

---

**TRABAJO ESPECIAL DE REACTORES Y REACCIONES**

---

**Diseño de un reactor heterogéneo de lecho fijo**

Resumen:

El objetivo principal de este trabajo es desarrollar un modelo 1-D heterogéneo isotérmico a partir de las ecuaciones locales de balance utilizando las técnicas de promediación volumétricas desarrolladas en el curso.

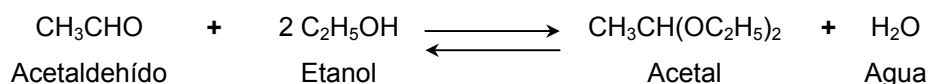
También se genera un esquema de cálculo y resolución del modelo, se analizan las predicciones del mismo y se comparan las “corridas” para diferentes valores de los parámetros elegidos. Para tal fin se hace uso de dos métodos numéricos:

- 1-) Método Runge Kutta de 4º orden
- 2-) Método de incremento finito

Ambos son programados en lenguaje BASIC.

Introducción:

Se diseñará un reactor donde se lleva a cabo la siguiente reacción heterogénea:



Los datos cinéticos de esta reacción fueron evaluados como parte de un proyecto de cooperación iberoamericana durante el año 1996. Para tal fin se formó un núcleo de investigación multidisciplinario para estudiar la problemática del aprovechamiento de los productos derivados de la industria de la caña de azúcar (alcohoquímica) La responsabilidad del proyecto se distribuyó entre institutos de investigación de distintos países. Así, la responsabilidad de la evaluación de los distintos catalizadores posibles recayó en el Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE) de la UNL, bajo la dirección del Dr. Ulises Sedrán. El diseño del proceso de separación y purificación del acetal quedó a cargo del Dr. Pío Aguirre del Instituto de Desarrollo y Diseño (INGAR). En una etapa posterior se realizó un prediseño de una planta piloto con la tecnología desarrollada, tarea que estuvo a cargo del Ing. Francisco Pedro (INGAR).

La reacción química se realiza en fase líquida utilizando una resina polimérica como catalizador.

La temperatura de reacción se encuentra en un intervalo de entre 20 y 30 °C.

La conversión de equilibrio de esta reacción en fase líquida es relativamente baja (50% – 60%). Para vencer esta limitación, a la mezcla de reactivos se le incorpora un solvente orgánico inerte (en este caso se escoge n-hexano que posee muy buen rendimiento frente a solventes similares). Este solvente genera una nueva fase líquida cuya misión es desplazar el equilibrio capturando el acetal producido

durante la reacción. A partir de estudios de laboratorio se determinó que la relación óptima solvente/reactivos (en base volumétrica) es igual a 2.

Ecuaciones Locales de Balance de Materia y Energía:

Las ecuaciones locales de balance desarrolladas en el curso, en su forma vectorial, son las siguientes:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\rho_i \underline{v}) + \underline{\nabla} \cdot \underline{j}_i = R_i \quad (1)$$

$$\sum_i^N M_i C_i \hat{C}_{p_i} \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + \underline{v} \cdot \underline{\nabla} T \right] = \sum_k^R (-\Delta H_k) r_k + \underline{\nabla} \cdot (\lambda \underline{\nabla} T) \quad (2)$$

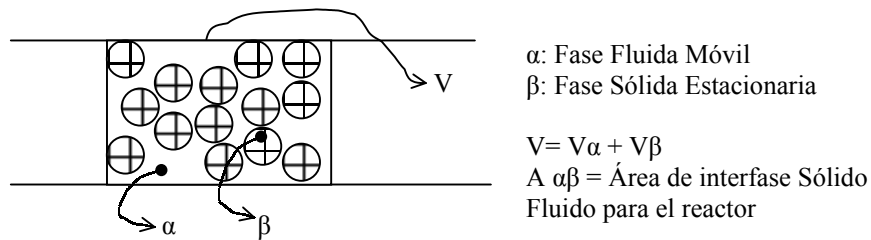
Aplicando la ecuación (1) para el componente B (acetaldehído) en el REACTOR planteado en la introducción con las siguiente hipótesis:

REACTOR	Isotérmico Bifásico (Líquido – Sólido) Estado Estacionario Reacción Heterogénea
---------	--

la ecuación del balance local de materia se reduce a la siguiente expresión

$$\underline{\nabla} \cdot (C_B \underline{v}) - \underline{\nabla} \cdot (D_{BM} \underline{\nabla} C_B) = 0 \quad (3)$$

Para obtener las ecuaciones promediadas que modelan el reactor se debe definir un volumen de promediación V acorde a la escala del reactor, por ejemplo:



Definido de esta manera, las características internas de las partículas sólidas pueden ser obviadas en esta etapa y considerar la fase  $\beta$  como un sólido continuo. Promediando la ecuación 3 en el volumen V, utilizando las técnicas de promediación y haciendo algo de álgebra se llega a:

$$\underline{\nabla} \cdot \left[ \epsilon_\alpha \langle C_B \rangle^\alpha \langle \underline{v} \rangle^\alpha \right] - \underline{\nabla} \cdot \left[ D_{BM} \epsilon_\alpha \underline{\nabla} \langle C_B \rangle^\alpha \right] = \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} C_B (\underline{\omega} - \underline{v}) \cdot \underline{n}_\alpha dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} D_{BM} \underline{\nabla} C_B \cdot \underline{n}_\alpha dA - \underline{\nabla} \cdot \left[ \epsilon_\alpha \langle \overline{C_B \underline{v}} \rangle^\alpha - \frac{D_{BM}}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \overline{C_B} \cdot \underline{n}_\alpha dA \right] \quad (4)$$

donde:

$\varepsilon_\alpha$  : Hold Up de la fase  $\alpha$  ( $V_\alpha/V$ )

$\langle C_B \rangle^\alpha$  : Promedio de fase intrínseco de la concentración de B

$\langle \underline{v} \rangle^\alpha$  : Promedio de fase intrínseco de la velocidad del fluido

$\langle \overline{C_B \underline{v}} \rangle^\alpha$  : Promedio intrínseco del producto de las desviaciones de velocidad y concentración respecto a los valores promedios respectivos.

$\overline{C_B}$  : Desviación (dispersión) de  $C_B$  respecto al valor promedio de la fase.

Analizando la ecuación (4) para un lecho fijo notamos que, por estar el sólido inmóvil  $\underline{\omega}=0$  y utilizando el modelo de película estanca estacionaria para el flujo extrapartícula  $\underline{v}=0$  y  $D_{BM} \nabla C_B \cdot \underline{n}_\alpha = -k_L(C_B - C_B^{\alpha\beta})$  siendo  $k_L$ : *Coficiente Pelicular de Transferencia de Materia*.

Aplicando esto a la ecuación (4) tenemos:

$$\begin{aligned} \underline{\nabla} \cdot \left[ \varepsilon_\alpha \langle C_B \rangle^\alpha \langle \underline{v} \rangle^\alpha \right] - \underline{\nabla} \cdot \left[ D_{BM} \varepsilon_\alpha \underline{\nabla} \langle C_B \rangle^\alpha - \varepsilon_\alpha \langle \overline{C_B \underline{v}} \rangle^\alpha + \frac{D_{BM}}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \overline{C_B} \cdot \underline{n}_\alpha dA \right] = \\ = -k_L \frac{A_{\alpha\beta}}{V} \left( \langle C_B \rangle^\alpha - \langle C_B \rangle^{\alpha\beta} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

Definiendo el *Tensor de Dispersividad*  $^1 \underline{\underline{D}}$  para modelar las desviaciones podemos escribir la siguiente igualdad:

$$\underline{\nabla} \cdot \left[ \varepsilon_\alpha \langle \overline{C_B \underline{v}} \rangle^\alpha - \frac{D_{BM}}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \overline{C_B} \cdot \underline{n}_\alpha dA \right] = \underline{\nabla} \cdot \left[ -\varepsilon_\alpha \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\nabla} \langle C_B \rangle^\alpha \right] \quad (6)$$

Redefiniendo las siguientes variables para simplificar la notación

$\langle C_B \rangle^\alpha = C_B$  : concentración de B en el "bulk"

$\varepsilon_\alpha \langle \underline{v} \rangle^\alpha = \underline{U}_s$  : Velocidad Superficial de la fase  $\alpha$

$\langle C_B \rangle^{\alpha\beta} = C_{B_s}^s$  : Concentración de B sobre la superficie del sólido

$\frac{A_{\alpha\beta}}{V} = av$  : Área externa del catalizador por unidad de volumen de reactor.

$\varepsilon_\alpha \underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D}}_{eff}$  : Tensor de Dispersividad Efectivo

<sup>1</sup> "Concepts and Design of Chemical Reactors" WHITAKER S. and CASSANO A.

reemplazando (4) en (5) el balance promediado queda:

$$\underline{\nabla} \cdot [C_B \underline{U}_s] - \underline{\nabla} \cdot [D_{BM,eff} \underline{\nabla} C_B + \underline{D}_{eff} \cdot \underline{\nabla} C_B] = -k_L a_v (C_B - C_{B_s}^s) \quad (7)$$

*Ecuación de Balance de Materia Promediada para un Reactor Heterogéneo de Lecho Fijo*

Planteando un modelo unidimensional (flujo pistón), vale decir, las propiedades sólo varían en la dirección axial  $z$  del reactor, no existen efectos dispersivos ni difusivos, y que la velocidad superficial es constante, la ecuación 7 se reduce a

$$-U_s \frac{dC_B}{dz} = k_L a_v (C_B - C_{B_s}^s) \quad (8)$$

*Ecuación de Balance de Materia para un Reactor Heterogéneo de Lecho Fijo 1-D*

Utilizando el mismo procedimiento en el Balance de Energía (ecuación 2) y recordando que el reactor es ISOTÉRMICO, se llega a

$$h_f a_v (T_s^s - T) = \frac{4U}{dt} (T - T_{ref}) \quad (9)$$

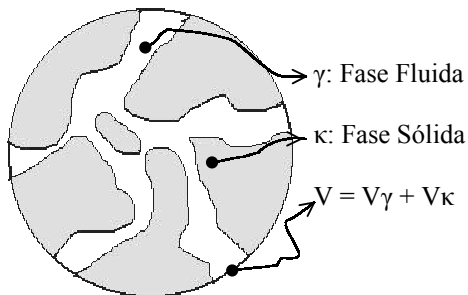
Aplicando el balance para el componente B en UNA PARTÍCULA DE CATALIZADOR con las siguientes hipótesis:

PARTÍCULA SÓLIDA	Esférica y Porosa
	Isotérmica
	Bifásica (Líquido – Sólido)
	Estado Estacionario
	Reacción Heterogénea
	Aplicable la ley de Fick para el flujo

tenemos que la ecuación (1) se reduce a:

$$\underline{\nabla} \cdot (D_B^{eff} \underline{\nabla} C_B) = 0 \quad (10)$$

Para obtener la ecuación promediada que modela la concentración del reactivo en la partícula de catalizador, se define un nuevo volumen de promediación  $V$ , esta vez a escala partícula, con su correspondiente condición de contorno:



$A_{\gamma\kappa}$ : Área de interfase Sólido-Fluido de la partícula de catalizador

$r_B^{sup}$ : Velocidad de Reacción para la especie B sobre la superficie del sólido

Condición de Contorno  $\left\{ \begin{array}{l} -D_B^{eff} \underline{\nabla} C_B \cdot \underline{n}_\gamma = -r_B^{sup} \end{array} \right.$

Aplicando las técnicas de promediación volumétrica a la ecuación (10) en el volumen  $V$ , admitiendo que  $D_B^{eff}$  en dicho volumen es constante y reemplazando la condición de contorno, se llega a

$$\underline{\nabla} \cdot \left[ D_B^{eff} \varepsilon_\gamma \underline{\nabla} \langle C_B \rangle^\gamma \right] + \underline{\nabla} \cdot \left[ \frac{D_B^{eff}}{V} \int_{A_{\gamma\kappa}} \overline{C_B} \underline{n}_\gamma dA \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\kappa}} r_B^{sup} dA = 0 \quad (11)$$

donde:

$\varepsilon_\gamma$  : Hold Up de la fase  $\gamma$  ( $V_\gamma/V$ )

$\langle C_B \rangle^\gamma$  : Promedio de fase intrínseco de la concentración de B

$\overline{C_B}$  : Desviación (dispersión) de  $C_B$  respecto del valor promedio de la fase.

Para eliminar  $\overline{C_B}$  de la ecuación (11) se debe obtener una relación que modele esta desviación (*Closure Problem*), así es que se llega a:

$$\underline{\nabla} \cdot \left[ D_B^{eff} \varepsilon_\gamma \left( \underline{I} + \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\kappa}} \underline{n}_\gamma \underline{f} dA \right) \cdot \underline{\nabla} \langle C_B \rangle^\gamma \right] = \underline{\nabla} \cdot \left[ \varepsilon_\gamma \underline{D} \cdot \underline{\nabla} \langle C_B \rangle^\gamma \right] \quad (12)$$

donde se define:

$$\underline{\underline{D}}_{eff} = \varepsilon_\gamma \underline{D} = \varepsilon_\gamma D_B^{eff} \left( \underline{I} + \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\kappa}} \underline{n}_\gamma \underline{f} dA \right) \quad (13)$$

$\underline{\underline{D}}_{eff}$  es el tensor difusividad efectiva para la partícula, que para un modelo geométrico espacialmente periódico se demuestra que es independiente de la velocidad de reacción.

El balance local de B promediado en  $V$  es:

$$\underline{\nabla} \cdot \left[ \underline{\underline{D}}_{eff} \cdot \underline{\nabla} \langle C_B \rangle^\gamma \right] + \langle r_B^{sup} \rangle^{\gamma\kappa} \frac{A_{\gamma\kappa}}{V} = 0 \quad (14)$$

Simplificando la notación mediante las siguientes variables,

$\langle C_B \rangle^\gamma = C_{Bs}$ : concentración "bulk" en el interior de la partícula

$\frac{A_{\gamma\kappa}}{V} = as$ : Superficie reactiva del catalizador por unidad de volumen de catalizador.

$\langle r_B^{sup} \rangle^{\gamma\kappa} \cdot as = r_B^{sup}$ : Velocidad de reacción de la especie B en las condiciones de superficie por unidad de volumen de catalizador.

la ecuación (14) adopta la forma final

$$\nabla \cdot \left[ \underline{D_{eff}} \cdot \nabla C_{Bs} \right] + r_B^{sup} = 0 \quad (15)$$

*Ecuación de Balance de Materia Promediada para una Partícula Catalítica*

Considerando que  $\underline{D_{eff}}$  es constante, y haciendo uso del concepto del factor de efectividad, la ecuación (15) puede ser resulta para las diferentes geometrías con las siguientes condiciones de contorno

$$\nabla C_{Bs} \Big|_{r=0} = 0$$

$$C_{Bs} \Big|_{r=R} = C_{Bs}^s \Rightarrow -D_B^{eff} \nabla C_{Bs} \Big|_{r=R} \cdot \underline{n_\alpha} = k_L av (C_B - C_{Bs}^s)$$

de esta manera se llega a

$$k_L av (C_B - C_{Bs}^s) = \frac{\rho_B}{\rho_s} \eta r_B (C_{Bs}^s, T) \quad (16)$$

*Ecuación de Balance de Materia para la Partícula Catalítica*

Utilizando el mismo procedimiento en el Balance de Energía, obtenemos

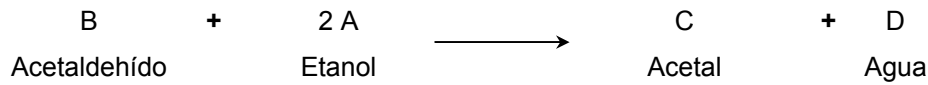
$$h_f av (T_s^s - T) = (-\Delta Hr) \frac{\rho_B}{\rho_s} \eta r_B (C_{Bs}^s, T) \quad (17)$$

y bajo la hipótesis de que  $\Delta Hr \approx 0$ , la ecuación (17) se reduce a

$$(T_s^s - T) = 0 \quad (18)$$

Planteo y resolución del modelo de Reactor Heterogéneo Lecho Fijo 1-D:

La reacción que está bajo estudio es la siguiente:



Los estudios de laboratorio indican que la expresión de la cinética intrínseca para la reacción directa es de la forma

$$r = k C_A^2 C_B \quad (19)$$

Si se considera que la alimentación al reactor se produce de forma estequiométrica, se cumple que  $C_A = 2 C_B$  para cualquier punto del reactor, por lo tanto podemos escribir la cinética como

$$r = 4k C_B^3 \quad (20)$$

Los valores de las propiedades de los compuestos a 20 °C son:

	CPTO.	PM [g/mol]	$\rho$ [g/cm <sup>3</sup> ]	$\mu$ [cp]	X 0	$\rho_m$ [g/cm <sup>3</sup> ]	C0 [mol/cm <sup>3</sup> ]	$\mu_m$ [cp]
A	Etanol	44,05	0,788	1,04	2/3	0,790	0,0116	0,464
B	Acetaldehído	46,07	0,794	0,22	1/3		0,0058	
Difusividad Molecular			$D_{AB} = D_{BA} = 3,4 \cdot 10^{-05}$ [cm <sup>2</sup> /s] (Correlación de Wilke y PinChang)					
Exotermia de la Reacción			$\Delta hr = -7,35$ kcal/mol.					
Constante Cinética			$k = 75,12$ [(cm <sup>3</sup> /mol) <sup>2</sup> /s]					

Los valores de las propiedades del catalizador y del lecho catalítico son las siguientes:

Nombre Comercial del Catalizador	Amberlyst 15 Dry
Dp	0,07 [cm]
Porosidad de sólido	0,8
Densidad del sólido ( $\rho_s$ )	0,608 (g/cm <sup>3</sup> )
Radio Medio de Poro	$120 \cdot 10^{-08}$ (cm)
Superficie Específica (Sg)	50 (m <sup>2</sup> /g)
Porosidad del Lecho	0,5
Densidad del Lecho ( $\rho_B$ )	0,305
Diámetro del Reactor dt	15 (cm)

La Difusividad efectiva en la partícula fue calculada a partir de la expresión general del flujo molar en poros, considerando gradiente de presión total nulo,  $D_{B,S}^{eff} = D_{B,A}^{eff}$  para todo S distinto de B, y recurriendo a la relación de flujos molares dada por la estequiometría  $N_S = \nu_S / \nu_B N_B$

$$\frac{1}{D_B^{eff}} = \frac{1}{D_{Kn,B}^{eff}} + \frac{1 - x_B}{D_{B,A}^{eff}} \quad (21)$$

$D_{Kn,B}^{eff}$ [cm <sup>2</sup> /s]	$D_{B,A}^{eff}$ [cm <sup>2</sup> /s]	$x_{B0}$	$D_B^{eff}$ [cm <sup>2</sup> /s]
$3,0 \cdot 10^{-02}$	$2,72 \cdot 10^{-05}$	1/3	$4,1 \cdot 10^{-05}$

La correlación usada para el cálculo de  $k_L$ , válida para  $3 \leq Re \leq 2000$ , (Petrovic y Todos) es:

$$\varepsilon_L \left( \frac{k_L D_p}{D_{B,A}} \right) = 0,357 \left( \frac{D_p \rho_m U_s}{\mu_m} \right)^{0,614} \left( \frac{\mu_m}{\rho_m D_{B,A}} \right)^{0,33} \quad (22)$$

La ecuación usada para el cálculo del área externa de las partículas por unidad de volumen de reactor es:

$$av = \frac{6(1 - \varepsilon_L)}{D_p} \quad (23)$$

Ecuaciones del modelo:

$$\text{Balance de B en el Fluido: } -U_s \frac{dC_B}{dz} = k_L a_v (C_B - C_{B_s}^s)$$

$$\text{Balance de B en el Sólido: } k_L a_v (C_B - C_{B_s}^s) = \frac{\rho_B}{\rho_s} \eta r_B(C_{B_s}^s, T)$$

$$\text{Condición de Contorno: } z = 0, C_B = C_{B0}$$

$$\text{Expresión cinética: } r_B(C_{B_s}^s, T) = 4k(C_{B_s}^s)^3$$

$$\text{Factor de Efectividad: } \eta = \frac{Tgh(\phi)}{\phi}$$

$$\text{Módulo de Thiele Generalizado: } \phi = \frac{Rp}{3} \sqrt{\frac{8k(C_{B_s}^s)^2}{D_B^{eff}}}$$

Valores de parámetros utilizados

$$D_B^{eff} = 4,1 \cdot 10^{-05} \text{ [cm}^2\text{/s]}$$

$$D_{B,A} = 3,4 \cdot 10^{-05} \text{ [cm}^2\text{/s]}$$

$$\rho_m = 0,79 \text{ [g/cm}^3\text{]}$$

$$\mu_m \text{ [cp]} = 0,464 \text{ [cp]}$$

$$k = 75,12 \text{ [(cm}^3\text{/mol)}^2\text{/s]}$$

$$\rho_s = 0,608 \text{ [g/cm}^3\text{]}$$

$$\varepsilon_L = 0,5$$

$$\rho_B = 0,305 \text{ [g/cm}^3\text{]}$$

El resto de los parámetros se dejan como variable para analizar su efecto sobre los perfiles de concentración.



---

## Programas de Cálculo

Como se dijo anteriormente, se usan dos métodos numéricos diferentes para resolver el sistema de ecuaciones programados en QBASIC 4.0. A continuación se explicitan los programas con sus respectivos códigos:

### 1-) Método de Runge Kutta de 4º orden

```
CLS
PRINT "Programa para resolver un reactor tubular ISOTERMICO"
PRINT "catalitico con gradiente intra y extra particula CINETICA r=k C^3"
PRINT "Método numérico Runge kutta de 4º orden"
PRINT "Carga de datos"
PRINT "-----"
INPUT "Difusividad molecular de B en A DBA [cm^2/s] (3.4 10-5):"; DBA
INPUT "Radio de particula Rp [cm] (.035):"; Rp
INPUT "Porosidad del lecho (0.5) :"; Pol
INPUT "Porosidad de Particula (0.8):"; Pop
INPUT "Constante Cinetica k [(cm^3/mol)^2 1/s] (75.12):"; k
INPUT "Velocidad Superficial del Fluido Us [cm/s] (.26):"; Us
INPUT "roB [g/cm^3] (P/ej: .305):"; roB
INPUT "roS [g/cm^3] (P/ej: .608):"; roS
INPUT "Concen. Inicial en extremo del Reactor C0 [mol/cm^3](5.8e-3 ):"; C0
INPUT "Ingreso Z0 [cm] (0):"; Z0
INPUT "Ingreso conversiçn a la entrada X0 (0):"; X0
INPUT "Ingreso conversiçn de salida Xf (.95):"; Xf
PRINT ""
PRINT ""Deseas guardar el archivo digitalmente? "
PRINT "Los datos se guardar n en C:\Reactor3.xls"
INPUT "Podras mirar el archivo usando EXXEL. (s/n):"; res$
WHILE res$ = "s"
OPEN "C:\Reactor3.xls" FOR OUTPUT AS #1
PRINT #1, "Z", "X", "rn", "etan", "Cs ", "Cb ", "klav"
PRINT #1, ""
kl =DBA/(2*Rp*Pol) * .357*(2*Rp*.79*Us/.00633)^.641 * (.00633/(.79*DBA))^.33
av = 6 * (1 - Pol) / (2 * Rp)
DiEf = Pop * DBA / (1 - (1 / 3))
klav = kl * av
Cssp = C0
401
Fin = (Rp / 3) * (2 * 4 * k / DiEf) ^ (.5) * Cssp
etan = (EXP(Fin) - EXP(-Fin)) / (Fin * (EXP(Fin) + EXP(-Fin)))
rn = 4 * k * Cssp ^ 3 / roS
Cssc = C0 / (1 + roB * 4 * k / (kl * av * roS) * Cssp ^ 2 * etan)
E = ABS(Cssc - Cssp)
IF E > .00000001# THEN 402 ELSE 403
402
Cssp = Cssc
GOTO 401
403
Cs = Cssc
Cb = C0
Kl = (Us * C0 / roB) * 1 / (etan * rn)
Z = Z0
X = X0
PRINT #1, Z, X, rn, etan, Cs, Cb, klav
FOR X = X0 TO Xf STEP h
Cssp = C0 * (1 - X)
Y = X + h / 2
C = C0 * (1 - Y)
501
Fin = (Rp / 3) * (2 * 4 * k / DiEf) ^ (.5) * Cssp
etan = (EXP(Fin) - EXP(-Fin)) / (Fin * (EXP(Fin) + EXP(-Fin)))
rn = 4 * k * Cssp ^ 3 / roS
Cssc = C / (1 + roB * 4 * k / (kl * av * roS) * Cssp ^ 2 * etan)
E = ABS(Cssc - Cssp)
IF E > .00000001# THEN 502 ELSE 503
502
Cssp = Cssc
GOTO 501
```

---

```

503
Css = Cssc
Fin = Rp / 3 * (2 * 4 * k * Css ^ 2 / DiEf) ^ (.5)
etan = (EXP(Fin) - EXP(-Fin)) / (Fin * (EXP(Fin) + EXP(-Fin)))
rn = 4 * k * Css ^ 3 / roS
K2 = (Us * C0 / roB) * 1 / (etan * rn)
      Y = X + h
      C = C0 * (1 - X)

601
Fin = Rp / 3 * (2 * 4 * k * Cssp ^ 2 / DiEf) ^ (.5)
etan = (EXP(Fin) - EXP(-Fin)) / (Fin * (EXP(Fin) + EXP(-Fin)))
rn = 4 * k * Cssp ^ 3 / roS
Cssc = C / (1 + roB * 4 * k / (kl * av * roS) * Cssp ^ 2 * etan)
E = ABS(Cssc - Cssp)
  IF E > .00000001# THEN 602 ELSE 603

602
  Cssp = Cssc
  GOTO 601

603
Css = Cssc
Fin = Rp / 3 * (2 * 4 * k * Css ^ 2 / DiEf) ^ (.5)
etan = (EXP(Fin) - EXP(-Fin)) / (Fin * (EXP(Fin) + EXP(-Fin)))
rn = 4 * k * Css ^ 3 / roS
K4 = (Us * C0 / roB) * 1 / (etan * rn)
Z = Z + h / 6 * (K1 + 4 * K2 + K4)
K1 = K4
Cb = C0 * (1 - X)

701
Fin = Rp / 3 * (2 * 4 * k * Cssp ^ 2 / DiEf) ^ (.5)
etan = (EXP(Fin) - EXP(-Fin)) / (Fin * (EXP(Fin) + EXP(-Fin)))
rn = 4 * k * Cssp ^ 3 / roS
Cssc = Cb / (1 + roB * 4 * k / (kl * av * roS) * Cssp ^ 2 * etan)
E = ABS(Cssc - Cssp)
  IF E > .00000001# THEN 702 ELSE 703

702
  Cssp = Cssc
  GOTO 701

703
Cs = Cssc
XX = X + h
PRINT #1, Z, XX, rn, etan, Cs, Cb
      NEXT X
      CLOSE #1
      res$ = "n"
      WEND
      PRINT ""

END
    
```

## 2-) Método de incremento finito

```

CLS
PRINT "Programa para resolver un reactor tubular ISOTERMICO"
PRINT "catalitico con gradiente intra y extra particula CINETICA r=k C^3"
PRINT "Metodo numerico Diferencias Finitas"
PRINT "Carga de datos"
PRINT "-----"
INPUT "Difusividad molecular de B en A DBA [cm^2/s] (3.4e-5):"; DBA
INPUT "Radio de particula Rp [cm] (0.035):"; Rp
INPUT "Constante Cinetica k [(cm^3/mol)^2 1/s] (75.12):"; k
INPUT "Velocidad Superficial del Fluido Us [cm/s] (0.26):"; Us
INPUT "Porosidad Lecho (0.5)"; Pol
INPUT "Porosidad Particula (0.8)"; Pop
INPUT "roB [g/cm^3] (0.305):"; roB
INPUT "roS [g/cm^3] (0.608):"; roS
INPUT "Conc. Inicial en extremo del Reactor C0 [mol/cm^3](5.8e-3 ):"; C0
INPUT "Ingrese Z0 [cm] (0):"; Z0
INPUT "Ingrese Zf [cm] (500):"; Zf
INPUT "Ingrese el deltaZ [cm] (P/ej: 1):"; deltaZ
PRINT ""
PRINT ""Deseas guardar el archivo digitalmente? "
    
```

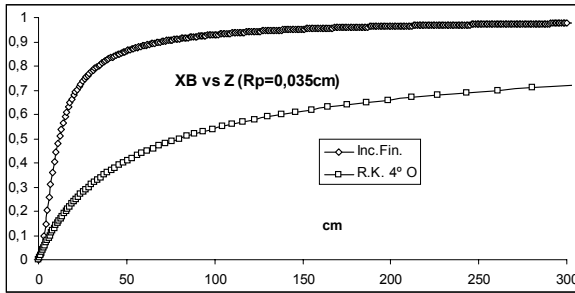
---

```
PRINT "Los datos se guardar n en C:\Reactor1.xls"
INPUT "Podras mirar el archivo usando EXCEL. (s/n):"; res$
WHILE res$ = "s"
OPEN "C:\Reactor1.xls" FOR OUTPUT AS #1
PRINT #1, "Z", "X", "rn", "Fin", "Etan", "Cssc ", "Cb "
PRINT #1, ""
kl = DBA/(2*Rp*Pol)*.357 * (2*Rp*.79*Us/.00633)^.641 * (.00633/(.79*DBA))^.33
av = 6 * (1 - Pol) / (2 * Rp)
DiEf = Pop * DBA / (1 - (1 / 3))
A = C0
      FOR Z = Z0 TO Zf STEP deltaZ
Cssp = C0
501
Fin = Rp / 3 * (2 * 4 * k * Cssp ^ 2 / DiEf) ^ (.5)
Etan = (EXP(Fin) - EXP(-Fin)) / (Fin * (EXP(Fin) + EXP(-Fin)))
rn = 4 * k * Cssp ^ 3 / roS
Cssc = C0 - roB / (kl * av) * Etan * rn
E = ABS(Cssc - Cssp)
      IF E > .00000001# THEN 502 ELSE 503
502
      Cssp = Cssc
      GOTO 501
503
C1 = C0 + (Z + deltaZ) * (kl * av / Us) * (Cssc - C0)
X = (A - C0) / A
PRINT #1, Z, X, rn, Fin, Etan, Cssc, C0
C0 = C1
      NEXT Z
      CLOSE #1
      res$ = "n"
      WEND
      PRINT ""
END
```

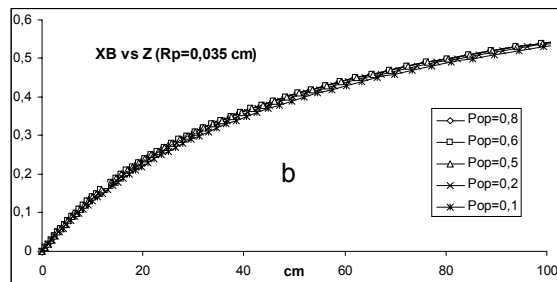
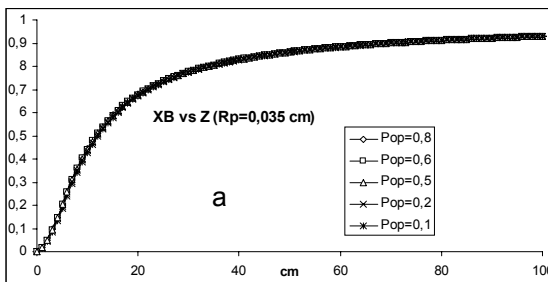
---

**Resultados:**

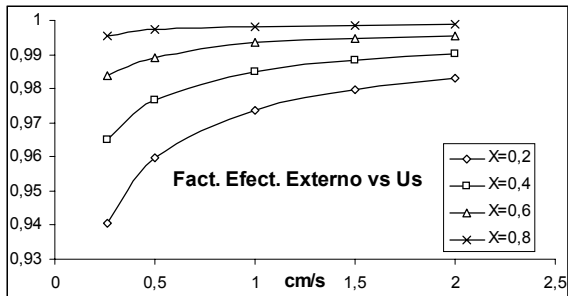
A continuación se muestran curvas obtenidas con ambos métodos numéricos



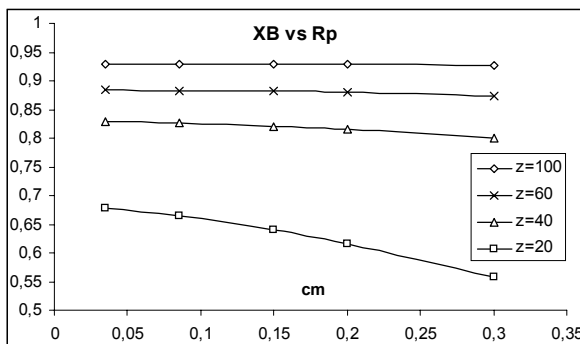
La gráfica muestra los resultados obtenidos con ambos métodos numéricos para un radio de partícula constante. Se evidencia mercadamente que el método numérico usado influye en la predicción cuantitativa de resultados, aunque cualitativamente se corresponden.



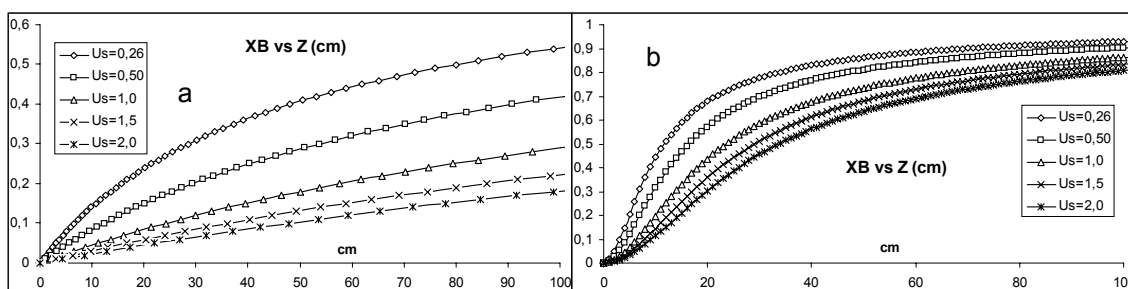
Las gráficas muestran que para el catalizador elegido ( $R_p = 0,035$  cm) no se observan cambios apreciables en la conversión frente a grandes cambios de porosidad. El sistema se encuentra bajo fuerte control químico. a) Incremento Finito. b) Runge Kutta 4º Orden



Para ver el efecto de resistencia a la transferencia de materia en la película externa, se muestra como se modifica el factor de efectividad externo al aumentar la velocidad superficial del fluido para distintos niveles de conversión. A pesar de las pequeñas variaciones del factor de efectividad, el valor del mismo siempre se encuentra por encima de 0,94 lo que nos indica que para el radio de partícula original no existen limitaciones importantes en la película externa (Runge Kutta de 4º Orden)



La grafica muestra la influencia del radio de partícula sobre la conversión en distintas posiciones del reactor. El efecto del tamaño de partícula es más evidente sobre los primeros tramos del reactor y se magnifica cuando el radio de partículas alcanza valores superiores 0,1 cm. (Incremento Finito)



Las gráficas muestran que un aumento de la velocidad superficial del fluido produce una caída de la conversión para la misma posición en el reactor. a) Runge Kutta 4° Oden. b) Incremento Finito

#### Conclusiones:

La elección del método de cálculo usado para resolver el sistema de ecuaciones puede tener influencia en los resultados numéricos obtenidos. El método de Incremento Finito requiere de menor cantidad de cálculos (programa más corto) pero brinda resultados superiores a los esperados. El método de Runge Kutta de 4° orden requiere de un programa más extenso pero brinda resultados más aproximados a los esperados.

Los resultados muestran que las condiciones adoptadas ( $R_p = 0,035$  y  $U_s = 0,26$  cm/s) por los autores del trabajo referenciado hacen que el reactor no presente ningún tipo de limitaciones difusivas y por lo tanto sea el óptimo para el diseño de un reactor catalítico heterogéneo de lecho fijo, al menos desde un punto de vista químico.

En vista de que el reactor fue pensado como lecho percolador y de que la velocidad superficial debe ser baja, no se tuvo en cuenta la pérdida de carga producida por el lecho.

Al trabajar con un sistema isotérmico y una exotermia baja, no existen problemas de hot spot ni de run away.

#### Bibliografía Consultada:

- Proyecto Final de la materia Proyecto Industrial correspondiente a la Carrera de Ingeniería Química. "Producción de Acetal", Febrero de 2000.
- Apuntes del Curso.
- WHITAKER S. and CASSANO A. "Concepts and Desing of Chemical Reactors".
- VIAN A. and OCÓN J. "Elementos de Ingeniería Química".
- FROMET G. and BISCHOFF K. "Chemical reactor. Analysis and Desing"