



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

---

---

**FACULTAD DE QUÍMICA**

**ANÁLISIS DE UN REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO  
APLICANDO EL MODELO DE DAVIDSON-HARRISON  
MODIFICADO, UTILIZANDO MATHEMATICA COMO  
HERRAMIENTA DE CÓMPUTO.**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:**

**INGENIERO QUÍMICO**

**P R E S E N T A :**

**GONZAGA RIVERA MAURICIO ELYN**



**CIUDAD DE MÉXICO**

**OCTUBRE 2017**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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 esta 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.

**JURADO ASIGNADO:**

**PRESIDENTE:**           **Profesor: José Gabriel Téllez Romero**  
**VOCAL:**               **Profesor: Rodolfo Ruiz Trejo**  
**SECRETARIO:**       **Profesor: Rafael Herrera Nájera**  
**1° SUPLENTE:**       **Profesor: Tatiana Eugenievna Klimova Berestneva**  
**2° SUPLENTE:**       **Profesor: Héctor Javier Martínez Grimaldo**

**SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:**

**FACULTAD DE QUÍMICA, UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO.**

**ASESOR DEL TEMA:**

---

**DR. RAFAEL HERRERA NÁJERA**

**SUSTENTANTE:**

---

**GONZAGA RIVERA MAURICIO ELYN**



## RESUMEN

El presente trabajo contempla el análisis de un sistema de reacción heterogéneo utilizando modelos matemáticos que se resolverán con *Mathematica*® como herramienta de cómputo, permitiendo analizar el efecto que tienen los parámetros característicos de este tipo de sistemas sobre su comportamiento. La construcción de modelos matemáticos se hará con base en el material de los cursos de “Transferencia de masa” e “Ingeniería de Reactores II”.

La metodología empleada para el desarrollo de este trabajo consiste en determinar y analizar las bases de diseño de un sistema heterogéneo con reacción química, bajo el Modelo de Davidson-Harrison con *fase-emulsión* como PFR y CSTR. Para alcanzar dichos objetivos, se revisa la construcción del modelo matemático propio de cada sistema, a través de un conjunto de ecuaciones que representan las propiedades conservativas que sean necesarias incorporar (masa, energía y/o momentum), y de los parámetros de transporte correspondientes. Se analiza cómo afecta a la conversión del reactivo de interés  $X_A$ , al variar el valor de parámetros propios de la operación del reactor. Se tomó como referencia la conversión  $X_A$ , que se alcanza cuando el reactor opera en una condición particular, denominada *Caso Base*.

En cada uno de los casos particulares resueltos (variación de parámetros), primero se calcularon los parámetros del Modelo Davidson-Harrison (cálculos intermedios), dentro de una función. Posteriormente, se insertaron todas las ecuaciones correspondientes a los balances de materia (en forma de lista), incluyendo las condiciones de entrada al reactor. Finalmente, se hace uso de *Mathematica*® para obtener la solución numérica del conjunto de ecuaciones diferencial-algebraicas que constituyen el modelo de Davidson-Harrison. Para analizar dinámica e interactivamente el efecto de múltiples parámetros sobre los perfiles de concentración, así como la conversión, se construyó un comando de control en *Mathematica*® llamado *Manipulate*.

## ÍNDICE DE FIGURAS, TABLAS Y GRÁFICAS

### Figuras

Figura 1.1 Regímenes de fluidización.....	18
Figura 1.2 Esquema de un Reactor de Lecho Fluidizado en donde se indica la concentración del reactivo de interés en las partes relevantes del modelo Davidson-Harrison, a saber: i) gas que se alimenta al reactor, $C_{A0}$ , ii) <i>fase-burbuja</i> , $C_{Ab}(z)$ , iii) <i>fase-emulsión</i> , $C_{Ae}(z)$ , y iv) gas que sale de la zona de reacción, $C_A$ .....	20
Figura 1.3 Esquema de la versión del modelo de Davidson-Harrison.....	22
Figura 1.4 Formación de una burbuja en el lecho a partir de la inyección de gas (con una velocidad $u_0$ ), en el plato distribuidor.....	24
Figura 1.5 Elevación de una burbuja en el lecho fluidizado.....	25
Figura 1.6 Reactor Tubular de Flujo Tapón, PFR.....	34
Figura 1.7 Reactor de Tanque Agitado, CSTR.....	35
Figura 2.1 Condiciones de fluidización incipiente y fluidización normal de reactor de lecho fluidizado del Caso Base, bajo el modelo D-H/PFR.....	60
Figura 2.2 Condiciones de fluidización normal obtenidas con los siguientes diámetros de burbuja: (a) de 0.20 m y (b) de 0.44 m.....	72
Figura 2.3 Condiciones de fluidización normal obtenidas con los siguientes diámetros de reactor: (a) de 1.68 m y (b) de 2.15 m.....	87
Figura 2.4 Aumento progresivo de la velocidad superficial del gas en el lecho, mostrando las diferentes condiciones derivadas de este aumento.....	100
Figura 2.5 Fenómeno de coalescencia en las burbujas presentes en el lecho fluidizado..	109
Figura 3.1 Reactor de lecho fluidizado bajo el modelo Davidson-Harrison, se muestran concentraciones del reactor en la <i>fase-burbuja</i> ( $C_{Ab}$ ), <i>fase-emulsión</i> ( $C_{Ae}$ ) y del lecho en su conjunto a la salida ( $C_A$ ), se asume <i>fase-emulsión</i> como reactor de mezcla perfecta.....	119
Figura 3.2 Condiciones de fluidización incipiente y fluidización normal de reactor de lecho fluidizado del Caso Base D-H/CSTR.....	133
Figura 3.3 Condiciones de fluidización normal obtenidas con los siguientes diámetros de burbuja: (a) de 0.20 m y (b) de 0.44 m, bajo el modelo D-H/CSTR.....	146

Tablas

Tabla 1.1 Definición de parámetros RLF, Modelo: Davidson-Harrison.....	33
Tabla 2.1 Nomenclatura y valor de parámetros importantes tanto del catalizador como de las condiciones de operación del reactor.....	41
Tabla 2.2 Nomenclatura y valor de los parámetros que se utilizaron para determinar la composición de la corriente de salida del Caso Base.....	58
Tabla 2.3 Condiciones de operación del RLF con diámetro de burbuja, $d_b$ , variable.....	68
Tabla 2.4. Resultados obtenidos al variar el diámetro de burbuja, de un valor definido en el Caso Base de 0.32 m, se reduce a 0.20 m y aumenta a 0.44 m.....	70
Tabla 2.5 Condiciones de operación del RLF, con diámetro de reactor $d_R$ , variable.....	84
Tabla 2.6 Resultados obtenidos al variar el diámetro de reactor de un valor definido en el Caso Base de 2 m a 1.68 m y a 2.15 m.....	85
Tabla 2.7 Condiciones de operación del RLF con velocidad superficial de gas de entrada, $u_0$ , variable.....	96
Tabla 2.8 Resultados obtenidos al variar la velocidad superficial de gas de entrada $u_0$ ...	98
Tabla 2.9 Razón constante entre la altura del lecho en condiciones normales de fluidización, $H$ , y la velocidad de ascenso de las burbujas en el lecho $u_b$ .....	110
Tabla 3.1 Nomenclatura y valor de los parámetros utilizados del Caso Base D-H/CSTR.....	132
Tabla 3.2 Resultados obtenidos bajo los modelos D-H/CSTR y D-H/PFR, al variar el diámetro de burbuja.....	144

Gráficas

Gráfica 2.1 Perfiles de concentración de A en un RLF bajo el modelo D-H/PFR, en la <i>fase-burbuja</i> ( $C_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $C_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).....	62
Gráfica 2.2 Perfiles de concentración de B ( $\text{mol/m}^3$ ) en un RLF bajo el modelo DH/PFR, en la <i>fase-burbuja</i> ( $C_{Bb}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $C_{Be}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_B$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ )..	63

Gráfica 2.3 Perfiles de conversión porcentual de A en un RLF bajo el modelo DH/PFR, en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	64
Gráfica 2.4 Perfiles de conversión de A en un RLF, para un diámetro de burbuja ( $d_b$ ) de 0.20 m bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con $d_b=0.32$ m (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	73
Gráfica 2.5 Perfiles de conversión de A en un RLF, para un diámetro de burbuja ( $d_b$ ) de 0.44 m bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con $d_b=0.32$ m (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	74
Gráfica 2.6 Área total de transferencia de las burbujas para cada diámetro de burbuja...	80
Gráfica 2.7 Perfiles de conversión de A en un RLF, para un diámetro de reactor ( $d_R$ ) de 2.15 m bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con $d_R=2$ m (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	88
Gráfica 2.8 Perfiles de conversión de A en un RLF, para un diámetro de reactor ( $d_R$ ) de 1.68 m bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con $d_R=2$ m (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	89
Gráfica 2.9 Perfiles de conversión de A en un RLF, para una velocidad superficial de gas de entrada ( $u_0$ ) de 0.15 m/s bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con $u_0=0.3$ m/s (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	102
Gráfica 2.10 Perfiles de conversión de A en un RLF, para una velocidad superficial de gas de entrada ( $u_0$ ) de 0.45 m/s bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con $u_0=0.3$ m/s (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	103
Gráfica 2.11 Perfiles de conversión de A en un RLF, para una velocidad superficial de gas de entrada ( $u_0$ ) de 2 m/s bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con $u_0=0.3$ m/s (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	104

Gráfica 2.12 Perfiles de conversión de A en un RLF para valores del parámetro $\beta$ de 0.9 (línea verde continua) y 0.1 (línea verde discontinua) bajo el modelo D-H/PFR, en función del parámetro cinético ( $\kappa'$ ).....	112
Gráfica 2.13 Coeficiente de rapidez de reacción en función de la temperatura del sistema.....	114
Gráfica 2.14 Perfiles de conversión de A en un RLF bajo el modelo D-H/PFR, en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la temperatura del reactor.....	115
Gráfica 3.1 Perfiles de concentración de A en un RLF bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $C_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $C_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	135
Gráfica 3.2 Perfiles de concentración de B en un RLF bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $C_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $C_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	136
Gráfica 3.3 Perfiles de conversión de A en un RLF bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $C_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $C_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	137
Gráfica 3.4 Perfiles de conversión de A en un RLF bajo el modelo D-H/CSTR (línea roja) y del modelo D-H/PFR (línea verde), del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función del parámetro cinético ( $\kappa'$ ).....	139
Gráfica 3.5 Perfiles de conversión de A en un RLF para un diámetro de burbuja ( $d_b$ ) de 0.20 m, bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	147
Gráfica 3.6 Perfiles de conversión de A en un RLF para un diámetro de burbuja ( $d_b$ ) de 0.44 m, bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la <i>fase-burbuja</i> ( $X_{Ab}$ color azul), <i>fase-emulsión</i> ( $X_{Ae}$ color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$ color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).....	148
Gráfica 3.7 Perfiles de conversión de A en un RLF para valores del parámetro X de 2.5 (líneas continuas) y 0.3 (líneas discontinuas), bajo el modelo D-H/CSTR, en función del parámetro cinético ( $\kappa'$ ).....	156

**CONTENIDO**

**AGRADECIMIENTOS** ..... ¡Error! Marcador no definido.

**RESUMEN** ..... 4

**ÍNDICE DE FIGURAS, TABLAS Y GRÁFICAS** ..... 5

**JUSTIFICACIÓN**..... 11

**OBJETIVOS** ..... 12

**HIPÓTESIS**..... 12

**NOMENCLATURA** ..... 13

**REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, RLF. GENERALIDADES DEL MODELO DAVIDSON-HARRISON**..... 17

    1.1 Introducción ..... 17

    1.2 Restricciones ..... 21

    1.3 Reacción..... 22

    1.4 Mecánica de las burbujas ..... 23

    1.5 Transferencia de masa entre *fase-burbuja* y *fase-emulsión* ..... 28

    1.6 Ecuaciones de balance de materia del Modelo de Davidson-Harrison..... 29

        1.6.1 *Fase-burbuja* ..... 29

        1.6.2 *Fase-emulsión* ..... 29

    1.7 Parámetros del modelo Davidson-Harrison ..... 30

    1.8 Condiciones a la frontera ..... 32

    1.9 Características de los reactores PFR y CSTR..... 34

        1.9.1 Ventajas y desventajas de CSTR y PFR..... 37

    1.10 Estudio de Modelos ..... 37

    1.11 Estrategia ..... 38

**REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, MODELO: DAVIDSON-HARRISON CON FASE-EMULSIÓN MODELADA COMO PFR** ..... 40

    2.1 Reacción química..... 40

    2.2 Reactor ..... 41

    2.3 Casos de estudio con el modelo D-H/PFR..... 42

    2.4 Modelo Davidson-Harrison con la *fase-emulsión* comportándose como PFR, D-H/PFR ..... 42

2.4.1 Balance de masa en la <i>fase-burbuja</i> .....	42
2.4.2 Balance de masa en la <i>fase-emulsión</i> .....	43
2.4.3 Deducción del modelo.....	45
2.4.4 Condiciones de frontera .....	47
2.4.5 Solución Analítica .....	48
2.4.6 Concentración del reactivo.....	54
2.5 Resultados del modelo D-H/PFR.....	55
2.5.1 Caso Base PFR.....	56
2.6 Modificación de Variables.....	66
2.6.1 Caso 1: Diámetro de burbuja.....	66
2.6.2 Caso 2: Diámetro del reactor.....	83
2.6.3 Caso 3: Velocidad superficial del gas en el lecho.....	94
<b>REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, MODELO: DAVIDSON-HARRISON CON FASE-EMULSIÓN MODELADA COMO CSTR.....</b>	<b>118</b>
3.1 Reacción química.....	119
3.2 Reactor .....	119
3.3 Casos de estudio con el modelo D-H/CSTR.....	120
3.4 Modelo Davidson-Harrison con la <i>fase-emulsión</i> comportándose como CSTR, D-H/CSTR .....	120
3.4.1 Balance de masa en la <i>fase-burbuja</i> .....	120
3.4.2 Balance de masa en la <i>fase-emulsión</i> .....	122
3.4.3 Deducción.....	125
3.4.4 Condición de frontera.....	127
3.4.5 Concentración del reactivo.....	127
3.5 Resultados del modelo D-H/CSTR.....	129
3.5.1 Caso Base D-H/CSTR.....	130
3.6 Modificación de variable .....	141
3.6.1 Caso 1: Diámetro de burbuja D-H/CSTR .....	142
<b>CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES .....</b>	<b>159</b>
<b>APÉNDICE .....</b>	<b>162</b>
<b>REFERENCIAS .....</b>	<b>188</b>

## JUSTIFICACIÓN

Algunos de los objetivos principales de los cursos de Transferencia de masa e Ingeniería de Reactores II de la carrera de Ingeniería Química de la UNAM, consisten en determinar las bases de diseño y de análisis de sistemas de reacciones químicas heterogéneas. Para alcanzar dichos objetivos, se revisa la construcción del modelo matemático propio de cada sistema, tomando en consideración las características de las reacciones y el tipo de sistema, a través de un conjunto de ecuaciones que representan las propiedades conservativas que sea necesario incorporar (masa, energía y/o momentum) y de los parámetros de transporte correspondientes, la rapidez de reacción, y las propiedades termodinámicas de los materiales que constituyen el sistema. El estudio conceptual de cada sistema permite construir el modelo matemático correspondiente, en términos de un conjunto de ecuaciones que se considera que al resolverse permitan diseñar (dimensionar) el equipo y predecir (analizar) el comportamiento del sistema que se está estudiando.

Sin embargo, la gran mayoría de ese tipo de sistemas, implican modelos matemáticos que son difíciles de resolver, debido a la relación no-lineal que guardan las variables que determinan el comportamiento de dichos sistemas, como es el caso de la interdependencia de la temperatura (ecuación de Arrhenius), rapidez de reacción (concentración de reactivos y productos) y del sistema de intercambio de calor con los alrededores (coeficiente de transferencia de calor). Esta problemática es una parte muy importante de la Ingeniería Química, porque obliga al profesionista a conocer bien el sistema en cuestión, de tal manera que sea capaz de proponer modelos relativamente sencillos, cuya solución sea factible y describa la realidad de interés. Actualmente, se tiene la posibilidad de utilizar programas de cómputo, tales como *Mathematica*®; consecuentemente, se tiene la posibilidad de estructurar modelos de sistemas complejos y resolverlos numéricamente, en tiempos relativamente cortos, permitiendo así al estudiante diseñar el equipo y analizar el comportamiento de las reacciones de interés bajo condiciones de operación propuestas por él mismo. Por ello, el presente trabajo está dirigido a desarrollar una metodología para el planteamiento y solución de sistemas de reacción, que sirvan como material de apoyo para el estudio de la Ingeniería Química, en particular en los curso de Ingeniería de Reactores II y Transferencia de masa, pero con la posibilidad de aplicarse a otros cursos con necesidades semejantes.

## OBJETIVOS

Analizar el comportamiento de un reactor de lecho fluidizado en el que ocurre una reacción de primer orden irreversible, utilizando dos versiones del modelo de Davidson-Harrison, que se diferencian una de la otra por el comportamiento que se asume tiene la *fase-emulsión*, en el primer modelo se considera la *fase-emulsión* como un reactor de flujo tapón, mientras que en el segundo modelo como un reactor continuo agitado; en particular se analizará el efecto de parámetros que definen al sistema, utilizando para ello *Mathematica*® como herramienta de cómputo.

Desarrollar una metodología de trabajo que cumpla la función de material de apoyo didáctico, presentando la solución a los modelos matemáticos complejos que resultan de dichos sistemas, permitiendo al estudiante diseñar el equipo y analizar el comportamiento de las reacciones de interés bajo condiciones de operación propuestas por él mismo.

## HIPÓTESIS

El uso de *Mathematica*® como herramienta de cómputo permite la solución relativamente rápida de problemas complejos como los que plantea el análisis de reactores de lecho fluidizado.

## NOMENCLATURA

Definición	Término	Unidades
Reactivo de interés en el proceso.	A	[No aplica]
Producto de interés en el proceso.	B	[No aplica]
Coefficiente de rapidez de reacción.	$k$	$s^{-1}$
Rapidez de reacción.	$r$	$mol/m^3s$
Concentración inicial del reactivo en la corriente de entrada del reactor.	$C_{A0}$	$mol/m^3$
Concentración molar del lecho en su conjunto ( <i>total</i> ) del reactivo en la corriente de salida del lecho.	$C_A$	$mol/m^3$
Concentración molar en la <i>fase-emulsión</i> del reactivo en la corriente de salida del lecho.	$C_{Ae}$	$mol/m^3$
Concentración molar en la <i>fase-burbuja</i> del reactivo en la corriente de salida del lecho.	$C_{Ab}$	$mol/m^3$
Concentración molar del lecho en su conjunto ( <i>total</i> ) del reactivo a lo largo del lecho.	$C_A(z)$	$mol/m^3$
Concentración molar en la <i>fase-emulsión</i> del reactivo a lo largo del lecho.	$C_{Ae}(z)$	$mol/m^3$
Concentración molar de la <i>fase-burbuja</i> del reactivo a lo largo del lecho.	$C_{Ab}(z)$	$mol/m^3$
Conversión porcentual del lecho en su conjunto ( <i>total</i> ) del reactivo en la corriente de salida del lecho.	$X_A$	[adim]
Conversión porcentual de la <i>fase-emulsión</i> del reactivo en la corriente de salida del lecho.	$X_{Ae}$	[adim]
Conversión porcentual de la <i>fase-burbuja</i> del reactivo en la corriente de salida del lecho.	$X_{Ab}$	[adim]

Conversión porcentual del lecho en su conjunto ( <i>total</i> ) del reactivo a lo largo del lecho.	$X_A(z)$	[adim]
Conversión porcentual de la <i>fase-emulsión</i> del reactivo a lo largo del lecho.	$X_{Ac}(z)$	[adim]
Conversión porcentual de la <i>fase-burbuja</i> del reactivo a lo largo del lecho.	$X_{Ab}(z)$	[adim]
Posición axial en el lecho.	$z$	m
Velocidad superficial del gas en el lecho.	$u_0$	$\frac{m}{s}$
Velocidad mínima de fluidización.	$u_{mf}$	$\frac{m}{s}$
Fracción de huecos de fluidización incipiente.	$\epsilon_{mf}$	[no aplica]
Diámetro de burbuja.	$d_b$	m
Aceleración de la gravedad.	$g$	$\frac{m}{s^2}$
Difusividad.	$\mathcal{D}$	$\frac{m^2}{s}$
Densidad del sólido.	$\rho_s$	$\frac{kg}{m^3}$
Masa de catalizador.	$W$	kg
Diámetro del reactor.	$d_R$	m
Numero de burbujas presentes en el lecho.	$N_b$	[no aplica]
Velocidad de ascenso de una burbuja en el lecho.	$u_{br}$	$\frac{m}{s}$
Velocidad absoluta de ascenso de las burbujas en un lecho.	$u_b$	$\frac{m}{s}$
Flujo volumétrico global de emulsión-burbuja.	$Q$	$\frac{m^3}{s}$

Flujo volumétrico de la burbuja.	q	$\frac{m^3}{s}$
Coefficiente de transferencia de masa entre la burbuja y emulsión.	$k_g$	$\frac{m}{s}$
Área de interfase de transferencia de la burbuja.	S	$m^2$
Parámetro adimensional X.	X	[adim]
Parámetro adimensional $\beta$ .	$\beta$	[adim]
Parámetro adimensional $k'$ .	$\kappa'$	[adim]
Volumen promedio de burbujas.	V	$m^3$
Área transversal del Reactor.	$A_c$	$m^2$
Columna en condiciones de fluidización incipiente.	$H_0$	m
Altura del lecho en condiciones de fluidización.	H	m
Diferencia de altura entre fluidización incipiente y condiciones normales de fluidización.	$\Delta H$	m
Constante 1 de solución analítica de la ecuación [referencia, Aris o Kapplan]: que define la concentración en la burbuja, presentada en la solución analítica.	$C_1$	[no aplica]
Constante 2 de solución analítica de la ecuación [referencia, Aris o Kapplan]: que define la concentración en la burbuja, presentada en la solución analítica.	$C_2$	[no aplica]
Raíz cuadrada positiva de la ecuación [referencia, Aris o Kapplan]: que define la concentración en la burbuja, presentada en la solución analítica.	$m_1$	[no aplica]
Raíz cuadrada negativa de la ecuación [referencia, Aris o Kapplan]: que define la concentración en la burbuja, presentada en la solución analítica.	$m_2$	[no aplica]

Área de interfase de transferencia de la burbuja, de todas las burbujas presentes en el lecho.	$S_t$	$m^2$
Flujo volumétrico de la burbuja, de todas las burbujas presentes en el lecho.	$q_t$	$\frac{m^3}{s}$
Coefficiente de transferencia de masa entre la burbuja y emulsión, de todas las burbujas presentes en el lecho.	$k_{gt}$	$\frac{m}{s}$
Flujo volumétrico global de emulsión-burbuja, de todas las burbujas presentes en el lecho.	$Q_t$	$\frac{m^3}{s}$
Factor pre-exponencial de la ecuación de la ecuación de Arrhenius.	$k_0$	$s^{-1}$
Energía de activación.	$E_a$	$\frac{J}{mol}$
Constante universal de los gases.	$R_c$	$\frac{J}{K mol}$
Temperatura del sistema.	$T$	$K$
Flujo molar del reactivo de interés en la dirección axial.	$m_A$	$\frac{m}{s}$
Concentración de molar de A en la corriente que sale del reactor de la sección 1.9.2.	$C_{AeS}$	$\frac{mol}{m^3}$
Velocidad la <i>fase-emulsión</i> en el modelo PFR y CSTR sección 1.9.2.	$v_e$	$\frac{m}{s}$
Tiempo de residencia que tiene el fluido en el reactor	$\theta$	$s$
Gasto volumétrico del material que fluye por la emulsión sección 1.9.	$Q_e$	$\frac{m^3}{s}$
Volumen de la <i>fase-emulsión</i> .	$V_e$	$m^3$
Altura del lecho fluidizado por donde sale el gas.	$z_H$	$m$
Inicio lecho fluidizado por donde entra el gas.	$z_0$	$m$

## CAPÍTULO I

### REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, RLF. GENERALIDADES DEL MODELO DAVIDSON-HARRISON.

#### 1.1 Introducción

En términos generales, se denomina como *reactor de lecho fluidizado (RLF)* al equipo en donde se llevan a cabo transformaciones químicas que implican la interacción de partículas sólidas que se mantienen suspendidas en el seno de un fluido (gas o líquido) que fluye continuamente. En la mayoría de los casos, la fase fluida es un gas que contiene el reactivo que se desea transformar, mientras que las partículas sólidas contienen el otro reactivo y/o el catalizador que se requiere para conseguir la transformación química deseada. La operación del lecho es adecuada cuando las partículas sólidas se mantienen suspendidas en el seno del fluido, porque así se facilitan los procesos de transferencia y la transformación química que ocurren en este sistema heterogéneo gas-sólido. La suspensión del sólido en el fluido se consigue balanceando la fuerza de gravedad que actúa sobre las partículas sólidas con la fuerza que ejerce el fluido en movimiento sobre dichas partículas sólidas. Así, conocidas las características del sólido (área, porosidad, densidad, tamaño, etcétera) y del fluido (densidad, viscosidad, etcétera), se ajusta el gradiente de presión (y por lo tanto, el flujo volumétrico del fluido que se alimenta al reactor) para establecer el lecho fluidizado. Se dice que un sistema de este tipo está en la condición de *fluidización incipiente* cuando el gradiente de presión que se aplica a la corriente gaseosa es el mínimo necesario para solamente soportar el peso de las partículas sólidas, sin llegar a moverlas. Al incrementar el gradiente de presión más allá de la condición de *fluidización incipiente* se presenta la expansión del lecho, debido a que las partículas tienen la energía necesaria para moverse en el seno del gas, alcanzando así la

condición de *lecho fluidizado*. Sin embargo, si se continúa incrementando el gradiente de presión, la expansión del lecho deja de ser uniforme, viéndose interrumpida por cavidades, dando paso a una fluidización turbulenta (la cual puede verse como vapor en un líquido hirviendo), hasta llegar a una condición tal en donde un elevado gradiente de presión, puede arrastrar las partículas sólidas fuera del lecho.

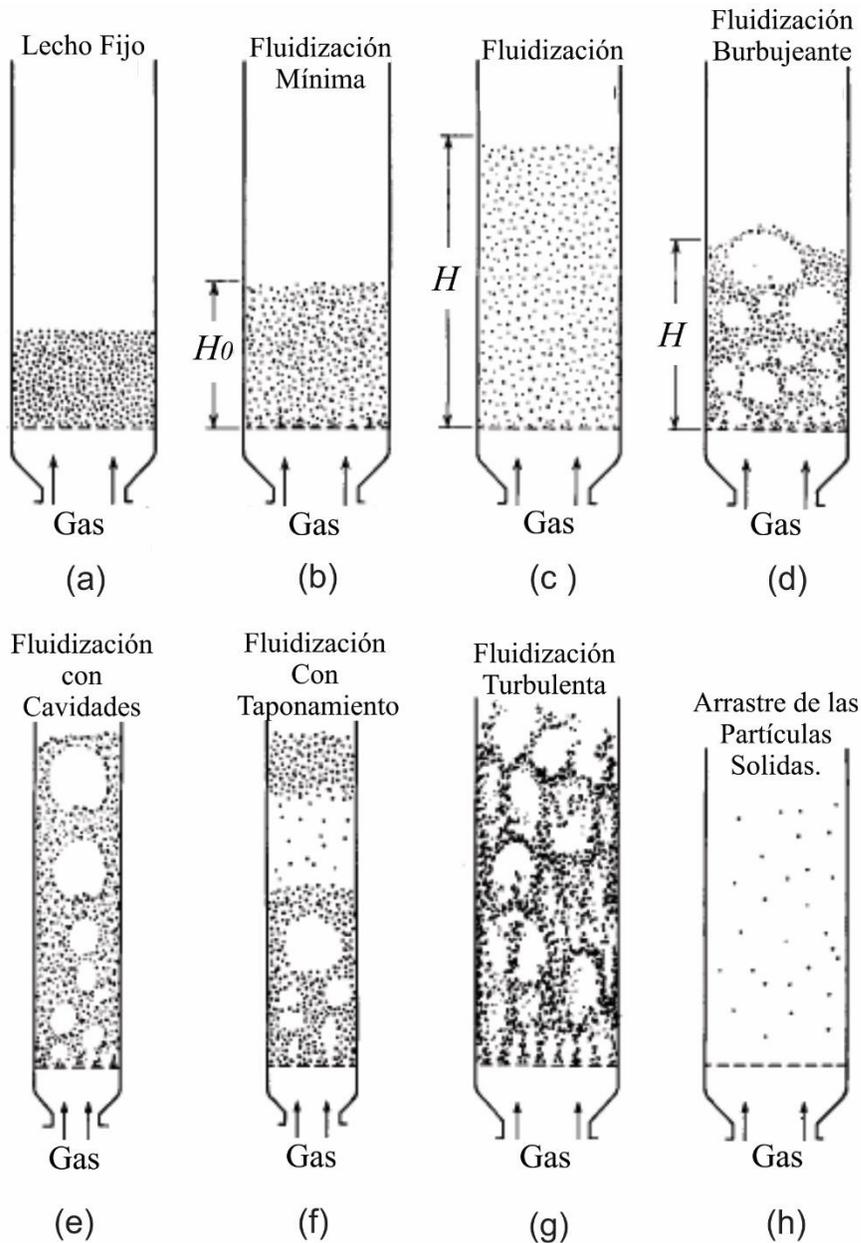


Figura 1.1 Regímenes de fluidización.

En la Figura 1.1, se ilustran los diferentes regímenes de fluidización, en (a) se muestra la columna estática, (b) columna en condiciones de fluidización mínima, (c) condiciones normales de fluidización, (d) Fluidización con burbujeo, (e) y (f) se presentan cavidades y taponamientos debido a las altas velocidades del gas de entrada, (g) fluidización turbulenta, y finalmente en (h), el aumento descontrolado en la caída de presión provoca que las partículas sólidas sean arrastradas fuera del lecho.

Los sistemas de lecho fluidizado exhiben ventajas interesantes, entre las cuales destaca la posibilidad de favorecer la transferencia de momentum, masa y calor, facilitando así el desarrollo de la transformación química esperada. Brevemente, puede decirse que la clave para conseguir una operación saludable de un reactor de lecho fluidizado, RLF, consiste en propiciar la interacción entre la corriente gaseosa y las partículas sólidas, maximizando la agitación de la mezcla y minimizando la resistencia a la transferencia de masa y calor que pudiera haber entre dichas fases. En esas condiciones, la operación del RLF (y consecuentemente su simulación matemática) puede asumirse isotérmica.

En conclusión, el diseño y análisis de un RLF conlleva el reconocer cuáles son los parámetros y variables que determinan el sistema en cuestión, tanto la transferencia de momentum, masa y calor, como la rapidez de reacción con la cual se logra la transformación de reactivos en productos, ya que la combinación de todos esos procesos determinan la composición del sistema (en el gas: flujo volumétrico y concentración de reactivo; en las partículas sólidas: tamaño y composición). Ahí radica la complejidad de su modelado y análisis matemático.

En este trabajo se analiza el comportamiento de un reactor de lecho fluidizado, en el cual se lleva a cabo una reacción irreversible de primer orden, asumiendo que el reactor se opera en condiciones isotérmicas y en estado estacionario, empleando para ello el modelo *Davidson-Harrison* (1963). En dicho modelo se asume que un reactor de lecho fluidizado puede modelarse considerando que está constituido por dos fases: una fase diluida, que representa a las burbujas de gas que atraviesan el lecho fluidizado, y que es conocida como *fase-burbuja*; la otra es una fase densa, a la cual se le conoce como *fase-emulsión*, llamada así porque se asume que es una emulsión heterogénea gas-sólido que está formada por las partículas sólidas que se encuentran suspendidas en la parte de gas que soporta el peso de las

partículas sólidas. La *fase-burbuja* contiene el reactivo, y la *fase-emulsión* el catalizador en cuya superficie se da la transformación química de reactivo a producto. Consecuentemente, es muy importante conocer y controlar los procesos de transporte que ocurren entre dichas fases. En la Figura 1.2 se presenta un esquema del reactor de lecho fluidizado, que permite identificar partes esenciales del modelo *Davidson-Harrison (1963)*, e indicar que la composición de la *fase-burbuja* y *fase-emulsión* cambian a lo largo del lecho.

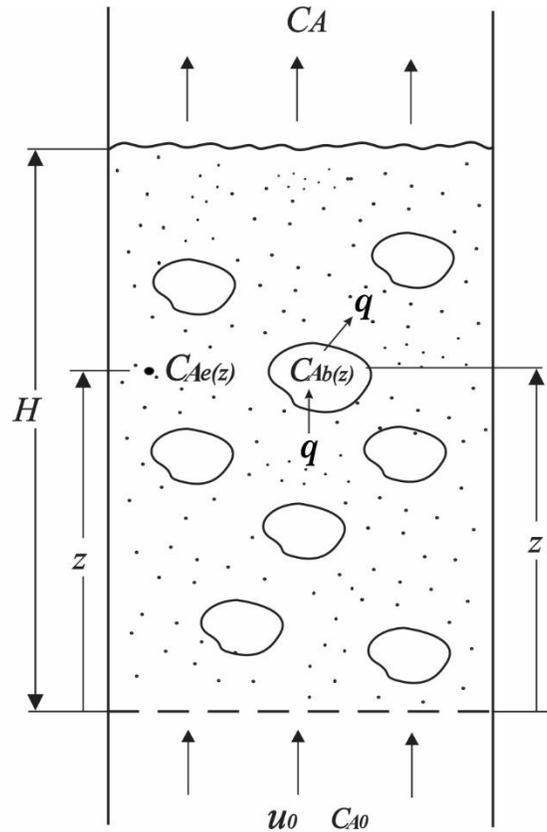


Figura 1.2 Esquema de un Reactor de Lecho Fluidizado en donde se indica la concentración del reactivo de interés en las partes relevantes del modelo Davidson-Harrison, a saber: i) gas que se alimenta al reactor,  $C_{A0}$ , ii) *fase-burbuja*,  $C_{Ab(z)}$ , iii) *fase-emulsión*,  $C_{Ae(z)}$ , y iv) gas que sale de la zona de reacción,  $C_A$ .

## 1.2 Restricciones

De las restricciones desarrolladas por Davidson y Harrison (1963) se encuentran las siguientes:

- 1) La *fase-burbuja* es incompresible y exhibe un comportamiento viscoso.
- 2) La *fase-burbuja* contiene una cantidad despreciable de sólidos, de manera que en ella no ocurre reacción química alguna.
- 3) La *fase-emulsión* es homogénea y en ella se da la reacción química.
- 4) La porosidad de la *fase-emulsión* es constante y su valor es igual al de la porosidad del lecho en condiciones de fluidización incipiente.
- 5) La *fase-burbuja* que atraviesa el lecho fluidizado está constituida por burbujas esféricas cuyo tamaño es constante.
- 6) La presión que se ejerce sobre la *fase-burbuja* es constante a lo largo del lecho fluidizado.
- 7) La temperatura es constante en todo el lecho.
- 8) La *fase-burbuja* se modeló con el modelo de reactor tubular con flujo pistón, *PFR* por sus siglas en Inglés.
- 9) La *fase-emulsión* se modeló con dos modelos diferentes: 9-A) modelo de *PFR* (*Plug Flow Reactor*); y 9-B) modelo de reactor de tanque agitado con mezclador perfecto, *CSTR* (*continuous flow stirred tank reactor*) por sus siglas en Inglés.

10) De acuerdo con la Figura 1.3 el gas que entra al reactor se reparte entre la *fase-emulsión* y la *fase-burbuja*, y es diferente la velocidad con la que se mueve el gas en cada una de dichas fases: la *fase-emulsión* tiene una velocidad  $u_{mf}$ , mientras que la *fase-burbuja* se mueve a una velocidad  $u_0 - u_{mf}$ , en (a) se ilustra el punto 9), mientras que en (b) el 9.B).

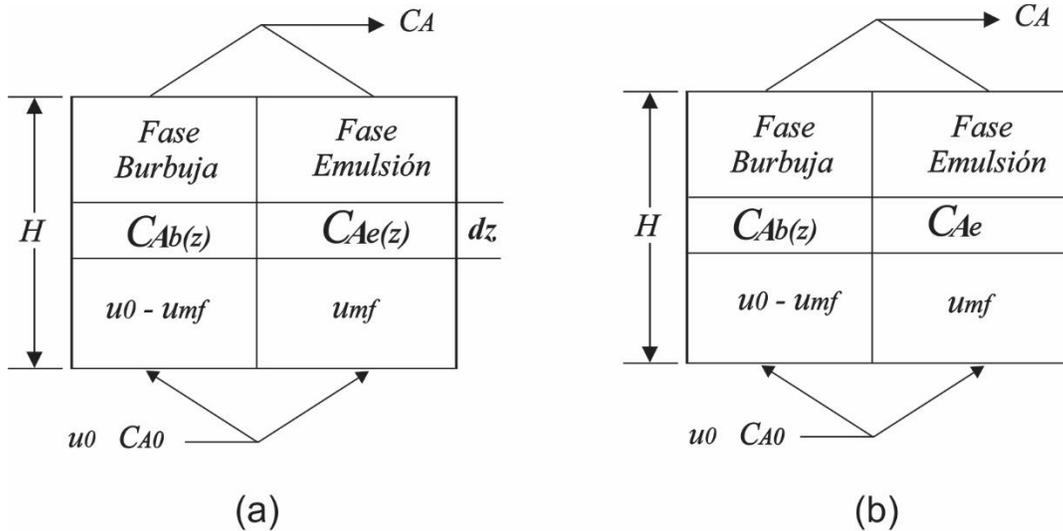


Figura 1.3 Esquema de la versión del modelo de Davidson-Harrison.

En la Figura 1.3 se muestra el esquema de la versión del modelo Davidson-Harrison, en el que se identifican factores importantes de dicho modelo, tales como en (a): la dependencia de las fases burbuja y emulsión sobre la altura del lecho fluidizado,  $H$ ; en (b): la dependencia únicamente de la *fase-burbuja* sobre la altura del lecho fluidizado,  $H$ ; y las respectivas velocidades de ambas fases.

### 1.3 Reacción

Como se explicó anteriormente, los modelos matemáticos que se han aplicado para describir el desarrollo de reacciones químicas en reactores de lecho fluidizado son complejos, porque en su construcción se consideran factores propios de la transferencia de las propiedades conservativas y de la rapidez de reacción de los materiales que participan en el proceso.

Como se hace en el estudio de buena parte de procesos heterogéneos catalíticos que se desarrollan a nivel industrial, donde brevemente puede decirse que las mejores condiciones de operación de un reactor están determinadas por un balance económico que toma en consideración factores tales como los costos de: i) materiales (reactivos, productos, etcétera); ii) condiciones de operación del reactor; iii) proceso de separación que sigue al de transformación química; iv) mano de obra; v) mantenimiento; vi) tiempos muertos. En este trabajo se utilizó un modelo sencillo para representar a la transformación química, a saber: reacción química unimolecular e irreversible del tipo:



Dicha reacción obedece una rapidez de reacción de primer orden con respecto al reactivo A -Ecuación (1)-, que tiene un coeficiente de rapidez de reacción,  $k$ , que es una función tipo Arrhenius, en la cual los valores de energía de activación,  $E$  y factor pre-exponencial,  $k_0$  son constantes -Ecuación (2)-:

$$r_A = kC_A \quad (1)$$

$$k = k_0 \exp(-E/RT) \quad (2)$$

#### 1.4 Mecánica de las burbujas

Para el estudio de reactores de lecho fluidizado, resulta fundamental el desarrollo de modelos que describan el contacto gas-sólido, donde la burbuja sea definible desde su formación hasta la superficie del lecho; por ello, para este apartado se citarán los parámetros que describen la mecánica de una burbuja que atraviesa el lecho fluidizado.

En la Figura 1.4 se ilustra la secuencia de formación de una burbuja en un lecho fluidizado, donde en (a) la burbuja comienza a formarse por la inyección de gas en los platos distribuidores, este distribuidor debe evitar que las partículas caigan dentro del túnel de gas, ser capaz de soportar las fuerzas debido a la caída de presión (asociadas con el flujo de gas durante la operación), y soportar el peso de las partículas durante reposo; en (b) la velocidad del gas provoca que las partículas sólidas ubicadas arriba del agujero del plato distribuidor, sean desplazadas en dirección axial, en (c) el desplazamiento de las partículas sólidas se extiende a todas direcciones del perímetro semiesférico del “vacío” creado (realmente

ocupado por gas), en (d) el vacío creado por el gas toma una forma estrecha y alargada debido a la presión de las partículas sólidas que lo rodea, el vacío crece lo suficiente provocando que los sólidos que en principio fueron desplazados hacia arriba, caigan por sus paredes, cortando desde la base del plato distribuidor el vacío que se había creado; finalmente en (e) una vez cortado el vacío, éste se contrae, resultando en la aparición de una burbuja con forma esférica (esta forma esférica minimiza la tensión de la pared de la capa superficial), dando paso a la entrada de gas para la formación de más burbujas.

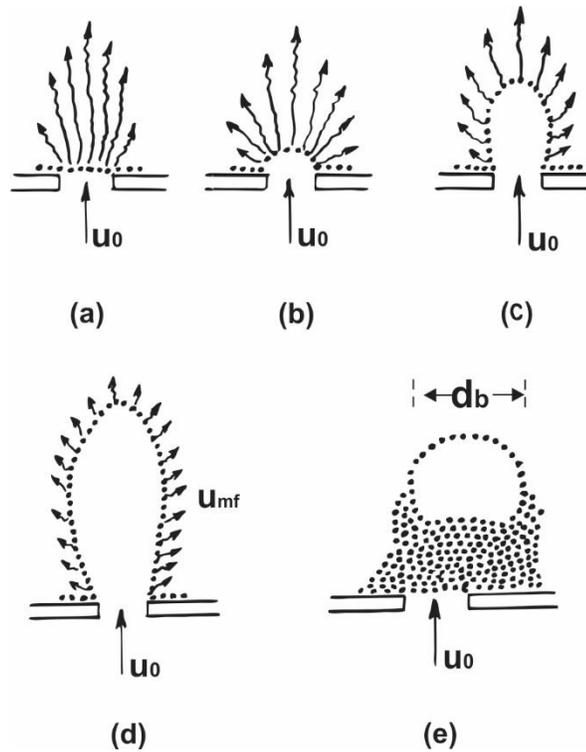


Figura 1.4 Formación de una burbuja en el lecho a partir de la inyección de gas (con una velocidad  $u_0$ ), en el plato distribuidor.

Una vez formada la burbuja, ésta comienza a elevarse por el reactor al mismo tiempo en el que intercambia materia, donde de ella sale reactivo para entrar a la *fase-emulsión*, y entra producto proveniente de la emulsión (donde únicamente se lleva a cabo la reacción). La elevación de la burbuja desplaza los sólidos en todo su perímetro, formando corrientes periféricas que se deslizan por las paredes hasta el fondo de la burbuja, donde se forma un cúmulo de sólidos, llamado "estela", como se ilustra en (a) de la Figura 1.5.

Las observaciones hechas por M. Botterill, J. S. George y H. Besford, (1966) dedujeron que este flujo descendente de sólidos deriva en una envoltura que rodea las paredes de la burbuja, esta envoltura ocupa un grosor, de manera que el diámetro de burbuja puede elevarse. F. A. Zenz, (1966), demostró que ésta envoltura corresponde al 50 % del diámetro inicial de la burbuja, teniendo una expansión de  $1.5 d_b$ . Para el trabajo realizado, se toma en consideración que la burbuja es esférica, incompresible y no cambia su tamaño en todo el lecho. Por ello, para el desarrollo del modelo se asume una burbuja como se ilustra en (b) de la Figura 1.5.

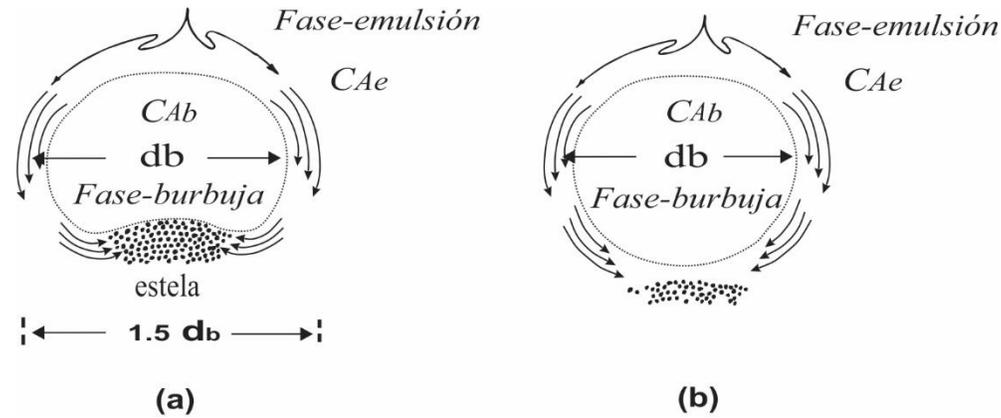


Figura 1.5 Elevación de una burbuja en el lecho fluidizado.

En la figura 1.5 se muestra la elevación de una burbuja en el lecho fluidizado; en (a) existe un aumento en el diámetro de burbuja en su paso por el lecho, debido a un desplazamiento (en la parte inferior de la burbuja) producido por un cumulo de sólidos, denominados estela; en (b) se asume una burbuja esférica, incompresible, con volumen constante en su paso por el lecho.

Davies y Taylor (1950) mediante sus experimentos establecieron una velocidad de ascenso de una burbuja que relaciona su diámetro  $d_b$ ; así como la fuerza gravitatoria  $g$ , ejercida sobre éstas, en la Ecuación (3):

$$u_{br} = 0.711(g d_b)^{1/2} \quad (3)$$

Experimentos desarrollados por Nicklin (1962) y respaldados por Wallis (1969) muestran cómo a partir del estudio de un sistema fluidizado (aire y agua) pudieron derivar ecuaciones que describen el paso de las burbujas en el lecho, las cuales son aplicables para una amplia variedad de sistemas de dos fases; derivando en la ecuación que describe la velocidad absoluta de las burbujas en el lecho, siendo ésta la suma de la velocidad ascendente del fluido que atraviesa la *fase-emulsión* como burbujas, más la velocidad natural de ascenso de las burbujas en el lecho:

$$u_b = u_0 - u_{mf} + u_{br} \quad (4)$$

Cuando el *RLF* está operando en condiciones de fluidización incipiente, existe una relación entre la altura que tiene el lecho fluidizado en dichas condiciones (también llamada *altura inicial*),  $H_0$ , y otros parámetros del lecho fluidizado, tales como: la masa del catalizador,  $W$ , el área transversal del reactor,  $A_c$ , la densidad de las partículas sólidas,  $\rho_s$ , y la fracción mínima de huecos del lecho fluidizado,  $\epsilon_{mf}$ , como se indica en la Ecuación (5):

$$H_0 = \frac{W}{A_c \rho_s (1 - \epsilon_{mf})} \quad (5)$$

Nicklin (1962) también mostró que debido al burbujeo ocasionado por la velocidad de las burbujas, se produce un aumento en la altura del nivel del lecho, donde si en una unidad de volumen hay un número determinado de burbujas,  $N_b$ , cada una con un volumen promedio,  $V$ , y una velocidad de ascenso,  $u_b$ , entonces  $[N_b V u_b]$ , representa el flujo que atraviesa el lecho como burbujas:

$$N_b V u_b = u_0 - u_{mf} \quad (6)$$

Una vez conocido el flujo que atraviesa el lecho, se puede obtener la fracción de gas, o bien, de burbujas presentes en el lecho:

$$N_b V = \delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \quad (7)$$

Donde el volumen promedio de cada una de las burbujas presentes en el lecho (las cuales se asumen como esféricas), queda en función del diámetro de burbuja:

$$V = \frac{1}{6} \pi d_b^3 \quad (8)$$

Al igual que el número de burbujas presentes en el lecho fluidizado:

$$N_b = \frac{6\delta}{\pi d b^3} \quad (9)$$

A condiciones de fluidización mínima, es decir, cuando se tiene una velocidad mínima de fluidización,  $u_{mf}$ , el lecho no presenta ninguna expansión, teniendo una altura inicial,  $H_0$ . Al hacerse presente dentro del lecho una velocidad mayor, se hace presente una expansión:

$$N_b V H = H - H_0 \quad (10)$$

Donde  $[H-H_0]$  representa el factor de expansión, debido a las burbujas dentro del *RLF*.

En condiciones normales de fluidización, es decir, cuando la velocidad de fluidización es lo suficientemente alta para mantener expandido al lecho fluidizado (mayor que la de fluidización incipiente pero menor que aquella velocidad que favorece el arrastre de las partículas sólidas fuera del reactor), la altura del lecho en dichas condiciones,  $H$ , se puede expresar en términos de la altura del lecho en condiciones de fluidización incipiente,  $H_0$ , como lo indica la Ecuación (11):

$$H = H_0 / (1 - N_b V) \quad (11)$$

### 1.5 Transferencia de masa entre *fase-burbuja* y *fase-emulsión*

Una vez analizada la mecánica de la burbuja, se procedió al estudio del intercambio de masa que ocurre entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*. Rigurosamente, la *fase-emulsión* está constituida por dos fases: las burbujas de gas (que contienen el reactivo *A*) y las partículas de catalizador (en donde ocurre la reacción química); consecuentemente, para que haya reacción química se requiere del transporte de masa a través de la superficie que separa dichas fases (interfase). Sin embargo, haciendo uso de la suposición de que el lecho fluidizado puede considerarse como una emulsión compuesta por gas y partículas de catalizador, se considera que el transporte de masa ocurre entre las burbujas y la emulsión, y que puede ser por difusión y por convección; cuya interfase *S*, se presenta en la superficie de la burbuja:

$$S = \pi d_b^2 \quad (12)$$

Derivado de los estudios realizadas por Davidson-Harrison (1963), se concluye que el intercambio de flujo volumétrico, *q*, de entrada y salida para una burbuja en movimiento, es el mismo al de una burbuja estática:

$$q = 3\pi u_{mf}a$$

Donde el área superficial de la burbuja se define como:  $a=(1/2)d_b$ , al ser modelada la burbuja en dos dimensiones, esta área superficial se eleva al cuadrado, resultando en una ecuación donde el flujo volumétrico, *q*, se expresa en términos del diámetro de la burbuja  $d_b$ :

$$q = \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2 \quad (13)$$

Para el transporte de masa por difusión, se establece un coeficiente de transferencia de masa,  $K_g$ , entre la parte céntrica de la burbuja, con una concentración,  $C_{Ab}$ , a las paredes de ésta, donde la concentración es  $C_{Ae}$ , este coeficiente es función de la difusividad del sistema, *D*, la fuerza gravitatoria, *g*, y del diámetro presente en la burbuja  $d_b$ , multiplicado por el área de interfase entre burbuja y emulsión *S*:

$$k_g = 0.975\sqrt{D} \left(\frac{g}{d_b}\right)^{1/4} S \quad (14)$$

Al sumar la transferencia de masa por convección, *q*, y difusión,  $K_g$ , se obtiene el coeficiente global de transferencia de masa entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión*:

$$Q = q + k_g S \quad (15)$$

## 1.6 Ecuaciones de balance de materia del Modelo de Davidson-Harrison

A continuación, se presentan las ecuaciones que constituyen el modelo de Davidson-Harrison (1963) que se utilizaron para modelar el comportamiento de un *RLF*, en el cual se lleva a cabo una reacción química irreversible que obedece una ecuación de rapidez de reacción de primer orden en condiciones isotérmicas y estado estacionario. Es conveniente señalar que los balances de masa se escriben en función de la concentración molar del reactivo *A* en cada una de las zonas de interés, donde el elemento de control se muestra en la Figura 1.2.

### 1.6.1 Fase-burbuja

El balance de masa en la *fase-burbuja* -Ecuación (16)- indica que el cambio de la concentración del reactivo *A* en la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}$ , a lo largo del eje longitudinal de lecho fluidizado (indicado por el flujo molar por convección de *A* en la dirección  $z$ ) es igual al transporte de *A* de la *fase-burbuja* a la *fase-emulsión* por convección [ $q(C_{Ab} - C_{Ae})$ ] y por difusión a través de la interfase gas-sólido,  $S$ , [ $k_g S(C_{Ab} - C_{Ae})$ ], como se indica en la siguiente ecuación:

$$-u_b V \frac{dC_{Ab}}{dz} = (q + k_g S)(C_{Ab} - C_{Ae}) \quad (16)$$

### 1.6.2 Fase-emulsión

En este trabajo se asume que la *fase-emulsión*, que es la zona en la cual ocurre la reacción química, se comporta como: a) reactor tubular con flujo tapón, PFR (por sus siglas en Inglés: Plug Flow Reactor); y b) como reactor continuo agitado CSTR (por sus siglas en Inglés: Continuos Stirred Tank Reactor).

a) Balance de masa de la *fase-emulsión* cuando se comporta como un *PFR* -Ecuación (17)-:

$$u_{mf} \frac{dC_{Ae}}{dz} + (u_0 - u_{mf}) \frac{dC_{Ab}}{dz} + k C_{Ae} (1 - N_b V) = 0 \quad (17)$$

Este balance de masa fue construido asumiendo que: i) el gradiente de composición se presenta únicamente en la dirección axial,  $z$ , (en la dirección radial se tiene un mezclado perfecto); ii) el transporte de masa es únicamente por convección, tanto en la *fase-emulsión*:  $u_{mf} \frac{dC_{Ae}}{dz}$ , como en la *fase-burbuja*  $(u_0 - u_{mf}) \frac{dC_{Ab}}{dz}$ ; y iii) la reacción química ocurre en la *fase-emulsión*:  $kC_{Ae}(1 - N_bV)$ .

b) Balance de masa de la *fase-emulsión* cuando se comporta como un *CSTR* -Ecuación (18)-:

$$N_bVu_b(C_{A0} - C_{Ae})(1 - e^{-QH/u_bV}) + u_0(C_{A0} - C_{Ae}) = kHC_{Ae}(1 - N_bV) \quad (18)$$

En este caso el balance de masa fue construido asumiendo que: i) en la *fase-emulsión* se tiene un mezclado perfecto, por lo que, no existe ningún gradiente de composición en toda esa región y el transporte de masa es por convección:  $u_0(C_{A0} - C_{Ae})$ ; ii) hay un transporte de masa por convección entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión*:  $N_bVu_b(C_{A0} - C_{Ae})(1 - e^{-QH/u_bV})$ ; y iii) en el seno de la *fase-emulsión* ocurre la reacción química:  $[kC_{Ae}H(1 - N_bV)]$ .

Evidentemente, el balance de masa en la *fase-burbuja* -Ecuación (16)- se acoplará con el de balance de masa de la *fase-emulsión* que tenga un comportamiento de *PFR* - Ecuación (17)- o *CSTR* -Ecuación (18)-.

### 1.7 Parámetros del modelo Davidson-Harrison

El modelo de Davidson-Harrison (1963) establece tres grupos adimensionales que facilitan el estudio y análisis del RLF. Un primer grupo,  $X$ , compuesto por el coeficiente global de transferencia de masa entre *fase-burbuja* y *fase-emulsión*,  $Q$ , la altura del lecho en condiciones de fluidización,  $H$ , velocidad de ascenso de las burbujas,  $u_b$ , y por el volumen de cada una de ellas,  $V$ . Este parámetro  $X$ , describe la facilidad de intercambio de masa entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión*:

$$X = \frac{QH}{u_bV} \quad (19)$$

Por su parte  $\beta$ , agrupa la velocidad con la que se mueve la *fase-burbuja* [ $u_0 - u_{mf}$ ], dividido entre la velocidad de entrada del gas,  $u_0$ , de forma que puede verse a  $\beta$ , como un indicador de la fracción del flujo de gas que atraviesa el lecho como burbujas:

$$\beta = (u_0 - u_{mf})/u_0 \quad (20)$$

Mientras que  $\kappa'$ , se define como un parámetro cinético, ya que introduce el coeficiente de rapidez de reacción,  $k$ :

$$\kappa' = \frac{kH_0}{u_0} \quad (21)$$

Al ser aplicados los parámetros  $X$ ,  $\beta$  y  $\kappa'$ , se reescriben los balances de materia de *fase-burbuja* y *fase-emulsión*, reduciendo el número de variables, de esta forma el balance para la *fase-burbuja* a partir de la Ecuación (16) se tiene:

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{X}{H}(C_{Ab} - C_{Ae}) = 0 \quad (22)$$

Para la *fase-emulsión* bajo las condiciones de PFR -Ecuación (17)-, se obtiene la siguiente expresión:

$$(1 - \beta) \frac{dC_{Ae}}{dz} + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{\kappa'}{H} C_{Ae} = 0 \quad (23)$$

Por su parte para la *fase-emulsión* bajo el modelo de CSTR -Ecuación (18)-, se tiene la siguiente ecuación algebraica:

$$C_{Ae} = \frac{C_{A0}(1 - \beta e^X)}{(\kappa' + 1 - \beta e^X)} \quad (24)$$

### 1.8 Condiciones a la frontera

Al resultar con dos ecuaciones diferenciales y dos variables, los balances correspondientes donde se modela la *fase-emulsión* como PFR (Plug Flow Reactor), se tienen las siguientes condiciones a la frontera para el sistema:

- (i) El gas que entra en la *fase-burbuja* en  $z = 0$  tiene una concentración  $C_0$ .

$$C_{Ab} = C_{A0} \quad a \quad z = 0 \quad (25)$$

- (ii) El gas entrante en la *fase-emulsión* en  $z = 0$  tiene una concentración  $C_{A0}$ , [ $C_{Ae}=C_{A0}=C_{Ab}$ ], al ser aplicada esta condición en el balance de la *fase-burbuja* -Ecuación (16)-, se tiene que:

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} = 0 \quad a \quad z = 0 \quad (26)$$

Al ser modela la *fase-emulsión* como CSTR (Continuos Stirred Tank Reactor), se tiene una sola ecuación diferencial que describe la *fase-burbuja* y una ecuación algebraica que describe la *fase-emulsión*, de manera que solamente se hace uso de la primera condición a la frontera -Ecuación (25)-.

Una vez resueltos los balances de la *fase-emulsión* y *fase-burbuja*, y conocidas sus concentraciones para obtener la concentración *total* de reactivo que se obtiene a la salida del lecho,  $C_A$ , se debe sumar la contribución de ambas fases:

$$u_0 C_A = (u_0 - u_{mf}) C_{Ab} + u_{mf} C_{Ae} \quad (27)$$

Donde  $C_A$  representa finalmente la suma de las corrientes de gas presente en ambas fases en la corriente de salida.

A continuación, se presentan las ecuaciones de los parámetros que se utilizaron para modelar los procesos de transporte implicados en el modelo *RLF* tipo Davidson-Harrison (1963), utilizado en este trabajo. Para facilitar dicha presentación, en la Tabla 1.1 se indica la definición de cada parámetro de interés (1ª columna); luego la ecuación que se utilizó para calcularlo (2ª columna) y finalmente las unidades en las que fue expresado (3ª columna).

Tabla 1.1 Definición de parámetros RLF, Modelo: Davidson-Harrison.

Definición	Ecuación	Unidades
Velocidad de ascenso de una burbuja en el lecho.	$u_{br} = 0.711(g d_b)^{1/2}$	$\frac{m}{s}$
Velocidad absoluta de ascenso de las burbujas en un lecho.	$u_b = u_0 - u_{mf} + u_{br}$	$\frac{m}{s}$
Fracción de burbujas en el lecho.	$N_b V = \delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b}$	[adim]
Flujo volumétrico global de emulsión-burbuja.	$Q = q + k_g S$	$\frac{m^3}{s}$
Flujo volumétrico de la burbuja.	$q = \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2$	$\frac{m^3}{s}$
Coefficiente de transferencia de masa entre la burbuja y emulsión.	$k_g = 0.975\sqrt{D} \left(\frac{g}{d_b}\right)^{1/4}$	$\frac{m}{s}$
Área de interfase de transferencia de la burbuja.	$S = \pi d_b^2$	$m^2$
Parámetro adimensional X.	$X = \frac{Q H}{u_b V}$	[adim]
Parámetro adimensional $\beta$ .	$\beta = 1 - \frac{u_{mf}}{u_0}$	[adim]
Parámetro adimensional $k'$ .	$k' = \frac{k H_0}{u_0}$	[adim]
Volumen promedio de burbujas.	$V = \frac{1}{6} \pi d_b^3$	$m^3$
Área transversal del reactor.	$A_c = \frac{\pi}{4} d_R^2$	$m^2$
Columna en condiciones de fluidización incipiente.	$H_0 = \frac{W}{A_c \rho_S (1 - \epsilon_{mf})}$	m
Altura del lecho en condiciones de fluidización.	$H = \frac{H_0}{(1 - \delta)}$	m

### 1.9 Características de los reactores PFR y CSTR

Como se mencionó, el comportamiento de la *fase-emulsión* del modelo D-H se simulará considerando que se comporta como un reactor tubular de flujo tapón, PFR, o bien como un reactor continuo agitado, CSTR. En este sentido, es oportuno tener presente que de acuerdo con el modelo Davidson-Harrison, la *fase-emulsión* es una mezcla heterogénea gas-sólido, formada por las partículas sólidas del catalizador y por la parte de gas que las mantiene suspendidas, constituyendo así el lecho fluidizado. También, es conveniente explicar brevemente algunas de las características de los modelos PFR y CSTR, y cómo se aplicó cada uno de dicho modelos para describir el comportamiento de la *fase-emulsión*. Los modelos PFR y CSTR se diferencian entre sí por el grado de mezclado que se supone existe en cada uno de ellos.

#### Reactor de flujo tapón, PFR

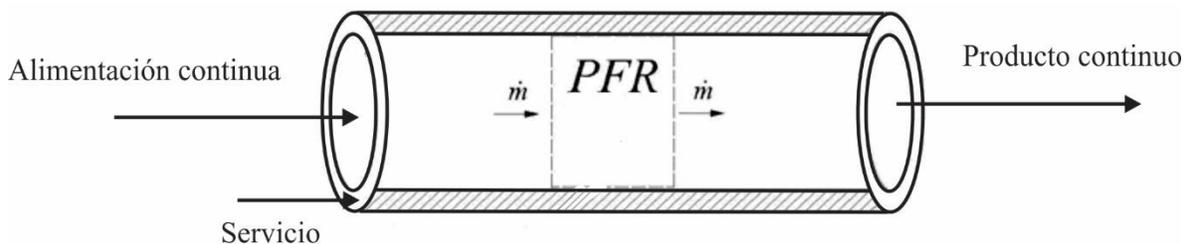


Figura 1.6 Reactor Tubular de Flujo Tapón, PFR.

Básicamente, al aplicar el modelo de PFR para describir la transformación química en la *fase-emulsión*, se están asumiendo las siguientes restricciones: i) la velocidad con la que se mueve la *fase-emulsión* es lo suficientemente grande como para que dicha velocidad pueda representarse con un valor constante; ii) el transporte de masa sea por convección únicamente; y iii) solamente haya gradiente de concentración de especies en la dirección axial, es decir, que la *fase-emulsión* se tiene un perfil de concentración de especies plano en la dirección radial. Consecuentemente, el transporte de masa en la *fase-emulsión* se modela mediante el producto de la velocidad la *fase-emulsión*,  $v$ , y por el gradiente de concentración de la especie de interés en la dirección axial  $z$ , obteniendo una ecuación del tipo:

$$m_A = v_e \left( \frac{dC_{Ae}}{dz} \right)$$

Donde  $m_A$  es el flujo molar de  $A$  (especie de interés) en la dirección axial  $z$  de la *fase-emulsión*;  $v_e$  es la velocidad de la *fase-emulsión* en la dirección  $z$ ;  $C_{Ae}$  es la concentración molar de  $A$  en el seno la *fase-emulsión*, y es función únicamente de la coordenada  $z$  y, finalmente, el término entre paréntesis representa al gradiente de la concentración molar de  $A$  en la dirección  $z$  que se tiene en la *fase-emulsión*.

**Reactor continuo agitado, CSTR**

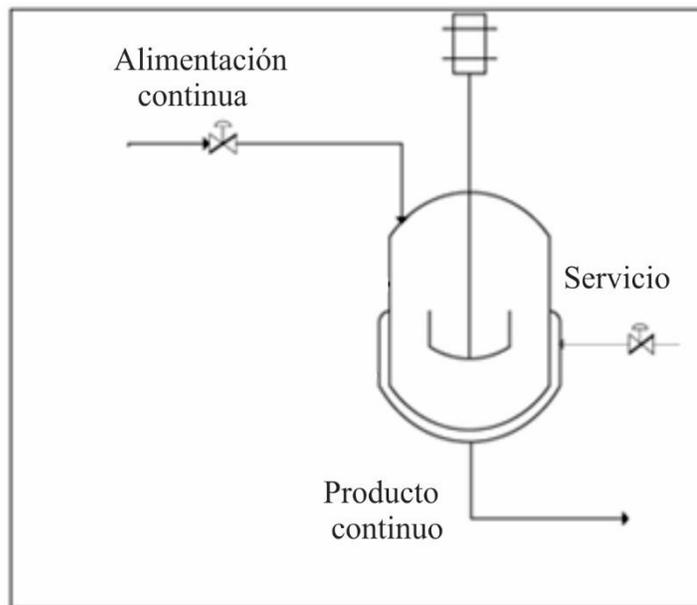


Figura 1.7 Reactor de Tanque Agitado, CSTR.

La idea básica del modelo de reactor continuo agitado, CSTR, consiste en asumir que el material que contiene la *fase-emulsión* está perfectamente agitado (mezclado perfecto), de manera que no hay gradientes de composición en toda esa mezcla reaccionante. En esas condiciones no puede haber transporte de masa (ni de energía) por difusión, y el transporte por convección se modela aplicando en toda la *fase-emulsión* (todo el lecho fluidizado) el concepto de gradiente de largo alcance, como se indica en la siguiente ecuación:

$$m_A = v_e \left( \frac{C_{A0} - C_{Ae}}{z_0 - z_H} \right)$$

Donde  $C_{A0}$  es la concentración de  $A$  de la corriente que entra a la *fase-emulsión* ( $z = z_0$ : entrada del gas al lecho fluidizado);  $C_{Ae}$  es la concentración de  $A$  en toda la *fase-emulsión* (todo el lecho fluidizado) y en la posición en donde termina la *fase-emulsión* ( $z = z_H$ : altura del lecho fluidizado por donde sale el gas) es la principal suposición del modelo CSTR.

Una forma del modelo del CSTR comúnmente usada es en términos del tiempo de residencia de material que fluye a través del reactor,  $\theta$ , la cual se obtiene multiplicando el numerador y el denominador de la ecuación anterior por el área de sección transversal del tubo,  $A_c$ , y aplicando las siguientes igualdades:

$$v_e A_c = Q_e$$

Donde  $Q_e$  es el gasto volumétrico del material que fluye por el reactor.

$$(z_0 - z_H) A_c = V_e$$

Donde  $V_e$  es el volumen de la *fase-emulsión* (volumen del lecho fluidizado).

$$\frac{V_e}{Q_e} = \theta$$

Como  $V_e$  y  $Q_e$  tienen un valor constante, el tiempo de residencia  $\theta$  también es constante, de manera que el modelo de CSTR para la *fase-emulsión* también puede expresarse como:

$$m_A = \theta(C_{A0} - C_{AeS})$$

Donde  $m_A$  es el flujo molar de  $A$  (especie de interés) en la dirección axial  $z$ ;  $\theta$  es el tiempo de residencia que tiene el fluido en el reactor;  $C_{A0}$  es la concentración molar de  $A$  en la corriente que entra al reactor;  $C_{AeS}$  es la concentración molar de  $A$  en la corriente que sale del reactor. Al aplicar este modelo a la *fase-emulsión*, se asume que  $C_{A0}$  es la concentración molar de  $A$  en la corriente de gas que entra al reactor, mientras que  $C_{AeS}$  es la concentración molar de  $A$  en la *fase-emulsión*.

### 1.9.1 Ventajas y desventajas de CSTR y PFR

CSTR – Continuo de tanque agitado (“Continuous Stirred Tank reactor”). Comúnmente usado para reacciones en fase líquida. Ventajas: i) buen control de la temperatura, ii) fácil de adaptar a dos fases, iii) bajo costo de fabricación y mano de obra, iv) consistencia en la productividad. Desventaja: i) baja conversión por unidad de volumen comparado con otros reactores de flujo. Ejemplos de uso: fermentación, hidrólisis de proteínas.

PFR – Tubular de flujo tapón (“Plug Flow Reactor”). Comúnmente usado para reacciones en fase gaseosa. Ventajas: i) bajo costo de operación, ii) alta conversión por unidad de volumen. Desventajas: i) difícil control de la temperatura, ii) posibilidad de puntos desproporcionadamente calientes. Ejemplos de uso: craqueo de petróleo, síntesis de amoníaco.

### 1.10 Estudio de Modelos

En este trabajo se modeló el comportamiento de un reactor de lecho fluidizado gas-sólido, en el cual se desarrolla una reacción elemental, unimolecular e irreversible, en condiciones isotérmicas y estado estacionario. Se utilizaron dos versiones del modelo de Davidson-Harrison que se diferencian una de la otra por el comportamiento que se asume tiene la *fase-emulsión*:

**Modelo 1** La *fase-emulsión* se comporta como un reactor de flujo tapón. De aquí en adelante a este modelo se le etiquetará como D-H/PFR, el cual se presenta en el Capítulo II.

**Modelo 2** La *fase-emulsión* se comporta como un reactor continuo agitado. De aquí en adelante a este modelo se le etiquetará como D-H/CSTR, el cual se presenta en el Capítulo III.

Mediante las dos versiones del modelo de Davidson-Harrison D-H/PFR y D-H/CSTR, se analizó el comportamiento del reactor de lecho fluidizado, teniendo como variable dependiente a la conversión del reactivo A ( $X_A$ ) y como variable independiente cada uno de los siguientes factores:  $X_1$ ) diámetro de burbuja,  $d_b$ ,  $X_2$ ) diámetro del reactor,  $d_R$ , y  $X_3$ ) velocidad superficial del gas que se alimenta al lecho,  $u_0$ .

### 1.11 Estrategia

Aprovechando que los modelos D-H/PFR y D-H/CSTR permiten obtener el valor de  $X_A$  en la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y con ello la conversión del lecho en su conjunto (*total*) del reactivo de interés a la salida del reactor. Se comparan las condiciones de la corriente de salida del lecho que resultan de la acción de variar cada uno de los parámetros mencionados, teniendo como referencia en el Capítulo II al Caso Base PFR, mientras que en el Capítulo III la comparación recae directamente entre los modelos de Davidson-Harrison, con *fase-emulsión* como PFR (Modelo 1) y *fase-emulsión* como CSTR (Modelo 2).

Conversión en la *fase-burbuja*

$$X_{Ab} = \frac{C_{A0} - C_{Ab}}{C_{A0}} \quad (28)$$

Conversión en la *fase-emulsión*

$$X_{Ae} = \frac{C_{A0} - C_{Ae}}{C_{A0}} \quad (29)$$

Conversión del lecho en su conjunto

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \quad (30)$$

Las etapas que, principalmente, constituyen la estrategia aplicada en el desarrollo del presente trabajo son las siguientes:

1. Reducción de los balances de materia en los Modelos D-H/PFR y D-H/CSTR a un modelo matemático simplificado que resulta de la aplicación de los parámetros adimensionales definidos por Davidson-Harrison.

2. Fijar parámetros de entrada, y condiciones iniciales.
3. Resolución numérica en *Mathematica*® de los modelos matemáticos y obtención de perfiles del comportamiento.
4. Análisis de los perfiles obtenidos del comportamiento del sistema.
5. Variación de un parámetro.
6. Análisis del aumento o disminución de un parámetro sobre las ecuaciones de los Modelos D-H/PFR y D-H/CSTR.

Finalmente, antes de pasar al Capítulo II, es conveniente señalar que con el propósito de disminuir la complejidad inherente de modelar matemáticamente el comportamiento de reactores de lecho fluidizado (RLF), en este trabajo se considera la simplificación que han hecho otros autores [Davies y Taylor (1950)] en cuanto a que la transformación química de interés sea representada por una reacción elemental, unimolecular e irreversible del tipo:



Por considerarse una reacción elemental, el orden de reacción coincide con el coeficiente estequiométrico y, consecuentemente, se asume que dicha transformación tiene una rapidez de reacción ( $r$ ) que es de primer orden con respecto del reactivo A:

$$r = kC_A$$

Donde  $k$  es el coeficiente de rapidez de reacción, y  $C_A$  es la concentración molar del reactivo.

## CAPÍTULO II

### REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, MODELO: DAVIDSON-HARRISON CON *FASE-EMULSIÓN* MODELADA COMO PFR

#### 2.1 Reacción química

Antes de presentar el tipo de modelo de Davidson-Harrison que asume que la *fase-emulsión* se comporta como un reactor de flujo tapón (al que se denominará de aquí en adelante como D-H/PFR), es oportuno recordar una suposición que se hace comúnmente para simplificar el modelado matemático del comportamiento de reactores de lecho fluidizado y que consiste en asumir que las transformaciones químicas de interés son reacciones irreversibles elementales. En este trabajo se asumió que la reacción química de interés es una reacción elemental, monoatómica e irreversible, la cual se desarrolla con una rapidez de reacción de primer orden:



El valor del coeficiente cinético,  $k$ , a las condiciones presentadas es:

$$k = 0.809318 \text{ s}^{-1} \quad \text{a } T = 385 \text{ K}$$

Esta ecuación de rapidez de reacción fue incorporada al balance de masa; en la selección de las variables que representan a la composición de la corriente de salida del RLF, se consideró la conversión del reactivo A ( $X_A$ ) como la variable dependiente principal.

## 2.2 Reactor

Con respecto a las características del reactor, éste se asumió como un tubo cilíndrico que contiene partículas sólidas de catalizador (relativamente pequeñas y porosas en cuya superficie está depositado el agente catalítico), donde se lleva a cabo la transformación del reactivo A. El reactor está colocado en posición vertical. El reactivo está diluido en la corriente gaseosa que se alimenta por la parte inferior del reactor, y la fuerza con la que se alimenta la corriente gaseosa es suficiente para mantener la condición de lecho fluidizado. En la Tabla 2.1 se indican la nomenclatura y el valor de parámetros importantes tanto del catalizador como del reactor.

Tabla 2.1 Nomenclatura y valor de parámetros importantes tanto del catalizador como de las condiciones de operación del reactor.

Variable	Letra	Valor	Unidades
Velocidad superficial del gas en el lecho.	$u_0$	0.3	m/s
Velocidad mínima de fluidización.	$u_{mf}$	0.03	m/s
Fracción de huecos de fluidización incipiente.	$\epsilon_{mf}$	0.5	[adim]
Diámetro de burbuja.	$d_b$	0.32	m
Aceleración de la gravedad.	$g$	9.8	$m/s^2$
Difusividad.	$D$	$20 \times 10^{-6}$	$m^2/s$
Densidad del sólido.	$\rho_s$	2000	$kg/m^3$
Masa de catalizador.	$W$	7000	kg
Diámetro del reactor.	$d_R$	2	m
Concentración inicial de la especie A.	$C_{A0}$	100	$mol/m^3$

\*Datos tomados de: "Ingeniería de las reacciones químicas, Octave Levenspiel, Tercera Edición".

### 2.3 Casos de estudio con el modelo D-H/PFR

El comportamiento del reactor de lecho fluidizado mediante el modelo D-H/PFR, se analizó teniendo como variable dependiente a la conversión del reactivo A ( $X_A$ ) para diferentes condiciones de operación del reactor. Concretamente, se varió sistemáticamente cada uno de los siguientes factores:  $X_1$ ) diámetro de burbuja ( $d_b$ , variable independiente),  $X_2$ ) diámetro del reactor ( $d_R$ , variable independiente), y  $X_3$ ) velocidad superficial del gas en el lecho ( $u_0$ , variable independiente).

### 2.4 Modelo Davidson-Harrison con la *fase-emulsión* comportándose como PFR, D-H/PFR

A continuación, se presentan las ecuaciones que constituyen el modelo D-H/PFR. Es importante señalar en primer término que se ha considerado que el reactor opera en condiciones isotérmicas y en estado estacionario, por lo cual, no se considera en el modelo el balance de energía, y en los balances de masa (en la *fase-burbuja*, en la *fase-emulsión*) no se considera la dependencia de la composición con respecto del tiempo. Es conveniente indicar que al suponer la operación isotérmica del reactor, implícitamente se asume que la energía implicada en la transformación química es balanceada con la energía que el sistema intercambia con los alrededores, de manera tal que la temperatura de la mezcla reaccionante se mantiene constante.

#### 2.4.1 Balance de masa en la *fase-burbuja*

Para explicar la construcción del balance de masa en la *fase-burbuja*, considere una burbuja como las que se muestran en la Figura 1.2, representando a la composición del sistema en términos de la concentración molar del reactivo de interés, y considerando que el material que contiene cada burbuja está perfectamente agitado, se puede asumir que la concentración molar del reactivo de interés en toda la burbuja,  $C_{Ab}$ , es constante, se tiene que el balance de masa en la *fase-burbuja* puede expresarse como se muestra en la Ecuación (16):

$$(q + k_g S)(C_{Ae} - C_{Ab}) = u_b V \frac{dC_{Ab}}{dz} \quad (16)$$

De acuerdo con esta ecuación, en cada burbuja existe un balance entre el transporte de masa que ocurre entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión* (lado izquierdo) y la rapidez de cambio que sufre la composición de la *fase-burbuja* con respecto a su posición en el lecho fluidizado (lado derecho). Además,  $q$  es el flujo volumétrico de gas que atraviesa la superficie de la burbuja en dirección normal a ella;  $k_g$  es el coeficiente de transferencia de masa entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*;  $C_{Ae}$  y  $C_{Ab}$  representan a la concentración del reactivo de interés en la *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$ ) y en la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$ ) y son función de la posición que tiene la burbuja en el eje axial  $z$ ;  $u_b$  es la velocidad de ascenso de las burbujas;  $V$  es el volumen de la burbuja.

#### 2.4.2 Balance de masa en la *fase-emulsión*

En la Figura 1.2, la zona marcada con pequeños puntos corresponde a la *fase-emulsión*, y sus dimensiones corresponden a las del lecho fluidizado (diámetro de reactor  $d_R$  y altura  $H$ ); como ya se explicó, es un material heterogéneo compuesto de las partículas de catalizador y del gas que mantiene el lecho en condiciones de fluidización; ahí el transporte de masa es por convección en la dirección axial; los constituyentes de la *fase-emulsión* se mueven con una velocidad constante, y en las partículas de catalizador es la única zona del RLF en donde se lleva a cabo la transformación química, por lo que, la concentración del reactivo de interés cambia en la dirección axial.

Básicamente, al aplicar el modelo de PFR para describir la transformación química en la *fase-emulsión* se están asumiendo las siguientes restricciones: i) los componentes de la *fase-emulsión* se mueven en la dirección axial con una velocidad constante, ii) el transporte de masa es por convección, y iii) solamente haya gradiente de concentración de especies en la dirección axial, es decir, que la *fase-emulsión* tiene un perfil de concentración de especies plano en la dirección radial. Consecuentemente, el balance de masa en la *fase-emulsión* es el siguiente:

$$u_{mf} \frac{dC_{Ae}}{dz} + (u_0 - u_{mf}) \frac{dC_{Ab}}{dz} + kC_{Ae}(1 - N_bV) = 0 \quad (17)$$

Enseguida se explica el significado de cada uno de los tres términos que constituyen el balance de masa en la *fase-emulsión* -Ecuación (17)- y la nomenclatura correspondiente. El primer término representa al transporte por convección de  $A$  en las partículas de sólido, ahí  $u_{mf}$  es la velocidad de fluidización mínima, y  $C_{Ae}$  es la concentración molar de  $A$  en el sólido. El segundo término representa el transporte por convección de  $A$  en el gas, ahí  $u_0$  es la velocidad con la que se alimenta el gas (en el fondo del reactor), y  $C_{Ab}$  es la concentración molar de  $A$  en el gas (burbuja). El tercer término corresponde a la rapidez con la cual ocurre la transformación química,  $k$  es el coeficiente cinético de rapidez de reacción, y el término  $(1-N_bV)$  representa la parte del catalizador que está en contacto directo con el gas, que es en donde ocurre la reacción química.

El comportamiento del RLF de acuerdo con el modelo D-H/PFR se puede predecir resolviendo las ecuaciones diferenciales (16) y (17) (con las condiciones límite propias del caso) y los parámetros que determinan el comportamiento mecánico del lecho fluidizado (Tabla 2.1).

En el Capítulo I se explicó que el análisis de RLF se hizo teniendo como variable dependiente a la conversión del reactivo  $A$ ,  $X_A$ , la cual fue definida como:

Conversión en la *fase-burbuja*

$$X_{Ab} = \frac{C_{A0} - C_{Ab}}{C_{A0}} \quad (28)$$

Conversión en la *fase-emulsión*

$$X_{Ae} = \frac{C_{A0} - C_{Ae}}{C_{A0}} \quad (29)$$

Conversión del lecho en su conjunto

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \quad (30)$$

Donde  $X_{Ae}$  es la conversión del reactivo en la *fase-emulsión*,  $X_{Ab}$  es la conversión del reactivo en la *fase-burbuja*, y  $X_A$  es la conversión *total* del reactivo de interés  $A$ ;  $C_{A0}$  es la concentración de  $A$  en la corriente de gas que se alimenta al lecho fluidizado; y  $C_A$  es la concentración molar *total* de  $A$  en la corriente de gas que sale del lecho fluidizado.

Para determinar el efecto que pueden tener las condiciones de operación (alguna de ellas en particular se considera como variable independiente) sobre  $X_A$ , es necesario obtener  $C_A$ , y eso se consigue resolviendo el modelo D-H/PFR para las condiciones de operación del RLF que sean de interés. En este sentido, en el párrafo siguiente se presenta una manera de expresar en forma más sencilla las Ecuaciones (16) y (17).

### 2.4.3 Deducción del modelo

En relación con el balance de masa de la *fase-burbuja* -Ecuación (16)- se define un coeficiente de transporte de masa global,  $Q$ , de la siguiente manera:

$$Q = q + k_g S \quad (15)$$

Por lo tanto, la Ecuación (16) puede escribirse como:

$$\frac{Q}{u_b V} (C_e - C_b) = \frac{dC_b}{dz}$$

Definiendo el siguiente grupo adimensional:

$$X = \frac{QH}{u_b V} \quad (15)$$

$$\frac{Q}{u_b V} = \frac{X}{H}$$

El balance de masa de la *fase-burbuja*, aplicando los parámetros adimensionales de Davidson-Harrison a la Ecuación (16), es el siguiente:

$$\frac{dC_b}{dz} + \frac{X}{H} (C_b - C_e) = 0 \quad (22)$$

En cuanto al balance de masa de la *fase-emulsión* -Ecuación (17)- se reacomoda como se indica enseguida. Primeramente, se divide cada uno de los términos de la Ecuación (2) entre la velocidad superficial del gas  $u_0$ :

$$\frac{u_{mf}}{u_0} \frac{dC_{Ae}}{dz} + \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_0} \right) \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{k}{u_0} C_{Ae} (1 - N_b V) = 0$$

Revisando el parámetro adimensional  $\beta$  definido por:

$$\beta = 1 - \frac{u_{mf}}{u_0}$$

$$\frac{u_{mf}}{u_0} = 1 - \beta$$

Aplicando  $\beta$  a la Ecuación (17) se obtiene:

$$(1 - \beta) \frac{dC_{Ae}}{dz} + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{k}{u_0} (1 - N_b V) C_{Ae} = 0$$

El producto  $N_b V$  representa la fracción de burbujas que tiene la *fase-emulsión* (el lecho fluidizado), y se relaciona con la expansión que alcanza el lecho cuando llega a la condición de lecho fluidizado de la siguiente manera:

$$N_b V = \frac{H - H_0}{H} \quad (10)$$

Lo cual implica que:

$$\frac{H_0}{H} = 1 - N_b V$$

Aplicando a la Ecuación (17) se obtiene:

$$(1 - \beta) \frac{dC_{Ae}}{dz} + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{k}{u_0} \frac{H_0}{H} C_{Ae} = 0$$

Ahora, se sustituye la siguiente agrupación a la ecuación anterior:

$$\kappa' = \frac{kH_0}{u_0}$$

Aplicando los parámetros adimensionales de D-H en el balance de masa en la *fase-emulsión* -Ecuación (17)-, la ecuación puede reescribirse de la siguiente forma:

$$(1 - \beta) \frac{dC_{Ae}}{dz} + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{\kappa'}{H} C_{Ae} = 0 \quad (23)$$

#### 2.4.4 Condiciones de frontera

Para completar el modelo D-H/PFR constituido hasta ahora por los balances de masa en la *fase-burbuja* y en la *fase-emulsión*, -Ecuaciones (22) y (23)-, respectivamente, es necesario establecer las condiciones límites propias del RLF, las cuales deben estar en términos de valores conocidos de las variables de dichas ecuaciones, como se explica enseguida.

En el fondo del lecho fluidizado ( $z = 0$ ), la concentración del reactivo A en la *fase-burbuja* es igual a la concentración de A de la corriente que se alimenta al reactor:

$$C_{Ab} = C_{A0} \quad \text{en } z = 0 \quad (25)$$

En el fondo del lecho fluidizado ( $z = 0$ ), la concentración del reactivo A en la *fase-emulsión* es también es igual a la concentración de A de la corriente que se alimenta al reactor:

$$C_{Ae} = C_{A0} = C_{Ab} \quad \text{en } z = 0$$

Lo cual implica que:

$$C_{Ae} - C_{Ab} = 0 \quad \text{en } z = 0$$

Aplicando esta condición a la Ecuación (22), se tiene la segunda condición límite:

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{X}{H} \left( \frac{C_{Ab} - C_{Ae}}{0} \right) = 0$$

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (26)$$

El modelo matemático de un reactor de lecho fluidizado (RLF) según el modelo de Davidson-Harrison (D-H), que considera que la *fase-emulsión* se comporta como un reactor de flujo tapón (PFR), denominado en este trabajo como D-H/PFR, resuelto numéricamente (*solución numérica*), está constituido por el siguiente el conjunto de ecuaciones:

Balance de materia en la *fase-burbuja*:

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{X}{H} (C_{Ab} - C_{Ae}) = 0 \quad (22)$$

Balance de materia en la *fase-emulsión*:

$$(1 - \beta) \frac{dC_{Ae}}{dz} + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{\kappa'}{H} C_{Ae} = 0 \quad (23)$$

Condiciones de frontera del sistema:

$$C_{Ab} = C_0 \quad \text{en } z = 0 \quad (25)$$

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (26)$$

Es conveniente señalar que en este trabajó se aprovechó la oportunidad que se tiene para resolver este sistema de ecuaciones diferenciales tanto analítica como numéricamente. La solución numérica se obtuvo utilizando como herramienta de cómputo al software *Mathematica*®.

#### 2.4.5 Solución Analítica

Utilizar una ecuación de rapidez de reacción de primer orden e irreversible permite construir una ecuación relativamente sencilla del balance de masa de la *fase-emulsión* - Ecuación (23)-, que es la única zona del RLF en donde se supone ocurre la transformación química. Para resolver analíticamente las ecuaciones diferenciales (22) y (23), las cuales describen, respectivamente, a los balances de masa en la *fase-burbuja* y en la *fase-emulsión*, que están acotadas por las condiciones frontera que muestran las Ecuaciones (25) y (26), se utilizó un método que consiste en combinar las Ecuaciones (22) y (23), que están expresadas en términos de dos variables dependientes ( $C_{Ab}$  y  $C_{Ae}$ ) y una variable independiente ( $z$ ).

De manera tal que se obtiene una sola ecuación que está en términos de una variable dependiente ( $C_{Ab}$ ) y la variable independiente  $z$ , al resolver esta ecuación se obtiene el perfil  $C_{Ab}(z)$ , y con esta información se obtiene el correspondiente perfil  $C_{Ae}(z)$ , como se explica en los párrafos siguientes.

Se puede empezar expresando la variable  $C_{Ae}$  en términos de las otras dos variables  $C_{Ab}$  y  $z$ , despejándola de la Ecuación (22) y sustituyéndola en la Ecuación (23):

$$C_{Ae} = \frac{H}{X} \frac{dC_{Ab}}{dz} + C_{Ab}$$

$$(1 - \beta) \frac{d}{dz} \left[ \frac{H}{X} \frac{dC_{Ab}}{dz} + C_{Ab} \right] + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{\kappa'}{H} \left[ \frac{H}{X} \frac{dC_{Ab}}{dz} + C_{Ab} \right] = 0$$

$$(1 - \beta) \frac{H}{X} \frac{d^2 C_{Ab}}{dz^2} + (1 - \beta) \frac{dC_{Ab}}{dz} + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{k'}{X} \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{\kappa'}{H} C_{Ab} = 0$$

Multiplicando la ecuación anterior por  $[XH]$ , y factorizando se tiene:

$$(1 - \beta) H^2 \frac{d^2 C_{Ab}}{dz^2} + XH(1 - \beta) \frac{dC_{Ab}}{dz} + XH\beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + Hk' \frac{dC_{Ab}}{dz} + X\kappa' C_{Ab} = 0$$

$$H^2(1 - \beta) \frac{d^2 C_{Ab}}{dz^2} + XH \frac{dC_{Ab}}{dz} - XH\beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + XH\beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + Hk' \frac{dC_{Ab}}{dz} + X\kappa' C_{Ab} = 0$$

$$H^2(1 - \beta) \frac{d^2 C_{Ab}}{dz^2} + H(X + k') \frac{dC_{Ab}}{dz} + X\kappa' C_{Ab} = 0 \quad (31)$$

Esta es una ecuación diferencial de segundo orden en términos de  $C_{Ab}$  y  $z$ , cuya solución proporciona el perfil  $C_{Ab}(z)$ . Para obtener el perfil  $C_{Ae}(z)$  se combina el perfil  $C_{Ab}(z)$  previamente obtenido con la Ecuación (31), para así tener la ecuación diferencial que describe  $C_{Ae}$  en función de  $z$  únicamente.

La Ecuación (31) es una ecuación diferencial de segundo orden de  $C_{Ab}$  en  $z$ , y tiene una solución que es de la forma [referencia, Aris o Kaplan]:

$$C_{Ab} = C_1 e^{-m_1 z} + C_2 e^{-m_2 z} \quad (32)$$

Donde  $C_1$  y  $C_2$  son constantes que serán expresadas en términos de las condiciones de frontera del RLF;  $m_1$  y  $m_2$  también son constantes y se obtienen considerando que son las raíces cuadráticas de la Ecuación (31), como se explica enseguida.

Aplicando a la Ecuación (32) la condición a la frontera indicada por la Ecuación (25) se tiene:

$$C_{Ab} = C_{A0} \text{ en } z = 0 \quad (25)$$

$$C_{A0} = C_1 e^{-m_1(0)} + C_2 e^{-m_2(0)}$$

Por lo tanto las constantes  $C_1$  y  $C_2$  están relacionadas de la siguiente manera:

$$C_{A0} = C_1 + C_2 \quad (33)$$

Ahora, aplicando a la Ecuación (32) la condición a la frontera indicada por la Ecuación (26) se tiene:

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} = 0 \text{ a } z = 0 \quad (26)$$

$$0 = -m_1 C_1 e^{-m_1(0)} + [-m_2 C_2 e^{-m_2(0)}]$$

Con lo cual se obtiene otra relación entre las constantes  $C_1$  y  $C_2$ :

$$0 = -m_1 C_1 - m_2 C_2 \quad (34)$$

Las Ecuaciones (33) y (34) constituyen un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas ( $C_1$  y  $C_2$ ), por lo tanto, al resolver dicho sistema se obtienen las expresiones  $C_1$  y  $C_2$  en términos de  $C_{A0}$  (que es un valor conocido) y de  $m_1$  y  $m_2$ , que son las raíces cuadráticas de la ecuación diferencial de segundo orden -Ecuación (31)-, cuyos valores se obtienen como se explica en seguida.

Combinando las Ecuaciones (33) y (34) se tiene:

$$C_1 = -\frac{m_2 C_{A0}}{(m_1 - m_2)} \quad (35)$$

$$C_2 = C_{A0} + \frac{m_2 C_{A0}}{(m_1 - m_2)} = \frac{m_1 C_{A0}}{(m_1 - m_2)} \quad (36)$$

Para obtener los valores de  $m_1$  y  $m_2$ , se reconoce la forma cuadrática de la Ecuación (31), a la cual se aplica una factorización (dividiendo entre H) y agrupan los parámetros que la constituyen como se indica enseguida:

$$H^2(1 - \beta) \frac{d^2 C_{Ab}}{dz^2} + H(X + k') \frac{dC_{Ab}}{dz} + X\kappa' C_{Ab} = 0$$

$$H(1 - \beta) \frac{d^2 C_{Ab}}{dz^2} + (X + k') \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{X}{H} \kappa' C_{Ab} = 0 \quad (37)$$

$$\underbrace{H(1 - \beta)}_a \frac{d^2 C_{Ab}}{dz^2} + \underbrace{(X + k')}_b \frac{dC_{Ab}}{dz} + \underbrace{\frac{X}{H} \kappa'}_c C_{Ab} = 0$$

$$am^2 + bm + c = 0$$

Resolviendo esta ecuación cuadrática, y sustituyendo los términos  $a$ ,  $b$  y  $c$  por los parámetros de la Ecuación (37), se obtienen las expresiones de  $m_1$  y  $m_2$  en términos conocidos:

$$m_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{-(X + k') + \sqrt{(X + k')^2 - 4H(1 - \beta) \frac{X}{H} \kappa'}}{2H(1 - \beta)}$$

$$m_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{-(X + k') - \sqrt{(X + k')^2 - 4H(1 - \beta) \frac{X}{H} \kappa'}}{2H(1 - \beta)}$$

$$m_1 = \frac{-(X + k') + \sqrt{(X + k')^2 - 4(1 - \beta)X\kappa'}}{2H(1 - \beta)} \quad (38)$$

$$m_2 = \frac{-(X + k') - \sqrt{(X + k')^2 - 4(1 - \beta)X\kappa'}}{2H(1 - \beta)} \quad (39)$$

Una vez que se han expresado  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $m_1$  y  $m_2$  en términos conocidos, se puede obtener el perfil  $C_{Ab}(z)$ , sustituyendo las Ecuaciones (35), (36), (38) y (39) en la Ecuación (32):

$$C_{Ab} = -\frac{m_2 C_0}{(m_1 - m_2)} e^{-\left(\frac{(X+k') + \sqrt{(X+k')^2 - 4(1-\beta)X\kappa'}}{2H(1-\beta)}\right)z} + \frac{m_1 C_0}{(m_1 - m_2)} e^{-\left(\frac{(X+k') - \sqrt{(X+k')^2 - 4(1-\beta)X\kappa'}}{2H(1-\beta)}\right)z} \quad (40)$$

Como antes se explicó, una vez que se tiene la función  $C_{Ab}(z)$ , se procede a obtener el perfil  $C_{Ae}(z)$ , y para ello se combinan  $C_{Ab}(z)$  de la Ecuación (40) con la Ecuación (22), obteniéndose una ecuación diferencial que describe  $C_{Ae}$  en función de  $z$  únicamente, cuya solución permite obtener el perfil  $C_{Ae}(z)$ :

$$C_{Ae} = \frac{H}{X} \frac{dC_{Ab}}{dz} + C_{Ab}$$

$$C_{Ae} = \frac{H}{X} \frac{d}{dz} [C_1 e^{-m_1 z} + C_2 e^{-m_2 z}] + C_1 e^{-m_1 z} + C_2 e^{-m_2 z}$$

Desarrollando la derivada y factorizando se obtiene la función  $C_{Ae}(z)$  en términos de parámetros conocidos -Ecuación (41)-:

$$C_{Ae} = \frac{H}{X} [-m_1 C_1 e^{-m_1 z} - m_2 C_2 e^{-m_2 z}] + C_1 e^{-m_1 z} + C_2 e^{-m_2 z}$$

$$C_{Ae} = -\frac{H}{X} m_1 C_1 e^{-m_1 z} - \frac{H}{X} m_2 C_2 e^{-m_2 z} + C_1 e^{-m_1 z} + C_2 e^{-m_2 z}$$

$$C_{Ae} = C_1 e^{-m_1 z} \left(1 - \frac{H}{X} m_1\right) + C_2 e^{-m_2 z} \left(1 - \frac{H}{X} m_2\right) \quad (41)$$

Una vez que se han expresado  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $m_1$  y  $m_2$  en términos conocidos, se puede obtener el perfil de la fase-emulsión  $C_{Ae}(z)$ , sustituyendo las Ecuaciones (35), (36), (38) y (39), en la Ecuación (41):

$$C_{Ae} = -\frac{m_2 C_0}{(m_1 - m_2)} e^{-\left(\frac{(X+k') + \sqrt{(X+k')^2 - 4(1-\beta)X\kappa}}{2H(1-\beta)}\right)^z} \left[1 - \frac{H}{X} m_1\right] + \frac{m_1 C_0}{(m_1 - m_2)} e^{-\left(\frac{(X+k') - \sqrt{(X+k')^2 - 4(1-\beta)X\kappa}}{2H(1-\beta)}\right)^z} \left[1 - \frac{H}{X} m_2\right] \quad (42)$$

En resumen, el modelo matemático de un reactor de lecho fluidizado (RLF) según el modelo de Davidson-Harrison (D-H) que considera que la *fase-emulsión* se comporta como un reactor de flujo tapón (PFR), denominado en este trabajo como D-H/PFR, y que fue resuelto analíticamente (*solución analítica*), está constituido por el siguiente el conjunto de ecuaciones:

Balace de materia en la *fase-burbuja*:

$$C_{Ab} = -\frac{m_2 C_0}{(m_1 - m_2)} e^{-\left(\frac{(X+k') + \sqrt{(X+k')^2 - 4(1-\beta)X\kappa}}{2H(1-\beta)}\right)^z} + \frac{m_1 C_0}{(m_1 - m_2)} e^{-\left(\frac{(X+k') - \sqrt{(X+k')^2 - 4(1-\beta)X\kappa}}{2H(1-\beta)}\right)^z} \quad (40)$$

Balace de materia en la *fase-emulsión*:

$$C_{Ae} = -\frac{m_2 C_0}{(m_1 - m_2)} e^{-\left(\frac{(X+k') + \sqrt{(X+k')^2 - 4(1-\beta)X\kappa}}{2H(1-\beta)}\right)^z} \left[1 - \frac{H}{X} m_1\right] + \frac{m_1 C_0}{(m_1 - m_2)} e^{-\left(\frac{(X+k') - \sqrt{(X+k')^2 - 4(1-\beta)X\kappa}}{2H(1-\beta)}\right)^z} \left[1 - \frac{H}{X} m_2\right] \quad (42)$$

Condiciones de frontera del sistema:

$$C_{Ab} = C_0 \quad \text{en } z = 0 \quad (25)$$

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (26)$$

### 2.4.6 Concentración del reactivo

Para obtener la concentración *total* del reactivo limitante (A) a la salida del lecho fluidizado ( $z = H$ ), se utiliza la Ecuación (27), que es una combinación del valor de las funciones  $C_{Ab}(z)$  y  $C_{Ae}(z)$  evaluadas en dicho plano,  $C_{Ab}(H)$  y  $C_{Ae}(H)$ , respectivamente:

Cuando  $z=H$

$$u_0 C_A = (u_0 - u_{mf}) C_{Ab} + u_{mf} C_{Ae} \quad (27)$$

Cuando ( $0 \leq z \leq H$ )

$$u_0 C_A(z) = (u_0 - u_{mf}) C_{Ab}(z) + u_{mf} C_{Ae}(z)$$

La concentración *total* del reactivo de interés se puede expresar en términos de los parámetros adimensionales definidos por Davidson-Harrison, definiendo  $\beta$  como la fracción de flujo que atraviesa el lecho como gas, y sustituyendo en la ecuación resultante de dividir la Ecuación (27) entre la velocidad superficial del gas en el lecho  $u_0$ .

$$C_A = \left(1 - \frac{u_{mf}}{u_0}\right) C_{Ab} + \frac{u_{mf}}{u_0} C_{Ae}$$

$$\beta = (u_0 - u_{mf})/u_0 \quad (20)$$

$$C_A = \beta C_{Ab} + (1 - \beta) C_{Ae} \quad (43)$$

La Ecuación (43) permite conocer la concentración *total* del reactivo de interés en la corriente de salida del lecho fluidizado o en cualquier punto del lecho, según donde se evalúe  $z$ , ( $0 \leq z \leq H$ ).

Aplicando la *solución analítica y numérica* del modelo del D-H/PFR antes descrito, se predijo el comportamiento de dicho RLF para una serie de condiciones de operación del reactor. El análisis de los resultados obtenidos se presentan en el siguiente apartado.

## 2.5 Resultados del modelo D-H/PFR

En este apartado se presentan y analizan los resultados de modelar el comportamiento de un reactor de lecho fluidizado, en función de varias condiciones de operación. En principio se analiza un caso que será identificado de aquí en adelante como *Caso Base PFR*, el cual corresponde a una sola condición de operación del reactor, lo que significa que se definió el valor de todos y cada uno de los parámetros que determinan la conversión *total* del reactivo A ( $X_A$ ) a la salida del reactor. Los resultados obtenidos del Caso Base se tomaron como referencia para analizar el comportamiento del *RLF* para diferentes condiciones de operación del reactor, las cuales fueron definidas fijando como variable independiente a uno de los factores que se enlistan enseguida, mientras que se mantuvieron constantes los demás parámetros que se utilizaron en el *Caso Base PFR*, dejando como variable dependiente la conversión del reactivo de interés,  $X_A$ , para así poder analizar el efecto que tiene sobre éste.

*Caso 1:* Diámetro de burbuja ( $d_b$ );

*Caso 2:* Diámetro del reactor ( $d_R$ );

*Caso 3:* Velocidad superficial del gas en el lecho ( $u_0$ ).

### 2.5.1 Caso Base PFR

El primer caso que se presenta consiste en obtener la concentración *total* de reactivo de interés ( $C_A$ ) a la salida del reactor de lecho fluidizado, cuando éste opera en las condiciones que se indican en la Tabla 2.1. La reacción química que se consideró conveniente utilizar para analizar el comportamiento del reactor de lecho fluidizado es una reacción catalítica, irreversible, cuya rapidez de reacción es de primer orden y que tiene un coeficiente de rapidez de reacción,  $k$ , que es una función tipo Arrhenius:



$$r_A = kC_A \quad (1)$$

$$k = k_0 \exp(-E/RT) \quad (2)$$

El análisis del RLF bajo el modelo D-H/PFR se desarrolló resolviendo numéricamente en *Mathematica*® (Apéndice) las ecuaciones diferenciales, con sus propias condiciones de frontera del balance de materia de la *fase-burbuja* Ecuación (22) y del balance de materia de la *fase-emulsión*, Ecuación (23).

Balance de materia en la *fase-burbuja*:

$$\frac{dC_b}{dz} + \frac{X}{H}(C_b - C_e) = 0$$

Balance de materia en la *fase-emulsión*:

$$(1 - \beta) \frac{dC_E}{dz} + \beta \frac{dC_b}{dz} + \frac{\kappa'}{H} C_e = 0$$

El modelado con D-H/PFR, donde se asumen gradientes de concentración en la dirección axial de la *fase-emulsión*, permitirá conocer las concentraciones molares, y con ello las conversiones del reactivo de interés en ambas fases, y consecuentemente del lecho en su conjunto presentes en la corriente de salida del lecho; también, será posible observar el perfil de la conversión en cada una de estas fases a lo largo del lecho fluidizado.

### Condiciones a la salida del lecho fluidizado

En la Tabla 2.2 se muestra la nomenclatura (1ª columna) y valor de los parámetros que se utilizaron en el modelo D-H/PFR (renglones 1 a 14) para calcular la composición de la corriente de salida en términos de la concentración del reactivo *A* en la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}$ , y la *total*,  $C_A$  (renglones 15, 16 y 17, respectivamente), con su respectiva conversión  $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$  (renglones 18, 19 y 20), habiendo resuelto numéricamente (4ª columna) y analíticamente (5ª columna) el modelo D-H/PFR; la  $C_A$  fue calculada considerando la concentración de *A* en las dos fases, de acuerdo con la Ecuación (43).

El valor de todos los parámetros que definen el modelo D-H/PFR resueltos de la solución numérica son los mismos de la solución analítica, al igual que las concentraciones y conversiones de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*. En la corriente de salida del lecho fluidizado, se tiene una concentración molar del reactivo en la *fase-emulsión* de  $C_{Ae} = 5.65 \text{ mol/m}^3$ , equivalente a una conversión porcentual de  $X_{Ae} = 94.35 \%$ . En la *fase-burbuja* se tiene una concentración molar del reactivo de  $C_{Ab} = 39.87 \text{ mol/m}^3$ , cuya conversión porcentual es de  $X_{Ab} = 60.12 \%$  y, finalmente, la contribución de ambas fases (el lecho en su conjunto) logra una concentración molar del reactivo de  $C_A = 36.45 \text{ mol/m}^3$ , equivalente a una conversión porcentual de  $X_A = 63.54 \%$ .

Tabla 2.2 Nomenclatura y valor de los parámetros que se utilizaron para determinar la composición de la corriente de salida del Caso Base.

#	Parámetro	Letra	Solución numérica	Solución analítica	$\Delta$ Resultados	Unidades
1	Velocidad de ascenso de una sola burbuja.	$u_{br}$	1.259	1.259	0.000	m/s
2	Velocidad absoluta de ascenso de las burbujas en un lecho.	$u_b$	1.529	1.529	0.000	m/s
3	Fracción de burbujas en el lecho.	$\delta$	0.176	0.176	0.000	[adim]
4	Coefficiente de transporte de emulsión-burbuja.	Q	0.010	0.010	0.000	m <sup>3</sup> /s
5	Flujo de la burbuja.	q	0.007	0.007	0.000	m <sup>3</sup> /s
6	Coefficiente de transporte burbuja-emulsión.	$k_g$	0.010	0.010	0.000	m/s
7	Área de interfase de transferencia de burbuja.	S	0.321	0.321	0.000	m <sup>2</sup>
8	Parámetro adimensional X.	X	1.086	1.086	0.000	[adim]
9	Parámetro adimensional $\beta$ .	$\beta$	0.9	0.9	0.0	[adim]

La Tabla 2.2 continúa en la página siguiente.

REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, MODELO: D-H/PFR

#	Parámetro	Letra	Solución numérica	Solución analítica	$\Delta$ Resultados	Unidades
10	Parámetro adimensional $k'$ .	$\kappa'$	5.941	5.941	0.000	[adim]
11	Volumen promedio de burbujas.	V	0.017	0.017	0.000	m <sup>3</sup>
12	Área transversal del reactor.	$A_c$	3.141	3.141	0.000	m <sup>2</sup>
13	Columna estática.	$H_0$	2.228	2.228	0.000	m
14	Altura del lecho a condiciones de fluidización.	H	2.705	2.705	0.000	m
15	Concentración del reactivo en la <i>fase-emulsión</i> .	$C_{Ae}$	5.65	5.65	0.00	mol/m <sup>3</sup>
16	Concentración del reactivo en la <i>fase-burbuja</i> .	$C_{Ab}$	39.87	39.87	0.00	mol/m <sup>3</sup>
17	Concentración <i>total</i> del reactivo.	$C_A$	36.45	36.45	0.00	mol/m <sup>3</sup>
18	Conversión del reactivo en la <i>fase-emulsión</i> .	$X_{Ae}$	94.34	94.34	0.00	[adim]
19	Conversión del reactivo en la <i>fase-burbuja</i> .	$X_{Ab}$	60.12	60.12	0.00	[adim]
20	Conversión <i>total</i> de reactivo.	$X_A$	63.54	63.54	0.00	[adim]

En la Figura 2.1 se muestra en (a) condiciones iniciales de operación y resultados de la modelación, como la altura inicial ( $H_0=2.223\text{ m}$ ) (condiciones de fluidización mínima), al igual que los parámetros que describen sus condiciones de operación, como diámetro de burbuja ( $d_b = 0.32\text{ m}$ ), diámetro del reactor ( $d_R = 2\text{ m}$ ), masa de catalizador ( $W = 7000\text{ Kg}$ ) y velocidad superficial del gas en el lecho ( $u_0 = 0.3\text{ m/s}$ ); en (b) se tiene la concentración y conversión del reactivo A ( $C_A$  y  $X_A$ ) a la salida del reactor, donde la concentración final de A ( $C_A$ ) es de  $36.45\text{ mol/m}^3$ , equivalente a una conversión del 63.64 % del reactivo, y altura final del lecho ( $H=2.706\text{ m}$ ) (condiciones de fluidización).

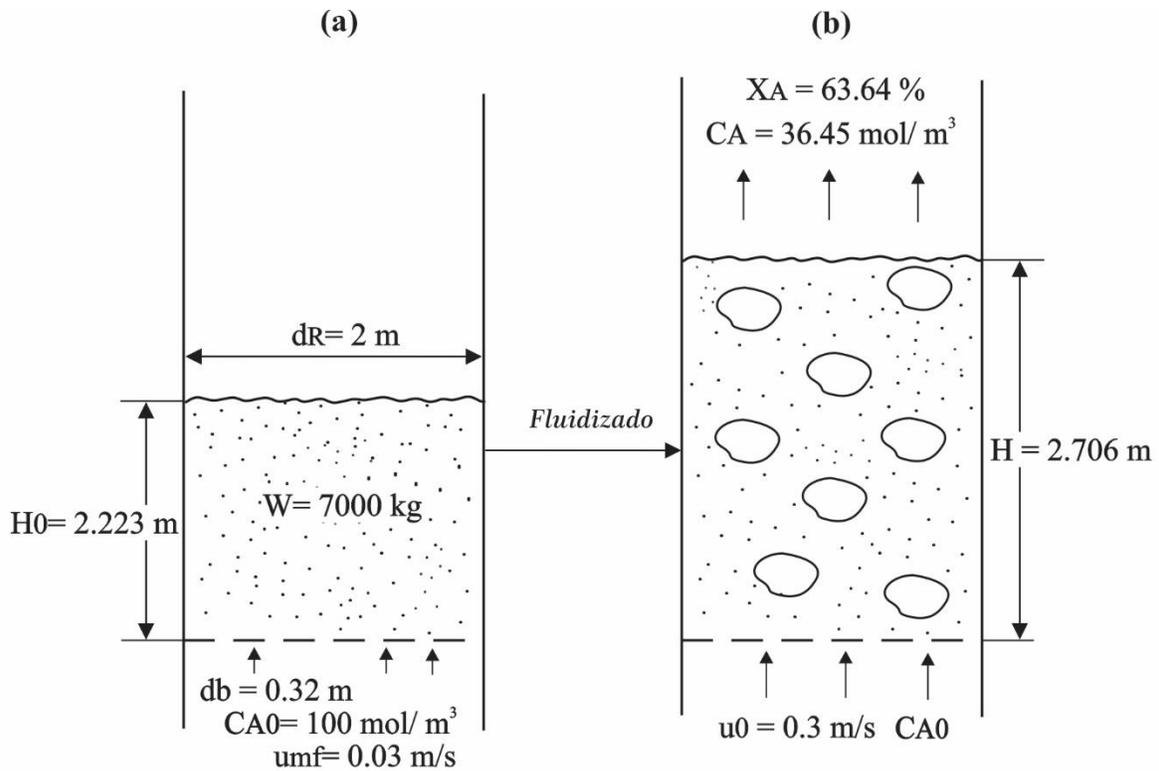


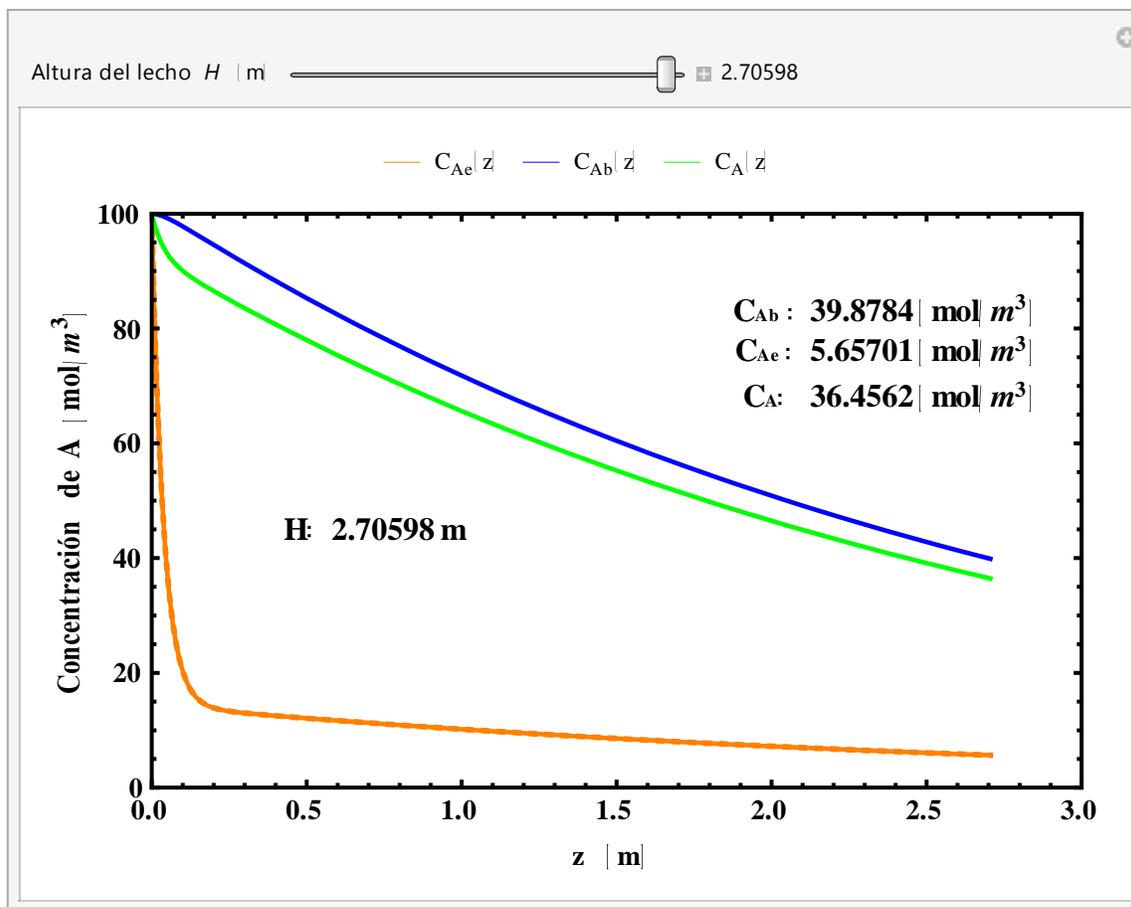
Figura 2.1 Condiciones de fluidización incipiente y fluidización normal de reactor de lecho fluidizado del Caso Base, bajo el modelo D-H/PFR.

### Composición a lo largo del lecho fluidizado

La utilización del software *Mathematica*® no solo se limita a la obtención de la concentración *total* del reactivo A ( $C_A$ ) a la salida del reactor, concentración final de la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$ ) y a la concentración final de la *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$ ), donde el sistema alcanza su altura final de fluidización  $H$  ( $z=H$ ), sino también se puede conocer el valor de la concentración de A en la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}(z)$ ), *fase-emulsión* ( $C_{Ae}(z)$ ), y *total* ( $C_A(z)$ ), a lo largo de su paso dentro del reactor ( $0 \leq z \leq H$ ). Para la presentación de estas concentraciones en el trabajo, se hace uso de gráficos, en los cuales se exponen sus perfiles de concentración o conversión.

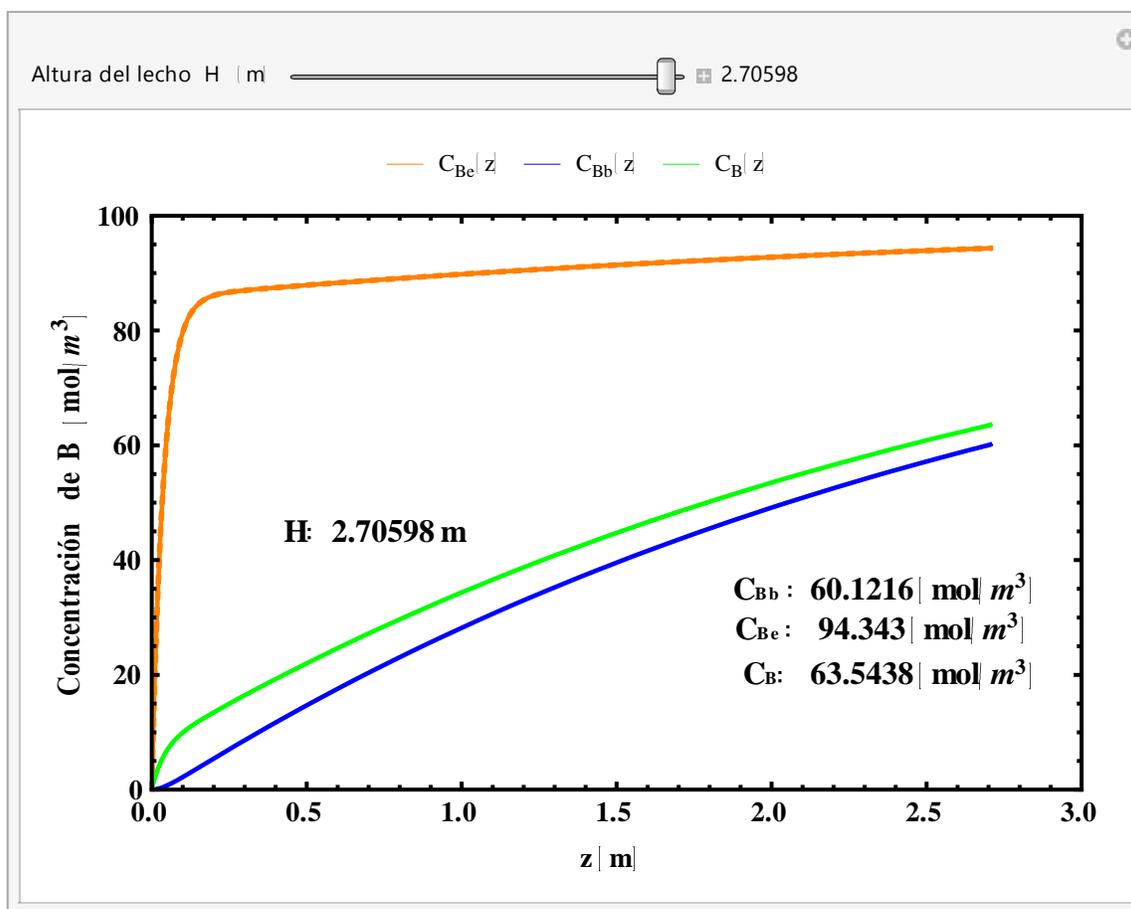
En las gráficas 2.1, 2.2 y 2.3 se presenta el cambio en la composición de las partes que constituyen el modelo D-H/PFR en función de la altura ( $z$ ) del lecho fluidizado, expresando dicha composición en términos de la concentración molar ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ) del reactivo A (Gráfica 2.1), concentración molar ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ) del producto B (Gráfica 2.2), y conversión porcentual de A (Gráfica 2.3). Es importante mencionar que la composición del RLF en su conjunto resulta de considerar la concentración molar, tanto de la *fase-burbuja* como de la *fase-emulsión*, como se propone en la Ecuación (43), y que por abreviar a la composición del RLF se le denomina de aquí en adelante como concentración o conversión *total*, según sea el caso.

En las gráficas 2.1, 2.2 y 2.3, la *fase-burbuja* se identifica con el color azul ( $C_{Ab}$ ,  $C_{Bb}$  y  $X_{Ab}$ ), la *fase-emulsión* con el anaranjado ( $C_{Ae}$ ,  $C_{Be}$  y  $X_{Ae}$ ), y la *total* (o del lecho en su conjunto) se identifica con verde ( $C_A$ ,  $C_B$  y  $X_A$ ).



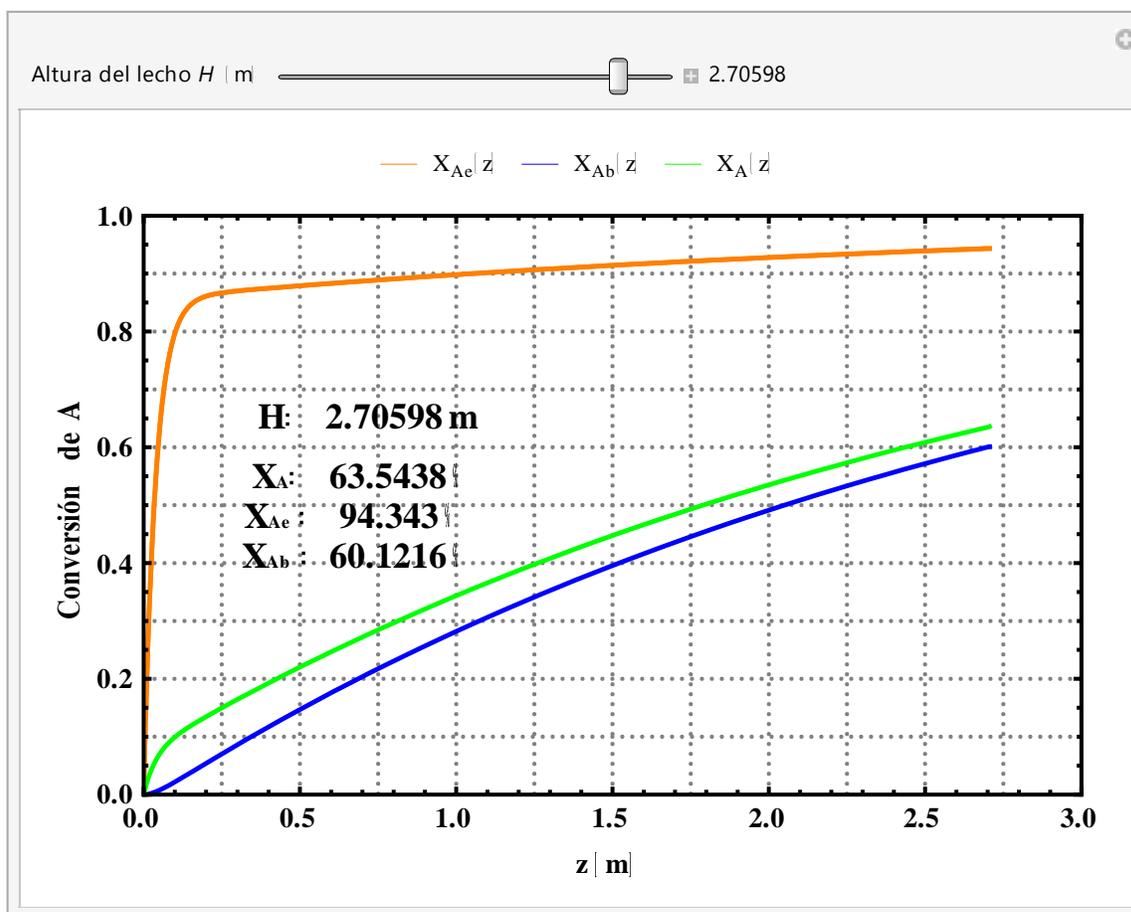
Gráfica 2.1 Perfiles de concentración de A en un RLF bajo el modelo D-H/PFR, en la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 2.1 se presentan los perfiles de concentración molar ( $\text{mol/m}^3$ ) del reactivo de interés en la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y *total* del sistema modelado como D-H/PFR. Se observa que el cambio en la rapidez de disminución de la concentración del reactivo en la *fase-emulsión*  $C_{Ae}(z)$  es demasiado drástico en los primeros 0.20 m de lecho, y mucho mayor que el perfil de la *fase-burbuja*, debido a que es en la emulsión donde se lleva a cabo la reacción química, mientras que el perfil de la rapidez de disminución de la concentración del reactivo en la *fase-burbuja*  $C_{Ab}(z)$  depende directamente de la capacidad de transferir materia entre ambas fases a lo largo del lecho, cuya expansión fue de 2.706 m. Por su parte, el perfil del lecho en su conjunto,  $C_A$ , es muy parecido al de  $C_{Ab}(z)$ , dado que la contribución de gas de la *fase-burbuja* en la corriente de salida del reactor es mucho mayor, comparado con la contribución de gas de la *fase-emulsión*.



Gráfica 2.2 Perfiles de concentración de B ( $\text{mol/m}^3$ ) en un RLF bajo el modelo DH/PFR, en la *fase-burbuja* ( $C_{Bb}$  color azul), *fase-emulsión* ( $C_{Be}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_B$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 2.2 se presentan los perfiles de concentración molar ( $\text{mol/m}^3$ ) del producto “B” en la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y *total* del sistema modelado como D-H/PFR. Nuevamente se observa una rápida aparición de producto en la *fase-emulsión*  $C_{Be}(z)$  (donde se lleva a cabo la reacción), en tan solo 0.20 m de altura del lecho. Los perfiles de la rapidez de aparición de concentración del producto en la *fase-burbuja*,  $C_{Bb}(z)$ , y del lecho en su conjunto,  $C_A(z)$ , crecen ligeramente a lo largo de su paso en el lecho, manteniendo su cercanía, lo cual resulta en una baja concentración de producto, con respecto a la obtenida en la *fase-emulsión*, cuyos valores se hacen presentes en el gráfico.



Gráfica 2.3 Perfiles de conversión porcentual de A en un RLF bajo el modelo DH/PFR, en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 2.3 se presentan los perfiles de aparición de la conversión porcentual del reactivo de interés en la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y *total* del sistema modelado como D-H/PFR. Donde resalta el rápido crecimiento de la conversión en la *fase-emulsión*  $X_{Ae}(z)$ , que va de 0 a 80 %, al principio del recorrido del reactor (cercano a 0.20 m). A partir de este punto el crecimiento es más ligero en los 2.5 m restantes de lecho, donde tan solo se tiene un crecimiento de 10 %. El perfil de la *fase-burbuja* tiene un crecimiento más “uniforme” a lo largo de su trayecto en el lecho, logrando una conversión del 60.23 % al final del lecho fluidizado. Por último, en el perfil del lecho en su conjunto (*total*), se observa que al inicio se tiene un aumento drástico, debido al rápido aumento logrado en la *fase-emulsión*, sin embargo, este efecto se atenúa conforme se avanza en el reactor, ya que la suma de ambas

fases que define al perfil *total* es controlada por la aportación de gas de la *fase-burbuja*, ya que es muy superior al gas aportado por la *fase-emulsión*.

### **Análisis y conclusión del Caso Base PFR**

Los resultados que se muestran en la Gráfica 2.1 están de acuerdo con el modelo D-H/PFR, en cuanto a que la transformación de *A* se lleva a cabo en la *fase-emulsión*, como lo demuestra el hecho de que la concentración de *A* disminuye considerablemente a lo largo del eje *z* ( $C_{Ae}$ ), particularmente en los primeros 0.20 m del lecho, zona en la que se alcanza una conversión de poco más del 80 % (Gráfica 2.3). En contraste con lo que ocurre en la *fase-emulsión*, en la *fase-burbuja* la rapidez de cambio de la concentración de *A* con respecto a *z* ( $C_{Ab}$ ) es mucho menor, debido a que en esta zona no ocurre transformación química y el cambio de composición se debe únicamente a la transferencia de *A* hacia la *fase-emulsión*.

La Ecuación (43) permite analizar que la concentración final del reactivo de interés a la salida del reactor,  $C_A$ , siempre será menor o igual a la concentración de *A* que se tenga en la *fase-burbuja*  $C_{Ab}$ , y mayor o igual a la concentración de *A* presente en la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , lo anterior debido al parámetro adimensional  $\beta$ , ya que al ser la fracción de flujo que pasa a través del lecho como gas, indica la cantidad de gas que aporta (a la salida del lecho) la *fase-emulsión* y *fase-burbuja* con sus respectivas concentraciones. El que  $C_A$  tienda acercarse a  $C_{Ab}$  o  $C_{Ae}$  depende del valor de  $\beta$ , como se explica a continuación:

$$C_A = \beta C_{Ab} + (1 - \beta) C_{Ae} \quad (43)$$

$$\text{Si } \beta \rightarrow 1 \quad C_A = \beta C_{Ab} + \underbrace{(1 - \beta)}_0 C_{Ae} \quad \therefore C_A = C_{Ab}$$

$$\text{Si } \beta \rightarrow 0 \quad C_A = \underbrace{\beta C_{Ab}}_0 + \underbrace{(1 - \beta)}_1 C_{Ae} \quad \therefore C_A = C_{Ae}$$

La concordancia de los resultados de la Tabla 2.1 obtenidos numéricamente (4<sup>a</sup> columna) y analíticamente (5<sup>a</sup> columna), indican que el uso de la herramienta de cómputo *Mathematica*® resuelve numéricamente el modelo D-H/PFR, lo cual permite esperar que se obtengan resultados confiables al igual que la solución analítica, siendo una ventaja para el análisis y estudio del comportamiento del *RLF* a diferentes condiciones de operación.

## 2.6 Modificación de Variables

Una vez resuelto y analizado el Caso Base, se analizó el modelo RLF con D-H/PFR modificando sistemáticamente el valor de algunos parámetros que definen la operación de este tipo de reactor. Para ello, fue necesario crear en *Mathematica*® una nueva función (Apéndice) que considera como variable independiente a cada uno de los parámetros modificados, y como variable dependiente a la concentración y conversión del reactivo de interés a la salida del reactor (*fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*).

De esta manera se definieron y analizaron tres casos de interés, identificándose cada uno de ellos con el nombre de la variable independiente, a saber:

Caso 1: Diámetro de burbuja ( $d_b$ );

Caso 2: Diámetro del reactor ( $d_R$ );

Caso 3: Velocidad superficial del gas en el lecho ( $u_0$ ).

### 2.6.1 Caso 1: Diámetro de burbuja

El diámetro de la burbuja es un parámetro importante en el modelado de reactores de lecho fluidizado sólido-gas, ya que impacta principalmente en el intercambio de masa gas-sólido y, consecuentemente, en la capacidad del reactor para transformar reactivo en producto deseado. En este primer caso se analizó el cambio en las condiciones de la corriente de salida (concentración y conversión del reactivo de interés) al variar el diámetro de la burbuja  $d_b$ . Los valores de  $d_b$  que se probaron fueron: 0.20 m, 0.32 m (Caso Base) y 0.44 m, como se indica en la Tabla 2.3, la cual recoge las demás condiciones de operación declaradas para el Caso Base. Todo esto con el fin de obtener y observar cómo cambia la concentración del reactivo de interés a la salida del reactor, considerando la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}$ , la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , y la *total*,  $C_A$ . Ésta última resulta de la contribución de las dos fases. Se calcula también la conversión del reactivo de interés correspondiente a cada una de dichas concentraciones:  $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$ ,  $X_A$ .

Retomando la transferencia de masa entre *fase-burbuja* y *fase-emulsión* vista en el Capítulo I, las Ecuaciones (8), (12), (13), (14) y (15) describen aspectos fundamentales de la transferencia másica entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión* en función del tamaño de la burbuja, ya que es un efecto importante en el rendimiento del sistema de lecho fluidizado.

Volumen promedio de cada una de las burbujas presentes en el lecho:

$$V = \frac{1}{6} \pi d_b^3$$

Área de interfase de transferencia de la burbuja:

$$S = \pi d_b^2$$

Flujo volumétrico de intercambio entre fases:

$$q = \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2$$

Coefficiente de transferencia de masa,  $K_g$ :

$$k_g = 0.975 \sqrt{D} \left( \frac{g}{d_b} \right)^{1/4} S$$

Coefficiente global de transferencia entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión*:

$$Q = q + k_g S$$

Por esta razón, las variaciones que se realicen en el tamaño de la burbuja son de suma importancia para las condiciones operativas del sistema. El modelado con diámetro de burbuja variable permitirá observar el efecto de esta acción sobre la capacidad del reactor para convertir reactivo en producto deseado.

Tabla 2.3 Condiciones de operación del RLF con diámetro de burbuja,  $d_b$ , variable.

Parámetro	Letra	Valor	Unidades
Velocidad superficial del gas en el lecho.	$u_0$	0.3	m/s
Velocidad mínima de fluidización.	$u_{mf}$	0.03	m/s
Fracción de huecos de fluidización incipiente.	$\epsilon_{mf}$	0.5	[adim]
Diámetro de burbuja.	$d_b$	0.20	m
		0.32	
		0.44	
Aceleración de la gravedad.	$g$	9.8	$m/s^2$
Difusividad.	$D$	$20 \times 10^{-6}$	$m^2/s$
Densidad del sólido.	$\rho_s$	2000	$kg/m^3$
Masa de catalizador.	$W$	7000	kg
Diámetro del reactor.	$d_R$	2	m
Concentración inicial de la especie A.	$C_{A0}$	100	$mol/m^3$

### Condiciones a la salida del lecho fluidizado

En la Tabla 2.4 se muestra el valor de cada uno de los parámetros que se utilizaron para resolver el modelo D-H/PFR en el Caso 1, considerando los valores de burbuja 0.20 m y 0.44 m (renglones 1 a 14), así como la concentración ( $C_{Ae}$ ,  $C_{Ab}$  y  $C_A$ ) y conversión ( $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$ ) en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*, respectivamente, que fueron calculados con este modelo (renglones 15 a 20).

La acción de disminuir el diámetro de burbuja,  $d_b$ , impacta positivamente en la conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*. A pesar de obtener valores bajos para los parámetros que describen la transferencia de masa entre ambas fases en una burbuja (renglones 4 a 7), también se reduce la velocidad de ascenso de una burbuja  $u_{br}$ , como la de todas las burbujas  $u_b$ . Ambos parámetros al combinarse con un aumento en la expansión del lecho en condiciones normales de fluidización  $H$ , favorecen el tiempo de contacto entre la fase sólida y la gaseosa, es decir, aumenta el tiempo de residencia de las burbujas en el lecho, traduciéndose en una mayor capacidad de transferir materia de una fase a otra.

Tabla 2.4. Resultados obtenidos al variar el diámetro de burbuja, de un valor definido en el Caso Base de 0.32 m, se reduce a 0.20 m y aumenta a 0.44 m.

#	Parámetro	Letra	$d_b$ 0.20 m	$d_b$ 0.32 m	$d_b$ 0.44 m	Unidades
1	Velocidad de ascenso de una sola burbuja.	$u_{br}$	0.9954	1.25909	1.47642	m/s
2	Velocidad absoluta de ascenso de las burbujas en un lecho.	$u_b$	1.2654	1.52909	1.74642	m/s
3	Fracción de burbujas en el lecho.	$\delta$	0.213371	0.17657	0.154602	[adim]
4	Coefficiente de transporte de emulsión-burbuja.	Q	0.00427711	0.01053	0.019446	m <sup>3</sup> /s
5	Flujo de la burbuja.	q	0.00282741	0.00723	0.0136848	m <sup>3</sup> /s
6	Coefficiente de transporte entre la burbuja y emulsión.	$k_g$	0.0115364	0.01025	0.0094724	m/s
7	Área de interfase de transferencia de la burbuja.	S	0.125664	0.32169	0.608212	m <sup>2</sup>
8	Parámetro adimensional X.	X	2.28568	1.08693	0.657982	[adim]
9	Parámetro adimensional $\beta$ .	$\beta$	0.9	0.9	0.9	[adim]

La Tabla 2.4 continúa en la página siguiente.

REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, MODELO: D-H/PFR

#	Parámetro	Letra	$d_b$ 0.20 m	$d_b$ 0.32 m	$d_b$ 0.44 m	Unidades
10	Parámetro adimensional $k'$ .	$\kappa'$	6.01099	6.01099	6.01099	[adim]
11	Volumen promedio de burbujas.	V	0.00418879	0.01715	0.0446022	m <sup>3</sup>
12	Área transversal del Reactor.	$A_c$	3.1416	3.1416	3.1416	m <sup>2</sup>
13	Altura del lecho en condiciones de fluidización.	H	2.83256	2.70597	2.63565	m
14	Aumento de la columna de lecho.	$\Delta H$	0.604386	0.477809	0.407477	m
15	Concentración de A en la emulsión a la salida.	$C_{Ae}$	4.91	5.65	5.02	mol/m <sup>3</sup>
16	Concentración de A, en la burbuja a la salida.	$C_{Ab}$	18.84	39.87	55.47	mol/m <sup>3</sup>
17	Concentración <i>total</i> de reactivo a la salida.	$C_A$	17.45	36.45	50.43	mol/m <sup>3</sup>
18	Conversión del reactivo en la emulsión.	$X_{Ae}$	95.09	94.34	94.98	[adim]
19	Conversión del reactivo en la burbuja.	$X_{Ab}$	81.1642	60.12	44.5305	[adim]
20	Conversión <i>total</i> del reactivo en el lecho.	$X_A$	82.5573	63.54	49.5755	[adim]

En la Figura 2.2 se ilustra en (a) y (b) los resultados que se obtienen del modelado, presentando las condiciones en estado estacionario (finales) para un diámetro de burbuja de 0.20 m y de 0.44 m, respectivamente.

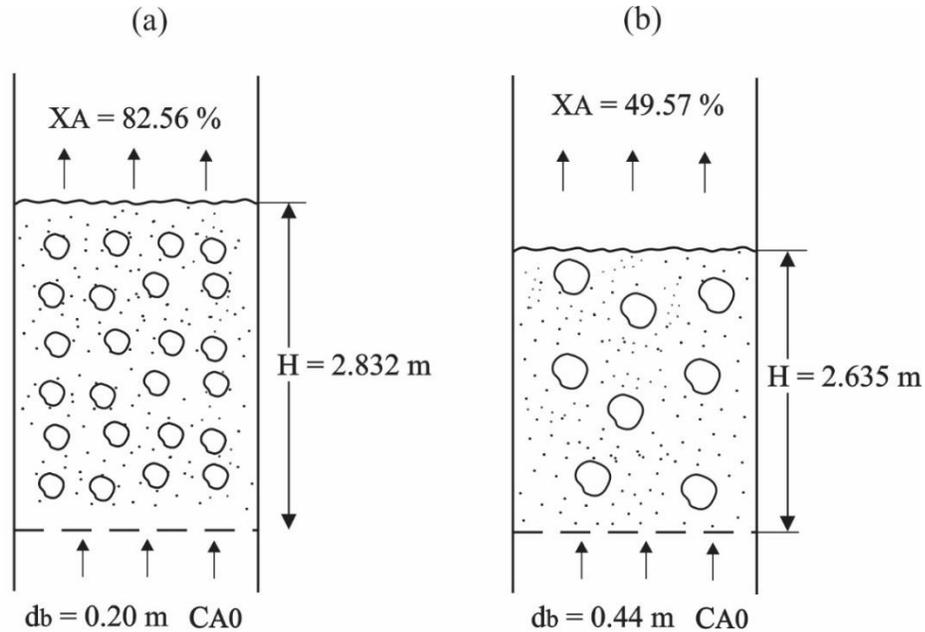
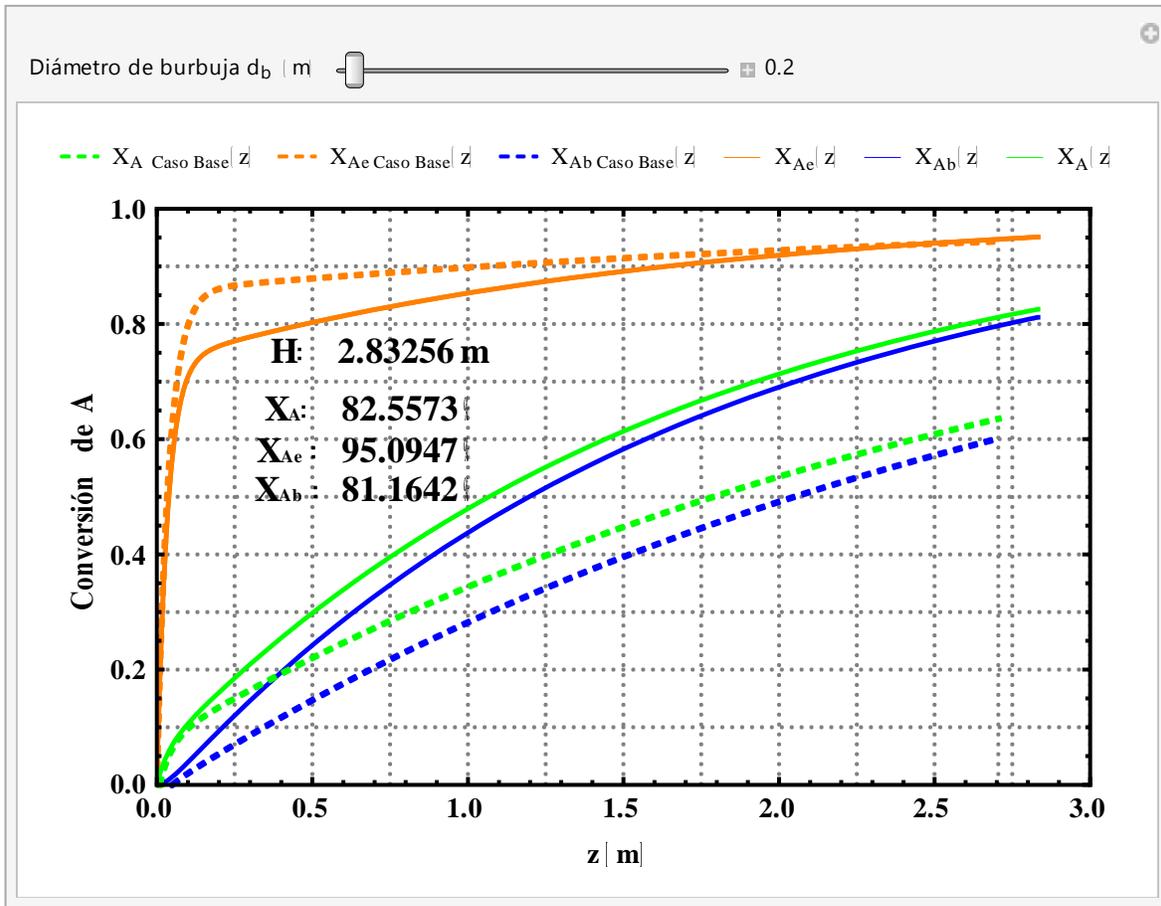


Figura 2.2 Condiciones de fluidización normal obtenidas con los siguientes diámetros de burbuja: (a) de 0.20 m y (b) de 0.44 m.

### Composición a lo largo del lecho fluidizado

En la Tabla 2.4 y Figura 2.2 se reportó la composición a la altura máxima del lecho fluidizado ( $z=H$ ) en términos de la concentración molar ( $C_{Ae}$ ,  $C_{Ab}$  y  $C_A$ ) y conversión porcentual ( $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$ ) del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, la *fase-emulsión* y la *total*, respectivamente. Utilizando el mismo modelo D-H/PFR, se calculó la composición a lo largo del lecho fluidizado ( $0 \leq z \leq H$ ) en términos de conversión ( $X_{Ae}(z)$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$ ) del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, la *fase-emulsión* y la *total*, respectivamente.

En las Gráficas 2.4 y 2.5 se presentan  $X_{Ae}(z)$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$ , en función de la altura del lecho fluidizado:  $0 \leq z \leq H$ , para casos que consideran un diámetro de burbuja diferente ( $d_b = 0.2 \text{ m}$  y  $d_b = 0.44 \text{ m}$ ). Como referencia se incluyen los perfiles del Caso Base (líneas discontinuas). En dichas gráficas, la conversión en la *fase-burbuja*  $X_{Ab}(z)$  se identifica con color azul, la conversión en la *fase-emulsión*  $X_{Ae}(z)$  con color naranja y la conversión *total* (o del lecho en su conjunto)  $X_A(z)$  se identifica con color verde.

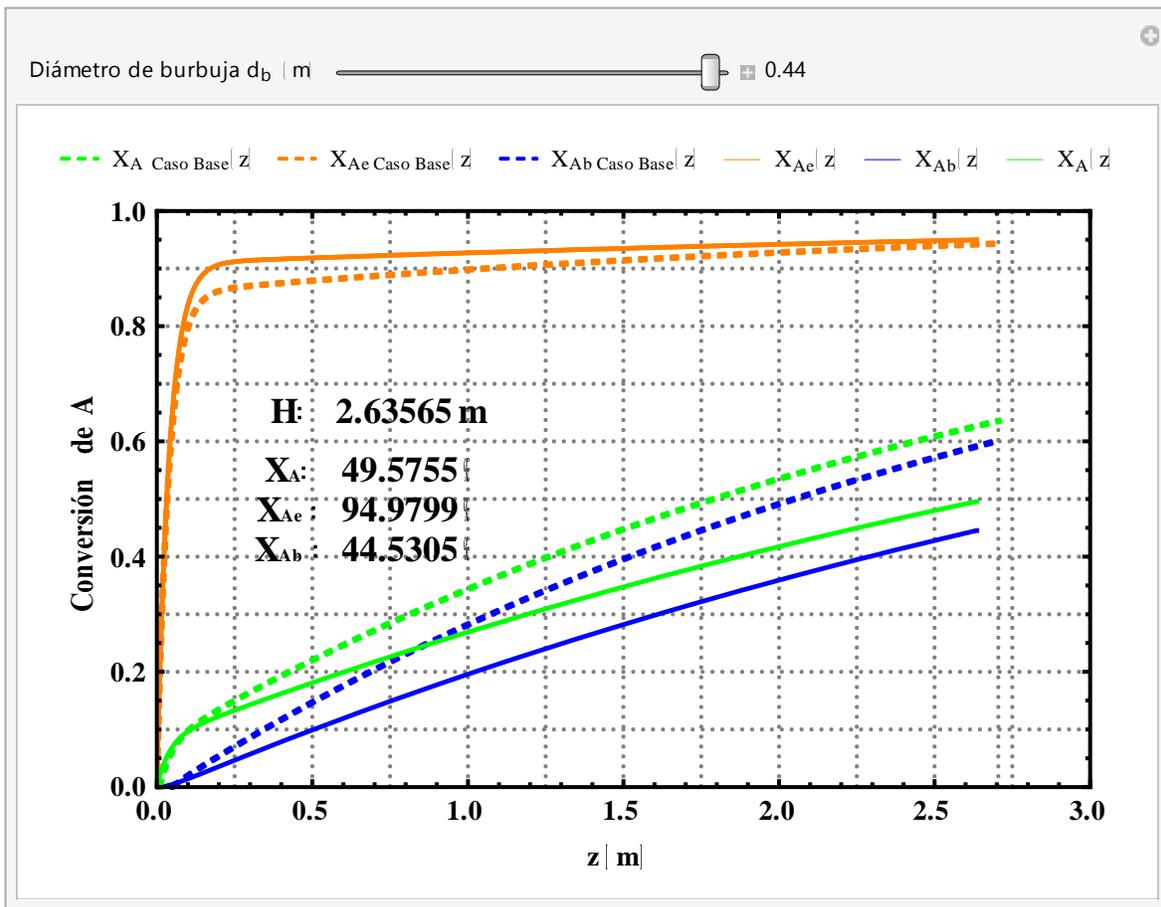


Gráfica 2.4 Perfiles de conversión de A en un RLF, para un diámetro de burbuja ( $d_b$ ) de 0.20 m bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con  $d_b=0.32$  m (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 2.4 se observa que la conversión de  $X_{Ae}(z)$  (pendiente del perfil  $X_{Ae}(z)$ ) del sistema con burbuja pequeña (línea continua) es menor, y se iguala con la conversión de  $X_{Ae}(z)$  del Caso Base (línea discontinua), en donde la altura del lecho es de  $z=2.5$  m, aproximadamente. También, se observa que con los dos tamaños de burbuja (0.2 m y 0.32 m), la rapidez de cambio, tanto de  $X_{Ab}(z)$  como de  $X_A(z)$  a lo largo del lecho fluidizado son mayores para el sistema con menor diámetro de burbuja ( $d_b = 0.2$  m). Todo ello se traduce en que la conversión porcentual del reactivo de interés que tiene el lecho en su conjunto en la parte superior del lecho fluidizado ( $X_A(H)= X_A$ ) es ligera pero claramente mayor en el sistema con burbujas de menor tamaño.

Además, es interesante notar que con  $d_b=0.2$  m se tuvo una expansión del lecho de 2.832 m y una conversión *total* del reactivo de 82.55 %, mientras que con  $d_b=0.32$  m (Caso Base) la expansión del lecho fue de 2.706 m y la conversión *total* de reactivo fue de 63.54 %.

Antes de analizar estos resultados, es conveniente describir los que se obtuvieron al utilizar burbujas de tamaño mayor que las del Caso Base (0.44 m y 0.32 m, respectivamente), que son los que se presentan en la Gráfica 2.5.



Gráfica 2.5 Perfiles de conversión de A en un RLF, para un diámetro de burbuja ( $d_b$ ) de 0.44 m bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con  $d_b=0.32$  m (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 2.5 se observa que, a diferencia de lo que ocurrió con burbujas más pequeñas que las del Caso Base ( $d_b = 0.32$  m), la conversión de  $X_{Ae}(z)$  con  $d_b = 0.44$  m es mayor que con  $d_b = 0.32$  m (Caso Base) a lo largo de todo el lecho fluidizado. También, se observa que con los dos tamaños de burbuja (0.44 m, línea continua y 0.32 m, línea discontinua (Caso Base)), la rapidez de cambio tanto de  $X_{Ab}(z)$ , como de  $X_A(z)$  a lo largo del lecho fluidizado son mayores para el sistema con menor diámetro de burbuja ( $d_b = 0.32$  m). Todo ello se traduce en que la conversión porcentual del reactivo de interés que tiene el lecho en su conjunto en la parte superior del lecho fluidizado ( $X_A(H) = X_A$ ) es claramente mayor en el sistema con burbujas de menor tamaño (Caso Base). Además, es interesante notar que con  $d_b=0.44$  m se tuvo una expansión del lecho de 2.635 m y una conversión *total* del reactivo de 49.57 %, mientras que con  $d_b=0.32$  m (Caso Base) la expansión del lecho fue de 2.706 m y la conversión *total* de reactivo fue de 63.54 %.

### **Análisis**

En el Caso 1 se aplicó el modelo D-H/PFR para simular cuál es el efecto de cambiar el diámetro de burbuja,  $d_b$ , sobre la conversión porcentual del reactivo de interés en las dos fases que constituyen el lecho fluidizado (*fase-burbuja*  $X_{Ab}$ , la *fase-emulsión*  $X_{Ae}$ ) y, consecuentemente, en el lecho fluidizado en su conjunto  $X_A$  (llamada también *total*). Sucintamente, puede decirse que los resultados de esta simulación permitieron observar que la disminución del tamaño de la burbuja se tradujo en un incremento de la capacidad del lecho fluidizado para convertir el reactivo en producto. Para explicar este resultado, primeramente se aclara cómo cambiaron parámetros del RLF que dependen directa e indirectamente del valor de  $d_b$ . Con esa información se analizan los procesos físicos y químicos que contempla el modelo D-H/PFR y, finalmente, se explica por qué al disminuir  $d_b$  aumenta  $X_{Ab}$ ,  $X_{Ae}$  y  $X_A$ .

### **Parámetros que dependen de $d_b$**

A continuación, se muestra el cambio que sufren los parámetros del modelo D-H/PFR que están relacionados directa e indirectamente con  $d_b$  cuando valor de éste último se cambia. Para ello, se utilizó una flecha dirigida hacia abajo ( $\downarrow$ ) o hacia arriba ( $\uparrow$ ), dependiendo de si el parámetro en cuestión disminuye o aumenta, respectivamente. Este señalamiento se anotó antes o después del parámetro en turno, según se consideró conveniente.

Las ecuaciones del modelo D-H/PFR que dependen directamente o indirectamente de  $d_b$  se revisan enseguida considerando la disminución del diámetro de burbuja (i.e.  $\downarrow d_b$ ).

Velocidad de ascenso de una burbuja,  $u_{br}$ :

$$u_{br} = 0.711(g d_b)^{1/2}$$

Por lo tanto:  $\downarrow d_b$  implica que  $\downarrow u_{br}$

Velocidad de ascenso de todas las burbujas en el lecho,  $u_b$ :

$$u_b = u_0 - u_{mf} + u_{br}$$

Por lo tanto:  $\downarrow u_{br}$  implica que  $\downarrow u_b$

La disminución de la velocidad de ascenso de todas las burbujas en el lecho,  $u_b$ , significa un incremento en el tiempo de residencia que tienen los reactivos para transformarse en productos.

Fracción de huecos del lecho fluidizado,  $\delta$ :

$$\delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b}$$

Por lo tanto:  $\downarrow u_b$  implica que  $\uparrow \delta$

Esto significa que burbujas más pequeñas constituyen un lecho fluidizado con mayor cantidad de espacio “vacío”, realmente ocupado con gas.

Altura del lecho fluidizado,  $H$ , en condiciones normales de fluidización:

$$H = \frac{H_0}{1 - \delta}$$

Por lo tanto:  $\uparrow \delta$  implica que  $H \uparrow$

Al aumentar la altura del lecho fluidizado en condiciones normales de fluidización se dispondrá de mayor tiempo de residencia, toda vez que el flujo volumétrico no se cambió, y con ello una mayor zona de reacción.

La transferencia de masa entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión* es otro de los aspectos que está intrínsecamente relacionado con el diámetro de burbuja, a través del área de transferencia de masa en una burbuja,  $S$ , y del flujo volumétrico de transferencia de masa entre dichas fases a través de una burbuja,  $q$ , como se muestra enseguida.

Área de transferencia de masa de una burbuja,  $S$ :

$$S = \pi d_b^2$$

Por lo tanto, si  $d_b \downarrow$  ello implica que  $S \downarrow$

Flujo volumétrico de transferencia de masa entre dichas fases a través de una burbuja,  $q$ :

$$q = \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2$$

Por lo tanto, si  $d_b \downarrow$  ello implica que  $q \downarrow$

El coeficiente de transporte entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*,  $k_g$ , es ligeramente favorecido por la disminución en el diámetro de burbuja, sin embargo, no impide que área de transferencia de masa en una burbujas,  $S$ , y el flujo volumétrico de transferencia de masa entre fases,  $q$ , reduzcan el coeficiente global de transporte para una burbuja,  $Q$ , entre la *fase-emulsión* y *fase-burbuja*:

$$k_g = 0.975\sqrt{D} \left(\frac{g}{d_b}\right)^{1/4}$$

Por lo tanto, si  $d_b \downarrow$  ello implica que  $k_g \uparrow$

$$Q = q + k_g S$$

Por lo tanto, si  $d_b \downarrow$  ello implica que  $Q \downarrow$

La transferencia másica por convección,  $q$ , afecta en mayor medida al coeficiente global de transferencia,  $Q$ , que la transferencia másica por difusión,  $k_g S$ .

Evidentemente, todo lo anterior indica que los parámetros que describen el área de transferencia para una burbuja,  $S$ , el flujo volumétrico de transferencia de masa entre fases,  $q$ , y el coeficiente global de una burbuja,  $Q$ , se ven disminuidos por la acción de reducir el diámetro de burbuja. Sin embargo, la operación del RLF depende de la cantidad total de burbujas,  $N_b$ , y, consecuentemente, del área de todas las burbujas,  $S_t$ , de sus flujos volumétricos,  $q_t$ , y del coeficiente global de todas las burbujas,  $Q_t$ . Por esto, se consideró necesario analizar cómo se relaciona el diámetro de burbuja  $d_b$  con  $N_b$ ,  $S_t$ ,  $q_t$ ,  $k_{gt}$  y  $Q_t$ . Para ello, se procedió como sigue.

Si  $H$  es la altura del lecho fluidizado y  $\delta$  es la fracción de huecos del lecho fluidizado:

$$\text{Entonces, } H\delta = \text{volumen ocupado por el gas} = N_b V H$$

Donde  $N_b$  y  $V$  representan el número de burbujas y el volumen de cada burbuja:

$$\text{Como } V = \frac{1}{6}\pi d_b^3$$

Por lo tanto, se puede conocer el número de burbujas presentes en el lecho fluidizado:

$$N_b = \frac{6\delta}{\pi d_b^3}$$

Por otro lado, el área total de transferencia de masa del lecho fluidizado,  $S_t$ , es:

$$S_t = S N_b$$

Donde  $S$  es el área de cada burbuja, que en términos del diámetro de burbuja  $d_b$  es:

$$S = \pi d_b^2$$

Por lo tanto, el área total de transferencia de masa en el lecho fluidizado,  $S_t$ , es:

$$S_t = (\pi d_b^2) \left( \frac{6\delta}{\pi d_b^3} \right) = \frac{6\delta}{d_b}$$

Por lo tanto, si  $d_b \downarrow$  ello implica que  $S_t \uparrow$

Flujo volumétrico de transferencia de masa entre dichas fases a través de todas las burbujas,  $q_t$ :

$$q_t = N_b q = \left( \frac{6\delta}{\pi d_b^3} \right) \left( \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2 \right) = \frac{9\delta u_{mf}}{2d_b}$$

Por lo tanto, si  $d_b \downarrow$  ello implica que  $q_t \uparrow$

Coefficiente de transporte entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*,  $k_g$ , de todas las burbujas:

$$k_{gt} = N_b k_g = \left( \frac{6\delta}{\pi d_b^3} \right) \left( 0.975\sqrt{D} \left( \frac{g}{d_b} \right)^{1/4} \right) = \frac{5.85\delta\sqrt{D}g^{1/4}\delta}{\pi d_b^{3.25}}$$

Por lo tanto, si  $d_b \downarrow$  ello implica que  $k_{gt} \uparrow$

Por último, es conveniente analizar el coeficiente global de transporte para todas las burbujas presentes en el lecho,  $Q_t$ , el cual está compuesto por el flujo volumétrico total de masa entre ambas fases,  $q$ , el área total de transferencia de masa en el lecho fluidizado,  $S_t$ , y del coeficiente total de transporte entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*,  $k_{gt}$ :

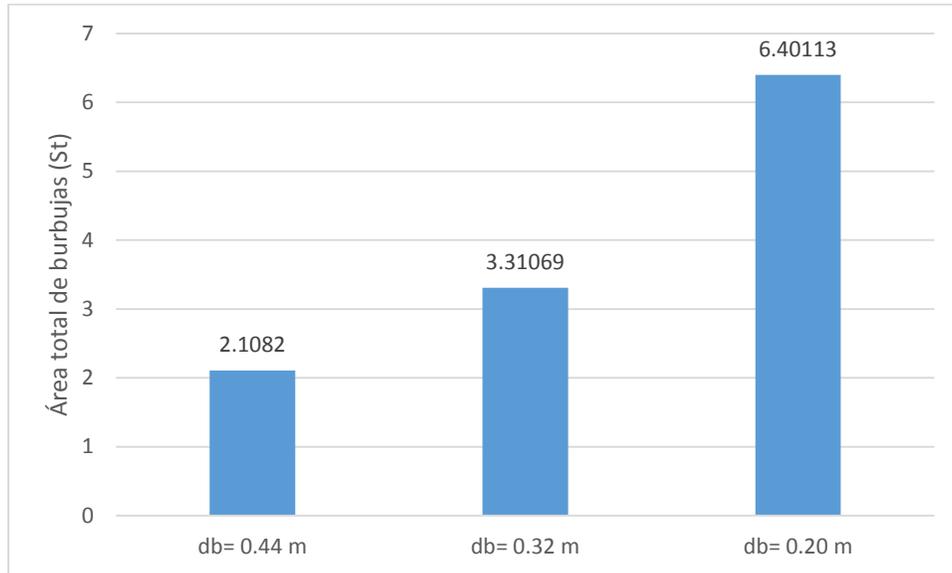
$$Q_t = q_t + k_{gt} S_t$$

$$Q_t = \frac{9\delta u_{mf}}{2d_b} + \left( \frac{5.85\delta\sqrt{D}g^{1/4}}{\pi d_b^{3.25}} \right) \left( \frac{6\delta}{d_b} \right)$$

Por lo tanto, si  $d_b \downarrow$  ello implica que  $Q_t \uparrow$

Al disminuir el diámetro de burbuja,  $d_b$ , disminuye el área de cada burbuja,  $S$ ; sin embargo, aumentan tanto el área de todas las burbujas,  $S_t$  (que es el área total de transferencia de masa del lecho fluidizado), como el coeficiente global de transferencia de masa entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión* de todas las burbujas,  $Q_t$ . Es por ello que la conversión del reactivo de interés fue mayor al reducir el diámetro de la burbuja, lo cual significa que en el rango investigado, el incremento del área total de transporte de masa se traduce en un incremento de la capacidad del lecho para transformar reactivo en producto.

Lo anterior, se corrobora con lo reportado en la Gráfica 2.6, donde se muestra el área total de transferencia de las burbujas presentes en el lecho,  $S_t$ , obtenidas con los  $d_b$  de 0.44 m, 0.32 (Caso Base) y 0.20 m.



Gráfica 2.6 Área total de transferencia de las burbujas para cada diámetro de burbuja.

Parámetro adimensional X:

La disminución del volumen promedio de una burbuja,  $V$ , y de la velocidad de ascenso de las burbujas en el lecho,  $u_b$ , combinado con un aumento en la altura del lecho en condiciones normales de fluidización,  $H$ , provoca que el parámetro adimensional que define la transferencia de masa entre ambas fases para una burbuja,  $X$ , aumente considerablemente, de acuerdo a lo reportado en la Tabla 2.4, traduciéndose en un mayor tiempo de residencia de las burbujas dentro del lecho.

$$X = \frac{Q H}{u_b V}$$

Por lo tanto, si  $d_b \downarrow$  implica que  $X \uparrow$

Balance de materia en la *fase-burbuja*:

La reducción del diámetro de burbuja provoca el aumento en la altura del lecho en condiciones normales de fluidización,  $H$ , que acompañado con una disminución en la velocidad de ascenso de las burbujas, deriva en una mejora en la transferencia de materia entre fases, como lo indica el parámetro adimensional  $X$ . Por ello la concentración del reactivo de interés disminuye.

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{\uparrow X}{\uparrow H} (C_{Ab} - C_{Ae}) = 0$$

Balance de materia en la *fase-emulsión*:

Se tiene un impacto casi nulo en el balance de materia de la *fase-emulsión*, el cual puede comprobarse con los resultados de la Tabla 2.4, e ilustrarse en las Gráficas 2.4 y 2.5.

$$(1 - \beta) \frac{dC_{Ae}}{dz} + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{\kappa'}{H} C_{Ae} = 0$$

Conversión *total* del reactivo:

Derivado del impacto positivo en la disminución de la concentración del reactivo de interés en los balances de la *fase-emulsión*, y principalmente de la *fase-burbuja* (a la salida del reactor), se traduce en altos porcentajes de conversión del reactivo.

$$C_A = \beta C_{Ab} + (1 - \beta) C_{Ae}$$

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

Por lo tanto, si  $C_A \downarrow$  ello implica que  $X_A \uparrow$

## Conclusión

Cuando las burbujas ascienden, el reactante se transfiere hacia fuera y dentro de las mismas, de manera que puedan entrar en contacto con el sólido para producir la reacción. Una vez que se lleva la reacción, el producto fluye hacia el interior de las burbujas y sale del lecho con las mismas. Es por ello que, la velocidad a la cual los reactantes y productos fluyen hacia dentro y fuera de la burbuja es importante para la conversión. Sin embargo, resulta determinante el tiempo que tarda una burbuja atravesar el lecho (conocido como el tiempo de residencia), al igual que el número de burbujas presentes en el lecho.

El aumento en el tamaño de las burbujas a un valor de 0.44 m, provoca un incremento en la velocidad de ascenso total de ellas, acompañado con una disminución en la altura del lecho a condiciones normales de fluidización,  $H$ , reduciendo considerablemente el tiempo de residencia en el lecho, donde el reactivo y producto tienen menos tiempo para transferirse de una fase a otra. De esta acción, ocurre una canalización del gas, dando lugar a fluctuaciones en el lecho que derivan, posiblemente, en un fenómeno de coalescencia, provocando que la conversión *total* para este caso tenga un valor reducido del 49.57 %. Por otro lado, al disminuir el diámetro de la burbuja a 0.20 m, el resultado obtenido fue favorable, obteniendo una conversión *total* de 82.55 %, debido a un mayor número de burbujas, como puede comprobarse con los valores presentados en la Tabla 2.4, al visualizar la fracción de burbujas en el lecho.

Los valores elevados del diámetro de burbuja,  $d_b$ , derivan en conversiones pequeñas. Para reducir y controlar el tamaño de las burbujas es conveniente introducir accesorios internos para estos sistemas. En general, el tamaño de las burbujas está determinado por la velocidad superficial, la geometría del recipiente y del diseño del distribuidor, al igual que el uso de dispositivos internos, que permiten tener burbujas lo suficientemente pequeñas y distribuidas uniformemente para conseguir un buen contacto del gas con el sólido.

### 2.6.2 Caso 2: Diámetro del reactor

Para el diseño de un RLF, el diámetro del reactor  $d_R$  es un parámetro determinante en las propiedades del sistema, ya que impacta en los costos de construcción, operación y mantenimiento, al igual que en la capacidad de transformar reactivo en producto. Para el estudio de este segundo caso, se analizó en un RLF el cambio en la concentración del reactivo de interés, A, a la salida del reactor en la *fase-burbuja*,  $C_{bA}$ , *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , y la *total*,  $C_A$ , al igual que sus debidas conversiones  $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$ , respectivamente, que se tiene al variar el  $d_R$  al modelo D-H/PFR. La Tabla 2.5 muestra los parámetros que fueron utilizados en el Caso Base, con excepción del  $d_R$  para el cual se contemplan dos valores diferentes, de los cuales, con referencia al valor ocupado en el Caso Base ( $d_R = 2$  m), se decidió utilizar los valores de 1.68 m y 2.15 m para analizar el cambio en la concentración y conversión del reactivo de interés en la corriente de salida, así como en su paso por el lecho fluidizado.

Para el análisis de este caso se retoman las ecuaciones del Capítulo I que involucran directa e indirectamente el diámetro del reactor,  $d_R$ .

Área transversal del reactor:

$$A_C = \frac{\pi}{4} d_R^2$$

Altura de la columna estática:

$$H_0 = \frac{W}{A_C \rho_S (1 - \epsilon_{mf})}$$

Altura del lecho en condiciones de fluidización:

$$H = H_0 / (1 - NV)$$

Ante lo anterior, las variaciones que se realicen en el diámetro de reactor son importantes para las condiciones operativas del sistema. El modelado con diámetro de reactor variable permitirá observar el efecto sobre la capacidad del reactor para convertir reactivo en producto.

Tabla 2.5 Condiciones de operación del RLF, con diámetro de reactor  $d_R$ , variable.

Parámetro	Letra	Valor	Unidades
Velocidad superficial del gas en el lecho.	$u_0$	0.3	m/s
Velocidad mínima de fluidización.	$u_{mf}$	0.03	m/s
Fracción de huecos de fluidización incipiente.	$\epsilon_{mf}$	0.5	[adim]
Diámetro de burbuja.	$d_b$	0.32	m
Aceleración de la gravedad.	$g$	9.8	$m/s^2$
Difusividad.	$D$	$20 \times 10^{-6}$	$m^2/s$
Densidad del sólido.	$\rho_s$	2000	$kg/m^3$
Masa de catalizador.	$W$	7000	kg
Diámetro del reactor.	$d_R$	1.68	m
		2	
		2.15	
Concentración inicial de la especie A.	$C_{A0}$	100	$mol/m^3$

### Condiciones a la salida del lecho fluidizado

Los resultados obtenidos del modelado se presentan en la Tabla 2.6. En dicha tabla se muestra el valor de los parámetros requeridos para resolver el modelo D-H/PFR (renglones 1 a 15), así como la concentración ( $C_{Ae}$ ,  $C_{Ab}$  y  $C_A$ ) y conversión ( $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$ ) en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*, respectivamente (renglones 16 a 21), para un diámetro de reactor de 1.68 m (4ª columna) y de 2.15 m (6ª columna), además de los resultados obtenidos del Caso Base, cuyo diámetro de reactor es de 2 m (5ª columna). La acción de disminuir el diámetro de reactor,  $d_R$ , impacta positivamente sobre los parámetros  $X$  y  $\kappa'$ , y en la altura final del lecho,  $H$ , con lo cual se tiene un mayor tiempo de residencia de las burbujas dentro del lecho, favoreciendo la conversión de A en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*.

Tabla 2.6 Resultados obtenidos al variar el diámetro de reactor de un valor definido en el Caso Base de 2 m a 1.68 m y a 2.15 m.

#	Parámetro	Letra	$d_R$ 1.68 m	$d_R$ 2 m	$d_R$ 2.15 m	Unidades
1	Velocidad de ascenso de una sola burbuja.	$u_{br}$	1.25909	1.25909	1.25909	m/s
2	Velocidad absoluta de ascenso de las burbujas en un lecho.	$u_b$	1.52909	1.52909	1.52909	m/s
3	Fracción de burbujas en el lecho.	$\delta$	0.17657	0.17657	0.17657	[adim]
4	Coefficiente de transporte de emulsión-burbuja.	Q	0.01053	0.01053	0.01053	m <sup>3</sup> /s
5	Flujo de la burbuja.	q	0.00723	0.00723	0.00723	m <sup>3</sup> /s
6	Coefficiente de transporte entre la burbuja y emulsión.	$k_g$	0.01025	0.01025	0.01025	m/s
7	Área de interfase de transferencia de la burbuja.	S	0.32169	0.32169	0.32169	m <sup>2</sup>
8	Parámetro adimensional X.	X	1.54043	1.08693	0.940556	[adim]
9	Parámetro adimensional $\beta$ .	$\beta$	0.9	0.9	0.9	[adim]

La Tabla 2.6 continúa en la página siguiente.

REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, MODELO: D-H/PFR

#	Parámetro	Letra	$d_R$ 1.68 m	$d_R$ 2 m	$d_R$ 2.15 m	Unidades
10	Parámetro adimensional $k'$ .	$\kappa'$	8.51898	6.01099	5.20151	[adim]
11	Volumen promedio de burbujas.	V	0.01715	0.01715	0.01715	m <sup>3</sup>
12	Área transversal del reactor.	$A_c$	2.21671	3.1416	3.6305	m <sup>2</sup>
13	Altura de la columna estática.	$H_0$	3.15784	2.22817	1.92811	m
14	Altura del lecho en condiciones de fluidización.	H	3.835	2.70597	2.34157	m
15	Aumento de la columna de lecho.	$\Delta H$	0.677167	0.477809	0.413464	m
16	Concentración del reactivo en la emulsión.	$C_{Ae}$	3.84	5.65	6.42	mol/m <sup>3</sup>
17	Concentración del reactivo en la burbuja.	$C_{Ab}$	27.023	39.87	45.22	mol/m <sup>3</sup>
18	Concentración <i>total</i> del reactivo en el lecho.	$C_A$	24.704	36.45	41.34	mol/m <sup>3</sup>
19	Conversión del reactivo en la emulsión.	$X_{Ae}$	96.1667	94.34	93.5859	%
20	Conversión del reactivo en la burbuja.	$X_{Ab}$	72.9777	60.12	54.7843	%
21	Conversión <i>total</i> del reactivo en el lecho.	$X_A$	75.2966	63.54	58.6645	%

En la Figura 2.3 se ilustra como al disminuir el diámetro del reactor se tiene un aumento de la altura del lecho en condiciones de fluidización incipiente,  $H_0$ , (a). Por otra parte, el aumento en  $d_R$  hace notar la disminución de la altura inicial del lecho,  $H_0$ , (b). También, se incorpora la altura final del lecho,  $H$ , al igual que la conversión *total* a la salida del reactor,  $X_A$ , que se obtienen al modelar ambos diámetros.

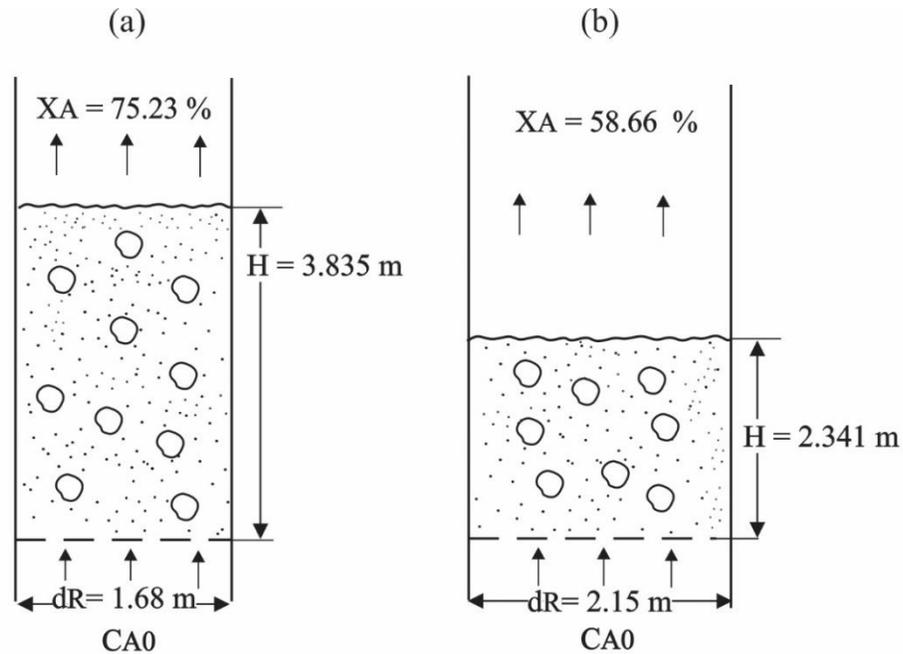
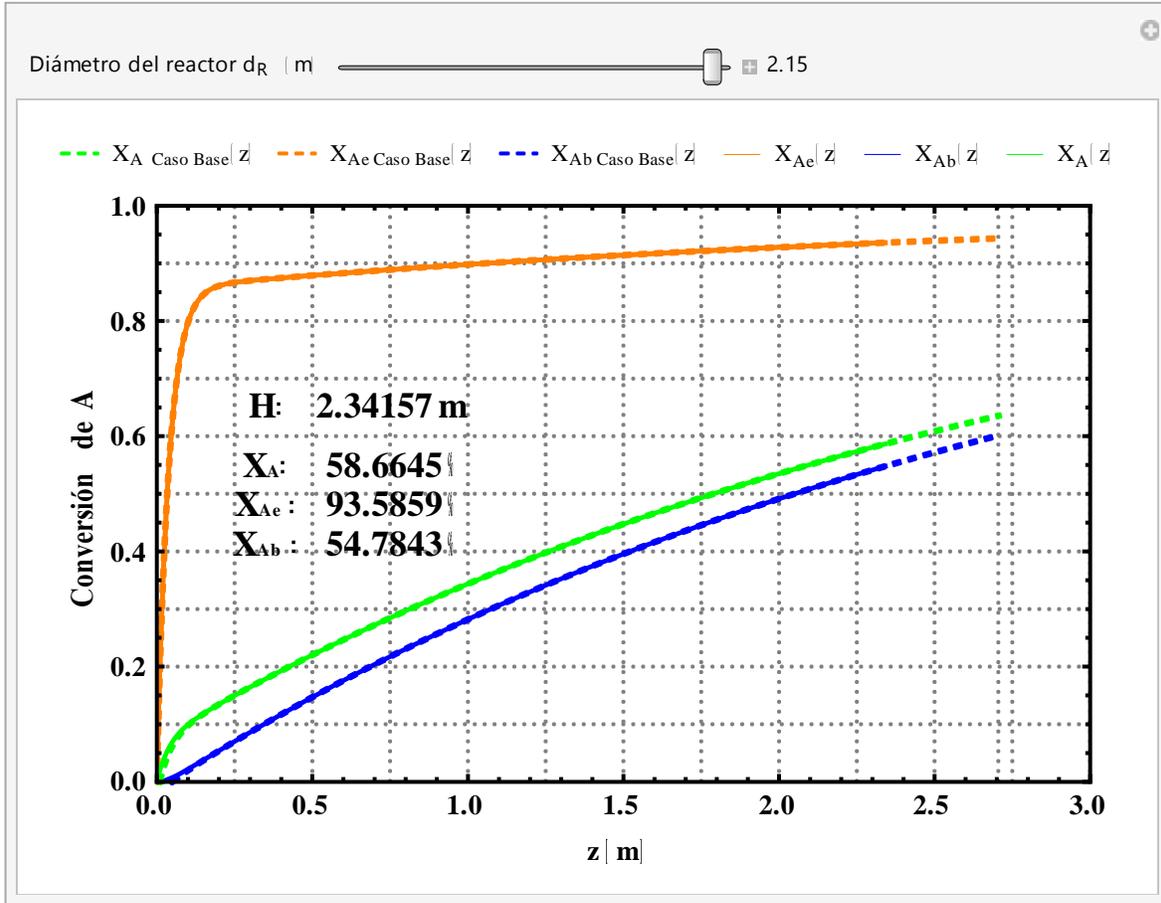


Figura 2.3 Condiciones de fluidización normal obtenidas con los siguientes diámetros de reactor: (a) de 1.68 m y (b) de 2.15 m.

### Composición a lo largo del lecho fluidizado

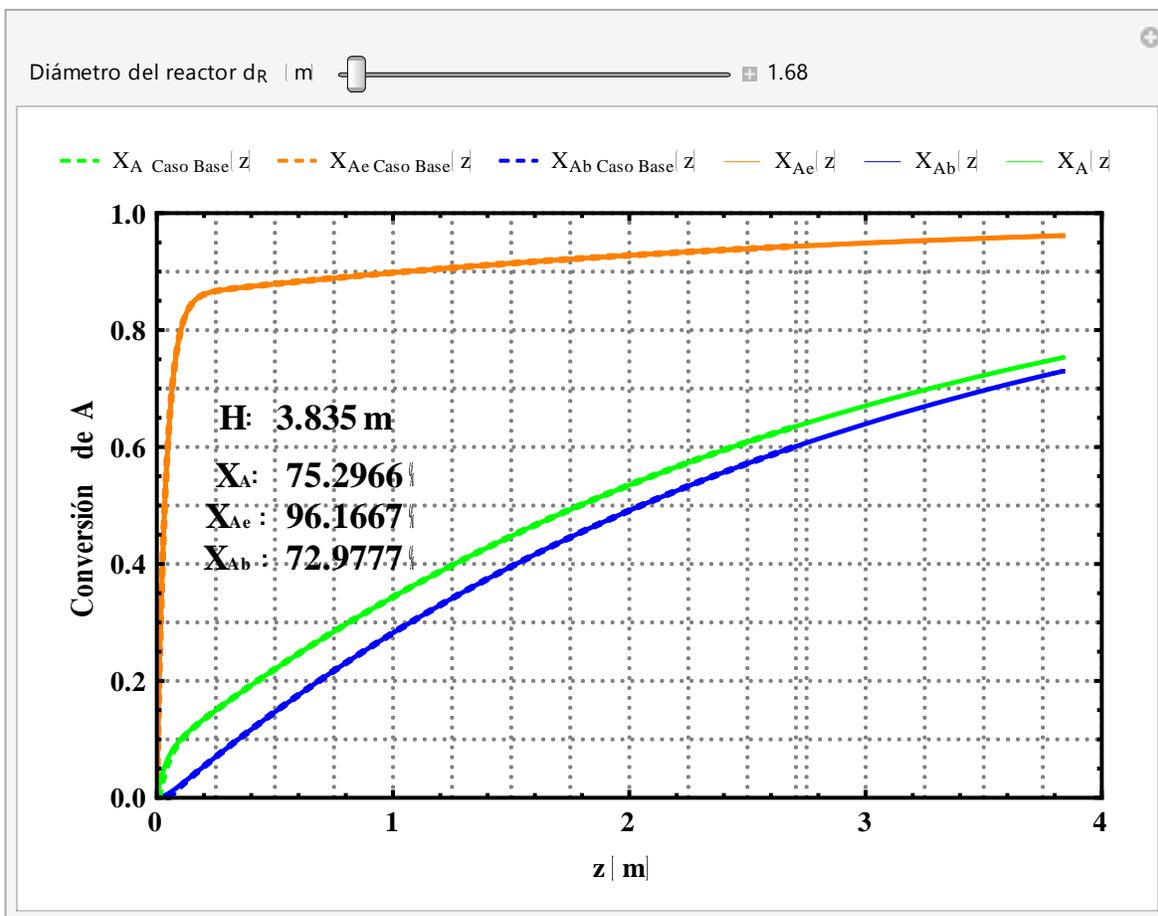
Sumado a los resultados de la composición a la altura máxima del lecho fluidizado ( $z=H$ ) reportados en la Tabla 2.6 y la Figura 2.3, se calculó la composición a lo largo del lecho fluidizado ( $0 \leq z \leq H$ ), utilizando el mismo modelo D-H/PFR, en términos de conversión porcentual ( $X_{Ae}(z)$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$ ) del reactivo de interés A, en la *fase-burbuja*, la *fase-emulsión* y la *total*, respectivamente.

En las Gráficas 2.7 y 2.8 se presentan  $X_{Ae}(z)$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$  en función de la altura del lecho fluidizado:  $0 \leq z \leq H$ , para diferentes diámetros de reactor  $d_R$  probados (Gráfica 2.7,  $d_R = 2.15 \text{ m}$ ; Gráfica 2.8,  $d_R = 1.68 \text{ m}$ ). Se incluyen los resultados del Caso Base (líneas discontinuas) modelado con un  $d_R = 2 \text{ m}$ .



Gráfica 2.7 Perfiles de conversión de A en un RLF, para un diámetro de reactor ( $d_R$ ) de 2.15 m bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con  $d_R=2$  m (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 2.7 se observa que el perfil de conversión de la *fase-emulsión*,  $X_{Ae}(z)$ , *fase-burbuja*,  $X_{Ab}(z)$ , y, conversión *total*,  $X_A(z)$ , del sistema con un diámetro de reactor de 2.15 m, se superponen exactamente con el perfil de conversión del Caso Base (línea discontinua). Este efecto se observa al alcanzar la altura final del lecho, correspondiente a 2.341 m, dando como resultado una conversión *total* de reactivo de 58.66 %. Lo anterior se traduce en que la conversión porcentual del reactivo de interés que tiene el lecho en su conjunto en la parte superior del lecho fluidizado ( $X_A(H) = X_A$ ) es ligeramente menor que en el sistema modelado con un diámetro de reactor de 2 m, donde se obtiene una conversión *total* de 63.54 % y una altura final del lecho de 2.706 m.



Gráfica 2.8 Perfiles de conversión de A en un RLF, para un diámetro de reactor ( $d_R$ ) de 1.68 m bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con  $d_R = 2$  m (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 2.8 al igual que la anterior, el perfil de conversión de la *fase-emulsión*,  $X_{Ae}(z)$ , *fase-burbuja*,  $X_{Ab}(z)$ , y, conversión *total*,  $X_A(z)$ , para un diámetro de reactor de 1.68 m (línea continua), se superpone al perfil de la conversión del Caso Base (línea discontinua), de modo que en esta ocasión no es posible apreciar la línea discontinua que representa el Caso Base. Para un diámetro de reactor menor, se logra una expansión del lecho de 3.835 m, con una conversión *total* del reactivo de 75.29 %. Tanto la altura final del lecho como la conversión *total* son mayores que el Caso Base (con  $d_R = 2$  m), donde tan solo logra una expansión de 2.706 m, y una conversión *total* de A de 63.54 %. Es por ello que, en la Gráfica 2.8 no es posible apreciar el perfil de conversión del Caso Base. Sin embargo, se hace notar con una línea punteada vertical dónde termina la altura final del lecho del Caso Base.

### Análisis

En el Caso 2 se aplicó el modelo D-H/PFR para simular el efecto de cambiar el diámetro de reactor  $d_R$  sobre la conversión porcentual del reactivo de interés  $A$  en las dos fases que constituyen el lecho fluidizado (*fase-burbuja*,  $X_{Ab}$ , *fase-emulsión*,  $X_{Ae}$ ) y, consecuentemente, en el lecho fluidizado en su conjunto  $X_A$ .

Los resultados de esta simulación permitieron observar que la disminución del diámetro de reactor se tradujo en un incremento de la capacidad del lecho fluidizado para convertir el reactivo en producto. Para explicar este resultado, se muestra el cambio en los parámetros del RLF que dependen directa e indirectamente del valor de  $d_R$ . Con esa información se analizan los procesos físicos y químicos que contempla el modelo D-H/PFR y, finalmente, se explica por qué al disminuir  $d_R$  aumenta  $X_{Ab}$ ,  $X_{Ae}$  y  $X_A$ .

### Parámetros que dependen de $d_R$

A continuación, se muestra el cambio considerando la disminución del diámetro de reactor (i.e.  $\downarrow d_R$ ) que sufren las ecuaciones de los parámetros del modelo D-H/PFR que están relacionados directa e indirectamente con  $d_R$ . Para ello, se utilizó una flecha dirigida hacia abajo ( $\downarrow$ ) o hacia arriba ( $\uparrow$ ), dependiendo de si el parámetro en cuestión disminuye o aumenta, respectivamente.

La reducción del diámetro del reactor impacta directamente en el área transversal del lecho,  $A_c$ :

$$A_c = \frac{\pi}{4} d_R^2$$

Por lo tanto:  $\downarrow d_R$  implica que  $\downarrow A_c$

Altura inicial del lecho,  $H_0$ , en condiciones de fluidización incipiente:

$$H_0 = \frac{W}{A_c \rho_s (1 - \epsilon_{mf})}$$

Por lo tanto:  $\downarrow d_R$  implica que  $\uparrow H_0$

Un aumento en la altura inicial del lecho  $H_0$ , se traduce como un mayor recorrido de las burbujas dentro del sistema, incrementando el tiempo de residencia que tienen los reactivos para transformarse en productos.

Altura del lecho fluidizado,  $H$ , en condiciones normales de fluidización:

$$H = \frac{H_0}{(1 - \delta)}$$

Por lo tanto:  $\uparrow H_0$  implica que  $\uparrow H$

La relación existente entre la altura inicial del lecho,  $H_0$ , con el diámetro del reactor,  $d_R$ , se extiende cuando el reactor opera por encima de la fluidización incipiente, generando una expansión del lecho,  $H$ . De modo que  $\Delta H$  representa la diferencia de altura entre la expansión del lecho en condiciones de fluidización normal y a condiciones de fluidización incipiente. Esta diferencia es mayor cuando se modela con un diámetro de reactor menor, con lo cual se dispondrá de un mayor recorrido de las burbujas dentro del lecho, y con ello una mayor capacidad de transferir materia entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión*.

Parámetro adimensional  $X$  (facilidad de transferencia de masa entre ambas fases):

$$X = \frac{Q H}{u_b V}$$

Por lo tanto, si  $H \uparrow$  ello implica que  $X \uparrow$

Los valores de los parámetros de la ecuación que define la facilidad de transferencia de masa entre ambas fases (parámetro  $X$ ), tales como: el flujo global de la transferencia entre ambas fases,  $Q$ , el volumen promedio de burbujas,  $V$ , y la velocidad de ascenso de las burbujas,  $u_b$ , no cambian con el reportado en el Caso Base, tal como se observa en la Tabla 2.6. El aumento en el parámetro  $X$ , es gracias a una mayor expansión del lecho,  $H$ , incrementando el tiempo de residencia que tiene el reactivo para transformarse en producto.

Parámetro cinético  $\kappa'$ :

$$\kappa' = \frac{k H_0}{u_0}$$

Por lo tanto, si  $H_0 \uparrow$  ello implica que  $\kappa' \uparrow$

La acción de disminuir el área transversal del reactor (manteniendo la misma carga de catalizador), se tradujo en un mayor recorrido de las burbujas en el lecho, con ello se aumenta la transferencia de reactivo contenido en la burbuja para entrar en contacto con el sólido presente en la *fase-emulsión*, traduciéndose en una mayor zona de reacción.

Balance materia en la *fase-burbuja*:

Tanto la altura del lecho en condiciones normales de fluidización,  $H$ , como el parámetro adimensional,  $X$ , al estar presentes en la ecuación de balance de materia de la *fase-burbuja*, provocan un impacto positivo. Esto se traduce en una disminución de la concentración del reactivo de interés dentro de la burbuja.

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} = -\frac{X}{H}(C_{Ab} - C_{Ae})$$

Balance de materia en la *fase-emulsión*:

El aumento del parámetro cinético  $\kappa'$ , al igual que la altura final del lecho en condiciones de fluidización normal,  $H$ , tienen un impacto ligeramente positivo en el balance de materia de la *fase-emulsión*, debido a que el valor en la relación  $[\kappa'/H]$ , tan solo varía unas centésimas con la relación obtenida en el Caso Base.

$$(1 - \beta) \frac{dC_{Ae}}{dz} + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{\kappa'}{H} C_{Ae} = 0$$

Conversión *total* del reactivo:

Derivado del impacto positivo en los balances de materia en la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*, la concentración del reactivo de interés en la corriente de salida del lecho fluidizado es baja, traduciéndose en altos porcentajes de conversión del reactivo de interés *A* a la salida del reactor.

$$C_A = \beta C_{Ab} + (1 - \beta) C_{Ae}$$

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

Por lo tanto, si  $C_A \downarrow$  ello implica que  $X_A \uparrow$

### Conclusión

Para un diámetro de reactor de 2.15 m, se tiene una altura inicial del lecho  $H_0$  de 1.928 m y se logra una expansión de lecho de 2.341 m, teniendo una diferencia de 0.4134 m entre el lecho en condiciones de fluidización incipiente y a condiciones normales de fluidización  $\Delta H$ . Bajo dichas condiciones se obtuvo una conversión del reactivo de interés *A* en la *fase-emulsión* de 93.58 %, en la *fase-burbuja* de 54.78 % y la *total* de 58.66 %. A pesar de lograr un porcentaje elevado de conversión en la *fase-emulsión*, no contribuye a obtener una conversión global elevada del reactivo *A* a la salida del lecho, esto debido a que la contribución de gas presente en la *fase-emulsión*, a la salida del lecho, es muy bajo. En la *fase-burbuja* esta contribución de gas a la salida es más elevado, por ello, al obtener porcentajes de conversión muy bajas en la *fase-burbuja*, lo serán también para la conversión *total* que se tenga del reactivo a la salida del lecho. Lo antes mencionado se debe a la baja expansión que se tiene en la altura del lecho  $\Delta H$ , ya que implica un menor tiempo de contacto entre la burbuja con la *fase-emulsión* (donde se lleva a cabo la reacción), reduciendo la tasa de transferencia de masa entre ambas fase, evitando que el producto contenido en la *fase-emulsión* logre transferirse con mayor flujo a la burbuja.

Para un diámetro reducido de reactor de 1.68 m, se tiene una altura inicial del lecho  $H_0$  de 3.158 m, logrando una expansión de lecho de 3.835 m, lo cual implica que se tenga una diferencia de expansión de 0.6771 m. En la Tabla 2.6 se puede observar que esta diferencia de altura en el lecho es mayor a la obtenida en el Caso Base y con un diámetro de reactor de 2.15 m. Se alcanza una conversión del reactivo de interés  $A$  en la *fase-emulsión* de 96.16 %, en la *fase-burbuja* de 72.97 % y una *total* de 75.29 %. Para este diámetro de reactor se logra en ambas fases conversiones del reactivo altas. El porcentaje de reactivo convertido en la *fase-emulsión* vuelve a ser elevado como lo fue con el diámetro de reactor anterior, sin embargo, para este caso, la reducción de este parámetro provoca que la altura del lecho en fluidización incipiente  $H_0$  aumente, al igual que la expansión a condiciones normales de fluidización  $H$ . Esto deriva en un aumento en la tasa de transferencia de masa que existe entre la *fase-emulsión* y la *fase-burbuja* y con ello en una mayor zona de reacción (reflejado en el modelo con el aumento del parámetro cinético  $\kappa'$ ). De ahí que las conversiones para un diámetro de reactor menor ( $\downarrow d_R$ ) sean mayores.

### 2.6.3 Caso 3: Velocidad superficial del gas en el lecho

La velocidad superficial del gas que entra al reactor resulta ser un parámetro importante en el modelado de RLF solido-gas. Un aumento en la velocidad por encima de la velocidad mínima de fluidización resulta en la formación de burbujas que se elevan a través del lecho, provocando la expansión de éste, debido a la caída de presión que se presenta, lo cual provoca que las partículas sólidas presentes en el lecho (donde se lleva a cabo la reacción) sean suspendidas y arrastradas por el gas que sube por la columna, derivando en un movimiento continuo de éstas.

Este último caso consiste en variar el valor de  $u_0$ . En la Tabla 2.7 se muestran las condiciones iniciales de operación del sistema, al igual que los valores correspondientes a la velocidad del gas de entrada  $u_0$ , de los cuales, con referencia al valor ocupado en el Caso Base de 0.30 m/s, se decidió probar los siguientes valores: 0.15 m/s, 0.45 m/s y 2.00 m/s, para el análisis del caso. Con el fin de obtener, observar y analizar el cambio en la concentración del reactivo de interés  $A$  a la salida del reactor, considerando la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}$ , la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , y la *total*,  $C_A$ . Se calcula también la conversión del reactivo de interés correspondiente a cada una de dichas concentraciones:  $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$ .

Para el análisis del caso, se retoman las ecuaciones definidas en el Capítulo I que describen la mecánica de la burbuja y la transferencia másica entre las *fase-burbuja* y *fase-emulsión* en función de la velocidad superficial del gas, parámetro importante en el rendimiento del sistema de lecho fluidizado.

Velocidad de ascenso de las burbujas en un lecho burbujeante:

$$u_b = u_0 - u_{mf} + u_{br}$$

Fracción de burbujas en el lecho:

$$\delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b}$$

Altura del lecho en condiciones de fluidización:

$$H = \frac{H_0}{(1 - \delta)}$$

Parámetro  $\beta$  (fracción de gas que pasa en el lecho como burbujas):

$$\beta = 1 - \frac{u_{mf}}{u_0}$$

Parámetro cinético  $\kappa'$ :

$$\kappa' = \frac{k H_0}{u_0}$$

De acuerdo con las ecuaciones presentadas, es importante el análisis que se obtenga de las variaciones que se realicen en la velocidad superficial del gas, sobre las condiciones operativas del sistema, permitiendo observar el efecto de esta acción, sobre la capacidad del reactor para convertir reactivo en producto deseado.

Tabla 2.7 Condiciones de operación del RLF con velocidad superficial de gas de entrada,  $u_0$ , variable.

Parámetro	Letra	Valor	Unidades
Velocidad superficial del gas en el lecho.	$u_0$	0.15	m/s
		0.3	
		0.45	
		2.00	
Velocidad mínima de fluidización.	$u_{mf}$	0.03	m/s
Fracción de huecos de fluidización incipiente.	$\epsilon_{mf}$	0.5	[adim]
Diámetro de burbuja.	$d_b$	0.32	m
Aceleración de la gravedad.	$g$	9.8	$m/s^2$
Difusividad.	$D$	$20 \times 10^{-6}$	$m^2/s$
Densidad del sólido.	$\rho_s$	2000	$kg/m^3$
Masa de catalizador.	$W$	7000	kg
Diámetro del reactor.	$d_R$	2.00	m
Concentración inicial de la especie A.	$C_{A0}$	100	$mol/m^3$

### Condiciones a la salida del lecho fluidizado

Los resultados obtenidos del modelado D-H/PFR para el caso 3 se presentan en la Tabla 2.8, donde se muestran los parámetros que se vieron afectados al variar la velocidad superficial del gas de entrada (renglones 1 a 8). También se integra en la tabla las concentraciones y conversiones de la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$ ,  $X_{Ab}$ ), *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$ ,  $X_{Ae}$ ), y *total* ( $C_A$ ,  $X_A$ ), (renglones 9 a 14 ) que se obtienen con una velocidad superficial del gas de 0.15 m/s (4ª columna), de 0.45 m/s (columna 6) y de 2.00 m/s (7ª columna). Sumado a estos resultados, se integran los valores obtenidos en el Caso Base, como referencia del estudio, con una velocidad del gas de entrada de 2 m/s (5ª columna).

La acción de aumentar la velocidad superficial del gas  $u_0$  impacta negativamente en la conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*. Para esta acción, se tienen valores muy bajos del parámetro cinético  $\kappa'$ , donde se presenta una elevada expansión del lecho en condiciones de fluidización,  $H$ , (provocado por el aumento en la fracción de burbujas presentes en el lecho  $\delta$ ), al igual que una alta velocidad de ascenso de burbujas,  $u_b$ . La capacidad de transferir materia entre fases descrita por  $X$ , no se ve afectada a pesar de depender directamente del parámetro analizado en este caso. Es por ello que, se realizó un análisis de estos parámetros, junto con la fracción de gas que pasa a través del lecho como burbujas, parámetro  $\beta$ , el cual se ve afectado con un ligero aumento en esta ocasión.

Tabla 2.8 Resultados obtenidos al variar la velocidad superficial de gas de entrada  $u_0$ .

#	Parámetro	Letra	$u_0$ 0.15 m/s	$u_0$ 0.3 m/s	$u_0$ 0.45 m/s	$u_0$ 2 m/s	Unidades
1	Velocidad absoluta de ascenso de las burbujas en un lecho.	$u_b$	1.37909	1.52909	1.67909	3.22909	m/s
2	Fracción de burbujas en el lecho.	$\delta$	0.0870137	0.17657	0.250135	0.610079	[adim]
3	Fracción de huecos del lecho fluidizado.	$\epsilon_f$	0.543507	0.58828	0.625068	0.805039	[adim]
4	Parámetro adimensional X.	X	1.08693	1.08693	1.08693	1.08693	[adim]
5	Parámetro adimensional $\beta$ .	$\beta$	0.8	0.9	0.93333	0.985	[adim]
6	Parámetro adimensional $k'$ .	$\kappa'$	12.022	6.01099	4.00733	0.901649	[adim]
7	Altura del lecho en condiciones de fluidización.	H	2.44053	2.70597	2.97143	5.71441	m
8	Aumento de la columna de lecho.	$\Delta H$	0.21236	0.477809	0.743258	3.48624	m
9	Concentración del reactivo en la emulsión.	$C_{Ae}$	2.5295	5.65	8.7059	33.3505	mol/m <sup>3</sup>

La Tabla 2.8 continúa en la página siguiente.

REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, MODELO: D-H/PFR

#	Parámetro	Letra	$u_0$ 0.15 m/s	$u_0$ 0.3 m/s	$u_0$ 0.45 m/s	$u_0$ 2 m/s	Unidades
10	Concentración del reactivo en la burbuja.	$C_{Ab}$	36.912	39.87	42.601	61.2062	mol/m <sup>3</sup>
11	Concentración <i>total</i> del reactivo en el lecho.	$C_A$	30.0355	36.45	40.3413	60.7883	mol/m <sup>3</sup>
12	Conversión del reactivo en la emulsión.	$X_{Ae}$	97.4705	94.34	91.2941	66.6495	%
13	Conversión del reactivo en la burbuja.	$X_{Ab}$	63.088	60.12	57.399	38.7938	%
14	Concentración <i>total</i> del reactivo en el lecho.	$X_A$	69.9645	63.54	59.6587	39.2117	%

En la Figura 2.4 se ilustran las condiciones de arranque y en estado estacionario del modelado. En (a) se muestra la expansión del lecho de 2.44 m con una velocidad de gas de 0.15 m/s, donde se obtiene una conversión *total* del reactivo de 69.96 %; (b) a una velocidad de gas de 0.3 m/s (condiciones en estado estacionario del Caso Base); (c) a una velocidad de gas de 0.45 m/s se obtiene una conversión *total* del reactivo de 59.66 % y una expansión del lecho de 2.971 m y, finalmente, en (d) se registra una conversión *total* del reactivo de 39.21 % y una expansión del lecho de 5.714 m, a una velocidad superficial del gas de entrada de 2 m/s.

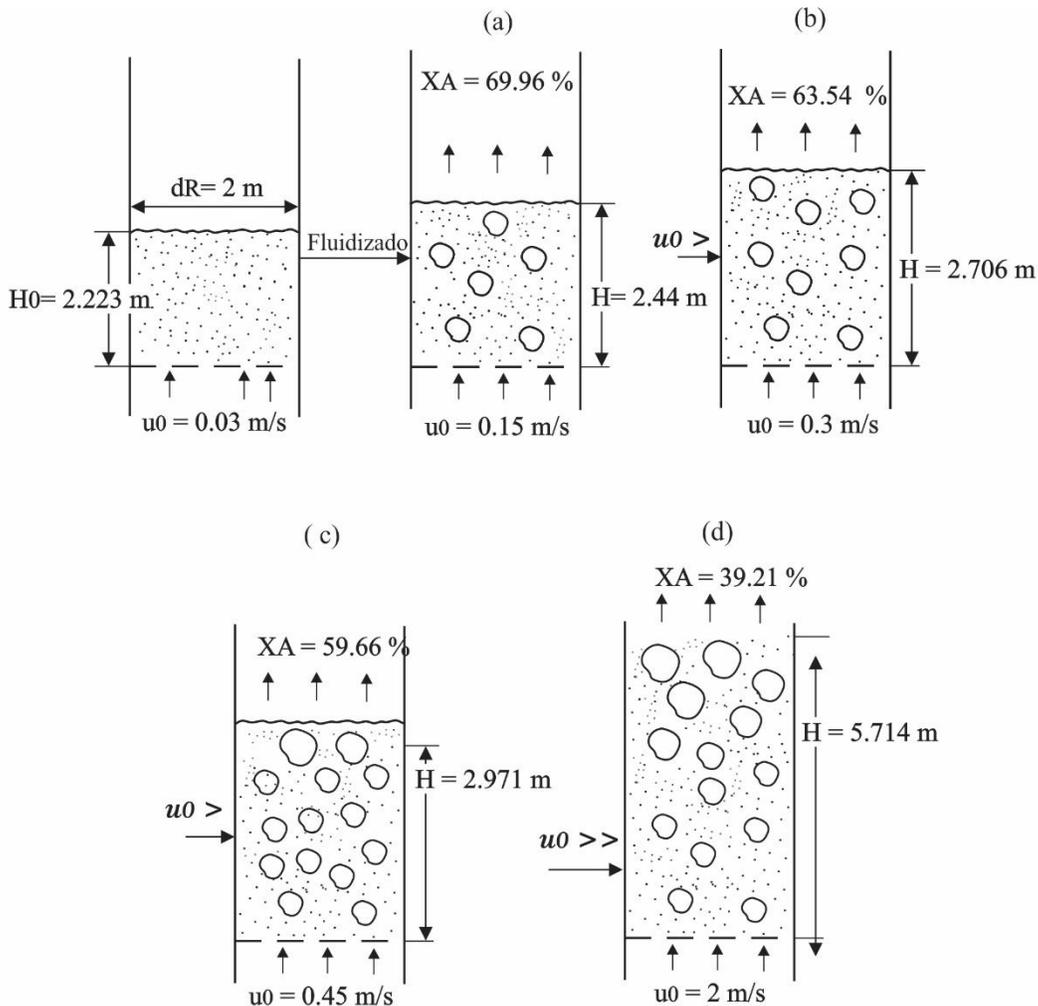
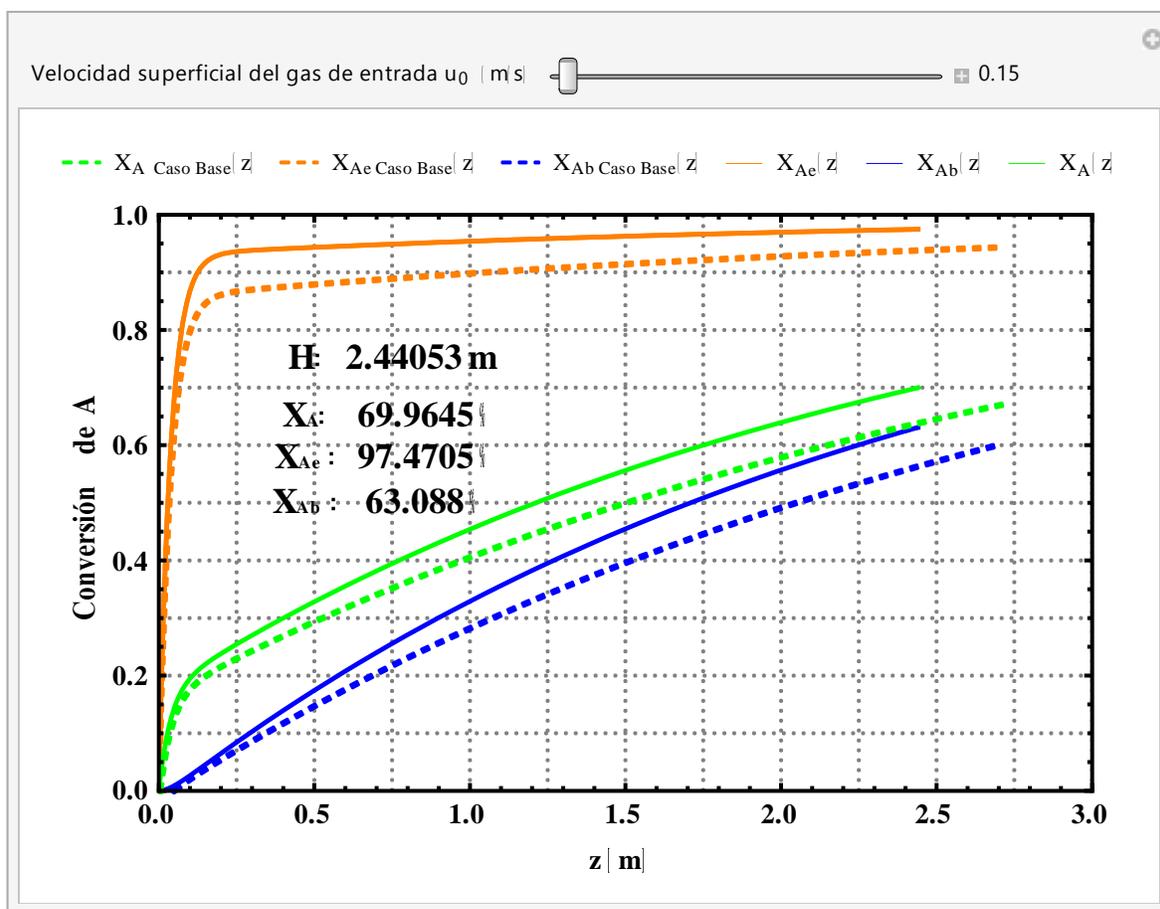


Figura 2.4 Aumento progresivo de la velocidad superficial del gas en el lecho, mostrando las diferentes condiciones derivadas de este aumento.

### Composición a lo largo del lecho fluidizado

Una vez reportadas las condiciones de la corriente de salida (altura máxima del lecho fluidizado,  $z=H$ ) en la Tabla 2.8 y la Figura 2.4, en términos de la concentración molar ( $C_{Ae}$ ,  $C_{Ab}$  y  $C_A$ ) y conversión porcentual ( $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$ ) del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, la *fase-emulsión* y la *total*, respectivamente, se procedió a calcular la composición a lo largo del lecho fluidizado ( $0 \leq z \leq H$ ) en términos de conversión porcentual ( $X_{Ae}(z)$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$ ) del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, la *fase-emulsión* y la *total*, respectivamente.

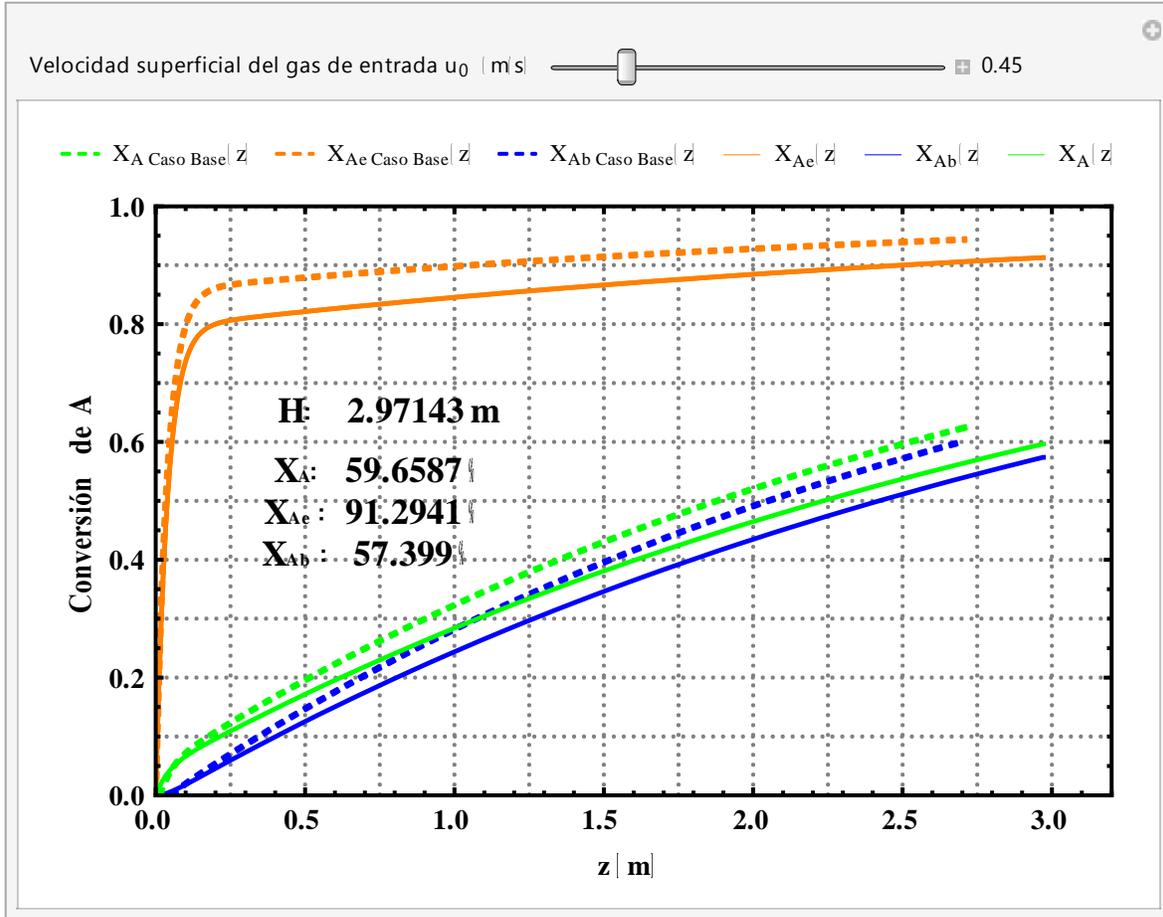
En las Gráficas 2.9, 2.10 y 2.11 se presentan los perfiles de la conversión porcentual del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, en color azul  $X_{Ab}(z)$ , *fase-emulsión*, con el naranja  $X_{Ae}(z)$ , y *total*, con verde  $X_A(z)$ , en función de la altura ( $0 \leq z \leq H$ ) para los casos de velocidades de gas diferentes (Gráfica 2.9,  $u_0 = 0.15$  m/s; Gráfica 2.10,  $u_0 = 0.45$  m/s; Gráfica 2.11,  $u_0 = 2$  m/s). En cada gráfica se presentan los perfiles obtenidos en el Caso Base (línea discontinua) como referencia del estudio.



Gráfica 2.9 Perfiles de conversión de A en un RLF, para una velocidad superficial de gas de entrada ( $u_0$ ) de 0.15 m/s bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con  $u_0=0.3$  m/s (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ac}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

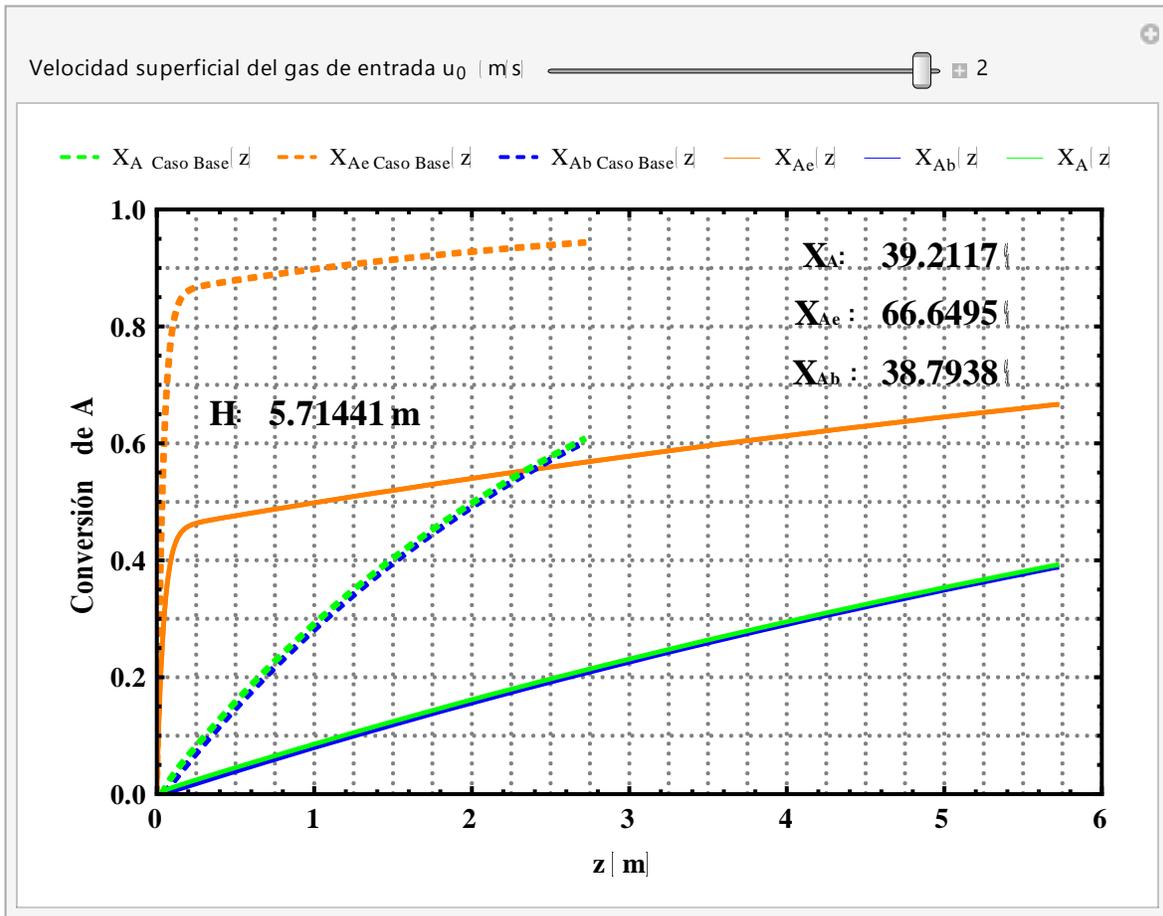
En la Gráfica 2.9 se observa en todo momento que los perfiles de conversión de  $X_{Ac}(z)$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$  aumentan con una menor velocidad superficial del gas (línea continua), con respecto a los perfiles de conversión del Caso Base (línea discontinua). Con  $u_0=0.15$  m/s se tuvo una expansión del lecho de 2.44 m y una conversión *total* del reactivo de 69.96 %, mientras que con  $u_0=0.3$  m/s (Caso Base) la expansión del lecho es de 2.706 m y la conversión *total* de reactivo fue de 63.54 %. En el análisis de los casos 1 y 2, se hizo énfasis en la importancia que tenía la diferencia de expansión de lechos  $\Delta H$  sobre la conversión del reactivo, ya que se determinó que entre mayor sea esta distancia, las burbujas tardarían más en atravesar el lecho, lo que se traduce en un mayor tiempo de residencia para el intercambio de materia entre las fases.

Para dicha velocidad de gas, se tiene una expansión menor a la del Caso Base, sin embargo, se obtuvieron conversiones altas del reactivo, debido principalmente al parámetro cinético  $\kappa'$ , ya que su valor se elevó al doble con respecto al Caso Base, como se puede verificar en la Tabla 2.8. Todo lo anterior se traduce en que la conversión porcentual del reactivo de interés que tiene el lecho en su conjunto (*total*) en la parte superior del lecho fluidizado es claramente mayor en el sistema con velocidad superficial de gas menor.



Gráfica 2.10 Perfiles de conversión de A en un RLF, para una velocidad superficial de gas de entrada ( $u_0$ ) de 0.45 m/s bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con  $u_0=0.3$  m/s (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 2.10 los perfiles de conversión de  $X_{Ae}(z)$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$  con mayor velocidad superficial del gas (línea continua) son menores en todo momento, comparados con los perfiles de conversión del Caso Base (línea discontinua). Con  $u_0=0.45$  m/s se tuvo una expansión del lecho de 2.97 m y una conversión *total* del reactivo de 59.66 %, mientras que con  $u_0=0.3$  m/s (Caso Base) la expansión del lecho fue de 2.706 m y la conversión *total* de reactivo fue de 63.54 %, contrario a la gráfica anterior. Las conversiones del Caso Base quedan por arriba de los resultados modelados con  $u_0$  mayor. La acción de aumentar la velocidad superficial del gas provoca un aumento en la altura máxima del lecho, sin embargo, para el análisis de este caso, la altura no parece favorecer la obtención de producto deseado, también, ocurre una ligera disminución del parámetro cinético  $\kappa'$ , con respecto al Caso Base.



Gráfica 2.11 Perfiles de conversión de A en un RLF, para una velocidad superficial de gas de entrada ( $u_0$ ) de 2 m/s bajo el modelo D-H/PFR (línea continua), perfiles del Caso Base con  $u_0=0.3$  m/s (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 2.11 se modeló con una velocidad superficial del gas de 2 m/s, 6.6 veces mayor a la del Caso Base (0.3 m/s). Se observa, como en la gráfica 2.10, que los perfiles de conversión de  $X_{Ae}(z)$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$  con mayor velocidad superficial del gas (línea continua) son mucho menores en todo momento, comparados con los perfiles de conversión del Caso Base (línea discontinua), lo cual se traduce en que la conversión porcentual del reactivo de interés que tiene el lecho en su conjunto en la parte superior del lecho fluidizado ( $X_A = X_A(H)$ ) es claramente menor en el sistema con velocidad superficial de gas mayor. Para  $u_0 = 2$  m/s se tuvo una expansión del lecho ampliamente mayor de 5.71 m y una conversión *total* del reactivo de tan solo 39.21 %, mientras que con  $u_0 = 0.3$  m/s (Caso Base) la expansión del lecho fue de 2.706 m y la conversión *total* de reactivo fue de 63.54 %. Los resultados de la Tabla 2.8 muestra la clara disminución del parámetro cinético, lo cual es determinante para que se presenten perfiles bajos de la *fase-emulsión* y *fase-burbuja* en la presente gráfica. Una observación importante recae sobre el perfil de la conversión *total* del reactivo  $X_A(z)$  (línea verde), la cual, se observa en las Gráficas 2.9, 2.10 y 2.11, el perfil de  $X_A(z)$  tiende acerca al perfil de la *fase-burbuja*  $X_{Ab}(z)$  (línea azul), debido al aumento en el valor del parámetro  $\beta$ , indicando que la mayor parte de gas que pasa a través del lecho, lo hace dentro de la *fase-burbuja*.

### Análisis

En el Caso 3 se aplicó el modelo D-H/PFR para simular cuál es el efecto de cambiar la velocidad superficial del gas  $u_0$ , sobre la conversión porcentual del reactivo de interés en las dos fases que constituyen el lecho fluidizado (*fase-burbuja*  $X_{Ab}$ , la *fase-emulsión*  $X_{Ae}$ ) y del lecho fluidizado en su conjunto,  $X_A$ . La acción de incrementar la velocidad superficial del gas, se tradujo en una disminución en la capacidad del lecho fluidizado para convertir el reactivo en producto. Para explicarlo, se desarrolló un análisis de cómo cambiaron los parámetros del RLF que dependen directamente del valor de  $u_0$ . Con esa información se explica por qué al aumentar  $u_0$ , disminuye  $X_{Ab}$ ,  $X_{Ae}$  y  $X_A$ , analizando los procesos físicos y químicos que contempla el modelo D-H/PFR.

### Parámetros que dependen de $u_0$

En seguida se analizan los parámetros del modelo D-H/PFR que están relacionados directa e indirectamente con  $u_0$ , mostrando el cambio que sufren cuando el valor de esta variable se modifica. Al igual que en el análisis de los dos casos 1 y 2, se retoma el uso de una flecha dirigida hacia abajo ( $\downarrow$ ) o hacia arriba ( $\uparrow$ ), dependiendo de si el parámetro en cuestión disminuye o aumenta, respectivamente. Las ecuaciones del modelo D-H/PFR que dependen directamente de  $u_0$  se revisan considerando un aumento en la velocidad superficial del gas (i.e.  $\uparrow u_0$ ).

Velocidad de ascenso de todas las burbujas en el lecho,  $u_b$ :

$$u_b = u_0 - u_{mf} + u_{br}$$

Por lo tanto:  $\uparrow u_0$  implica que  $\uparrow u_b$

El aumento en la velocidad de ascenso de todas las burbujas a través del lecho,  $u_b$ , se traduce en una disminución en el tiempo que tienen las burbujas de transferir el reactivo para transformarse en producto.

Fracción de huecos del lecho fluidizado,  $\delta$ :

$$\delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b}$$

Por lo tanto:  $\uparrow u_0$  implica que  $\uparrow \delta$

Lo cual se traduce como una mayor cantidad de espacio “vacío”, realmente, ocupado con gas.

Los parámetros que describen la transferencia de masa convectiva, difusiva y global, entre fases  $q$ ,  $k_g$  y  $Q$ , respectivamente, no fueron reportados en los resultados de la modelación (Tabla 2.8), ya que su valor para una sola burbuja no cambia al variar  $u_0$ . Sin embargo, cuando se contemplan estos mismos parámetros para todas las burbujas presentes en el lecho, su valor depende de la cantidad total de burbujas,  $N_b$ , y, por consecuencia, de  $u_0$ . Por tales motivos, se consideró necesario analizar cómo se relaciona la velocidad superficial del gas de entrada  $u_0$  con  $N_b$ ,  $S_t$ ,  $q_t$ ,  $k_{gt}$  y  $Q_t$ ; para ello se procedió como sigue.

Número de burbujas presentes en el lecho:

$$N_b = \frac{6\delta}{\pi d_b^3}$$

Donde  $\delta$  es la fracción de huecos en el lecho fluidizado, que en términos del diámetro de burbuja  $u_0$  es:

$$\delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b}$$

Por lo tanto, el número total de burbujas presentes en el lecho,  $N_b$ , es:

$$N_b = \frac{6}{\pi d_b^3} \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right)$$

Por lo tanto:  $\uparrow u_0$  ello implica que  $\uparrow N_b$

Área total de transferencia de masa en el lecho fluidizado,  $S_t$ , es:

$$S_t = (\pi d_b^2) \left[ \frac{6}{\pi d_b^3} \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right) \right] = \frac{6}{d_b} \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right)$$

Por lo tanto, si  $\uparrow u_0$  ello implica que  $S_t \uparrow$

Flujo volumétrico de transferencia de masa entre dichas fases a través de todas las burbujas,  $q_t$ , es:

$$q_t = N_b q = \left( \frac{6}{\pi d_b^3} \right) \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right) \left( \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2 \right) = \frac{9u_{mf}}{2d_b} \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right)$$

Por lo tanto, si  $\uparrow u_0$  ello implica que  $q_t \uparrow$

Coefficiente de transporte entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*,  $k_{gt}$ , de todas las burbujas:

$$k_{gt} = N_b k_g = \left( \frac{6}{\pi d_b^3} \right) \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right) \left( 0.975 \sqrt{D} \left( \frac{g}{d_b} \right)^{1/4} \right) = \frac{5.85 \sqrt{D} g^{1/4}}{\pi d_b^{3.25}} \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right)$$

Por lo tanto, si  $\uparrow u_0$  ello implica que  $k_{gt} \uparrow$

Coefficiente global de transporte para todas las burbujas:

$$Q_t = q_t + k_{gt}S_t$$

$$Q_t = \frac{9u_{mf}}{2d_b} \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right) + \left( \frac{5.85\sqrt{D}g^{1/4}}{\pi d_b^{3.25}} \right) \left( \frac{6}{d_b} \right) \left( \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right)$$

$$Q_t = \left[ \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b} \right] \left[ \frac{9u_{mf}}{2d_b} + \left( \frac{35.1\sqrt{D}g^{1/4}}{\pi d_b^{4.25}} \right) \right]$$

Por lo tanto, si  $\uparrow u_0$  ello implica que  $Q_t \uparrow$

Al aumentar la velocidad superficial del gas  $u_0$ , aumentan el área total de transferencia del lecho,  $S_t$ , el flujo volumétrico total,  $q_t$ , el coeficiente de transporte entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión* de todas las burbujas,  $k_{gt}$ , y, con ello, el coeficiente global de todas las burbujas  $Q_t$ . Esto se corrobora con la fracción de huecos  $\delta$ , el cual aumentó a la acción de elevar  $u_0$ , lo que se traduce en una mayor cantidad de espacio “vacío” (realmente ocupado por gas en forma de burbujas). Sin embargo, la conversión del reactivo de interés a la salida del lecho, no se ve beneficiada, ya que a pesar de tener un aumento en la capacidad de transferir materia entre fases, no es factor suficiente para compensar el poco tiempo de residencia de las burbujas dentro del lecho, debido al aumento en su velocidad de ascenso  $u_b$ , lo cual puede derivar en un fenómeno de coalescencia (no considerado en la ecuación), donde las burbujas tienden a aumentar su tamaño conforme avanzan en el lecho, disminuyendo el número de éstas,  $N_b$ .

En este fenómeno de coalescencia, dos burbujas con diámetro inicial  $d_b$  pueden combinarse en burbujas de dos veces este diámetro  $2d_b$ ; puesto que las burbujas más grandes se elevan más rápido (como se vio en el caso 1 “diámetro de burbuja variable” del presente capítulo), estas burbujas de doble volumen se combinarán con otras burbujas de diámetro unitario  $d_b$ , para producir burbujas de tres veces el diámetro inicial  $3d_b$ . Nuevamente, al tener una burbuja más grande, se elevará aún más rápido, en su camino se fusionará con burbujas de diámetro unitario o dos veces el diámetro inicial, como se ilustra en la Figura 2.5.

Las burbujas eventualmente pueden ser lo suficientemente grandes como para cubrir toda la sección transversal de la columna, generando un taponamiento, y, con ello, bajos valores en  $S_t$ ,  $q_t$ ,  $k_{gt}$  y  $Q_t$ . Por esta razón, el aumento en la velocidad superficial del gas, provoca que en la simulación se tengan conversiones bajas del reactivo de interés.

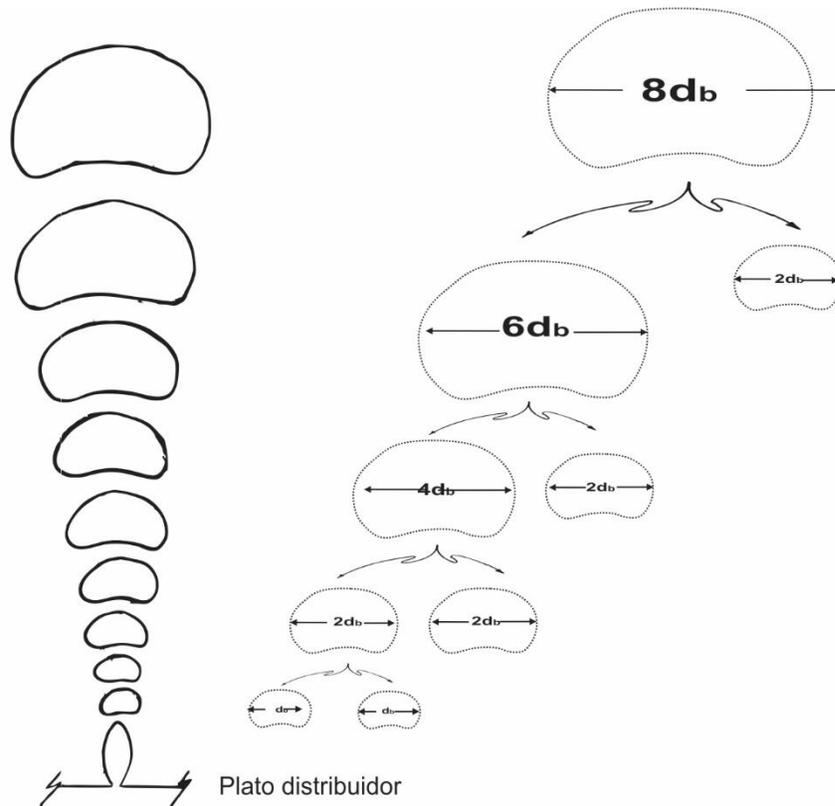


Figura 2.5 Fenómeno de coalescencia en las burbujas presentes en el lecho fluidizado.

Altura del lecho fluidizado,  $H$ , en condiciones normales de fluidización:

$$H = \frac{H_0}{1 - \delta}$$

Por lo tanto:  $\uparrow \delta$  implica que  $H \uparrow$

Al aumentar la altura del lecho fluidizado en condiciones normales de fluidización, se supondría contar con un mayor tiempo de residencia, y, con ello, una mayor zona de reacción, sin embargo, la velocidad de ascenso de las burbujas es tal que no permite obtener un mayor tiempo de residencia, ni zona de reacción.

Parámetro adimensional  $X$ :

El parámetro que describe la facilidad de transferencia de masa entre fases,  $X$ , se relaciona con la velocidad del gas de entrada  $u_0$  a través de la velocidad de ascenso de las burbujas  $u_b$  y de la altura del lecho en condiciones normales de fluidización,  $H$ . Sin embargo, en la Tabla 2.8, el valor de este parámetro no cambia en ninguno de los valores asignados de  $u_0$ . Esto se debe a que el coeficiente global de transporte,  $Q$ , y el volumen promedio de burbujas,  $V$ , no son sensibles a los cambios de  $u_0$  y a la existencia de una razón constante entre las variables  $H$  y  $u_b$ , provocando que la transferencia de masa entre ambas fases,  $X$ , (para todas las velocidad de gas superficial modeladas) sea la misma, como se muestra en la Tabla 2.9.

$$X = \frac{QH}{Vu_b}$$

Tabla 2.9 Razón constante entre la altura del lecho en condiciones normales de fluidización,  $H$ , y la velocidad se ascenso de las burbujas en el lecho  $u_b$ .

Parámetro	Letra	$u_0$	$u_0$	$u_0$	$u_0$	Unidad
		0.15 m/s	0.3 m/s	0.45 m/s	2 m/s	
		Valor	Valor	Valor	Valor	
Coefficiente global de transporte.	Q	0.010	0.010	0.010	0.010	m <sup>3</sup> /s
Volumen de burbuja.	V	0.017	0.017	0.017	0.017	m <sup>3</sup>
Velocidad de ascenso de las burbujas.	$u_b$	1.37909	1.52909	1.67909	3.22909	m/s
Altura del lecho en condiciones de fluidización.	H	2.44053	2.70597	2.97143	5.71441	m
Razón constante.	$u_b/H$	1.76966	1.76966	1.76966	1.76966	1/s
Parámetro adimensional.	X	1.08693	1.08693	1.08693	1.08693	[adim]

Parámetro adimensional  $\beta$ :

$$\beta = 1 - \frac{u_{mf}}{u_0}$$

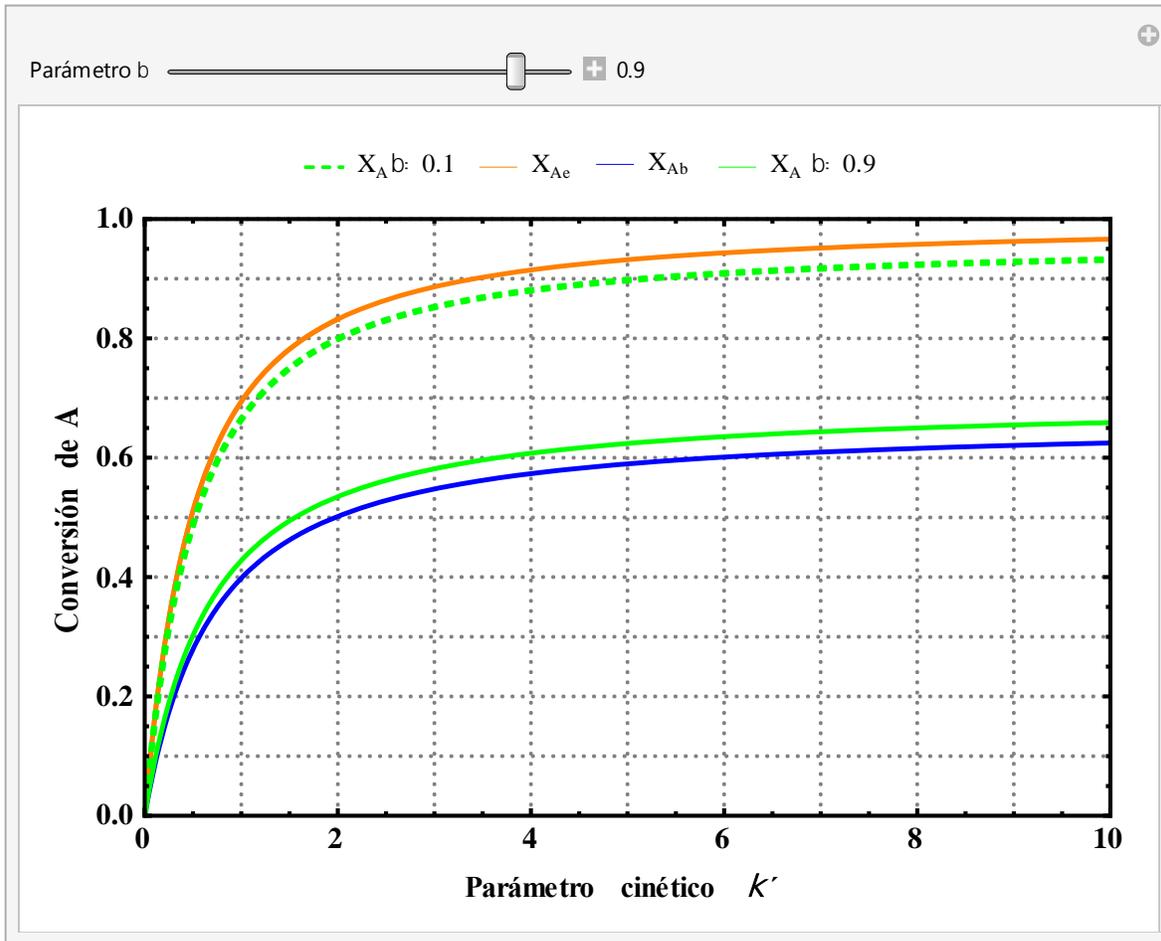
Por lo tanto:  $\uparrow u_0$  ello implica que  $\uparrow \beta$

El parámetro de estudio  $u_0$  guarda una relación directa con  $\beta$ , el cual describe la fracción de gas que atraviesa el lecho en la *fase-burbuja*, es decir, cuando  $\beta \rightarrow 1$ , el gas presente en el lecho lo atraviesa dentro de la *fase-burbuja*. Por otro lado, cuando  $\beta \rightarrow 0$ , la mayor parte del gas está presente en la *fase-emulsión*. El análisis reveló que el aumento en  $u_0$  provoca que el parámetro  $\beta$  se viera beneficiado, lo cual impacta sobre la conversión *total* del reactivo  $X_A$  en la corriente de salida del RLF ( $z=H$ ), como en su paso por el lecho ( $0 \leq z \leq H$ ), de modo que el perfil de  $X_A(z)$  es más cercano al perfil de la *fase-burbuja*  $X_{Ab}(z)$ . Para ejemplificar lo anterior, en la Gráfica 2.12 se muestra el perfil de  $X_A(z)$  para dos valores diferentes de  $\beta$ . Con un valor de  $\beta = 0.1$ , el perfil de  $X_A(z)$  (línea verde discontinua), es más cercano al perfil de la *fase-emulsión*  $X_{Ae}(z)$ , con lo cual se tendrían altos porcentajes de conversión a la salida del lecho fluidizado; mientras que al tener un valor de  $\beta = 0.9$ , el perfil de  $X_A(z)$  (línea verde continua), es más cercano al perfil de la *fase-burbuja*, como se comprueba en el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$C_A = \beta C_{Ab} + (1 - \beta) C_{Ae} \quad (43)$$

$$\text{Si } \beta \rightarrow 1 \quad C_A = \beta C_{Ab} + \underbrace{(1 - \beta)}_0 C_{Ae} \quad \therefore \quad C_A = C_{Ab}$$

$$\text{Cuando } \beta \rightarrow 0 \quad C_A = \underbrace{\beta C_{Ab}}_0 + \underbrace{(1 - \beta)}_1 C_{Ae} \quad \therefore \quad C_A = C_{Ae}$$



Gráfica 2.12 Perfiles de conversión de A en un RLF para valores del parámetro  $\beta$  de 0.9 (línea verde continua) y 0.1 (línea verde discontinua) bajo el modelo D-H/PFR, en función del parámetro cinético ( $\kappa'$ ).

Parámetro adimensional  $\kappa'$ :

$$\kappa' = \frac{k H_0}{u_0}$$

Por lo tanto:  $\uparrow u_0$  implica que  $\downarrow \kappa'$

El parámetro más afectado a la acción de aumentar  $u_0$ , es el parámetro cinético  $\kappa'$ , debido a su relación inversamente proporcional con  $u_0$ , inhibiendo la transformación de reactivo en producto, por la reducción del tiempo de contacto de las burbujas con la zona de reacción. Por el contrario, la disminución de  $u_0$  provoca un amplio aumento en el valor de  $\kappa'$  (como se puede observar en la Tabla 2.8), favoreciendo la transformación de reactivo.

Sin embargo por más que aumente el valor del parámetro cinético, no se tendrá una transformación total del reactivo en la corriente de salida del lecho fluidizado. En la Gráfica 2.12, se muestra la conversión porcentual del reactivo en función del parámetro cinético  $\kappa'$ , donde se observa que conforme se avanza en el perfil de la *fase-emulsión*, se tiene una conversión muy alta del reactivo, pero no provoca que en la *fase-burbuja* y *total* se tengan altas conversiones del reactivo.

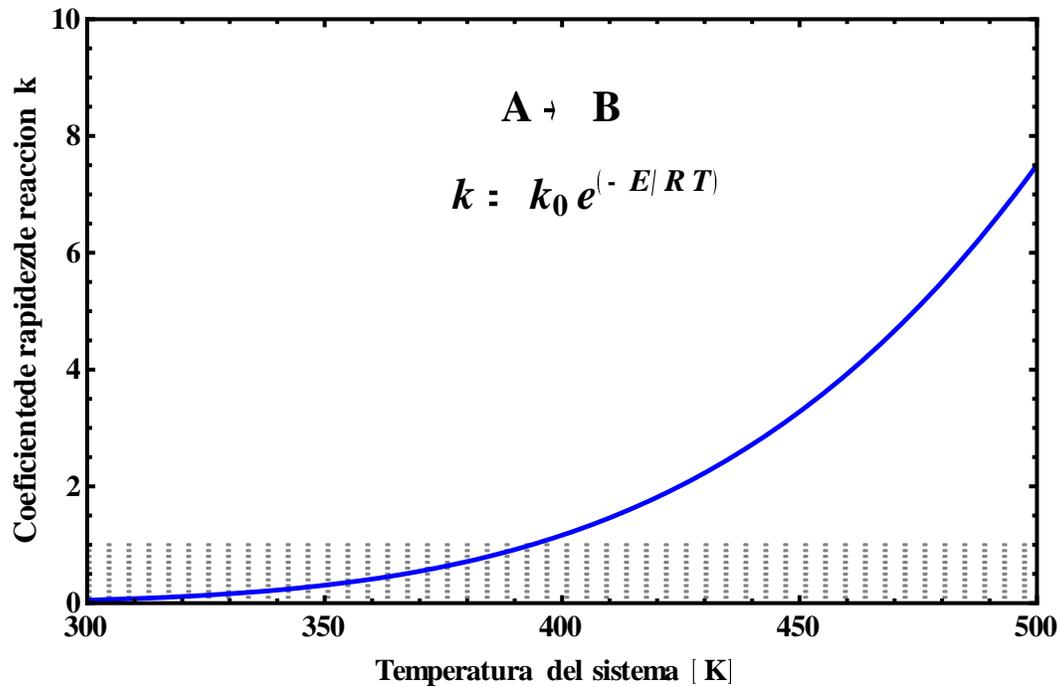
Para el parámetro cinético adimensional  $\kappa'$ , en el presente caso, se varió la velocidad superficial del gas  $u_0$ , mientras que en el caso 2 (“diámetro de reactor variable”) de este capítulo, se modificó la altura inicial del lecho  $H_0$ , con lo cual, el coeficiente de reacción es el único parámetro que no se ha variado. Es por ello que, a manera de complementar el análisis, se estudia la dependencia de la temperatura (dada por la ecuación de Arrhenius) sobre el coeficiente de rapidez de reacción, mediante la Gráfica 2.13, y las ecuaciones que se muestra a continuación.

$$k = k_0 \exp(-E/RT)$$

Por lo tanto:  $\uparrow T$  implica que  $\uparrow k$

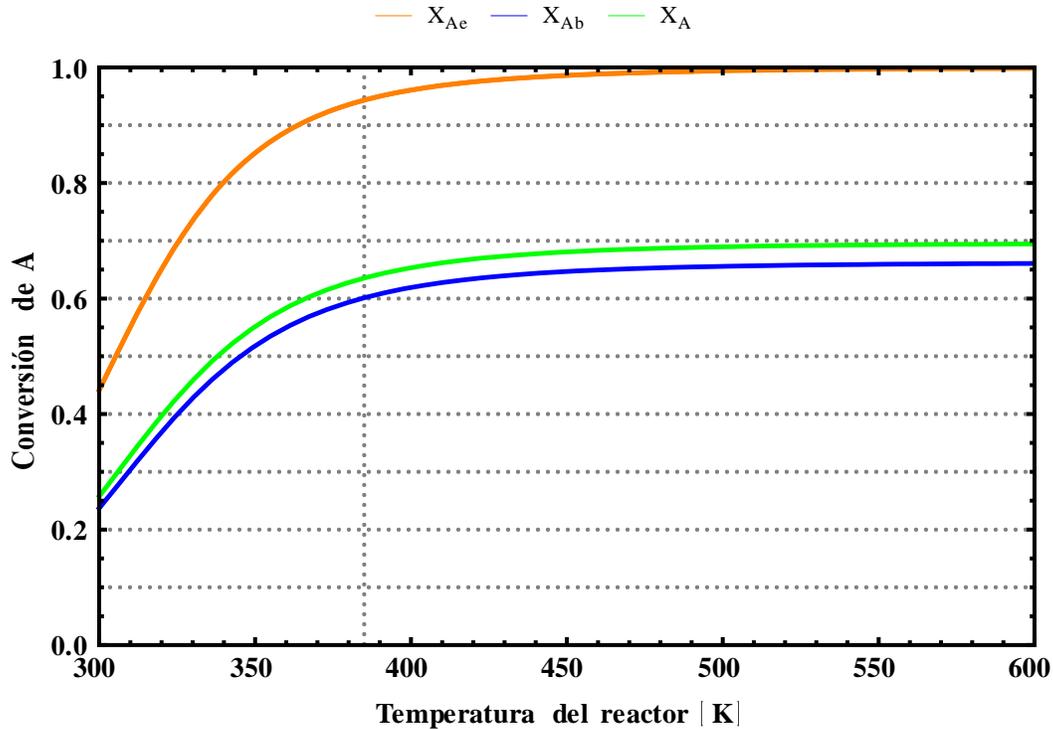
$$\kappa' = \frac{k H_0}{u_0}$$

Por lo tanto:  $\uparrow k$  ello implica que  $\uparrow \kappa'$



Gráfica 2.13 Coeficiente de rapidez de reacción en función de la temperatura del sistema.

La acción de aumentar la temperatura del sistema repercute positivamente en el coeficiente de rapidez de reacción  $k$ , lo cual se traduce en una mayor capacidad de transformar reactivo en producto. La acción de aumentar  $k$  deriva en un aumento en el parámetro cinético  $\kappa'$ . En la Gráfica 2.14 se muestra la conversión del reactivo en función de la temperatura del sistema, donde se observa que al aumentar la temperatura, el perfil de la conversión de la *fase-emulsión*  $X_{Ae}(z)$  alcanza una conversión del reactivo cercana al 99 %, el perfil de conversión de la *fase-burbuja*  $X_{Ab}(z)$  tan solo logra una conversión del 65 %, y el perfil de conversión del lecho en su conjunto  $X_A(z)$  alcanza una conversión del reactivo de 70 %. Además, se observa que a partir de una temperatura cercana a los 450 K, los perfiles de conversión de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total* dejan de aumentar y permanecen constantes. Lo anterior indica que la obtención de una mayor conversión del reactivo depende principalmente en la capacidad del sistema en transferir materia de una fase a otra.



Gráfica 2.14 Perfiles de conversión de A en un RLF bajo el modelo D-H/PFR, en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la temperatura del reactor.

Balance en la *fase-burbuja*:

El incremento en  $u_0$  resulta en un aumento de la altura del lecho en condiciones normales de fluidización  $H$ , lo que implicaría un mayor tiempo de intercambio de reactivo-producto en la burbuja. Sin embargo, la disminución en la capacidad de transformar reactivo en producto en la *fase-emulsión*, acompañado con el aumento en la velocidad de ascenso de las burbujas  $u_b$ , provoca que el aumento en la altura del lecho no sea un factor positivo para la disminución en la concentración del reactivo, derivando en altas concentración del reactivo en la corriente de salida del lecho.

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{X}{H}(C_{Ab} - C_{Ae}) = 0$$

Balance en la *fase-emulsión*:

El aumento en  $u_0$  disminuye considerablemente el valor del parámetro cinético  $\kappa'$ , el cual contribuye negativamente en el balance de materia de la *fase-emulsión*, donde se lleva a cabo la reacción. El aumento de  $\beta$ , indica que la mayor contribución de gas a la salida del reactor es por parte de la *fase-burbuja*, como se muestra en el segundo término de la ecuación, mientras que en el primer término se muestra la casi nula contribución de gas que se tiene de la *fase-emulsión* en la corriente de salida.

$$(1 - \beta) \frac{dC_{Ae}}{dz} + \beta \frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{\kappa'}{H} C_{Ae} = 0$$

Conversión *total* del reactivo:

Derivado del impacto negativo en el balance de la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*, no disminuye considerablemente la concentración del reactivo de interés a la salida del reactor, lo cual implica bajos porcentajes de conversión del reactivo.

$$C_A = \beta C_{Ab} + (1 - \beta) C_{Ae}$$

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

Por lo tanto:  $\uparrow C_A$  ello implica que  $\downarrow X_A$

### Conclusión

En este análisis se observó que mayores velocidades superficiales de gas conducen a una expansión mucho mayor del lecho,  $H$ , al permanecer constante la altura inicial del lecho,  $H_0$ , la diferencia de altura  $\Delta H$  se incrementa considerablemente al igual que la fracción de burbujas en lecho  $\delta$ , lo que se traduce en un mayor espacio ocupado por el gas que atraviesa el lecho con una mayor velocidad de ascenso  $u_b$ . El parámetro cinético  $\kappa'$  se ve ampliamente reducido, debido a la disminución en el tiempo de residencia de las burbujas dentro del lecho (por ascender con mayor velocidad). Es por ello que, la conversión lograda del reactivo va siendo cada vez menor, provocando además un sobredimensionamiento del reactor, debido a la altura final del lecho en condiciones normales de fluidización,  $H$ .

Otra de las razones para la obtención de bajas conversiones a la acción de aumentar la velocidad superficial del gas, se debe a la presencia de un fenómeno de coalescencia (no tomado en cuenta en el modelo) en las burbujas, el cual, con frecuencia, se presenta al operar a altas velocidades. Por todas estas razones mencionadas, resulta importante el estudio del parámetro  $u_0$ .

Una de las relaciones más interesantes, fue la del parámetro  $\beta$  (fracción de gas que pasa a través del lecho como burbujas) con  $u_0$ . El aumento de  $\beta$  indica que la mayor parte del gas que se inyecta en la columna tiende a pasar como burbuja. Es por ello que, el perfil de conversión del lecho en su conjunto (*total*) tenga un comportamiento cercano al perfil de conversión de la *fase-burbuja*.

Una vez visto cómo se comporta el RLF cuando se modela la *fase-emulsión* como flujo pistón D-H/PFR, se procederá a modelar el sistema de lecho fluidizado cuando en la *fase-emulsión* se asume un mezclado perfecto, D-H/CSTR, con el fin de observar las diferencias existentes tanto en el modelo matemático, como en los resultados en las conversiones del reactivo de interés en la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y la del lecho en su conjunto.

## CAPÍTULO III

### REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, MODELO: DAVIDSON-HARRISON CON *FASE-EMULSIÓN* MODELADA COMO CSTR

Al principio del Capítulo I se mencionaron algunas de las ventajas que exhiben los sistemas de lecho fluidizado, entre las cuales destaca el mezclado intenso que ocurre entre las partículas sólidas (reactivos y/o catalizador) y la fase gas (reactivos). La agitación de las fases que constituyen el reactor favorece tanto la transferencia de masa como la de energía, y ello da la posibilidad de llevar a cabo la transformación química en condiciones isotérmicas. Estas ventajas citadas de los RLF también se presentan en los reactores de mezcla completa (CSTR, por sus siglas en Inglés: continuous flow stirred tank reactor), cuyo modelo, como su nombre lo indica presupone un mezclado perfecto de la mezcla de reacción. En este apartado se analiza el comportamiento de un RLF considerando el modelo de Davidson-Harrison que asume que la *fase-emulsión* se comporta como un CSTR. Por simplicidad a dicho modelo se le identifica como D-H/CSTR.

En el desarrollo del modelo D-H/CSTR se asume que la concentración del reactivo de interés en la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , es independiente de la posición en el lecho, su valor depende de las condiciones de operación del reactor descrito por una ecuación algebraica. Esto es lo que implica el considerar que en la *fase-emulsión* se tenga *una agitación perfecta*. En contraste, la concentración de los reactantes en la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}$ , depende de la posición en el lecho, como se muestra en la Figura 3.1.

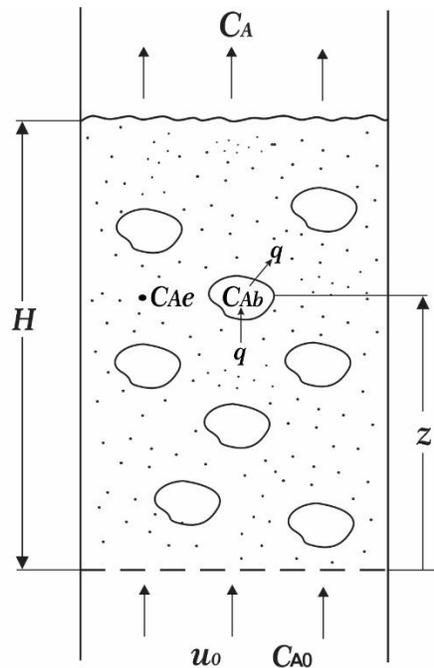
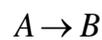


Figura 3.1 Reactor de lecho fluidizado bajo el modelo Davidson-Harrison, se muestran concentraciones del reactor en la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$ ), *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$ ) y del lecho en su conjunto a la salida ( $C_A$ ), se asume *fase-emulsión* como CSTR.

### 3.1 Reacción química

Para el estudio realizado se retoma la reacción elemental del apartado anterior, la cual es monoatómica e irreversible y elemental, con una rapidez de reacción de primer orden:



$$r = kC_A$$

### 3.2 Reactor

Se asume un tubo cilíndrico colocado en posición vertical que contiene partículas sólidas de catalizador, en cuya superficie se desarrolla la reacción. El reactivo está diluido en la corriente gaseosa que se alimenta por la parte inferior del reactor, la fuerza con la que se alimenta la corriente gaseosa es suficiente para mantener la condición de lecho fluidizado. Se retoma el valor de los parámetros presentados en la Tabla 2.1, en la cual se indica la nomenclatura y el valor de parámetros importantes tanto del catalizador como del reactor.

### 3.3 Casos de estudio con el modelo D-H/CSTR

Se analizó el comportamiento del reactor de lecho fluidizado mediante el modelo D-H/CSTR, teniendo como variable dependiente a la conversión del reactivo A ( $X_A$ ), y como punto de referencia una solución particular del modelo, denominada Caso Base. Dicho Caso Base consiste en calcular  $X_A$  cuando el valor de todos y cada uno de los parámetros del reactor es único y constante. En la segunda parte de este capítulo, se varía el diámetro de burbuja ( $d_b$ , variable independiente) para analizar el efecto sobre la conversión  $X_A$  (variable dependiente) que predice el modelo D-H/CSTR. Los resultados obtenidos en el Caso Base, como al variar el diámetro de burbuja, se comparan directamente con los resultados del modelo D-H/PFR presentado en el capítulo anterior.

### 3.4 Modelo Davidson-Harrison con la *fase-emulsión* comportándose como CSTR, D-H/CSTR

A continuación, se presentan las ecuaciones que constituyen el modelo D-H/CSTR, donde es importante señalar que el reactor opera en condiciones isotérmica y en estado estacionario. Por lo cual, no se considera en el modelo el balance de energía, ni la dependencia de la composición con respecto del tiempo en los balances de masa de la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*.

#### 3.4.1 Balance de masa en la *fase-burbuja*

La Ecuación (16) corresponde al balance de masa en la *fase-burbuja* del modelo D-H/CSTR. Es conveniente señalar que dicho balance tiene la misma estructura que el balance de masa de la *fase-burbuja* del modelo D-H/PFR, toda vez que en la construcción del modelo D-H/CSTR se asumió que la *fase-burbuja* mantiene las restricciones que se le impusieron en la construcción del modelo D-H/PFR, es decir que la *fase-burbuja* contiene una cantidad despreciable de sólidos, de manera que en ella no ocurre reacción química alguna. Dicha fase está constituida por burbujas esféricas cuyo tamaño es constante y, finalmente, se resuelve bajo el modelo de reactor tubular de flujo pistón. Por ello, la concentración  $C_{Ab}$  depende de la posición que tenga la burbuja en el reactor (básicamente altura del lecho  $z$ ).

La Ecuación (16) describe que la rapidez de cambio que sufre la composición de la *fase-burbuja* con respecto a su posición en el lecho fluidizado (lado izquierdo), se debe a la transferencia de masa que ocurre entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión*, cuando la burbuja se encuentra a cierta altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

$$u_b V \frac{dC_{Ab}}{dz} = (q + k_g S)(C_{Ae} - C_{Ab}) \quad (16)$$

Donde  $q$  es el flujo volumétrico de materia que atraviesa la superficie de la burbuja (transporte por convección); el producto  $k_g S$  permite modelar la transferencia de masa entre las *fase-burbuja* y *fase-emulsión* por difusión;  $C_{Ae}$  y  $C_{Ab}$  representan las concentraciones del reactivo de interés en la *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$ ) y en la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$ );  $C_{Ab}$  es función de la posición que tiene la burbuja en el eje axial  $z$ ;  $u_b$  es la velocidad de ascenso de las burbujas en el lecho fluidizado; mientras que  $V$  es el volumen promedio de las burbujas.

La Ecuación (16) muestra que el balance de masa de la *fase-burbuja* es una ecuación diferencial que tiene a  $C_{Ab}$  como variable dependiente y a  $z$  como variable independiente, ya que todos los demás términos son conocidos. Por lo tanto, para tener la función explícita  $C_{Ab}(z)$  se debe resolver la ecuación diferencial (16), y para ello se puede utilizar como condición de frontera la condición que prevalece en el fondo del lecho: en  $z=0$  se tiene que  $C_{Ab}=C_{A0}$ . Sustituyendo  $(q+k_g S)$  por  $Q$ , se resuelve la nueva versión de la Ecuación (16) con la condición de frontera antes indicada, para obtener  $C_{Ab}(z)$ :

$$u_b V \frac{dC_{Ab}}{dz} = Q(C_{Ae} - C_{Ab}) \quad (16)$$

$$C_{Ab} = C_{A0} \quad \text{en } z = 0$$

$$C_{Ab} = C_{Ae} + (C_{A0} - C_{Ae})e^{-Qz/u_b V} \quad (44)$$

### 3.4.2 Balance de masa en la *fase-emulsión*

Aprovechando que el modelo D-H/CSTR presupone que la *fase-emulsión* se comporta como un *CSTR*, es decir que todo el material (reactivo y catalizador) que forman esta fase está *perfectamente agitado (mezclado perfecto)*. Es posible suponer que la concentración del reactivo de interés  $C_{Ae}$  es la misma en toda la *fase-emulsión*; y que el balance de dicho reactivo se puede hacer considerando como elemento de control todo el lecho, expresándolo en términos de la altura  $H$  por unidad de sección transversal de flujo del lecho.

A continuación, se describen los procesos que se llevan a cabo en la *fase-emulsión* considerando, como ya se dijo, que se comporta como *CSTR*.

i) Reactivo que se transporta de la *fase-burbuja* a la *fase-emulsión*:

$$N_b Q \int_0^H C_{Ab} dz$$

Donde  $N_b$  representa el número de burbujas por unidad de volumen del lecho;  $Q$  representa el flujo neto que hay entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión* ( $Q=q+k_g S$ ); como ya se conoce la función  $C_{Ab}(z)$  -Ecuación (44)-, se puede conocer la cantidad de reactivo que se transporta de la *fase-burbuja* a la *fase-emulsión*, mediante una función que depende únicamente de  $z$ :

$$N_b Q \int_0^H [C_{Ae} + (C_{A0} - C_{Ae}) e^{-Qz/u_b V}] dz$$

Esta integral es función de  $z$ , y ninguno de los otros términos que la constituyen dependen de dicha variable, por lo tanto, la cantidad de reactivo que se transporta de la *fase-burbuja* a la *fase-emulsión*, se puede conocer resolviendo dicha integral:

$$N_b Q C_{Ae} \int_0^H dz + N_b Q (C_{A0} - C_{Ae}) \int_0^H e^{-Qz/u_b V} dz$$

$$N_b Q C_{Ae} H + N_b Q (C_{A0} - C_{Ae}) \left[ -\frac{u_b V}{Q} e^{-\frac{Qz}{u_b V}} + C \right]$$

- ii) Reactivo que entra en el fondo del lecho fluidizado:

$$u_{mf}C_{A0}$$

Donde  $u_{mf}$  es la velocidad mínima de fluidización, y  $C_{A0}$  es la concentración inicial del reactivo en la corriente de entrada del reactor.

- iii) Reactivo que sale de la *fase-emulsión* y entra a la *fase-burbuja*:

$$N_b Q H C_{Ae}$$

Donde  $N_b$  representa el número de burbujas presentes en el lecho,  $Q$  es el coeficiente global de transferencia entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión*,  $H$  es la altura del lecho en condiciones normales de fluidización, y  $C_{Ae}$  es la concentración del reactivo de interés presente en la *fase-emulsión*, independiente de la posición en el lecho.

- iv) Reactivo que sale en la parte superior del lecho fluidizado:

$$u_{mf}C_{Ae}$$

Donde  $u_{mf}$  es la velocidad mínima de fluidización, y  $C_{Ae}$  es la concentración del reactivo en la *fase-emulsión*.

- v) Reactivo que se transforma irreversiblemente en producto en la *fase-emulsión*, con una rapidez de reacción de primer orden:

$$kC_{Ae}H(1 - N_bV)$$

Donde  $k$  es el coeficiente de rapidez de reacción definida por unidad de volumen de la *fase-emulsión*; esto presupone que la *fase-emulsión* se mueve a la velocidad mínima de fluidización,  $u_{mf}$  y que tiene una concentración de partículas (número de partículas de catalizador por unidad de volumen) constante.

Combinando las ecuaciones que describen los procesos antes mencionados, la suma de (i) y (ii), debe ser igual a la suma de (iii), (iv) y (v), obteniendo el balance de masa de la *fase-emulsión* en términos del reactivo A:

$$N_b V u_b (C_{A0} - C_{Ae}) \left( 1 - e^{-\frac{Qz}{u_b V}} \right) + N Q H C_{Ae} + u_{mf} C_{A0} = N Q H C_{Ae} + u_{mf} C_{Ae} + k H C_{Ae} (1 - N_b V)$$

Después de agrupar términos comunes, se obtiene el modelo que describe el balance de masa en la *fase-emulsión*:

$$N_b V u_b (C_{A0} - C_{Ae}) \left( 1 - e^{-\frac{Qz}{u_b V}} \right) + u_{mf} (C_{A0} - C_{Ae}) = k H C_{Ae} (1 - N_b V) \quad (18)$$

El primer término de la ecuación representa el transporte que se tiene del reactivo de interés *A* que sale de la *fase-burbuja* (cuya dependencia de la concentración, en dicha fase, con respecto a la posición en el lecho está representada por la función exponencial) para entrar a la *fase-emulsión*. El segundo término de la ecuación representa el transporte por convección de *A* que se tiene de la entrada del reactor a la *fase-emulsión*. Por último, el tercer término corresponde a la rapidez con la cual ocurre la transformación química en el seno de la *fase-emulsión*.

El análisis del RLF bajo el modelo D-H/CSTR se realizó para las condiciones de operación del RLF que sean de interés, teniendo como variable dependiente a la conversión del reactivo en la *fase-burbuja*,  $X_{Ab}$ , *fase-emulsión*,  $X_{Ae}$ , y del lecho en su conjunto,  $X_A$ , como se definen a continuación:

Conversión en la *fase-burbuja*

$$X_{Ab} = \frac{C_{A0} - C_{Ab}}{C_{A0}} \quad (28)$$

Conversión en la *fase-emulsión*

$$X_{Ae} = \frac{C_{A0} - C_{Ae}}{C_{A0}} \quad (29)$$

Conversión del lecho en su conjunto

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \quad (30)$$

Donde  $X_{Ae}$  es la conversión del reactivo en la *fase-emulsión*,  $X_{Ab}$  es la conversión del reactivo en la *fase-burbuja*, y  $X_A$  es la conversión *total* del reactivo de interés *A*;  $C_{A0}$  es la concentración de *A* en la corriente de gas que se alimenta al lecho fluidizado; y  $C_A$  es la concentración molar *total* de *A* en la corriente de gas que sale del lecho fluidizado.

Para resolver el modelo D-H/CSTR y determinar el efecto que pueden tener las condiciones de operación sobre  $X_A$ , es necesario obtener  $C_A$ . En el apartado siguiente se presenta una manera de expresar en forma más sencilla las Ecuaciones (16) y (18).

### 3.4.3 Deducción

En la siguiente sección se presenta una forma más sencilla de expresar las ecuaciones de balance de burbuja y emulsión, Ecuaciones (16) y (18), respectivamente.

- Para el balance en la *fase-burbuja* se aplica a la Ecuación (16) el mismo análisis desarrollado en el capítulo anterior; donde al utilizar los grupos adimensionales definidos por Davidson-Harrison se tiene la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{dC_{Ab}}{dy} + \frac{X}{H}(C_{Ab} - C_{Ae}) = 0 \quad (22)$$

- En cuanto al balance en la *fase-emulsión*, la Ecuación (18) se redefine de acuerdo al siguiente desarrollo:

$$N_b V u_b (C_{A0} - C_{Ae}) \left( 1 - e^{-\frac{Qz}{u_b V}} \right) + u_{mf} (C_{A0} - C_{Ae}) = k H C_{Ae} (1 - N_b V) \quad (18)$$

Se sustituye  $N_b V u_b$ , del primer término de la Ecuación (18) al relacionarla con la Ecuación (6), la cual describe el flujo de gas que pasa como burbuja en el lecho:

$$N_b V u_b = u_0 - u_{mf}$$

Mientras que  $N_b V$ , presente en el tercer término de la Ecuación (18) se relaciona con la expansión que se tiene en el lecho, descrito en la Ecuación (10):

$$N_b V = \frac{H - H_0}{H} \quad ; \quad \frac{H_0}{H} = 1 - N_b V$$

Al sustituir las Ecuaciones (10) y (6) en la Ecuación (18) se tiene:

$$(u_0 - u_{mf})(C_{A0} - C_{Ae}) \left( 1 - e^{-QH/u_b V} \right) + u_{mf}(C_{A0} - C_{Ae}) = k C_{Ae} H_0$$

La ecuación obtenida se divide entre  $u_0$ :

$$\left(1 - \frac{u_{mf}}{u_0}\right) (C_{A0} - C_{Ae}) \left(1 - e^{-\frac{zH}{u_b V}}\right) + \frac{u_{mf}}{u_0} (C_{A0} - C_{Ae}) = \frac{kC_{Ae}H_0}{u_0}$$

Se aplican los grupos adimensionales  $\beta$ ,  $X$  y  $\kappa'$  definidos por Davidson-Harrison:

$$\beta = 1 - \frac{u_{mf}}{u_0} \quad ; \quad X = \frac{QH}{u_b V} \quad y \quad \kappa' = \frac{kH_0}{u_0}$$

Resultando en la siguiente ecuación algebraica:

$$\beta(C_{A0} - C_{Ae})(1 - e^X) + (1 - \beta)(C_{A0} - C_{Ae}) = \kappa' C_{Ae}$$

Para resolver el balance, se despeja la concentración en la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , de la ecuación anterior:

$$\beta(C_{A0} - C_{A0}e^X - C_{Ae} + C_{Ae}e^X) + C_{A0} - C_{Ae} - \beta C_{A0} + \beta C_{Ae} = \kappa' C_{Ae}$$

$$\underbrace{\beta C_{A0} - \beta C_{A0}} + \underbrace{\beta C_{Ae} - \beta C_{Ae}} + \beta C_{Ae}e^X + C_{A0} - C_{Ae} - \beta C_{A0}e^X = \kappa' C_{Ae}$$

Eliminando los términos subrayados de la ecuación anterior:

$$-\beta C_{A0}e^X + \beta C_{Ae}e^X + C_{A0} - C_{Ae} = \kappa' C_{Ae}$$

Agrupando términos y factorizando la ecuación:

$$-\beta C_{A0}e^X + C_{A0} = \kappa' C_{Ae} + C_{Ae} - \beta C_{Ae}e^X$$

$$C_{A0}(1 - \beta e^X) = C_{Ae}(\kappa' + 1 - \beta e^X)$$

El balance para la *fase-emulsión*, Ecuación (18), puede expresarse en la Ecuación (24):

$$C_{Ae} = \frac{C_{A0}(1 - \beta e^X)}{(\kappa' + 1 - \beta e^X)} \quad (24)$$

### 3.4.4 Condición de frontera

Del modelo D-H/CSTR, constituido por los balances de masa en la *fase-burbuja* (ecuación diferencial), y en la *fase-emulsión* (ecuación algebraica), Ecuaciones (22) y (24), respectivamente, es necesario establecer una sola condición de frontera requerida por el sistema.

En el fondo del lecho fluidizado donde  $z = 0$ , la concentración del reactivo A en la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}$ , es igual a la concentración de A en la corriente que alimenta al reactor,  $C_{A0}$ , es decir:

$$C_{Ab} = C_{A0} \quad \text{a } z = 0 \quad (25)$$

Dado que para conocer la composición del reactivo en la *fase-emulsión* es necesario resolver una ecuación algebraica, no es necesario definir otra condición de frontera.

### 3.4.5 Concentración del reactivo

Para conocer la concentración *total* del reactivo de interés a la salida del lecho fluidizado, donde  $z = H$ , se utiliza la Ecuación (27), la cual contempla las contribuciones de la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}$ , y *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ .

$$u_0 C_A = (u_0 - u_{mf}) C_{Ab} + u_{mf} C_{Ae} \quad (27)$$

La Ecuación (27) se puede expresar en términos de los parámetros adimensionales definidos por Davidson-Harrison, definiendo  $\beta$  como la fracción de flujo que atraviesa el lecho como gas, y sustituyendo en la Ecuación (27), se tiene lo siguiente:

$$C_A(z) = \beta C_{Ab}(z) + (1 - \beta) C_{Ae} \quad (43)$$

La Ecuación (43) permite conocer la concentración *total* del reactivo de interés en la corriente de salida del lecho fluidizado, o en cualquier punto del lecho, según donde se evalúe  $z$  ( $0 \leq z \leq H$ ), se debe resaltar que en esta ocasión la concentración de la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , no está definida en función de su posición en el lecho ( $z$ ), por lo que, dicho valor es único dentro de todo el lecho.

En resumen, el reactor de lecho fluidizado (RLF) según el modelo de Davidson-Harrison (D-H) que considera a la *fase-emulsión* como un reactor de mezcla completa (CSTR), denominado en este trabajo como D-H/CSTR, queda constituido por el conjunto de Ecuaciones (22), (24), (25) y (43) mostradas a continuación:

Balance de materia en la *fase-burbuja*:

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{X}{H}(C_{Ab} - C_{Ae}) = 0$$

Balance de materia en la *fase-emulsión*:

$$C_{Ae} = \frac{C_{A0}(1 - \beta e^X)}{(\kappa' + 1 - \beta e^X)}$$

Condición de frontera del sistema:

$$C_{Ab} = C_{A0} \quad \text{a} \quad z = 0$$

Concentración *total* del reactivo de interés a la salida del lecho:

$$C_A(z) = \beta C_{Ab}(z) + (1 - \beta)C_{Ae}$$

El análisis del RLF bajo dicho modelo, se desarrolló resolviendo numéricamente una ecuación diferencial -Ecuación (22)- con su propia condición de frontera y una ecuación algebraica -Ecuación (24)- ambas ecuaciones compuestas por los parámetros que determinan el comportamiento mecánico del lecho fluidizado (Tabla 1.1), y por los valores que describen la condiciones de operación del sistema, (Tabla 2.1), teniendo como variable dependiente a la conversión del reactivo de interés  $X_A$ , para un par de condiciones de operación del reactor. La presentación y análisis de los resultados obtenidos se presentan en el siguiente apartado.

### 3.5 Resultados del modelo D-H/CSTR

A continuación, se presentan y analizan los resultados de modelar un reactor de lecho fluidizado *RLF*, en el cual se lleva a cabo una reacción irreversible de primer orden, asumiendo una operación en condiciones isotérmicas y estado estacionario. Para esta ocasión, se realiza una segunda versión del modelo *Davidson-Harrison*, en el que se asume que la *fase-emulsión* (única zona del reactor en la que ocurre la reacción química) se comporta como un reactor de mezcla completa CSTR. A dicho modelo se denomina como D-H/CSTR.

Se estudió y analizó el comportamiento del *RLF* bajo el modelo D-H/CSTR, en principio se analiza un caso, identificado como *Caso Base D-H/CSTR*, el cual corresponde a una sola condición de operación del reactor, lo que significa que se definió el valor de todos y cada uno de los parámetros que determinan la conversión del reactivo A ( $X_A$ ) en la corriente de salida del reactor. Posterior a este análisis, se resuelve para una diferente condición de operación del reactor, la cual fue definida fijando como variable independiente el diámetro de burbuja  $d_b$  (manteniendo constantes los demás parámetros que se utilizaron en el *Caso Base D-H/CSTR*), siendo la variable dependiente la conversión del reactivo de interés  $X_A$ , y así poder analizar el efecto sobre la conversión al variar  $d_b$ . Este caso se identifica como *Caso 1: Diámetro de burbuja D-H/CSTR*. Los resultados obtenidos en el *Caso Base* y *Caso 1* (diámetro de burbuja variable), bajo el modelo *D-H/PFR* del capítulo anterior, se comparan con los obtenidos en el *Caso Base D-H/CSTR* y *Caso 1: Diámetro de burbuja D-H/CSTR* del presente capítulo.

### 3.5.1 Caso Base D-H/CSTR

El primer caso que se presenta consiste en obtener la concentración y conversión *total* de reactivo de interés a la salida del reactor de lecho fluidizado,  $C_A$  y  $X_A$ , respectivamente, cuando éste se opera en las condiciones que se indican en la Tabla 2.1. La reacción química estudiada para análisis del RLF es una reacción catalítica e irreversible, cuya rapidez de reacción es de primer orden con respecto al reactivo, con un coeficiente de rapidez de reacción,  $k$ , que es una función tipo Arrhenius:



$$r_A = kC_A \quad (1)$$

$$k = k_0 \exp(-E/RT) \quad (2)$$

El análisis del RLF bajo el modelo D-H/CSTR se desarrolló resolviendo numéricamente la ecuación diferencial en *Mathematica*® (Apéndice) con su propia condición de frontera -Ecuación (25)-, obtenida del balance de materia de la *fase-burbuja*, Ecuación (22), y una ecuación algebraica correspondiente al balance de materia en la *fase-emulsión*, Ecuación (24).

Balance de materia en la *fase-burbuja*:

$$\frac{dC_b}{dz} + \frac{X}{H}(C_b - C_e) = 0 \quad (22)$$

Condición de frontera:

$$C_{Ab} = C_{A0} \quad \text{a} \quad z = 0 \quad (25)$$

Balance de materia en la *fase-emulsión*:

$$C_e = \frac{C_0(1 - \beta e^{-X})}{(\kappa' + 1 - \beta e^{-X})} \quad (24)$$

El modelado con *fase-emulsión*, asumida como reactor de mezcla completa CSTR, permitirá observar, analizar y comparar la capacidad del reactor para convertir reactivo en producto deseado con respecto a la información obtenida en el capítulo anterior, donde se modeló la *fase-emulsión* como PFR.

### Condiciones a la salida del lecho fluidizado

En la Tabla 3.1 se muestran los resultados de los parámetros que determinan el comportamiento mecánico del lecho fluidizado del modelo *D-H/CSTR* (renglones 1 a 14); también se presenta la composición de la corriente de salida en términos de la concentración molar del reactivo de interés *A* en la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}$ , y la *total*,  $C_A$  (renglones 15, 16 y 17), con su respectiva conversión  $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$  (renglones 18, 19 y 20). Como referencia del estudio, se integran los resultados obtenidos en el *Caso Base* bajo el modelo *D-H/PFR*, presentados en el capítulo anterior (columna 3).

Se observa que el valor de todos los parámetros que definen al modelo D-H/CSTR, resultan tener el mismo valor que los resultados obtenidos bajo el modelo D-H/PFR, la diferencia recae únicamente en las concentraciones y conversiones de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*. Para la *fase-emulsión* modelada como CSTR, a la salida del lecho fluidizado se tiene una mayor concentración molar del reactivo  $C_{Ae} = 10.38 \text{ mol/m}^3$ , equivalente a una conversión porcentual del 89.62 %, porcentaje menor al obtenido en la misma fase modelada como PFR, donde la concentración molar del reactivo de interés fue de  $C_{Ae} = 5.65 \text{ mol/m}^3$ , obteniendo una conversión porcentual de 94.35 %. En la *fase-burbuja*, y en el lecho en su conjunto (*total*), también se consiguen conversiones menores del reactivo de interés bajo el modelo D-H/CSTR, con respecto al modelo D-H/PFR. Todo lo anterior, se traduce en una menor capacidad para transformar reactivo en producto para el modelo D-H/CSTR.

Tabla 3.1 Nomenclatura y valor de los parámetros utilizados del Caso Base D-H/CSTR.

#	Parámetro	Letra	CSTR	PFR	Unidad
1	Velocidad de ascenso de una sola burbuja.	$u_{br}$	1.25909	1.25909	m/s
2	Velocidad absoluta de ascenso de las burbujas en un lecho.	$u_b$	1.52909	1.52909	m/s
3	Fracción de burbujas en el lecho.	$\delta$	0.17657	0.17657	[adim]
4	Coefficiente de transporte de emulsión-burbuja.	Q	0.01053	0.01053	m <sup>3</sup> /s
5	Flujo de la burbuja.	q	0.00723	0.00723	m <sup>3</sup> /s
6	Coefficiente de transporte entre la burbuja y emulsión.	$k_g$	0.01025	0.01025	m/s
7	Área de interfase de transferencia de la burbuja.	S	0.32169	0.32169	m <sup>2</sup>
8	Parámetro adimensional X.	X	1.08693	1.08693	[adim]
9	Parámetro adimensional $\beta$ .	$\beta$	0.9	0.9	[adim]
10	Parámetro adimensional $k'$ .	$\kappa'$	6.01099	6.01099	[adim]
11	Volumen promedio de burbujas.	V	0.01715	0.01715	m <sup>3</sup>
12	Área transversal del Reactor.	$A_c$	3.1416	3.1416	m <sup>2</sup>
13	Columna estática.	$H_0$	2.22817	2.22817	m
14	Altura del lecho en condiciones de fluidización.	H	2.70597	2.70597	m
15	Concentración del reactivo en la <i>fase-emulsión</i> .	$C_{Ae}$	10.38	5.65	mol/m <sup>3</sup>
16	Concentración del reactivo en la <i>fase-burbuja</i> .	$C_{Ab}$	40.60	39.87	mol/m <sup>3</sup>

La Tabla 3.1 continúa en la página siguiente.

#	Parámetro	Letra	CSTR	PFR	Unidad
17	Concentración <i>total</i> del reactivo en el lecho.	$C_A$	37.58	36.45	mol/m <sup>3</sup>
18	Conversión del reactivo en la <i>fase-emulsión</i> .	$X_{Ae}$	89.62	94.35	[adim]
19	Conversión del reactivo en la <i>fase-burbuja</i> .	$X_{Ab}$	59.40	60.13	[adim]
20	Concentración <i>total</i> del reactivo en el lecho.	$X_A$	62.42	63.55	[adim]

En la Figura 3.2 se muestran algunas condiciones iniciales de operación, como diámetro de burbuja ( $d_b = 0.32$  m), diámetro del reactor ( $d_R = 2$  m), altura inicial ( $H_0 = 2.223$  m), masa de catalizador ( $W = 7000$  Kg) y velocidad superficial del gas en el lecho ( $u_0 = 0.3$  m/s); al igual que la concentración y conversión del reactivo de interés  $C_A = 37.58$  mol/m<sup>3</sup> y  $X_A = 62.41$  %, respectivamente, que se obtiene en la corriente de salida del lecho fluidizado, cuya altura es de  $H = 2.706$  m.

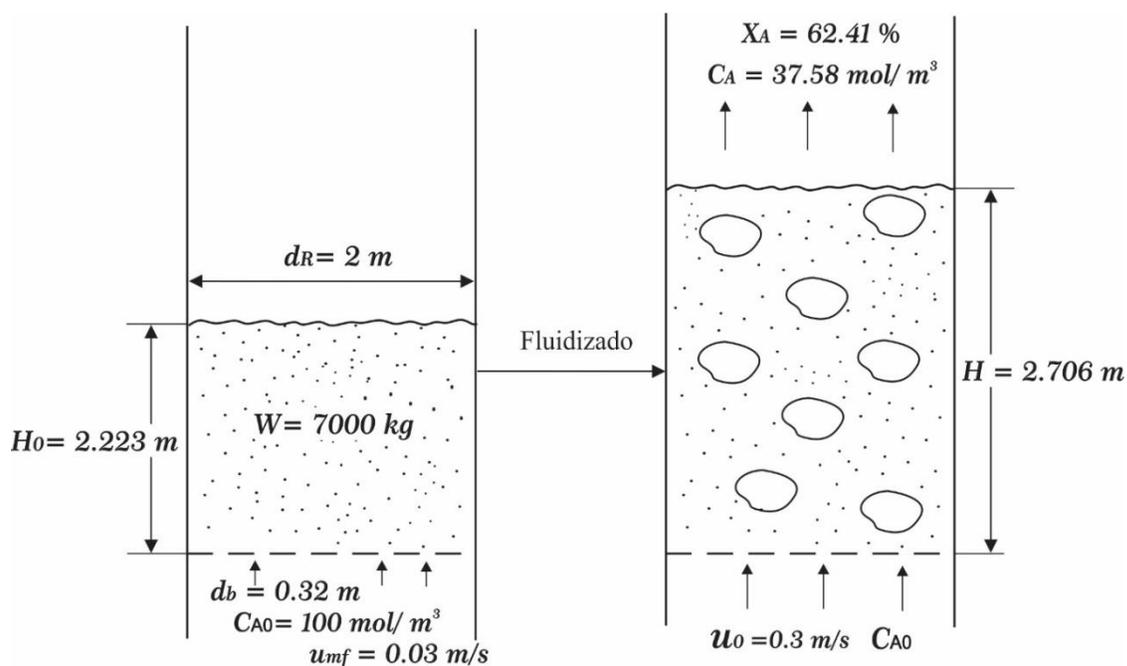


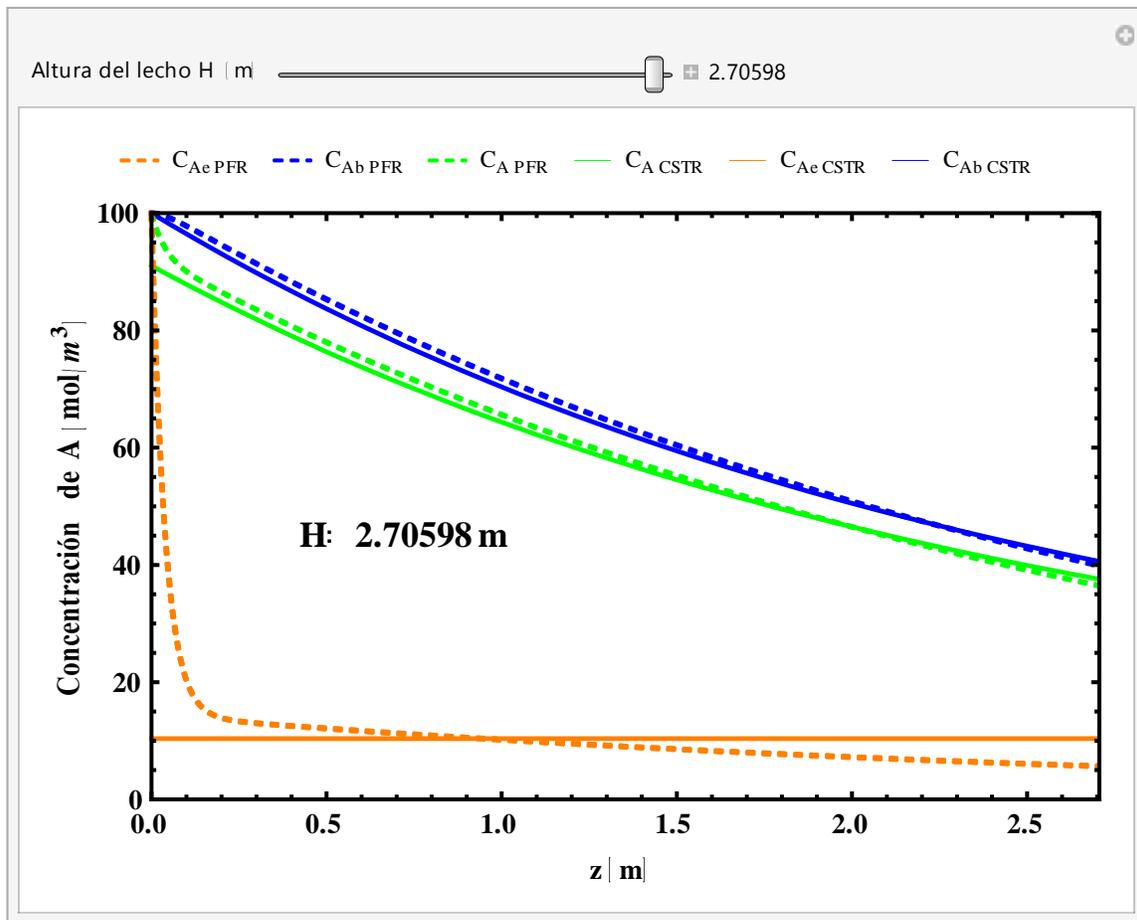
Figura 3.2 Condiciones de fluidización incipiente y fluidización normal de reactor de lecho fluidizado del Caso Base D-H/CSTR.

### Composición a lo largo del lecho fluidizado

Una vez reportada las condiciones de la corriente de salida del lecho fluidizado ( $z=H$ ), en términos de la concentración molar ( $C_{Ae}$ ,  $C_{Ab}$  y  $C_A$ ) y conversión porcentual ( $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$ ) del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, la *fase-emulsión* y la *total*, respectivamente, en la Tabla 3.1 y Figura 3.2, utilizando el mismo modelo D-H/CSTR, se calculó la composición a lo largo del lecho fluidizado ( $0 \leq z \leq H$ ) en términos de la concentración molar ( $C_{Ae}(z)$ ,  $C_{Ab}(z)$  y  $C_A(z)$ ), y de la conversión porcentual ( $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$ ) del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, la *fase-emulsión* y la *total*, respectivamente. Así mismo, se calculó la concentración del producto en función de la longitud del lecho fluidizado en las diferentes fases:  $C_{Be}(z)$ ,  $C_{Bb}(z)$  y  $C_B(z)$ .

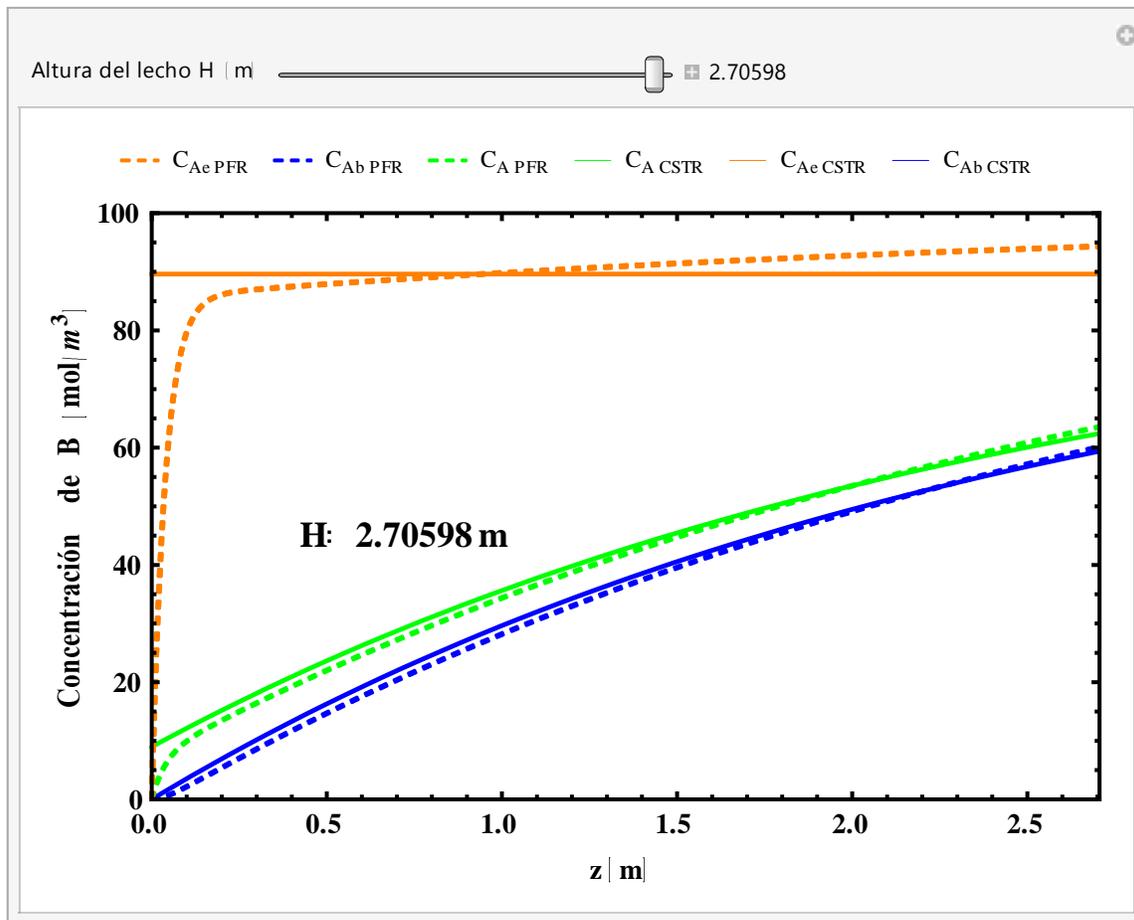
En la Gráfica 3.1 se presentan la concentración molar del reactivo del interés ( $C_{Ae}(z)$ ,  $C_{Ab}(z)$  y  $C_A(z)$ ) en función de la altura del lecho fluidizado:  $0 \leq z \leq H$ . En la Gráfica 3.2 se presenta la concentración molar del producto ( $C_{Be}(z)$ ,  $C_{Bb}(z)$  y  $C_B(z)$ ). Por último, en la Gráfica 3.3 se expone el perfil de la conversión porcentual del reactivo ( $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$ ) en función de la altura del lecho fluidizado:  $0 \leq z \leq H$ .

Es importante mencionar que en las Gráficas 3.1, 3.2 y 3.3, se incluyen los perfiles obtenidos en el modelado del Caso Base, bajo el modelo D-H/PFR, presentado en el Capítulo II (líneas discontinuas), como referencia del estudio. En dichas gráficas, la concentración molar y conversión porcentual en la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$  y  $X_{Ab}$ ) se identifica con color azul, *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$  y  $X_{Ae}$ ) en color naranja, y *total* (o del lecho en su conjunto) ( $C_A$  y  $X_A$ ) se identifica con color verde.



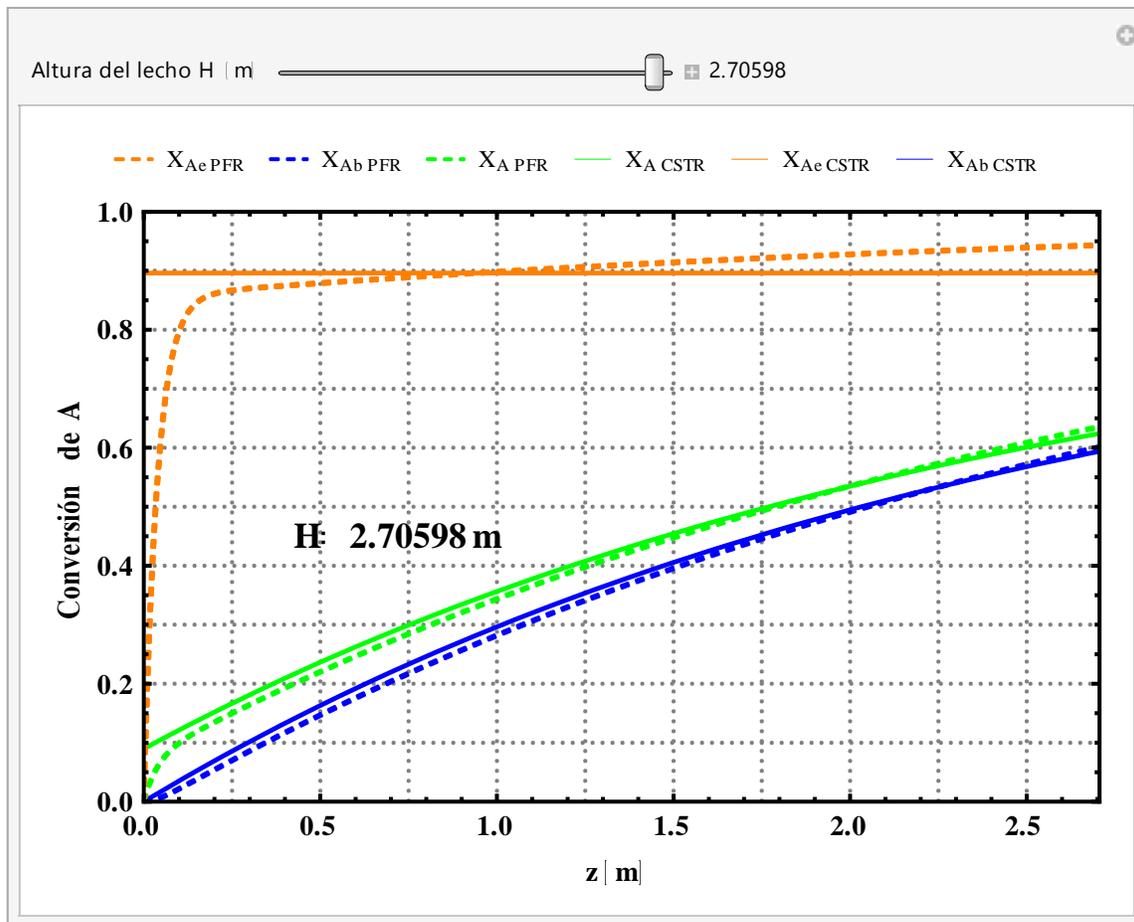
Gráfica 3.1 Perfiles de concentración de A en un RLF bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 3.1 se observa que la rapidez de consumo del reactivo en la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}(z)$ , del sistema modelado como D-H/CSTR (línea continua), se mantiene constante a lo largo del lecho, con un valor de  $10.38\text{ mol/m}^3$ . Al inicio del lecho este perfil se sitúa por debajo del perfil  $C_{Ae}(z)$  del sistema modelado con D-H/PFR (línea discontinua). Sin embargo, ambas concentraciones se igualan a una altura de lecho de  $0.9\text{ m}$  y a partir de este punto, el perfil de concentración de la *fase-emulsión*  $C_{Ae}(z)$  de D-H/PFR, se mantiene por debajo del D-H/CSTR, esto es debido a que continua la transformación de reactivo a producto hasta llegar a la altura final del lecho, cuya expansión fue de  $2.706\text{ m}$ . Este mismo comportamiento se hace presente en los perfiles de la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}(z)$ , y del lecho en su conjunto (*total*),  $C_A(z)$ , del modelo D-H/CSTR, donde dichas concentraciones molares son ligeras, pero claramente mayores a las obtenidas en el modelo D-H/PFR.



Gráfica 3.2 Perfiles de concentración de B en un RLF bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 3.2 se observan los perfiles de concentración de aparición del producto B en la *fase-emulsión*,  $C_{Be}(z)$ , *fase-burbuja*,  $C_{Bb}(z)$ , y del lecho en su conjunto,  $C_B(z)$ , del sistema modelado con D-H/CSTR (línea continua) y del modelado con D-H/PFR (línea discontinua). En esta gráfica resulta más claro notar como los perfiles de la *fase-burbuja*,  $C_{Bb}(z)$ , *fase-emulsión*,  $C_{Be}(z)$ , y del lecho en su conjunto,  $C_B(z)$ , resueltos bajo el modelo D-H/PFR, quedan por arriba de los perfiles obtenidos bajo el modelo D-H/CSTR, lo cual se traduce en una ligera ventaja para transformar reactivo en producto para el sistema resuelto con D-H/PFR. Es importante resaltar que el perfil de concentración *total*  $C_B(z)$  bajo el modelo D-H/CSTR comienza con una concentración molar del producto cercana a  $10 \text{ mol/m}^3$ , debido a un efecto de dilución “instantánea”(que tiene lugar en el punto donde la corriente de entrada se mezcla con el sistema completo) propia de los reactores de mezcla completa.



Gráfica 3.3 Perfiles de conversión de A en un RLF bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $C_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $C_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $C_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 3.3 se muestra el perfil de la conversión en la *fase-emulsión*,  $X_{Ae}(z)$ , *fase-burbuja*,  $X_{Ab}(z)$ , y del lecho en su conjunto,  $X_A(z)$ , del sistema modelado con D-H/CSTR (línea continua) y del modelado con D-H/PFR (línea discontinua). En el sistema D-H/CSTR, en la *fase-emulsión* se tiene una conversión del reactivo de 89.62 %, en la *fase-burbuja* de 59.40 %, logrando una conversión *total* del reactivo de 62.42 %. Estas conversiones se sitúan por debajo a las obtenidas con el modelo D-H/PFR, donde en la *fase-emulsión* se alcanzó la conversión del reactivo de 94.35 %, en la *fase-burbuja* 60.13 %, teniendo una conversión *total* del reactivo de 63.55 %.

Al inicio del lecho, los perfiles de la *fase-burbuja*,  $X_{Ab}(z)$ , y del lecho en su conjunto,  $X_A(z)$ , del modelo D-H/CSTR se mantienen por arriba de los perfiles del modelo D-H/PFR, pero a una altura aproximada de 2 m, es donde se igualan los perfiles de ambos modelos. A partir de este punto y hasta la altura final del lecho (2.706 m), los perfiles del modelo D-H/PFR quedan ligeramente por arriba de los obtenidos con el modelo D-H/CSTR, derivando en una mayor capacidad de transformar reactivo en producto en el modelo D-H/PFR.

### Análisis

El *Caso Base CSTR* se resolvió utilizando el modelo modificado Davidson-Harrison, donde se asume que la *fase-emulsión* se comporta como un reactor de mezcla completa, D-H/CSTR (no existen gradientes de concentración en dicha fase), esto con el fin de compararlo con el modelo en el cual se asume la existencia de gradientes de concentración en la dirección axial del reactor D-H/PFR. Todo ello resulta en la obtención de una menor conversión porcentual del reactivo de interés en el modelo D-H/CSTR, en las dos fases que constituyen el lecho fluidizado (*fase-burbuja*  $X_{Ab}$ , *fase-emulsión*  $X_{Ae}$ ) y, consecuentemente, en el lecho fluidizado en su conjunto  $X_A$  (*total*).

Al utilizar los mismos parámetros descrito por Davidson-Harrison en ambos modelos, la diferencia entre los modelos recae únicamente en el balance de materia de la *fase-emulsión*, donde de una ecuación diferencial en el modelo D-H/PFR -Ecuación (23)-, pasa a ser descrita por una ecuación algebraica en D-H/CSTR -Ecuación (24)-, ambas ecuaciones se muestran a continuación:

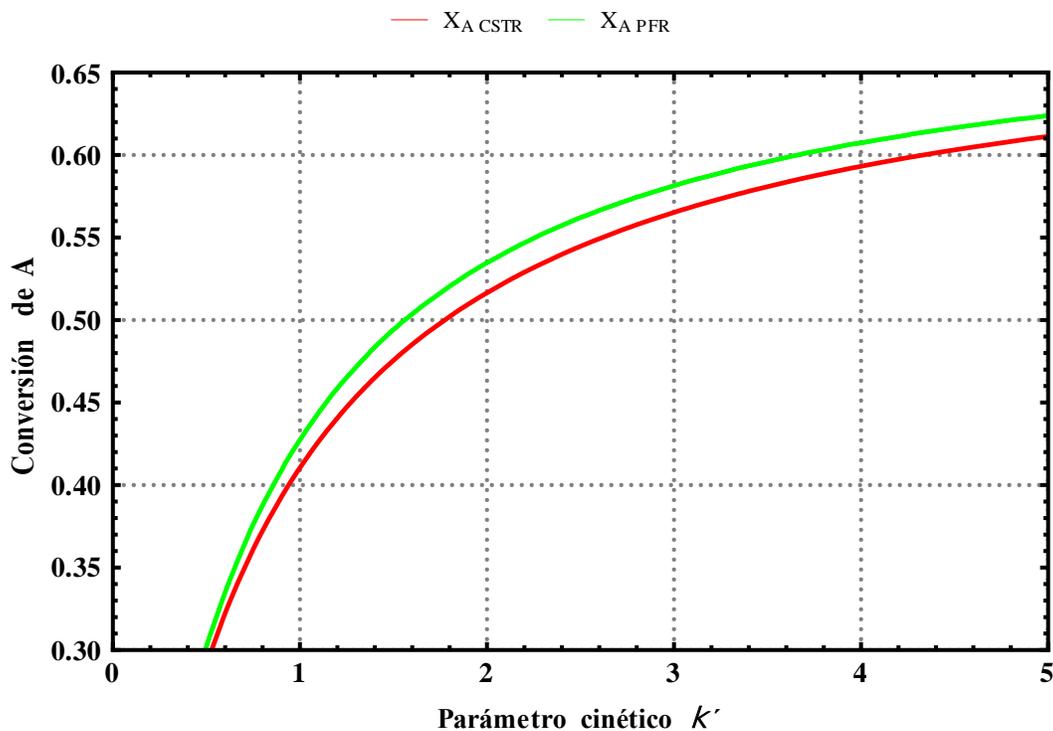
Balance de materia en la *fase-emulsión* D-H/PFR:

$$\underbrace{(u_0 - u_{mf}) \frac{dC_{Ab}}{dz}}_1 + \underbrace{u_{mf} \frac{dC_{Ae}}{dz}}_2 + \underbrace{kC_{Ae}(1 - N_b V)}_3 = 0 \quad (22)$$

Balance de materia en la *fase-emulsión* D-H/CSTR:

$$\underbrace{N_b V u_b (C_{A0} - C_{Ae}) \left(1 - e^{-\frac{QH}{u_b V}}\right)}_1 + \underbrace{u_{mf} (C_{A0} - C_{Ae})}_2 = \underbrace{kHC_{Ae}(1 - N_b V)}_3 \quad (24)$$

En ambas ecuaciones, el primer término representa el transporte de materia entre la *fase-emulsión* y la *fase-burbuja*. En la Ecuación (22) se observa que la tasa de cambio de la concentración de reactivo en la burbuja, es función de su posición en el lecho ( $z$ ), por su parte, la Ecuación (24) también contempla el cambio de la concentración en la burbuja con respecto a la altura del lecho ( $H$ ), mediante una función exponencial. El segundo término de la Ecuación (24) se deriva de asumir que el material que contiene la *fase-emulsión* está perfectamente agitado (mezclado perfecto), de manera que no hay gradientes de composición en toda la mezcla reaccionante, bajo esas condiciones no puede haber transporte de masa (ni de energía) por difusión, y el transporte por convección se modela aplicando en toda la *fase-emulsión* (todo el lecho fluidizado) el concepto de gradiente de largo alcance. Por último, en ambas Ecuaciones (22) y (24) se hace presente en el tercer término la rapidez con la cual ocurre la transformación química.



Gráfica 3.4 Perfiles de conversión de A en un RLF bajo el modelo D-H/CSTR (línea roja) y del modelo D-H/PFR (línea verde), del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función del parámetro cinético ( $\kappa'$ ).

La Gráfica 3.4 muestra la conversión *total* (la del lecho en su conjunto) de ambos modelos, donde se puede observar que el perfil de la conversión *total*  $X_A$  es mayor para el modelo Davidson-Harrison con *fase-emulsión* modelada como PFR.

Balance en la *fase-burbuja*:

La disminución en la capacidad de transformar reactivo en producto en la *fase-emulsión*, repercute negativamente en el balance de la burbuja.

$$\frac{dC_{Ab}}{dz} + \frac{X}{H}(C_{Ab} - C_{Ae}) = 0$$

Derivado del aumento en la concentración del reactivo de interés en el balance de la *fase-burbuja* y *fase-emulsión* (comparado con el modelo D-H/PFR), implica bajos porcentajes de conversión del reactivo.

$$C_A = \beta C_{Ab} + (1 - \beta)C_{Ae}$$

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

Por lo tanto:  $\uparrow C_A$  ello implica que  $\downarrow X_A$

### Conclusión

Los resultados presentados en la Tabla 3.1, muestran que en las fases que componen al lecho fluidizado (*fase-burbuja*  $X_{Ab}$  y *fase-emulsión*  $X_{Ae}$ ) y el lecho fluidizado en su conjunto  $X_A$  (*total*) resueltas bajo el modelo D-H/CSTR, se obtiene una mayor concentración molar del reactivo en la corriente de salida del lecho, comparada con la concentraciones del modelo D-H/PFR, lo cual se traduce en una menor capacidad de transformar reactivo en producto en el modelo D-H/CSTR. Lo anterior, se debe principalmente a una disminución en la conversión del reactivo en la *fase-emulsión*, repercutiendo en el balance de la *fase-burbuja*.

Las diferencias presentadas en el *Caso Base D-H/CSTR* con el *Caso Base D-H/PFR*, tanto en la Tabla 3.1 como en las Gráficas presentadas (3.1, 3.2 y 3.3), permitieron analizar el comportamiento del reactor de lecho fluidizado, teniendo como variable dependiente principal a la conversión del reactivo de interés ( $X_A$ ). A continuación, se extiende el análisis para una diferente condición de operación del reactor, que resulta de variar el diámetro de burbuja ( $d_b$ , variable independiente), con la finalidad de comparar los resultados del modelo D-H/CSTR con los obtenidos en el modelo D-H/PFR.

### 3.6 Modificación de variable

El *Caso Base CSTR* para un RLF se analizó bajo el modelo D-H/CSTR, a continuación se muestra la modelación del sistema, en el cual se modifica sistemáticamente el valor del diámetro de burbuja  $d_b$ , el cual define la operación de un RLF. Para ello, fue necesario crear en *Mathematica*® una nueva función (Apéndice), donde se fija como variable independiente  $d_b$  y como variable dependiente a la concentración y conversión del reactivo de interés a la salida del reactor (*fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*), el cual se identifica como *Caso 1: Diámetro de burbuja D-H/CSTR*; donde además fuera posible integrar los resultados con diámetro de burbuja variable obtenidos en un RLF bajo el modelo D-H/PFR, presentados en el Capítulo II.

De esta manera, se define y analiza un único caso:

Caso 1: Diámetro de burbuja ( $d_b$ ).

### 3.6.1 Caso 1: Diámetro de burbuja D-H/CSTR

Después de analizar la importancia en el modelado de reactores de lecho fluidizados (con diámetro de burbuja variable), sobre el intercambio de masa gas-sólido y la capacidad del reactor para transformar reactivo en producto, el presente caso consiste en variar, nuevamente, el valor del  $d_b$  bajo el modelo modificado de Davidson-Harrison (1963), donde se asume la *fase-emulsión* como un reactor de mezcla completa CSTR. Para ello, se contemplan dos valores diferentes de  $d_b$ . con la finalidad de observar el cambio en la concentración del reactivo de interés a la salida del reactor, considerando la *fase-burbuja*,  $C_{Ab}$ , la *fase-emulsión*,  $C_{Ae}$ , y la *total*,  $C_A$ . Además se calcula la conversión del reactivo de interés correspondiente a cada una de dichas concentraciones:  $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$ , respectivamente.

A continuación, se citan las ecuaciones, que describen la transferencia de masa entre *fase-burbuja* y *fase-emulsión* que son función del tamaño de la burbuja.

Volumen promedio de cada una de las burbujas presentes en el lecho:

$$V = \frac{1}{6} \pi d_b^3$$

Área de interfase de transferencia de la burbuja:

$$S = \pi d_b^2$$

Flujo volumétrico de intercambio entre fases:

$$q = \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2$$

Coefficiente de transferencia de masa:

$$k_g = 0.975 \sqrt{D} \left( \frac{g}{d_b} \right)^{1/4} S$$

Coefficiente global de transferencia entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión*:

$$Q = q + k_g S$$

Los valores de los diámetros de burbuja a probar son los mismos que se tomaron en la realización del “*Caso 1: Diámetro de burbuja*” del capítulo anterior, con la finalidad de comparar los resultados de aquella modelación con la presentada en esta sección, Los valores a probar son: 20 m y 0.44 m, como se indican en la Tabla 2.3, al no ser la referencia del estudio el Caso Base, se excluye el diámetro de burbuja del Caso Base, cuyo valor es de 0.32 m.

### **Condiciones a la salida del lecho fluidizado**

En la Tabla 3.2 se muestra el valor de cada uno de los parámetros utilizados para resolver el modelo D-H/CSTR, junto con los valores obtenidos en el modelo D-H/PFR, con diámetro de burbuja variable (renglones 1 a 14), considerando tamaños de burbuja de 0.20 m y 0.44 m (renglones 3 y 4). Además se incluye la composición de la corriente de salida, reportada en concentración molar ( $C_{Ae}$ ,  $C_{Ab}$  y  $C_A$ ) y conversión porcentual ( $X_{Ae}$ ,  $X_{Ab}$  y  $X_A$ ) de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*, respectivamente, calculados con ambos modelos (renglones 15 a 20).

Para los modelos D-H/CSTR y D-H/PFR, los valores de los parámetros que los definen son idénticos para cada tamaño de burbuja. La diferencia radica en la concentración y conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*; en ambos modelos la acción de disminuir el diámetro de burbuja  $d_b$  impacta positivamente en la conversión del reactivo de interés. Sin embargo, dicha capacidad es menor en el modelo D-H/CSTR, obteniendo conversiones en la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y *total* de 83.87 %, 78.03 % y 78.92 %, respectivamente, comparado con el rendimiento obtenido con D-H/PFR, donde se obtuvieron conversiones de 95.09 %, 81.16 % y 82.55 %, respectivamente. Por otro lado, al aumentar el tamaño de la burbuja, la diferencia en los rendimientos de ambos modelos, es casi nula, en la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y *total* se registraron conversiones de 91.84 %, 44.28 % y 49.03 % para D-H/CSTR, mientras que para el modelo D-H/PFR, fueron de 94.97 %, 44.53 % y 49.57 %, respectivamente.

Tabla 3.2 Resultados obtenidos bajo los modelos D-H/CSTR y D-H/PFR, al variar el diámetro de burbuja.

#	Parámetro	Letra	$d_b = 0.20 \text{ m}$		$d_b = 0.44 \text{ m}$		Unidades
			PFR	CSTR	PFR	CSTR	
1	Velocidad de ascenso de una sola burbuja.	$u_{br}$	0.9954	0.9954	1.47642	1.47642	m/s
2	Velocidad absoluta de ascenso de las burbujas en un lecho.	$u_b$	1.2654	1.2654	1.74642	1.74642	m/s
3	Fracción de burbujas en el lecho.	$\delta$	0.213371	0.213371	0.154602	0.154602	[adim]
4	Coefficiente de transporte de emulsión-burbuja.	$Q$	0.00427713	0.00427713	0.019446	0.019446	$\text{m}^3/\text{s}$
5	Flujo de la burbuja.	$q$	0.00282743	0.00282743	0.0136848	0.0136848	$\text{m}^3/\text{s}$
6	Coefficiente de transporte entre la burbuja y emulsión.	$k_g$	0.0115364	0.0115364	0.0094724	0.0094724	m/s
7	Área de interfase de transferencia de la burbuja.	$S$	0.125664	0.125664	0.608212	0.608212	$\text{m}^2$
8	Volumen promedio de burbujas.	$V$	0.00418879	0.00418879	0.0446022	0.0446022	$\text{m}^3$

La Tabla 3.2 continúa en la página siguiente.

REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO, MODELO: D-H/CSTR

#	Parámetro	Letra	$d_b = 0.20 \text{ m}$		$d_b = 0.44 \text{ m}$		Unidades
			PFR	CSTR	PFR	CSTR	
9	Área transversal del reactor.	$A_c$	3.1416	3.1416	3.1416	3.1416	$\text{m}^2$
10	Altura del lecho en condiciones de fluidización.	H	2.83256	2.83256	2.63565	2.63565	m
11	Aumento de la columna de lecho.	$\Delta H$	0.604386	0.604386	0.407477	0.407477	m
12	Parámetro adimensional X.	X	2.28568	2.28568	0.657982	0.657982	[adim]
13	Parámetro adimensional $\beta$ .	$\beta$	0.9	0.9	0.9	0.9	[adim]
15	Concentración del reactivo en la emulsión.	$C_{Ae}$	4.91	13.13	5.02	8.16	$\text{mol}/\text{m}^3$
16	Concentración del reactivo en la burbuja.	$C_{Ab}$	18.83	21.96	55.47	55.72	$\text{mol}/\text{m}^3$
17	Concentración <i>total</i> del reactivo en el lecho.	$C_A$	17.44	21.08	50.42	50.96	$\text{mol}/\text{m}^3$
18	Conversión del reactivo en la emulsión.	$X_{Ae}$	95.0947	86.87	94.9799	91.84	%
19	Conversión del reactivo en la burbuja.	$X_{Ab}$	81.1642	78.03	44.5305	44.28	%
20	Conversión <i>total</i> del reactivo en el lecho.	$X_A$	82.5573	78.92	49.5755	49.03	%

En la Figura 3.3, se ilustra en (a) y (b) los resultados que se obtienen del modelado, presentando las condiciones de arranque y en estado estacionario (finales) para un diámetro de burbuja de 0.20 m y de 0.44 m, respectivamente, donde se trata de ilustrar las dimensiones de las burbujas, como el número de ellas presentes en el lecho fluidizado.

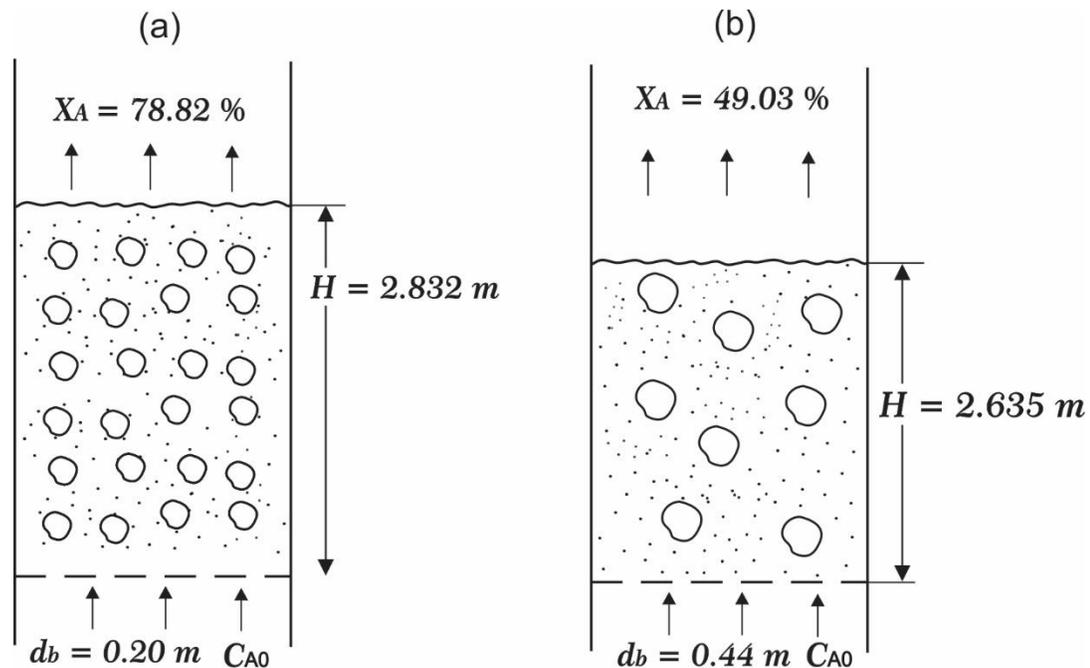
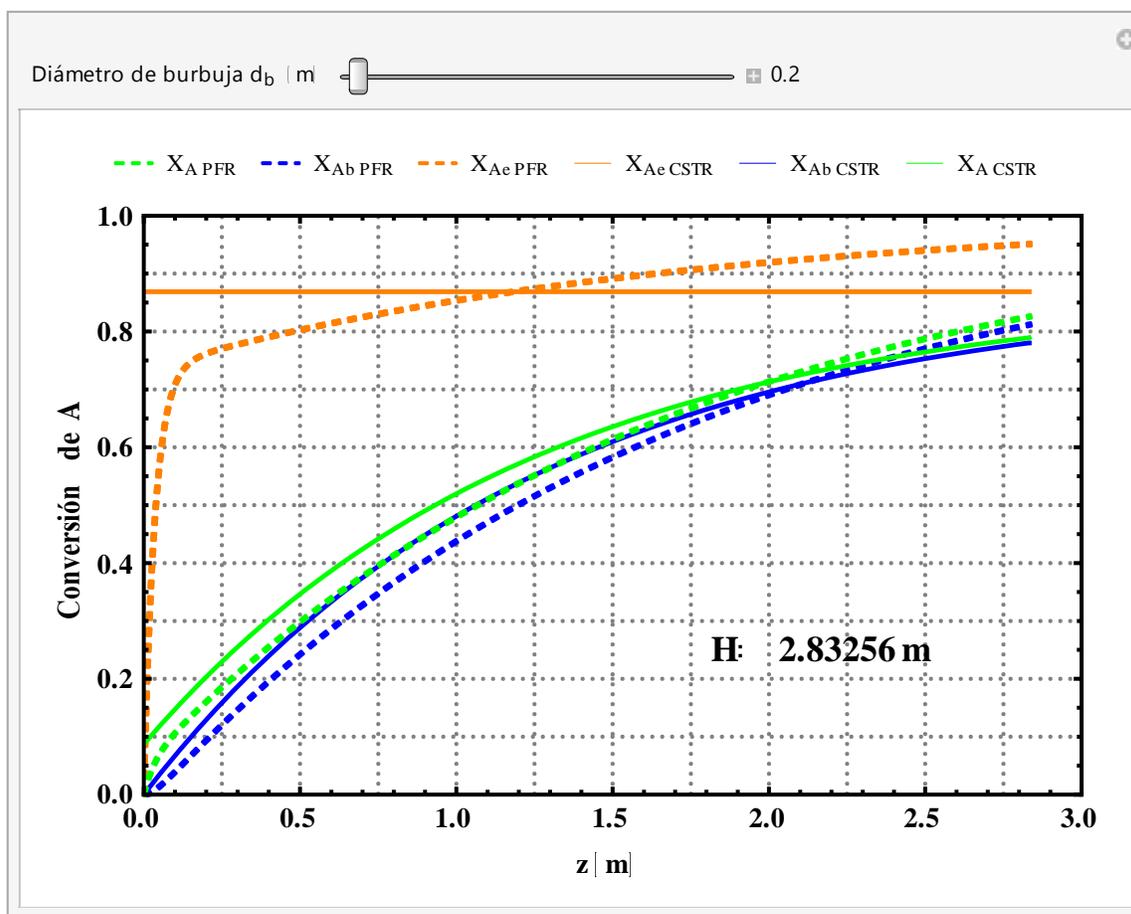


Figura 3.3 Condiciones de fluidización normal obtenidas con los siguientes diámetros de burbuja: (a) de 0.20 m y (b) de 0.44 m, bajo el modelo D-H/CSTR.

### Composición a lo largo del lecho fluidizado

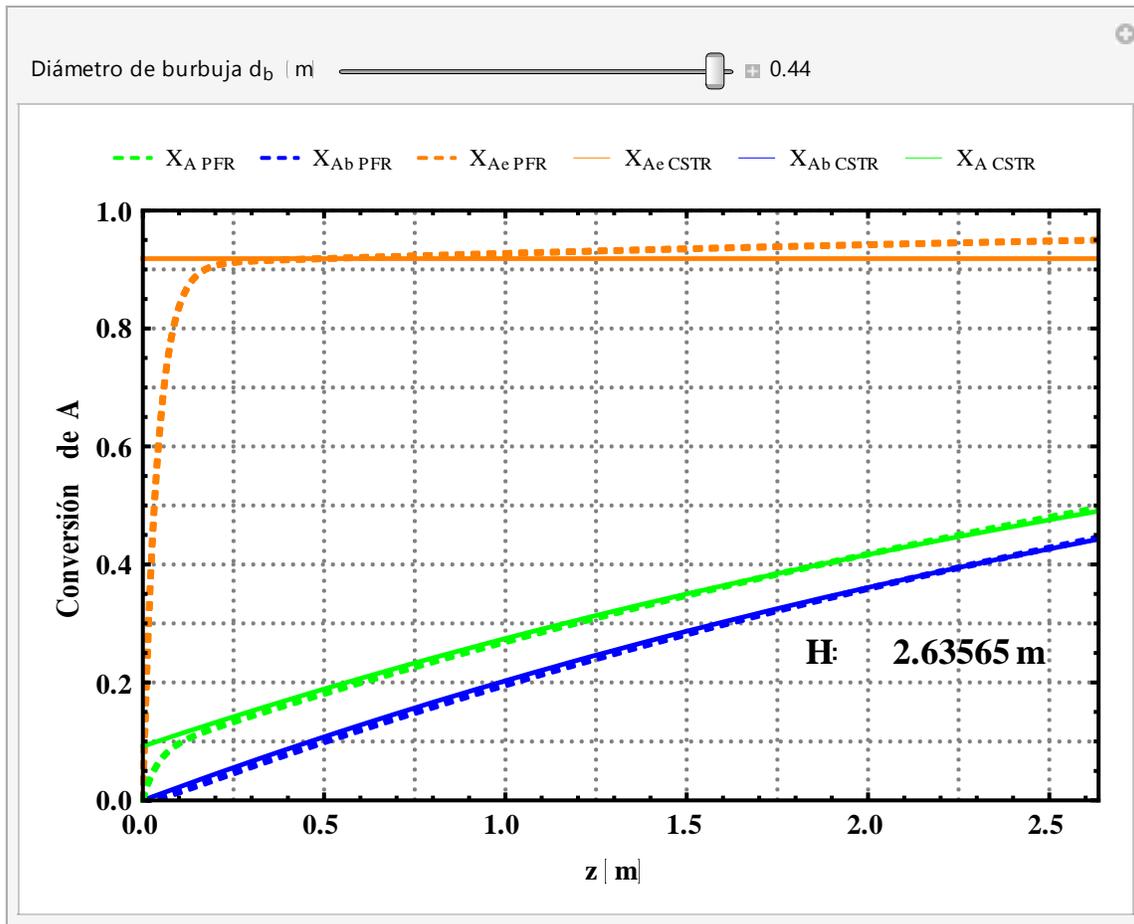
Una vez presentada la composición de la corriente de salida en ambos modelos, resulta interesante analizar sus perfiles en su paso por el lecho fluidizado, es por ello, que para el modelo D-H/CSTR y el modelo D-H/PFR, se calculó la composición a lo largo del lecho fluidizado ( $0 \leq z \leq H$ ) en términos de conversión porcentual del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, la *fase-emulsión* y la *total* ( $X_{Ae}(z)$ ,  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$ ), respectivamente. Los perfiles del modelo D-H/PFR se toman como referencia (líneas discontinuas). En las gráficas 3.5 y 3.6, la conversión porcentual en la *fase-burbuja*,  $X_{Ab}(z)$ , se identifica con color azul, la conversión porcentual en la *fase-emulsión*,  $X_{Ae}(z)$ , con color naranja y la *total* (o del lecho en su conjunto),  $X_A(z)$ , se identifica con color verde, para el modelo D-H/CSTR (líneas continuas).



Gráfica 3.5 Perfiles de conversión de A en un RLF para un diámetro de burbuja ( $d_b$ ) de 0.20 m, bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $X_{A_b}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{A_e}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 3.5 para un tamaño de burbuja de 0.20 m, se observa que el perfil de conversión de la *fase-emulsión*  $X_{A_e}(z)$ , del sistema modelado con D-H/CSTR (línea continua) es constante a lo largo del lecho, teniendo una conversión del reactivo del 86 %; siendo este perfil mayor que el de  $X_{A_e}(z)$  del sistema modelado con D-H/PFR (línea discontinua) en el primer metro del lecho. Posteriormente, se igualan en donde la altura del lecho es de 1.2 m, aproximadamente, a partir de este punto  $X_{A_e}(z)$  de D-H/PFR, es mayor hasta al final del lecho (cuya expansión fue de 2.83 m), obteniendo una conversión del reactivo de 96 % en la *fase-emulsión*, diez unidades más a la obtenida con el modelo D-H/CSTR.

El perfil de conversión de la *fase-burbuja*  $X_{Ab}(z)$ , como la *total*  $X_A(z)$ , tienden a tener el mismo comportamiento en su paso por el lecho, en un principio se tienen perfiles mayores para el sistema modelado con *fase-emulsión* como CSTR, sin embargo, se igualan al sistema D-H/PFR a una altura cercana a los 2.05 m. A partir de este punto y hasta el final del lecho (2.83 m), es mayor el perfil de conversión de la *fase-burbuja*  $X_{Ab}(z)$ , como el *total*  $X_A(z)$ , en el sistema D-H/PFR. Todo ello, se traduce en bajas conversiones en la corriente de salida del lecho fluidizado para el sistema modelo con D-H/CSTR.



Gráfica 3.6 Perfiles de conversión de A en un RLF para un diámetro de burbuja ( $d_b$ ) de 0.44 m, bajo el modelo D-H/CSTR (línea continua) y del modelo D-H/PFR (línea discontinua), en la *fase-burbuja* ( $X_{Ab}$  color azul), *fase-emulsión* ( $X_{Ae}$  color naranja) y del lecho en su conjunto ( $X_A$  color verde), en función de la altura del lecho fluidizado ( $z$ ).

En la Gráfica 3.6 se observa que el modelado con un tamaño de burbuja mayor (0.44 m), provoca que incremente la conversión de la *fase-emulsión*  $X_{Ae}(z)$  D-H/CSTR, igualándose rápidamente con  $X_{Ae}(z)$  D-H/PFR, en tan solo los primeros 0.25 m de lecho. Por otro lado, los perfiles de la *fase-burbuja*  $X_{Ab}(z)$ , y la del lecho en su conjunto  $X_A(z)$ , también se igualan en los primeros metros del lecho, con lo cual se presentan perfiles de conversión ( $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$ ), muy parecidos en ambos modelos. Los perfiles  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$  de D-H/CSTR son ligeramente mayores a los de D-H/PFR en los primeros 1.75 m del lecho, a partir de esta altura  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$  de ambos sistemas, se sobreponen hasta llegar a 2.25 m de recorrido, de este punto y hasta la altura final del lecho (cuya expansión es de 2.63 m) los perfiles de conversión  $X_{Ab}(z)$  y  $X_A(z)$  de D-H/PFR son mayores.

Bajo el modelo D-H/CSTR se tiene una conversión *total*  $X_A$  de 49.03 %. El sistema modelado con D-H/PFR logró una conversión *total*  $X_A$  de 49.57 %. Los resultados obtenidos en ambos sistemas son muy parecidos, como se observa tanto en la Tabla 3.2 como en la Gráfica 3.6, sin embargo, la capacidad de transformar reactivo es ligera, pero claramente mayor, en el sistema modelado con D-H/PFR.

### **Análisis**

En este caso se aplicó el modelo D-H/CSTR, teniendo como referencia el modelo D-H/PFR para simular el efecto sobre la conversión del reactivo de interés en las dos fases que constituyen el lecho fluidizado (*fase-burbuja*  $X_{Ab}$  y *fase-emulsión*  $X_{Ae}$ ) y, consecuentemente, en el lecho fluidizado en su conjunto  $X_A$ , que se tiene al variar el diámetro de burbuja  $d_b$ .

Los resultados de esta simulación permitieron observar nuevamente que la disminución del tamaño de la burbuja se tradujo en un incremento en la capacidad del lecho fluidizado para convertir el reactivo en producto para ambos modelos. Por otro lado, la acción de aumentar el diámetro de burbuja reduce la capacidad de transformar reactivo en producto. Las conversiones en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión*, como la *total*, en ambos modelos, son casi idénticas cuando se resuelve para un tamaño de burbuja mayor. Para explicar este resultado, primero se aclara cómo cambiaron los parámetros propios de un RLF bajo el modelo Davidson-Harrison (1963), que dependen de  $d_b$ . Con esa información se analizan los procesos físicos y químicos que contemplan los modelos D-H/CSTR y D-H/PFR y así explicar por qué al aumentar  $d_b$  se tienen conversiones muy parecidas en ambos modelos.

### Parámetros que dependen de $d_b$

A continuación, se muestra el cambio que sufren los parámetros del modelo D-H/CSTR, relacionados directa e indirectamente con  $d_b$ , cuando el valor de este último se cambia. Para ello, se utilizó una flecha dirigida hacia abajo ( $\downarrow$ ) o hacia arriba ( $\uparrow$ ), dependiendo de si el parámetro en cuestión disminuye o aumenta, respectivamente. Las ecuaciones que dependen directamente  $d_b$  se revisan enseguida, bajo la consideración de un aumento en el diámetro de burbuja (i.e.  $\uparrow d_b$ ).

Velocidad de ascenso de una burbuja,  $u_{br}$ :

$$u_{br} = 0.711(g d_b)^{1/2}$$

Por lo tanto:  $\uparrow d_b$  implica que  $\uparrow u_{br}$

Velocidad de ascenso de todas las burbujas en el lecho,  $u_b$ :

$$u_b = u_0 - u_{mf} + u_{br}$$

Por lo tanto:  $\uparrow u_{br}$  implica que  $\uparrow u_b$

Un aumento en la velocidad de ascenso de todas las burbujas en el lecho,  $u_b$ , se traduce en una reducción en el tiempo de residencia de las burbujas dentro del lecho, disminuyendo la transferencia de materia entre fases y la zona de reacción.

Fracción de huecos del lecho fluidizado,  $\delta$ :

$$\delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b}$$

Por lo tanto:  $\uparrow u_b$  implica que  $\downarrow \delta$

El aumento en las dimensiones de las burbujas no favorece a tener una mayor fracción de huecos, como se supondría.

Altura del lecho fluidizado,  $H$ , en condiciones normales de fluidización:

$$H = \frac{H_0}{1 - \delta}$$

Por lo tanto:  $\downarrow \delta$  implica que  $H \downarrow$

Al verse disminuida la expansión del lecho fluidizado en condiciones normales de fluidización se dispondrá de un menor tiempo de residencia y con ello una menor zona de reacción.

El tamaño de la burbuja tiene una influencia importante en la transferencia de masa entre la *fase-burbuja* y la *fase-emulsión*, por ello, se analiza para una sola burbuja, como se ve afectada el área de transferencia de masa en una burbuja,  $S$ , el flujo volumétrico de transferencia de masa entre fases a través,  $q$ , el coeficiente de transporte entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*,  $k_g$ , y el coeficiente global de transporte para una burbuja,  $Q$ .

Área de transferencia de masa de una burbuja,  $S$ :

$$S = \pi d_b^2$$

Por lo tanto, si  $d_b \uparrow$  ello implica que  $S \uparrow$

Flujo volumétrico de transferencia de masa entre dichas fases a través de una burbuja,  $q$ :

$$q = \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2$$

Por lo tanto, si  $d_b \uparrow$  ello implica que  $q \uparrow$

Coficiente de transporte entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*,  $k_g$ :

$$k_g = 0.975\sqrt{D} \left(\frac{g}{d_b}\right)^{1/4}$$

Por lo tanto, si  $d_b \uparrow$  ello implica que  $k_g \downarrow$

Coefficiente global de transporte para una burbuja,  $Q$ :

$$Q = q + k_g S$$

Por lo tanto, si  $d_b \uparrow$  ello implica que  $Q \uparrow$

De acuerdo al análisis presentado, la acción de aumentar el tamaño de burbuja, implica una mejora en la transferencia de masa entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión* para una sola burbuja. A continuación, se desarrolla el análisis para todas las burbujas presentes en el lecho. Se calculó cuántas burbujas están contenidas dentro del lecho fluidizado,  $N_b$ , cuando se modela para un diámetro de 0.20 m y 0.44 m. Aunado a esto, se incluye el cálculo del área superficial total,  $S_t$ , flujo volumétrico de transferencia de masa total,  $q_t$ , coeficiente de transporte entre fases total,  $k_{gt}$ , y el coeficiente global de transporte total,  $Q_t$ .

- Cálculo de los parámetros del modelo D-H/CSTR con diámetro de burbuja de 0.20 m.

Se puede conocer el número de burbujas presentes en el lecho a partir de la siguiente ecuación:

$$N_b V = \frac{H - H_0}{H}$$

Donde el volumen promedio de las burbujas se conoce de:

$$V = \frac{\pi d_b^3}{6}$$

La fracción de gas en lecho está definido:

$$\delta = \frac{(H - H_0)}{H}$$

Número de burbujas presentes en el lecho fluidizado:

$$N_b = \frac{6\delta}{\pi d_b^3}$$

$$N_b = \frac{6(0.213371)}{\pi(0.20)^3} = 50.93 \approx 51 \text{ burbujas}$$

Por su parte, el área total de transferencia de masa en el lecho fluidizado,  $S_t$ , es:

$$S_t = S N_b = (\pi d_b^2) \left( \frac{6\delta}{\pi d_b^3} \right) = \frac{6\delta}{d_b}$$

$$S_t = \frac{6(0.154602)}{0.20} = 6.40 \text{ m}^2$$

El flujo volumétrico de transferencia de masa entre fases a través de todas las burbujas,  $q_t$ , es:

$$q_t = N_b q = \left( \frac{6\delta}{\pi d_b^3} \right) \left( \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2 \right) = \frac{9\delta u_{mf}}{2d_b}$$

$$q_t = \frac{9(0.213371)(0.03)}{2(0.20)} = 0.14400101 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$

Coefficiente de transporte entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*,  $k_g$ , de todas las burbujas:

$$k_{gt} = N_b k_g = \left( \frac{6\delta}{\pi d_b^3} \right) \left( 0.975\sqrt{D} \left( \frac{g}{d_b} \right)^{1/4} \right) = \frac{5.85\delta\sqrt{D}g^{1/4}}{\pi d_b^{3.25}}$$

$$k_{gt} = \frac{5.85\sqrt{(20 \times 10^{-6})(9.81)^{1/4}(0.213371)}}{\pi 0.20^{3.25}} = 0.58754885 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

El coeficiente global de transporte para todas las burbujas presentes en el lecho:

$$Q_t = q_t + k_{gt} S_t$$

$$Q_t = \frac{9\delta u_{mf}}{2d_b} + \left( \frac{5.85\delta\sqrt{D}g^{1/4}}{\pi d_b^{3.25}} \right) \left( \frac{6\delta}{d_b} \right)$$

$$Q_t = 0.14400101 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} + \left( 0.58754885 \frac{\text{m}}{\text{s}} \right) * 6.4 \text{ m}^2 = 3.90431366 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$

- Cálculo de los parámetros del modelo D-H/CSTR con diámetro de burbuja de 0.44 m.

Número de burbujas presentes en el lecho fluidizado:

$$N_b = \frac{6(0.154602)}{\pi(0.44)^3} = 3.466 \approx 4 \text{ burbujas}$$

Área total de transferencia de masa en el lecho fluidizado,  $S_t$ , es:

$$S_t = \frac{6(0.154602)}{0.44} = 2.11 \text{ m}^2$$

El flujo volumétrico de transferencia de masa entre fases a través de todas las burbujas,  $q_t$ , es:

$$q_t = \frac{9(0.154602)(0.03)}{2(0.44)} = 0.04743152 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$

Coefficiente de transporte entre la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*,  $k_g$ , de todas las burbujas:

$$k_{gt} = \frac{5.85(0.154602)\sqrt{(20 \times 10^{-6})(9.81)^{1/4}}}{\pi 0.44^{3.25}} = 0.0328315 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

El coeficiente global de transporte para todas las burbujas presentes en el lecho:

$$Q_t = 0.04743152 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} + \left(0.0328315 \frac{\text{m}}{\text{s}}\right) * 2.11 \text{ m}^2 = 0.11670608 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$

De acuerdo a lo anterior, la transferencia de materia entre fases es mayor cuando se opera con un diámetro de burbuja de 0.20 m, esto se debe principalmente a las 51 burbujas presentes en el lecho, las cuales a pesar de su reducida dimensión y limitación de transferir materia, es debido a la gran cantidad de estas, lo que provoca tener un área superficial global de 6.20 m<sup>2</sup> en todo el lecho, derivando en una mayor transferencia de materia.

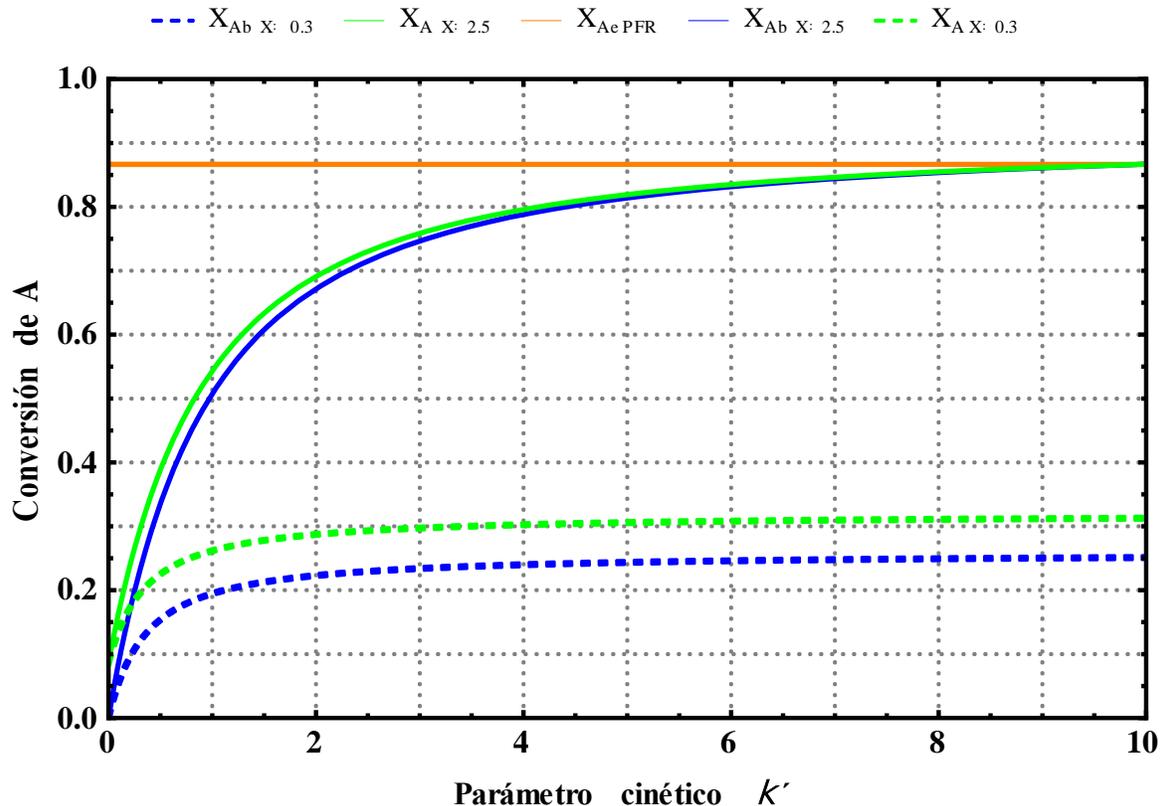
La acción de operar con un diámetro de burbuja de 0.44 m, deriva en la presencia de tan solo 4 burbujas en el lecho, cada una con una mayor capacidad de transportar materia (comparado con las burbujas de 0.20 m de diámetro). Sin embargo, esta última cantidad logra tan solo un área superficial de 2.11 m<sup>2</sup> en todo el lecho, esto se traduce en una deficiencia de intercambio de materia entre fases, para este diámetro de burbuja se tiene un coeficiente global de transporte  $Q_t = 0.1167 \text{ m}^3/\text{s}$ , mucho menor al obtenido con  $d_b$  de 0.20 m, cuyo valor fue de  $Q_t = 3.9043 \text{ m}^3/\text{s}$ . Todo lo anterior indica que la operación del RLF depende de la cantidad total de burbujas  $N_b$  que se hacen presentes en el lecho, y del tiempo en que tarden cruzar el mismo.

Parámetro adimensional X:

$$X = \frac{Q H}{u_b V}$$

Por lo tanto, si  $d_b \uparrow$  ello implica que  $X \downarrow$

Al ser este parámetro un indicativo de la facilidad con la que el sistema fluidizado transfiere materia de una fase a otra, dicha facilidad se ve disminuida a la acción de aumentar el diámetro de burbuja, derivando en bajas conversiones en la *fase-burbuja*, como en la *total*, donde estos perfiles están más separados del perfil de la *fase-emulsión*. Caso contrario ocurre cuando se tiene un aumento en el valor de X, lo cual indica que se tiene una mejora en el intercambio de materia entre burbuja y emulsión, viéndose beneficiada la *fase-burbuja* y *total*, donde sus perfiles de crecimiento estarían más cercanos al perfil de la *fase-emulsión*, como se muestra en la Gráfica 3.7.



Gráfica 3.7 Perfiles de conversión de A en un RLF para valores del parámetro X de 2.5 (líneas continuas) y 0.3 (líneas discontinuas), bajo el modelo D-H/CSTR, en función del parámetro cinético ( $\kappa'$ ).

Balance de materia de la *fase-emulsión*:

El balance de materia contiene los tres parámetros que definen el Modelo de Davidson-Harrison (1963), donde se toma en cuenta la cinética de la reacción (únicamente en esta fase es donde se lleva a cabo la reacción química), con el parámetro cinético  $\kappa'$ , al igual que la fracción de gas que atraviesa el lecho en la *fase-burbuja*,  $\beta$ , ambos parámetros se mantienen constantes para los dos diámetros de burbuja modelados. La diferencia radica únicamente en el parámetro X (facilidad de intercambio de materia entre fases), es por ello que, a continuación se analiza el balance de materia en la *fase-emulsión* del modelo D-H/CSTR.

$$C_{Ae} = \frac{C_{A0}(1 - \beta e^{-X})}{(\kappa' + 1 - \beta e^{-X})}$$

- Concentración molar y conversión del reactivo para un tamaño de burbuja de 0.20 m, en la *fase-emulsión* bajo el modelo D-H/CSTR:

$$\beta e^{-X} = 0.9e^{-2.2856} = 0.0915$$

$$C_{Ae} = \frac{100(1 - 0.9e^{-2.2856})}{6.01099 + 1 - 0.9e^{-2.2856}} = \frac{90.845}{6.919} = 13.13 \text{ mol/m}^3$$

$$X_{Ae} = 86.87 \%$$

- Concentración molar y conversión *total* del reactivo para un tamaño de burbuja de 0.44 m, en la *fase-emulsión* bajo el modelo D-H/CSTR:

$$\beta e^{-X} = 0.9e^{-0.6579} = 0.4661$$

$$C_{Ae} = \frac{100(1 - 0.9e^{-0.6579})}{6.01099 + 1 - 0.9e^{-0.6579}} = \frac{53.385}{6.544} = 8.15 \text{ mol/m}^3$$

$$X_{Ae} = 91.84 \%$$

De acuerdo a los cálculos presentados, un valor elevado de X (en el producto  $\beta e^{-X}$ ), impacta negativamente en el balance de la emulsión (numerador), mientras que un valor bajo de X, favorece el producto  $\beta e^{-X}$ , del numerador; es por ello que para un diámetro de burbuja de 0.20 m, exista una mayor diferencia entre las conversiones de la corriente de salida de la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y *total*, con respecto a las obtenidas en el modelo D-H/PFR. Al resolver con un diámetro de burbuja de 0.44 m bajo el modelo D-H/CSTR, las concentraciones, al igual que la conversiones del reactivo, en la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y *total* (a la salida del reactor) son cercanas a las obtenidas con el modelo D-H/PFR, derivando en perfiles de conversión (*fase-burbuja* y *total*) muy parecidos en ambos modelos, como se muestran en la Gráfica 3.6.

## Conclusión

El aumento en el diámetro de la burbuja a un valor de 0.44 m, se traduce en un menor tiempo de residencia, donde el reactivo y producto tiene menos tiempo para transferirse de una fase a otra. La principal razón para obtener conversiones del reactivo de interés muy bajas, se debe a una drástica reducción del número de burbujas presentes en el lecho fluidizado. Al resolver ambos modelos para este tamaño de burbuja, se obtiene una cantidad de 4 burbujas, logrando apenas una conversión *total* del reactivo en el modelo D-H/CSTR de 49.03 % y en el modelo D-H/PFR de 49.57 % y una expansión del lecho de  $H=2.63$  m. A pesar de tener dentro del reactor burbujas con mayores dimensiones, no implica, que en conjunto, se tenga una mayor transferencia de materia entre fases. La presencia de un número muy reducidos de burbujas también impacta negativamente en la expansión del reactor, lo cual se traduce en un menor tiempo de contacto entre burbuja y emulsión para transferirse materia. La acción de disminuir el diámetro de la burbuja a 0.20 m fue favorable, ya que se tiene un aumento importante en la cantidad de burbujas presentes en el lecho, la cual asciende a 51 burbujas, provocando una expansión del lecho de 2.83 m y una conversión *total* del reactivo en el modelo D-H/CSTR de 78.92 % y en el modelo D-H/PFR de 82.55 %.

De lo anterior, se concluye que la operación de un RLF depende de la cantidad de burbujas presentes en el lecho fluidizado y del tiempo que éstas tengan para transferir materia entre fases en su paso por el lecho. Las conversiones de la *fase-emulsión*, *fase-burbuja* y *total* del modelo que considera a la *fase-emulsión* como un reactor de mezcla completa D-H/CSTR son ligeramente menores a las obtenidas en el modelo D-H/PFR. Para un tamaño de burbuja de 0.20 m, esta diferencia se hace un poco mayor, ya que en los resultados obtenidos con un diámetro de burbuja de 0.44 m, la diferencia es casi nula, por ello, se obtienen mejores resultados al resolver el RLF bajo el modelo D-H/PFR, es decir, al considerar a la *fase-emulsión* como un reactor de flujo pistón.

## CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En general, el trabajo que aquí se reporta permite concluir que es posible simular el comportamiento isotérmico de un reactor de lecho fluidizado, en el cual se lleva a cabo una reacción irreversible y de primer orden utilizando dos versiones del Modelo de Davidson-Harrison, que se resolvieron utilizando *Mathematica*® como herramienta de cómputo. Las dos versiones del modelo de Davidson-Harrison asumen que la reacción ocurre únicamente en la *fase-emulsión*, pero en una de ellas la *fase-emulsión* se comporta como un reactor de tipo flujo pistón (D-H/PFR), mientras que en la otra lo hace como un reactor continuo agitado (D-H/CSTR). Los resultados de la simulación de dichos sistemas permitieron analizar el efecto que tiene el valor de parámetros del reactor, tales como diámetro de burbuja  $d_b$ , diámetro del reactor  $d_R$ , y velocidad superficial del gas de entrada  $u_0$ , sobre la conversión de reactivo A ( $X_A$ ). En particular, se pudo comprobar que con modelo D-H/PFR se alcanza una mayor conversión de reactivo que con el D-H/CSTR.

### Modelo 1

Simular al modelo D-H/PFR un aumento en el diámetro de las burbujas de 0.44 m, provocó que la conversión *total* se redujera a 49.57 % (con respecto al Caso Base), debido a una disminución en la altura del lecho a condiciones normales de fluidización, reduciendo el tiempo de residencia y derivando en una canalización del gas. Por otra parte, disminuir el diámetro de la burbuja a 0.20 m fue favorable, obteniendo una conversión *total* de 82.55 %, debido a un mayor número de burbujas presentes en el lecho, aumentando el área total de transferencia de materia entre fases y elevando el tiempo de residencia de la burbuja dentro del lecho.

Para un diámetro de reactor de 2.15 m se tiene una conversión *total* de 58.66 %, debido a una baja expansión del lecho fluidizado, reduciendo la tasa de transferencia de masa entre ambas fase. Por otro lado, al disminuir el diámetro de reactor a 1.68 m se obtiene una conversión *total* de 75.29 %, dicho valor es provocado por un aumento en la altura del lecho en condiciones normales de fluidización y, con ello, en una mayor zona de reacción.

Por último, a una velocidad superficial del gas de 0.15 m/s se obtiene una conversión *total* de 69.96 %. A medida que el valor de este parámetro aumenta, la conversión *total* del reactivo se reduce, donde a una velocidad superficial del gas de 2 m/s se obtiene una conversión *total* de 39.21 %. Lo anterior, es debido a un incremento en la velocidad de ascenso de las burbujas, reduciendo el tiempo de residencia de las burbujas dentro del lecho, además, se provoca un sobredimensionamiento del reactor debido a la elevada altura final del lecho a condiciones normales de fluidización.

## Modelo 2

Para el modelo D-H/CSTR, se analizó el comportamiento del reactor de lecho fluidizado teniendo como única variable independiente al diámetro de burbuja,  $d_b$ . El aumento en el tamaño de las burbujas a 0.44 m provocó que se obtuviera una conversión *total* de 49.03 %, debido a una reducida cantidad de apenas 4 burbujas presentes en el lecho. Tener dentro del reactor burbujas con mayores dimensiones no implica que, en conjunto, se tenga una mayor transferencia de materia entre fases. Por otro lado, disminuir el diámetro de la burbuja a 0.20 m fue favorable, obteniendo una conversión *total* de 78.92 %, debido a la presencia de 51 burbujas involucradas en la transferencia de materia y expansión del lecho.

## Modelo 1 vs Modelo 2

La simulación bajo el modelo D-H/CSTR deriva en una menor conversión *total* del reactivo en la corriente de salida del lecho, comparada con la del modelo D-H/PFR. Lo anterior, se debe principalmente a una disminución en la conversión de la *fase-emulsión* del modelo D-H/CSTR, cuyo valor para un diámetro de burbuja de 0.20 m es de 86.87 %, mientras que para éste mismo diámetro en el modelo D-H/PFR la conversión en la *fase-emulsión* fue de 95.09 %. El aumento en el tamaño de las burbujas a 0.44 m deriva en que nuevamente en el Modelo 1 se tenga una conversión mayor de 94.9 % en la *fase-emulsión*, mientras que en Modelo 2 es de 91.84 %. De acuerdo a lo anterior, para ambos tamaños de burbujas en el modelo D-H/CSTR se obtienen conversiones menores en la *fase emulsión*, *fase-burbuja* y del lecho en su conjunto (*total*), con respecto al modelo D-H/PFR.

### Recomendaciones

El trabajo se presentó bajo una metodología diseñada con un enfoque práctico y creativo, donde fuera posible aplicar la teoría de forma adecuada, para entender los fenómenos físico-químicos descritos en ambos modelos matemáticos de Davidson-Harrison. Lo anterior, permite la mejora del trabajo a través del aumento de la complejidad del sistema reaccionante (introduciendo reacciones paralelas, consecutivas o reversibles) a los modelos D-H/PFR y D-H/CSTR, o bien, aplicar un modelo de tres dimensiones que implemente la transferencia de las tres cantidades conservativas (masa, momento y energía). De tal manera, que el estudio presentado cuente con mayor detalle (supliendo las simplificaciones hechas aquí), con el fin de beneficiar el material de apoyo para los cursos de Ingeniería de Reactores II y Transferencia de Masa, permitiendo al estudiante analizar el comportamiento de las reacciones de interés con la ayuda de Mathematica®.

## APÉNDICE

En la presente sección se incluye el código programado en Mathematica®, así como una breve explicación de los comandos utilizados en las modelaciones realizadas.

### Uso del programa

A continuación se muestra (en secuencia), la programación del *Caso Base* bajo el modelo D-H/PFR y D-H/CSTR.

#### Matriz estequiométrica

La programación de la matriz permite extender el análisis, donde una reacción elemental, monoatómica, e irreversible ( $A \rightarrow B$ ), se tiene la oportunidad de ampliar el estudio para otro sistema de reacciones.

```
StMat[Rxs_]:=Module[{n,esps,m,EstDir,EstInv,Esteq,NT,N},
n=Length[Rxs];
esps>DeleteDuplicates[Flatten[Table[Variables[Rxs[[i,j]]],{i,1,n},{j,1,2}]]];
m=Length[esps];
EstDir=Table[Table[Coefficient[Rxs[[j,1]],esps[[i]],1],{i,1,m}],{j,1,n}];
EstInv=Table[Table[Coefficient[Rxs[[j,2]],esps[[i]],1],{i,1,m}],{j,1,n}];
N = Table[EstInv[[i]]-EstDir[[i]],{i,1,n}];
"v = Transpose[vT]";
Return[N];]
StMat::usage="StMat[{A + B → C , . . .}]
regresa la matriz estequiométrica para la red de reacciones
{A + B → C , . . . }

Ejemplo: Para las reacciones consecutivas {A → 2B, B → C}
la matriz estequiométrica es Primera reacción  $\begin{pmatrix} A & B & C \\ -1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$  ";
Segunda reacción  $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$ 
```

```

Rxs={A→B};

N=StMat[Rxs];
NT=Transpose[N];
Print["N = ", N//MatrixForm]
n=Length[Transpose[N]];
m=Length[N];
rank=MatrixRank[N];
Grid[{{"No. de reactivos/productos",n},
{"No. de reacciones",m},
{"No. de reacciones independientes",rank}},Alignment→Left,Frame→All]

```

Se crea la función que define la expresión de rapidez de reacción, cuyo argumento es la concentración [C]. Esta concentración resulta de la contribución de ambas fases, por ello, se definen las concentraciones de la *fase-burbuja* [Cbv] y *fase-emulsión* [Cev], teniendo como el argumento la altura del lecho [z]. También, se declara el coeficiente de rapidez de reacción k, el cual permanece constante al operar en condiciones isotérmicas.

```

R[C_]:= {R1[C]}
Print[Style["NT · R = ",Bold,14],NT.{ "R" }//MatrixForm]
R1[C_]:=k*C[[1]]
k=1.3*104*e( $\frac{-3.1*10^4}{Rc*T}$ )(*S-1*)
Cbv[z_]:=Table[Cbi[z],{i,1,n}];
Cev[z_]:=Table[Cei[z],{i,1,n}];

```

Se declaran las variables (condiciones de operación) y constantes necesarias para la solución de las ecuaciones que definen al modelo de Davidson-Harrison (cálculos intermedios).

```

u0=0.3; (* $\frac{m}{s}$ *)
umf=0.03; (* $\frac{m}{s}$ *)
emf=0.5; (*adim*)
db=0.32; (*m*)
g=9.8; (* $\frac{m}{s^2}$ *)

```

```

D1=20*10-6; (* $\frac{m^2}{s}$ *)
os=2000; (* $\frac{kg}{m^3}$ *)
W=7000; (*kg*)
dR=2; (*m*)

```

```

CA0=100; (* $\frac{mol}{m^3}$ *)
CB0=0; (* $\frac{mol}{m^3}$ *)
Rc=8.3144621; (* $\frac{J}{molK}$ *)
T=385; (*K*)

```

Parámetros que constituyen el modelo de Davidson-Harrison.

Velocidad de ascenso de una burbuja en un lecho, si no  $u_{mf}$ :

$$u_{br} = 0.711 (g d_b)^{1/2}$$

$$ubr = 0.711 (g * db)^{1/2}; \quad \left( * \frac{m}{s} * \right)$$

Velocidad de ascenso de una burbuja en un lecho burbujeante:

$$u_b = u_0 - u_{mf} + u_{br}$$

$$ub = u0 - umf + ubr; \quad \left( * \frac{m}{s} * \right)$$

Fracción de burbujas en el lecho:

$$\delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b}$$

$$\delta = \frac{u0 - umf}{ub};$$

Fracción de huecos de fluidización:

$$\epsilon_f = 1 - (1 - \delta)(1 - \epsilon_{mf})$$

$$\epsilon f = 1 - (1 - \delta) (1 - \epsilon m f);$$

Coefficiente de transporte

$$Q = q + k_g S$$

$$Q = q + k_g * S; \quad \left( * \frac{m^3}{s} * \right)$$

Flujo de la burbuja

$$q = \frac{3\pi}{4} u_{mf} d_b^2$$

$$q = (3 * \pi / 4) * umf * db^2; \quad \left( * \frac{m^3}{s} * \right)$$

Coefficiente de transporte entre la burbuja y emulsión:

$$k_g = 0.975 \sqrt{D} \left( \frac{g}{d_b} \right)^{1/4}$$

$$k_g = 0.975 * \sqrt{D_1} * (g/d_b)^{1/4} ; \left( \frac{m}{s} * \right)$$

Área de interfase de transferencia de la burbuja

$$S = \pi d_b^2$$

$$S = \pi * d_b^2 ; \left( m^2 * \right)$$

Parámetro adimensional X

$$X = \frac{QH}{u_b V}$$

$$X = (Q * H_f) / (u_b * V) ;$$

Parámetro adimensional  $\beta$

$$\beta = 1 - \frac{u_m f}{u_0}$$

$$\beta = 1 - u_m f / u_0 ;$$

Parámetro adimensional  $k'$

$$k' = \frac{k H_0}{u_0} = \frac{k H (1-\delta)}{u_0}$$

$$k = (H_0 * k) / u_0 ;$$

Volumen promedio de burbujas

$$V = \frac{1}{6} \pi d_b^3$$

$$V = (1/6) * \pi * (d_b)^3 ; \left( m^3 * \right)$$

Área transversal del Reactor

$$A_c = \frac{\pi}{4} d_R^2$$

$$A_c = \frac{\pi}{4} d_R^2 ; \left( m^2 * \right)$$

Altura del lecho en condiciones de fluidización

$$H = \frac{W}{A_c \rho_s (1-\epsilon_f)}$$

$$H_f = \frac{W}{A_c * \rho_s * (1-\epsilon_f)} ; \left( m * \right)$$

Hasta este punto únicamente se han declarado condiciones de operación y los parámetros que componen al modelo de Davidson-Harrison, con sus respectivos valores, símbolos y unidades pertinentes (entre paréntesis). A continuación, se procede a resolver numéricamente el Caso Base bajo el modelo D-H/PFR.

Programación de las ecuaciones diferenciales correspondientes a los balances de la *fase-burbuja* [BalMB] y *fase-emulsión* [BalME].

### Balance en la burbuja

```
BalMB=Table[Cbi' [z]==(X/Hf)*(Cev[z]-Cbv[z])[[i]],{i,1,n}];
//TableForm
```

### Balance en la emulsión

```
BalMEPFR=Table[(1-β)*Cei' [z]+β*Cbi' [z]+(k/Hf)*Cev[z] [[i]]==0,{i,1,n}];
//TableForm
```

Ambas ecuaciones son agrupadas en [EcA] mediante el comando [Join], con el fin de evitar soluciones aisladas. Se declaran las condiciones de frontera pertinentes para resolver el modelo de Davidson-Harrison considerando a la *fase-emulsión* como un reactor de flujo pistón (D-H/PFR). Para resolver [EcA] se hace uso del comando [DSolve], el cual permite encontrar una solución numérica a ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales.

```
EcA=Join[{BalMB[[1]],BalMEPFR[[1]]};
Ecs//TableForm
SOL1=DSolve[Join[EcA,{Cb1[0]==CA0},{Cb1' [0]==0}],{Cb1[z],Ce1[z]},z]
```

El paso final es correr el programa y analizar los resultados obtenidos, para ello se procede a graficar la concentración y conversión del reactivo de interés "A", en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, todo ello mediante el control [Manipulate] de Mathematica®, y así apreciar el avance en la conversión a lo largo del reactor.

Dentro del comando [Manipulate] se grafican [Plot] los perfiles de concentración del reactivo de interés, en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ .

```
Manipulate[Show[Plot[CeA[z],{z,0,H},PlotRange→{{0,Hf},
{0,100}},Frame→True,PlotLabel→Style["Perfil de
concentración de A en la emulsión y burbuja ",
Black,Bold,15],ImageSize→23 23,PlotStyle→{Orange,
Thick,{Thickness[0.007]}},Epilog→{
Inset[Style[(β*CbA[H]+(1-β)*CeA[H])"mol/m3",
14,Bold,Italic],{2.4,69}],
Inset[Style[CbA[H]"mol/m3",14,Bold,Italic],{2.4,87}],
Inset[Style[CeA[H]"mol/m3",14,Bold,Italic],{2.4,78}],
Inset[Style[H"m",14,Bold,Italic],{2.3,25}],
Inset[Style["H=",14,Bold],{2,25}],
Inset[Style["— CAe=",14,Bold],{1.90,78}],
Inset[Style["— CA =",14,Bold],{1.85,69}],
Inset[Style["— CAb =",14,Bold],{1.9,87}]}],
FrameStyle→Directive[Thick,Black,Bold,15],
FrameLabel→{"z [m]","Concentración de A [mol/m3"]},
Plot[CbA[z],{z,0,H},PlotStyle→{Blue,Thickness[0.005]}],
Plot[β*CbA[z]+(1-β)*CeA[z],{z,0,H},PlotStyle→{Green,
Thickness[0.005]}],{H,0.001,Hf}]
```

Perfiles de conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja, fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ .

```

Manipulate[Show[Plot[ $\left(\frac{CA0-CbA[z]}{CA0}\right)$ , {z, 0, H}, PlotRange→
{{0, Hf}, {0, 1}}, Frame→True, PlotStyle→
Directive[Thick], FrameStyle→
Directive[Thick, Black, Bold, 15], ImageSize→23 23,
FrameLabel→{"z [m]", "Conversión de A "},
GridLines→{{0.25, 0.50, 0.75, 1, 1.25, 1.5, 1.75,
2, 2.25, 2.5, 2.75, 3}, {0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5,
0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1}}, GridLinesStyle→
Directive[Gray, Thick, {Thickness[0.00000005]}, Dotted],
PlotLabel→Style["Perfil de conversión de A en fases
burbuja y emulsion (PFR)", Black, Bold, 14], Epilog→{
Inset[Style[ $\frac{CbA[0]-CbA[H]}{CbA[0]}100\%$ ", 16, Bold], {1.3, 0.65}],
Inset[Style[ $\frac{CbA[0]-(\beta * CbA[H] + (1-\beta) * CeA[H])}{CbA[0]}100\%$ ",
16, Bold], {1.3, 0.55}],
Inset[Style["XAe = ", 16, Bold], {0.65, 0.75}],
Inset[Style["XAb = ", 16, Bold], {0.66, 0.65}],
Inset[Style["XAH = ", 16, Bold], {0.56, 0.55}],
Inset[Style[ $\frac{CbA[0]-CeA[H]}{CbA[0]}100\%$ ", 16, Bold],
{1.3, 0.75}]}],
Plot[ $\left(\frac{CA0-CeA[z]}{CA0}\right)$ , {z, 0, H}, PlotRange→{{0, Hf}, {0, 1}},
Frame→True, PlotStyle→{Orange, Thick, {Thickness[0.007]}}],
Plot[ $\left(\frac{CA0-(\beta * CbA[z] + (1-\beta) * CeA[z])}{CA0}\right)$ , {z, 0, H},
PlotRange→{{0, Hf}, {0, 1}}, Frame→True,
PlotStyle→{Green, Thick, {Thickness[0.007]}}], {H, 0.001, Hf}]

```

A continuación, se muestra el modelo de Davidson-Harrison, considerando a la *fase-emulsión* como un reactor de mezcla completa, D-H/CSTR.

Programación de la ecuación algebraica correspondiente al balance de la *fase-emulsión* [BalMECSTR] y de la ecuación diferencial del balance de la *fase-burbuja* [BalMBC].

```
BalMECSTR=(CA0*(1-beta*e^-X))/(1+k-beta*e^-X);
BalMBC=DSolve[{Cbc'[z]==(X/Hf)*(BalMECSTR-Cbc[z]),Cbc[0]==CA0},Cbc[z],z]
```

Perfiles de concentración del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ , bajo el modelo D-H/CSTR.

```
Manipulate[Show[Plot[CbAcstr[z],{z,0,H},PlotRange->{{0,Hf},
{0,100}},Frame->True,PlotStyle->{Blue,Thickness[0.005]},
FrameStyle->Directive[Thick,Black,Bold,15],ImageSize->23 23,
FrameLabel->{"z [m]","Concentracion de A"},PlotLabel->
Style["Perfil de concentracion de A en fases burbuja y
emulsion (CSTR)",Black,Bold,14],Epilog->{
Inset[Style[(beta*CbAcstr[H]+(1-beta)*BalMECSTR)"mol/m^3",
14,Bold],{2.4,69}],
Inset[Style[CbAcstr[H]"mol/m^3",14,Bold],{2.4,87}],
Inset[Style[BalMECSTR)"mol/m^3",14,Bold],{2.4,78}],
Inset[Style[H"m",14,Bold,Italic],{2.3,25}],
Inset[Style["H=",14,Bold],{2,25}],
Inset[Style["Ce1=",14,Bold],{1.88,78}],
Inset[Style["Cb1 =",14,Bold],{1.88,69}],
Inset[Style["CH CSTR=",14,Bold],{1.9,87}]}],
FrameStyle->Directive[Thick,Black,Bold,15]],
Plot[BalMECSTR,{z,0,H},PlotStyle->{Orange,
Thickness[0.005]}],
Plot[beta*CbAcstr[z]+(1-beta)*BalMECSTR,{z,0,H},
PlotStyle->{Green,Thickness[0.005]}],{H,0.001,Hf}]
```

Perfiles de conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja, fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ , bajo el modelo D-H/CSTR.

```

Manipulate[Show[Plot[(CA0-CbAcstr[z])/CA0,{z,0,H},PlotRange→
{{0,Hf},{0,1}},Frame→True,PlotStyle→{Blue,Thickness[0.005]},
GridLines→{{0.25,0.50,0.75,1,1.25,1.5,1.75,2,2.25,2.5,2.75,3},
{0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8,0.9,1}},GridLinesStyle→
Directive[Gray,Thick,{Thickness[0.0000005]},Dotted],
FrameStyle→Directive[Thick,Black,Bold,15],ImageSize→23 23,
FrameLabel→{"z [m]","Conversion de A "},
PlotLabel→Style["Perfil de conversion de A en fases
burbuja y emulsion (CSTR)",Black,Bold,14],Epilog→{
Inset[Style[(CA0-(β*CbAcstr[H]+(1-β)*BalMECSTR))/CA0*100"%",
14,Bold],{0.8,.6}],
Inset[Style[(CA0-CbAcstr[H])/CA0*100"%",14,Bold],{0.8,.8}],
Inset[Style[(CA0-BalMECSTR)/CA0*100"%",14,Bold],{0.8,.7}],
Inset[Style[H"m",14,Bold,Italic],{2.23,.25}],
Inset[Style["H=",14,Bold],{1.95,.25}],
Inset[Style["XAe =",14,Bold],{0.4,.7}],
Inset[Style["XAH =",14,Bold],{0.4,.6}],
Inset[Style["XAeb =",14,Bold],{0.4,.8}]}],FrameStyle→
Directive[Thick,Black,Bold,15]],Plot[(CA0-BalMECSTR)/CA0,
{z,0,H},PlotStyle→{Orange,Thickness[0.005]}],
Plot[(CA0-β*CbAcstr[z]+(1-β)*BalMECSTR)/CA0,{z,0,H},
PlotStyle→{Green,Thickness[0.005]}]],{H,0.001,Hf}]

```

### Solución analítica

A continuación, se presenta la programación requerida en la solución analítica del modelo D-H/PFR y D-H/CSTR.

Dentro de la hoja de cálculo se borra el valor de los parámetros adimensionales  $X$ ,  $\beta$  y  $k$ , mediante el comando [Clear], con el fin de no generar resultados, al ir declarando las variables del método analítico.

```
Clear[X,k,β,Hf]
SolA=DSolve[Hf^2*(1-β)Cb'[z]+Hf*(X+k)*Cb'[z]+k*X*Cb[z]==0,Cb[z],z]
```

Programación de las ecuaciones correspondientes a los balances de la *fase-burbuja* [Cbb] Ecuación (32) y *fase-emulsión* [Cee] Ecuación (22).

```
Cbb=e^m1*z C11+e^m2*z C22;
Cee=D[(Hf1/X1)*Cbb,z]+Cbb
```

Se introducen los valores de los parámetros adimensionales  $X$ ,  $\beta$  y  $k$ .

```
X=1.0869302035847737;
k=6.0109905477389285;
β=0.9;
Hf=2.7059781789620443;
```

Se declaran  $m_1$  y  $m_2$ , que son las raíces cuadráticas de la ecuación diferencial de segundo orden -Ecuación (31)-:

$$m_1 = \frac{\left( X+k - \sqrt{X^2 - 2 X k + k^2 + 4 X k \beta} \right)}{2 Hf (-1+\beta)}$$

$$m_2 = \frac{\left( X+k + \sqrt{X^2 - 2 X k + k^2 + 4 X k \beta} \right)}{2 Hf (-1+\beta)}$$

Se introducen  $C_1$  y  $C_2$ , que son constantes expresadas en términos de las condiciones de frontera del RLF:

$$C_1 = -m_2 * CA_0 / (m_1 - m_2)$$

$$C_2 = CA_0 - C_1$$

Una vez citadas todas las variables requeridas, se crea una función [Graf], donde se agrupan estas variables y pasan a ser resueltas, obteniendo los perfiles de concentración del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión*, y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ , bajo el modelo D-H/PFR.

```

GRAF[X_, β_] :=
Module[{m1, m2, C1, C2, Cb, Ce},
  m1 = 
$$\frac{(X + k - \sqrt{X^2 - 2 X k + k^2 + 4 X k \beta})}{2 Hf (-1 + \beta)}$$
;
  m2 = 
$$\frac{(X + k + \sqrt{X^2 - 2 X k + k^2 + 4 X k \beta})}{2 Hf (-1 + \beta)}$$
;
  C1 = (-m2*CA0) / (m1 - m2);
  C2 = CA0 + ((m2*CA0) / (m1 - m2));
  Cb = C1*em1*z + C2*em2*z;
  Cee = D[(Hf/X)*Cb, z] + Cb;
  Ce = (C1*em1*z*(1 + m1*Hf/X) + C2*em2*z(1 + m2*Hf/X));
  Show[Plot[Cb, {z, 0, Hf}, PlotStyle → {Blue, Thickness[0.005]},
    PlotRange → {{0, Hf}, {0, 100}}, Frame → True, PlotStyle →
    {Blue, Thickness[0.005]},
    FrameStyle → Directive[Thick, Black, Bold, 15], ImageSize → 23 23,
    FrameLabel → {"z [m] ", "Concentracion de A "}, Epilog → {
    Inset[Style["— CPFR", 14, Bold], {1.95, 78}],
    Inset[Style["— CH", 14, Bold], {1.92, 69}],
    Inset[Style["— Cb", 14, Bold], {1.9, 87}]], PlotLabel →
    Style["Perfil de concentracion de A en fases burbuja y
    emulsion (PFR)", Black, Bold, 14]],
  Plot[Ce, {z, 0, Hf}, PlotStyle → {Orange, Thickness[0.005]},
    PlotRange → {{0, Hf}, {0, 100}}],
  Plot[Cee, {z, 0, Hf}, PlotStyle → {Black, Thickness[0.005]},
    PlotRange → {{0, Hf}, {0, 100}}],
  Plot[β*Cb + (1 - β)*Ce, {z, 0, Hf}, PlotStyle → {Green, Thickness
    [0.005]}, PlotRange → {{0, Hf}, {0, 100}}]]]

Manipulate[GRAF[X, β], {{X, X}, 0.1, 70, Appearance → "Labeled"},
  {{β, β}, 0, 0.999, Appearance → "Labeled"}]

```

En [Graf2] se programan los perfiles de concentración del reactivo de interés en la *fase-burbuja, fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ , bajo el modelo D-H/CSTR.

```

GRAF2[X_,β_] :=
Module[{m1,m2,C1,C2,Cb,Ce},

$$m1 = \frac{(X+k-\sqrt{X^2-2Xk+k^2+4Xk\beta})}{2Hf(-1+\beta)}$$
;

$$m2 = \frac{(X+k+\sqrt{X^2-2Xk+k^2+4Xk\beta})}{2Hf(-1+\beta)}$$
;
Ce = (β*CA0*e-X-CA0) / (β*e-X-1-k);
Cb = Ce + (CA0-Ce) * e-X/Hf*z;
Show[Plot[Ce,{z,0,Hf},PlotStyle→{Orange,Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0,Hf},{0,100}},Frame→True,PlotStyle→{Blue,
Thickness[0.005]},FrameStyle→Directive[Thick,Black,Bold,15],
ImageSize→23 23,FrameLabel→{"z [m] ","Concentracion de A
[mol/m3"]},Epilog→{Inset[Style[Ce"mol/m3","14,Bold"],{2.4,78}],
Inset[Style["— CCSTR","14,Bold"],{1.98,78}],
Inset[Style["— CH","14,Bold"],{1.92,69}],
Inset[Style["— Cb","14,Bold"],{1.9,87}]}],
PlotLabel→Style["Perfil de concentracion de A en fases
burbuja y emulsion (CSTR)","Black,Bold,14]],
Plot[Cb,{z,0,Hf},PlotRange→{{0,3},{0,100}},
PlotStyle→{Blue,Thickness[0.005]}],
Plot[β*Cb+(1-β)*Ce,{z,0,Hf},PlotRange→{{0,3},{0,100}},
PlotStyle→{Green,Thickness[0.005]}]]]

Manipulate[GRAF2[X,β],{{X,X},0.1,2.6,Appearance→"Labeled"},
{{β,β},0,0.999,Appearance→"Labeled"}]

```

## Modificación de variables

En este apartado se incluye la programación del análisis del RLF bajo el modelo D-H/PFR y D-H/CSTR, modificando sistemáticamente el valor de los siguientes parámetros:

Caso 1: Diámetro de burbuja ( $d_b$ );

Caso 2: Diámetro del reactor ( $d_R$ );

Caso 3: Velocidad superficial del gas en el lecho ( $u_0$ ).

### Diámetro de burbuja

Se crea una nueva función [PFRdbN], dejando al diámetro de burbuja como argumento, en seguida, dentro del comando [Module] se agrupan todos los parámetros que considera el modelo de Davidson Harrison (cálculos intermedios).

```
PFRdbN[db_] :=
Module[{u0, umf, emf, g, d1, rho_s, W, dR, CA0, CB0, Rc, T, m1, m2, C1, C2, Cb, Ce, k,
ubr, ub, delta, epsilon_f, Q, q, kg, S, V, Ac, H0, Hf, X, beta, k, XA, Xe, Xb, SOLNU1, Xb1, SOLNU2},
k=1.3*10^4 * e^((-3.1*10^4)/(Rc*T)); u0=0.3; umf=0.03; emf=0.5; g=9.8; d1=20*10^-6;
rho_s=2000; W=7000; dR=2; CA0=100; CB0=0; Rc=8.3144621; T=385;
ubr=0.711 (g*db)^1/2;
ub=u0-umf+ubr; delta=(u0-umf)/ub; epsilon_f=1-(1-delta)(1-emf); Q=q+kg*S;
q=(3*pi/4)*umf*db^2; kg=0.975*sqrt(d1)*(g/db)^1/4; S=pi*db^2; V=(1/6)*pi*(db)^3;
Ac=(pi/4)*dR^2; Hf=W/(Ac*rho_s*(1-epsilon_f)); H0=Hf*(1-delta);
X=(Q*Hf)/(ub*V); beta=1-umf/u0; k=(H0*k)/u0;
```

Una vez definidos todos los parámetros, se procede a programar las ecuaciones diferenciales correspondientes al balance de la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*, con sus respectivas condiciones de frontera, mediante el comando [DSolve]. También, se programa

el cálculo de la conversión del reactivo de interés en cada una de las fases [Xb, Xe y XA] respectivamente.

```
SOLNU1=DSolve[{Cb'[z]==(X/Hf)*(Ce[z]-Cb[z]),
(1-β)*Ce'[z]+β*Cb'[z]+(k/Hf)*Ce[z]==0,
Cb[0]==CA0,Cb'[0]==0},{Cb[z],Ce[z]},z];
Xb={ (CA0-Cb[z])/CA0}/.SOLNU1;
Xe={ (CA0-Ce[z])/CA0}/.SOLNU1;
XA={ (CA0-(β*Cb[z]+(1-β)*Ce[z]))/CA0}/.SOLNU1;
```

Se agrupan los perfiles de conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ , en un solo grafico mediante el comando [Show].

```
Show[Plot[Xb,{z,0,Hf},PlotLegends→Placed[{"XAb PFR"},Above],
PlotStyle→{Blue,Thickness[0.005]},PlotRange→{{0,Hf},{0,1}},
Frame→True,PlotStyle→{Blue,Thickness[0.005]},
FrameStyle→Directive[Thick,Black,Bold,15],ImageSize→23 23,
FrameLabel→{"z [m]","Conversión porcentual de A"},
Epilog→{Inset[Style[Hf"m",14,Bold],{0.76,.65}],
Inset[Style["H=",14,Bold],{0.50,.65}]},
GridLines→{{0.25,0.50,0.75,1,1.25,1.5,1.75,2,2.25,2.5,2.75,
3},{0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8,0.9,1}},GridLinesStyle→
Directive[Gray,Dotted]},Plot[Xe,{z,0,Hf},PlotLegends→
Placed[{"XAe PFR"},Above],PlotStyle→{Orange,Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0,Hf},{0,100}}},Plot[XA,{z,0,Hf},PlotLegends→
Placed["Gráfica 2.E Conversión porcentual de A en un RLF
para diferentes diámetros de burbuja (db), bajo el modelo
DH/PFR (línea continua), en la fase-burbuja (XAb Color azul),
la fase-emulsión (XAe Color naranja), la del lecho en su
conjunto (XAH Color verde), en función de la altura del lecho
fluidizado (z).",Below],PlotStyle→{Orange,Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0,Hf},{0,100}}},Plot[XA,{z,0,Hf},PlotLegends→
Placed[{"XAH PFR"},Above],PlotStyle→{Green,Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0,Hf},{0,100}}}]
```

Por último, haciendo uso de [Manipulate], se retoma la función creada, donde se tiene como argumento el diámetro de burbuja. Se le asigna un rango de valores a  $d_b$  (en este caso de 0.2 a 0.44), y mediante el control manual es posible ir variando  $d_b$ , a la vez que se aprecia dinámicamente el cambio en los perfiles de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*, del gráfico.

```
Manipulate[PFRdbN[db], {{db, 0.2, "Diámetro de burbuja  $d_b$  (m)"},
0.20, 0.44, Appearance->"Labeled"}]
```

Diámetro de reactor

Se crea una nueva función [PFRdRN], dejando al diámetro de reactor como argumento, en seguida, dentro del comando [Module] se agrupan todos los parámetros que considera el modelo de Davidson Harrison.

```
PFRdRN[dR_] :=
Module[{u0, umf, emf, g, d1, ρs, W, db, CA0, CB0, Rc, T, m1, m2, C1, C2, Cb, Ce, k,
ubr, ub, δ, εf, Q, q, kg, S, V, Ac, H0, Hf, X, β, k, XA, Xe, Xb, SOLNU1, Xb1, SOLNU2},
k=1.3*104*e( $\frac{-3.1*10^4}{Rc*T}$ ); u0=0.3; umf=0.03; emf=0.5; g=9.8; d1=20*10-6;
ρs=2000; W=7000; db=0.32; CA0=100; CB0=0; Rc=8.3144621; T=385;
ubr=0.711*(g*db)1/2;
ub=u0-umf+ubr; δ= $\frac{u0-umf}{ub}$ ; εf=1-(1-δ)(1-emf); Q=q+kg*S;
q=(3*π/4)*umf*db2; kg=0.975*√d1*(g/db)1/4; S=π*db2; V=(1/6)*π*(db)3;
Ac= $\frac{\pi}{4}$ dR2; Hf= $\frac{W}{Ac*\rho_s*(1-\epsilon f)}$ ; H0=Hf*(1-δ);
X=(Q*Hf)/(ub*V); β=1-umf/u0; k=(H0*k)/u0;
```

Programación de las ecuaciones diferenciales correspondientes al balance de la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*, con sus respectivas condiciones de frontera, mediante el comando [DSolve]. También, se programa el cálculo de la conversión del reactivo de interés, en cada una de las fases [Xb, Xe y XA], respectivamente.

```
SOLNU2=DSolve[{Cb'[z]==(X/Hf)*(Ce[z]-Cb[z]),
(1-β)*Ce'[z]+β*Cb'[z]+(k/Hf)*Ce[z]==0,
Cb[0]==CA0,Cb'[0]==0},{Cb[z],Ce[z]},z];
Xb={(CA0-Cb[z])/CA0}/.SOLNU2;
Xe={(CA0-Ce[z])/CA0}/.SOLNU2;
XA={(CA0-(β*Cb[z]+(1-β)*Ce[z]))/CA0}/.SOLNU2;
```

Se agrupan los perfiles de conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ , en un solo grafico mediante el comando [Show].

```
Show[Plot[Xb,{z,0,Hf},PlotLegends→Placed[{"XAb PFR"},Above],
PlotRange→{{0,Hf},{0,1}},PlotStyle→{Blue,Thickness[0.005]},
Frame→True,FrameStyle→Directive[Thick,Black,Bold,15],
ImageSize→23 23,FrameLabel→{"z [m] ","Conversión porcentual
de A "},Epilog→{Inset[Style[Hf"m",14,Bold],{0.76,.65}],
Inset[Style["H=",14,Bold],{0.50,.65}]},GridLines→{{0.25,0.50,
0.75,1,1.25,1.5,1.75,2,2.25,2.5,2.75,3},{0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,
0.6,0.7,0.8,0.9,1}},GridLinesStyle→Directive[Gray,Dotted]},
Plot[Xe,{z,0,Hf},PlotLegends→Placed[{"XAe PFR"},Above],
PlotStyle→{Orange,Thickness[0.005]},PlotRange→{{0,Hf},{0,100}}],

Plot[Xe,{z,0,Hf},PlotLegends→Placed["Gráfica 2.F Conversión
porcentual de A en un RLF para diferentes diámetros de
reactor (dR), bajo el modelo DH/PFR(línea continua), en
la fase-burbuja (XAb Color azul),la fase-emulsión(XAe Color
naranja), la del lecho en su conjunto (XAH Color verde),en
función de la altura del lecho fluidizado (z).",Below],
PlotStyle→{Orange,Thickness[0.005]},PlotRange→{{0,Hf},
{0,100}}],Plot[XA,{z,0,Hf},PlotLegends→Placed[{"XAH PFR"},
Above],PlotStyle→{Green,Thickness[0.005]},PlotRange→{{0,Hf},
{0,100}}]]
```

Mediante [Manipulate], se retoma la función [PFRdRN], donde se tiene como argumento el diámetro de reactor. Se le asigna un rango de valores a  $d_R$  (en este caso de 1.68 a 2.15) y mediante el control manual, es posible ir variando  $d_R$  a la vez que se aprecia dinámicamente el cambio en los perfiles de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*, del gráfico.

```
Manipulate[PFRdRN[dR], {{dR, 2.15, "Diámetro del reactor dR (m)"},
1.68, 2.15, Appearance->"Labeled"}]
```

Velocidad superficial del gas de entrada

Se crea la función [PFRu0N], dejando a la velocidad superficial del gas de entrada como argumento, en seguida, dentro del comando [Module] se agrupan todos los parámetros que considera el modelo de Davidson Harrison.

```
PFRu0N[u0_] :=
Module[{umf, emf, g, d1, ρs, W, db, dR, CA0, CB0, Rc, T, m1, m2, C1, C2, Cb, Ce, k,
ubr, ub, δ, εf, Q, q, hg, S, V, Ac, H0, Hf, X, β, k, XA, Xe, Xb, SOLNU1, Xb1, SOLNU2},
k=1.3*104*e( $\frac{-3.1*10^4}{Rc*T}$ ); umf=0.03; emf=0.5; g=9.8; d1=20*10-6;
ρs=2000; W=7000; db=0.32; dR=2; CA0=100; CB0=0; Rc=8.3144621; T=385;
ubr=0.711(g*db)1/2;
ub=u0-umf+ubr; δ= $\frac{u0-umf}{ub}$ ; εf=1-(1-δ)(1-emf); Q=q+hg*S;
q=(3*π/4)*umf*db2; hg=0.975*√d1*(g/db)1/4; S=π*db2; V=(1/6)*π*(db)3;
Ac= $\frac{\pi}{4}$ dR2; Hf= $\frac{W}{Ac*\rho s*(1-\epsilon f)}$ ; H0=Hf*(1-δ);
X=(Q*Hf)/(ub*V); β=1-umf/u0; k=(H0*k)/u0;
```

Programación de las ecuaciones diferenciales correspondientes al balance de la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*, con sus respectivas condiciones de frontera, mediante el comando [DSolve], agrupadas en [SOLNU4]. También, se programa las conversiones del reactivo de interés.

```
SOLNU4=DSolve[{Cb'[z]==(X/Hf)*(Ce[z]-Cb[z]),
(1-β)*Ce'[z]+β*Cb'[z]+(k/Hf)*Ce[z]==0,
Cb[0]==CA0,Cb'[0]==0},{Cb[z],Ce[z]},z];
Xb={(CA0-Cb[z])/CA0}/.SOLNU4;
Xe={(CA0-Ce[z])/CA0}/.SOLNU4;
XA={(CA0-(β*Cb[z]+(1-β)*Ce[z])/CA0}/.SOLNU4;
```

Se agrupan los perfiles de conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ , en un solo grafico mediante el comando [Show].

```
Show[Plot[Xb,{z,0,Hf},PlotLegends→Placed[{"XAb PFR"},Above],
PlotStyle→{Blue,Thickness[0.005]},PlotRange→{{0,Hf},{0,1}},
Frame→True,PlotStyle→{Blue,Thickness[0.005]},
FrameStyle→Directive[Thick,Black,Bold,15],ImageSize→23 23,
FrameLabel→{"z [m]","Conversión porcentual de A"},
Epilog→{Inset[Style[Hf"m",14,Bold],{0.76,.65}],
Inset[Style["H=",14,Bold],{0.50,.65}]},
GridLines→{{0.25,0.50,0.75,1,1.25,1.5,1.75,2,2.25,2.5,2.75,
3},{0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8,0.9,1}},GridLinesStyle→
Directive[Gray,Dotted]},Plot[Xe,{z,0,Hf},PlotLegends→
Placed[{"XAe PFR"},Above],PlotStyle→{Orange,Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0,Hf},{0,100}}],Plot[Xe,{z,0,Hf},PlotLegends→
Placed["Gráfica 2.L Conversión porcentual de A en un RLF para
diferentes velocidades de gas de entrada (u0), bajo el modelo
DH/PFR (línea continua), en la fase-burbuja (XAb Color azul),
la fase-emulsión (XAe Color naranja), la del lecho en su
conjunto (XAH Color verde), en función de la altura del lecho
fluidizado (z).",Below],PlotStyle→{Orange,Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0,Hf},{0,100}}],Plot[XA,{z,0,Hf},PlotLegends→
Placed[{"XAH PFR"},Above],PlotStyle→{Green,Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0,Hf},{0,100}}]]]
```

Mediante [Manipulate], se retoma la función [PFRu0N], donde se tiene como argumento la velocidad superficial del gas de entrada. Se le asigna un rango de valores a  $u_0$  (en este caso de 0.15 a 2), y mediante el control manual es posible ir variando  $u_0$ , a la vez que se aprecia dinámicamente el cambio en los perfiles de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*, del gráfico.

```
Manipulate[PFRu0N[u0],{u0,0.3,"Velocidad superficial del gas de entrada u0
(m/s)"},0.15,2,Appearance->"Labeled"]
```

### Reactor CSTR vs PFR

Se crea una nueva función [CSTRdb], teniendo al diámetro de burbuja como argumento, en seguida, dentro del comando [Module] se agrupan todos los parámetros que considera el modelo de Davidson Harrison.

```
CSTRdb[db_]:=
Module[{u0,umf,emf,g,d1,rhoS,W,dR,CA0,CB0,Rc,T,m1,m2,C1,C2,Cb,Ce,k,
ubr,ub,delta,epsilonf,Q,q,hg,S,V,Ac,H0,Hf,X,beta,k,XA,Xe,Xb,SOLNU1,Xb1,SOLNU2},
k=1.3*10^4*Exp((-3.1*10^4)/(Rc*T));u0=0.3;umf=0.03;emf=0.5;g=9.8;d1=20*10^-6;
rhoS=2000;W=7000;dR=2;CA0=100;CB0=0;Rc=8.3144621;T=385;
ubr=0.711*(g*db)^1/2;ub=u0-umf+ubr;delta=(u0-umf)/ub;epsilonf=1-(1-delta)*(1-emf);
Q=q+hg*S; q=(3*pi/4)*umf*db^2; hg=0.975*sqrt(d1)*(g/db)^1/4;
S=pi*db^2; V=(1/6)*pi*(db)^3; Ac=(pi/4)*dR^2; Hf=W/(Ac*rhoS*(1-epsilonf)); H0=Hf*(1-delta);
X=(Q*Hf)/(ub*V); beta=1-umf/u0; k=(H0*k)/u0;
```

Programación de las ecuaciones correspondientes al balance de la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*, con sus respectivas condiciones de frontera, bajo el modelo D-H/CSTR y D-H/PFR, dentro del comando [DSolve]. También, se programan las conversiones del reactivo de interés, obtenidas en cada uno de los modelos.

```
SOLCSTR=DSolve[{Cb'[z]==(X/H)*(Ce-Cb[z]),Cb[0]==CA0},Cb[z],z];
SOLPFR=DSolve[{Cb'[z]==(X/H)*(Ce[z]-Cb[z]),
(1-β)*Ce'[z]+β*Cb'[z]+(k/H)*Ce[z]==0,Cb[0]==CA0,Cb'[0]==0},
{Cb[z],Ce[z]},z];
Ce=(CA0*(1-β*e-X))/(1+k-β*e-X);
CH={β*Cb[z]+(1-β)*Ce}/.SOLCSTR;
Xb={CA0-Cb[z]}/CA0/.SOLCSTR;
Xe={CA0-Ce}/CA0;
XA={CA0-(β*Cb[z]+(1-β)*Ce)}/CA0/.SOLCSTR;
Xb1={CA0-Cb[z]}/CA0/.SOLPFR;
Xe1={CA0-Ce[z]}/CA0/.SOLPFR;
XA1={CA0-(β*Cb[z]+(1-β)*Ce[z])}/CA0/.SOLPFR;
```

Se agrupan los perfiles de conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ , de ambos modelos en un solo gráfico, mediante el comando [Show].

```
Show[Plot[Xb, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed[{"XAb CSTR"}, Above],
PlotStyle→{Blue, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H}, {0, 1}},
Frame→True, PlotStyle→{Blue, Thickness[0.005]},
FrameStyle→Directive[Thick, Black, Bold, 15], ImageSize→23 23,
FrameLabel→{"z [m] ", "Conversión porcentual de A "},
Epilog→{Inset[Style[H"m", 14, Bold], {2.28, .25}],
Inset[Style["H=", 14, Bold], {2, .25}]}, GridLines→{{0.25, 0.50,
0.75, 1, 1.25, 1.5, 1.75, 2, 2.25, 2.5, 2.75, 3}, {0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5,
0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1}}, GridLinesStyle→Directive[Gray, Dotted]],
Plot[Xe, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed[{"XAe CSTR"}, Above],
PlotStyle→{Orange, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H},
{0, 100}}, Plot[Xe1, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed[{"XAe PFR"},
Above], PlotStyle→{Orange, Dashed, Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0, H}, {0, 100}}, Plot[Xe1, {z, 0, H}, PlotLegends→
Placed["Gráfica 3.5 Conversión porcentual de A en un RLF
para un diámetro de burbuja (db =0.20 m), bajo el modelo
DH/CSTR (línea continua) y el modelo DH/PFR (línea discontinua),
en la fase-burbuja (CAb Color azul), la fase-emulsión (CAe Color
naranja), y del lecho en su conjunto (CA Color verde), en función
de la altura del lecho fluidizado (z).", Below], PlotStyle→{Orange,
Dashed, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H}, {0, 100}}],

Plot[Xb1, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed[{"XAb PFR"}, Above], PlotStyle→
{Blue, Dashed, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H}, {0, 100}},
Plot[XA1, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed[{"XA PFR"}, Above], PlotStyle→
{Green, Dashed, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H}, {0, 100}},
Plot[XA, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed[{"XA CSTR"}, Above], PlotStyle→
{Green, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H}, {0, 100}}]]]
```

Mediante [Manipulate], se retoma la función [CSTRdb], se le asigna un rango de valores a  $d_b$  (en este caso 0.20 a 0.44), y mediante el control manual es posible ir variando  $d_b$ , a la vez que se aprecia dinámicamente el cambio en los perfiles de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*, del gráfico.

```
Manipulate[CSTRdb[db], {{db, 0.2, "Diámetro de burbuja  $d_b$  (m)"},
0.20, 0.44, Appearance->"Labeled"}]
```

Todos los parámetros

También, es posible analizar en un solo gráfico, el comportamiento de los perfiles de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, a la vez que se modifica más de un parámetro. Para ello, se crea una función [ANALISISCST], donde se tiene a la velocidad superficial del gas, diámetro de reactor y diámetro de burbuja como argumento, en seguida, dentro del comando [Module] se agrupan todos los parámetros que considera el modelo de Davidson Harrison.

```
ANALISISCST[u0_, W_, db_, dR_] :=
Module[{umf, emf, g, d1, rhoS, CA0, CB0, Rc, T, m1, m2, C1, C2, Cb, Ce, k,
ubr, ub, delta, ef, Q, q, kg, S, V, Ac, H0, H, X, beta, k, XA, Xb, Xe, CH},
k=1.3*10^4 * e( $\frac{-3.1*10^4}{Rc*T}$ ); umf=0.03; emf=0.5; g=9.8; d1=20*10-6;
rhoS=2000; CA0=100; CB0=0; Rc=8.3144621; T=385;
ubr=0.711 (g*db)1/2; ub=u0-umf+ubr; delta= $\frac{u0-umf}{ub}$ ; ef=1-(1-delta)(1-emf);
Q=q+kg*S; q=(3*pi/4)*umf*db2; kg=0.975*sqrt(d1)*(g/db)1/4;
S=pi*db2; V=(1/6)*pi*(db)3; Ac= $\frac{\pi}{4} dR^2$ ; H= $\frac{W}{Ac*rhoS*(1-ef)}$ ; H0=H*(1-delta);
X=(Q*H)/(ub*V); beta=1-umf/u0; k=(H0*k)/u0;
```

Programación de las ecuaciones correspondientes al balance de la *fase-burbuja* y *fase-emulsión*, con sus respectivas condiciones de frontera, bajo el modelo D-H/CSTR y D-H/PFR, dentro del comando [DSolve]. También, se programa las conversiones del reactivo de interés, obtenidas en cada uno de los modelos.

```
SOLCSTR=DSolve[{Cb'[z]==(X/H)*(Ce-Cb[z]),Cb[0]==CA0},Cb[z],z];
SOLPFR=DSolve[{Cb'[z]==(X/H)*(Ce[z]-Cb[z]),
(1-β)*Ce'[z]+β*Cb'[z]+(k/H)*Ce[z]==0,Cb[0]==CA0,Cb'[0]==0},
{Cb[z],Ce[z]},z];
Ce=(CA0*(1-β*e-X))/(1+k-β*e-X);
CH={β*Cb[z]+(1-β)*Ce}/.SOLCSTR;
Xb={ (CA0-Cb[z])/CA0}/.SOLCSTR;
Xe={ (CA0-Ce)/CA0};
XA={ (CA0-(β*Cb[z]+(1-β)*Ce))/CA0}/.SOLCSTR;
Xb1={ (CA0-Cb[z])/CA0}/.SOLPFR;
Xe1={ (CA0-Ce[z])/CA0}/.SOLPFR;
XA1={ (CA0-(β*Cb[z]+(1-β)*Ce[z]))/CA0}/.SOLPFR;
```

Se agrupan los perfiles de conversión del reactivo de interés en la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y del lecho en su conjunto, desde  $z=0$  hasta  $z=H$ , de ambos modelos en un solo gráfico, mediante el comando [Show].

```
Show[Plot[Xb, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed[{"Xb CSTR"}, Above],
PlotStyle→{Blue, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H}, {0, 1}},
Frame→True, PlotStyle→{Blue, Thickness[0.005]},
FrameStyle→Directive[Thick, Black, Bold, 15], ImageSize→23 23,
FrameLabel→{"z [m] ", "Conversión de A "}, Epilog→{
Inset[Style[H"m", 14, Bold], {2.29, .255}],
Inset[Style["H=", 14, Bold], {1.75, .255}]},
PlotLabel→Style["Perfil de conversión de A en fases burbuja
y emulsion (CSTR)", Black, Bold, 14]], Plot[Xe, {z, 0, H},
PlotLegends→Placed[{"Xe CSTR"}, Above], PlotStyle→
{Orange, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H}, {0, 100}}],
Plot[XA, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed[{"XA CSTR"}, Above],
PlotStyle→{Green, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H}, {0, 100}}],
Plot[Xe1, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed[{"Xe PFR"}, Above], PlotStyle→
{Orange, Dashed, Thickness[0.005]}, PlotRange→{{0, H}, {0, 100}}],
Plot[Xe1, {z, 0, H}, PlotLegends→Placed["Gráfica 3.J Conversión
porcentual de A en un RLF para diferentes velocidades de gas
de entrada (u0), bajo el modelo DH/CSTR (línea continua) y el modelo
DH/PFR (línea discontinua). en la fase-burbuja (Cb Color azul),
la fase-emulsión (Ce Color naranja, la de lecho en su conjunto
(CA Color verde), en función de la altura del lecho fluidizado (z).",
Below], PlotStyle→{Orange, Dashed, Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0, H}, {0, 100}}], Plot[Xb1, {z, 0, H}, PlotLegends→
Placed[{"Xb PFR"}, Above], PlotStyle→{Blue, Dashed, Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0, H}, {0, 100}}], Plot[XA1, {z, 0, H}, PlotLegends→
Placed[{"XA PFR"}, Above], PlotStyle→{Green, Dashed, Thickness[0.005]},
PlotRange→{{0, H}, {0, 100}}]]]
```

Mediante [Manipulate], se retoma la función [ANALISISCST], se le asigna un rango de valores a los parámetros a analizar y mediante el control manual es posible ir variando cada uno de ellos, a la vez que se aprecia dinámicamente el cambio en los perfiles de la *fase-burbuja*, *fase-emulsión* y *total*, de ambos modelos.

```
Manipulate[ANALISISCST[u0,W,db,dR],  
{u0,0.3,"Velocidad superficial de entrada u0 (m/s)"},  
0.15,2,Appearance->"Labeled"},  
{W,7000,"Carga de catalizador W (Kg)"},6500,8000,  
Appearance->"Labeled"},{db,0.32,"Diámetro  
de burbuja db (m)"},0.20,0.44,Appearance->"Labeled"},  
{dR,2,"Diámetro de reactor dR (m)"},1.68,2.15,  
Appearance->"Labeled"}]
```

---

## REFERENCIAS

- [1] J. F. Davidson and D. Harrison, Fluidized Particles (New York: Cambridge University Press, 1963).
- [2] Octave Levenspiel; Ingeniería de las reacciones químicas, 3er Ed; México: Limusa Wiley, 2004.
- [3] D. Kunii and O. Levenspiel, Fluidization Engineering (New York: Wiley, 1968).
- [4] Bird, R. Byron, Stewart, Warren E y Lightfoot, Edwin N. *Feonómenos de transporte*. Barcelona, España: Ed. Reverté, 1992.
- [5] Octave Levenspiel Dazio Kunni. Fluidization Engineering, 1991.
- [6] R. M. Davies and Geoffrey Taylor, The mechanics of large bubbles rising through extended liquids and through liquids in tubes, 1950.
- [7] Nicklin, D. J., Wilkes, J. O. and Davidson, J. F., Two-phase flow in vertical tubes, 1962.
- [8] Wallis, G. B. One-dimensional two-phase flow, McGraw-Hill, New York, 1969.
- [9] Daizo Kunii and Octave Levenspiel. Bubbling Bed Model. Model for Flow of Gas through a Fluidized Bed. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 7(3):446 - 452, 1968.
- [10] Froment, G. F.; Bischoff, K. B. *Chemical Reactor Analysis and Design*, 2nd ed.; J. Wiley: New York, 1990.

[11] James J. Carberry; Chemical and Catalytic Reaction Engineering, New York 1976.

[12] Scott, Fogler H. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas; Cuarta edición. México: Pearson Education, 2008.

[13] Henry C. Foley; An Introduction to Chemical Engineering Analysis Using Mathematica, The Pennsylvania State University, 2002.