

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN



INFORME FINAL DE INVESTIGACIÓN

“PERFIL DEL FACTOR DE EFECTIVIDAD EN UN REACTOR DE LECHO FIJO A PARTIR DE DATOS GLOBALES DEL PROCESO DE OXIDACIÓN DEL DIÓXIDO DE AZUFRE”

AUTOR: Luis Américo Carrasco Venegas

ESTUDIANTES DE APOYO:

VANESSA DEL CARMEN PINEDA CASTAÑEDA
INGRID CARMEN ROSA HUÁNUCO GUILLÉN
CRISTIAN ANTHONY CASAS PRECIADO

PERIODO DE EJECUCIÓN: Del 01 de abril de 2022 al 31 de marzo de 2023

Resolución de aprobación Nro. 339-2022-R

Callao, 2023

PERÚ

DEDICATORIA

A mi amada familia:
quienes son la fuerza impulsora
para seguir esforzándome en mi
desarrollo personal y contribución
a la ciencia.

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'César', located at the bottom right of the page.

AGRADECIMIENTO

A la Facultad de Ingeniería Química por darme la oportunidad de desarrollarme profesionalmente.

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'César', located at the bottom right of the page.

RESUMEN

El presente trabajo de investigación tiene por objetivo encontrar el perfil del factor de efectividad de las partículas de catalizador en el proceso de oxidación del dióxido de azufre a trióxido de azufre que se produce en el interior de un reactor catalítico de lecho fijo. La metodología consiste en la simplificación de las ecuaciones de conservación de materia y energía aplicados a este proceso considerando los efectos de difusión radial y despreciando los efectos de difusión axial; tiene por objetivo encontrar los perfiles de conversión y temperatura dentro del lecho, los cuales se consideran las condiciones externas a las partículas de catalizador; luego se simplifica adecuadamente las ecuaciones de conservación de materia y energía aplicados al proceso que se lleva dentro del catalizador, utilizando los datos globales del reactor, para cada partícula seleccionada arbitrariamente, generando un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales los cuales se resuelven mediante las rutinas existentes para el caso. Se ha encontrado que el factor de efectividad para este caso fluctúa entre 0.3 y 1.15 y que las mayores fluctuaciones se encuentran en el centro del reactor referida a la longitud y por otro lado y el factor de efectividad es más alto en la periferia del reactor, respecto del radio. También cabe mencionar que los sistemas resultantes presentan problemas de convergencia y, por tanto, se ha utilizado diferentes rutinas para un punto de difícil convergencia o también se ha manejado cambiando los valores iniciales de prueba.

Palabras claves: dióxido de azufre, modelamiento, simulación, factor de efectividad



ABSTRACT

The objective of this research work is to find the profile of the effectiveness factor of the catalyst particles in the oxidation process of sulfur dioxide to sulfur trioxide that occurs inside a fixed bed catalytic reactor. The methodology consists in the simplification of the equations of conservation of matter and energy applied to this process considering the effects of radial diffusion and neglecting the effects of axial diffusion; its objective is to find the conversion and temperature profiles inside the bed, which are considered the external conditions to the catalyst particles; then the equations of conservation of matter and energy applied to the process that is carried out inside the catalyst are adequately simplified, using the global data of the reactor, for each arbitrarily selected particle, generating a system of non-linear algebraic equations which are solved by means of the routines existing for the case. It has been found that the effectiveness factor for this case fluctuates between 0.3 and 1.15 and that the greatest fluctuations are found in the center of the reactor referred to the length and on the other hand and the effectiveness factor is higher at the periphery of the reactor. with respect to the radius. It is also worth mentioning that the resulting systems present convergence problems and therefore, different routines have been used for a point of difficult convergence or it has also been handled by changing the initial test values.

Keywords: sulfur dioxide, modeling, simulation, effectiveness factor



INDICE

RESUMEN.....	4
ABSTRACT.....	5
INTRODUCCIÓN.....	4
I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	6
1.1 Descripción de la realidad problemática	6
1.2 Formulación y planteamiento del problema	6
1.3 Objetivos generales y específicos	7
1.4 Justificación.....	7
1.5 Limitaciones de la investigación	8
II. MARCO TEORICO	9
2.1. Antecedentes	9
2.1.1. Antecedentes Nacionales.....	9
2.1.2. Antecedentes internacionales.....	10
2.2. Bases teóricas	10
2.2.1. Catálisis y catalizadores	10
2.2.2. Cinética de la reacción	12
2.2.3. Ecuaciones requeridas para la obtención del perfil de factor de efectividad	13
2.2.4. Principales etapas de una reacción química heterogénea.....	16
2.3.1 Factor de efectividad de catalizadores heterogéneos	17
2.3.2. Módulo de Thiele y Modulo de Weisz-Prater	17
2.3.3 Proceso de fabricación del ácido sulfúrico	19
2.3. Definición de términos básicos.....	21
III. HIPÓTESIS Y VARIABLES.....	22
3.1. Hipótesis general y específicas	22
3.2. Definición conceptual de las variables	22
3.3. Operacionalización de las variables	23
3.3.1. Definición operacional de las variables (dimensiones, indicadores, índices, técnicas estadísticas, método y técnica)	24



IV.	DISEÑO METODOLÓGICO.....	24
4.1.	Tipo y diseño de la Investigación	24
4.2.	Método de investigación	24
4.3.	Población y muestra	25
4.4.	Lugar de estudio	25
4.5.	Técnicas e instrumentos de recolección de información	25
4.6.	Análisis y procesamiento de datos	26
V.	RESULTADOS	26
5.1	Resultados descriptivos	26
5.2	Resultados inferenciales.....	27
5.3	Resultados inferenciales.....	27
5.4	Otro tipo de resultados	27
5.4.1	Modelamiento del proceso de oxidación en el lecho.....	27
5.4.2	Modelamiento del proceso de oxidación en la partícula de catalizador..	37
VI.	DISCUSIÓN DE RESULTADOS.....	45
	CONCLUSIONES.....	46
	RECOMENDACIONES	47
	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	47
	ANEXO: MATRIZ DE CONSISTENCIA	50



INDICE DE FIGURAS

		PÁGINA
Figura 1	Esquema de tratamiento de un reactor catalítico de lecho fijo	13
Figura 2	Diagrama de proceso de la producción de ácido sulfúrico de la empresa Monsanto	21
Figura 3	Perfil de conversión del dióxido de azufre en función a la longitud y el radio	35
Figura 4	Perfil de temperatura del dióxido de azufre en función a la longitud y el radio	35
Figura 5	Perfil axial de conversión en función del radio del reactor	36
Figura 6	Perfil axial de temperatura en función del radio del reactor	36
Figura 7	Perfil del factor de efectividad de la conversión del dióxido de azufre	44
Figura 8	Perfil del factor de efectividad de la conversión del dióxido de azufre en función a la longitud para cada radio del reactor	45



INDICE DE TABLAS

PÁGINA

Tabla 1	Propiedades físicas y condiciones de operación del proceso de oxidación del dióxido de azufre	31
---------	---	----



INTRODUCCIÓN

En la actualidad existe mucha preocupación por las emisiones de gases contaminantes y de efecto invernadero. El dióxido de azufre es uno de estos gases que se producen de diversas fuentes como son la quema de combustibles fósiles, procesos de descomposición natural de materia orgánica, emisiones volcánicas, y principalmente de la manufactura del ácido sulfúrico a partir de azufre elemental o de la oxidación de minerales sulfurados. Este proceso indicado, requiere de una serie de etapas para su manufactura; una de estas etapas es la conversión del dióxido de azufre a trióxido de azufre y que está limitada por la termodinámica del proceso, pues nunca se llega a la conversión total. Todos los esfuerzos están dedicados a obtener la mayor conversión posible de dióxido de azufre a trióxido de azufre; para lograr esto se analiza una serie de factores como son el tipo y tamaño de catalizador, el radio y la longitud del catalizador, la temperatura de entrada, la temperatura de la pared, el flujo de alimentación, la composición de la alimentación, etc.

Una vez logrado estas condiciones más favorables, usando pseudo experimentos, a partir de los datos iniciales, se procede a realizar los balances de materia y energía en el interior del catalizador con la finalidad de obtener el factor de efectividad en cada punto de la torre de oxidación; estos datos así obtenidos permitirán obtener el perfil del factor de efectividad dentro de la columna; asimismo se podrán evaluar otros factores como el módulo de Thiele y el módulo de Weiz en forma gráfica para una mejor interpretación de los resultados. Un análisis completo de todas las condiciones y parámetros obtenidos, permitirán optimizar el diseño del reactor correspondiente, y a su vez, diseñar los sistemas de medición y control apropiados para un correcto funcionamiento de la unidad de conversión que es el equipo crítico en este proceso de manufactura del ácido sulfúrico.



I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 Descripción de la realidad problemática

La oxidación del dióxido de azufre es una de las etapas más importantes en el proceso de manufactura del ácido sulfúrico. El dióxido de azufre es obtenido directamente a partir de la oxidación del azufre o a partir de la tostación de minerales sulfurados; esta etapa es relativamente sencilla y rápida, se produce una reacción irreversible, de tal forma que todo el azufre o todo el sulfuro se convierte totalmente en dióxido de azufre. La segunda etapa importante, es la oxidación del dióxido de azufre a trióxido de azufre; es una reacción que alcanza el equilibrio bajo ciertas condiciones de presión y temperatura, por tanto, es importante obtener las condiciones más adecuadas que permitan la más alta conversión de dióxido de azufre a trióxido de azufre. A partir de estas condiciones es posible obtener el perfil del factor de efectividad dentro del lecho del catalizador y hacer un análisis de las zonas de más alta eficiencia y tomar las previsiones del caso en aquellas zonas donde los catalizadores son menos eficientes. Todo este análisis se realizará en un reactor de lecho fijo pseudo homogéneo, a partir de los datos de proceso iniciales reportados en la literatura; dado la alta exotermicidad del proceso, también se analizará las zonas más calientes del reactor, considerando las geometrías rectangular, cilíndrica y esférica.

1.2 Formulación y planteamiento del problema

El análisis del perfil del factor de efectividad es una herramienta que no ha sido usado con mucha frecuencia en el análisis global de los procesos; sin embargo, nos brinda mucha información sobre la performance de los catalizadores ubicados en las diferentes zonas del reactor, en este caso tubular no isotérmico, pseudo homogéneo; para lograr este propósito, primero se efectuara un balance de masa y energía en el interior del reactor, el cual nos brinda las condiciones de presión, temperatura y conversión externas a las que está expuesta cada partícula de catalizador y a partir de este conocimiento, es posible obtener el factor de efectividad de cada



partícula y luego obtener el perfil correspondiente. Un análisis estadístico, determinara, cuáles de los factores externos influyen significativamente en el análisis correspondiente.

Problema general

¿Cómo se deberá determinar el perfil del factor de efectividad en un reactor de lecho fijo?

Problemas específicos

¿Cuáles son los datos globales de proceso y propiedades físicas necesarios para obtener el perfil del factor de efectividad en el proceso de oxidación del dióxido de azufre?

1.3 Objetivos generales y específicos

Objetivo general

Determinar el perfil del factor de efectividad en un reactor tubular de lecho fijo.

Objetivo específico

Precisar los datos globales de proceso y propiedades físicas necesarios para obtener el perfil del factor de efectividad en el proceso de oxidación del dióxido de azufre.

1.4 Justificación

Las predicciones teóricas y los termogramas respectivos en un reactor catalítico de lecho fijo no isotérmico muestran que las condiciones de temperatura en cada punto del reactor de lecho fijo son diferentes, esto hace que cada partícula de catalizador actúe de diferente manera; este estudio permitirá predecir las condiciones a las cuales están expuestas cada partícula y su respectiva eficiencia; por tanto, el desarrollo del presente trabajo se justifica plenamente, pues permitirá mostrar de antemano las condiciones a las cuales serán sometidas los catalizadores ubicados en las distintas zonas del catalizador. Incrementará el conocimiento en esta área



de modelamiento y simulación, además, servirá como base de estudio para otros procesos similares, incrementando el conocimiento en el área de fenómenos de transporte y diseño de reactores.

Por tanto, la importancia de este estudio radica principalmente en los siguientes puntos.

- ✓ Es importante su análisis para incrementar su conversión pues es uno de los parámetros críticos en el diseño de plantas que pretenden obtener ácido sulfúrico.
- ✓ Los resultados contribuirán en la formación académica de los estudiantes de maestría en el área de fenómenos de transporte y diseño de reactores
- ✓ Los resultados pueden ser usados por la industria ya que la principal preocupación en la producción del ácido sulfúrico es elevar la conversión y preservar el catalizador.

1.5 Limitaciones de la investigación

En cuanto a la limitación teórica, la limitación fundamental en este trabajo es la obtención de la base inicial de datos; el acoplamiento de los balances de materia y energía tanto en el lecho como en la partícula puede considerarse otra limitante debido a la complejidad de la cinética de la reacción lo cual podría causar problemas de convergencia a la hora de resolver los sistemas resultantes.

No se tiene limitante espacial, pues al tratarse de una investigación de modelamiento, no se requiere de ambientes de laboratorio.

Respecto al tiempo si hay una seria limitación, pues investigaciones de este tipo requieren mayor tiempo de dedicación y los docentes tenemos múltiples actividades lo cual limita seriamente los avances.



II. MARCO TEORICO

2.1. Antecedentes

En la literatura se ha obtenido información sobre catalizadores y sus diversas modificaciones para incrementar el porcentaje de conversión del dióxido de azufre a trióxido de azufre; sin embargo, respecto a los procesos de oxidación y determinación de los factores de efectividad, no se dispone de mucha información, más aún referido a la obtención de los perfiles del factor de efectividad.

2.1.1. Antecedentes Nacionales

Carrasco (2013), en su trabajo denominado “Modelamiento y simulación de reactores de lecho fijo”, usando los datos proporcionados por García-Ochoa et al. (1991), obtuvo el perfil de conversión y temperatura del proceso de conversión del dióxido de azufre a trióxido de azufre, en un reactor de lecho fijo, usando el modelo de dos dimensiones con difusión axial, difusión radial y difusión axial y radial.

Reyna (2022) en su trabajo denominado: “Optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente de los procesos de tostación de minerales sulfurados a través del modelamiento y simulación” desarrolla la optimización de un reactor catalítico de lecho fijo a partir de los datos proporcionados por García-Ochoa et al. (1991); con esta información, realiza pseudo experimentos en base a un diseño experimental y determina las condiciones óptimas dentro del lecho catalítico.

Granados, C. (1979) presenta los balances de materia y energía en la planta de ácido sulfúrico basado en el proceso de Monsanto a partir de azufre elemental. Utiliza datos globales; no analiza los procesos dentro del reactor catalítico, únicamente toma en cuenta las entradas y salidas.



2.1.2. Antecedentes internacionales

Froment, G., Bischoff, K., De Wilde, J. (2011), presenta la cinética de la oxidación del dióxido de azufre a trióxido de azufre en un reactor de lecho fijo, cuya expresión es bastante compleja pues sus parámetros son funciones de la temperatura y su evaluación en sistemas múltiples genera inestabilidad, si no se tienen valores iniciales apropiados cuando se resuelve un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales.

Una forma modificada de la expresión de la expresión de la velocidad de reacción es presentada por (Pernet, et. al, 2016).

García-Ochoa et al (1991), en su trabajo: "Simulación de reactores de lecho fijo por el modelo de dos dimensiones I-Reacciones simples", presenta el modelamiento de la oxidación del dióxido de azufre en un reactor de lecho fijo, considerando la difusión radial y la técnica de colocación ortogonal; obtiene los perfiles correspondientes de temperatura y conversión.

Chenier (2002), hace un análisis del mecanismo de reacción entre el pentóxido de vanadio, usando como iniciador sulfato de sodio y el dióxido de azufre, lo cual permite entender el proceso de conversión.

Katz (2011), en el capítulo 4, hace un estudio detallado del proceso de fabricación del ácido sulfúrico, haciendo referencia al proceso industrial desarrollado por Monsanto. Hace un análisis de los procesos de obtención a partir de azufre y minerales sulfurados, presenta las ecuaciones químicas correspondientes y hace un análisis de los efectos de la contaminación.

2.2. Bases teóricas

2.2.1. Catálisis y catalizadores

Se denomina catálisis al fenómeno que transcurre cuando en la composición del complejo activado de alguna de las etapas en que se lleva a cabo la reacción participa una sustancia que no toma parte

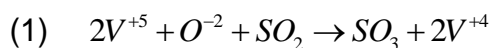
estequiométrica del proceso total, pero que cambia las propiedades cinéticas del sistema reaccionante. Este compuesto se denomina catalizador.

En catálisis heterogénea, el catalizador tiene un estado de agregación diferente a la de los reactivos y productos. Generalmente, el catalizador es sólido, los reactivos y productos están en una o más fases fluidas (gas o líquida) y la reacción catalítica se lleva a cabo sobre la superficie del sólido. O sea, el catalizador provee un camino alternativo para la reacción, no presente en su ausencia. (Gonzo, 2011)

Según Frost (1961); el catalizador es una sustancia que altera la velocidad de una reacción dada sin hacerle caso el destino final del catalizador. El rol principal del catalizador es cambiar el mecanismo de una sustancia de una energía de activación alta a una energía de activación baja y orientar el sentido de la reacción.

En el caso de la oxidación del dióxido de azufre, se utiliza el catalizador pentóxido de vanadio promovido por pequeñas cantidades de sulfato de metal alcalino como el sulfato de sodio, que reacciona en presencia de SO_3 que da $(S_2O_7)^{-2}$ en un paso inicial. Esta es la fuente del ion O^{-2} que reduce el V^{+5} a V^{+4} y es reoxidada a V^{+5} por el oxígeno. Chenier (2002). Las etapas fundamentales son:

Iniciación $SO_4^{-2} + SO_3 \rightarrow (S_2O_7)^{-2}$ (conteniendo O^{-2})



Sumando (1) + (2) $SO_2 + 1/2O_2 \rightarrow SO_3$

Según Chenier (2002), el proceso es altamente exotérmico que permite recuperar calor en muchas etapas: después del quemado de azufre, después de la conversión, y después de la torre de absorción. Asimismo, el calor degradado puede ser usado para generar vapor. Una planta opera



con 10% de dióxido de azufre en la alimentación y una conversión de 99.7% de dióxido de azufre a trióxido de azufre y tiene un gas de chimenea de 350 ppm de SO₂. La conversión de equilibrio (mejor conversión teórica) es de 100 ppm de SO₂. Las regulaciones requieren que no más de 4 Lb de SO₂ salga por cada tonelada de H₂SO₄ hecho. Esta no es una fuente apreciable de la lluvia acida, ante todo causada por las plantas de generación de electricidad que queman carbón conteniendo azufre. De hecho, el total de dióxido de azufre emitido a partir de la quema de carbonen las torres de estación es más que el total de azufre usado en las plantas de alimentación de ácido sulfúrico. Sin embargo, se está continuando la reducción de emisiones de sulfuro en las plantas de ácido sulfúrico; procesos a baja temperatura están siendo estudiados, lo que podría disminuir las emisiones de dióxido de azufre.

Otro catalizador muy usado en la industria del ácido sulfúrico es el catalizador platino soportado en esferas de trióxido de aluminio (Pt/Al₂O₃). La cinética de la reacción esta expresado en términos de este catalizador, cuyo mecanismo no se conoce; sin embargo, de acuerdo con la expresión cinética, se considera la difusión interna, la reacción y la adsorción.

2.2.2. Cinética de la reacción

Froment et al (2011) señalan que la expresión de la velocidad de reacción está dada por:

$$SO_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons SO_3$$

$$r = \frac{K_1 P_{O_2} P_{SO_2} \left(1 - \frac{P_{SO_3}}{P_{SO_2} P_{O_2}^{1/2} K_P}\right)}{22,414(1 + K_2 P_{SO_2} + K_3 P_{SO_3})^2} \left(\frac{Kgmol SO_2}{Kg cat * hr}\right) \quad (1)$$

Donde:

$$K_1 = \exp\left(12.160 - \frac{5473}{T}\right) \quad (2)$$

$$K_2 = \exp\left(-9.953 + \frac{8619}{T}\right) \quad (3)$$

$$K_3 = \exp\left(-71.745 + \frac{52596}{T}\right) \quad (4)$$

$$K_p = \exp\left(\frac{11300}{T} - 10,68\right) \quad (5)$$

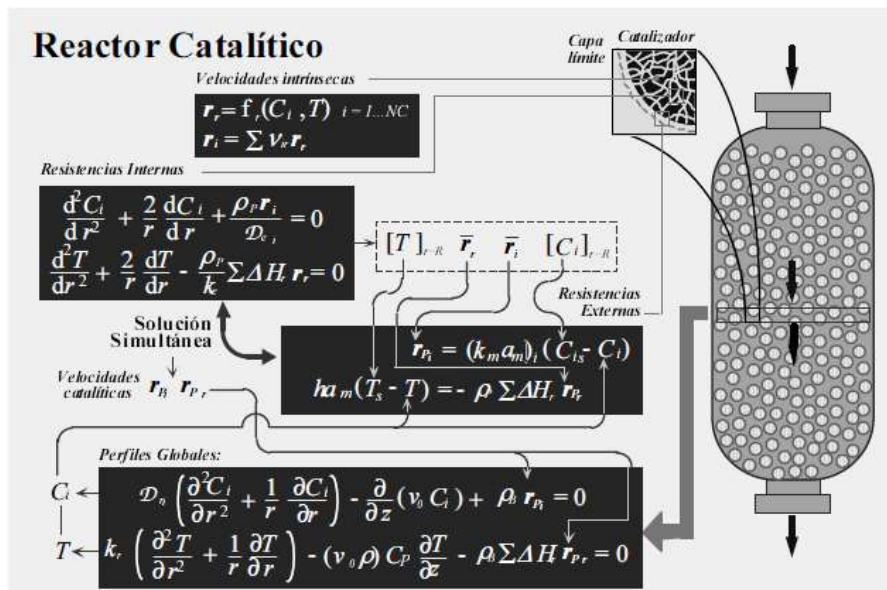
La expresión de la ley de velocidad es compleja y tiene una alta dependencia de la temperatura; es así como uno de los factores más importantes en la conversión del dióxido de azufre es la temperatura.

2.2.3. Ecuaciones requeridas para la obtención del perfil de factor de efectividad

Una vez conocida la cinética de la reacción, es preciso aplicar los balances de materia, energía y cantidad de movimiento si fuera necesario tanto en el reactor como en cada una de las partículas. La Fig. 1 resume en forma apropiada lo mencionado.

Figura 1:

Esquema de tratamiento de un reactor catalítico de lecho fijo



Fuente: <http://www.ingenieriaquimica.es/files/pdf/iq/500/iq11dic2011.pdf>

En el caso del reactor se puede tomar las siguientes suposiciones

- ✓ No se considera ni la difusión axial ni radial, por lo tanto, el reactor se comportará como uno homogéneo, unidimensional.; el modelo resultante será dos ecuaciones diferenciales ordinarias: la concentración y temperatura dependientes de la longitud
- ✓ Se considera solo la difusión axial; el reactor se comporta como uno pseudo homogéneo, unidimensional; el modelo resultante será un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales con un número total equivalente al doble del número de puntos de colocación
- ✓ Se considera solo la difusión radial; el reactor se comporta como uno pseudo homogéneo, bidimensional; el modelo resultante será dos ecuaciones diferenciales parciales, las que pueden ser transformadas a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias con la concentración y temperatura dependientes de la longitud y el radio, con un número total equivalente al doble del número de puntos de colocación
- ✓ Se considera tanto la difusión axial como la radial; el reactor se comporta como uno pseudo homogéneo, bidimensional; el modelo resultante será dos ecuaciones diferenciales parciales, las que pueden ser transformadas a un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales con la concentración y temperatura dependientes de la longitud y el radio, con un número total equivalente al doble del número de puntos de colocación.

Las ecuaciones de conservación de materia y energía y cantidad de movimiento, así como la ecuación de continuidad, son presentados por Bird et al (1993). y Bird et al. (2006).

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{V} \quad (6)$$



Carrasco (2018) indica los casos en las cuales estas ecuaciones son aplicables de manera efectiva

Ecuación de conservación de cantidad de movimiento

$$\rho \frac{DV}{Dt} = -\nabla p - \nabla \tau + \rho g \quad (7)$$

La ecuación (7) es usada para encontrar los parámetros de flujo de fluidos newtonianos y no newtonianos

Ecuación de Navier Stokes

$$\rho \frac{DV}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 V + \rho g \quad (8)$$

La ecuación (8) es usada para encontrar parámetros de flujo de fluidos newtonianos

Ecuación de conservación de materia

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla C_A = -\nabla \cdot \mathbf{N}_A + r_A \quad (9)$$

La ecuación (9) es usada para el caso de contradifusión equimolar y no equimolar

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla C_A = D \nabla^2 C_A + r_A \quad (10)$$

La ecuación (10) es usada para el caso de contradifusión equimolar

Ecuación de conservación de materia

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla T \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + G \quad (11)$$

La ecuación (11) es usada para el caso de conductividad variable y constante

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla T = k \nabla^2 T + G \quad (12)$$

La ecuación (12) solo es usada para el caso de conductividad constante

Para perfilar un reactor químico y sus respectivas partículas de catalizador, se requiere de estas ecuaciones fundamentales y otras ecuaciones auxiliares

2.2.4. Principales etapas de una reacción química heterogénea

Las distintas etapas son las siguientes:

- ✓ *Difusión externa (o resistencia de la película):* difusión de los reactivos hacia la superficie exterior del catalizador.
- ✓ *Difusión interna (o resistencia a la difusión en los poros):* difusión de los reactivos hacia el interior del catalizador, donde se va a producir la reacción mayoritariamente.
- ✓ *Adsorción química (o física en ciertas ocasiones) en la superficie:* durante la unión de las moléculas del reactivo en algún lugar de la superficie del catalizador.
- ✓ *Reacción química superficial:* reacción en la superficie de la partícula de catalizador.
- ✓ *Desorción química en la superficie:* durante la separación de las moléculas de producto de la superficie del catalizador.
- ✓ *Difusión interna (o resistencia a la difusión en los poros):* difusión de los productos hacia el exterior del catalizador.
- ✓ *Difusión externa (o resistencia de la película):* durante la salida de los productos hacia el seno de la fase gaseosa. (Santamaría et al., 2012; Smith, 1991)

Otros factores que pueden influir

- ✓ *Flujo de calor en la propia partícula:* aparece fundamentalmente en reacciones rápidas exotérmicas o endotérmicas, y provoca gradientes de temperatura dentro de la partícula.
- ✓ *Flujo externo de calor:* provoca un gradiente de temperaturas entre la superficie exterior de la partícula y la corriente de fluido exterior. En este

caso, el catalizador podría tener temperatura uniforme en todos sus puntos, pero distinta a la temperatura del seno del fluido exterior.

De todas las etapas de la reacción, la de difusión interna es algo especial, puesto que no puede ser etapa controlante, en el sentido de que si es muy lenta la velocidad vendrá dada por la de difusión interna, puesto que la reacción podría producirse en la superficie del sólido. Por ello se dice que la resistencia a la difusión interna está "en paralelo" con las otras resistencias, todas ellas "en serie". (Levenspiel, 2005; López, 2007; Conesa, 2010).

2.3 Conceptual

2.3.1 Factor de efectividad de catalizadores heterogéneos

El factor de efectividad mide la desaceleración de la velocidad de reacción causada por la resistencia a la difusión dentro de la partícula, ([15]; [12], [16]) y está dada por la siguiente ecuación:

Según Fogler (2001) y Aris et al (1957)

$$\text{Factor de efectividad} = \eta = \frac{\text{velocidad con efecto de la difusión}}{\text{velocidad sin efecto de la difusión}} = \frac{-r_{AP}}{-r_{AS}}$$

Luego se podrá hallar la velocidad global de la velocidad superficial

$$-r_{AP} = -\eta * r_{AB}$$

Al evaluar el factor de efectividad se tendrá la velocidad global siempre menor que la reacción superficial que indicara una resistencia adicional en el proceso, donde $0 < \eta < 1$ cuando el factor de efectividad es igual a 1 la resistencia es nula en la difusión de los poros.

2.3.2. Módulo de Thiele y Modulo de Weisz-Prater

Los fenómenos de velocidad de reacción dentro de la partícula juegan un rol importante en el modelamiento; el proceso más lento gobierna el proceso general de transferencia de masa, que en este caso se han considerados la difusión interna y la velocidad de reacción.

Según De Silva, et al (2014) y Iordanidis (2002), el módulo de Thiele se define como la relación entre la velocidad de reacción y la velocidad de difusión de un gas, dentro de la partícula de catalizador. La mayor tasa de difusión se produce cuando el tamaño de poros es grande, por tanto, a mayor tamaño de poro, el módulo de Thiele será pequeño pues la relación con el coeficiente de difusión es inversa.

Kimura et al. (2018) analiza el efecto del calor de reacción en reacciones gas-sólido con un modelo de reacción de volumen, con una velocidad de reacción de segundo orden; la variación del factor de efectividad con el avance de la reacción es representada gráficamente. Utiliza el método simplificado para la estimación del factor de efectividad, con la utilización del Módulo de Thiele, los números de Prater y Número de Arrhenius. Sus resultados lo representan gráficamente para reacciones altamente exotérmicas para múltiples casos.

Zhu, et al. (2018) analizaron la influencia del tamaño de los poros distribuidos espacialmente y la porosidad en las características reactivas y de difusión dentro de la partícula porosa del catalizador. El modelo desarrollado en este estudio integra ecuaciones de balance de masa, momento y calor, tamaño de poro espacial y modelos de distribución de porosidad, difusión multicomponente y modelos cinéticos agrupados.

El análisis comparativo de las consideraciones en el modelamiento tales como considerar modelos 1D homogéneo y heterogéneo en la fase fluida y sólida y 2D en ambas fases, tanto para la concentración como para la temperatura, ha sido desarrollado por (Iordanidis, 2002)

Sun, Y. (2004) utiliza el método de descomposición de Adomian para estudiar el problema de la difusión y reacción en pastillas de catalizador. Para su estudio considera resolver el modelo no lineal de difusión y reacción y para obtener soluciones aproximadas. La variación de la concentración de reactivo en los pellets de catalizador y los factores de eficacia se determinan para reacciones de segundo, medio y primer

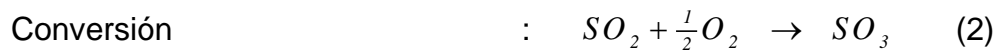
orden. Las soluciones analíticas aproximadas obtenidas se comparan con soluciones obtenidas con un método numérico de diferencias finitas. En general, el método del polinomio de Adomian con tres términos da soluciones comparables al procedimiento numérico para el módulo de Thiele por encima de 4 aproximadamente.

En el modelamiento del factor de efectividad para reacciones complejas, no es posible realizar simplificaciones en términos de los números adimensionales como el número de Prater o Arrhenius antes indicados; se debe seguir un procedimiento generalizado, es decir desarrollar completamente los balances de materia de cada componente, o en su defecto simplificarlo utilizando el criterio de conversión y plantear además la ecuación de conservación de energía; estas ecuaciones deben ser acopladas con la ley de Fick y la ley de Fourier. Este procedimiento se denomina procedimiento generalizado y es el que se utiliza en este trabajo. (Carrasco, 2018)

2.3.3 Proceso de fabricación del ácido sulfúrico

Existen dos procesos mayores para producir el ácido sulfúrico: 1) El proceso de las cámaras de plomo, y 2) El proceso de contacto. El viejo proceso de las cámaras de plomo emplea ácido nítrico y óxidos de nitrógeno para oxidar el SO_2 a SO_3 . En el proceso de contacto se oxida catalíticamente el SO_2 a SO_3 y es empleado esencialmente el 90% de todo el ácido sulfúrico es producido actualmente por el método de contacto, debido a que el proceso de las cámaras de plomo reduce ácido de concentración baja lo que lo hace antieconómico. El proceso de contacto que se muestra en la Figura N° 01, corresponde a una planta diseñada y operada por la MONSANTO CHEMICAL COMPANY-USA. Este usa azufre puro, aun cuando el proceso puede ser utilizado con SO_2 proveniente de varias fuentes. La planta produce tanto ácido sulfúrico al 98% en peso como también óleum o ácido sulfúrico fumante (H_2SO_4 con SO_3 disuelto). Las tres reacciones en el proceso de contacto son:



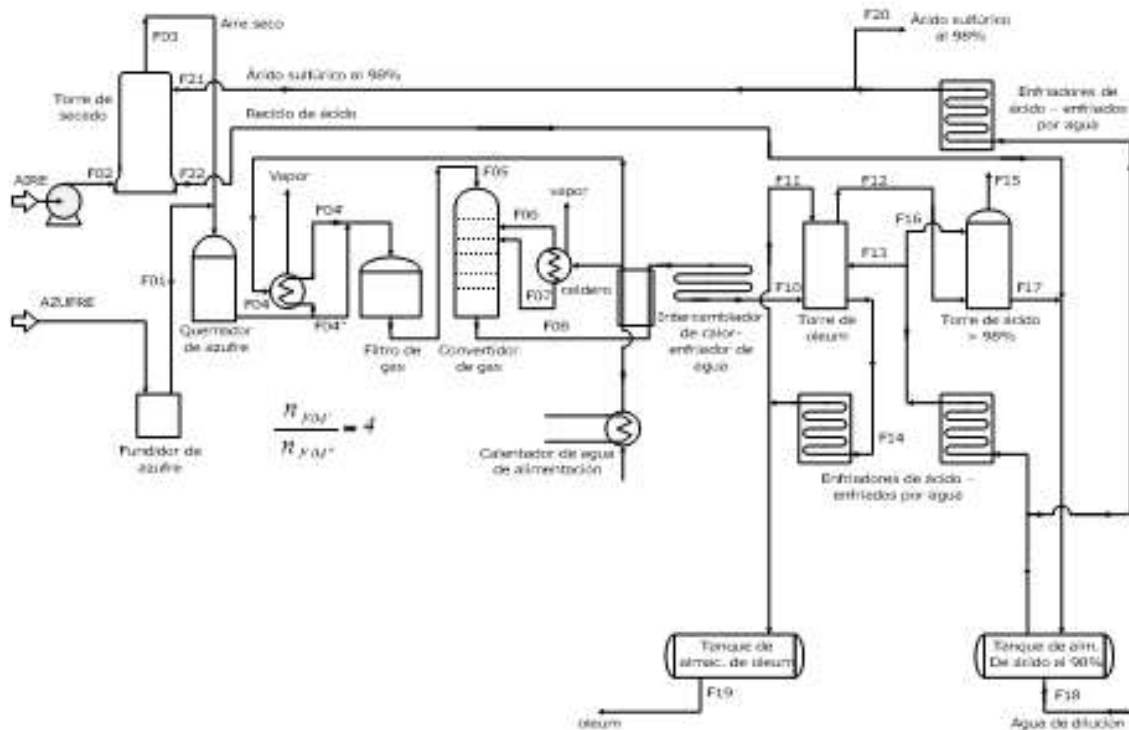


El azufre puro es transportado de los montículos de almacenamiento el tanque de fusión de azufre por medio de tractores pequeños de cuchara. El azufre se funde y se mantiene a 135 °C mediante serpentines inmersos por los que circulan vapor. A la temperatura señalada, la viscosidad del azufre fundido es aproximadamente 8 cp y es bombeado al quemador. El aire es primero secado, poniéndolo en contacto con ácido sulfúrico al 98% en peso en una torre de absorción. El aire debe ser secado para prevenir la corrosión y evitar la formación de nieblas ácidas en el gas residual proveniente de la última torre de absorción. El secado del aire permite el uso de acero corriente como material de construcción de los equipos y ductos, eliminando de esta manera la necesidad de emplear equipos contruidos de plomo o recubiertos de plomo. El quemador de azufre es un recipiente cilíndrico de acero forrado con ladrillos aislantes y ladrillos refractarios. El azufre fundido fluye por la parte superior y hacia abajo sobre la superficie del ladrillo refractario. El aire también es suministrado por la parte superior. Al poner en marcha el quemador, se instala temporalmente un quemador de gas o de petróleo en la base, para calentar el panel de ladrillo s hasta la temperatura de ignición de azufre. Otro tipo de quemador atomiza el azufre fundido dentro de una cámara de combustión horizontal.



Figura 2

Diagrama de proceso de la producción de ácido sulfúrico de la empresa Monsanto



2.3. Definición de términos básicos

- **Catalizador:** es un material compuesto por lo general contiene un soporte o matriz y un “elemento activo”, que por lo general es un metal; también existen los catalizadores denominados masicos, pues toda la masa es activa.
- **Oxidación:** Se entiende por oxidación al proceso de pérdida de electrones por parte de un elemento como consecuencia de la ganancia de dichos electrones por otro elemento. En el caso del dióxido de azufre, el azufre +4 en el dióxido de azufre pasa a azufre +6 en el trióxido de azufre.

- **Conversión:** La transformación de dióxido de azufre a trióxido de azufre, industrialmente se conoce como conversión y el equipo que realiza este proceso se denomina convertidor.

Nota: En todos los procesos de transformación química hay una conversión, que muchas veces se usa tangencialmente; sin embargo, en el caso de la industria del ácido sulfúrico, este término es bastante común.

- **Modelo unidimensional:** El proceso de transferencia de masa advectivo y difusional se considera en una sola dirección, en este caso en la dirección axial
- **Modelo bidimensional:** El proceso de transferencia de masa advectivo se considera en la dirección axial y el proceso de transporte de masa difusional se considera en la dirección radial, y además se puede considerar en la dirección axial

III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

3.1. Hipótesis general y específicas

Hipótesis general

El perfil del factor de efectividad se determina obteniendo las condiciones de conversión y temperatura a lo largo del lecho y su posterior uso en el perfil de concentración y temperatura en cada partícula individual.

Hipótesis Específica

Para determinar el perfil del factor de efectividad se requiere conocer las propiedades físicas del catalizador, las dimensiones del reactor tubular y las condiciones de operación.

3.2. Definición conceptual de las variables

Variable Dependiente

Z: Perfil del factor de efectividad

Variables Independientes



X: Factores de proceso

Indicadores

Perfil del factor de efectividad dependiente de la ubicación espacial dentro del lecho catalítico, que a su vez dependen fundamentalmente de la conversión y temperatura global

3.3. Operacionalización de las variables

Las características físicas del catalizador, las relaciones geométricas del reactor y las condiciones de operación, así como su actividad influyen directamente en el valor numérico del factor de efectividad en cada punto del reactor.

Variable	Definición conceptual	Definición operacional	Dimensiones	Indicadores
Perfil del factor de efectividad	El factor de efectividad es la relación que existe entre la velocidad de reacción observada y la velocidad de reacción en ausencia de difusión interna (Conesa, s.f.).	El perfil del factor de efectividad es la relación espacial de los diferentes valores obtenidos y representados gráficamente.	Temperatura máxima	Análisis de los perfiles gráficos
Factores de proceso			Consideraciones físicas del reactor y del catalizador	Relación geometría del reactor Propiedades físicas del catalizador y gas en el reactor
			Condiciones de operación reactor	Temperatura Flujo Presión Concentración

3.3.1. Definición operacional de las variables (dimensiones, indicadores, índices, técnicas estadísticas, método y técnica)

El perfil del factor de efectividad es una sucesión de cálculos del factor de efectividad; es un parámetro que relaciona la velocidad de reacción observada (considerando el transporte difusional) y la velocidad de reacción ideal (Velocidad de reacción, sin considerar la transferencia de masa por difusión)

IV. DISEÑO METODOLÓGICO

4.1. Tipo y diseño de la Investigación

Tipo de investigación: Aplicada, cuantitativa e inductiva

Nivel de investigación: Explicativa

Diseño de la investigación: Documental

4.2. Método de investigación

Con los datos experimentales obtenidos de la literatura, se realiza un pseudo experimento, usando las herramientas estadísticas, se procede a optimizar las dimensiones del reactor, así como las condiciones de operación, lo cual nos provee los perfiles óptimos de temperatura y conversión, los que se constituyen en las condiciones de superficie del catalizador. Con esta información se procede a calcular el factor de efectividad de cada partícula de catalizador, considerando las condiciones de simetría en la dirección radial del reactor.

El diseño de la investigación tiene las siguientes etapas

Primera etapa: Recopilación de la información que sustente el trabajo

Segunda etapa: Recopilación de modelos cinéticos y datos de proceso

Tercera etapa: Acondicionamiento de los datos

Cuarta etapa: Aplicación de los balances de materia y energía en el lecho catalítico

Quinta etapa: Optimización de las condiciones de operación



Sexta etapa: Aplicación de los balances de materia y energía en la partícula de catalizador.

Séptima etapa: Análisis de los resultados y preparación del Informe Final

4.3. Población y muestra

En este trabajo, no aplica la población

La muestra consiste en el análisis del proceso de conversión de una mezcla de gases proveniente de la oxidación del azufre o minerales sulfurados, cuya característica fundamental es la composición inicial del dióxido de azufre que fluctúa entre un 6 y 10% en volumen. Baja estas condiciones de concentración será sometido a la conversión a dióxido de azufre, cuyos valores de conversión serán verificados con la implementación de un software cuyo aspecto fundamental es el conocimiento de la cinética de la reacción.

4.4. Lugar de estudio

El estudio se llevará a cabo en el Centro de Computo de la Facultad de Ingeniería Química; sin embargo, algunas etapas del trabajo serán desarrollados en domicilio debido a la disponibilidad de tiempo y a los softwares disponibles tanto en el Centro de Computo de la FIQ así como en domicilio.

4.5. Técnicas e instrumentos de recolección de información

Para el cálculo del factor de efectividad se requieren básicamente los siguientes datos:

- ✓ Geometría y tamaño del catalizador: Los valores iniciales son obtenidos de los reportes técnicos.
- ✓ Numero de Peclet de transferencia de masa: Obtenido de reportes técnicos
- ✓ Numero de Peclet de transferencia de calor: Obtenido de reportes técnicos
- ✓ Porosidad del lecho: Obtenido por medio de cálculos



- ✓ Geometría y longitud del reactor: Los valores iniciales son obtenidos de reportes técnicos
- ✓ La ley de velocidad: Obtenido de reportes técnicos
- ✓ Condiciones de operación del reactor: Obtenido de reportes técnicos
Los valores iniciales son obtenidos de reportes técnicos
- ✓ Temperatura máxima permisible de la partícula más caliente: Obtenido de los reportes técnicos
- ✓ Factor de efectividad no isotérmico: Calculado a partir de los balances de materia y energía y los datos de reporte antes indicado.
- ✓ Propiedades termodinámicas: Entalpia de reacción de la conversión del dióxido de azufre.

Todos estos datos serán recogidos de fuentes de información secundaria

4.6. Análisis y procesamiento de datos

Los datos de proceso, del reactor y de la partícula de catalizador se procesan mediante un programa de cómputo que permite la solución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias como resultado del modelamiento; los datos de conversión y temperatura obtenidos de la ejecución son utilizados para calcular el factor de efectividad en cada punto como resultado de la aplicación de los balances de materia y energía en la partícula.

V. RESULTADOS

5.1 Resultados descriptivos

En el presente trabajo no ha sido utilizada la estadística descriptiva debido a que se utilizó las ecuaciones de conservación de materia y energía tanto en el reactor como en la partícula de catalizador; sin embargo, se ha obtenido los perfiles de conversión y temperatura en el lecho, además de la fracción molar y la presión parcial de cada componente. En cuanto a la partícula, se tiene los perfiles de la densidad de flujo molar, de conversión de la densidad de flujo de calor y temperatura, así como el perfil del factor de efectividad.



5.2 Resultados inferenciales

En el presente trabajo no ha sido utilizada la estadística descriptiva debido a que se utilizó las ecuaciones de conservación de materia y energía tanto en el reactor como en la partícula de catalizador.

5.3 Resultados inferenciales

En el presente trabajo no ha sido utilizada la estadística inferencial debido a que se utilizó las ecuaciones de conservación de materia y energía tanto en el reactor como en la partícula de catalizador.

5.4 Otro tipo de resultados

5.4.1 Modelamiento del proceso de oxidación en el lecho

Modelo matemático. - Considerando solo los efectos de difusión radial

$$\varepsilon \times D_{er} \times \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \times \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) - U_s \times \frac{\partial C_A}{\partial z} + \rho_b \cdot v_A \times r_A(x, T) = 0 \quad (1)$$

$$k_{er} \times \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \times \frac{\partial T}{\partial r} \right) - U_s \times \rho_g \times C_{Pg} \times \frac{\partial T}{\partial z} + \rho_b \times (-\Delta Hr) \times r_A(x, T) = 0 \quad (2)$$

Las ecuaciones (1) y (2), resultan ser dos ecuaciones diferenciales parciales acopladas por la concentración y la temperatura, las mismas que se transforman a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

$$\frac{\partial C_A}{\partial z} = \frac{\varepsilon \times D_{er}}{U_s} \times \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \times \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{\rho_b \cdot v_A \times r_A(x, T)}{U_s} \quad (3)$$

$$Pe_{Mr} = \frac{d_p \times U_s}{D_{er}} \quad (4)$$

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{\varepsilon \times d_p}{Pe_{Mr}} \times \left(\frac{\partial^2 x}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \times \frac{\partial x}{\partial r} \right) + \frac{\rho_b \cdot v_A \times r_A(x, T)}{U_s \times C_{A0}} \quad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k_{er}}{U_s \times \rho_g \times C_{Pg}} \times \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \times \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\rho_b \times (-\Delta Hr) \times r_A(x, T)}{U_s \times \rho_g \times C_{Pg}} \quad (6)$$

$$Pe_{Hr} = \frac{d_p \times G \times C_{Pg}}{k_{er}} \quad (7)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{d_p}{Pe_{Hr}} \times \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \times \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\rho_b \cdot (-\Delta H_r) \times r_A(x, T)}{U_s \rho_g C_{pg}} \quad (8)$$

Haciendo el siguiente cambio de variables:

$$\phi_1 = \frac{\varepsilon \times d_p}{Pe_{Mr}} \quad \phi_2 = \frac{\rho_b \cdot v_A}{U_s C_{A0}} \quad (9)$$

$$\phi_3 = \frac{d_p}{Pe_{Hr}} \quad \phi_4 = \frac{\rho_b \cdot (-\Delta H_r)}{U_s \rho_g C_{pg}} \quad (10)$$

Con la ayuda de las ecuaciones (9) y (10), las ecuaciones (5) y (6), se convierten en:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \phi_1 \left(\frac{\partial^2 x}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial x}{\partial r} \right) + \phi_2 \cdot r_A(x, T) \quad (11)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \phi_3 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \phi_4 \cdot r_A(x, T) \quad (12)$$

Las ecuaciones (11) y (12) deben ser resueltas por el método de Lines, para todos los puntos.

En el eje del tubo ($r=0$), las ecuaciones anteriores, se hacen indeterminadas, pero con la ayuda del Teorema de L'Hospital, se levanta dicha indeterminación.

Para $r=0$ ($i=0$)

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r} \frac{\partial x}{\partial r} = \left(\frac{\partial^2 x}{\partial r^2} \right) \quad \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right)$$

Las ecuaciones (11) y (12), se transforman en:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = 2 \times \phi_1 \left(\frac{\partial^2 x}{\partial r^2} \right) + \phi_2 \cdot r_A(x, T) \quad (13)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 2 \times \phi_3 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + \phi_4 r_A(x, T) \quad (14)$$

Discretizando las ecuaciones (13) y (14)

$$\frac{\partial x_i}{\partial z} = 2 \phi_1 \left(\frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{\Delta r^2} \right) + \phi_2 r_A(x_i, T_i) \quad (15)$$

$$\frac{\partial T_i}{\partial z} = 2 \phi_3 \left(\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta r^2} \right) + \phi_4 r_A(x_i, T_i) \quad (16)$$

$$\frac{\partial x_0}{\partial z} = 2 \phi_1 \left(\frac{x_1 - 2x_0 + x_{-1}}{\Delta r^2} \right) + \phi_2 r_A(x_0, T_0) \quad (17)$$

$$\frac{\partial T_0}{\partial z} = 2 \phi_3 \left(\frac{T_1 - 2T_0 + T_{-1}}{\Delta r^2} \right) + \phi_4 r_A(x_0, T_0) \quad (18)$$

Las ecuaciones (17) y (18) se aplica en el eje del tubo y para cualquier valor de z, es decir a todo lo largo del tubo.

Para r ≠ 0 (i=1,2,3,4,5)

Se discretizan las ecuaciones (11) y (12)

$$\frac{dx_i}{dz} = \phi_1 \left(\frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{\Delta r^2} + \frac{1}{i\Delta r} \left(\frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta r} \right) \right) + \phi_2 r_A(x_i, T_i) \quad (28)$$

$$\frac{dT_i}{dz} = \phi_3 \left(\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta r^2} + \frac{1}{i\Delta r} \left(\frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta r} \right) \right) + \phi_4 r_A(x_i, T_i) \quad (29)$$

Se expanden las ecuaciones (28) y (29) para i=1,2,..5

Condiciones de frontera para el balance de materia

$$r = 0 \quad \frac{\partial C_A}{\partial r} = 0 \quad \text{o} \quad \frac{\partial x}{\partial r} = 0 \quad x_i = x_{i-1} \quad , \quad \text{Si} \quad i = 0 \quad x_{-1} = x_0$$

$$r = R \quad \frac{\partial C_A}{\partial r} = 0 \quad \text{o} \quad \frac{\partial x}{\partial r} = 0 \quad x_{i+1} = x_i \quad , \quad \text{Si} \quad i = 10 \quad x_{11} = x_{10}$$

Condiciones de frontera para el balance de energía

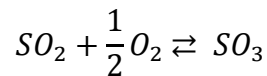
$$r=0 \quad \text{o} \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad T_i = T_{i-1} \quad , \quad \text{Si} \quad i=0 \quad T_{-1} = T_0$$

$$r=R \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = h(T - T_w) \rightarrow \frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{h}{k}(T - T_w) \quad , \quad \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta r} = -\frac{h}{k}(T_i - T_w)$$

$$Bi_w = \frac{R \times h}{k} = \frac{i \Delta r \times h}{k} \quad i=10 \quad \frac{\Delta r \times h}{k} = \frac{Bi_w}{10}$$

$$T_{11} = \left(1 - \frac{Bi_w}{10}\right) T_{10} + \frac{Bi_w}{10} T_w$$

La velocidad de reacción está dada por el siguiente conjunto de reacciones:



r = La velocidad de reacción en términos de la presión parcial

$$r_A = \frac{k_1(T) \times p_A \times p_B \left(1 - \frac{p_R}{p_A \times p_B^{0.5} K_p(T)}\right)}{22.414(1 + k_2(T) p_A + k_3(T) p_R)^2} \quad \text{Kmol/Kg cat h} \quad (30)$$

Las constantes específicas de velocidad de reacción están definidas por

$$k_1(T) = \exp(12.160 - 5473/T) \quad (31)$$

$$k_2(T) = \exp(-9.953 + 8619/T) \quad (32)$$

$$k_3(T) = \exp(-71.745 + 52596/T) \quad (33)$$

$$K_p(T) = \exp(11300/T - 10.68) \quad (34)$$

Ejecución del programa: Con el modelo matemático propuesto es posible elaborar el programa respectivo con los datos de la Tabla 1 y obtener básicamente los perfiles de conversión y temperatura del fluido, los cuales a su vez se consideran como las condiciones externas a las partículas de catalizador, para ser empleados como condiciones de frontera para el modelamiento del proceso intraparticular

Tabla 1.

Propiedades físicas y condiciones de operación del proceso de oxidación del dióxido de azufre

Propiedades físicas y condiciones de operación del proceso	Datos específicos
Condición térmica	No isotérmica
Entalpia de reacción	-94886 Kj/Kmol
Densidad del catalizador	1025 kg/m ³
Velocidad másica de flujo	1709 Kg/h/m ²
Presión total del sistema	1 atm
Fracción molar de dióxido de azufre en el alimento	0.065
Fracción molar de oxígeno	(1-0.065) *0.21
Temperatura de la superficie del catalizador	420 Oc
Conversión del dióxido de azufre en la superficie	0
Conductividad térmica	0.025 W/m/ K
Coefficiente de difusión	1x10 ⁻⁶ m ² /s
Catalizador	Pentóxido de vanadio
Longitud de difusión	R=0.2 cm (coord. esféricas)

Fuente: Adaptado de: García – Ochoa et. al. (1991)

Se ha elaborado el programa [reactor_acido_sulfurico](#) que permite generar los datos de conversión y temperatura en función del radio y longitud del reactor. El programa respectivo es el siguiente:

Diseño de un reactor de lecho fijo

$z(0) = 0$

$z(f) = 0.1524$ # Longitud del reactor

$PT0 = 1.6$ # Presion total del sistema

$Rg = 0.082$ # Constante universal de los gases

$RHOg = 0.5864$ # Densidad del fluido

$Tw = 197$ # Temperatura de la pared

$Phr = 4.4$ # Numero de Peclet de transferencia de calor radial

$Pmr = 9.6$ # Numero de Peclet de transferencia de masa radial

$Biw = 6.67$ # Numero de Biot de la pared

$dp = 0.003175$ # diámetro del catalizador

$E = 0.5$ # Porosidad del lecho catalítico

$RHOc = 1025$ # Densidad del catalizador

$G = 1709$ # Velocidad másica de flujo

$Us = G / RHOg$ # Velocidad del fluido



$DHR = -94886$ # Entalpia de reacci3n
 $CPg = 1.09$ # Calor especifico del fluido
 $R = 0.02615$ # radio del reactor
 $DR = R / 10$ # variaci3n radial

$CA0 = PA00 / (Rg * Tin)$ # Concentraci3n Inicial del di3xido de azufre
 $Tin = 400 + 273.15$ # Temperatura inicial de la mezcla reaccionante
 $YA0 = 0.065$ # Fracci3n molar inicial del di3xido de azufre

$PA00 = PT0 * YA0$ # Presion inicial del di3xido de azufre
 $PB00 = (1 - YA0) * PT0 * 0.21$ # Presion inicial del oxigeno

Cambios de variable

$PHI1 = E * dp / Pmr$

$PHI2 = Miu * RHO_b / (Us * CA0)$

$Miu = -1$

$PHI3 = dp / Phr$

$PHI4 = -DHR * RHO_b / (Us * RHO_g * CPg)$

Ecuaciones de balance de masa

$d(X0)/d(z) = 2 * PHI1 * (X1 - 2 * X0 + Xn) / DR^2 - PHI2 * R0$
 $d(X1)/d(z) = PHI1 * ((X2 - 2 * X1 + X0) + (X1 - X0) / 1) / DR^2 - PHI2 * R1$
 $d(X2)/d(z) = PHI1 * ((X3 - 2 * X2 + X1) + (X2 - X1) / 2) / DR^2 - PHI2 * R2$
 $d(X3)/d(z) = PHI1 * ((X4 - 2 * X3 + X2) + (X3 - X2) / 3) / DR^2 - PHI2 * R3$
 $d(X4)/d(z) = PHI1 * ((X5 - 2 * X4 + X3) + (X4 - X3) / 4) / DR^2 - PHI2 * R4$
 $d(X5)/d(z) = PHI1 * ((X6 - 2 * X5 + X4) + (X5 - X4) / 5) / DR^2 - PHI2 * R5$
 $d(X6)/d(z) = PHI1 * ((X7 - 2 * X6 + X5) + (X6 - X5) / 6) / DR^2 - PHI2 * R6$
 $d(X7)/d(z) = PHI1 * ((X8 - 2 * X7 + X6) + (X7 - X6) / 7) / DR^2 - PHI2 * R7$
 $d(X8)/d(z) = PHI1 * ((X9 - 2 * X8 + X7) + (X8 - X7) / 8) / DR^2 - PHI2 * R8$
 $d(X9)/d(z) = PHI1 * ((X10 - 2 * X9 + X8) + (X9 - X8) / 9) / DR^2 - PHI2 * R9$
 $d(X10)/d(z) = PHI1 * ((X11 - 2 * X10 + X9) + (X10 - X9) / 10) / DR^2 - PHI2 * R10$

Condiciones de frontera

$Xn = X0$

$X11 = X10$

Valores iniciales de conversi3n

$X0(0) = 0$

$X1(0) = 0$

$X2(0) = 0$

$X3(0) = 0$

$X4(0) = 0$

$X5(0) = 0$

$X6(0) = 0$

$X7(0) = 0$

$X8(0) = 0$

$X9(0) = 0$

$X10(0) = 0$

Ecuaciones de balance de energia

$d(T0)/d(z) = 2 * PHI3 * (T1 - 2 * T0 + Tn) / DR^2 + PHI4 * R0$
 $d(T1)/d(z) = PHI3 * ((T2 - 2 * T1 + T0) + (T1 - T0) / 1) / DR^2 + PHI4 * R1$
 $d(T2)/d(z) = PHI3 * ((T3 - 2 * T2 + T1) + (T2 - T1) / 2) / DR^2 + PHI4 * R2$
 $d(T3)/d(z) = PHI3 * ((T4 - 2 * T3 + T2) + (T3 - T2) / 3) / DR^2 + PHI4 * R3$
 $d(T4)/d(z) = PHI3 * ((T5 - 2 * T4 + T3) + (T4 - T3) / 4) / DR^2 + PHI4 * R4$
 $d(T5)/d(z) = PHI3 * ((T6 - 2 * T5 + T4) + (T5 - T4) / 5) / DR^2 + PHI4 * R5$
 $d(T6)/d(z) = PHI3 * ((T7 - 2 * T6 + T5) + (T6 - T5) / 6) / DR^2 + PHI4 * R6$
 $d(T7)/d(z) = PHI3 * ((T8 - 2 * T7 + T6) + (T7 - T6) / 7) / DR^2 + PHI4 * R7$
 $d(T8)/d(z) = PHI3 * ((T9 - 2 * T8 + T7) + (T8 - T7) / 8) / DR^2 + PHI4 * R8$
 $d(T9)/d(z) = PHI3 * ((T10 - 2 * T9 + T8) + (T9 - T8) / 9) / DR^2 + PHI4 * R9$
 $d(T10)/d(z) = PHI3 * ((T11 - 2 * T10 + T9) + (T10 - T9) / 10) / DR^2 + PHI4 * R10$

Condiciones de frontera

$Tn = T0$

$T11 = T10 - Biw * (T10 - Tw) / 10$

Valores iniciales de la temperatura

$T0(0) = 400$

$T1(0) = 400$
 $T2(0) = 400$
 $T3(0) = 400$
 $T4(0) = 400$
 $T5(0) = 400$
 $T6(0) = 400$
 $T7(0) = 400$
 $T8(0) = 400$
 $T9(0) = 400$
 $T10(0) = 400$

Para $i = 0$

$K10 = \exp(12.160 - 5473 / (T0 + 273.15))$
 $K20 = \exp(-9.953 + 8619 / (T0 + 273.15))$
 $K30 = \exp(-71.745 + 52596 / (T0 + 273.15))$
 $Kp0 = \exp(11300 / (T0 + 273.15) - 10.68)$
 $PA0 = PA00 * (1 - X0)$
 $PB0 = PB00 - 0.5 * PA00 * X0$
 $PR0 = PA00 * X0$
 $R0 = ((K10 * PB0 * PA0 * (1 - PR0 / (PA0 * Kp0 * (PB0) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K20 * PA0 + K30 * PR0) ^ 2))$

Para $i = 1$

$K11 = \exp(12.160 - 5473 / (T1 + 273.15))$
 $K21 = \exp(-9.953 + 8619 / (T1 + 273.15))$
 $K31 = \exp(-71.745 + 52596 / (T1 + 273.15))$
 $Kp1 = \exp(11300 / (T1 + 273.15) - 10.68)$
 $PA1 = PA00 * (1 - X1)$
 $PB1 = PB00 - 0.5 * PA00 * X1$
 $PR1 = PA00 * X1$
 $R1 = ((K11 * PB1 * PA1 * (1 - PR1 / (PA1 * Kp1 * (PB1) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K21 * PA1 + K31 * PR1) ^ 2))$

Para $i = 2$

$K12 = \exp(12.160 - 5473 / (T2 + 273.15))$
 $K22 = \exp(-9.953 + 8619 / (T2 + 273.15))$
 $K32 = \exp(-71.745 + 52596 / (T2 + 273.15))$
 $Kp2 = \exp(11300 / (T2 + 273.15) - 10.68)$
 $PA2 = PA00 * (1 - X2)$
 $PB2 = PB00 - 0.5 * PA00 * X2$
 $PR2 = PA00 * X2$
 $R2 = ((K12 * PB2 * PA2 * (1 - PR2 / (PA2 * Kp2 * (PB2) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K22 * PA2 + K32 * PR2) ^ 2))$

Para $i = 3$

$K13 = \exp(12.160 - 5473 / (T3 + 273.15))$
 $K23 = \exp(-9.953 + 8619 / (T3 + 273.15))$
 $K33 = \exp(-71.745 + 52596 / (T3 + 273.15))$
 $Kp3 = \exp(11300 / (T3 + 273.15) - 10.68)$
 $PA3 = PA00 * (1 - X3)$
 $PB3 = PB00 - 0.5 * PA00 * X3$
 $PR3 = PA00 * X3$
 $R3 = ((K13 * PB3 * PA3 * (1 - PR3 / (PA3 * Kp3 * (PB3) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K23 * PA3 + K33 * PR3) ^ 2))$

Para $i = 4$

$K14 = \exp(12.160 - 5473 / (T4 + 273.15))$
 $K24 = \exp(-9.953 + 8619 / (T4 + 273.15))$
 $K34 = \exp(-71.745 + 52596 / (T4 + 273.15))$
 $Kp4 = \exp(11300 / (T4 + 273.15) - 10.68)$
 $PA4 = PA00 * (1 - X4)$
 $PB4 = PB00 - 0.5 * PA00 * X4$
 $PR4 = PA00 * X4$
 $R4 = ((K14 * PB4 * PA4 * (1 - PR4 / (PA4 * Kp4 * (PB4) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K24 * PA4 + K34 * PR4) ^ 2))$

Para $i = 5$

$K15 = \exp(12.160 - 5473 / (T5 + 273.15))$
 $K25 = \exp(-9.953 + 8619 / (T5 + 273.15))$
 $K35 = \exp(-71.745 + 52596 / (T5 + 273.15))$
 $Kp5 = \exp(11300 / (T5 + 273.15) - 10.68)$
 $PA5 = PA00 * (1 - X5)$
 $PB5 = PB00 - 0.5 * PA00 * X5$
 $PR5 = PA00 * X5$
 $R5 = ((K15 * PB5 * PA5 * (1 - PR5 / (PA5 * Kp5 * (PB5) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K25 * PA5 + K35 * PR5) ^ 2))$



```

# Para i = 6
K16 = exp(12.160 - 5473 / (T6 + 273.15))
K26 = exp(-9.953 + 8619 / (T6 + 273.15))
K36 = exp(-71.745 + 52596 / (T6 + 273.15))
Kp6 = exp(11300 / (T6 + 273.15) - 10.68)
PA6 = PA00 * (1 - X6)
PB6 = PB00 - 0.5 * PA00 * X6
PR6 = PA00 * X6
R6 = ((K16 * PB6 * PA6 * (1 - PR6 / (PA6 * Kp6 * (PB6) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K26 * PA6 + K36 * PR6) ^ 2))

# Para i = 7
K17 = exp(12.160 - 5473 / (T7 + 273.15))
K27 = exp(-9.953 + 8619 / (T7 + 273.15))
K37 = exp(-71.745 + 52596 / (T7 + 273.15))
Kp7 = exp(11300 / (T7 + 273.15) - 10.68)
PA7 = PA00 * (1 - X7)
PB7 = PB00 - 0.5 * PA00 * X7
PR7 = PA00 * X7
R7 = ((K17 * PB7 * PA7 * (1 - PR7 / (PA7 * Kp7 * (PB7) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K27 * PA7 + K37 * PR7) ^ 2))

# Para i = 8
K18 = exp(12.160 - 5473 / (T8 + 273.15))
K28 = exp(-9.953 + 8619 / (T8 + 273.15))
K38 = exp(-71.745 + 52596 / (T8 + 273.15))
Kp8 = exp(11300 / (T8 + 273.15) - 10.68)
PA8 = PA00 * (1 - X8)
PB8 = PB00 - 0.5 * PA00 * X8
PR8 = PA00 * X8
R8 = ((K18 * PB8 * PA8 * (1 - PR8 / (PA8 * Kp8 * (PB8) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K28 * PA8 + K38 * PR8) ^ 2))

# Para i = 9
K19 = exp(12.160 - 5473 / (T9 + 273.15))
K29 = exp(-9.953 + 8619 / (T9 + 273.15))
K39 = exp(-71.745 + 52596 / (T9 + 273.15))
Kp9 = exp(11300 / (T9 + 273.15) - 10.68)
PA9 = PA00 * (1 - X9)
PB9 = PB00 - 0.5 * PA00 * X9
PR9 = PA00 * X9
R9 = ((K19 * PB9 * PA9 * (1 - PR9 / (PA9 * Kp9 * (PB9) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K29 * PA9 + K39 * PR9) ^ 2))

# Para i = 10
K110 = exp(12.160 - 5473 / (T10 + 273.15))
K210 = exp(-9.953 + 8619 / (T10 + 273.15))
K310 = exp(-71.745 + 52596 / (T10 + 273.15))
Kp10 = exp(11300 / (T10 + 273.15) - 10.68)
PA10 = PA00 * (1 - X10)
PB10 = PB00 - 0.5 * PA00 * X10
PR10 = PA00 * X10
R10 = ((K110 * PB10 * PA10 * (1 - PR10 / (PA10 * Kp10 * (PB10) ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K210 * PA10 + K310 * PR10) ^ 2))

```

Resultados numéricos y gráficos. En las figuras 3 y 4 se muestran los datos de conversión y temperatura del lecho como función de la longitud y radio del reactor y en las figuras 5, 6, 7 y 8 se muestran los gráficos correspondientes de los perfiles que muestran la variación de la conversión y temperatura en función de la longitud y el radio del reactor



Figura 3

Perfil de conversión del dióxido de azufre en función a la longitud y el radio

		r0	r1	r2	r3	r4	r5	r6	r7	r8	r9	r10
z0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
z1	0.0159312	0.0255977	0.0256013	0.0256206	0.0257066	0.0255682	0.0253673	0.024583	0.0219108	0.015673	0.0082138	0.0035827
z2	0.0305616	0.0507336	0.0507017	0.0505689	0.050133	0.0484108	0.04448	0.0367864	0.0260907	0.0162554	0.0090176	0.0049589
z3	0.0464112	0.0893484	0.0883916	0.0857218	0.0801281	0.0697493	0.0551173	0.0394946	0.0265978	0.0168418	0.0099487	0.0062858
z4	0.0610416	0.1437202	0.1381194	0.1255826	0.1058289	0.0811243	0.0579532	0.0401686	0.0271081	0.0174551	0.0108244	0.0074103
z5	0.0768912	0.2245704	0.2055662	0.1695754	0.1253305	0.0864865	0.0593875	0.0409456	0.0277407	0.0181797	0.0117739	0.0085529
z6	0.0903024	0.2983706	0.2615922	0.1986783	0.1343288	0.0890601	0.0606036	0.0416886	0.0283395	0.0188322	0.0125743	0.0094746
z7	0.1073712	0.3651074	0.3044979	0.2144095	0.139295	0.0918227	0.0622673	0.0427465	0.029183	0.0197067	0.0135887	0.0106036
z8	0.1220016	0.367245	0.298736	0.2109372	0.1405068	0.0938111	0.0637265	0.0437386	0.0299736	0.0204915	0.014456	0.0115422
z9	0.1378512	0.3271945	0.2718514	0.20149	0.1399199	0.0953873	0.0652362	0.0448701	0.0308913	0.0213751	0.0153961	0.0125372
z10	0.1524	0.2929854	0.2496602	0.1923713	0.1382415	0.0962556	0.0664761	0.0459238	0.031777	0.0222135	0.0162617	0.0134367

Figura 4

Perfil de temperatura del dióxido de azufre en función a la longitud y el radio

		r0	r1	r2	r3	r4	r5	r6	r7	r8	r9	r10
z0	0	400	400	400	400	400	400	400	400	400	400	400
z1	0.0159312	407.1627	407.1645	407.1656	407.1515	407.0329	406.5723	404.8818	399.5709	385.7581	356.2572	304.2762
z2	0.0305616	414.1447	414.0791	413.8378	413.1437	411.3319	407.2253	398.9924	384.3839	360.6792	325.2318	278.1575
z3	0.0464112	423.9593	423.2139	421.279	417.4948	410.9626	400.9118	386.5462	366.5125	339.2355	304.2715	263.0665
z4	0.0610416	434.852	432.208	426.5825	417.887	406.3233	392.087	374.413	351.9902	324.0618	290.923	254.0646
z5	0.0768912	445.6958	439.6867	428.6542	414.4363	398.8596	381.8452	362.0873	338.5965	311.1115	280.1673	247.0617
z6	0.0903024	450.1736	441.083	425.8597	408.4541	390.9922	372.5041	351.7447	328.0632	301.4312	272.4207	242.1309
z7	0.1073712	443.9973	433.315	417.0433	399.6024	381.776	362.6714	341.5843	318.2187	292.712	265.6242	237.8725
z8	0.1220016	426.6238	417.8279	404.9159	389.6687	372.6422	353.7811	332.9694	310.2372	285.8623	260.3984	234.6393
z9	0.1378512	405.7968	400.3941	390.8754	377.9491	362.2764	344.2736	324.2356	302.4685	279.3862	255.5533	231.6753
z10	0.1524	391.2941	387.0056	378.8638	367.2824	352.7548	335.7364	316.6511	295.9335	274.0752	251.6507	229.313

Figura 5

Perfil axial de conversión en función del radio del reactor

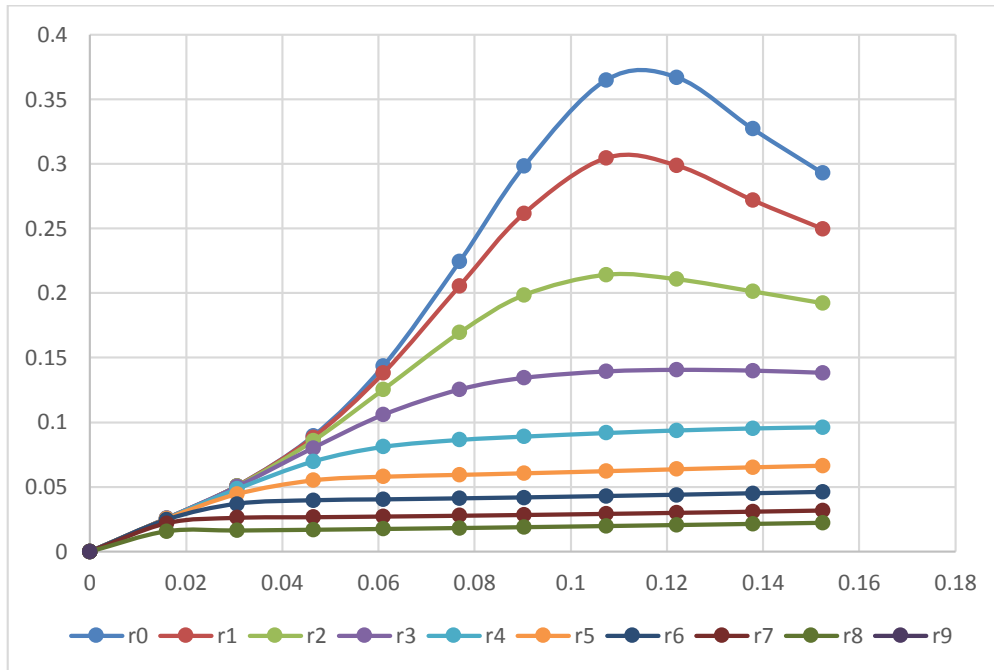
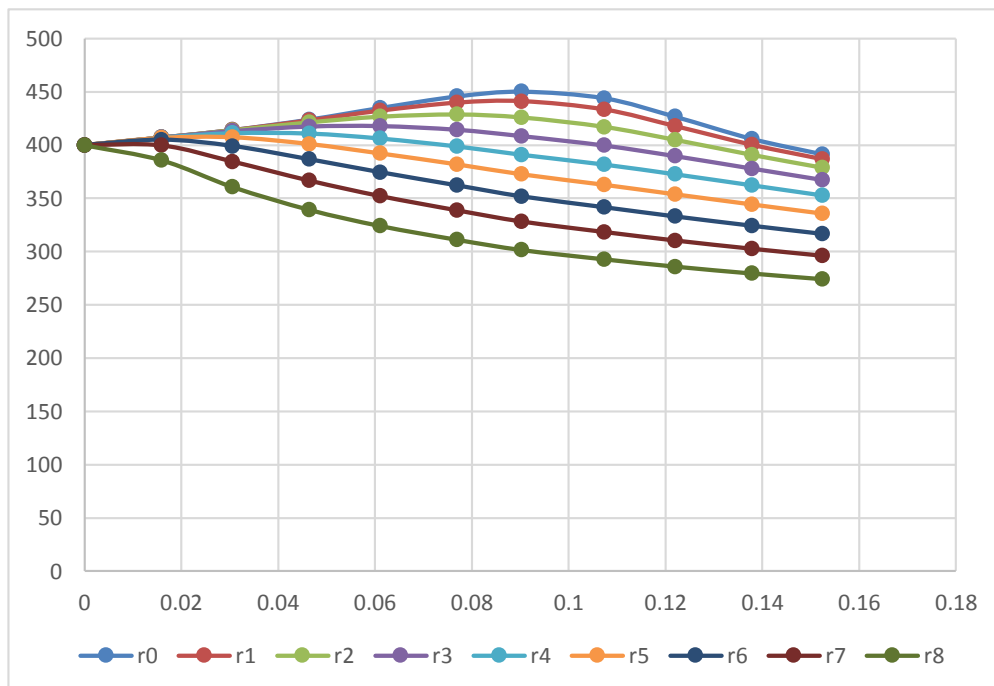


Figura 6

Perfil axial de temperatura en función del radio del reactor



5.4.2 Modelamiento del proceso de oxidación en la partícula de catalizador

Modelo matemático. El modelo matemático proviene de la simplificación de los balances de materia y energía.

Balance de materia de A:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 N_{Ar}) = \rho_B r_A \quad (1)$$

La ley de Fick para este proceso está dada por:

$$N_{Ar} = -D_A \frac{dC_A}{dr} + Y_A (N_{Ar} + N_{Br} + N_{Cr}) \quad (2)$$

Por la estequiometria, se tiene la siguiente relación: $-N_{Az} = -2N_{Bz} = N_{Rz}$

$$N_{Ar} = -\frac{D_A}{1-0.5Y_A} \frac{dC_A}{dr} \quad (3)$$

Con esta relación, la ecuación (3), se transforma en:

$$\frac{dC_A}{dr} = -\frac{N_{Ar}}{D_A} (1-0.5Y_A) \quad (4)$$

$$p_A = p_{AS} - p_{AS}x \quad p_B = p_{BS} - 0.5p_{AS}x \quad p_C = p_{AS}x$$

De estas relaciones se obtiene:

$$P_T = (p_{AS} + p_{BS}) - 0.5p_{AS}x = P_{TS} - 0.5p_{AS}x \quad (5)$$

De tal forma que la fracción molar resulta:

$$Y_A = \frac{p_A}{P_T} = \frac{P_{AS}(1-x)}{P_{T0} - 0.5p_{AS}x} \quad (6)$$

La ecuación (6) se transforma en:



$$\frac{dx}{dr} - \frac{N_{Ar}}{D_A C_{AS}} \left[1 - \frac{0.5 p_{AS}(1-x)}{P_{TS} - 0.5 p_{AS} x} \right] = 0 \quad (7)$$

Balance de energía

$$\frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 q_r)}{dr} = \rho_C \times \Delta H_R \times r_A \quad (8)$$

Ley de Fourier

$$\frac{dT}{dr} + \frac{q_r}{k} = 0 \quad (9)$$

La velocidad de reacción en términos de la conversión

$$r_A = \frac{k_1(T) \times p_A \times p_B \left(1 - \frac{p_R}{p_A \times p_B^{0.5} K_P(T)} \right)}{22.414(1 + k_2(T) p_A + k_3(T) p_A)^2} \quad (10)$$

Las constantes específicas de velocidad de reacción están definidas por

$$k_1(T) = \exp(12.160 - 5473/T) \quad (11)$$

$$k_2(T) = \exp(-9.953 + 8619/T) \quad (12)$$

$$k_3(T) = \exp(-71.745 + 52596/T) \quad (13)$$

$$K_P(T) = \exp(11300/T - 10.68) \quad (14)$$

La velocidad de reacción en la superficie se tiene:

$$r_{AS} = \frac{k_1(T_S) \times p_A \times p_B \left(1 - \frac{p_R}{p_A \times p_B^{0.5} K_P(T_S)} \right)}{22.414(1 + k_2(T_S) p_A + k_3(T_S) p_A)^2} \quad (15)$$

Discretizando la ecuación (1)

$$\frac{N_i - N_{i-1}}{\Delta r} + \frac{2}{i\Delta r} N_i - \rho_B \times r_A(x_i, T_i) = 0 \quad (16)$$

Discretizando la ecuación (7)

$$\frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta r} - \frac{N_{Ar}}{D_A C_{AS}} \left[1 + \frac{(1-x_i)}{(1+x_i)} \right] = 0 \quad (17)$$

Discretizando la ecuación (8)

$$\frac{q_i - q_{i-1}}{\Delta r} + \frac{2}{i\Delta r} q_i - \rho_B \times \Delta H_R \times r_A(x_i, T_i) = 0 \quad (18)$$

Discretizando la ecuación (9)

$$\frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta r} + \frac{q_r}{k} = 0 \quad (19)$$

Ahora la velocidad de reacción discretizada se da:

$$r_{Ai} = \frac{k_1(T_i) \times p_A \times p_B \left(1 - \frac{p_R}{p_A \times p_B^{0.5} K_p(T_i)}\right)}{22.414(1 + k_2(T_i)p_A + k_3(T_i)p_A)^2} \quad (20)$$

$$k_1(T_i) = \exp(12.160 - 5473/T_i) \quad (21)$$

$$k_2(T_i) = \exp(-9.953 + 8619/T_i) \quad (22)$$

$$k_3(T_i) = \exp(-71.745 + 52596/T_i) \quad (23)$$

$$K_p(T_i) = \exp(11300/T_i - 10.68) \quad (24)$$

El factor de efectividad se obtiene mediante el Método C

$$\eta = \frac{\int_0^R 4\pi r^2 \times r_A(x, T) dr}{r_A(x_S, T_S) \times \frac{4}{3} \pi R^3} = \frac{3}{R^3 \times r_A(x_S, T_S)} \int_0^R r^2 \times r_A(x, T) dr \quad (25)$$

y mediante el Método D

$$\frac{d\eta}{dr} = \frac{3}{R^3} \frac{r^2 \times r_A(x, T)}{r_A(x_S, T_S)} \quad (26)$$

$$\frac{\eta_i - \eta_{i-1}}{\Delta r} - \frac{3i^2 \Delta r^2}{R^3} \frac{r_A(x_i, T_i)}{r_A(x_S, T_S)} = 0 \quad (27)$$



Se resuelve simultáneamente el sistema de ecuaciones algebraicas no lineales conformada por (16), (17), (18), (19) y (27), con las ecuaciones auxiliares (21), (22), (23), (24) y con las condiciones de frontera:

Las condiciones de frontera a utilizar son:

$$r=0 \quad N_A=0 \quad C_A=? \quad X=? \quad q=0 \quad T=? \quad \eta=0$$

$$r=R \quad N_A=? \quad C_A=C_{AS} \quad X=0 \quad q=? \quad T=T_s \quad \eta=?$$

Se ha elaborado el programa denominado *particula_catalizador* que permite encontrar el perfil del factor de efectividad para cada partícula de catalizador seleccionada, con los datos de la Tabla 2, para lo cual se ejecuta previamente el programa *reactor_acido_sulfurico* que permite obtener las condiciones externas de temperatura y conversión.

#Programa para el calculo del factor de efectividad de cada partícula en el lecho

$$f(N1) = N1 - N0 + (2 / 1) * N1 - DR * r1$$

$$f(N2) = N2 - N1 + (2 / 2) * N2 - DR * r2$$

$$f(N3) = N3 - N2 + (2 / 3) * N3 - DR * r3$$

$$f(N4) = N4 - N3 + (2 / 4) * N4 - DR * r4$$

$$f(N5) = N5 - N4 + (2 / 5) * N5 - DR * r5$$

$$f(N6) = N6 - N5 + (2 / 6) * N6 - DR * r6$$

$$f(N7) = N7 - N6 + (2 / 7) * N7 - DR * r7$$

$$f(N8) = N8 - N7 + (2 / 8) * N8 - DR * r8$$

$$f(N9) = N9 - N8 + (2 / 9) * N9 - DR * r9$$

$$f(N10) = N10 - N9 + (2 / 10) * N10 - DR * r10$$

$$f(X0) = X1 - X0 - (DR * N1 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X1) / (PTS - 0.5 * PAS * X1))$$

$$f(X1) = X2 - X1 - (DR * N2 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X2) / (PTS - 0.5 * PAS * X2))$$

$$f(X2) = X3 - X2 - (DR * N3 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X3) / (PTS - 0.5 * PAS * X3))$$

$$f(X3) = X4 - X3 - (DR * N4 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X4) / (PTS - 0.5 * PAS * X4))$$

$$f(X4) = X5 - X4 - (DR * N5 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X5) / (PTS - 0.5 * PAS * X5))$$

$$f(X5) = X6 - X5 - (DR * N6 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X6) / (PTS - 0.5 * PAS * X6))$$

$$f(X6) = X7 - X6 - (DR * N7 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X7) / (PTS - 0.5 * PAS * X7))$$

$$f(X7) = X8 - X7 - (DR * N8 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X8) / (PTS - 0.5 * PAS * X8))$$

$$f(X8) = X9 - X8 - (DR * N9 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X9) / (PTS - 0.5 * PAS * X9))$$

$$f(X9) = X10 - X9 - (DR * N10 / (DA * CAS)) * (1 - 0.5 * PAS * (1 - X10) / (PTS - 0.5 * PAS * X10))$$

$$PAS = PTS * YAS$$

$$PBS = (PTS - PAS) * 0.21$$

$$YAS = 0.065$$

$$PTS = 1$$

$$X10 = 0.0134367$$

$$TS = 229.313$$

$$N0 = 0$$

$$q0 = 0$$

$$T10 = TS$$

$$R = 0.002$$

$$DR = R / 10$$

$$DHR = -94886$$

$$k = 0.025 * 3.6 \#Kj/h/m/K$$



DA = 1E-6*3600#m2/h
CAS = (PAS/(Rg * (TS + 273)))
Rg = 0.082
RHOC=1025

k10 = exp(12.160 - 5473 / (T0 + 273.15))
k11 = exp(12.160 - 5473 / (T1 + 273.15))
k12 = exp(12.160 - 5473 / (T2 + 273.15))
k13 = exp(12.160 - 5473 / (T3 + 273.15))
k14 = exp(12.160 - 5473 / (T4 + 273.15))
k15 = exp(12.160 - 5473 / (T5 + 273.15))
k16 = exp(12.160 - 5473 / (T6 + 273.15))
k17 = exp(12.160 - 5473 / (T7 + 273.15))
k18 = exp(12.160 - 5473 / (T8 + 273.15))
k19 = exp(12.160 - 5473 / (T9 + 273.15))
k110 = exp(12.160 - 5473 / (T10 + 273.15))

k20 = exp(-9.953 + 8619 / (T0 + 273.15))
k21 = exp(-9.953 + 8619 / (T1 + 273.15))
k22 = exp(-9.953 + 8619 / (T2 + 273.15))
k23 = exp(-9.953 + 8619 / (T3 + 273.15))
k24 = exp(-9.953 + 8619 / (T4 + 273.15))
k25 = exp(-9.953 + 8619 / (T5 + 273.15))
k26 = exp(-9.953 + 8619 / (T6 + 273.15))
k27 = exp(-9.953 + 8619 / (T7 + 273.15))
k28 = exp(-9.953 + 8619 / (T8 + 273.15))
k29 = exp(-9.953 + 8619 / (T9 + 273.15))
k210 = exp(-9.953 + 8619 / (T10 + 273.15))

k30 = exp(-71.745 + 52596 / (T0 + 273.15))
k31 = exp(-71.745 + 52596 / (T1 + 273.15))
k32 = exp(-71.745 + 52596 / (T2 + 273.15))
k33 = exp(-71.745 + 52596 / (T3 + 273.15))
k34 = exp(-71.745 + 52596 / (T4 + 273.15))
k35 = exp(-71.745 + 52596 / (T5 + 273.15))
k36 = exp(-71.745 + 52596 / (T6 + 273.15))
k37 = exp(-71.745 + 52596 / (T7 + 273.15))
k38 = exp(-71.745 + 52596 / (T8 + 273.15))
k39 = exp(-71.745 + 52596 / (T9 + 273.15))
k310 = exp(-71.745 + 52596 / (T10 + 273.15))

Kp0 = exp(11300 / (T0 + 273.15) - 10.68)
Kp1 = exp(11300 / (T1 + 273.15) - 10.68)
Kp2 = exp(11300 / (T2 + 273.15) - 10.68)
Kp3 = exp(11300 / (T3 + 273.15) - 10.68)
Kp4 = exp(11300 / (T4 + 273.15) - 10.68)
Kp5 = exp(11300 / (T5 + 273.15) - 10.68)
Kp6 = exp(11300 / (T6 + 273.15) - 10.68)
Kp7 = exp(11300 / (T7 + 273.15) - 10.68)
Kp8 = exp(11300 / (T8 + 273.15) - 10.68)
Kp9 = exp(11300 / (T9 + 273.15) - 10.68)
Kp10 = exp(11300 / (T10 + 273.15) - 10.68)

PA0 = PAS * (1 - X0)
PA1 = PAS * (1 - X1)
PA2 = PAS * (1 - X2)
PA3 = PAS * (1 - X3)
PA4 = PAS * (1 - X4)
PA5 = PAS * (1 - X5)
PA6 = PAS * (1 - X6)



$$\begin{aligned} PA7 &= PAS * (1 - X7) \\ PA8 &= PAS * (1 - X8) \\ PA9 &= PAS * (1 - X9) \\ PA10 &= PAS * (1 - X10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} PB0 &= PBS - 0.5 * PAS * X0 \\ PB1 &= PBS - 0.5 * PAS * X1 \\ PB2 &= PBS - 0.5 * PAS * X2 \\ PB3 &= PBS - 0.5 * PAS * X3 \\ PB4 &= PBS - 0.5 * PAS * X4 \\ PB5 &= PBS - 0.5 * PAS * X5 \\ PB6 &= PBS - 0.5 * PAS * X6 \\ PB7 &= PBS - 0.5 * PAS * X7 \\ PB8 &= PBS - 0.5 * PAS * X8 \\ PB9 &= PBS - 0.5 * PAS * X9 \\ PB10 &= PBS - 0.5 * PAS * X10 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} PR0 &= PAS * X0 \\ PR1 &= PAS * X1 \\ PR2 &= PAS * X2 \\ PR3 &= PAS * X3 \\ PR4 &= PAS * X4 \\ PR5 &= PAS * X5 \\ PR6 &= PAS * X6 \\ PR7 &= PAS * X7 \\ PR8 &= PAS * X8 \\ PR9 &= PAS * X9 \\ PR10 &= PAS * X10 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f(q1) &= q1 - q0 + (2 / 1) * q1 - DR * DHR * r1 \\ f(q2) &= q2 - q1 + (2 / 2) * q2 - DR * DHR * r2 \\ f(q3) &= q3 - q2 + (2 / 3) * q3 - DR * DHR * r3 \\ f(q4) &= q4 - q3 + (2 / 4) * q4 - DR * DHR * r4 \\ f(q5) &= q5 - q4 + (2 / 5) * q5 - DR * DHR * r5 \\ f(q6) &= q6 - q5 + (2 / 6) * q6 - DR * DHR * r6 \\ f(q7) &= q7 - q6 + (2 / 7) * q7 - DR * DHR * r7 \\ f(q8) &= q8 - q7 + (2 / 8) * q8 - DR * DHR * r8 \\ f(q9) &= q9 - q8 + (2 / 9) * q9 - DR * DHR * r9 \\ f(q10) &= q10 - q9 + (2 / 10) * q10 - DR * DHR * r10 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f(T0) &= q1 + k * (T1 - T0) / DR \\ f(T1) &= q2 + k * (T2 - T1) / DR \\ f(T2) &= q3 + k * (T3 - T2) / DR \\ f(T3) &= q4 + k * (T4 - T3) / DR \\ f(T4) &= q5 + k * (T5 - T4) / DR \\ f(T5) &= q6 + k * (T6 - T5) / DR \\ f(T6) &= q7 + k * (T7 - T6) / DR \\ f(T7) &= q8 + k * (T8 - T7) / DR \\ f(T8) &= q9 + k * (T9 - T8) / DR \\ f(T9) &= q10 + k * (T10 - T9) / DR \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} r1 &= -(k11 * PB1 * PA1 * (1 - PR1 / (PA1 * PB1 ^ 0.5 * Kp1))) / (22.414 * (1 + k21 * PA1 + k31 * PR1) \\ &\quad ^ 2)) * RHOC \\ r2 &= -(k12 * PB2 * PA2 * (1 - PR2 / (PA2 * PB2 ^ 0.5 * Kp2))) / (22.414 * (1 + k22 * PA2 + k32 * PR2) \\ &\quad ^ 2)) * RHOC \\ r3 &= -(k13 * PB3 * PA3 * (1 - PR3 / (PA3 * PB3 ^ 0.5 * Kp3))) / (22.414 * (1 + k23 * PA3 + k33 * PR3) \\ &\quad ^ 2)) * RHOC \\ r4 &= -(k14 * PB4 * PA4 * (1 - PR4 / (PA4 * PB4 ^ 0.5 * Kp4))) / (22.414 * (1 + k24 * PA4 + k34 * PR4) \\ &\quad ^ 2)) * RHOC \\ r5 &= -(k15 * PB5 * PA5 * (1 - PR5 / (PA5 * PB5 ^ 0.5 * Kp5))) / (22.414 * (1 + k25 * PA5 + k35 * PR5) \\ &\quad ^ 2)) * RHOC \end{aligned}$$



$$r6 = -(k16 * PB6 * PA6 * (1 - PR6 / (PA6 * PB6 ^ 0.5 * Kp6)) / (22.414 * (1 + k26 * PA6 + k36 * PR6) ^ 2)) * RHOC$$

$$r7 = -(k17 * PB7 * PA7 * (1 - PR7 / (PA7 * PB7 ^ 0.5 * Kp7)) / (22.414 * (1 + k27 * PA7 + k37 * PR7) ^ 2)) * RHOC$$

$$r8 = -(k18 * PB8 * PA8 * (1 - PR8 / (PA8 * PB8 ^ 0.5 * Kp8)) / (22.414 * (1 + k28 * PA8 + k38 * PR8) ^ 2)) * RHOC$$

$$r9 = -(k19 * PB9 * PA9 * (1 - PR9 / (PA9 * PB9 ^ 0.5 * Kp9)) / (22.414 * (1 + k29 * PA9 + k39 * PR9) ^ 2)) * RHOC$$

$$r10 = -(k110 * PB10 * PA10 * (1 - PR10 / (PA10 * PB10 ^ 0.5 * Kp10)) / (22.414 * (1 + k210 * PA10 + k310 * PR10) ^ 2)) * RHOC$$

$$N1(0) = -0.000002$$

$$N2(0) = -0.000002$$

$$N3(0) = -0.000002$$

$$N4(0) = -0.000002$$

$$N5(0) = -0.000002$$

$$N6(0) = -0.000002$$

$$N7(0) = -0.000002$$

$$N8(0) = -0.000002$$

$$N9(0) = -0.000002$$

$$N10(0) = -0.000002$$

$$q1(0) = 10$$

$$q2(0) = 10$$

$$q3(0) = 20$$

$$q4(0) = 35$$

$$q5(0) = 40$$

$$q6(0) = 50$$

$$q7(0) = 10$$

$$q8(0) = 10$$

$$q9(0) = 10$$

$$q10(0) = 10$$

$$X0(0) = 0.05$$

$$X1(0) = 0.04$$

$$X2(0) = 0.035$$

$$X3(0) = 0.030$$

$$X4(0) = 0.028$$

$$X5(0) = 0.026$$

$$X6(0) = 0.022$$

$$X7(0) = 0.020$$

$$X8(0) = 0.018$$

$$X9(0) = 0.012$$

$$T0(0) = 460$$

$$T1(0) = 450$$

$$T2(0) = 440$$

$$T3(0) = 430$$

$$T4(0) = 420$$

$$T5(0) = 410$$

$$T6(0) = 410$$

$$T7(0) = 410$$

$$T8(0) = 410$$

$$T9(0) = 410$$

$$f(E1) = E1 - E0 - 3 * DR * r1 * (1 * DR) ^ 2 / (R ^ 3 * r10)$$

$$f(E2) = E2 - E1 - 3 * DR * r2 * (2 * DR) ^ 2 / (R ^ 3 * r10)$$

$$f(E3) = E3 - E2 - 3 * DR * r3 * (3 * DR) ^ 2 / (R ^ 3 * r10)$$

$$f(E4) = E4 - E3 - 3 * DR * r4 * (4 * DR) ^ 2 / (R ^ 3 * r10)$$

$$f(E5) = E5 - E4 - 3 * DR * r5 * (5 * DR) ^ 2 / (R ^ 3 * r10)$$

$$f(E6) = E6 - E5 - 3 * DR * r6 * (6 * DR) ^ 2 / (R ^ 3 * r10)$$

$$f(E7) = E7 - E6 - 3 * DR * r7 * (7 * DR) ^ 2 / (R ^ 3 * r10)$$

$$f(E8) = E8 - E7 - 3 * DR * r8 * (8 * DR) ^ 2 / (R ^ 3 * r10)$$



$$f(E9) = E9 - E8 - 3 * DR * r9 * (9 * DR)^2 / (R^3 * r10)$$

$$f(E10) = E10 - E9 - 3 * DR * r10 * (10 * DR)^2 / (R^3 * r10)$$

$$E1(0) = 0.2$$

$$E2(0) = 0.3$$

$$E3(0) = 0.2$$

$$E4(0) = 0.3$$

$$E5(0) = 0.2$$

$$E6(0) = 0.3$$

$$E7(0) = 0.2$$

$$E8(0) = 0.3$$

$$E9(0) = 0.2$$

$$E10(0) = 0.3$$

$$E0 = 0$$

Resultados numéricos y gráficos. En la figura 7 se observa el perfil del factor de efectividad en función a la posición axial y radial del reactor de lecho fijo en forma numérica y en la figura 8 el perfil grafico del factor de efectividad en función de la longitud del reactor para cada radio del reactor.

Figura 7

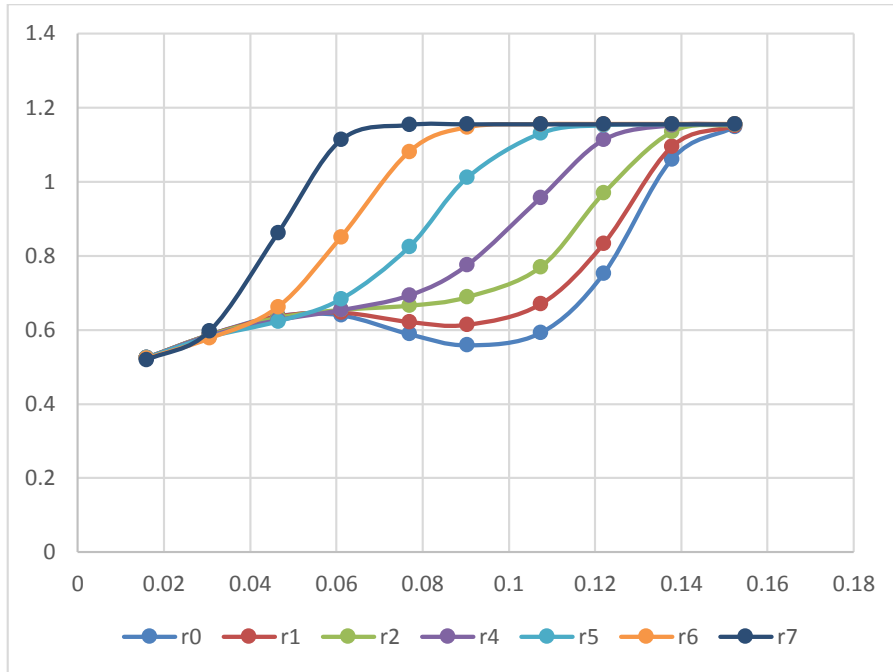
Perfil del factor de efectividad de la conversión del dióxido de azufre

		r0	r1	r2	r3	r4	r5	r6	r7	r8	r9	r10
z0	0	0.40389367	0.40389367	0.40389367	0.40389367	0.40389367	0.40389367	0.40389367	0.40389367	0.40389367	0.40389367	0.40389367
z1	0.0159312	0.52468836	0.52470143	0.52476737	0.52498568	0.52440551	0.5231523	0.51917451	0.5142903	0.58356026	1.11507466	1.15500992
z2	0.0305616	0.5868347	0.58669887	0.58620015	0.58477955	0.58091671	0.57705346	0.59701622	0.53923615	1.13614577	1.15500595	1.15501
z3	0.0464112	0.63699074	0.63590181	0.63274532	0.6266002	0.6230181	0.6614083	0.86113532	1.13447354	1.15496749	1.15501	1.15501
z4	0.0610416	0.63948139	0.64672406	0.65413081	0.65356731	0.68273391	0.84995675	1.11235559	1.15460718	1.15500962	1.15501	1.15501
z5	0.0768912	0.58859984	0.62159194	0.66547276	0.69318559	0.82393995	1.08037527	1.15311718	1.15500221	1.15501	1.15501	1.15501
z6	0.0903024	0.55847582	0.61371965	0.68863119	0.77453368	1.01018115	1.14619362	1.15489747	1.1550097	1.15501	1.15501	1.15501
z7	0.1073712	0.59180648	0.66941073	0.76945722	0.95667754	1.13051116	1.15438429	1.15499494	1.15500999	1.15501005	1.15501	1.15501
z8	0.1220016	0.751883	0.83253165	0.96902549	1.1128095	1.15249282	1.15496002	1.15500964	1.15500993	1.15501	1.15501	1.15501
z9	0.1378512	1.06050639	1.09451789	1.13438321	1.1521202	1.15485749	1.15500695	1.15500998	1.15500992	1.15501	1.15501	1.15501
z10	0.1524	1.14744029	1.1504944	1.15364513	1.15482343	1.15499953	1.15500977	1.15501	1.15501	1.15501	1.15500999	1.15501



Figura 8

Perfil del factor de efectividad de la conversión del dióxido de azufre en función a la longitud para cada radio del reactor



VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Respecto al modelamiento en el reactor en base a las figura 5 se observa que hay una marcada diferencia de la conversión en función a la posición axial para cada posición radial en el reactor; las mayores conversiones se logran en el eje del reactor y en puntos cercanos al eje; por otro lado, cerca de la pared del reactor, las conversiones son marcadamente más bajas. Esto se debe a los cambios de temperatura en el reactor pues las temperaturas más altas se encuentran en el eje del reactor lo que genera una mayor conversión; por otro lado, en las regiones cercanas a la pared del reactor, las temperaturas son más bajas tal como se observa en la figura 6. Estos resultados obtenidos son comparables a los obtenidos por García-Ochoa et. al (1991)

El cálculo del factor de efectividad para cada condición de conversión y temperatura resultó ser bastante complicada debido a la dificultad en la convergencia pues las ecuaciones resultantes del modelamiento presentan una no linealidad muy alta, lo que conllevó al uso de diversos métodos de solución de ecuaciones algebraicas no lineales; sin embargo, finalmente se logró la convergencia. El factor de efectividad obtenido a lo largo del lecho del reactor varia en el rango de 0.3 a 1.15; los valores más bajos se dan cerca de la entrada al reactor, mientras que, en la parte media, la variabilidad del factor de efectividad es bastante marcada y a la salida del reactor todos los valores tienden a 1.15.

CONCLUSIONES

Se ha logrado obtener el perfil del factor de efectividad en un reactor tubular de lecho fijo mediante el modelamiento del proceso en el lecho para la obtención de las condiciones externas de conversión y temperatura alrededor de la partícula, considerando un proceso pseudo homogéneo no isotérmico que se lleva a cabo en un reactor tubular de lecho fijo.

Se ha logrado precisar los datos globales de proceso y propiedades físicas necesarios para obtener el perfil del factor de efectividad en el proceso de oxidación del dióxido de azufre; dentro de los cuales tenemos las propiedades físicas como la densidad del catalizador y el gas, la entalpia de reacción, la conductividad térmica efectiva, la difusividad efectiva, etc., las condiciones del proceso como son flujo de alimentación, presión de operación, temperatura de entrada, números adimensionales de transferencia de masa, etc., la geometría como son la forma y tamaño de la partícula, el diámetro y longitud del reactor, etc.



RECOMENDACIONES

Se recomienda seguir analizando el cálculo del factor de efectividad utilizando otros modelos cinéticos y comparándolos con el calculado en este trabajo, pues no se tienen antecedentes del desarrollo de este tipo de trabajos que hayan sido realizados.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Aris, R. & Amundson, N. (1957). American Institute of Chemical Engineers – AICHE
- Bird, R., Stewart, W., Lightfoot, E. (1993). Fenómenos de Transporte, Reverte Ediciones, S.A. de C.V., México D. F., México
- Bird, R., Stewart, W., Lightfoot, E. (2006). Fenómenos de Transporte, Reverte Ediciones, 2da. Edic., Edit. Limusa Wiley. México.
- Carrasco, L. (2013). Modelamiento y simulación de reactores de lecho fijo. Unidad de Investigación de la Facultad de ingeniería Química de la Universidad Nacional del Callao, Perú.
- Carrasco, L. (2018). Modelamiento de los Fenómenos de Transporte. Edit Macro E.I.R.L, Lima Perú
- Chenier, P. (2002). Survey of industrial chemistry. Third Edic, Edit Springer Science + Business Media. Nueva York. DOI: 10.1007/978-1-4615-0603-4.
- Conesa, J. (2010). Diseño de reactores heterogéneos. España: Facultad de ingeniería Química - Universidad de Alicante.
- De Silva, E. Bamunusigha, B., Gunaekera, M. (2014). Heterogeneous kinetic study for esterification of acetic acid with etanol., Engineer Vol XLVII, Nro1, Sri Lanka.
- Fogler, H. (2001). Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. México: Prentice Hall, 3ra Edición.
- Froment, G., Bischoff, K., De Wilde, J. (2011). Chemical reactor, analysis, and design. 3ra. Ed. Edit. John Wiley and Sons, Inc. USA.



- Frost & Pearson (1953), "Kinetics and mechanism", 2st. ed, 1961. ISBN: 616773H: QD502 F7
- García-Ochoa, F., Borrachero, C., Molina, G., Romero, A. (1991). Simulación de reactores de lecho fijo por el modelo de dos dimensiones I-Reacciones simples, Anales de Química, Vol. 88.
- Gonzo, E. (2011). Conceptos Básicos sobre los Fenómenos de Transporte y Transformación en Catálisis Heterogénea. Argentina: Instituto de Investigaciones para la Industria Química (INIQUI) - CONICET.
- Granados, C. (1979). Manufactura del ácido sulfúrico. Facultad de Ingeniería Química y Metalurgia, Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga
- Ioannidis, A. (2002). Mathematical Modeling of Catalytic Fixed Bed Reactors. Twente University Press.
- Ioannidis, A. (2002). Mathematical modeling of catalytic fixed bed reactors. Ph. D. Thesis, University of Twente
- Katz, M. (2011). Materiales y materias primas, guía didáctica, azufre. Instituto Nacional de Educación Tecnológica, Republica de Argentina
- Kimura, S; Nakagawa, J., Tone, S., Otake, T., & Nakagawa, J. (1982). Non-isothermal behavior of gas-solid reactions based on the volume reaction model. Journal of Chemical Engineering of Japan, 15(2), 115–121. <https://doi.org/10.1252/jcej.15.115>.
- Levenspiel, O. (2005). Ingeniería de las reacciones químicas. (2a Ed.). México, D.F., México: Reverte S.A. de C.V.
- López, R. (2007). Mecanismo de reacción sobre catalizadores sólidos. Departamento de Ingeniería Química. Universidad del País Vasco. España.
- Pernet, L; Ochoa, I., Robledo, M., Rueda, C. (2016). Modelamiento y simulación de un reactor catalítico para la oxidación de SO₂ a SO₃, utilizando V₂O₅ como catalizador. Prospect. Vol. 14, No. 1, Enero - Junio de 2016, pp. 39-46.
- Reyna, A. (2022). Optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente de los procesos de tostación de minerales sulfurados a través del modelamiento y simulación. Tesis de Doctorado. Universidad Nacional Federico Villarreal, Perú.

Santamaría, J.; Herguido, J.; Menéndez, M. & Monzon. (2002), A. Ingeniería de reactores. España: Edit. Síntesis.

Smith, J. M. (1991). Ingeniería de la cinética química. 6ta Impresión. McGraw Hill.

Sun, Y., Liu, Bin, S. & Keith, S. (2004). Approximate solution for the nonlinear model of diffusion and reaction in porous catalysts by the decomposition method. Chemical Engineering Journal, 102(1), 1–10. [https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(03\)00060-3](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(03)00060-3).

Zhu, L; Ma, W, & Luo, Z. (2018). Influence of distributed pore size and porosity on MTO catalyst particle performance: Modeling



Luis Carrasco Venegas
Responsable del Proyecto



ANEXO: MATRIZ DE CONSISTENCIA

“PERFIL DEL FACTOR DE EFECTIVIDAD EN UN REACTOR DE LECHO FIJO A PARTIR DE DATOS GLOBALES DEL PROCESO DE OXIDACIÓN DEL DIÓXIDO DE AZUFRE”.

PROBLEMA	OBJETIVOS	HIPÓTESIS	VARIABLES	INDICADORES	METODOLOGIA
General	General	General	Dependiente		
¿Cómo se deberá determinar el perfil del factor de efectividad en un reactor de lecho fijo?	Determinar el perfil del factor de efectividad en un reactor tubular de lecho fijo.	El perfil del factor de efectividad se determina obteniendo las condiciones de conversión y temperatura a lo largo del lecho y su posterior uso en el perfil de concentración y temperatura en cada partícula individual.	Z: Perfil del factor de efectividad	Perfil del factor de efectividad dependiente de la ubicación espacial dentro del lecho catalítico	Nivel: Explicativo Tipo: Aplicativo Diseño: Documental
Específico	Específico	Específicas	Independientes		
¿Cuáles son los datos globales de proceso y propiedades físicas necesarios para obtener el perfil del factor de efectividad en el proceso de oxidación del dióxido de azufre?	Precisar los datos globales de proceso y propiedades físicas necesarios para obtener el perfil del factor de efectividad en el proceso de oxidación del dióxido de azufre.	Para determinar el perfil del factor de efectividad se requiere conocer las propiedades físicas del catalizador, las dimensiones del reactor tubular y las condiciones de operación.	X: Factores de proceso	Geometría y volumen del reactor Geometría y volumen de la partícula Temperature Flujo Presión Concentración	