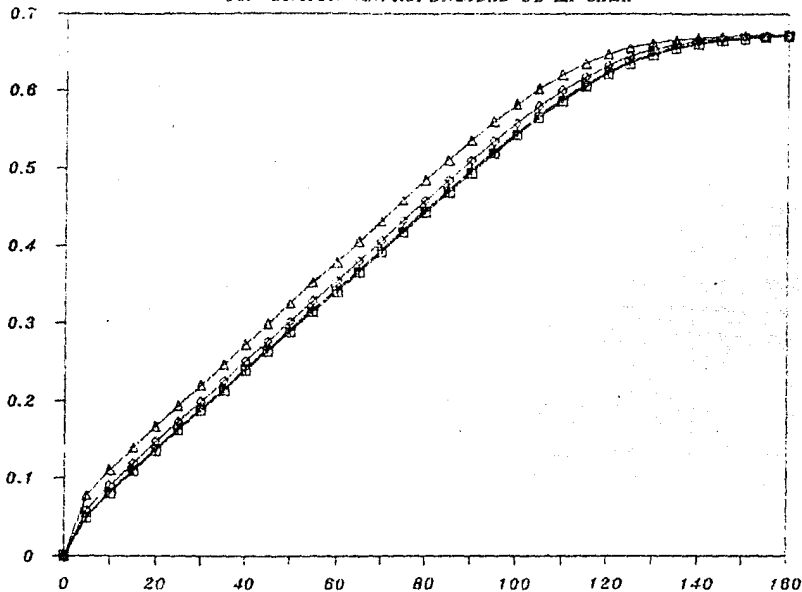


$\square \Delta Z = 0.5''$
 $+ \Delta Z = 1''$
 $\triangleright \Delta Z = 2.5''$
 $\circ Z = 5''$

PRIMERA CAMA , $G = 0.0678 \text{ g/(s*cm}^2)$

CONVERSION VS PROFUNDIDAD DE LA CAMA

CONVERSION FRACCIONAL



\square $\Delta Z = 0.5''$

$+$ $\Delta Z = 1''$

\circ $\Delta Z = 2.5''$

\triangle $\Delta Z = 5''$

PROFUNDIDAD DE LA CAMA (pulgadas)

COMO SE PUEDE OBSERVAR EN LOS CUATRO GRAFICOS ANTERIORES, LOS RESULTADOS QUE ARROJA EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO, UTILIZANDO EL METODO NUMERICO DE RUNGE-KUTTA PARA LA INTEGRACION DE LAS ECUACIONES DE DISEÑO DEL REACTOR, SON CONGRUENTES PARA CADA VALOR DE Δz SELECCIONADO Y PARA AMBOS VALORES DE LA VELOCIDAD DE LOS GASES MANEJADOS, YA QUE PRESENTAN UN COMPORTAMIENTO SIMILAR ENTRE SI, REFLEJANDOSE LA INFLUENCIA DEL TAMAÑO DEL INTERVALO DE INTEGRACION, LO QUE COMPROBABA QUE EL METODO NUMERICO MENCIONADO PUEDE SER UTILIZADO PARA UN TRABAJO POSTERIOR DE SIMULACION.

ES CLARO QUE, CUANTO MENOR SEA LA LONGITUD QUE SE ASIGNE A Δz , SE OBTENDRAN RESULTADOS MAS CONFIABLES, PERO EL TIEMPO EMPLEADO POR LA COMPUTADORA EN REALIZAR CADA CORRIDA DE CALCULO, AUMENTARA EN FORMA APRECIABLE.

EN LOS GRAFICOS SE PUEDE APRECIAR QUE LAS LINEAS OBTENIDAS CUANDO SE MANEJA $\Delta z = 0.5$ Y 1 ", ESTAN MUY CERCANAS ENTRE SI, POR LO QUE SE PUEDE CONSIDERAR COMO CONFIABLE ASIGNAR EL VALOR DE 1 " A Δz EN LAS PROXIMAS CORRIDAS DE CALCULO, CON LO QUE SE OBTIENE UNA DISMINUCION DEL TIEMPO QUE EMPLEA LA COMPUTADORA EN REALIZAR CADA CORRIDA DE CALCULO.

REFERENCIAS PARA EL CAPITULO V

- [1] THE MANUFACTURE OF SULFURIC ACID
WERNER E. DUECKER and JAMES R. WEST
HUNTINGTON N.Y.
ROBERT E. KRIEGER
1971
PP. 166

- [2] IDEM. PP. 169

- [3] IDEM. PP. 168

- [4] CINETICA DE REACCIONES
LAIDLER KEITH JAMES
GOMEZ HERRERA 2a ED.
ALHAMBRA. 1971
PP. 44

- [5] THE MANUFACTURE OF SULFURIC ACID
WERNER E. DUECKER and JAMES R. WEST
HUNTINGTON N.Y.
ROBERT E. KRIEGER
1971
PP. 135

- [6] CHEMICAL ENGINEER S HANDBOOK
Mc GRAW HILL 5a ED. 1973
PP. 3-130, 3-211

- [7] REID and SHERWOOD
THE PROPERTIES OF GASES AND LIQUIDS
Mc GRAW HILL. 2a ED. 1966
PP. 523

- [8] C.N. SATTERFIELD
MASS TRANSFER IN HETEROGENEOUS CATALYSIS
M.I.T. PRESS
PP. 62

- [9] IDEM. PP. 62

- [10] IDEM. PP. 62

[11] IDEM, PP. 62

[12] INGENIERIA DE LA CINETICA QUIMICA
J.M. SMITH
NUEVA EDICION
ED. C.E.C.S.A.
PP. 529

[13] IDEM, PP. 532

CAPITULO VI

CAMBIOS QUE SE PRESENTAN EN UN REACTOR TUBULAR CATALITICO DE CAMA FIJA CUANDO SE MODIFICA ALGUNA DE LAS VARIABLES DE OPERACION (SIMULACION)

SIMULACION

SIMULACION ES UN PROCESO NUMERICO DISEÑADO PARA EXPERIMENTAR EL COMPORTAMIENTO DE CUALQUIER SISTEMA EN UNA COMPUTADORA DIGITAL. EL COMPORTAMIENTO DEL SISTEMA SE PRESENTA A BASE DE MODELOS MATEMATICOS Y LOGICOS, DISEÑADOS PARA TAL FIN. SE PUEDE SIMULAR EL COMPORTAMIENTO DE SISTEMAS ECONOMICOS, SOCIALES, ADMINISTRATIVOS, FISICOS, QUIMICOS BIOLÓGICOS, ETC. LOS PROCESOS DE SIMULACION SE PUEDEN REALIZAR EN UNA COMPUTADORA ANALOGICA O CON PAPEL Y LAPIZ.

LA SIMULACION ES UTIL CUANDO SE IMPOSIBILITA LA RESOLUCION DEL MODELO ANALITICO O NUMERICO REQUERIDO EN UN DETERMINADO PROBLEMA. COMPARADOS CON LOS MODELOS ANALITICOS Y NUMERICOS, LOS PROCESOS DE SIMULACION PRESENTAN VENTAJAS Y DESVENTAJAS.

POR UNA LADO, PERMITE ESTUDIAR AL SISTEMA REAL SIN DEFORMARLO. LOS MODELOS ANALITICOS O NUMERICOS REQUIEREN LA SIMPLIFICACION DEL SISTEMA REAL DE ESTUDIO, A FIN DE QUE SE APEGUE A LAS CONDICIONES QUE FUNDAMENTAN LA TEORIA DEL MODELO EN USO; POR ESTO, FINALMENTE MUCHOS MODELOS ANALITICOS Y NUMERICOS RESUELVEN UN SISTEMA DEFORMADO MUY LEJANO AL SISTEMA REAL DE ESTUDIO. LOS PROCESOS DE SIMULACION SON HERRAMIENTAS MUY EFECTIVAS DE ENTRENAMIENTO DE PERSONAL Y GENERAN UNA VISION MACRO Y MICRO DEL SISTEMA BAJO ESTUDIO MUCHO MAS PROFUNDA Y DETALLADAMENTE QUE CUALQUIER MODELO ANALITICO O NUMERICO.

SIN EMBARGO, LOS PROCESOS DE SIMULACION NO PRODUCEN RESULTADOS OPTIMOS, SINO SIMPLEMENTE BUENOS.

SE COMPRENDE POR SISTEMA, A UNA COLECCION DE COMPONENTES QUE INTERACTUAN ENTRE SI COMO UNA UNIDAD, PARA LA CONSECUENCIA DE UN PROPOSITO EXPLICITO O IMPLICITAMENTE DEFINIDO.

EN LOS PROCESOS DE SIMULACION DE CUALQUIER SISTEMA, SE DEBEN DEFINIR LOS SIGUIENTES PARAMETROS:

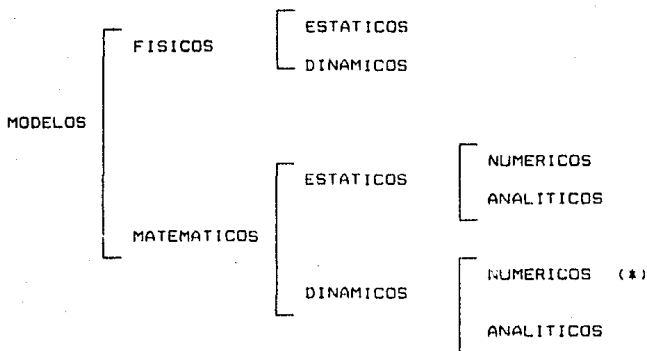
- COMPONENTE: CUALQUIER PARTE IMPORTANTE DEL SISTEMA. (UN SISTEMA PUEDE TENER VARIAS COMPONENTES)
- ATRIBUTO: SE REFIERE A LAS PROPIEDADES DE CUALQUIER COMPONENTE DEL SISTEMA (UNA COMPONENTE PUEDE TENER VARIOS ATRIBUTOS).
- ACTIVIDAD: CUALQUIER PROCESO QUE CAUSA CAMBIOS EN EL SISTEMA.
- ESTADO DEL SISTEMA: DESCRIPCION DE SUS COMPONENTES, SUS ATRIBUTOS Y ACTIVIDADES DE UN SISTEMA, EN UN DETERMINADO PERIODO DE TIEMPO.

TODO SISTEMA SE ENCUENTRA UBICADO O ENMARCADO DENTRO DE UN MACRO SISTEMA, ES DECIR, DE UN SISTEMA MAYOR QUE LE SIRVE COMO MARCO AMBIENTAL.

LA EXTENSION DE LA FRONTERA DE UN MARCO AMBIENTAL, DEPENDE DEL TIPO DE SISTEMA BAJO ESTUDIO.

EXISTEN ACTIVIDADES, QUE AFECTAN AL SISTEMA BAJO ESTUDIO Y QUE SE ORIGINAN EN UN MARCO AMBIENTAL, POR LO QUE ES NECESARIA SU DEFINICION. A DICHAS ACTIVIDADES SE LES CONOCE COMO ACTIVIDADES EXOGENAS; AQUELLAS QUE SE ORIGINAN DENTRO DEL SISTEMA BAJO CONSIDERACION, SE LLAMAN ACTIVIDADES ENDOGENAS. UN SISTEMA SIN ACTIVIDADES EXOGENAS, SE LLAMA SISTEMA CERRADO; UNO QUE CUENTA CON ELLAS SE LLAMA SISTEMA ABIERTO.

LA SIMULACION REQUIERE DE MODELOS PARA PODER REPRESENTAR EL COMPORTAMIENTO DE UN SISTEMA EN UNA COMPUTADORA. SE COMPRENDE POR MODELO, AL CONJUNTO DE INFORMACION RELATIVA A UN SISTEMA QUE PERMITE SU ESTUDIO. UNA CLASIFICACION DE MODELOS PUEDE SER:



(*) ---> PROCESO DE SIMULACION.

PASOS A SEGUIR EN UN PROCESO DE SIMULACION

PLANIFICAR UN PROCESO DE SIMULACION, REQUIERE DE LOS SIGUIENTES PASOS:

- a) FORMULACION DEL PROBLEMA.
- b) RECOLECCION Y PROCESAMIENTO DE LA INFORMACION REQUERIDA.
- c) FORMULACION DEL MODELO MATEMATICO.
- d) EVALUACION DE LAS CARACTERISTICAS DE LA INFORMACION PROCESADA.
- e) FORMULACION DE UN PROGRAMA DE COMPUTADORA.
- f) VALIDACION DEL PROGRAMA DE COMPUTADORA.
- g) DISEÑO DE EXPERIMENTOS DE SIMULACION.
- h) ANALISIS DE RESULTADOS Y VALIDACION DE LA SIMULACION.

AHORA, VOLVEMOS AL TEMA QUE OCUPA NUESTRA ATENCION. UNA VEZ QUE HEMOS ELABORADO EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO Y COMPROBADO LA ROBUSTEZ DEL METODO NUMERICO SELECCIONADO PARA RESOLVER LAS ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DEL REACTOR EN ESTUDIO, PODEMOS MANIPULAR LAS SIGUIENTES VARIABLES DE OPERACION PARA LA PRIMERA CAMA:

- i) VELOCIDAD DE LA MASA DE LOS GASES: 0.0407 Y 0.0678 $g/s \cdot cm^2$.
- ii) TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES HACIA EL INTERIOR DE LOS TUBOS, PARA AMBOS VALORES DE MASA VELOCIDAD SELECCIONADOS: 420, 440 Y 460 °C.

LO ANTERIOR SE REALIZARA CON EL OBJETIVO DE OBSERVAR:

- LA IMPORTANCIA DE LOS PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASA Y CALOR EXTERNOS HACIA LAS PARTICULAS DEL CATALIZADOR DENTRO DE LA CAMA FIJA.
- EL PAPEL ESENCIAL QUE JUEGA EN EL DISEÑO Y DIMENSIONAMIENTO DEL EQUIPO, LA NATURALEZA REVERSIBLE DE LA REACCION QUIMICA SELECCIONADA.
- EL FACTOR DE EFECTIVIDAD, EL CUAL DESCRIBE EN SU VARIACION, LA ENORME IMPORTANCIA DE LOS PROCESOS DE TRANSPORTE DENTRO DE LAS PARTICULAS CATALITICAS POROSAS.
- LA PROFUNDIDAD DE LA CAMA REQUERIDA PARA ALCANZAR LA CONVERSION DE EQUILIBRIO EN CADA CASO.

A CONTINUACION SE PRESENTAN LOS VALORES DE LOS DIFERENTES PARAMETROS DE INTERES, OBTENIDOS DURANTE LAS CORRIDAS REALIZADAS UTILIZANDO EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO; ESTO A MANERA DE TABLAS Y GRAFICOS.

RUN

CORRIDA # 1
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 420 °C
MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0407 (g/s cm²)
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	Kc	Km	h
5	1.685606E-06	3.460575E-03	4.218039E-02
10	2.095083E-06	3.453736E-03	4.282939E-02
15	2.543464E-06	3.447483E-03	.0434227
20	3.054475E-06	3.441443E-03	4.399587E-02
25	3.645768E-06	3.435473E-03	4.456235E-02
30	4.334909E-06	3.429503E-03	4.512885E-02
35	5.140988E-06	3.423493E-03	4.569914E-02
40	6.098951E-06	3.417376E-03	.0462796
45	7.208798E-06	3.411222E-03	.0468636
50	8.507471E-06	3.40499E-03	4.745493E-02
55	1.00233E-05	3.398686E-03	4.805315E-02
60	1.180907E-05	3.39228E-03	4.866094E-02
65	1.385098E-05	3.385874E-03	4.926883E-02
70	1.618939E-05	3.379472E-03	4.987637E-02
75	1.883161E-05	3.373134E-03	5.047773E-02
80	2.179612E-05	3.366916E-03	5.106783E-02
85	2.494461E-05	3.361026E-03	5.162673E-02
90	2.817105E-05	3.355618E-03	5.213984E-02
95	3.126335E-05	3.350913E-03	5.258636E-02
100	3.397488E-05	3.347104E-03	5.294781E-02
105	3.611561E-05	3.344276E-03	5.321614E-02
110	3.763454E-05	3.342355E-03	5.339841E-02
115	3.861678E-05	3.341148E-03	5.351296E-02
120	3.920914E-05	3.340433E-03	5.358084E-02
125	3.955022E-05	3.340025E-03	5.361953E-02
130	3.974104E-05	3.339798E-03	5.364106E-02
135	3.984605E-05	3.339674E-03	5.365286E-02
140	3.990332E-05	3.339606E-03	5.365929E-02
145	3.993436E-05	3.339569E-03	5.366277E-02
150	3.995115E-05	3.339549E-03	5.366465E-02

Ok

RUN

CORRIDA # 1
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 420 °C
MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0407 (g/s cm²)
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ϕ_s	η	rci
5	.956252	.6923288	4.707471E-07
10	1.062562	.652814	3.968437E-07
15	1.167379	.61706	3.721519E-07
20	1.275903	.5830822	3.615824E-07
25	1.390505	.5503344	3.572561E-07
30	1.51275	.5186587	3.56193E-07
35	1.643882	.4880424	3.569341E-07
40	1.786985	.4581409	3.590805E-07
45	1.939354	.4297948	3.611131E-07
50	2.103573	.4027029	3.630242E-07
55	2.280384	.376934	3.643553E-07
60	2.472783	.3522582	3.650021E-07
65	2.676343	.3293272	3.634676E-07
70	2.892705	.3079237	3.592563E-07
75	3.120303	.2881398	3.510326E-07
80	3.358826	.2698879	3.372325E-07
85	3.596659	.2537748	3.147093E-07
90	3.826988	.2398204	2.814703E-07
95	4.03723	.2282701	2.368705E-07
100	4.214403	.2192823	1.842013E-07
105	4.350128	.2127947	1.310304E-07
110	4.44442	.2084662	8.558014E-08
115	4.504564	.2057742	5.214656E-08
120	4.540534	.2041879	3.025327E-08
125	4.561146	.2032867	1.701191E-08
130	4.572645	.2027862	9.390373E-09
135	4.578963	.2025118	5.128953E-09
140	4.582407	.2023626	2.784946E-09
145	4.584273	.2022817	1.507103E-09
150	4.585281	.202238	8.149351E-10

Ok

RUN

CORRIDA # 1

PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 420 °C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0407 (g/s cm²)

LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ξ	fA	Tb
5	1.106128E-07	5.593818E-02	434.0227
10	1.8272E-07	9.301411E-02	443.3167
15	2.478002E-07	.1269162	451.8133
20	3.099084E-07	.1596713	460.0214
25	3.705551E-07	.1920479	468.1337
30	4.304721E-07	.2244297	476.2462
35	4.900498E-07	.2570317	484.413
40	5.495683E-07	.2900187	492.6751
45	6.090416E-07	.3234136	501.0382
50	6.684693E-07	.3572326	509.5063
55	7.277784E-07	.3914507	518.0732
60	7.868475E-07	.4260134	526.7251
65	8.454415E-07	.4607951	535.4305
70	9.031579E-07	.4955561	544.1306
75	9.594595E-07	.5299793	552.7423
80	1.013575E-06	.563552	561.1412
85	1.064413E-06	.5955498	569.1448
90	1.110461E-06	.6249313	576.493
95	1.150043E-06	.6505024	582.8873
100	1.18175E-06	.6712037	588.0634
105	1.205096E-06	.6865735	591.906
110	1.220861E-06	.6970143	594.5161
115	1.23073E-06	.7035763	596.1565
120	1.236565E-06	.7074656	597.1288
125	1.239883E-06	.7096821	597.6828
130	1.241731E-06	.7109151	597.991
135	1.242743E-06	.7115917	598.1601
140	1.243294E-06	.71196	598.2521
145	1.243593E-06	.7121596	598.302
150	1.243754E-06	.7122674	598.329

OK

RUN

CORRIDA # 2
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 440 °C
 MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0407 (g/s cm²)
 LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	Kc	Km	h
5	2.951097E-06	3.442606E-03	4.388557E-02
10	3.85587E-06	3.433572E-03	4.7474281E-02
15	4.895314E-06	3.425248E-03	4.553261E-02
20	6.14281E-06	3.417131E-03	4.630286E-02
25	7.630756E-06	3.409113E-03	4.706372E-02
30	9.423579E-06	3.40109E-03	4.782501E-02
35	1.160454E-05	3.392989E-03	4.859369E-02
40	1.419934E-05	3.384879E-03	4.936324E-02
45	1.728578E-05	3.376757E-03	5.013402E-02
50	2.094778E-05	3.368642E-03	5.090403E-02
55	2.511662E-05	3.360737E-03	5.165409E-02
60	2.9777E-05	3.353175E-03	5.237171E-02
65	3.457869E-05	3.346343E-03	5.301994E-02
70	3.910976E-05	3.340604E-03	5.356454E-02
75	4.285229E-05	3.336277E-03	5.397512E-02
80	4.550304E-05	3.333404E-03	5.424781E-02
85	4.713002E-05	3.33171E-03	5.440856E-02
90	4.802659E-05	3.330797E-03	5.449512E-02
95	4.848818E-05	3.330333E-03	5.453916E-02
100	4.871703E-05	3.330105E-03	5.456086E-02

Ok

RUN

CORRIDA # 2
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 440 °C
 MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0407 (g/s cm²)
 LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ϕ	η	rpi
5	1.254754	.5917475	6.069208E-07
10	1.428938	.5414625	5.15625E-07
15	1.605096	.4978664	4.853452E-07
20	1.793264	.458093	4.723422E-07
25	1.994206	.421173	4.667229E-07
30	2.212107	.3872129	4.638362E-07
35	2.451497	.3554763	4.624697E-07
40	2.709607	.3264427	4.599109E-07
45	2.98909	.2997902	4.549777E-07
50	3.292164	.2753018	4.457806E-07
55	3.609283	.2535237	4.279431E-07
60	3.937312	.2342439	3.973445E-07
65	4.253013	.2181445	3.477811E-07
70	4.534514	.2054126	2.782886E-07
75	4.757139	.1962248	1.977347E-07
80	4.910153	.1902858	1.23694E-07
85	5.002337	.1868351	6.946199E-08
90	5.052607	.1849894	3.622347E-08
95	5.078346	.1840535	1.808798E-08
100	5.091072	.183593	8.825729E-09

Ok

RUN

CORRIDA # 2
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 440 °C
MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0407 (g/s cm²)
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ξ	fA	Tb
5	1.407508E-07	7.243365E-02	458.4199
10	2.324618E-07	.1207039	470.6961
15	3.15473E-07	.1651724	482.0065
20	3.947022E-07	.2083409	492.9869
25	4.71992E-07	.2511715	503.8823
30	5.480087E-07	.2940256	514.7845
35	6.230725E-07	.3370898	525.741
40	6.972271E-07	.3804016	536.7615
45	7.701456E-07	.4237784	547.7993
50	8.413133E-07	.4669093	558.7755
55	9.096611E-07	.5091137	569.517
60	9.735316E-07	.549286	579.742
65	1.03051E-06	.5857537	589.025
70	1.077638E-06	.6163886	596.8238
75	1.112722E-06	.6394842	602.7036
80	1.135811E-06	.6548223	606.6086
85	1.149341E-06	.6638633	608.9106
90	1.156604E-06	.6687325	610.1503
95	1.160292E-06	.6712094	610.781
100	1.162107E-06	.6724297	611.0918

OK

RUN

CORRIDA # 3
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 460 °C
 MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0407 (g/s cm²)
 LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	Kc	Km	h
5	5.068748E-06	3.424037E-03	4.564752E-02
10	6.969017E-06	3.412481E-03	4.674411E-02
15	9.277143E-06	3.401718E-03	4.776544E-02
20	1.211239E-05	3.391273E-03	4.875651E-02
25	1.566171E-05	3.380886E-03	4.974221E-02
30	2.004544E-05	3.370559E-03	5.072212E-02
35	2.533186E-05	3.36039E-03	5.168703E-02
40	3.161173E-05	3.350493E-03	.0526262
45	3.852756E-05	3.341342E-03	5.349458E-02
50	4.550401E-05	3.333474E-03	5.424112E-02
55	5.132852E-05	3.327629E-03	5.479574E-02
60	5.528927E-05	3.323469E-03	5.514305E-02
65	5.74848E-05	3.322035E-03	5.532656E-02
70	5.853702E-05	3.32113E-03	5.541241E-02
75	5.900176E-05	3.320735E-03	5.544991E-02
80	5.919909E-05	3.320568E-03	5.546575E-02
85	5.928145E-05	3.320499E-03	5.547236E-02
90	5.931555E-05	3.32047E-03	5.547508E-02
95	5.932963E-05	3.320458E-03	5.547621E-02
100	5.933539E-05	3.320453E-03	5.547668E-02

Ok

RUN

CORRIDA # 3
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 460 °C
MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0407 (g/s cm²)
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	φ	η	rpi
5	1.632602	.4939757	7.56618E-07
10	1.907463	.4377061	6.471617E-07
15	2.195128	.3907232	6.107357E-07
20	2.50401	.3500249	5.928304E-07
25	2.845235	.3136888	5.819682E-07
30	3.219891	.2814335	5.710388E-07
35	3.624999	.2531429	5.537047E-07
40	4.060338	.2283373	5.231991E-07
45	4.499192	.2076513	4.671308E-07
50	4.910133	.1912208	3.767399E-07
55	5.234675	.1797706	2.594782E-07
60	5.447381	.1728402	1.49034E-07
65	5.562835	.1692341	7.355872E-08
70	5.617589	.167557	3.303704E-08
75	5.641658	.1668258	1.414252E-08
80	5.651857	.1665171	5.925744E-09
85	5.656109	.1663885	2.459518E-09
90	5.657871	.1663353	1.017095E-09
95	5.658597	.1663134	4.217896E-10
100	5.658895	.1663044	1.74472E-10

Ok

LIST RUN

CORRIDA # 3

PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 460 °C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0407 (g/s cm²)

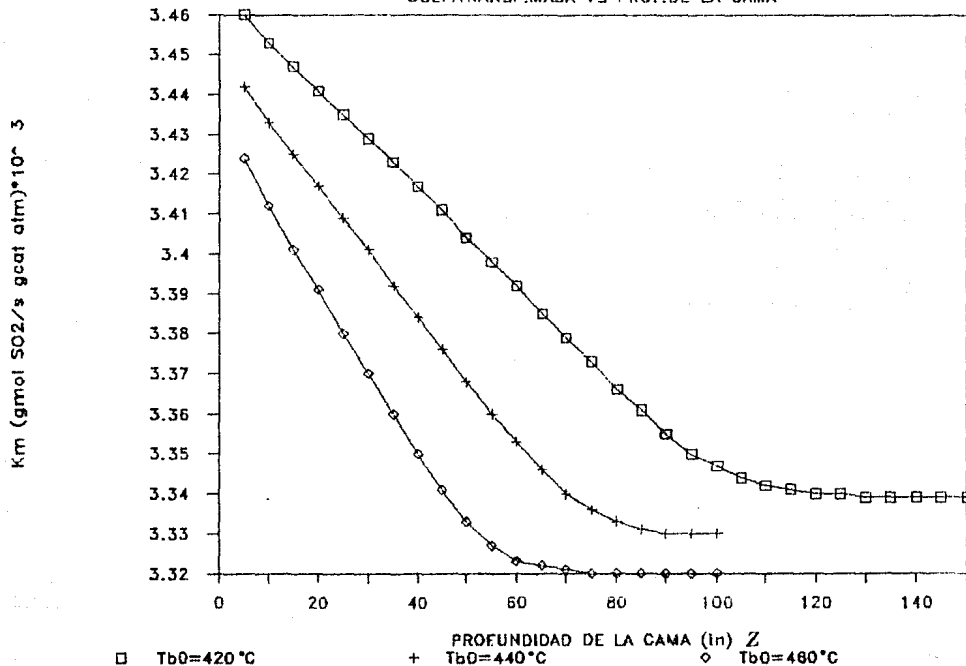
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ξ	fA	Tb
5	1.745409E-07	9.149324E-02	483.6188
10	2.871576E-07	.1522913	499.3227
15	3.892233E-07	.2086919	513.8975
20	4.863424E-07	.2635888	528.0901
25	5.803552E-07	.3179536	542.1516
30	6.716356E-07	.3719733	556.1305
35	7.597303E-07	.4253459	569.9485
40	8.430926E-07	.4770539	583.3421
45	9.187064E-07	.5250406	595.7777
50	9.820226E-07	.566071	606.4154
55	1.028477E-06	.596695	614.358
60	1.05721E-06	.6158669	619.3316
65	1.07228E-06	.6259953	621.9596
70	1.079304E-06	.6307331	623.1889
75	1.082367E-06	.6328026	623.726
80	1.08366E-06	.6336774	623.953
85	1.084199E-06	.6340418	624.0475
90	1.084422E-06	.6341928	624.0866
95	1.084515E-06	.6342551	624.1028
100	1.084553E-06	.6342811	624.1094

Ok

PRIMERA CAMA; G = .0407 g/(s cm²)

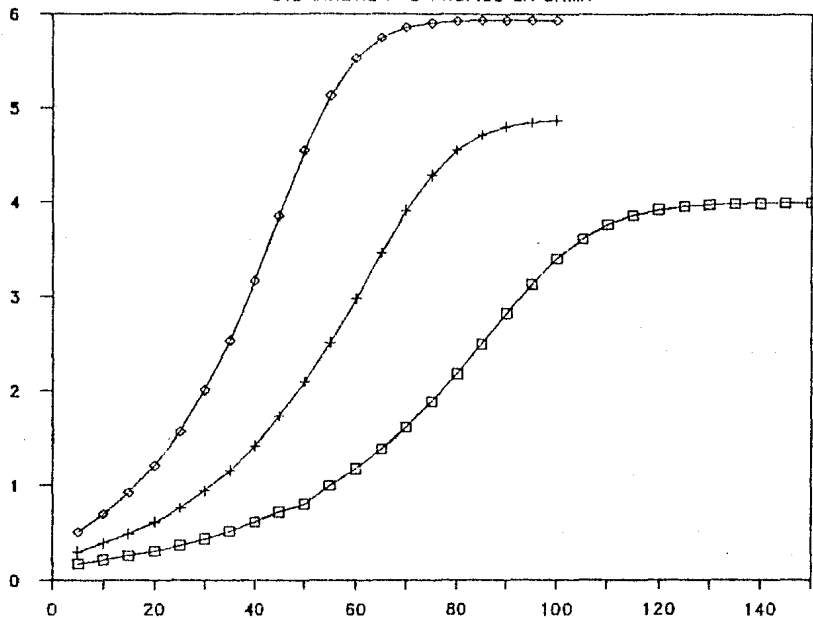
COEF. TRANSF. MASA VS PROF. DE LA CAMA



PRIMERA CAMA; $G = .0407 \text{ g}/(\text{s cm}^2)$

CTE. CINETICA VS PROF. DE LA CAMA

$K_c \cdot (\text{gmol SO}_2/\text{s gcat atm}) \cdot 10^{-7}$



□ $T_b = 420^\circ\text{C}$

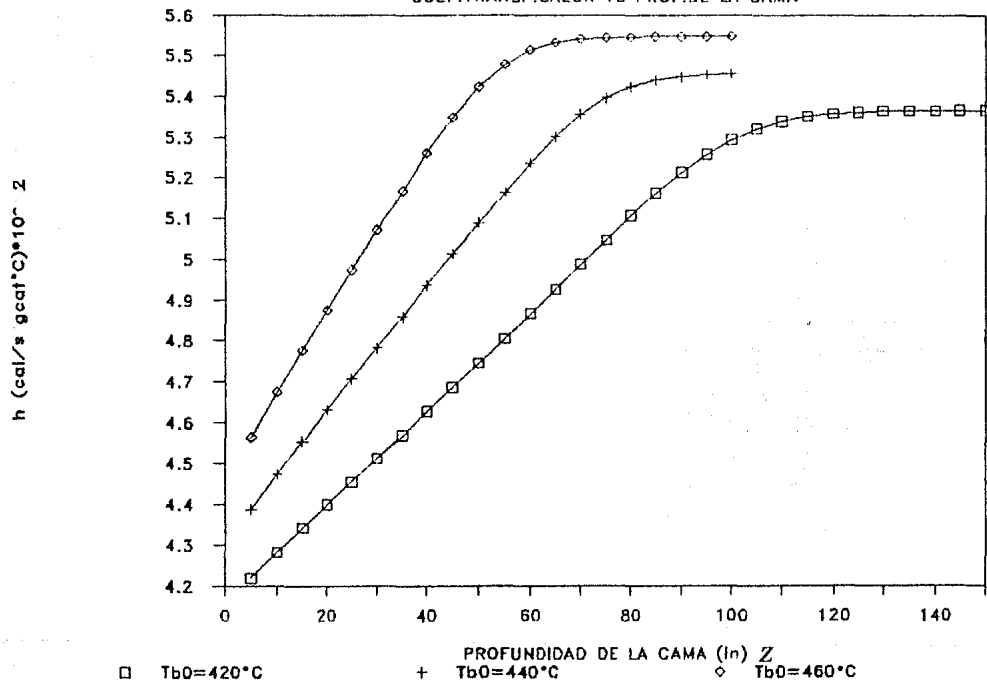
+ $T_b = 440^\circ\text{C}$

◇ $T_b = 460^\circ\text{C}$

PROFUNDIDAD DE LA CAMA (ln) Z

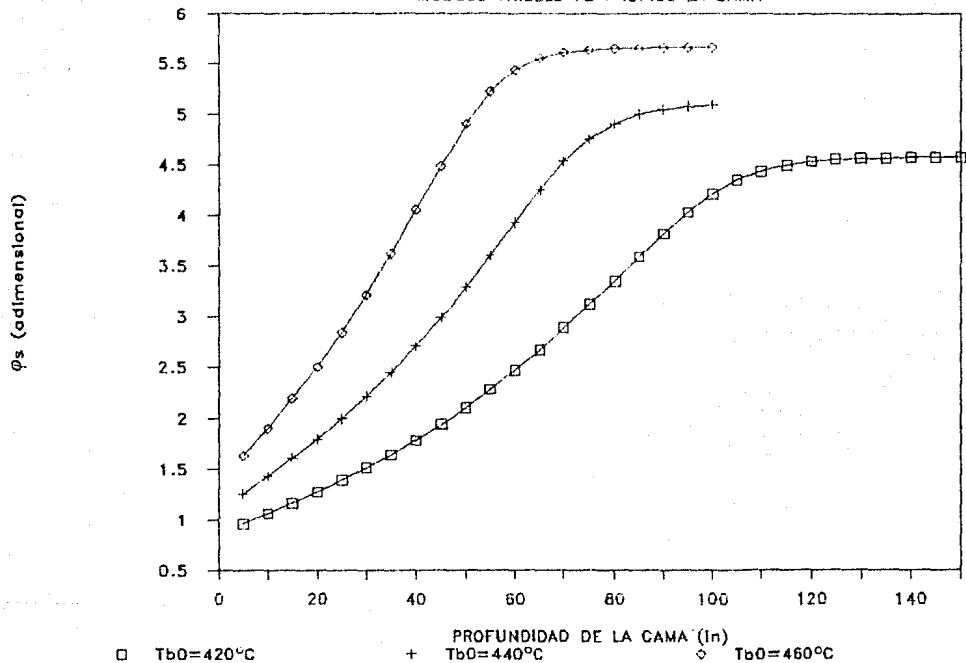
PRIMERA CAMA; G=.0407 g/(s cm²)

COEF.TRANSF.CALOR VS PROF.DE LA CAMA



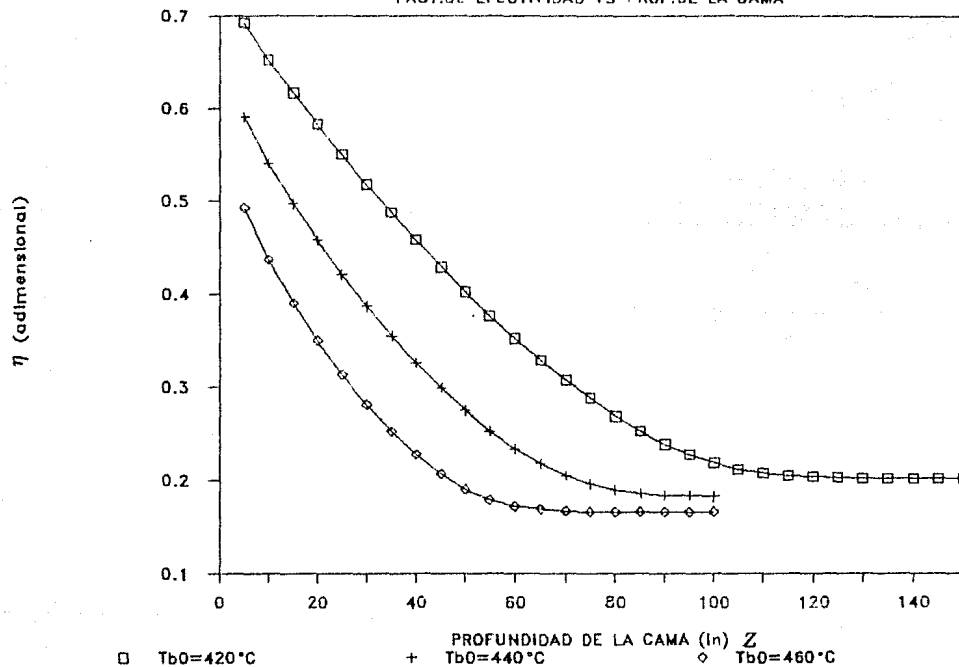
PRIMERA CAMA; G=.0407 g/(s cm²)

MODULO THIELLE VS PROF.DE LA CAMA



PRIMERA CAMA; $G = .0407 \text{ g}/(\text{s cm}^2)$

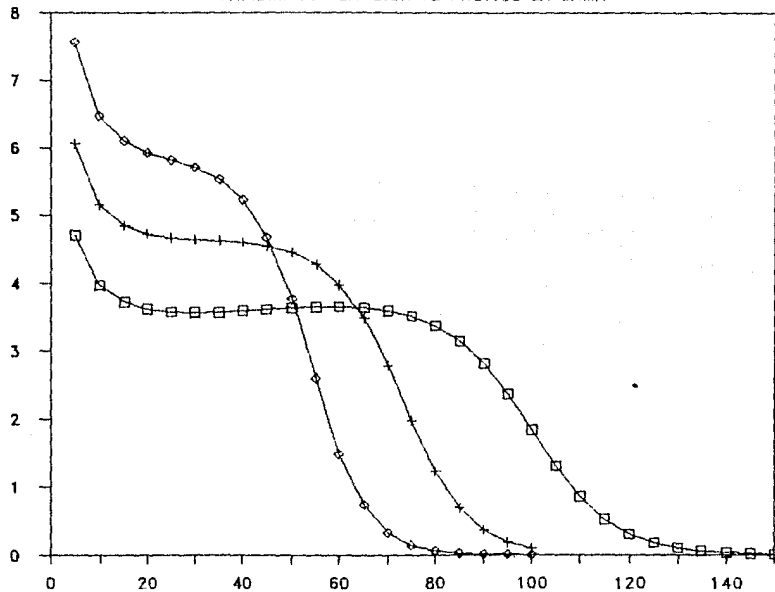
FACT.DE EFECTIVIDAD VS PROF.DE LA CAMA



PRIMERA CAMA; $G = .0407 \text{ g}/(\text{s cm}^2)$

RAPIDEZ DE REACCION VS PROF.DE LA CAMA

rpl (gmol SO₂/s gcat) * 10⁻⁷



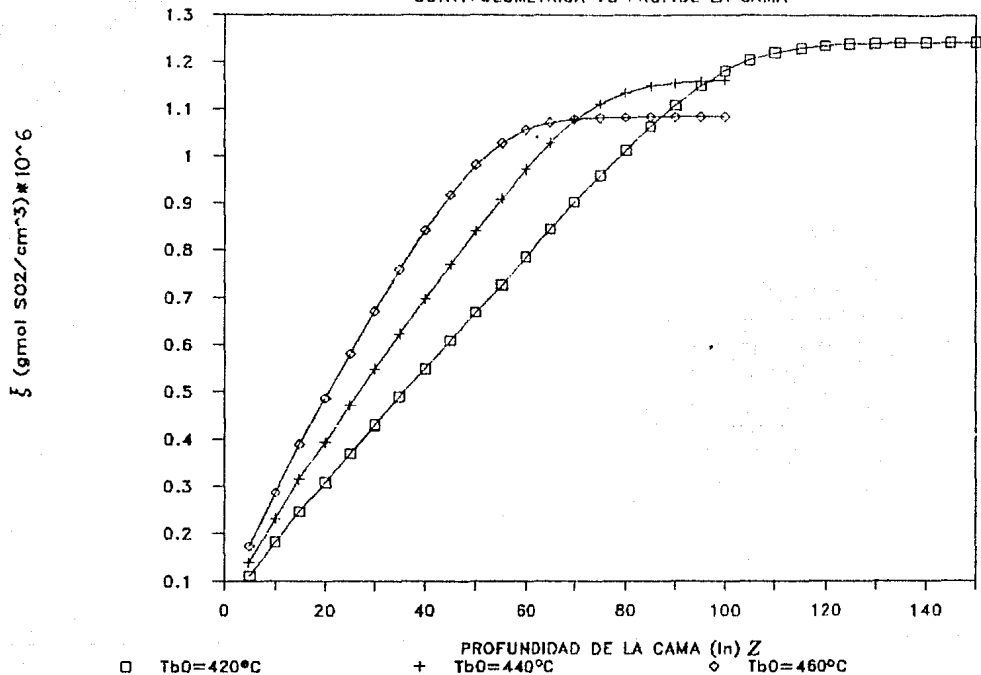
□ Tb0=420°C

+ Tb0=440°C

◇ Tb0=460°C

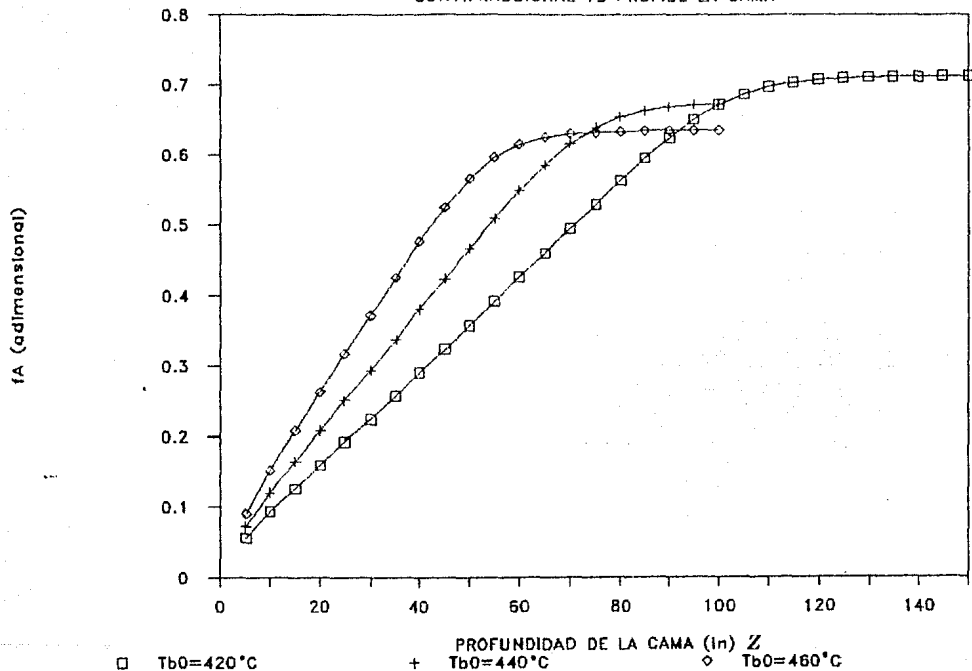
PRIMERA CAMA; G = .0407 g/(s cm²)

CONV. VOLUMETRICA VS PROF. DE LA CAMA



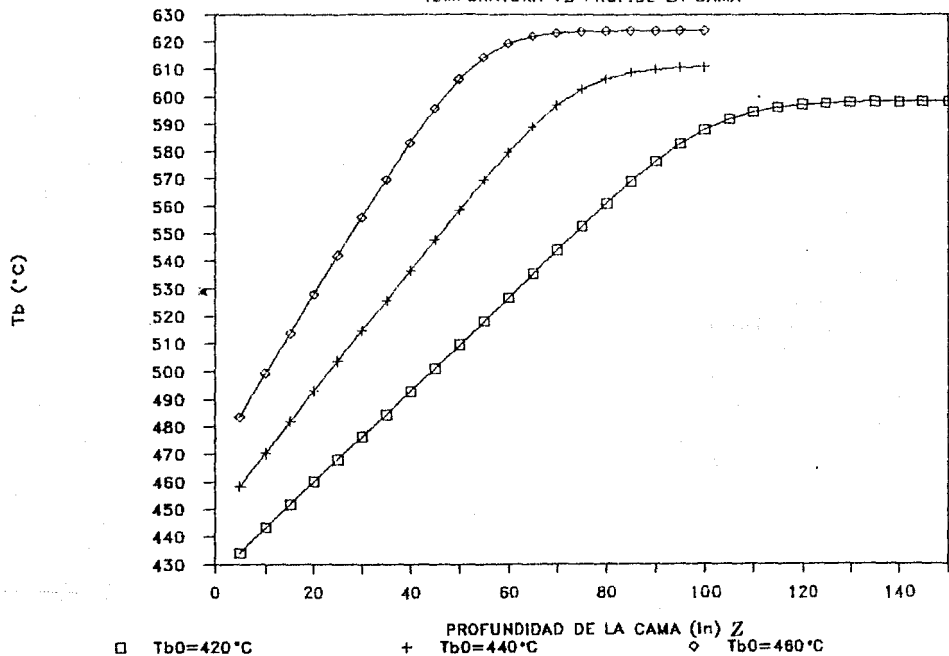
PRIMERA CAMA; G=.0407 g/(s cm²)

CONV.FRACCIONAL VS PROF.DE LA CAMA



PRIMERA CAMA; $G = .0407 \text{ g}/(\text{s cm}^2)$

TEMPERATURA VS PROF.DE LA CAMA



RUN

CORRIDA # 4

PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 420 °C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0678 (g/s cm²)

LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	Kc	Km	h
5	1.518309E-06	3.969151E-03	4.187448E-02
10	1.759432E-06	3.967437E-03	4.230706E-02
15	2.001196E-06	3.965916E-03	4.269121E-02
20	2.255366E-06	3.964482E-03	4.305334E-02
25	2.527722E-06	3.963074E-03	4.340356E-02
30	2.822481E-06	3.961734E-03	4.374706E-02
35	3.143373E-06	3.960387E-03	4.408694E-02
40	3.494012E-06	3.959047E-03	4.442518E-02
45	3.878114E-06	3.957708E-03	4.476316E-02
50	4.299556E-06	3.956367E-03	4.510185E-02
55	4.762468E-06	3.95502E-03	4.544194E-02
60	5.262409E-06	3.953651E-03	4.578761E-02
65	5.843596E-06	3.952285E-03	4.613231E-02
70	6.460642E-06	3.95091E-03	4.647951E-02
75	7.138958E-06	3.949524E-03	4.682934E-02
80	7.88421E-06	3.948128E-03	4.718182E-02
85	8.702408E-06	3.946722E-03	4.753691E-02
90	9.599688E-06	3.945306E-03	4.789444E-02
95	1.058232E-05	3.943881E-03	4.825416E-02
100	1.167964E-05	3.942433E-03	4.861959E-02
105	1.285458E-05	3.940995E-03	4.898281E-02
110	1.413248E-05	3.939553E-03	4.934662E-02
115	1.551724E-05	3.938113E-03	.0497101
120	1.701101E-05	3.93668E-03	5.007207E-02
125	1.861277E-05	3.935258E-03	5.043096E-02
130	2.035259E-05	3.933842E-03	5.078832E-02
135	2.215372E-05	3.93247E-03	5.113495E-02
140	2.402835E-05	3.931139E-03	5.147091E-02
145	2.594843E-05	3.929865E-03	5.179246E-02
150	2.78758E-05	3.928666E-03	5.209532E-02
155	2.976291E-05	3.927588E-03	5.237494E-02
160	3.155634E-05	3.926559E-03	5.262696E-02
165	3.320336E-05	3.925685E-03	5.284783E-02
170	3.466032E-05	3.924941E-03	5.303554E-02
175	3.589996E-05	3.924329E-03	5.319001E-02
180	3.691551E-05	3.923841E-03	.0533132

Dk

RUN

CORRIDA # 4
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 420 °C
MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0678 (g/s cm²)
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ϕ	η	rpi
5	.909026	.7090661	5.350114E-07
10	.9763238	.682855	4.372488E-07
15	1.0397	.659641	4.001912E-07
20	1.101238	.6378028	3.807996E-07
25	1.163867	.6167948	3.694472E-07
30	1.227881	.5963731	3.625345E-07
35	1.29381	.576416	3.583982E-07
40	1.362051	.5568635	3.559852E-07
45	1.43293	.5376886	3.548514E-07
50	1.506728	.5188832	3.545882E-07
55	1.583699	.5004511	3.549389E-07
60	1.665835	.4820228	3.561773E-07
65	1.750019	.4643601	3.572217E-07
70	1.838049	.4471124	3.584226E-07
75	1.930124	.4302957	3.596738E-07
80	2.026427	.413926	3.608778E-07
85	2.127127	.3980183	3.619396E-07
90	2.232368	.3825881	3.627599E-07
95	2.342265	.3676492	3.632312E-07
100	2.459333	.3529217	3.636319E-07
105	2.578938	.3390041	3.630042E-07
110	2.703252	.3256216	3.615785E-07
115	2.832109	.3127907	3.591316E-07
120	2.965207	.3005305	3.55385E-07
125	3.102038	.2888644	3.499896E-07
130	3.24465	.2777681	3.426022E-07
135	3.38658	.2672234	3.327799E-07
140	3.528901	.257539	3.195751E-07
145	3.66965	.2486062	3.027073E-07
150	3.806409	.2404787	2.817901E-07
155	3.936392	.2332096	2.567605E-07
160	4.056685	.2268417	2.280686E-07
165	4.164625	.2213965	1.967966E-07
170	4.258247	.2168637	1.645855E-07
175	4.33662	.2131952	1.333399E-07
180	4.399994	.2103079	1.047908E-07

Ok

RUN

CORRIDA # 4

PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 420 °C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0678 (g/s cm²)

LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ξ	fA	Tb
5	7.630092E-08	3.846425E-02	429.6432
10	1.247712E-07	6.317649E-02	435.8379
15	1.674582E-07	8.512441E-02	441.3392
20	2.073887E-07	.1058151	446.525
25	2.457215E-07	.1258268	451.5403
30	2.830479E-07	.1454564	456.4594
35	3.197152E-07	.1648801	461.3266
40	3.55945E-07	.184212	466.1705
45	3.918859E-07	.2035303	471.0105
50	4.276406E-07	.2228904	475.8607
55	4.632803E-07	.2423322	480.731
60	4.988709E-07	.2618939	485.6309
65	5.344562E-07	.2816028	490.5673
70	5.700249E-07	.3014556	495.5394
75	6.055844E-07	.3214602	500.549
80	6.411319E-07	.3416185	505.5968
85	6.766552E-07	.3619272	510.6818
90	7.121327E-07	.3823776	515.8019
95	7.475333E-07	.4029551	520.9532
100	7.828473E-07	.4236573	526.1354
105	8.17993E-07	.4444386	531.337
110	8.528939E-07	.4652555	536.5468
115	8.874619E-07	.4860555	541.7521
120	9.215856E-07	.5067703	546.9355
125	9.551253E-07	.5273116	552.075
130	9.879071E-07	.5475667	557.1425
135	1.019743E-06	.5674101	562.1064
140	1.050336E-06	.586644	566.9175
145	1.079376E-06	.6050545	571.5221
150	1.106513E-06	.6223968	575.8593
155	1.131382E-06	.6384097	579.8636
160	1.153642E-06	.6528426	583.4727
165	1.173033E-06	.665493	586.6356
170	1.189425E-06	.6762443	589.3237
175	1.202854E-06	.6850928	591.5358
180	1.213525E-06	.6921492	593.3

Ok

RUN

CORRIDA # 5
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 440 °C
MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0678 (g/s cm²)
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	Kc	Km	h
5	2.604938E-06	3.962731E-03	4.349533E-02
10	3.119028E-06	3.960491E-03	4.406077E-02
15	3.652976E-06	3.958484E-03	4.456734E-02
20	4.23125E-06	3.956583E-03	4.504751E-02
25	4.867782E-06	3.954735E-03	4.551378E-02
30	5.574035E-06	3.952918E-03	4.597253E-02
35	6.374332E-06	3.951101E-03	4.643123E-02
40	7.255908E-06	3.949303E-03	4.688521E-02
45	8.241551E-06	3.947505E-03	4.733916E-02
50	9.343686E-06	3.945703E-03	4.779399E-02
55	1.057537E-05	3.943896E-03	4.825022E-02
60	1.197365E-05	3.942067E-03	.0487119
65	1.350953E-05	3.940247E-03	4.917155E-02
70	1.521606E-05	3.938423E-03	4.963206E-02
75	1.710504E-05	3.936599E-03	5.009248E-02
80	1.922135E-05	3.934766E-03	.0505553
85	2.150292E-05	3.93296E-03	5.101104E-02
90	2.397537E-05	3.931182E-03	5.146017E-02
95	2.662072E-05	3.929445E-03	5.189866E-02
100	2.945254E-05	3.927756E-03	5.232485E-02
105	3.231632E-05	3.926172E-03	.0527249
110	3.516834E-05	3.924709E-03	5.309424E-02
115	3.789934E-05	.0039234	5.342464E-02
120	4.039372E-05	3.922274E-03	5.370912E-02
125	4.255352E-05	3.921345E-03	5.394358E-02
130	4.432221E-05	3.920613E-03	5.412814E-02
135	4.569526E-05	3.920063E-03	5.426715E-02
140	4.671185E-05	3.919664E-03	5.436779E-02
145	4.743607E-05	3.919385E-03	5.443835E-02
150	4.79368E-05	3.919194E-03	5.448661E-02
155	4.82756E-05	3.919065E-03	5.451902E-02
160	4.850145E-05	3.91898E-03	5.454051E-02

Ok

RUN

CORRIDA # 5

PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 440 °C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0678 (g/s cm²)

LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ϕ	η	rpi
5	1.181001	.6129947	6.816479E-07
10	1.288944	.57899	5.637075E-07
15	1.391852	.5495515	5.186663E-07
20	1.495035	.5225318	4.951525E-07
25	1.600687	.4971869	4.813918E-07
30	1.710079	.4731699	4.729341E-07
35	1.826003	.4499305	4.682308E-07
40	1.94556	.4280756	4.648981E-07
45	2.071013	.4071868	4.628049E-07
50	2.202853	.3872195	4.614306E-07
55	2.341507	.3681435	4.603743E-07
60	2.489782	.3496491	4.597903E-07
65	2.643348	.3322962	4.583357E-07
70	2.804557	.3157923	4.56168E-07
75	2.9734	.3001365	4.528684E-07
80	3.152584	.2850994	4.48369E-07
85	3.335928	.2711631	4.41074E-07
90	3.524967	.2581222	4.305983E-07
95	3.717873	.2460177	4.138837E-07
100	3.915226	.2347266	3.960896E-07
105	4.106743	.224685	3.692722E-07
110	4.290473	.2157948	3.351315E-07
115	4.460687	.2081308	2.939836E-07
120	4.611819	.2017367	2.47672E-07
125	4.739662	.1965994	1.995489E-07
130	4.842439	.192634	1.536575E-07
135	4.921115	.1896904	1.134422E-07
140	4.97877	.1875808	8.07903E-08
145	5.019545	.186112	5.591205E-08
150	5.047596	.1851122	3.78729E-08
155	5.066513	.1844428	2.526307E-08
160	5.079093	.1839999	1.667303E-08

04

RUN

CORRIDA # 5
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 440 °C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0678 (g/s cm²)

LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ξ	fA	Tb
5	9.846101E-08	5.046606E-02	452.8333
10	1.596438E-07	8.230614E-02	460.9307
15	2.138377E-07	.11083	468.185
20	2.646668E-07	.137866	475.0612
25	3.135221E-07	.1641186	481.7385
30	3.611052E-07	.1899464	488.3081
35	4.078435E-07	.2155722	494.8265
40	4.539885E-07	.2411294	501.3278
45	4.996595E-07	.2666833	507.8285
50	5.449482E-07	.2922858	514.342
55	5.899017E-07	.3179656	520.8754
60	6.345685E-07	.3437533	527.4365
65	6.788993E-07	.3696234	534.019
70	7.228288E-07	.3955401	540.6136
75	7.662671E-07	.4214509	547.2071
80	8.091083E-07	.4472915	553.783
85	8.511511E-07	.4729359	560.3094
90	8.92122E-07	.4982079	566.7413
95	9.316775E-07	.5228793	573.0208
100	9.693814E-07	.5466535	579.0722
105	1.004702E-06	.56916	584.8012
110	1.036985E-06	.5899371	590.0902
115	1.065603E-06	.608524	594.8218
120	1.090043E-06	.6245259	598.8956
125	1.110046E-06	.637714	602.2532
130	1.125705E-06	.6480955	604.8963
135	1.137447E-06	.6559136	606.8868
140	1.145921E-06	.6615746	608.3281
145	1.151849E-06	.6655435	609.3386
150	1.155896E-06	.6682578	610.0298
155	1.158612E-06	.6700807	610.4938
160	1.160411E-06	.6712894	610.8016

OK

RUN

CORRIDA # 6
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 460 °C
MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0678 (g/s cm²)
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	Kc	Km	h
5	4.312068E-06	3.956343E-03	4.510792E-02
10	5.352441E-06	3.953474E-03	4.583228E-02
15	6.466291E-06	3.950898E-03	4.648251E-02
20	7.722084E-06	3.948436E-03	.0471041
25	9.12614E-06	3.946052E-03	4.770597E-02
30	1.072029E-05	3.943704E-03	4.829875E-02
35	1.255775E-05	3.941361E-03	4.889034E-02
40	1.462617E-05	3.939041E-03	.0494761
45	1.697412E-05	3.936728E-03	5.005996E-02
50	1.966592E-05	3.934408E-03	5.064559E-02
55	2.265766E-05	3.932117E-03	5.122409E-02
60	2.603574E-05	3.929837E-03	5.179958E-02
65	2.970981E-05	3.927616E-03	5.236028E-02
70	3.367186E-05	3.925471E-03	5.290194E-02
75	3.789121E-05	3.923426E-03	5.341814E-02
80	4.208493E-05	3.921565E-03	5.388804E-02
85	4.608754E-05	3.91993E-03	5.430066E-02
90	4.965755E-05	3.918572E-03	5.464369E-02
95	5.260522E-05	3.917511E-03	5.491145E-02
100	5.493784E-05	3.916721E-03	5.511093E-02
105	5.653936E-05	3.916185E-03	.0552461
110	5.761304E-05	3.915833E-03	5.533492E-02
115	5.830296E-05	3.91561E-03	5.539124E-02
120	5.873322E-05	3.915472E-03	5.542609E-02
125	5.899673E-05	3.915388E-03	5.544732E-02
130	5.915606E-05	3.915338E-03	5.546013E-02
135	5.925171E-05	3.915307E-03	5.546779E-02
140	5.930892E-05	3.915289E-03	5.547238E-02

OK

RUN

CORRIDA # 6
PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 460 °C
MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0678 (q/s cm²)
LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

Z	ϕ	η	rpi
5	1.50889	.5210206	8.591259E-07
10	1.676561	.4814804	7.085758E-07
15	1.838816	.4483744	6.52302E-07
20	2.005889	.4185113	6.236974E-07
25	2.177467	.3915385	6.061032E-07
30	2.3573	.3666295	5.946436E-07
35	2.549234	.343216	5.871153E-07
40	2.749845	.3216573	5.805312E-07
45	2.961988	.3015584	5.743125E-07
50	3.189025	.2826056	5.67891E-07
55	3.425372	.2652051	5.589236E-07
60	3.675929	.2489166	5.470034E-07
65	3.93279	.2341325	5.291545E-07
70	4.194953	.2207111	5.03505E-07
75	4.460144	.2085723	4.678232E-07
80	4.712123	.198164	4.191767E-07
85	4.943421	.189434	3.582036E-07
90	5.143176	.1824426	2.887765E-07
95	5.303993	.1771384	2.183223E-07
100	5.428556	.1732129	1.551304E-07
105	5.513127	.170626	1.043135E-07
110	5.569329	.1689408	6.725638E-08
115	5.605239	.1678777	4.208791E-08
120	5.627556	.167222	2.581938E-08
125	5.641195	.1668233	1.563825E-08
130	5.649431	.1665832	9.397068E-09
135	5.65437	.1664395	5.620599E-09
140	5.657324	.1663536	3.350378E-09

Ok

RUN

CORRIDA # 6

PRIMERA CAMA

TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LOS GASES= 460 °C

MASA VELOCIDAD DE LOS GASES= .0678 (g/s cm²)

LONGITUD DEL INCREMENTO DE INTEGRACION= 2.54 cm

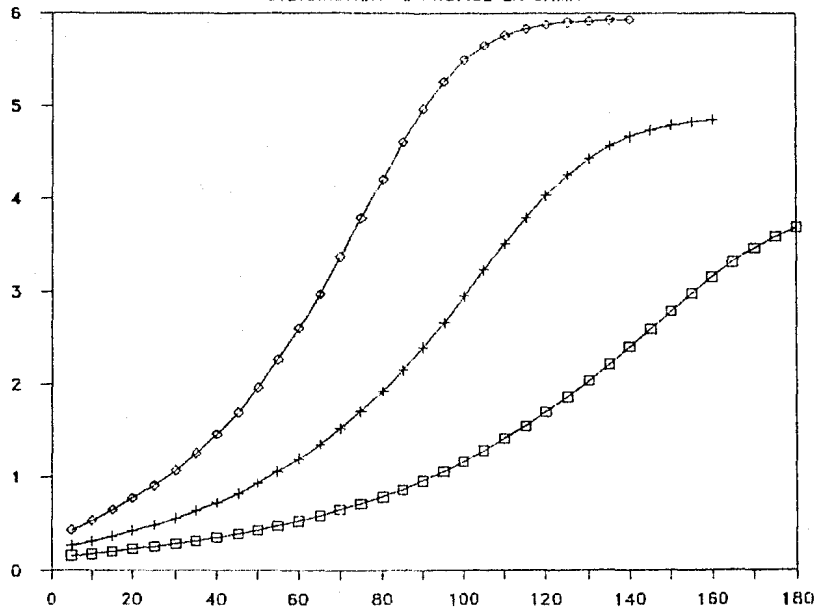
Z	ξ	fA	Tb
5	1.181588E-07	6.158712E-02	475.8968
10	1.937472E-07	.1017602	486.2701
15	2.605801E-07	.1378112	495.5818
20	3.23211E-07	.1720683	504.4326
25	3.83365E-07	.2054197	513.0516
30	4.41804E-07	.238259	521.5406
35	4.989887E-07	.2708298	529.9625
40	5.551615E-07	.3032619	538.3508
45	6.103732E-07	.3355797	546.7119
50	6.646478E-07	.3677929	555.0482
55	7.178183E-07	.399796	563.3326
60	7.696401E-07	.4314298	571.5238
65	8.197147E-07	.4624301	579.5534
70	8.674076E-07	.4923687	587.3101
75	9.119169E-07	.5206877	594.6493
80	9.522008E-07	.5466461	601.3786
85	9.871578E-07	.5694341	607.2874
90	1.015924E-06	.5883751	612.1997
95	1.038193E-06	.6031577	616.0343
100	1.054385E-06	.6139743	618.8404
105	1.065504E-06	.6214351	620.7761
110	1.072787E-06	.6263372	622.0481
115	1.077397E-06	.6294456	622.8546
120	1.080249E-06	.6313691	623.3537
125	1.081979E-06	.6325406	623.6577
130	1.083024E-06	.6332471	623.8411
135	1.08365E-06	.6336704	623.9509
140	1.084024E-06	.6339232	624.0166

Ok

PRIMERA CAMA; G=.0678 g/(s cm²)

CTE.CINETICA VS PROF.DE LA CAMA

Kc (gmol SO₂/s gcat atm)*10⁻⁷



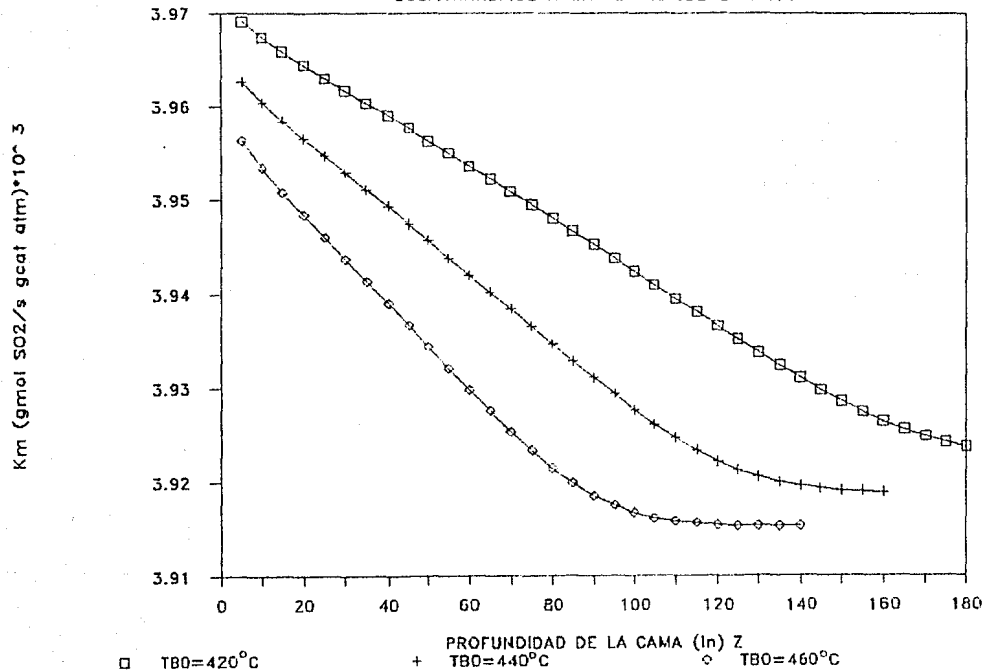
□ Tb0=420°C

+ Tb0=440°C

◇ Tb0=460°C

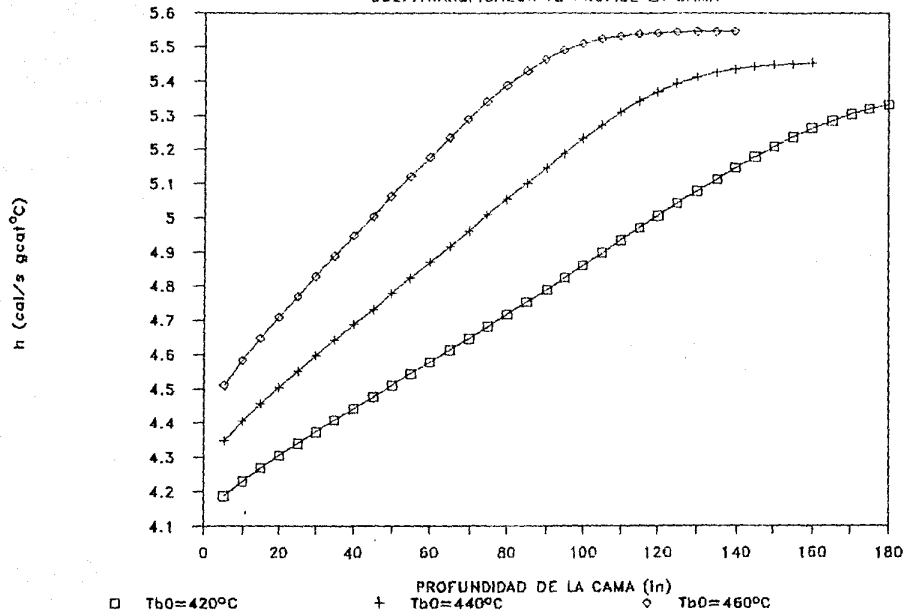
PRIMERA CAMA; G=0.0678 g/s cm²

COEF. TRANSF. DE MASA VS PROF. DE LA CAMA



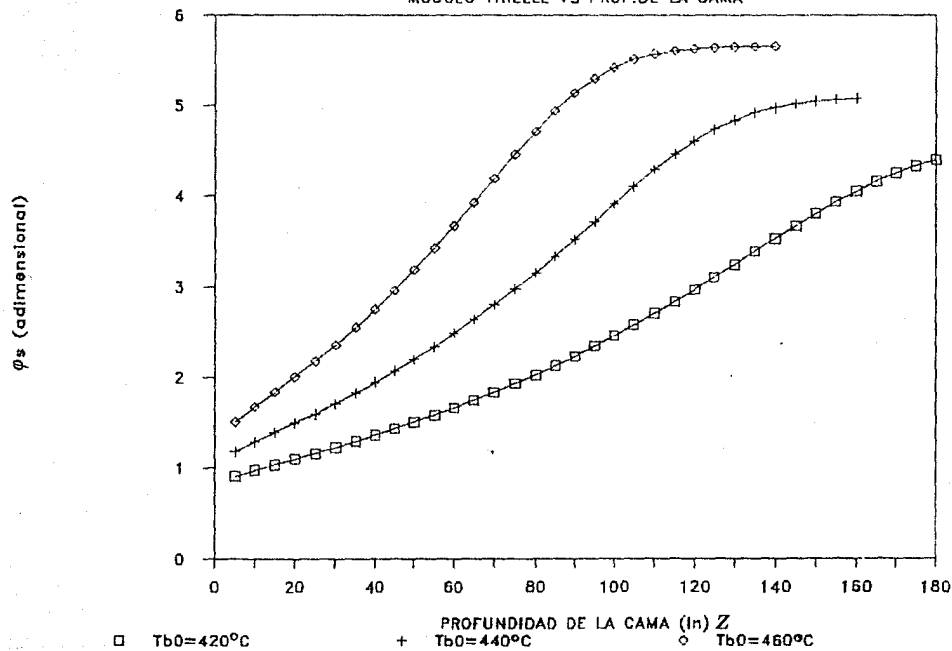
PRIMERA CAMA; G=0.0678 g/s cm²

COEF. TRANSF. CALOR VS PROF. DE LA CAMA



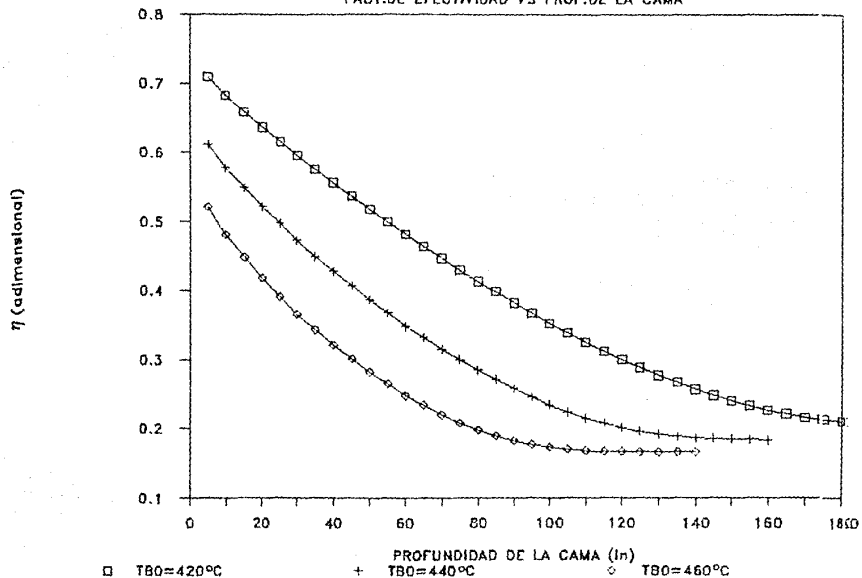
PRIMERA CAMA; $G=0.0678 \text{ g/s cm}^2$

MODULO THIELLE VS PROF.DE LA CAMA



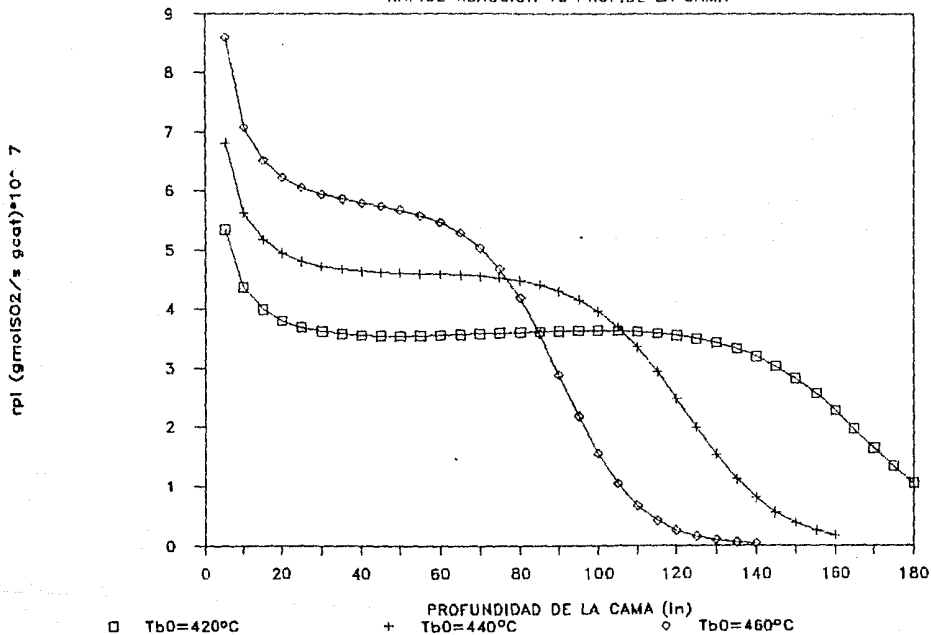
PRIMERA CAMA; G=0.0678 g/s cm²

FACT.DE EFECTIVIDAD VS PROF.DE LA CAMA



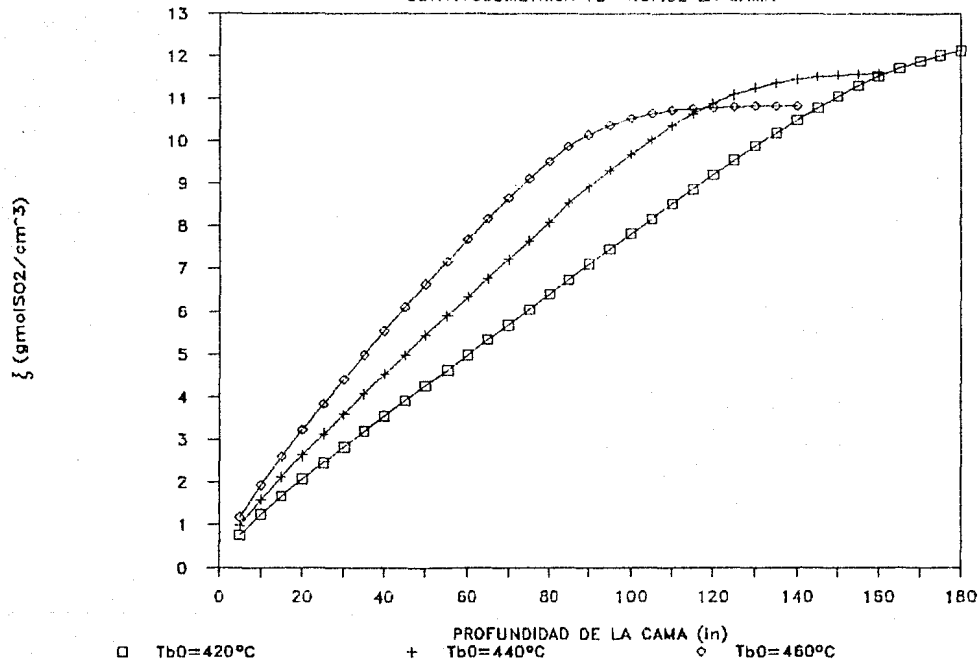
PRIMERA CAMA; $G=0.0678 \text{ g/s cm}^2$

RAP. DE REACCION VS PROF. DE LA CAMA



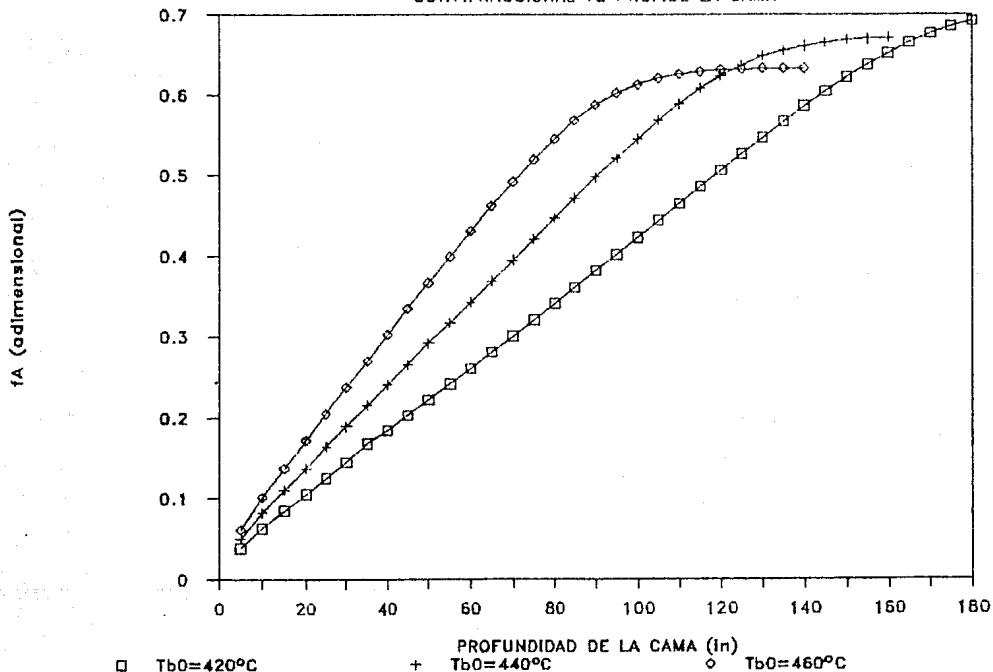
PRIMERA CAMA; G=0.0678 g/s cm²

CONV.VOLUMETRICA VS PROF.DE LA CAMA



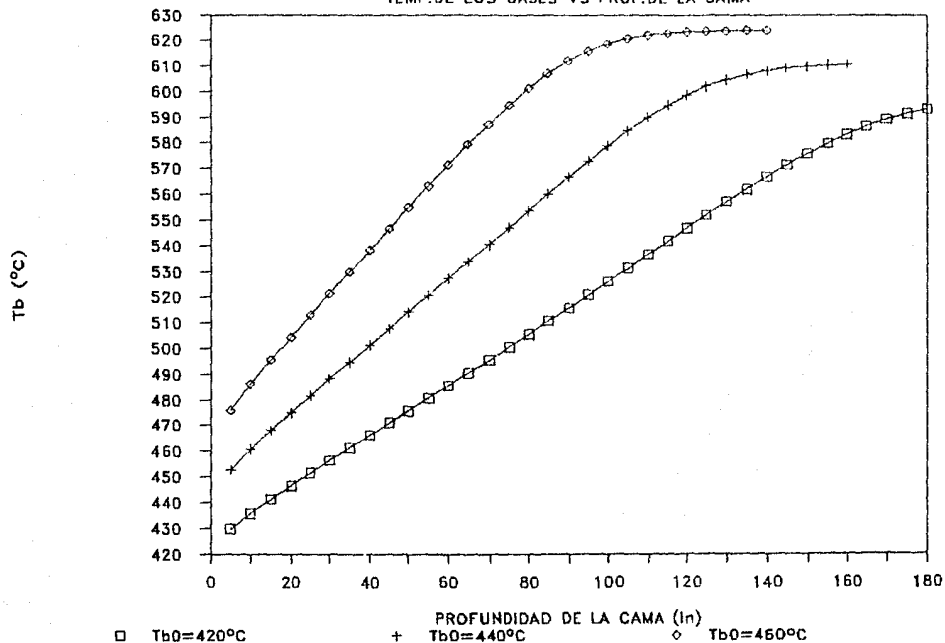
PRIMERA CAMA; $G=0.0678 \text{ g/s cm}^2$

CONV.FRACCIONAL VS PROF.DE LA CAMA



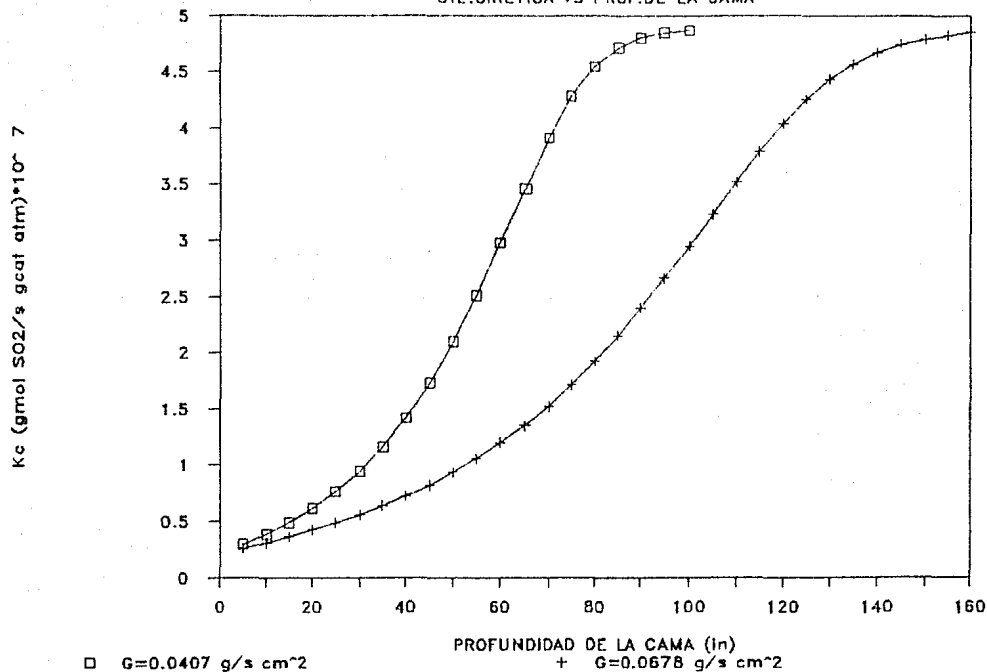
PRIMERA CAMA; $G=0.0678 \text{ g/s cm}^2$

TEMP.DE LOS GASES VS PROF.DE LA CAMA



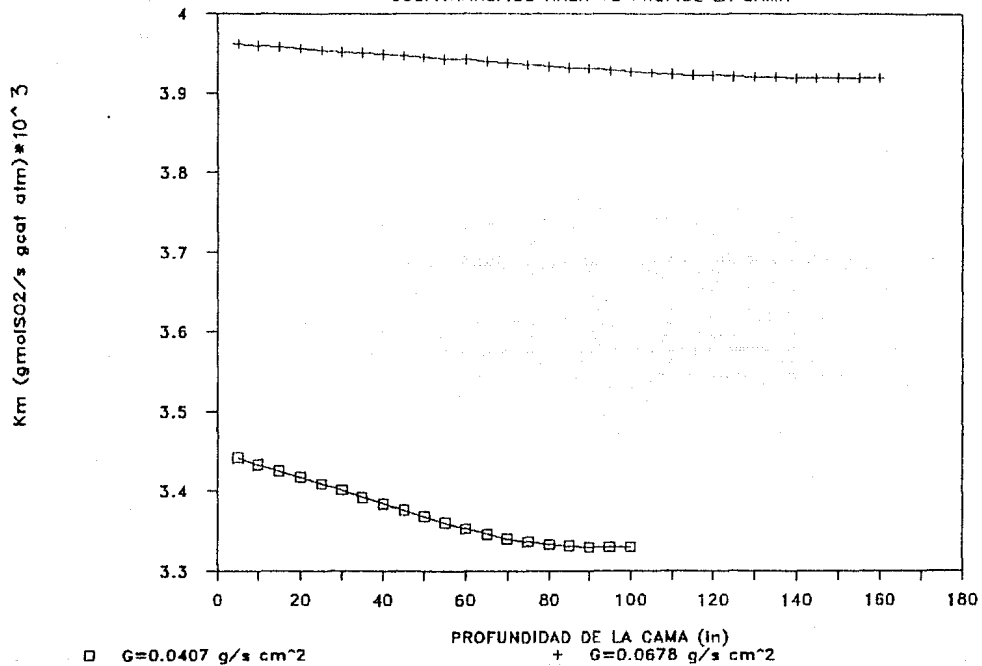
PRIMERA CAMA; $T_bO = 440^{\circ}C$

CTE.CINETICA VS PROF.DE LA CAMA



PRIMERA CAMA; $T_{b0} = 440^\circ\text{C}$

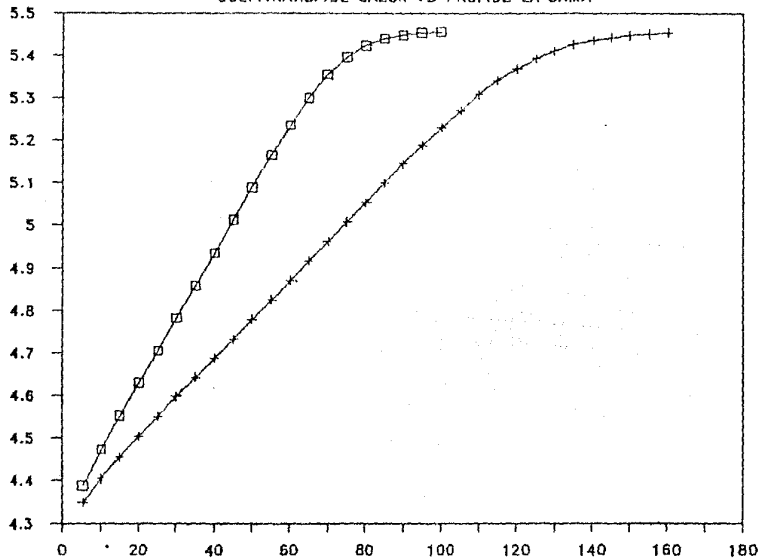
COEF. TRANSF. DE MASA VS PROF. DE LA CAMA



PRIMERA CAMA; $T_{b0}=440^{\circ}\text{C}$

COEF. TRANSF. DE CALOR VS PROF. DE LA CAMA

h (cal/s $\text{cm}^2\text{C}^{\circ}$) $\times 10^{-2}$

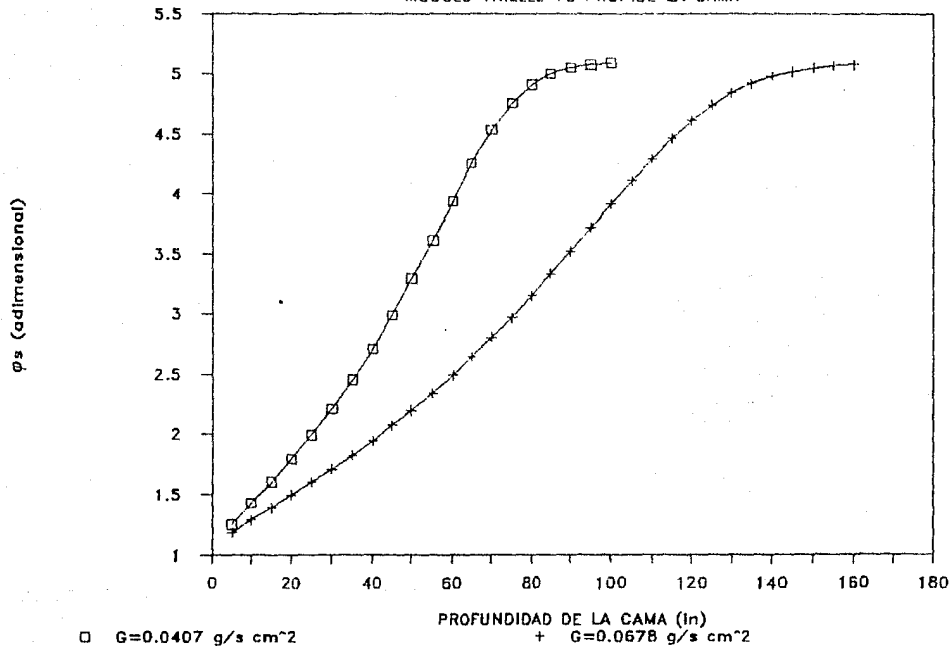


□ $G=0.0407$ g/s cm^{-2}

+ $G=0.0678$ g/s cm^{-2}

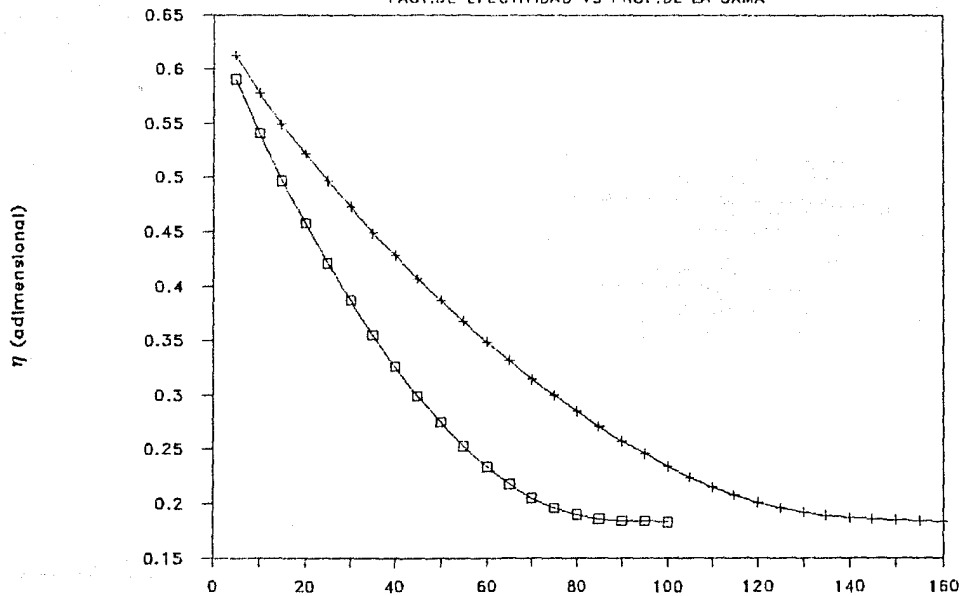
PRIMERA CAMA; $T_{b0}=440^{\circ}\text{C}$

MODULO THIELLE VS PROF.DE LA CAMA



PRIMERA CAMA; $T_{b0} = 440^\circ\text{C}$

FACT.DE EFECTIVIDAD VS PROF.DE LA CAMA

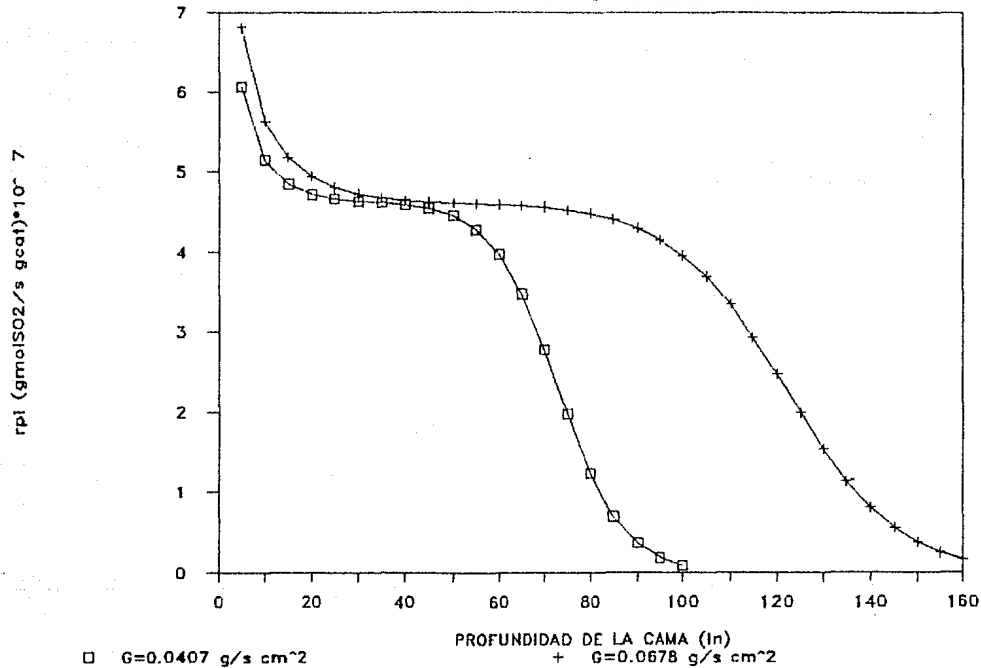


□ $G = 0.0407 \text{ g/s cm}^2$

+ $G = 0.0678 \text{ g/s cm}^2$

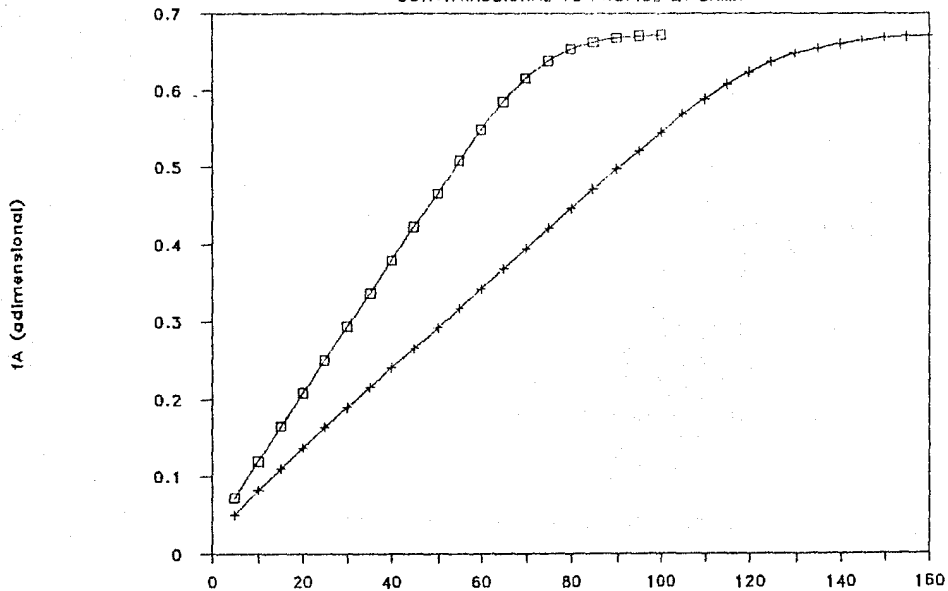
PRIMERA CAMA; $T_b0 = 440^\circ\text{C}$

RAP. DE REACCION VS PROF. DE LA CAMA



PRIMERA CAMA; $T_{b0}=440^{\circ}\text{C}$

CONV.FRACCIONAL VS PROF.DE LA CAMA

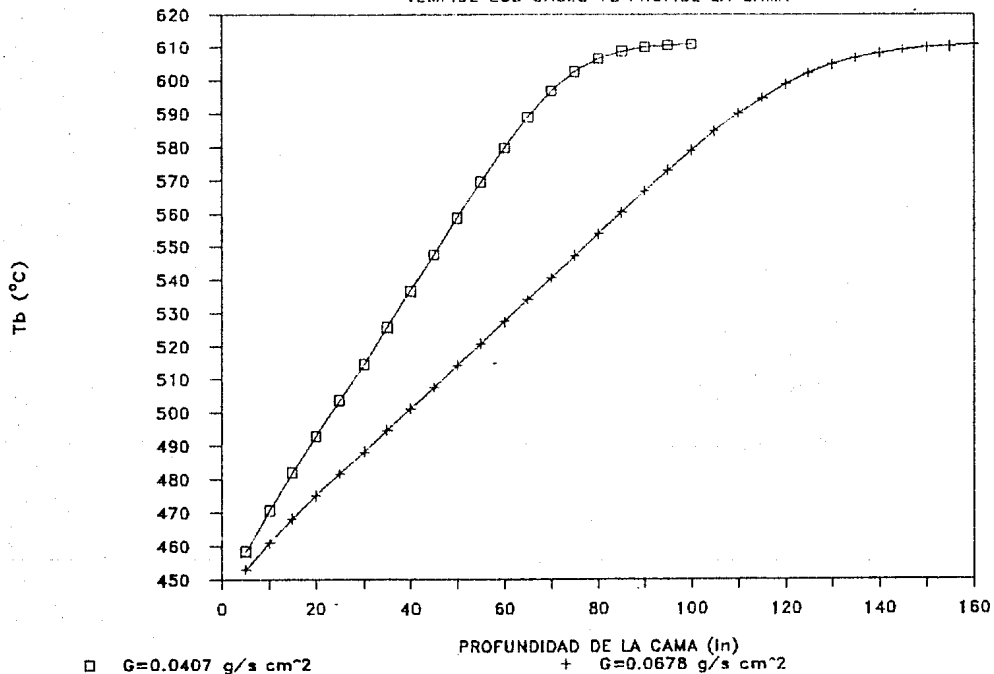


□ $G=0.0407 \text{ g/s cm}^2$

+ $G=0.0678 \text{ g/s cm}^2$

PRIMERA CAMA; $T_{b0}=440^{\circ}\text{C}$

TEMP.DE LOS GASES VS PROF.DE LA CAMA



□ $G=0.0407 \text{ g/s cm}^2$

+ $G=0.0678 \text{ g/s cm}^2$

PRESENTACION DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS DURANTE LA
SIMULACION, UTILIZANDO LA MISMA PARTICULA CATALITICA TIPICA
EN CADA UNO DE LOS CASOS

CORRIDA	G (g/s cm ²)	Tb (°C)	Tb eq(°C)	fA	Z (in)
1	0.0407	420.0	598.3	0.712	150
2	0.0407	440.0	611.0	0.672	100
3	0.0407	460.0	624.1	0.634	100
4	0.0678	420.0	593.2	0.692	180
5	0.0678	440.0	610.8	0.671	160
6	0.0678	460.0	624.0	0.634	140

OBSERVANDO LA TABLA ANTERIOR, SE PUEDE DECIR QUE:

- EL EFECTO DE LA MODIFICACION DE LA TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA EN LA ALIMENTACION, SE VE REFLEJADO EN LA PROFUNDIDAD DE LA CAMA REQUERIDA PARA QUE LA REACCION QUIMICA ALCANZE LA CONVERSION DE EQUILIBRIO.
- LA CONVERSION DE EQUILIBRIO NO PRESENTA CAMBIOS SIGNIFICATIVOS CUANDO SE MODIFICA LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION DE LA MEZCLA GASEOSA Y EL VALOR DE LA VELOCIDAD DE LA MASA DE LOS GASES. LO ANTERIOR SIGNIFICA QUE LOS MODELOS UTILIZADOS POR EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO VAN DE ACUERDO CON LA TERMODINAMICA DE LA REACCION QUIMICA SELECCIONADA EN ESTE EJEMPLO.
- CUANDO SE HA ALCANZADO LA CONVERSION DE EQUILIBRIO, LA TEMPERATURA DE LA MEZCLA DE REACCION PRESENTA VALORES MUY SIMILARES ENTRE SI, BAJO LAS CONDICIONES DE OPERACION ASIGNADAS EN CADA CORRIDA DE CALCULO.
- EL AUMENTO DE LA VELOCIDAD DE LA MASA DE LOS GASES DENTRO DE LOS TUBOS DEL REACTOR, PARA UNA TEMPERATURA DE ALIMENTACION DADA, PROVOCA QUE LA CONVERSION DE EQUILIBRIO DE LA REACCION QUIMICA SE ALCANZE A UNA PROFUNDIDAD MAYOR DE LA CAMA CATALITICA.

IMPORTANCIA DE LOS FENOMENOS DIFUSIONALES SOBRE EL AVANCE DE LA REACCION QUIMICA

CON LOS VALORES DE LA CONSTANTE CINETICA Y DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA, OBTENIDOS EN LAS CORRIDAS DE CALCULO ANTERIORES PARA CADA PUNTO A LO LARGO DE LOS TUBOS DEL REACTOR, SE PUEDE VERIFICAR LA IMPORTANCIA DE LOS PROCESOS DE DIFUSION HACIA LA PARTICULA Y LOS DE LA REACCION QUIMICA QUE SE VERIFICA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR. SI SE CALCULA LA RELACION (K_m/K_c) EN CADA PUNTO A LO LARGO DE LOS TUBOS, SE PUEDE TENER BUENA IDEA DE LAS MAGNITUDES RELATIVAS A AMBOS PROCESOS.

EN EL CASO QUE $(K_m/K_c) \gg 1$, EL AVANCE DE LA REACCION ESTARA CONTROLADO POR LA RAPIDEZ CON QUE SE VERIFICA LA REACCION QUIMICA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR, MIENTRAS QUE SI $(K_m/K_c) \ll 1$, EL PROCESO ESTARA CONTROLADO POR LA RAPIDEZ CON QUE SE DIFUNDEN LAS DIFERENTES ESPECIES QUE INTERVIENEN EN LA REACCION, DESDE EL SENDO DE LA FASE FLUIDA HASTA LA SUPERFICIE INTERNA DE LAS PARTICULAS CATALITICAS.

A CONTINUACION SE PRESENTA LA COMPARACION ENTRE LOS VALORES DE K_m Y K_c PARA CADA CORRIDA DE CALCULO.

CORRIDA N^o 1

$$G = 0.0407 \text{ (g/s cm}^2\text{)} ; T_{b0} = 420^\circ\text{C}$$

Z (in)	T _b (°C)	K _m (gmolSO ₂ /s gcat atm)	K _c	(K _m /K _c)
5	430.0	3.46E-3	1.68E-6	2059.5
20	460.0	3.44E-3	3.05E-6	1127.9
45	501.0	3.41E-3	7.20E-6	473.6
75	552.7	3.37E-3	1.88E-5	179.2
150	598.3	3.34E-3	3.99E-5	83.7

CORRIDA N^o 2

$$G = 0.0407 \text{ (g/s cm}^2\text{)} ; T_{b0} = 440^\circ\text{C}$$

Z (in)	T _b (°C)	K _m (gmolSO ₂ /s gcat atm)	K _c	(K _m /K _c)
5	458.4	3.44E-3	2.95E-6	1166.1
25	503.9	3.41E-3	7.63E-6	446.9
50	558.7	3.36E-3	2.09E-5	160.8
100	611.0	3.33E-3	4.87E-5	68.4

CORRIDA N^o 3G = 0.0407 (g/s cm²) ; Tb0 = 460°C

Z (in)	Tb(°C)	Km (gmolSO2/s qcat atm)	Kc	(Km/Kc)
5	483.6	3.42E-3	5.06E-6	675.9
25	542.1	3.38E-3	1.57E-5	215.3
50	606.4	3.33E-3	4.55E-5	73.2
100	624.1	3.32E-3	5.93E-5	95.9

CORRIDA N^o 4G = 0.0678 (g/s cm²) ; Tb0 = 420°C

Z (in)	Tb(°C)	Km (gmolSO2/s qcat atm)	Kc	(Km/Kc)
5	429.6	3.97E-3	1.51E-6	2629.1
50	475.9	3.96E-3	4.29E-6	923.1
100	526.1	3.94E-3	1.16E-5	339.6
150	575.8	3.93E-3	2.79E-5	140.9
180	593.3	3.92E-3	3.69E-5	106.2

CORRIDA N^o 5G = 0.0678 (g/s cm²) ; Tb0 = 440°C

Z (in)	Tb(°C)	Km (gmolSO2/s qcat atm)	Kc	(Km/Kc)
5	452.8	3.96E-3	2.60E-6	1523.1
50	514.3	3.94E-3	9.34E-6	421.8
100	579.0	3.93E-3	2.94E-5	133.7
160	610.8	3.91E-3	4.85E-5	80.6

CORRIDA N^o 6G = 0.0678 (g/s cm²) ; Tb0 = 460°C

Z (in)	Tb(°C)	Km (gmolSO2/s qcat atm)	Kc	(Km/Kc)
5	475.9	3.95E-3	4.31E-6	916.5
50	555.0	3.93E-3	1.97E-5	199.5
100	618.8	3.92E-3	5.49E-5	71.4
140	624.0	3.91E-3	5.93E-5	65.9

COMENTARIOS:

SE OBSERVA EN LAS TABLAS ANTERIORES QUE LA RELACION (K_m/K_c) SIEMPRE ES MUCHO MAYOR A 1.0 A LO LARGO DE LOS TUBOS DEL REACTOR, PARA CADA UNA DE LAS CORRIDAS DE CALCULO, LO QUE SIGNIFICA QUE EN TALES CASOS, EL PROCESO QUE CONTROLA ES LA REACCION QUIMICA EN LA SUPERFICIE DEL CATALIZADOR Y DADOS LOS VALORES DE DICHAS RELACIONES, SE PUEDE DECIR QUE LOS FENOMENOS DE DIFUSION SON DESPRECIABLES. ESTO CONFIRMA LA VALIDEZ DEL CALCULO DE LA RAPIDEZ DE REACCION, MEDIANTE EL MODELO CINETICO PROPUESTO POR EKLUND.

CAPITULO VII

CONCLUSIONES

- 1.- EL METODO NUMERICO SELECCIONADO PARA LA INTEGRACION DE LAS ECUACIONES DE DISEÑO DEL REACTOR (RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN), PRESENTA BUENA ESTABILIDAD (CONVERGE RAPIDAMENTE). LO ANTERIOR SE COMPROBO MEDIANTE LA ASIGNACION DE DIFERENTES TAMAÑOS PARA EL INTERVALO DE INTEGRACION, ARROJANDO RESULTADOS LOGICOS Y CONGRUENTES ENTRE SI PARA UNA MISMA CORRIDA DE CALCULO. ESTO INDICA QUE DICHO METODO SE PUEDE EMPLEAR CON CONFIANZA PARA NUESTRO CASO.

- 2.- LA PRECISION DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS DURANTE EL PROCESO DE CALCULO DE LAS CONDICIONES QUE PRESENTA LA MEZCLA DE REACCION A LO LARGO DE LOS TUBOS DEL REACTOR, DEPENDE DE LA SELECCION DEL TAMAÑO DEL INTERVALO DE INTEGRACION DE LAS ECUACIONES DE DISEÑO (ECS. 2.9 Y 2.17); ENTRE MENOR SEA LA LONGITUD DEL INTERVALO DE INTEGRACION, LOS RESULTADOS OBTENIDOS SERAN MAS CONFIABLES, PERO ESTO IMPLICA UN VOLUMEN MAYOR DE CALCULOS PARA UNA LONGITUD DADA DE LOS TUBOS DEL REACTOR.

- 3.- EN LA EJEMPLIFICACION DEL PROCEDIMIENTO DE CALCULO DE LAS CONDICIONES DE LA MEZCLA DE REACCION (TEMPERATURA Y CONVERSION ALCANZADA) EN EL EXTREMO FINAL DE UNO DE LOS ELEMENTOS DIFERENCIALES DE LOS TUBOS, SE OBSERVA QUE ES PROHIBITIVO REALIZAR LOS CALCULOS CORRESPONDIENTES DE INTEGRACION EN FORMA MANUAL, PARA EL NUMERO DE ELEMENTOS DIFERENCIALES QUE CUBREN LA LONGITUD TOTAL DE LOS TUBOS DEL REACTOR, DEBIDO A QUE EL PROCESO DE BUSQUEDA DE LA TEMPERATURA EN LA SUPERFICIE DE LAS PARTICULAS CATALITICAS POROSAS, INVOLUCRA UN PROCESO ITERATIVO, POR LO QUE SE RECOMIENDA RECURRIR A LOS MODERNOS SISTEMAS DE COMPUTO CON QUE SE CUENTA ACTUALMENTE. LO ANTERIOR LLEVA A LA ELABORACION DE UN PROGRAMA GENERAL DE CALCULO EN ALGUN LENGUAJE DE PROGRAMACION QUE SE PUEDA ADAPTAR A LAS NECESIDADES DEL PROBLEMA DE ESTUDIO.

- 4.- PARA PARTICULAS DE CATALIZADOR SOLIDO POROSO, ES NECESARIO INCLUIR EN LA EXPRESION QUE DESCRIBE LA RAPIDEZ DE LA REACCION QUIMICA, EL TERMINO DEL FACTOR DE EFECTIVIDAD, EL CUAL, CONSIDERA LOS GRADIENTES INTERNOS DE TEMPERATURA, CONCENTRACION Y LOS PROCESOS DE DIFUSION DE LAS ESPECIES QUIMICAS EN EL INTERIOR DE LA PARTICULA CATALITICA, LO ANTERIOR CON EL FIN DE OBTENER UN VALOR REPRESENTATIVO DE RAPIDEZ DE REACCION PARA LA TOTALIDAD DEL GRANULO.
- 5.- EL PROGRAMA GENERAL DE CALCULO PRESENTADO, PARA EL CASO DE LA OXIDACION CATALITICA EN FASE GASEOSA DEL DIOXIDO DE AZUFRE, PUEDE SER ALIMENTADO A UNA CALCULADORA PROGRAMABLE DE BOLSILLO (QUE MANEJE LENGUAJE BASIC) YA QUE ES CORTO Y POR TANTO NO REQUIERE DE GRANDES CAPACIDADES DE MEMORIA. LA ADAPTACION DE ESTE PROGRAMA A OTRO CASO DE REACCION QUIMICA SIMILAR AL CONTEMPLADO EN EL PRESENTE TRABAJO, SE PUEDE REALIZAR MEDIANTE PEQUEÑAS MODIFICACIONES AL MISMO. ESTO REPRESENTA UN VALIOSO MATERIAL PARA LA ENSEÑANZA DE UNA PARTE DE LA INGENIERIA QUIMICA.
- 6.- MEDIANTE LA SIMULACION PRACTICADA AL FENOMENO DE LA REACCION QUIMICA SELECCIONADA, SE PUEDEN COMPRENDER:
- LA IMPORTANCIA DE LOS PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASA Y CALOR EXTERNOS, HACIA LAS PARTICULAS DEL CATALIZADOR, CONTENIDAS DENTRO DE LOS TUBOS DEL REACTOR.
 - EL PAPEL ESENCIAL QUE JUEGA EN EL DISEÑO Y DIMENSIONAMIENTO DEL EQUIPO, LA NATURALEZA REVERSIBLE DE UNA REACCION QUIMICA.
 - EL FACTOR DE EFECTIVIDAD, EL CUAL DESCRIBE EN SU VARIACION LA ENORME IMPORTANCIA DE LOS PROCESOS DE TRANSPORTE DE LAS ESPECIES QUE INTERVIENEN EN LA REACCION, DENTRO DE LAS PARTICULAS CATALITICAS POROSAS.
 - QUE EL EFECTO DE LA MODIFICACION DE LA TEMPERATURA DE LA MEZCLA GASEOSA EN LA ALIMENTACION A LOS TUBOS DEL REACTOR, SE VE REFLEJADO EN LA PROFUNDIDAD REQUERIDA DE LA CAMA PARA QUE LA REACCION QUIMICA ALCANCE LA CONVERSION DE EQUILIBRIO, ASI COMO EN EL COMPORTAMIENTO DE LA RAPIDEZ DE REACCION A LO LARGO DE LOS TUBOS.

- QUE EL AUMENTO DE LA VELOCIDAD DE LA MASA DE LOS GASES DENTRO DEL INTERVALO MANEJADO EN ESTE TRABAJO EN LOS TUBOS DEL REACTOR, PARA UNA TEMPERATURA DE ALIMENTACION DADA, PROVOCA UN AUMENTO EN LOS REQUERIMIENTOS DE LA PROFUNDIDAD DE LA CAMA CATALITICA PARA QUE SE PUEDA ALCANZAR LA CONVERSION DE EQUILIBRIO, SIN AUMENTAR SENSIBLEMENTE EL VALOR DE LA RAPIDEZ DE REACCION.
- LA IMPORTANCIA DEL TAMANO DE LAS PARTICULAS CATALITICAS (DIAMETRO) Y DE LA VELOCIDAD DE LA MASA DE LA MEZCLA DE REACCION, SOBRE LOS PROCESOS DE TRANSPORTE EXTERNOS HACIA LOS GRANULOS CATALITICOS.
- LA COMPARACION ENTRE LOS VALORES DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA HACIA LOS GRANULOS CATALITICOS FRENTE A LA CONSTANTE CINETICA, PERMITE EL CONOCIMIENTO DEL PROCESO QUE CONTROLA EL AVANCE DE LA REACCION (TRANSPORTE DE MASA EXTERNO, REACCION QUIMICA EN LA SUPERFICIE INTERNA DEL CATALIZADOR O TRANSPORTE DE MASA INTERNO) EN CADA PUNTO A LO LARGO DE LOS TUBOS DEL REACTOR. PARA LOS VALORES DE LAS VARIABLES DE OPERACION MANEJADOS, SE OBTUVO QUE EL PROCESO QUE CONTROLA ES LA REACCION QUIMICA EN LA SUPERFICIE INTERNA DEL CATALIZADOR.
- 7.- EN LOS DATOS DE PLANTA PRESENTADOS, PARA UN CONVERTIDOR TIPICO UTILIZADO PARA LA OXIDACION DEL DIOXIDO DE AZUFRE, SE OBSERVA QUE DICHO EQUIPO CUENTA CON UN TOTAL DE CUATRO CAMAS Y QUE EN CADA UNA DE ELLAS LA CONVERSION LOGRADA POR LA REACCION QUIMICA ES DIFERENTE. DE ESTO SE DEDUCE QUE LA PROFUNDIDAD DE LAS CAMAS ES LA MISMA PARA CADA UNA DE ELLAS Y ESTARA DADA POR LA REQUERIDA PARA LA PRIMERA, EN DONDE SE TIENE LA MAYOR CONVERSION. LO ANTERIOR SE BASA EN EL HECHO DE QUE SE DEBE DAR UN MARGEN DE SEGURIDAD PARA LA PROFUNDIDAD DE LA CAMAS, DE TAL MANERA DE COMPENSAR LOS CAMBIOS GRADUALES QUE SUFRE EL CATALIZADOR, CONDICIONES DE OPERACION IMPREVISTAS, ETC.

EN EL PRESENTE TRABAJO SE REALIZARON LOS CALCULOS CORRESPONDIENTES A LA PRIMERA CAMA UNICAMENTE, DEBIDO A QUE COMO SE MENCIONO, LO QUE SE PERSIGUE ES ILUSTRAR EL COMPORTAMIENTO DE UNA REACCION QUIMICA DENTRO DE ESTE TIPO DE EQUIPOS, SIN CONTEMPLAR SU DIMENSIONAMIENTO TOTAL PARA UNA PRODUCCION DADA DE TRIOXIDO DE AZUFRE. LAS SIGUIENTES CAMAS DEBEN RECIBIR EL MISMO TRATAMIENTO GENERAL Y SOLO CAMBIARIAN LAS CONDICIONES DE ALIMENTACION DE LA MEZCLA REACCIONANTE, LAS CUALES ESTAN FIJADAS POR LA CALDERA (VER FIG. DEL REACTOR), LA COMPOSICION QUE MUESTRA LA MEZCLA A LA SALIDA DE CADA UNA DE LAS CAMAS Y DE ACUERDO CON UNA ESTRATEGIA QUE NOS PERMITA ACERCARNOS A UN PERFIL OPTIMO DE REACCION EN FUNCION DEL EQUILIBRIO QUIMICO.

8.- LOS RESULTADOS OBTENIDOS MEDIANTE LOS MODELOS DESARROLLADOS EN EL PRESENTE TRABAJO, CONCUERDAN MUY BIEN CON LOS REPORTADOS EN LA LITERATURA [1], BAJO LAS CONSIDERACIONES DE OPERACION ISOTERMICA DE LAS PARTICULAS CATALITICAS, FLUJO DE LOS GASES DENTRO DE LOS TUBOS DEL REACTOR EN FORMA DEL TIPO TAPON Y OPERACION ADIABATICA DE LOS MISMOS.

9.- EL MODELO PRESENTADO PUEDE SER USADO

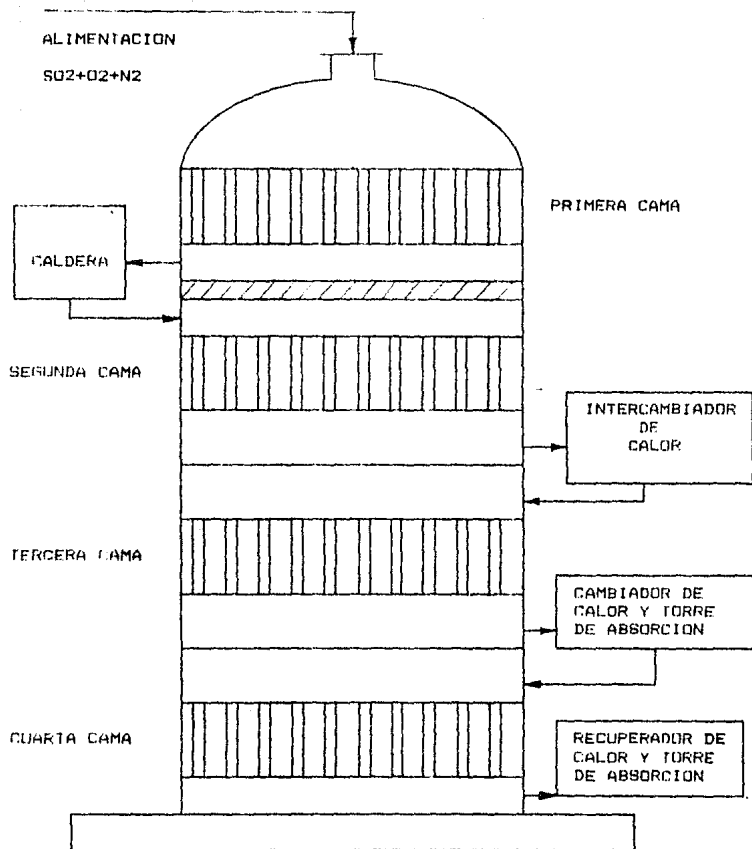
- i) PARA CASOS POSTERIORES, MANEJANDO PARTICULAS DE CATALIZADOR CON DIAMETROS MAYORES Y PROPIEDADES FISICAS SIMILARES A LAS UTILIZADAS (AREA ESPECIFICA, TORTUOSIDAD, POROSIDAD).
- ii) COMO BASE PARA EN UN FUTURO PLANTEAR LA SOLUCION DE ESTE PROBLEMA, CONTEMPLANDO EL CASO EN QUE DEBA TOMARSE EN CUENTA LA DISPERSION AXIAL DE TEMPERATURA Y COMPOSICION DE LA MEZCLA DE REACCION EN CADA PUNTO A LO LARGO DE LOS TUBOS QUE CONFORMAN EL TIPO DE REACTOR ANALIZADO EN ESTA OCASION, O BIEN, CONSIDERAR TANTO LAS DISPERSIONES AXIALES COMO RADIALES (MODELO DE DOS DIMENSIONES) Y VERIFICAR SU IMPORTANCIA SOBRE EL COMPORTAMIENTO DE LA REACCION QUIMICA QUE SE VERIFICA DENTRO DEL REACTOR. LA REALIZACION DE LA TAREA PROPUESTA, PERMITIRIA LA COMPARACION DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS MEDIANTE EL EMPLEO DE LOS DIFERENTES MODELOS Y OBTENER LAS CONCLUSIONES CORRESPONDIENTES, QUE OFRECERIAN UN PANORAMA MAS AMPLIO ENCAMINADO AL MEJOR ENTENDIMIENTO DEL FENOMENO DE ESTUDIO.

FINALMENTE, CON LA EXPERIENCIA OBTENIDA EN EL DESARROLLO DE ESTE MODELO, SE PUEDE PARTIR PARA ANALIZAR Y MODELAR OTRAS REACCIONES DE IMPORTANCIA INDUSTRIAL Y DEBIDO A LAS DEMANDAS DE LA INDUSTRIA

QUE SON TAMBIEN IMPORTANTES EN LO QUE SE REFIERE A LA PREPARACION DE SU PERSONAL TECNICO, PUEDE SER UTILIZADO ESTE DOCUMENTO POR LOS INGENIEROS COMO APOYO EN LA ENSEÑANZA Y COMPRENSION DEL COMPORTAMIENTO DE LOS REACTORES QUIMICOS.

REF (1): FOLLETO DE PUBLICIDAD DE MONSANTO EVIRO-CHEM
IC/EC-703
NEW LP-120 AND LP110 LOW PRESSURE DROP CATALYSTS.

(VER GRAFICO CORRESPONDIENTE EN LA SIGUIENTE HOJA)



REPRESENTACION ESQUEMATICA DE UN CONVERTIDOR DE DIOXIDO DE AZUFRE

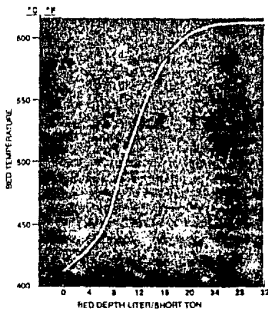
Type LP-120 activity is designed to maintain the optimum balance of total catalyst performance.

LP-120 will provide an activity comparable to Type 210 and Type 516 so existing catalysts can be replaced on a liter for liter basis. As shown in Figure 3, LP-120 exhibits the same conversion capability as existing Monsanto Enviro-Chem high activity catalysts. These results were obtained under first pass conditions in a fully instrumented laboratory integral bed reactor system. Similar conversion effectiveness has been exhibited by LP-120 in pilot plant and full scale applications.

Since the formulation for LP-120 is based on that of Type 210 and 516, it is expected to exhibit similar long life characteristics as its predecessors.

Actual full scale screening trials with commercial size equipment shows that screening losses comparable to Type 516 and Type 11 can be expected when the LP-120 is pneumatically screened at 2000-3000 liters/hour rates. Refer to the Monsanto Enviro-Chem recommended screening instructions for full details on how best to screen LP-120 catalyst.

A summary of LP-120 characteristics is presented in Table 1.



3. LABORATORY FULL BED REACTOR CONVERSION RESULTS (First Pass Conditions)



Type LP-110 achieves high activity and significant pressure drop improvements in the later converter passes.

Type LP-110 is based on the Type 11 formulation which was introduced in 1963 for lower pass service. The Type 11 formulation was specifically designed to exhibit high activity in the high SO₂, low temperature zones of these later passes. Its activity is typically 15-20% greater than even the Monsanto Enviro-Chem high activity first and second pass catalyst.

With Type 11's superior formulation as a basis, Type LP-110 is now available for service in the later passes of the converter. The Type LP-110, a 3/4" (9.5mm) Raschig ring design has a 50% lower pressure drop than the 7/32" (5.5mm) diameter Type 11 solid pellet. As with Type LP-120, this pressure drop improvement can be recovered as reduced capital costs, additional energy savings, or increased production capacity. Figure 4 shows Type LP-110 pressure drop performance as compared to Type 11.

CAPITULO VIII

BIBLIOGRAFIA

ANALISIS NUMERICO
RICHARD L. BURDEN, J. DOUGLAS FAIRES.
GRUPO EDITORIAL IBEROAMERICA.

CHEMICAL ENGINEERING/JULY 8, 1974
SULFUR DIOXIDES SO₂, SO₃. PHYSICAL AND THERMODYNAMIC
PROPERTIES.
pp. 85-92.

CINETICA DE REACCIONES
LAIDLER KEITH JAMES
GOMEZ HERRERA 2a ED.
ALHAMBRA. 1971

ECUACIONES DIFERENCIALES Y PROBLEMAS CON VALORES EN LA
FRONTERA.
WILLIAM E. BOYCE, RICHARD C. DIPRIMA.
TERCERA EDICION.
ED. LIMUSA.

HETEROGENEOUS CATALYSIS IN PRACTICE.
SATTEFIELD.
M.I.T. PRESS.
pp. 208-214

INGENIERIA DE LA CINETICA QUIMICA.
J.M. SMITH.
ED. C.E.C.S.A.

MANUAL DEL INGENIERO QUIMICO.
PERRY, CHILTON.
QUINTA EDICION (SEGUNDA EDICION EN ESPAÑOL).
ED. Mc GRAW HILL.

MASS TRANSFER IN HETEROGENEOUS CATALYSIS.
CHARLES N. SATTEFIELD.
M.I.T. PRESS.

METODOS Y MODELOS DE INVESTIGACION DE OPERACIONES.
VOL. 2 MODELOS ESTOCASTICOS.
JUAN PRAWDA.
ED. LIMUSA.

OPERACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA.
ROBERT E. TREYBAL.
2/e
ED. Mc GRAW HILL.

THE MANUFACTURE OF SULFURIC ACID.
WERNER E. DUECKER and JAMES R. WEST
HUNTINGTON, N.Y.
ROBERT E. KRIEGER
1971

THE PROPERTIES OF GASES AND LIQUIDS.
ROBERT C. REID, JOHN M. PRUSNITZ, THOMAS K. SHERWOOD.
Mc GRAW HILL.

THE ROLE OF DIFFUSION IN CATALYSIS.
C.N. SATTERFIELD.
M.I.T. PRESS.