

# FORMULACIÓN Y CÁLCULO NUMÉRICO DEL FACTOR DE EFECTIVIDAD NO ISOTÉRMICO PARA CATALIZADORES CILÍNDRICOS FINITOS CONSIDERANDO DIFUSIÓN BIDIMENSIONAL

BIBIAN HOYOS

*Departamento de Procesos Químicos, Facultad de Minas, Universidad Nacional de Colombia, Medellín*

JUAN GUILLERMO CADAVID

*Candidato a Magister, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá*

HERMES RANGEL

*Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá*

Recibido para revisar 15 Agosto 2000; aceptado 22 Octubre de 2000; versión final recibida 23 Julio 2001

**RESUMEN.** Se presenta el modelo de cálculo del factor de efectividad y de los perfiles de concentración y temperatura en pastillas catalíticas cilíndricas finitas huecas o sólidas. En el modelo se considera dispersión en las direcciones radial y axial y comportamiento no isotérmico. El sistema de ecuaciones diferenciales parciales que resulta del modelo se discretiza por el método de diferencias finitas centrales y el sistema algebraico altamente no lineal resultante se resuelve mediante un programa escrito para la hoja electrónica Excel<sup>TM</sup>. La técnica numérica propuesta puede extenderse a cualquier tipo de cinética; como ilustración se presentan algunos resultados para reacciones con expresiones de velocidad de reacción de orden  $n$ .

**PALABRAS CLAVES.** Factor de efectividad, Catalizadores cilíndricos finitos, Dispersión bidimensional, Modelo no isotérmico.

**ABSTRACT.** A model for calculating the effectiveness factor and the concentration and temperature profiles for finite cylindrical either hollow or solid catalyst particles is presented. The model accounts for dispersion in both radial and axial directions and non-isothermal behavior. The resulting partial differential equations system is discretized by a centered finite difference method and a program written for the Excel<sup>TM</sup> electronic sheet solves the highly nonlinear algebraic system. The numerical technique can be extended to any kinetic expression; for illustration, some results for  $n$ -th order reactions rate expressions are shown.

**KEY WORDS.** Effectiveness factor, Finite cylindrical catalysts, Bidimensional dispersion, Non-isothermal model.

## 1 INTRODUCCIÓN

En los estudios de catálisis heterogénea es importante establecer cual es el mecanismo que limita la velocidad de reacción dentro de la partícula catalítica, esto es, conocer si los efectos difusivos son los que controlan la velocidad total del proceso, o si por el contrario es la transformación química en la superficie la que controla.

Para tener una idea de las magnitudes relativas de los fenómenos de difusión y de transformación química, se define el factor de efectividad de una pastilla catalítica, para una condición de flujo estable, como:

$$\eta = \frac{\text{Lo que reacciona en toda la partícula}}{\text{Lo que reaccionaría si toda la partícula estuviese a la concentración y temperatura de la superficie externa}} \quad (1)$$

que también se puede expresar por:

$$\eta = \frac{\begin{array}{l} \text{Velocidad molar del} \\ \text{componente } i \text{ a través} \\ \text{de la superficie} \end{array} * \begin{array}{l} \text{Área de la} \\ \text{partícula} \\ \text{catalítica} \end{array}}{\begin{array}{l} \text{Velocidad de formación} \\ \text{del componente } i \\ \text{a la concentración y} \\ \text{temperatura de la} \\ \text{superficie externa} \end{array} * \begin{array}{l} \text{Volumen de} \\ \text{la partícula} \\ \text{catalítica} \end{array}} \quad (2)$$

Según la ecuación 2, un factor de efectividad igual a uno (para una situación isotérmica) indica que no existen impedimentos difusivos para la velocidad total del proceso y el control se debe a la energía de activación de la reacción que tiene lugar en la superficie de la partícula. Un factor de efectividad menor que uno indica que los aspectos difusivos son importantes en el control de la velocidad total de la reacción: entre más pequeño sea el factor de efectividad mayor será la importancia de los procesos físicos de transferencia de masa.

Se puede presentar también el caso de un factor de efectividad mayor que uno, lo que indica que los efectos de transferencia de calor son importantes, y aunque en apariencia esta sería la situación ideal, en la práctica no es recomendable debido a que se puede presentar desactivación del catalizador originada por las altas temperaturas que se generan dentro de la partícula.

Hay una gran cantidad de artículos publicados en los cuales se estudian los parámetros que tienen influencia en el valor del factor de efectividad. Uno de los parámetros más estudiados es la geometría de la pastilla. En particular, cabe destacar los trabajos de Carberry (1961, 1976) para poros cilíndricos y para tabletas planas, cilindros y esferas, el trabajo de Smith (1956) para partículas catalíticas esféricas y más recientemente los trabajos de Morbidelli y col. (1982) para tabletas y cilindros y el de Wang y col. (1994) con pastillas rectangulares reticuladas. Doraiswamy y Sharma (1984) presentan un resumen de la influencia de la geometría en el factor de efectividad y en la distribución de concentración dentro de la pastilla.

Otro aspecto ampliamente estudiado, es la influencia de la expresión de velocidad de reacción en el factor de efectividad: se encuentran estudios para reacciones de primer y segundo orden (Wakao et al., 1978; Lee, Lin, 1986), para reacciones del tipo Langmuir-Hinshelwood (Krasuk, 1965; Morbidelli, 1982 y 1983), para reacciones de orden negativo (Morbidelli and Varma, 1983) y aún para reacciones múltiples (Wohlfahrt, 1982). Doraiswamy y Sharma (1984) y Satterfield (1963 y 1991) también presentan un estudio de la influencia del tipo de reacción en la determinación del factor de efectividad en el cual presentan una buena cantidad de resultados para reacciones con ecuación de velocidad compleja.

La gran mayoría de los trabajos presentados en la literatura consideran en sus modelos matemáticos los fenómenos de difusión en una sola dirección con comportamiento no isotérmico. Para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales que estos modelos generan, se han intentado simplificaciones para casos

especiales que permiten una solución analítica (Scott et al. 1984; Singh, 1985) o soluciones numéricas empleando los métodos de colocación ortogonal (Trotta and Del Guidice, 1985; Rusic and Zrnec, 1994) y la simulación con el método Montecarlo (Wang et al., 1994).

Los modelos no isotérmicos de difusión en dos direcciones, generan sistemas de ecuaciones diferenciales parciales que no se han estudiado con profundidad. En este trabajo se presenta la formulación de un modelo matemático para calcular el factor de efectividad en pastillas catalíticas cilíndricas finitas (huecas o sólidas). Se considera comportamiento no isotérmico con difusión en las direcciones radial y axial y ecuaciones de velocidad de reacción que cumplen la ley de potencias. Como una alternativa diferente a las planteadas en la literatura, el sistema de ecuaciones diferenciales parciales se resuelve simultáneamente por el método de diferencias finitas centrales. La validación de la solución del modelo se hará por comparación con los datos reportados por Davis (1990), en el que se utiliza el programa DISPL para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales.

## 2 MODELO MATEMÁTICO

El modelo matemático para el cálculo del factor de efectividad de una pastilla cilíndrica hueca presentado en este trabajo, se basa en la aplicación de las ecuaciones de conservación de masa y energía sobre un elemento diferencial de volumen como el de la Figura 1, con las siguientes suposiciones:

- Difusión de las especies en dirección radial y axial simultáneamente
- Situación no isotérmica.
- Ecuación cinética expresada en ley de potencias, esto es, ecuaciones de velocidad del tipo:  $(-r_A) = k * C_A^n$ .
- Reacciones químicas en las que no se presenta cambio en el número de moles.
- Estado estable del sistema.
- Propiedades del sistema constantes ( $D_{e,A}$ ,  $k_e$ ,  $\Delta H_r$ , etc.).
- Los perfiles de concentración y temperatura son concéntricos.

La última suposición fue confirmada experimentalmente por Wakao et al. (1978) para reacciones con expresión cinética de primer orden en partículas esféricas y su extensión se supone válida para partículas cilíndricas y ordenes de reacción superiores.

Al realizar un balance de masa sobre el elemento diferencial de volumen de la Figura 1 y después de

aplicar la ley de Fick para estado estable (Bird et al., 1982), se obtiene:

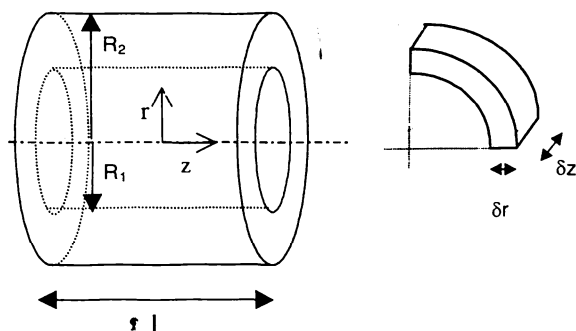


Figura 1. Pastilla Catalítica en forma de Cilindro Hueco y Elemento diferencial de volumen.

$$\frac{D_{e,A}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + D_{e,A} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - K C_A^n = 0 \quad (3)$$

con las siguientes condiciones de frontera (considerando como origen de coordenadas el centro de la pastilla):

$$\begin{aligned} r = R_1 \quad \forall z &\Rightarrow C_A(R_1, z) = C_A^S \\ r = R_2 \quad \forall z &\Rightarrow C_A(R_2, z) = C_A^S \\ z = L/2 \quad \forall r &\Rightarrow C_A(r, L/2) = C_A^S \\ z = 0 \quad R_1 \leq r \leq R_2 &\Rightarrow \partial C_A / \partial z = 0. \end{aligned}$$

Un balance de energía sobre el elemento diferencial de volumen en combinación con la ley de Fourier y bajo condiciones de estado estable, produce:

$$\frac{k_e}{r \Delta H} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{k_e}{\Delta H} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - K C_A^n = 0. \quad (4)$$

Las condiciones de frontera para la solución de esta ecuación diferencial son:

$$\begin{aligned} r = R_1 \quad \forall z &\Rightarrow T(R_1, z) = T^S \\ r = R_2 \quad \forall z &\Rightarrow T(R_2, z) = T^S \\ z = L/2 \quad \forall r &\Rightarrow T(r, L/2) = T^S \\ z = 0 \quad R_1 \leq r \leq R_2 &\Rightarrow \partial T / \partial z = 0. \end{aligned}$$

Con el fin de facilitar la solución numérica de las ecuaciones diferenciales 3 y 4, es preferible escribirlas en términos de las siguientes variables adimensionales:

$$\begin{aligned} f = C_A / C_A^S & \quad \text{Concentración} \\ \lambda = (r - R_1) / (R_2 - R_1) & \quad \text{Distancia radial} \\ \Gamma = 2z / L & \quad \text{Distancia axial} \\ t = T / T^S & \quad \text{Temperatura} \end{aligned}$$

La ecuación del balance de masa en términos de las nuevas variables adimensionales queda:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \lambda^2} + \frac{(R_2 - R_1)}{\lambda(R_2 - R_1) + R_1} \frac{\partial f}{\partial \lambda} + \left[ \frac{2(R_2 - R_1)}{L} \right]^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \Gamma^2} -$$

$$\left[ \frac{(R_2 - R_1)^2 (C_A^S)^{(n-1)} f^n}{D_{e,A}} \right] K_T^S \exp[-\gamma(1/t - 1)] = 0 \quad (5)$$

en la cual  $\gamma = E_a / R T^S$  y sus condiciones de frontera se transforman a

$$\begin{aligned} \lambda = 0 \quad \forall \Gamma &\Rightarrow f(0, \Gamma) = 1 \\ \lambda = 1 \quad \forall \Gamma &\Rightarrow f(1, \Gamma) = 1 \\ \Gamma = 1 \quad \forall \lambda &\Rightarrow f(\lambda, 1) = 1 \\ \Gamma = 0 \quad \forall \lambda &\Rightarrow \partial f / \partial \Gamma = 0. \end{aligned}$$

y la nueva ecuación para el balance de energía es:

$$\frac{\partial^2 t}{\partial \lambda^2} + \frac{(R_2 - R_1)}{\lambda(R_2 - R_1) + R_1} \frac{\partial t}{\partial \lambda} + \left[ \frac{2(R_2 - R_1)}{L} \right]^2 \frac{\partial^2 t}{\partial \Gamma^2} - \left[ \frac{(R_2 - R_1)^2 \Delta H (f C_A^S)^n}{k_e T^S} \right] K_T^S \exp[-\gamma(1/t - 1)] = 0 \quad (6)$$

cuyas condiciones de frontera son:

$$\begin{aligned} \lambda = 0 \quad \forall \Gamma &\Rightarrow t(0, \Gamma) = 1 \\ \lambda = 1 \quad \forall \Gamma &\Rightarrow t(1, \Gamma) = 1 \\ \Gamma = 1 \quad \forall \lambda &\Rightarrow t(\lambda, 1) = 1 \\ \Gamma = 0 \quad \forall \lambda &\Rightarrow \partial t / \partial \Gamma = 0. \end{aligned}$$

Las ecuaciones diferenciales para el caso de una pastilla cilíndrica sólida, tanto en variables reales como en variables adimensionales, son idénticas a las ecuaciones 3 a 6, los únicos cambios que se requieren están en el planteamiento de las condiciones de frontera para  $r = 0$ . Para este caso, como es lógico,  $R_1$  en todas las expresiones es igual a cero y por lo tanto  $\lambda = 0$ . Igualmente se mantienen dentro del modelo las mismas suposiciones presentadas para el caso de la pastilla hueca.

Las condiciones de frontera para el cilindro sólido en  $r = 0$  ( $\lambda = 0$ ), son:

$$\begin{aligned} \lambda = 0 \quad \forall \Gamma &\Rightarrow \partial f / \partial \Gamma = 0 \\ \lambda = 0 \quad \forall \Gamma &\Rightarrow \partial t / \partial \Gamma = 0. \end{aligned}$$

### Factor Efectividad

El cálculo del factor de efectividad se hace con base en la definición dada en la ecuación 1: Lo que reacciona en el interior de la partícula catalítica se calculó por la sumatoria de las contribuciones a la reacción en los elementos diferenciales de volumen de la Figura 1, tomando la concentración promedio y evaluando la constante de la velocidad de la reacción a la temperatura promedio del elemento.

El volumen del i-esimo elemento diferencial (numerados de adentro hacia fuera) está dado por:

$$\Delta V_i = \frac{\pi \Delta z [(R_1 + i \Delta r)^2 - (R_1 + (i-1) \Delta r)^2]}{4}$$

y en variables adimensionales:

$$\Delta V_i = \frac{\pi L \Delta \Gamma}{8} \left[ \frac{(R_1 + i \Delta \lambda (R_2 - R_1))^2 - (R_1 + (i-1) \Delta \lambda (R_2 - R_1))^2}{\Delta \lambda} \right]$$

La cantidad de un componente A que reacciona en este elemento diferencial de volumen es:

$$(-r_A)_i = \bar{k}_{T,i} (\bar{C}_A)_i^n \Delta V_i$$

y la expresión para el factor de efectividad se encuentra con la suma de las contribuciones en toda la pastilla:

$$\eta = \frac{\Delta \Gamma \sum_{i,j=1}^{n_r, n_z} \bar{k}_{T(i,j)} (\bar{C}_A)_{(i,j)}^n \left[ \frac{(R_1 + i \Delta \lambda R_{2,1})^2 - (R_1 + (i-1) \Delta \lambda R_{2,1})^2}{\Delta \lambda} \right]}{k_{TS} (C_{AS})^n (R_2^2 - R_1^2)}$$

donde  $R_{2,1} = R_2 - R_1$ . En la cual  $n_r$  y  $n_z$  representan el número de elementos diferenciales considerados en las direcciones radial y axial respectivamente.

### 3 SOLUCIÓN DEL MODELO

El cálculo del factor de efectividad implica la solución simultánea de las ecuaciones diferenciales 5 y 6. En este trabajo se discretiza el sistema acoplado de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales por medio de diferencias finitas centrales y el sistema algebraico resultante se soluciona en forma simultánea (debido a la formulación completamente implícita del sistema) mediante una programación lógica sobre la hoja electrónica Excel<sup>TM</sup>.

Teniendo en cuenta las ecuaciones en diferencias finitas, y las expresiones en variables adimensionales obtenidas para la representación del modelo, se pueden escribir las siguientes expresiones para los nodos de la malla en la que se divide la partícula catalítica:

*Ecuaciones para nodos interiores y nodos de los extremos.* ( $0 < \lambda \leq 1$ ;  $0 \leq \Gamma \leq 1$ )

\* *Balance de masa*

$$\frac{f_{\lambda+1,\Gamma} - 2f_{\lambda,\Gamma} + f_{\lambda-1,\Gamma}}{(\Delta \lambda)^2} + \frac{(R_2 - R_1)}{\lambda(R_2 - R_1) + R_1} \frac{f_{\lambda+1,\Gamma} - f_{\lambda-1,\Gamma}}{2\Delta \lambda} + \left[ \frac{2(R_2 - R_1)}{L} \right]^2 \frac{f_{\lambda,\Gamma+1} - 2f_{\lambda,\Gamma} + f_{\lambda,\Gamma-1}}{(\Delta \Gamma)^2} - \frac{(R_2 - R_1)^2 (f_{\lambda,\Gamma})^n (C_A^S)^{(n-1)} k_T^S}{D_{c,A}} \exp[-\gamma(1/t_{\lambda,\Gamma} - 1)] = 0$$

\* *Balance de Energía*

$$\frac{t_{\lambda+1,\Gamma} - 2t_{\lambda,\Gamma} + t_{\lambda-1,\Gamma}}{(\Delta \lambda)^2} + \frac{(R_2 - R_1)}{\lambda(R_2 - R_1) + R_1} \frac{t_{\lambda+1,\Gamma} - t_{\lambda-1,\Gamma}}{2\Delta \lambda} + \left[ \frac{2(R_2 - R_1)}{L} \right]^2 \frac{t_{\lambda,\Gamma+1} - 2t_{\lambda,\Gamma} + t_{\lambda,\Gamma-1}}{(\Delta \Gamma)^2} - \frac{(R_2 - R_1)^2 (f_{\lambda,\Gamma} C_A^S)^n (\Delta H) k_T^S}{k_c T^S} \exp[-\gamma(1/t_{\lambda,\Gamma} - 1)] = 0.$$

Para el caso de  $\lambda = 0$  se presenta una indeterminación en las ecuaciones en diferencias finitas que se puede

solucionar utilizando la regla de L'Hopital:

*Ecuaciones para los nodos sobre el eje longitudinal adimensional* ( $\lambda = 0$ ,  $\Gamma \neq 0$ )

\* *Balance de masa*

$$4 \left( \frac{f_{1,\Gamma} - f_{\lambda,\Gamma}}{\Delta \lambda^2} \right) + \left[ \frac{2(R_2 - R_1)}{L} \right]^2 \frac{f_{0,\Gamma+1} - 2f_{0,\Gamma} + f_{0,\Gamma-1}}{\Delta \Gamma} - \left[ \frac{(R_2 - R_1)^2 (f_{0,\Gamma})^n (C_A^S)^{(n-1)} k_T^S}{D_{c,A}} \right] \exp[-\gamma(1/t_{0,\Gamma} - 1)] = 0$$

\* *Balance de Energía*

$$4 \left( \frac{t_{1,\Gamma} - t_{\lambda,\Gamma}}{\Delta \lambda^2} \right) + \left[ \frac{2(R_2 - R_1)}{L} \right]^2 \frac{t_{0,\Gamma+1} - 2t_{0,\Gamma} + t_{0,\Gamma-1}}{\Delta \Gamma} - \left[ \frac{(R_2 - R_1)^2 (f_{0,\Gamma} C_A^S)^n (\Delta H) k_T^S}{k_c T^S} \right] \exp[-\gamma(1/t_{0,\Gamma} - 1)] = 0$$

Para la solución del modelo y su implementación en hoja electrónica Excel<sup>TM</sup>, se consideró un cuarto de pastilla catalítica, la cual se dividió en una malla de 100 nodos ( $\Delta \lambda = \Delta \Gamma = 0.1$ ).

Debido al alto grado de no-linealidad del sistema, la velocidad de convergencia del método se dificulta, y el hecho de que se encuentre o no una solución depende en gran medida de los valores con los que se inician las variables. Después de algunas pruebas preliminares se decidió iniciar los valores de la matriz de la concentración adimensional (**If**) en el valor de cero, para todos los nodos (**If**<sub>0</sub> = 0.0). A la matriz de iniciación para la temperatura adimensional (**It**) se le asignó el valor de 1.0 para todos los nodos (**It**<sub>0</sub> = 1.0), con lo cual se consigue una gran estabilidad y se aumenta la velocidad de convergencia.

Dentro de las matrices objetivo de concentraciones y temperaturas (matrices **Of** y **Ot**) se escribieron las relaciones algebraicas entre los diferentes nodos, obtenidas del planteamiento del problema en diferencias finitas.

Por último, se programó el modelo para calcular simultáneamente los valores de la matrices **If** e **It** que hacen que los coeficientes de las matrices **Of** y **Ot** satisfagan las ecuaciones diferenciales.

La Figura 2 presenta los perfiles de concentración y de temperatura para una partícula cilíndrica sólida y una reacción de primer orden, el factor de efectividad calculado fue 1.215; estos resultados difieren con los obtenidos por medio del cálculo típico que considera difusión en la dirección radial solamente (Figura 3) con el cual se obtiene un factor de efectividad de 1.447 (19% mayor), y el procedimiento planteado en este trabajo muestra que en el centro de la pastilla la concentración es 20.66% mayor y la temperatura 1.31% menor que el obtenido con el cálculo de difusión en una sola dirección.

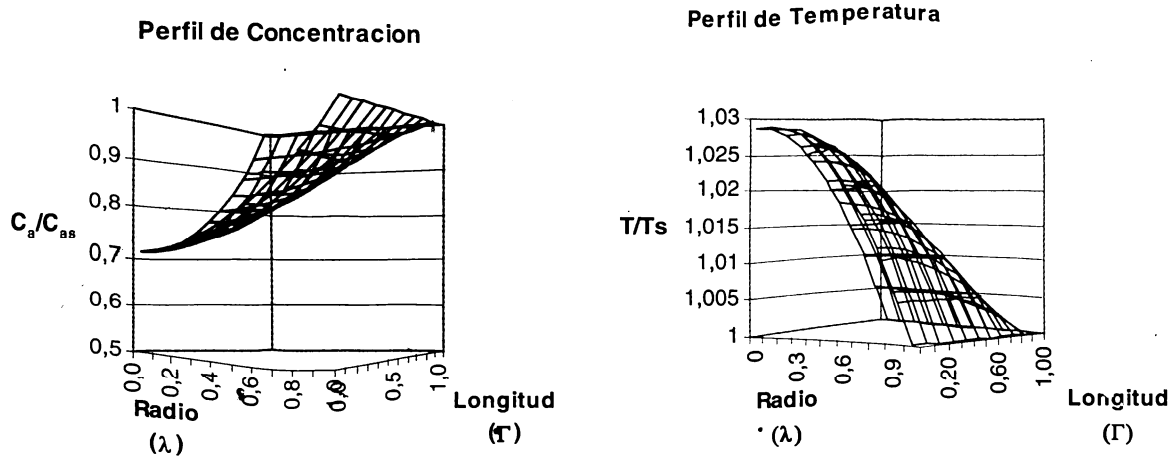


Figura 2. Perfil de concentración y de temperatura para un cilindro sólido finito. Cinética de primer orden.  $\beta = 0.1$ .  $\gamma = 30$ .  $C_{as} = 3.65 \times 10^{-7} \text{ mol/cm}^3$ .  $T_s = 623 \text{ K}$ .  $R_2 = 0.5 \text{ cm}$ .  $L = 1 \text{ cm}$ .  $\Phi = 1$ .  $\eta = 1.215$ .

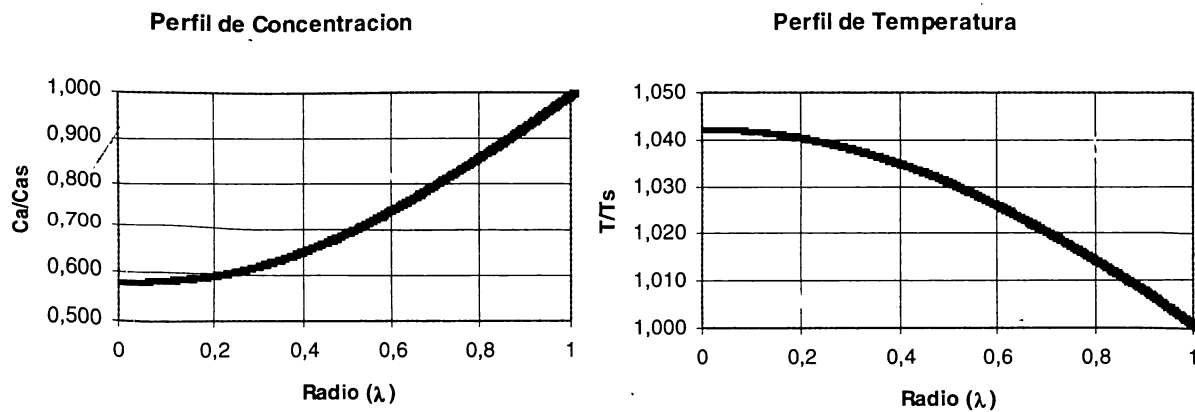


Figura 3. Perfil de concentración y de temperatura considerando difusión radial únicamente. La geometría, cinética y propiedades son las mismas de la Figura 2.  $\eta = 1.447$ .

#### 4 VALIDACIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO

Como una manera de validar los resultados obtenidos, en la Tabla 1 se presentan los datos reportados por Davis (1990) calculados con el programa DISPL y los datos obtenidos mediante la utilización del algoritmo planteado en el presente trabajo, para una distancia adimensional  $\Gamma = 0.25$  y las mismas condiciones de la Figura 2. La concordancia de los resultados obtenidos con los dos programas es excelente.

La Figura 4 corresponde a los perfiles de concentración y temperatura en una pastilla cilíndrica hueca en la cual se lleva a cabo una reacción de segundo orden. El factor de efectividad de 18.81 es una consecuencia clara de los efectos de transferencia de calor dentro de la partícula.

Tabla 1. Perfil de concentración reportado por Davis y calculado a partir del programa propuesto para un cilindro sólido finito. Cinética de primer orden.  $\beta = 0.1$ .  $\gamma = 30$ .  $L/D = 1$ .  $\Phi = 1$ .  $\Gamma = 0.25$ .

$\lambda$	DISPL [25] $C_a/C_{as}$	Este trabajo $C_a/C_{as}$
0,0000	0,728	0,7298
0,250	0,745	0,7469
0,500	0,797	0,7981
0,750	0,882	0,8829
1,000	1	1

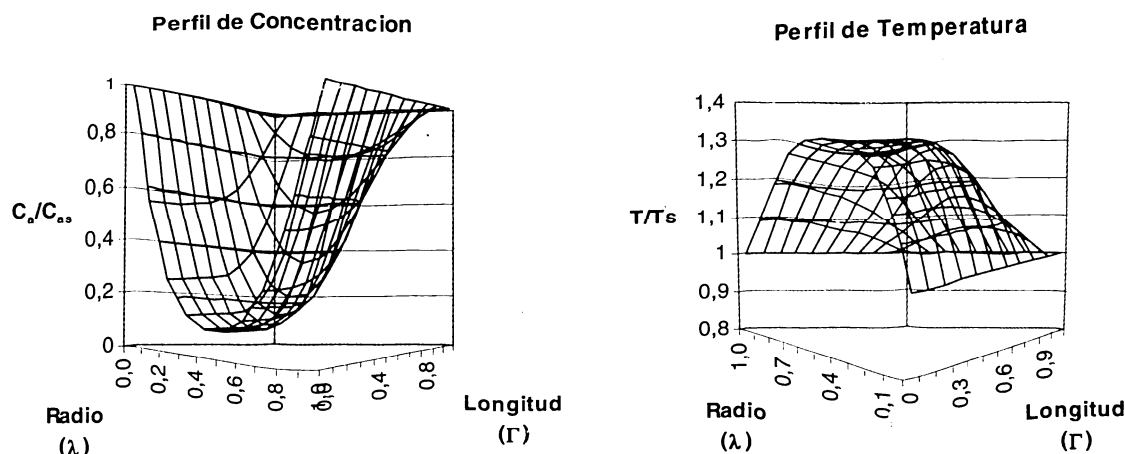


Figura 4. Perfil de concentración y de temperatura para un cilindro hueco. Cinética de segundo orden.  $\beta = 0.37$ ,  $\gamma = 29.86$ .  $C_{as} = 3.65 \times 10^{-7}$  mol/cm<sup>3</sup>.  $T_s = 623$  K.  $R_2 = 0.5$  cm,  $R_1 = 0.1$  cm  $L = 1$  cm,  $\eta = 18.81$ .

## 5 CONCLUSIONES

El programa desarrollado es una herramienta robusta para el análisis de la eficiencia de utilización de catalizadores cilíndricos. Por otra parte, al estar diseñado para tener en cuenta la difusión en dos direcciones, permite una apreciación más clara (comparada con el cálculo de difusión en una sola dirección) de los efectos que producen los fenómenos de difusión y de transferencia de calor dentro de partículas catalíticas cilíndricas.

La propuesta presentada constituye una herramienta ágil y flexible para el cálculo del factor de efectividad, además, puede ser extendida fácilmente a otro tipo de cinéticas, por lo que se puede utilizar para optimizar los parámetros geométricos del pellet catalítico, lo cual será motivo de estudio en otro trabajo.

Por último, se debe resaltar que la estrategia numérica resultó muy estable, segura en la convergencia y de alta velocidad.

## NOMENCLATURA

$C$  = Concentración

$D$  = Difusividad.

$E_a$  = Energía de activación de la reacción.

$f$  = Concentración adimensional.

$\Delta H$  = Cambio de la entalpía de reacción.

$I$  = Matriz de iniciación.

$K_T$  = Constante de velocidad de la reacción evaluada a la temperatura  $T$ .

$K_e$  = Conductividad efectiva de la pastilla catalítica.

$L$  = Longitud de la pastilla.

$r$  = Dirección radial.

$R_1, R_2$  = Radios interior y exterior de la pastilla cilíndrica.

$t$  = Temperatura adimensional.

$R$  = Constante universal de los gases.

$T$  = Temperatura

$V$  = Volumen

$z$  = Dirección longitudinal

### Letras griegas

$\beta$  = Parámetro físico-químico

$\left[ = \Delta H D_e C_A^s / (K_e T^s) \right]$ .

$\eta$  = Factor de efectividad.

$\lambda$  = Dirección radial adimensional.

$\Gamma$  = Dirección longitudinal adimensional.

$\gamma$  = Parámetro de energía de activación.

$\Phi$  = Módulo de Thiele  $\left[ = R^* (K_e/D_e)^{0.5} \right]$

### Sub-superíndices

$A$  = Componente en la reacción.

$e$  = Efectivo.

$n$  = Orden de la reacción.

$n_r$  = Número de elementos en la dirección radial.

$n_z$  = Número de elementos en la dirección longitudinal.

$O$  = Inicial.

$S$  = Superficie.

## REFERENCIAS

- Bird, R., Stewart, W. y Lightfoot, L., *Fenómenos de Transporte*, Editorial Reverte, 1982.
- Carballo, L. y Duran, H., *Aplicaciones Matemáticas en Ingeniería Química*. Universidad Nacional de Colombia. 1999.
- Carberry, J., *The Catalytic Effectiveness Factor Under Nonisothermal Conditions*. AIChE J. Vol. 7. No 2. 350-351. 1961.



- Carberry, J., *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*. Mc Graw-Hill. New York, 1976.
- Davis, E., *Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos*. Compañía Editorial Continental S.A. de C.V. México. 1990.
- Doraiswamy, L. and Sharma, M., *Heterogeneous Reactions: Analysis, Examples and Reactor Design*. Vol. 1. John Wiley and Sons. New York, 1984.
- Foster, R. and Butt, J., *Some Surface Transport Effects on Activity in Diffusionally Limited Catalytic Systems*. Ind. Eng. Chem. Fundam. Vol. 6. No. 4. 481-488. 1967.
- Froment, G. and Bisschoff, K., *Chemicals Reactors Analysis and Design*. John Wiley and Sons. 1979.
- Krasuk, J. and Smith, M., *Effectiveness Factors with Surface Diffusion*. Ind. Eng. Chem. Fundam. Vol. 4. No. 1. 102-106. 1965.
- Lee, H., *Effectiveness Factors for solid-Catalyzed Gas-Solid Reactions*. Chem. Eng. Sci. Vol. 34. 5-9. 1979.
- Lin, Z., Shao, N. and Li, T., *Calculation of the Effectiveness Factor of a Spherical Catalyst Using Weighted Residuals*. International Chem. Eng. Vol. 26. No 2. 335 - 339. 1986.
- Liu, S., *Stable Explicit Difference Approximations to Parabolic Partial Difference Equations*. AIChE J. Vol. 15, 334, 1969.
- Morbidelli, M., Servida, A. and Varma, A., *Optimal Catalysts Activity Profiles in Pellets*. Part I. Ind. Eng. Chem. Fundam. 21, 278-284. 1982.
- Morbidelli, M., Servida, A. and Varma, A., *Optimal Catalysts Activity Profiles in Pellets*. Part II. Ind. Eng. Chem. Fundam. 21, 284-289. 1982.
- Morbidelli, M. and Varma, A., *Isothermal Diffusion - Reaction in a Slab Catalyst with Bimolecular Langmuir-Hinshelwood Kinetics*. Chem. Eng. Sci. Vol. 38. No. 2. 289-296. 1983.
- Rusic, D. and Zrnec, S., *Impurity Poisoning of Ni-Catalysts Pellets*. In "Catalysts Deactivation". Delmond B. and Froment G. (editors). 623-627. 1994.
- Satterfield, C. and Sherwood, T., *The Role of Diffusion in Catalysis*. Addison-Wesley. Massachusetts, 1963.
- Satterfield, C., *Heterogeneous Catalysts in Industrial Practice*. 2 ed. Mc Graw- Hill. New York. 1991.
- Scott, S., Boddington, T. and Gray, G., *Analytical Expressions for Effectiveness Factors in Non-isothermal Spherical Catalysts*. Chem. Eng. Sci. Vol. 39, No. 6, 1079-1085, 1984.
- Singh, C., *A Generalized Method for Calculating Effectiveness Factor*. Chem. Eng. Sci. Vol. 40, No. 12, 2375-2378. 1985.
- Smith, J., *Chemical Engineering Kinetics*. Mc Graw-Hill. New York, 1956.
- Trotta, A. and Del Giudice, S., *Finite Element Solution of Simultaneous Convection, Diffusion and Reaction on Catalytic Surfaces*. Computers and Chem. Eng. Vol. 9, No. 2, 167-173. 1985.
- Wakao, N., Kaguei, S. and Nagai, H., *Effective Diffusion Coefficients for Fluid Species Reacting with First Order Kinetics in Packed Bed Reactors and Discussion on Evaluation of Catalysts Effectiveness Factors*. Chem. Eng. Sci. Vol. 33. 183 -187. 1978.
- Wang, J. et al. *Montecarlo Simulation Effects of Pore Entrance Deactivation on Reaction Performance*. In "Catalysts Deactivation". Delmond B. and Froment G. (editors). 525-530. 1994.
- Wohlfahrt, K., *The Design of Catalyst Pellets*. Chem. Eng. Sci. Vol. 37, No. 2, 283-290. 1982.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMÁN  
DEPTO. DE BIBLIOTECAS  
BIBLIOTECA "WBB"