



UNIVERSIDAD POPULAR AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE PUEBLA

---

**ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA**

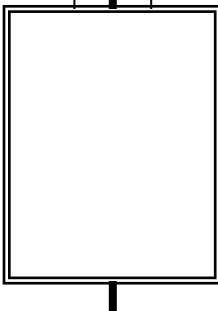
***EFFECTO DE LA EFICIENCIA DE MOJADO SOBRE LOS  
FACTORES DE EFECTIVIDAD***

Trabajo de Investigación  
para obtener el Título de

***Ingeniero Químico***

Presenta:

***Lilian Maribel Ortega Cuanalo.***



Puebla, Pue., México

**Mayo de 2014**



**UPAEP – Secretaría General**

Dirección General de Apoyos Académicos

Dirección del Centro de Recursos para el Aprendizaje y la Investigación.

Biblioteca Central - **Karol Wojtyła**

**Tesis Digitales Restricciones de uso:**

**DERECHOS RESERVADOS ©**

**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de textos, imágenes, gráficas, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente de donde la obtuvo mencionando el autor o autores involucrados en el documento.

Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD POPULAR AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE PUEBLA

---

*ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA*

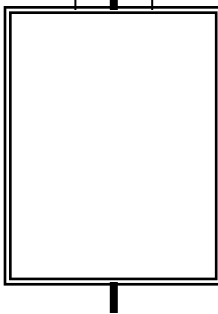
*EFFECTO DE LA EFICIENCIA DE MOJADO SOBRE LOS  
FACTORES DE EFECTIVIDAD*

Trabajo de Investigación  
para obtener el Título de

*Ingeniero Químico*

Presenta:

*Lilian Maribel Ortega Cuanalo.*



Puebla, Pue., México

Mayo de 2014

# CARTA DE APROBACIÓN DEL DIRECTOR Y ASESORES



Puebla, Pue., a 27 de marzo de 2014

**Lilian Maribel Ortega Cuanalo**  
**Estudiante de Ingeniería Química, UPAEP**  
**P r e s e n t e**

Me refiero a su carta del 25 de marzo del presente año en donde le informa a este comité su elección de opción de titulación.

Al respecto me permito hacer de su conocimiento que la Academia de Ingeniería Química ha resuelto autorizar su titulación a través de la elaboración y defensa de la *Monografía* denominada "Efecto de la eficiencia de mojado sobre los factores de efectividad", bajo la dirección del Mtro. Mario Edgar Cordero Sánchez

Su Monografía deberá ser presentada en examen profesional en un periodo no mayor a un año. En caso de exceder este tiempo, la Academia de Ingeniería Química revisará la vigencia de su contenido y podrá ratificar o rectificar el tema de la misma.

Por otro lado le recordamos que para completar sus trámites de examen de grado, deberá alcanzar al menos Testimonio Satisfactorio y 500 puntos para las evaluaciones EGEL-CENEVAL Y TOEFL, respectivamente.

Sin más por el momento me despido de usted quedando a sus órdenes para cualquier aclaración.

Atentamente,  
"La cultura al servicio del pueblo"

Mtro. Pedro Luis Díaz Bermúdez  
Presidente del Comité de Titulación  
del Departamento de Ingenierías



# DEDICATORIA

Dedico este trabajo con todo mi amor y cariño a DIOS,  
quien inspiró mi espíritu para la conclusión de este escrito,  
a mis padres Amando y Maribel,  
quienes me dieron la vida, educación, amor, apoyo, comprensión y consejos.  
a mis familiares, compañeros de estudio, a mis maestros y amigos,  
quienes me brindaron su amistad, compañía y motivación.

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a Dios por haberme regalado el don de la vida,, por sus bendiciones, por ser mi fortaleza y por brindarme una vida llena de aprendizaje, experiencia, felicidad, por iluminar mi camino, por darme inteligencia para culminar mi carrera de Ingeniería Química y haberme permitido lograr mis objetivos.

Agradezco a mis padres, por sus grandes ejmeplos dignos de superación, entrega, perseverancia y fortaleza, porque gracias a ustedes hoy puedo ver concluida mi meta, ya que en todo momento me han motivado e impulsado, agradezco sus consejos, sus valores, su paciencia y su amor

Agradezco a mi familia quien siempre me brindó su apoyo y comprensión a lo largo de mi carrera.

Agradezco a todos mis profesores por habermerme transmitido todo su conocimiento a lo largo de estos años, por su orientación, apoyo, motivación y paciencia. En especial agradezco al Profesor Mario Cordero Sánchez, mi asesor de este trabajo, por haberme brindado su tiempo, compañía y amistad durante mi estancia en esta Universidad.

## RESUMEN

El presente trabajo tiene como propósito principal la determinación de la distribución de las fases presentes alrededor de los pellets catalíticos (líquido-gas) en un medio poroso mediante el análisis del comportamiento hidrodinámico de un reactor de lecho escurrido para un proceso de Hidrodesulfuración, mediante el software COMSOL Multiphysics a través de la definición de las características y dimensiones de la superficie cubierta por la película de líquido y gas, conocida como capa límite hidrodinámica. Este líquido escurre a través del lecho, dando origen a la posibilidad de mojado incompleto, mala distribución de éste y de los perfiles de velocidad, afectando de manera directa la efectividad de la reacción. El modelo realizado y simulado requiere de la descripción de las propiedades del lecho catalítico, tales como, el diámetro de las partículas, la porosidad, la relación diámetro de pellet a diámetro de lecho, de las propiedades de los fluidos, de los parámetros de transporte, y de los modelos de fuerza de interacción entre las fases.

El modelo se constituyó de las ecuaciones de transporte de momento promedio, en el marco de referencia Euleriano, donde la interacción entre las fases gas-líquido-sólido se modeló mediante fuerzas de interacción entre pares de fases, propuestas por Attou (Attou, et al., 1999). Estas ecuaciones se resolvieron en un modelo 3D de reactor construido a partir 14 capas de tres pellets esféricos por cada una, en donde se especificaron ecuaciones de transporte de momento de las fases fluidas, y cuyo dominio es la región vacía del lecho. Una vez obtenidos los valores hidrodinámicos a lo largo del reactor como la velocidad, presión, fuerza resultante, número de Reynolds, se realizó el análisis correspondiente de éstos, logrando así determinar la distribución de las fases, considerando la entre la velocidad y la presión de un flujo y los conceptos de fenómenos de transporte acerca de la transferencia de momentum y la capa límite hidrodinámica.

Estos resultados son de gran importancia, porque al conocer la eficiencia de mojado y la distribución de fases nos permite comprender cómo influye la presencia del mojado en las partículas catalíticas en la reacción y qué porcentaje de éstas se está desperdiciando por su mal aprovechamiento durante la reacción debido a su bajo rendimiento y eficiencia, causando

pérdidas económicas importantes, por lo que los resultados obtenidos pueden ser implementados posteriormente en el reactor.

**Palabras clave:** capa límite hidrodinámica, partícula catalítica, eficiencia de mojado, hidrodesulfuración, CFD.

## Lista de Tablas

Tabla 2.2.1 Definiciones de parámetros hidrodinámicos .....	10
Tabla 2.3.2.1 Correlaciones para la estimación de la transición de regímenes de flujo del reactor de lecho escurrido para regímenes de flujo de pulso.....	14
Tabla 3.1.1 Datos para la construcción de cada plato .....	23
Tabla 3.1.2 Datos para la construcción de líneas de trazo por fracciones en el plato 5 .....	26
Tabla 3.1.3 Datos para la construcción de líneas de trazo por fracciones en el plato 10 .....	26
Tabla 3.2.1 Datos obtenidos de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy.....	29
Tabla 3.2.2 Datos obtenidos de los valores de la derivada de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy .....	30
Tabla 3.2.3 Datos obtenidos para realizar el cálculo del espesor de la capa límite.....	34
Tabla 3.2.4 Datos obtenidos de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy.....	34
Tabla 3.2.5 Datos obtenidos de los valores de la derivada de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy .....	36
Tabla 3.2.6 Datos obtenidos para realizar el cálculo del espesor de la capa límite.....	39
Tabla 3.2.1.1.1 Datos obtenidos para realizar la caracterización de la de la película .....	40
Tabla 3.2.1.2.1 Datos obtenidos para realizar la caracterización de la de la película .....	41
Tabla 3.2.1.3.1 Datos obtenidos para realizar la caracterización de la de la película .....	41
Tabla 4.1 Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 3 colocado en el plato 5 con el plano de corte xy, parte 1 .....	43
Tabla 4.2 Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 3 colocado en el plato 5 con el plano de corte xy, parte 2 .....	44
Tabla 4.3 Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 3 colocado en el plato 5 con el plano de corte yz, parte 1 .....	45

Tabla 4.4 Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 3 colocado en el plato 5 con el plano de corte yz, parte 2.....	45
Tabla 4.5 Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 2 colocado en el plato 10 con el plano de corte xy, parte 1 .....	47
Tabla 4.6 Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 2 colocado en el plato 10 con el plano de corte xy, parte 2 .....	47
Tabla 4.7 Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 2 colocado en el plato 10 con el plano de corte yz, parte 1.....	49
Tabla 4.8 Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 2 colocado en el plato 10 con el plano de corte yz, parte 2.....	48

## **Lista de Figuras**

Figura 1.1 Configuraciones de reactores basadas en su tipo de operación.....	2
Figura 2.2.1.1 Regímenes de flujo en reactores de lecho escurrido .....	12
Figura 2.3.4.1 Comportamiento del mojado de las partículas catalíticas .....	16
Figura 3.1.1 Reactor de lecho escurrido para el proceso de hidrodesulfuración .....	21
Figura 3.1.2 Plato con 3 pellets catalíticos .....	22
Figura 3.1.3 Selección de platos con pellets catalíticos, plato 5 .....	22
Figura 3.1.4 Selección de platos con pellets catalíticos, plato 10 .....	23
Figura 3.1.5 Corte a lo largo del reactor en el plano xy .....	24
Figura 3.1.6 Corte a lo largo del reactor en el plano yz .....	24
Figura 3.1.7 Pellet número 3 del plato 5.....	25
Figura 3.1.8 Pellet número 2 del plato 10 .....	25
Figura 3.1.9 Líneas de trazo en esferas catalíticas con división por fracciones .....	27
Figura 3.2.1 Gráfica obtenida de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy.....	30

Figura 3.2.2 Gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy .....	31
Figura 3.2.3 Pellet comparado con la gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy .....	33
Figura 3.2.4 Gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy con un corte de sección .....	33
Figura 3.2.5 Gráfica obtenida de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy.....	35
Figura 3.2.6 Gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy .....	37
Figura 3.2.7 Pellet comparado con la gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy .....	38
Figura 3.2.8 Gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy con un corte de sección.....	39
Figura 4.1 Representación gráfica de la capa límite del pellet 3 colocado en el plato 5 con el plano de corte xy.....	45
Figura 4.2 Representación gráfica de la capa límite del pellet 3 colocado en el plato 5 con el plano de corte yz.....	47
Figura 4.3 Representación gráfica de la capa límite del pellet 2 colocado en el plato 10 con el plano de corte xy.....	49
Figura 4.4 Representación gráfica de la capa límite del pellet 2 colocado en el plato 10 con el plano de corte yz.....	51

# ÍNDICE GENERAL

<b>1. INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
1.1 Introducción.....	1
1.2 Hipótesis.....	6
1.3 Objetivos.....	6
1.4 Objetivos particulares.....	6
1.5 Alcances y limitaciones.....	6
1.6 Impacto esperado.....	7
<b>2. ANTECEDENTES (ESTADO DEL ARTE).....</b>	<b>8</b>
2.1 Hidrodinámica de un reactor de lecho escurrido.....	8
2.1.1 Caída de presión.....	8
2.1.2 Modelos basados en la forma de la ecuación de Ergun.....	9
2.1.3 Holdup.....	9
2.2 Parámetros hidrodinámicos de un reactor de lecho escurrido.....	10
2.2.1 Regímenes de flujo.....	11
2.2.1.1 Regímenes de flujo de lecho escurrido.....	12
2.2.1.2 Regímenes de flujo de pulso.....	13
2.2.1.3 Regímenes de flujo de spray.....	13
2.2.1.4 Regímenes de flujo de burbuja.....	13
2.2.2 Transición de flujos de regímenes.....	13
2.3.3 Efectividad del catalizador.....	14
2.3.4 Mojado de las partículas de catalizador.....	15
2.3.5 Estimación del factor de mojado.....	17
2.3.6 Efecto del mojado sobre la velocidad de reacción.....	18
<b>3. METODOLOGÍA.....</b>	<b>21</b>
3.1 Diseño, enfoque y alcances.....	21
3.2 Cálculos.....	28
3.2.1 Determinación de la distribución de fases.....	40
3.2.1.1 Criterio de la velocidad.....	40

3.2.1.2 Criterio de la presión .....	41
3.2.1.3 Criterio de las fuerzas de interacción.....	42
<b>4. ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS .....</b>	<b>43</b>
<b>5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES .....</b>	<b>52</b>
<b>6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>53</b>
<b>7. ANEXO.....</b>	<b>54</b>

# 1. INTRODUCCIÓN

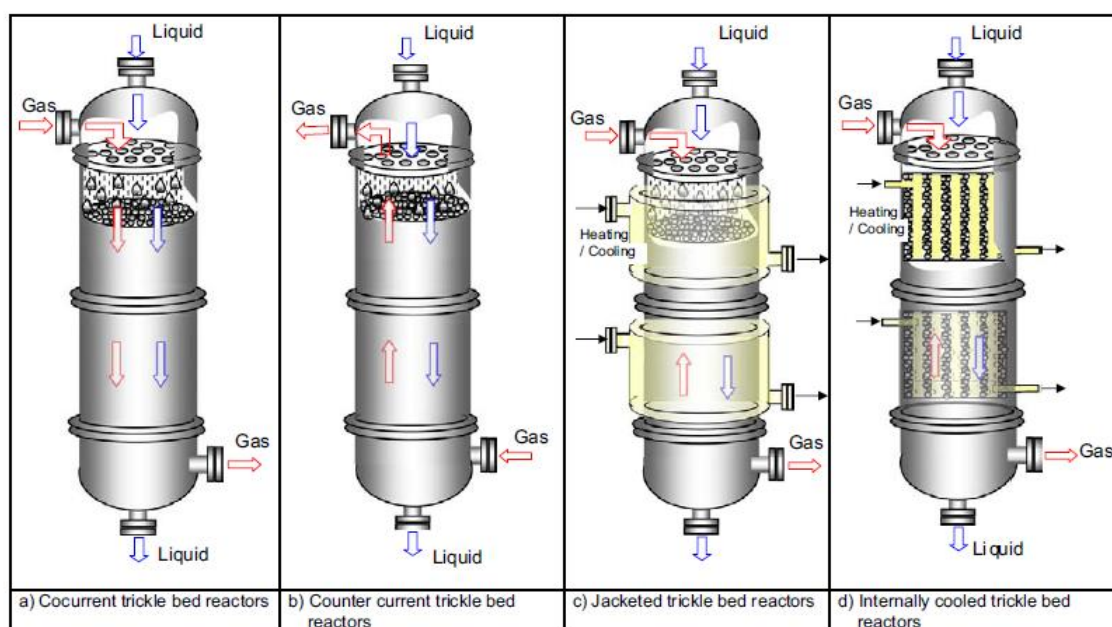
## 1.1 INTRODUCCIÓN

En la actualidad, utilizamos y consumimos con más frecuencia de lo que imaginamos el petróleo y sus derivados (Wauquier, 2004). Si la fracción hidrocarbúrica está destinada a usarse como combustible para nuestros automóviles o motocicletas, en la combustión resultará que cualquiera de los componentes sulfurados como anídrido sulfuroso ( $SO_2$ ) y anídrido sulfúrico ( $SO_3$ ), se transformarán en ácido sulfuroso ( $H_2SO_3$ ) o ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ) que son gases no sólo corrosivos, y que son dañinos para el medio ambiente por formación de lluvia ácida. Es por ello por lo que es necesario quitar tanto como sea posible del contenido de azufre de las fracciones hidrocarbúricas derivadas del petróleo bruto, tales como las fracciones de gasolina, combustible Diesel, gasóleos y similares (De Monroy, C. ,2000). Lo anterior, se realiza mediante el proceso de hidrot ratamiento de corrientes de petróleo, y más en concreto a partir de proceso de hidrodesulfuración (HDS), el cual permite remover contaminantes tales como azufre, nitrógeno, metales u oxígeno de las fracciones del petróleo, que de no ser removidos podrían tener efectos negativos sobre el equipo, los catalizadores y la calidad final del producto (Scott Fogler, 2006). Gracias al uso de hidrógeno también se pueden “romper” las pesadas moléculas de petróleo para obtener combustibles más livianos y de mayor valor comercial, este proceso conocido como “crackeo” con hidrógeno, no sólo mejora la calidad y el octanaje de los combustibles sino que también reduce las emisiones de gases contaminantes como dióxido de azufre, dióxido de nitrógeno y monóxido de carbono, que resultan del uso de combustibles en vehículos, aviones, ferrocarriles, barcos, plantas de gas, hornos residenciales e industriales, etc (Newbery , J. y Thierry, J (2007).

Por otra parte, hoy en día existen límites legales que determinan el contenido máximo permitido de algunas impurezas como, por ejemplo, el azufre (Wauquier, J. ,2004), las cuales se vuelen cada vez más estrictas y que obligan al mejor entendimiento de lo que tienen lugar en los reactores multifásicos de proceso y es de particular interés la distribución de fases y la eficiencia de mojado, ya que este parámetro está ligado a la velocidad de transporte de los reactivos hacia los sitios activos en donde se lleva a cabo la reacción y por lo tanto está directamente ligada a la velocidad de reacción.

En la industria existen múltiples tipos de reactores, cuyas configuraciones básicas se muestran a continuación, donde se pueden clasificar en 3 tipos como se indica en la figura 1.1:

- Los reactores convencionales de lecho escurrido: comprende un lecho lleno de partículas porosas de catalizador.
- Reactores semi-estructurados: lleno de partículas recubiertas o con un catalizador en el embalaje estructurado o monolito reactores que comprende gran número de pequeños canales recubierto con una capa de catalizador.
- Reactores de micro-goteo de lecho: comprende una serie de micro-canales llenos con las partículas con catalizador (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011)



**Figura 1.1** Configuraciones de reactores basadas en su tipo de operación (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011)

La mayoría de los procesos de hidrotratamiento de la industria del petróleo (hidrodesulfuración (HDS), hidrodeutrogenación, y hidrodesmetalización, etc) se llevan a cabo en reactores empacados de lecho escurrido, y trifásicos. En ellos hay muchos aspectos que tienen un efecto importante en su comportamiento; la configuración y características del flujo, etc., y pueden operar con flujo a contracorriente, ascendente a co-corriente y descendente a co-corriente. En este tipo de sistemas, existe un flujo continuo de gas y de líquido fluyendo descendentemente sobre un lecho fijo de partículas sólidas catalíticas; y es sabido que las características de las partículas sólidas y de su empaquetamiento, junto con los caudales y propiedades de las dos corrientes de fluidos determinarán el régimen de flujo del reactor y también sus propiedades fluido-dinámicas (Mendiburu Díaz, 2001). En este tipo de sistemas, es común que la reacción ocurra en fase líquida sobre la superficie del sólido y en donde el reactivo en fase gas se adsorbe con el líquido.

La gran escala de la industria de refinación de petróleo hace que el reactor de lecho escurrido sea uno de los tipos de reactores más importantes en función al tonelaje. Germain et al. (1979) concluyeron que el lecho escurrido, ofrece distintas ventajas de flujo casi ideal, alta carga de catalizador por unidad de volumen de líquido, baja disipación de energía y una mayor flexibilidad en la velocidad de producción y las condiciones de operación en comparación con otros tipos de reactores multifásicos. Las principales desventajas son los problemas potenciales con reacciones altamente exotérmicas, y la renovación frecuente del catalizador con catalizadores de desactivación rápida.

Por otra parte, el comportamiento hidrodinámico de estos reactores es muy complejo, debido a la intervención de muchos factores, entre los cuales se encuentra la posibilidad de un mojado incompleto del catalizador, múltiples morfologías de flujo, entre otros; afectando de manera directa la efectividad de la reacción, así como a la generación de un porcentaje de desperdicio de partículas catalíticas por su mal aprovechamiento durante la reacción debido a su bajo rendimiento y eficiencia, ocasionando pérdidas económicas muy importantes, y/o contaminación, con un análisis adecuado para mejorar el proceso de HDS y hacerlo más rentable. Además la hidrodesulfuración (HDS) catalítica de gasóleo ligero está sometida a mejoras continuas, debido a la creciente demanda del diesel y el incremento de las

restricciones ambientales para reducir la emisión de gases contaminantes como dióxido de azufre, dióxido de nitrógeno y monóxido de carbono, que resultan del uso de combustibles en vehículos; por lo que la mejora de la eficiencia del proceso de HDS es una demanda cada vez más alta. Por lo tanto, la incorporación de estos efectos/fenómenos a través del análisis de las partículas catalíticas, permitirá generar los conocimientos necesarios para mejorar la eficiencia de este proceso.

Scott Fogler (2006) señala que la hidrodesulfuración (HDS) es un proceso destinado a eliminar el azufre (impureza contaminante) que se encuentra en las fracciones del petróleo (después de diversos procesos, como destilación fraccionada, por presión reducida, reformado, o desintegración catalítica), su nivel depende de varios factores, entre ellos la naturaleza de la fracción de petróleo a tratar (composición y tipos de compuestos de azufre presentes), de la selectividad y actividad del tipo de catalizador utilizado (concentración de sitios activos, propiedades del soporte), de las condiciones de reacción (presión, temperatura, relación hidrocarburo/hidrógeno) y del diseño del proceso. El  $H_2S$  debe ser continuamente removido porque es un inhibidor de las reacciones de HDS y envenena el catalizador.

Este proceso consta en tratar el combustible en forma combinada con hidrógeno, alta temperatura y catalizadores. De esta manera, se obtiene el combustible limpio de impurezas (libre de azufre) y un gas llamado ácido sulfhídrico ( $H_2S$ ). El sistema de reacción consta usualmente de reactores empacados de tres fases, llamados así porque se encuentran presentes la fase líquida (gasóleo), la fase gas ( $H_2$  y  $H_2S$ ) y la fase sólida (catalizador). Estos son operados a co-corriente, es decir, la fase líquida y gas fluyen en la misma dirección y la masa de catalizador se mantiene fija.

Es necesario desulfurar el petróleo y los combustibles derivados, ya que pueden verse obstaculizados los procesamientos posteriores porque los componentes sulfurados pueden afectar negativamente el rendimiento de un catalizador. Las corrientes del petróleo (naftas, keroseno, gasóleos ligeros y pesados) contienen una gran cantidad de compuestos orgánicos de azufre, tales como el tiol, tiofeno, benzotiofeno, dibenzotiofeno y naftodibenzotiofeno. Estos compuestos varían en su reactividad a la HDS y en su proporción en las corrientes del

petróleo (Carberry, 1976). Si la fracción hidrocarbonada está destinada a ser usada como combustible, en la combustión resultará que cualquiera de los componentes sulfurados como anhídrido sulfuroso ( $SO_2$ ) y anhídrido sulfúrico ( $SO_3$ ), se transformarán en ácido sulfuroso ( $H_2SO_3$ ) o ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ) que son gases corrosivos, y que son dañinos para el medio ambiente por formación de lluvia ácida. Es por ello, por lo que es necesario quitar tanto como sea posible del contenido de azufre de las fracciones hidrocarbonadas derivadas del petróleo bruto, tales como las fracciones de gasolina, combustible Diesel, gasóleos y similares (De Monroy, 2000).

Los compuestos con contenido de azufre que son cíclicos son más difíciles de hidrogenar que los compuestos de cadena abierta y, cuanto mayor sea el número de anillos que están presentes, tanto mayor será la dificultad para partir los enlaces de carbono-azufre. Además de la presencia de óxidos de azufre en los gases de combustión de los combustibles hidrocarbonados, se cuentan otros componentes ambientalmente perjudiciales de tales gases de combustión hidrocarburos aromáticos, que pueden estar presentes debido a una combustión incompleta, y partículas carbonosas que a menudo contienen hidrocarburos aromáticos policíclicos, compuestos metálicos, materiales orgánicos oxigenados y otros materiales potencialmente tóxicos. Debido a la actual preocupación en torno a la contaminación, están siendo en todo el mundo aplicados por diversas legislaciones nacionales límites cada vez más rigurosos a los niveles de impurezas permitidos en los combustibles hidrocarbúricos, tales como el combustible Diesel (Wauquier, 2004).

Por lo anterior, este trabajo propone un método para determinar la distribución de las 2 fases presentes alrededor de los pellets catalíticos, mediante el análisis del comportamiento hidrodinámico de la reacción de hidrosulfuración, para obtener la eficiencia de mojado sobre las partículas del catalizador a través de la definición de las características y dimensiones de la superficie cubierta por una película de líquido y gas, que nos permita comprender mejor, el comportamiento de un reactor de lecho escurrido para éste proceso y mejorar así su eficiencia, rendimiento y rentabilidad y evitar pérdidas económicas importantes.

## **1.2 HIPÓTESIS**

Es posible determinar la distribución de las 3 fases (líquido-gas-catalizador) presentes en un reactor de lecho escurrido y obtener las características y dimensiones de la superficie cubierta por una película de líquido y gas que rodea a una partícula catalítica en un medio poroso para un proceso de HDS mediante el análisis de los parámetros hidrodinámicos para determinar la eficiencia de mojado y mejorar su rendimiento.

## **1.3 OBJETIVOS**

El objetivo principal de este trabajo es determinar la distribución de las 2 fases alrededor de los pellets catalíticos (líquido-gas) de un reactor de lecho percolado, para proceso de hidrodesulfuración, mediante el análisis de los resultados de las simulaciones del comportamiento hidrodinámico del modelo de flujo de dos fases fluidas moviéndose a través de un lecho empacado de un modelo de reactor constituido de 14 capas de tres pellets esféricos catalíticos por cada una y la obtención de la eficiencia de mojado.

## **1.4 OBJETIVOS PARTICULARES**

- 1) Determinar la eficiencia del mojado en un pellet catalítico.
- 2) Determinar la distribución de las 2 fases presentes en los pellets catalíticos (gas-líquido).
- 3) Conocer el factor de efectividad de la reacción y determinar la influencia de la presencia de partículas catalíticas en el reactor y establecer que porcentaje de ellas se está desperdiciando.

## **1.5 ALCANCES Y LIMITACIONES**

Los resultados están limitados a la validez de las ecuaciones de transporte promedio de momento en un marco de referencia Euleriano, y para un sistema donde ambas ecuaciones de transporte para las fases fluidas tienen como dominio la región intersticial del lecho catalítico. El análisis de la hidrodinámica está limitado al uso del modelo de Gidaspow/Attou/Gidaspow (Attou, et al., 1999, Gidaspow D, 1994) para las fuerzas de interacción entre las fases sólido-

líquido, gas-líquido y sólido-gas respectivamente y un lecho catalítico constituido por catorce capas de tres catalizadores esféricos cada una. Por otra parte, se realizó la determinación de la capa límite del resultado de la simulación en CDF a partir del análisis del nivel de interacción entre las fases en las cercanías de los pellets, por lo que una comparación con otros resultados es deseable

## **1.6 IMPACTO ESPERADO**

A largo plazo, este trabajo generará un impacto ambiental y económico; el primero es de suma importancia ya que diariamente utilizamos y consumimos el petróleo y sus derivados (fracciones de gasolina, Diesel, etc.) y durante su combustión se generan gases corrosivos y dañinos para el medio ambiente porque contienen compuestos sulfurados, generando lluvia ácida, es por ello por lo que es necesario quitar tanto como sea posible el contenido de azufre de las fracciones de hidrocarburos, y el segundo repercute directamente a la industria del petróleo donde se lleva a cabo el proceso de hidrotratamiento, refinamiento y mejora de productos derivados del petróleo, debido a que se puede lograr la implementación de soluciones viables para evitar pérdidas monetarias, hacer más eficiente y rentable el proceso de hidrosulfuración y mejorar su rendimiento. De manera más inmediata, nos permitirá obtener información respecto a si es posible obtener características de la distribución de fases alrededor de los pellets y de la eficiencia local de mojado a partir de la hidrodinámica de un modelo de ecuaciones promedio de transporte de momento como el mencionado con anterioridad.

## **2. ANTECEDENTES (ESTADO DEL ARTE)**

### **2.1 HIDRODINÁMICA DE UN REACTOR DE LECHO ESCURRIDO**

La hidrodinámica de reactores de lecho escurrido ha recibido considerable atención en la literatura desde que Larkindns et al. (1961) publicaron el primer modelo empírico para predecir la caída de presión y almacenamiento (retención) del líquido (holdup). Extensos comentarios han sido publicados recientemente en la hidrodinámica de reactores de lecho escurrido (Dudukovic y Mills, 1986; Ramachandran et al, 1987; Ramachandran y Chaudhari, 1983). El método más utilizado para la estimación del régimen de flujo se basa en el empleo de mapas de régimen de flujo, los cuales fueron propuestos por varios autores (Sweeney (1967; Baker, 1954) y en el que las coordenadas reflejan caudales de fase y propiedades de fase.

#### **2.1.1 Caída de presión**

Por otra parte, la predicción exacta de la caída de presión en los lechos escurridos es importante en la estimación de la presión necesaria de alimentación, holdup del líquido, las zonas interfaciales de gas-líquido y los coeficientes de transferencia de masa. Algunos autores

reportan correlaciones distintas para los diferentes regímenes de flujo (Sweeney, 1967; Specchia y Baldi, 1977; Saez y Carbonell, 1985; Ellman et al 1988). Otros autores informan de una sola correlación para todos los regímenes de flujo (Larkins et al, 1961; Turpin y Huntington, 1967; Charpentier et al, 1969; Sato et al, 1973b; Midoux et al, 1976).

### **2.1.2 Modelos basados en la forma de la ecuación de Ergun**

Cada modelo se puede clasificar aún más por el enfoque adoptado en su desarrollo, el enfoque de la ecuación de Ergun modificado se basa en una visión del lecho empacado como un conjunto de capilares. Estos modelos tienen la misma base teórica de la ecuación de Ergun, una ecuación muy utilizada para determinar la caída de presión del flujo en una sola fase de en lechos de relleno. Sin embargo, los modelos de flujo de dos fases actuales que tienen la forma de una ecuación de Ergun modificado han sido derivados por los argumentos empíricos y no por el modelado de flujo de dos fases en la partícula o la escala de poro.

### **2.1.3 Holdup**

La predicción exacta de almacenamiento del líquido es de utilidad para predecir la carga de catalizador por unidad de volumen de líquido, área interfacial gas-líquido, coeficientes de transferencia de calor en la pared, y el grado de mezcla de líquidos a lo largo de la longitud del reactor. Los modelos para la predicción de almacenamiento del líquido en el régimen de interacción gas - líquido se pueden separar en tres clases:

- 1) Correlaciones basada en los trabajos de Davison (Davidson et al., 1959) para películas laminares de líquido sobre placas inclinadas.
- 2) Fórmulas sobre la base de los parámetros empíricos utilizados para la correlación de caída de presión (Larkins et al, 1961; Sato et ai, 1973; Midoux et al, 1976).
- 3) Formas de la ecuación de Ergun (flujo monofásico en lecho relleno) para percatarse de la existencia de otra fase fluida modificada. Se consideran válidos sólo para el régimen de baja interacción. ( Sweeney,1967 ; Specchia y Baldi,1977 ; Saez y Carbonell ,1985 )

## 2.2 PARÁMETROS HIDRODINÁMICOS DE UN REACTOR DE LECHO ESCURRIDO

Los flujos patrones dentro de un reactor de lecho escurrido dependen fundamentalmente de la densidad de compactación, del gas y la velocidad del líquido, el tamaño de la partícula y las propiedades físicas de la fase líquida. Los parámetros hidrodinámicos se obtienen generalmente a partir de experimentos de flujo en frío a una escala mucho más pequeña que la escala real empleados en la industria. Los datos experimentales utilizados para desarrollar correlaciones apropiadas para el establecimiento de relaciones con los parámetros de diseño y operación están a menudo basados en el modelo de agua-aire y por lo tanto, sus aplicaciones a otros sistemas deben hacerse con mucho cuidado (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011). En la Tabla 2.2.1 se mencionan las definiciones más utilizadas para calcular los principales parámetros hidrodinámicos (Warner van der, 2007).

**Tabla 2.2.1** Definiciones de parámetros hidrodinámicos

<i>Parameter</i>	<i>Notation</i>	<i>Definition</i>
Liquid hold up (liquid saturation)	$\mathcal{E}_L$ ( $\beta_L$ )	Volume of liquid in the bed as a fraction of the total bed volume.
Pressure drop	$\frac{\Delta P}{\Delta z}$	Two-phase pressure drop per unit bed length
Wetting efficiency	$f$	The fraction of the external solid surface area that is wetted by the liquid.
Gas-liquid mass transfer coefficient	$k_{GL}\alpha_{GL}$	Volumetric gas-liquid mass transfer coefficient
Liquid-solid mass transfer coefficient	$k_{LS}\alpha_{LS}$	Volumetric gas-liquid mass transfer coefficient (including the liquid-solid mass transfer area)
Liquid phase axial dispersion	$D_{AX}$	A measure of the mixedness of the liquid phase obtained from residence time distribution analysis.
Liquid maldistribution factor	$M$	A measure of the cross-sectional distribution of the liquid in the bed

### 2.2.1 Regímenes de flujo

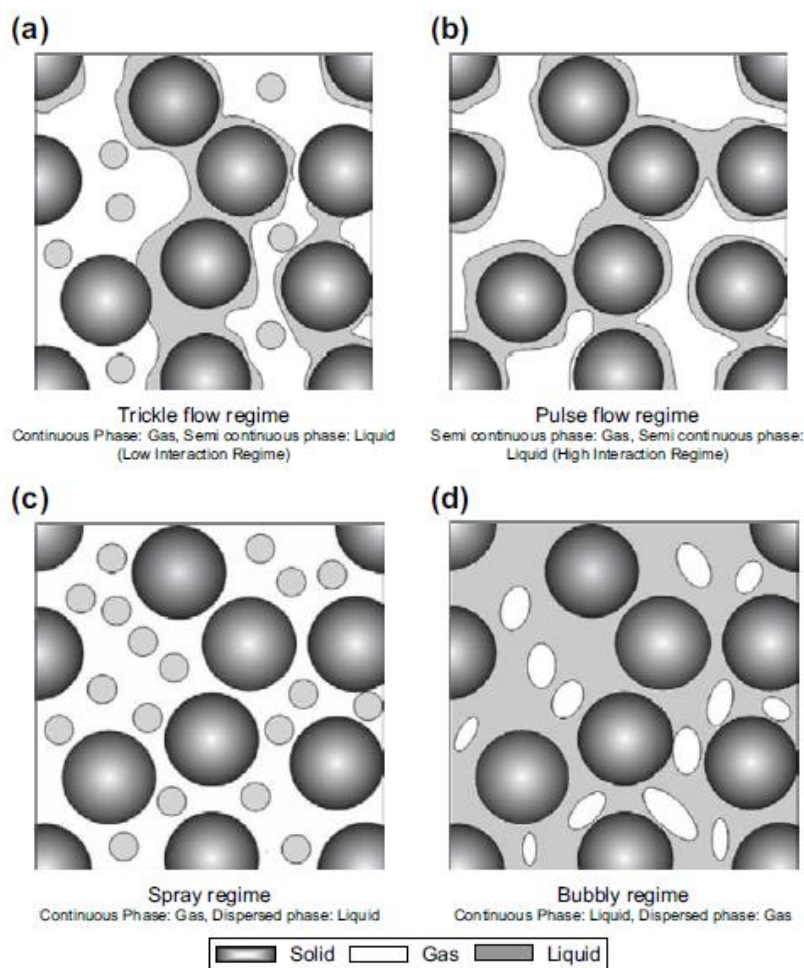
En los reactores de lecho escurrido, existen por lo menos 4 regímenes diferentes de flujo (Charpentier, Bakos, y Le Goff, 1971). Los límites de transición entre los diferentes regímenes se deben identificar con precisión, ya que a menudo los reactores de lecho escurrido trabajan a estos límites. La hidrodinámica y el transporte de varios parámetros, tales como la caída de presión, atraco fracción volumen del líquido, mojado de las partículas, la transferencia de masa en la interface, los coeficientes de transferencia de calor y el área interfacial son considerablemente afectados por el régimen de flujo predominante. Existen diferentes métodos, modelos y correlaciones para estimar los parámetros hidrodinámicos y de transporte en diferentes regímenes de flujo de reactores de lecho escurrido (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011).

La transición de un flujo laminar a un flujo turbulento característico del lecho escurrido es difícil de identificar y ocurre en un rango específico del número de Reynolds. Se asume un flujo completamente turbulento con un número de Reynolds mayor a 1000. El régimen de flujo dominante, es función de diversos parámetros como las dimensiones del reactor, el tamaño y forma de las partículas, el método de embalaje y las propiedades termo-físicas de la fase líquida y gaseosa (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011). Una clasificación más amplia de los flujos en los reactores de lecho escurrido se basa en la naturaleza del flujo de acuerdo a sus fases individuales, los cuales pueden ser: continuo, discontinuo y flujo disperso (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011).

De acuerdo a Ramanchandran y Chaudhari (1983) pueden ser identificados 4 tipos diferentes de regímenes de flujo en los reactores de lecho escurrido:

- Regímenes de lecho escurrido
- Regímenes de flujo de pulso
- Regímenes de spray
- Regímenes de burbuja

Los cuales se muestran en la figura 2.2.1.1, donde encuentran las características típicas de los regímenes de flujo.



**Figura 2.2.1.1** Regímenes de flujo en reactores de lecho escurrido (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011)

### 2.2.1.1 Regímenes de flujo de lecho escurrido

Este tipo de flujo se da en presencia de tasas bajas de flujo de fluido y gas, donde los flujos del líquido forman películas en las partículas del catalizador y en el momento donde el fluido líquido baja, las fuerzas de inercia son más débiles en comparación con las fuerzas superficiales locales que son controladas principalmente por la presión capilar. Sin embargo, a velocidades de flujo más alta, las fuerzas intersticiales son más importantes en comparación de las fuerzas interfaciales (adherencia de capilaridad), resultando en la formación de una película sobre la superficie del catalizador. Una baja caída de presión nos da un bajo rendimiento gas-líquido y menor desgaste de catalizador. El Mojado de las partículas puede ser ventajoso o desventajoso, según el tipo de reacción. Los índices de calor y

transferencia de masa son menores en comparación con los regímenes de flujo. Es muy útil en los casos de que deseemos aumentar la conversión y la productividad (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011).

#### **2.2.1.2 Regímenes de flujo de pulso**

La transición del flujo de lecho escurrido al régimen de flujo de pulso ocurre cuando hay un aumento en el caudal del gas o en el flujo del líquido. Los regímenes de flujo tienen ventajas en términos del mojado, la utilización eficaz de lecho del catalizador, el calor elevado y la tasa de transferencia de masa (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011).

#### **2.2.1.3 Regímenes de spray**

De acuerdo a Ramachandran y Chaudhari (1983) bajo ciertas condiciones, cuando existen tasas altas de flujo de gas y tasas bajas de flujo de líquido; la fase líquida pierde su carácter semi-permanente. Éste régimen es llamado “caudal de pulverización”, el cual es difícil identificar y medir el límite exacto entre el flujo de lecho escurrido y los regímenes de caudal de pulverización.

#### **2.2.1.4 Regímenes de burbuja**

Con gases de tasa alta de flujo y líquidos de tasa baja de flujo, el líquido ocupa toda la región del vacío en el espacio del lecho y se convierte en una fase continua. El gas fluye como una fase dispersa en forma de burbujas (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011).

### **2.3.2 Transición de flujos de regímenes**

En la práctica industrial, los reactores se operan cerca del límite de la transición de flujo. Existen correlaciones relevantes con las cuales podemos estimar la transición de regímenes de flujo, las cuales se muestran en la Tabla 2.3.2.1 (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011).

**Tabla 2.3.2.1** Correlaciones para la estimación de la transición de regímenes de flujo del reactor de lecho escurrido para regímenes de flujo de pulso (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011)

Author	Correlations
Larachi, Laurent, Wild, and Midoux (1993)	
$\Phi = \frac{1}{4.76 + 0.5 \frac{\rho_G}{\rho_a}}$ $\psi = \frac{\sigma_W}{\sigma_L} \left( \frac{\mu_L}{\mu_W} \right)^{1/3} \left( \frac{\rho_W}{\rho_L} \right)^{2/3}$	$\frac{L_t \lambda \psi \Phi}{G} = \left( \frac{G}{\lambda} \right)^{-1.25}$
Wang, Mao, and Chen (1994)	$L_t \lambda \psi = 4.864 \left( \frac{G}{\lambda} \right)^{-0.337}, \quad \frac{G}{\lambda \varepsilon} = 1$
Dudukovic and Mills (1986)	$L_t = \min \left[ \frac{10^3 G}{\lambda \psi}, 5.43 \frac{\varepsilon}{\psi} \left( \frac{\lambda \varepsilon}{G} \right)^{0.22} \right]$
Bansal et al. (2005)	
where,	
$S_1 = \frac{a_s d_p}{\varepsilon} \quad \text{and} \quad S_2 = \left( \frac{1}{d_{ps}} \right)^{\frac{1}{\phi}}$	For Newtonian liquid phase
$\frac{L_t \lambda \psi \phi}{G} = \left( \frac{G}{\lambda} \right)^{-1.25}$	$\left( \frac{L_t}{G} \right) \lambda \xi \left( \frac{S_2}{S_1^2} \right)^{1/4} = 5.73 \left( \frac{G}{\lambda \varepsilon} \right)^{-4/3}$
$We = \lambda_{\text{eff}} \dot{\gamma}_W$	For non-Newtonian (visco-inelastic) liquid phase
$\dot{\gamma}_W = \frac{3n+1}{4n} \frac{8V_0}{\varepsilon D_e} \frac{k_i}{2}, \quad \lambda_{\text{eff}} = \frac{N_1}{2\dot{\gamma}\tau}$	$\left( \frac{L_{t,vi}}{G} \right) \lambda \xi' \left( \frac{S_2}{S_1^2} \right)^{1/4} = 5.73 \left( \frac{G}{\lambda \varepsilon} \right)^{-4/3}$
	For non-Newtonian (visco-elastic) liquid phase
	$L_{t,ve} = L_{t,ve} (1 + \sqrt{2} We^{-2})$

### 2.3.3 Efectividad del catalizador

En los reactores de lecho escurrido las limitaciones difusionales intrapartícula juegan un papel importante en la velocidad efectiva de reacción debido a los tamaños de partícula utilizados. Cuando éstas están completamente bañadas por un líquido de composición homogénea, el factor de efectividad,  $\eta$ , puede calcularse según el método convencional a partir del módulo de Thiele generalizado,  $\phi$ . La expresión para el cálculo de  $\phi$  depende de la ecuación cinética y de la forma del catalizador.

En un reactor de lecho escurrido pueden existir zonas en las que el líquido no está suficientemente renovado o bien zonas en las que la superficie del catalizador no está completamente bañada por el líquido. Esto es particularmente cierto para bajas velocidades superficiales del líquido. La evaluación cualitativa de cómo y cuándo afecta el mojado parcial a la efectividad del catalizador ha sido expuesto por varios autores (Satterfield, 1975; Herskowitz y Smith, 1983; Funk *et al.*, 1991, entre otros). En general, se acepta que la efectividad aumenta con el mojado parcial para sistemas en los que el reactivo limitante es volátil (reacciones de hidrogenación y oxidación) y la resistencia a la transferencia de materia líquido partícula es comparable a la resistencia por difusión interna (Sedriks y Kennedy, 1973; Morita y Smith, 1978, Herskowitz *etal*, 1979; Tan y Smith, 1980; Mata y Smith, 1981, Biscaia y Cid, 1986; Leung *et al*, 1987b; Haure *et al*, 1990). Si el reactivo limitante es no volátil como ocurre, por ejemplo, en la hidro-desulfuración e hidro-tratamiento de fracciones pesadas, el efecto observado es el contrario (Bondi, 1971; Montagna, 1977; van Klinken y van Dongen, 1980; Beaudry *et al* 1986; Chao *et al* 1990). La evaluación cuantitativa de la efectividad del catalizador en condiciones de mojado parcial implica la integración de las ecuaciones de flujo de materia hacia el interior de la partículas para condiciones de contorno no simétricas. Para evitar este inconveniente, algunos autores han propuesto modelos simplificados.

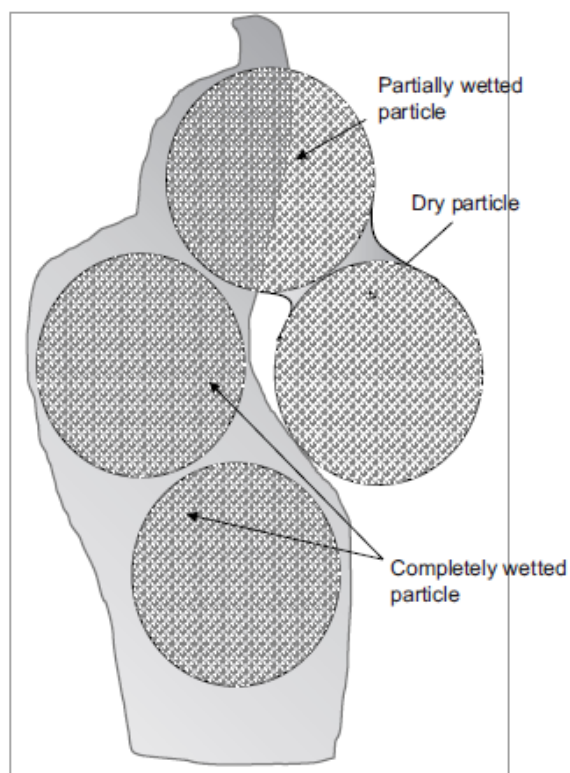
En cualquier caso, la evaluación de la efectividad global del catalizador requiere poder estimar el factor de mojado del catalizador. Se explican a continuación los trabajos existentes sobre la estimación del factor de mojado y los modelos propuestos para cuantificar su efecto sobre la efectividad del catalizador.

#### **2.3.4 Mojado de las partículas del catalizador**

En los reactores de lecho escurrido, el grado de mojado de las partículas del catalizador (eficiencia de mojado) es otro parámetro importante que se requiere para los cálculos de diseño Ramanchandran y Chaudhari (1983). Entre los diferentes tipos de reactores multifásicos, éste fenómeno es único en los reactores de lecho escurrido y su cuantificación es una tarea bastante difícil. El líquido no fluye de manera uniforme sobre las partículas del catalizador que lleva a diferentes grados de mojado. Existen 2 tipos de fenómenos de mojado de partículas catalíticas, los cuales se pueden observar en los reactores de lecho escurrido: el

mojado externo de las partículas del catalizador y el mojado interno de las partículas. El mojado externo de las partículas es una medida de la fracción de superficie del catalizador cubierta por una película de líquido, mientras que el mojado interno es la fracción del área de la superficie interna del catalizador cubierto por la fase líquida (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011).

En un flujo de régimen de lecho escurrido, el mojado externo es indispensable, mientras que en muchas situaciones internas el mojado no es completo a pesar de los efectos de la capilaridad. Como se muestra en la figura 2.3.4.1, existen diferentes comportamientos del mojado en los reactores de lecho escurrido: la adherencia completa, el mojado parcial e incompleta y el mojado interno de las partículas (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011).



**Figura 2.3.4.1** Comportamiento del mojado de las partículas catalíticas (Ranade, Chaudari y Gunjal, 2011)

### 2.3.5 Estimación del factor de mojado

El factor de mojado interno, fracción del volumen de poros de la partícula conteniendo líquido, suele ser próximo a la unidad excepto para condiciones muy extremas (reacciones fuertemente exotérmicas o velocidades del líquido muy bajas). El factor de mojado externo, fracción de la superficie externa del catalizador en contacto directo con el líquido, suele estar entre 0.6 y 1.0 en condiciones normales de proceso. Cabe destacar que, aunque el error absoluto en la estimación del factor de mojado no sea muy grande, pequeños cambios en  $f$  pueden afectar apreciablemente a la velocidad global de reacción.

La medida indirecta del factor de mojado ha sido abordada a partir de dos métodos diferentes: directamente a partir de datos de efectividad de reacción, o bien mediante la utilización de trazadores. Satterfield (1975), define  $f$  como la relación entre la constante cinética de primer orden medida en el reactor de lecho escurrido y la medida en reactor inundado. A partir de datos de procesos industriales, presenta una banda de valores de  $f$  en función del caudal másico superficial del líquido.

Otros autores han utilizado datos de reacción medidos para dos actividades del catalizador diferentes en sistemas donde el reactivo gaseoso es el limitante (Morita y Smith, 1978; Herskowitz *et al*, 1979; Mata y Smith, (1981); Herskowitz y Mosseri, 1983). A bajos caudales de líquido, se observan discrepancias que pueden atribuirse al efecto del gas sobre el mojado externo (Herskowitz y Smith, 1983).

Los datos obtenidos a partir de la respuesta de trazadores difieren en mayor medida debido a las diferentes definiciones utilizadas. Sicardi *et al.* (1980), definen el factor de mojado como la raíz cuadrada del cociente de las difusividades efectivas. Aunque ninguna de estas definiciones coincide exactamente con la fracción de la superficie externa bañada por el líquido, según Mills y Dudukovic (1981), la de Sicardi *et al.* (1980) confiere una mayor concordancia entre los datos obtenidos con trazadores y los obtenidos a partir de ensayos de reacción.

Mills y Dudukovic (1981), a partir de datos para diferentes sistemas, correlacionan / según la ecuación (2.3.5.1):

$$f = \tanh \left[ 0.664 \text{Re}_L^{0.333} \text{Fr}_L^{0.195} \text{We}_L^{-0.171} \left( a_r \frac{d_p^2}{\varepsilon_B^2} \right)^{-0.0615} \right] \quad (2.3.5.1)$$

Esta correlación predice valores del factor de mojado superiores a los obtenidos a partir de datos de reacción (Leung *et al.* 1987b; Tukac y Hanika, 1989; entre otros). No obstante, debe mencionarse que en la mayoría de los estudios con reacción, el coeficiente de transferencia de materia líquido-partícula está estimado a partir de correlaciones. Para evitar este inconveniente, Ruecker y Akgerman (1987) proponen la obtención del factor de mojado a partir de datos de reacción incluyendo ensayos con  $f = 1$  y ensayos con  $f = 0$ . De esta forma, quedan caracterizados todos los parámetros necesarios para el cálculo de  $f$ , incluyendo los coeficientes de transferencia de materia gas-sólido y líquido-sólido.

Recientemente, Lakota y Levec (1990) han obtenido  $f$  comparando los datos de transferencia de materia en lecho inundado y en lecho escurrido para la disolución de partículas de naftaleno. Sus datos concuerdan con los predichos por la ecuación anterior si se utiliza la velocidad real del líquido.

Ruiz *et al.* (1984) estudian cómo la temperatura y la concentración de reactivo afectan al factor de mojado, poniendo en evidencia la importancia de llevar a cabo experimentos hidrodinámicos en condiciones de reacción. Funk *et al.* (1991), a partir de estudios de reacción en un reactor con una única pastilla de catalizador, demuestran que cuando la velocidad de reacción es rápida, ésta disminuye el grado de mojado del catalizador. Estos autores discuten los posibles mecanismos para explicar la relación entre el grado de mojado y la velocidad de reacción.

### 2.3.6 Efecto del mojado sobre la velocidad de reacción.

El factor de efectividad del catalizador,  $\eta$ , puede calcularse a partir de la integración de las ecuaciones diferenciales de difusión en el seno del catalizador. Cuando el mojado externo es

parcial, las condiciones de contorno, que dependen de las características geométricas de la partícula, de los coeficientes de transferencia de materia (líquido-sólido y gas-sólido) y del factor de mojado, son asimétricas. Herskowitz y Smith (1983) plantean el sistema de ecuaciones y las condiciones de contorno para varias geometrías sencillas. Estos sistemas sólo tienen soluciones analíticas para cinéticas de primer orden irreversibles. Ramachandran y Smith (1979a) proponen una aproximación más sencilla, como lo muestra la ecuación (2.3.6.1), considerando la efectividad de la partícula proporcional, según el factor de mojado, a las efectividades que tendría si estuviese completamente cubierta de líquido o de gas.

$$\eta = f\eta_L + (1-f)\eta_G \quad (2.3.6.1)$$

Siguiendo el mismo principio, Mills y Dudukovic (1980) proponen expresiones de  $\eta$  donde también intervienen el módulo de Thiele y el número de Biot. Las comparaciones llevadas a cabo por diferentes autores entre las soluciones aproximadas y otras más exactas (Tan y Smith, 1980, entre otros) demuestran desviaciones inferiores al 10%, siendo mayores para valores del módulo de Thiele inferiores a la unidad. Para ecuaciones cinéticas no lineales, Goto *et al.* (1981) proponen una ecuación similar, donde  $\eta_L$  y  $\eta_G$  son las soluciones numéricas de las ecuaciones diferenciales de difusión en condiciones simétricas, o bien las calculadas a partir del módulo de Thiele generalizado. Haure *et al.* (1990) estudian la aplicabilidad de diferentes modelos para predecir la oxidación de  $SO_2$  en el reactor de lecho escurrido. Observan que el de Mata y Smith (1981) es el que mejor se ajusta.

Para evaluar la importancia del factor de mojado sobre la efectividad del catalizador en función de magnitudes observables, puede utilizarse el criterio de Lee y Smith (1982).

Beaudry *et al.* (1986) proponen calcular la eficiencia para una pastilla infinita que puede estar mojada por las dos caras ( $\eta_w$ ), por una ( $\eta_{dw}$ ) o por ninguna ( $\eta_d$ ). Para obtener la efectividad media del lecho, consideran que el factor de mojado es la probabilidad de que una cara de la pastilla esté mojada. En consecuencia, la expresión de  $\eta$  es la ecuación (2.3.6.2):

$$\eta = (1-f)^2 \eta_d + 2(1-f)f\eta_{dw} + f^2\eta_w \quad (2.3.6.2)$$

Biscaia y Cid (1986) plantean un modelo numérico que resuelve la ecuación de difusión en el seno de las partículas para condiciones asimétricas por el método de colocación ortogonal. Consideran el catalizador como un paralelepípedo plano y largo con transferencia de materia en dos caras e impermeable en las otras dos. La cinética considerada es de primer orden. La solución de la ecuación diferencial de la pastilla está escrita como combinación de funciones. Esta se resuelve una única vez y se usa en la resolución del sistema de ecuaciones del balance de líquido y gas a lo largo del reactor, multiplicando parámetros que son función de la concentración de los reactivos en el líquido y en el gas. De esta forma, según Biscaia y Cid (1986), se reduce unas cien veces el tiempo de computación comparado con otros métodos clásicos. Chao *et al.* (1990) proponen un modelo semejante.

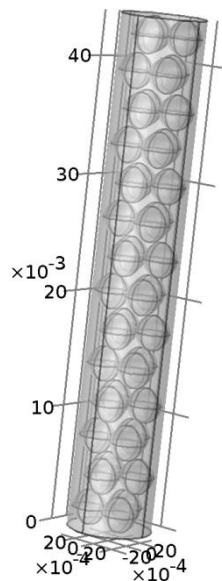
El modelo de Ring y Missen (1986, 1989) considera que tanto la parte mojada como la no mojada están divididas en varias zonas. Estos autores defienden que el modelo multizona predice mejor algunos resultados experimentales para procesos de hidrodesulfuración que los modelos clásicos con dos únicas zonas, mojada y no mojada.

Una vez abordado brevemente los parámetros hidrodinámicos para realizar el análisis de los reactores, como la caída de presión, atraco del líquido, mojado de las partículas, la transferencia de masa en la interface, los coeficientes de transferencia de calor y el área interfacial, existen otros aspectos que forman parte de este análisis, los cuales estudiaremos en el siguiente capítulo como lo es la hidrodinámica de los fluidos donde estudiaremos el modelo matemático de la ecuación de Bernoulli que describe este proceso.

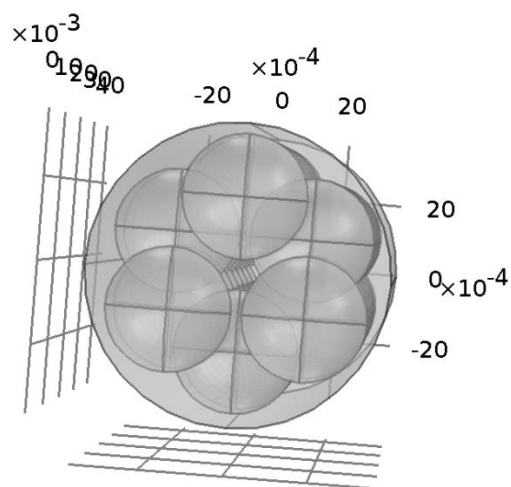
### 3. METODOLOGÍA

#### 3.1 DISEÑO, ENFOQUE Y ALCANCES

Se construyó un modelo de un reactor catalítico heterogéneo para la reacción de hidrodesulfuración constituido por 14 capas de 3 pellets cada uno como se muestra en las figura 3.21.1 y figura 3.1.2, respectivamente; acoplado las ecuaciones de transporte de cantidad de momento (la hidrodinámica) con todos los parámetros correspondientes a la reacción, velocidad y presión de entrada del flujo, dimensiones de cada partícula catalítica y del reactor, densidad y viscosidad de las fases, entre otros.

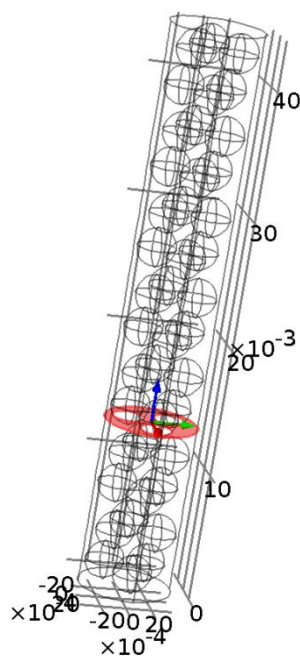


**Figura 3.1.1** Reactor de lecho escurrido para el proceso de hidrodesulfuración (COMSOL Multphysics)

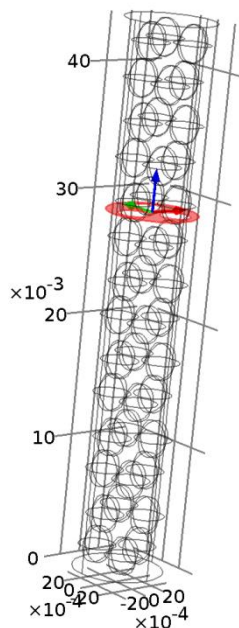


**Figura 3.1.2** Plato con 3 pellets catalíticos (COMSOL Multphysics)

Una vez elaborado el modelado del reactor de lecho escurrido, se realizó la selección de 2 capas de las 14 correspondientes para su análisis, enumeradas de manera ascendente iniciando en la parte inferior de éste, resultando electos el plato número 5 y 10 debido a su lejanía entre ambos, como se muestra en la figura 3.1.3 y 3.1.4, y con fines de reproducibilidad de los criterios fijados para la determinación de la distribución de fases.



**Figura 3.1.3** Selección de platos con pellets catalíticos, plato 5 (COMSOL Multphysics)



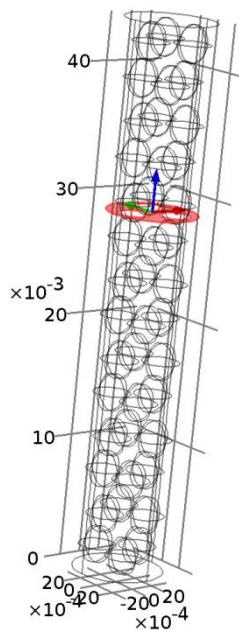
**Figura 3.1.4** Selección de platos con pellets catalíticos, plato 10 (COMSOL Multphysics)

Enseguida se realizaron 2 cortes a los pellets seleccionados, en los planos  $xy$  y  $yz$ , como se muestra en la figura 3.1.5 y la figura 3.1.6 respectivamente; con la finalidad de determinar el patrón de la distribución de fases en cada pellet seleccionado.

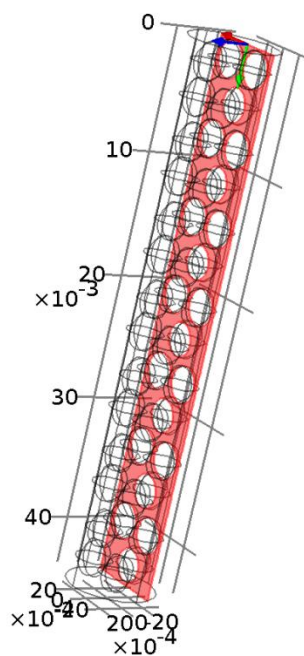
Se realizó un barrido a diferentes distancias de los planos mencionados, en la dirección restante, es decir,  $z$  y  $x$  respectivamente. Las coordenadas de las distancias entre los planos de corte, que permiten un barrido sobre los pellets seleccionados son las mostradas en la tabla 3.1.1:

**Tabla 3.1.1** Datos para la construcción de cada plato

	<i>Plato 5</i>	<i>Plato 10</i>
<i>Plano</i>	<i>Coordenada (m)</i>	<i>Coordenada (m)</i>
$xy$	$10*DIS+4*DP$	$15*DIS+9.0*DP$
$yz$	$-10*DIS$	$3*DIS$



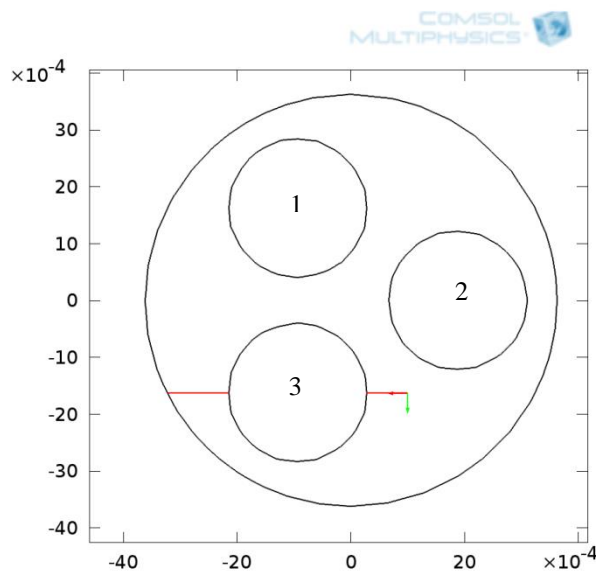
**Figura 3.1.5** Corte a lo largo del reactor en el plano xy (COMSOL Multphysics)



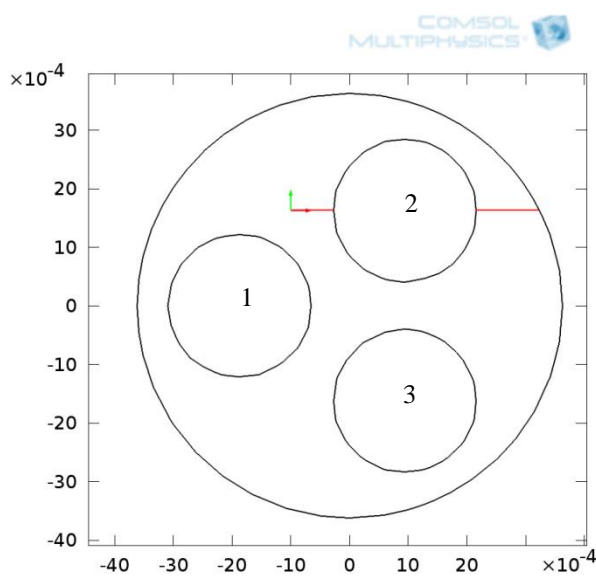
**Figura 3.1.6** Corte a lo largo del reactor en el plano yz (COMSOL Multphysics)

A continuación se eligieron 2 pellets diferentes de cada uno de los layers seleccionados anteriormente, que se encuentran en lados parcialmente opuestos para tener una percepción

distinta de los datos obtenidos. Del plato 5 se eligió el pellet número 3 como se muestra en la figura 3.1.7 y del layer 10 se eligió el pellet número 2 como se muestra en la figura 3.1.8.



**Figura 3.1.7** Pellet número 3 del plato 5 (COMSOL Multihypisics)



**Figura 3.1.8** Pellet número 2 del plato 10 (COMSOL Multihypisics)

Una vez elegido un pellet específico de cada plato se colocaron líneas de trazo alrededor de las esferas dividiéndolas por fracciones desde  $0^\circ$ ,  $22.5^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $67.5^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $112.5^\circ$ ,  $135^\circ$  hasta  $157.5^\circ$ , como se muestra en la figura 3.1.9, para obtener parámetros en estos puntos y obtener

gráficas de su comportamiento hidrodinámico. Las coordenadas de datos para construir las líneas en cada uno de los platos son las que se muestran en las tablas 3.1.2 y 3.1.3:

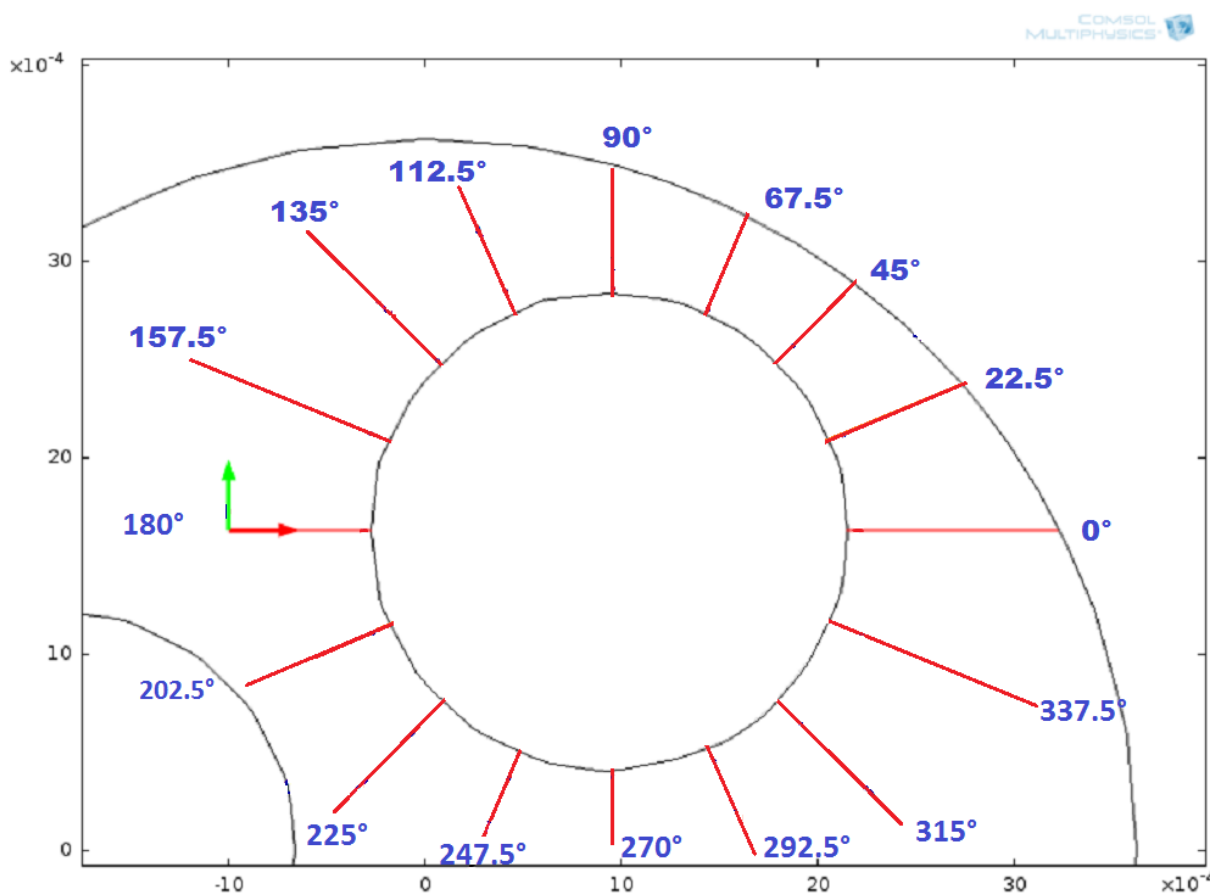
**Tabla 3.1.2** Datos para la construcción de líneas de trazo por fracciones en el plato 5

<i>Plato 5</i>			
<i>Fracción</i>	<i>Punt</i>	<i>Plano xy</i>	<i>Plano yz</i>
		<i>Coordenada (x,y)</i>	<i>Coordenada (x,y)</i>
<i>o</i>			
0°	Inicio	(10e-4, -16.3e-4)	(-0.6e-4, 0.01415)
	Fin	(-DR/2+2*DIS, -16.3e-4)	(35e-4, 0.01415)
22.5°	Inicio	(9e-4, -8e-4)	(-0.7e-4, 0.0134)
	Fin	(-DR/2+2*DIS, -26.5e-4)	(35e-4, 0.0149)
45°	Inicio	(5e-4, -1.5e-4)	(-2e-4, 0.0125)
	Fin	(-DR/2+2*DIS, -40.5e-4)	(33e-4, 0.0158)
67.5°	Inicio	(0,6e-4)	(8e-4, 0.0123)
	Fin	(-DR/2+2*DIS,-72e-4)	(24e-4, 0.016)
90°	Inicio	(-9.5e-4,0)	(16.5e-4, 0.0165)
	Fin	(-9.5e-4,-35e-4)	(16.5e-4, 0.012)
112.5°	Inicio	(-16e-4,-1e-4)	(9e-4, 0.0159)
	Fin	(-3.5e-4,-31e-4)	(25.5e-4, 0.012)
135°	Inicio	(-23e-4,-3e-4)	(2e-4, 0.0155)
	Fin	(3e-4,-29e-4)	(33e-4,0.0125)
157.5°	Inicio	(-28e-4,-8.5e-4)	(0.5e-4, 0.0148)
	Fin	(6e-4,-23e-4)	(35e-4, 0.0134)

**Tabla 3.1.3** Datos para la construcción de líneas de trazo por fracciones en el plato 10

<i>Plato 10</i>			
<i>Fracción</i>	<i>Punt</i>	<i>Plano xy</i>	<i>Plano yz</i>
		<i>Coordenada (x,y)</i>	<i>Coordenada (x,y)</i>
<i>o</i>			
0°	Inicio	(0,0)	(1e-4, 0.0298)
	Fin	(DR/2+2*DIS,0)	(-40e-4, 0.0298)
22.5°	Inicio	(-12e-4,73-4)	(1.5e-4, 0.0305)
	Fin	(DR/2+2*DIS,29e-4)	(-40e-4, 0.02875)
45°	Inicio	(-5e-4,1.5e-4)	(1.5e-4, 0.0315)

	Fin	$(DR/2+2*DIS,46e-4)$	$(-31e-4, 0.0283)$
67.5°	Inicio	$(2.5e-4,0)$	$(-8e-4, 0.0317)$
	Fin	$(DR/2+2*DIS,85e-4)$	$(-24e-4, 0.028)$
90°	Inicio	$((DR/2+2*DIS)/3.95,0)$	$(-16e-4, 0.0317)$
	Fin	$(0,1000e-4)$	$(-16e-4, 0.0277)$
112.5°	Inicio	$(3.5e-4,30e-4)$	$(-24e-4, 0.0316)$
	Fin	$(16e-4,0)$	$(-7.5e-4, 0.0277)$
135°	Inicio	$(25.5e-4,0)$	$(-33e-4, 0.0315)$
	Fin	$(-(DR/2+2*DIS)/0.85,71e-4)$	$(3e-4, 0.0278)$
157.5°	Inicio	$(36e-4,5e-4)$	$(-35e-4, 0.0306)$
	Fin	$(-(DR/2+2*DIS)/0.0168,1000e-4)$	$(2e-4, 0.029)$



**Figura 3.1.9** Líneas de trazo en esferas catalíticas con división por fracciones (COMSOL Multphysics)

Después de realizar las líneas en cada fracción del pellet se graficaron en el software antes mencionado los diferentes parámetros que nos ayudarán a determinar las dimensiones de la película que la rodea y su fase. Los parámetros y variables graficadas fueron:

1. Velocidad del líquido ( $v_L$ )
2. Velocidad del gas ( $v_G$ )
3. Presión del líquido ( $P_L$ )
4. Presión del gas ( $P_G$ )
5. Velocidad de esfuerzo cortante líquido (SRL)
6. Velocidad de esfuerzo cortante gas (SRG)
7. Fuerza resultante del líquido (FL)
8. Fuerza resultante del gas (FG)
9. Coeficiente de interacción de momento GL adimensional modificado (KGL)
10. Coeficiente de interacción de momento SL con dimensiones (KSL)
11. Coeficiente de interacción de momento SG con dimensiones (KSG)
12. Reynolds líquido (RL)
13. Reynolds gas (RG)

Una vez realizadas las gráficas de los parámetros mencionados contra la posición, en COMSOL, se obtuvieron los valores de la derivada de cada variable con la ayuda del software OriginPro 9.0, lo anterior se realizó con la idea determinar la posición para la cual la velocidad de las fases gas y líquido no cambia y están cercanas a cero. Con lo cual pudimos obtener los valores para determinar las dimensiones de la superficie cubierta por la película que rodea a la partícula catalítica y establecer la caracterización de la hidrodinámica de ésta.

## **3.2 CÁLCULOS**

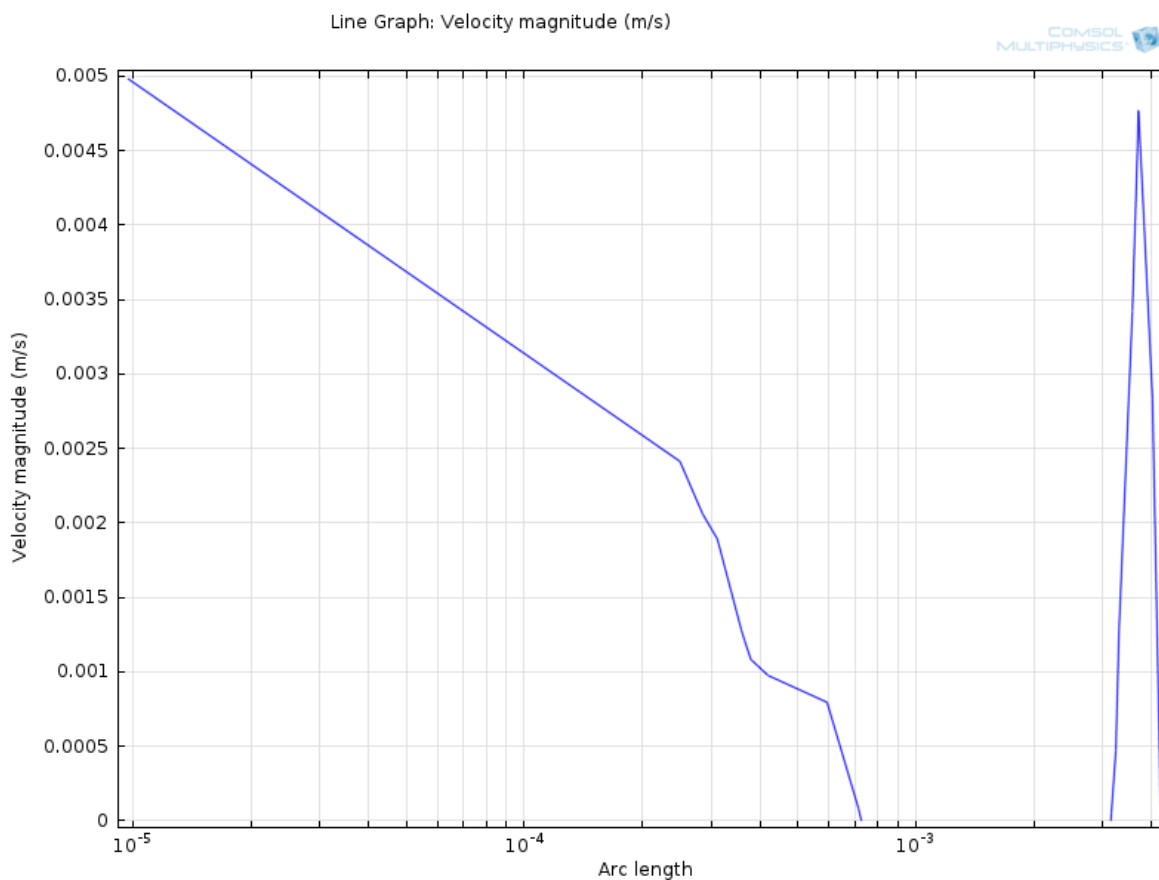
A continuación se muestra un ejemplo del proceso completo para la obtención de los datos para determinar las dimensiones y características de la capa límite del pellet número 2 de la layer 10, en las líneas que están direcciones de  $0^\circ$  y  $180^\circ$  del plano de corte  $xy$  con los

parámetros de la velocidad del líquido y velocidad del gas, y luego siguiendo este mismo proceso con todos los parámetros antes mencionados en los 4 pellets analizados.

En primer lugar se obtuvieron los datos de velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte  $xy$  y su gráfica como se muestra en la tabla 3.2.1 y en la figura 3.2.1:

**Tabla 3.2.1** Datos obtenidos de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte  $xy$ .

<b>Velocidad líquido</b>	
<i>Longitud</i>	<i>Velocidad</i>
0	0.005093413
9.6991E-06	0.004983072
0.000249714	0.002413345
0.000285386	0.002060104
0.000311147	0.001892607
0.000358298	0.00128211
0.000365379	0.001208917
0.000379035	0.001083479
0.0004195	0.000976009
0.000593429	0.000795982
0.000713844	8.33794E-05
0.000726146	5.12433E-19
0.003149063	2.29723E-18
0.003161122	5.59527E-05
0.00324402	0.000475109
0.003306043	0.00128589
0.003575227	0.00341804
0.003575815	0.003423179
0.003576271	0.003427154
0.00368139	0.004489968
0.003703457	0.004769327
0.00370779	0.004765731
0.003744134	0.004538035
0.003833473	0.003991909
0.004025128	0.002833975
0.004228437	9.31352E-18



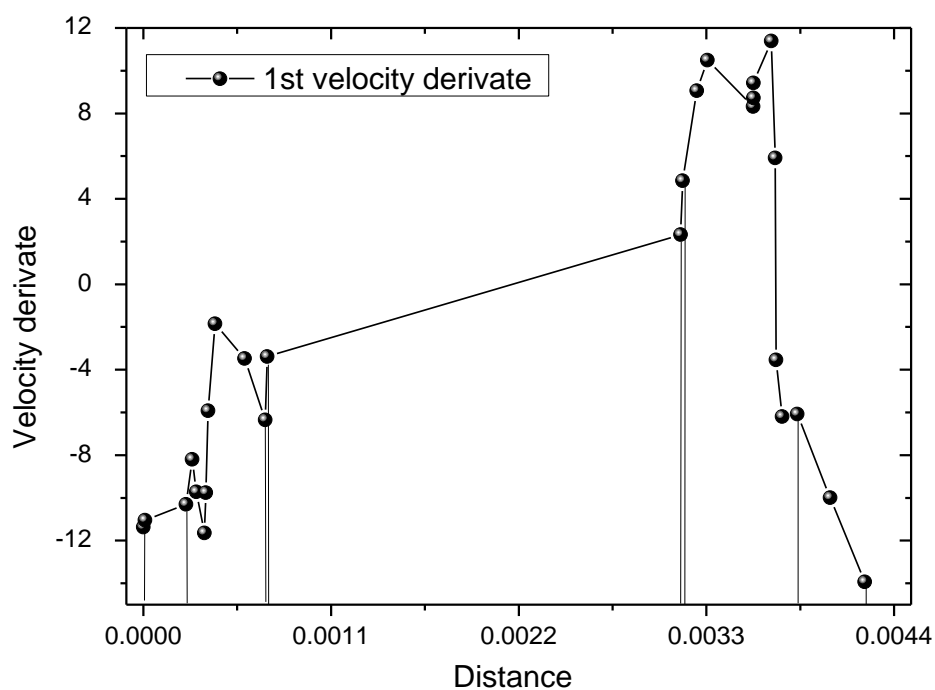
**Figura 3.2.1** Gráfica obtenida de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a  $0^\circ$  y  $180^\circ$  en el plano de corte  $xy$ .

Una vez obtenidos estos datos, se colocaron en el software OriginPro 9.0 para obtener el valor de su derivada y su gráfica como se muestra en la tabla 3.2.2 y en la figura 3.2.2:

**Tabla 3.2.2** Datos obtenidos de los valores de la derivada de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a  $0^\circ$  y  $180^\circ$  en el plano de corte  $xy$ .

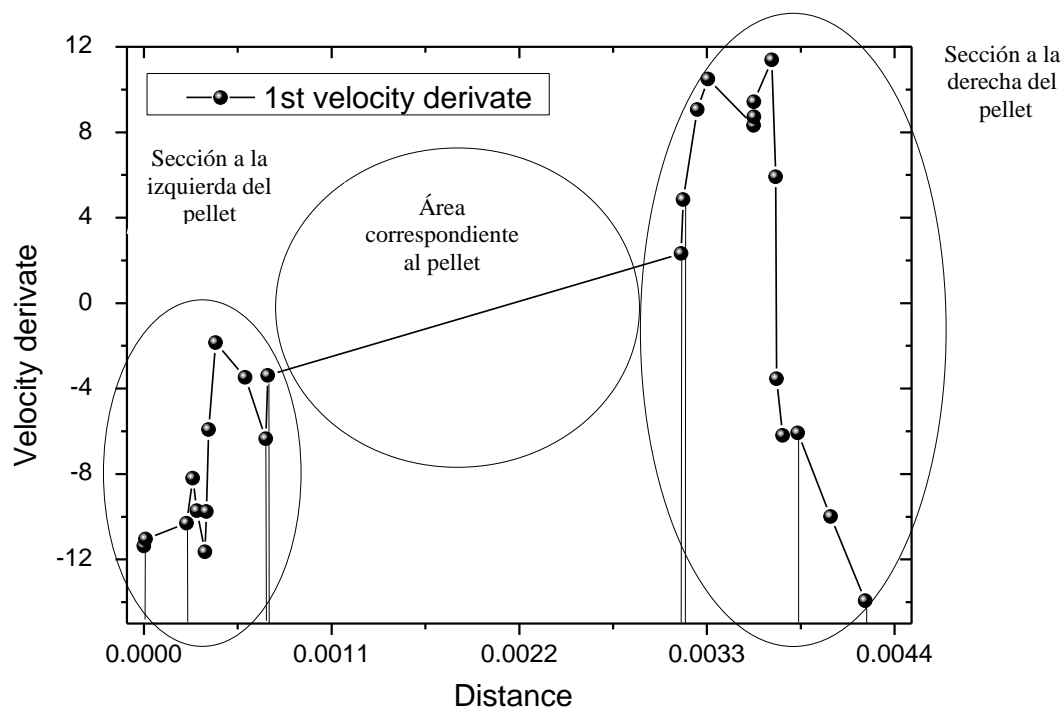
<b>Velocidad liquido</b>		
<i>Arc lenght</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0	0.005093413	-11.37648
9.6991E-06	0.004983072	-11.0415
0.000249714	0.002413345	-10.30447
0.000285386	0.002060104	-8.20218
0.000311147	0.001892607	-9.72486
0.000358298	0.00128211	-11.64189
0.000365379	0.001208917	-9.761
0.000379035	0.001083479	-5.92092

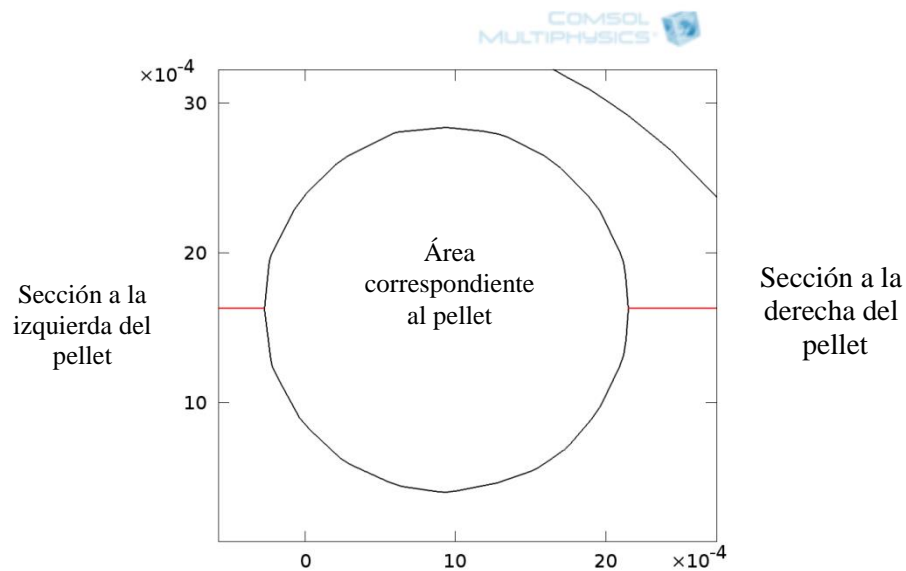
0.0004195	0.000976009	-1.84545
0.000593429	0.000795982	-3.47647
0.000713844	8.33794E-05	-6.34763
0.000726146	5.12433E-19	-3.38869
0.003149063	2.29723E-18	2.3198
0.003161122	5.59527E-05	4.84795
0.00324402	0.000475109	9.0643
0.003306043	0.00128589	10.49655
0.003575227	0.00341804	8.32454
0.003575815	0.003423179	8.72836
0.003576271	0.003427154	9.41949
0.00368139	0.004489968	11.38517
0.003703457	0.004769327	5.91502
0.00370779	0.004765731	-3.54744
0.003744134	0.004538035	-6.18903
0.003833473	0.003991909	-6.07735
0.004025128	0.002833975	-9.9905
0.004228437	9.31352E-18	-13.93922



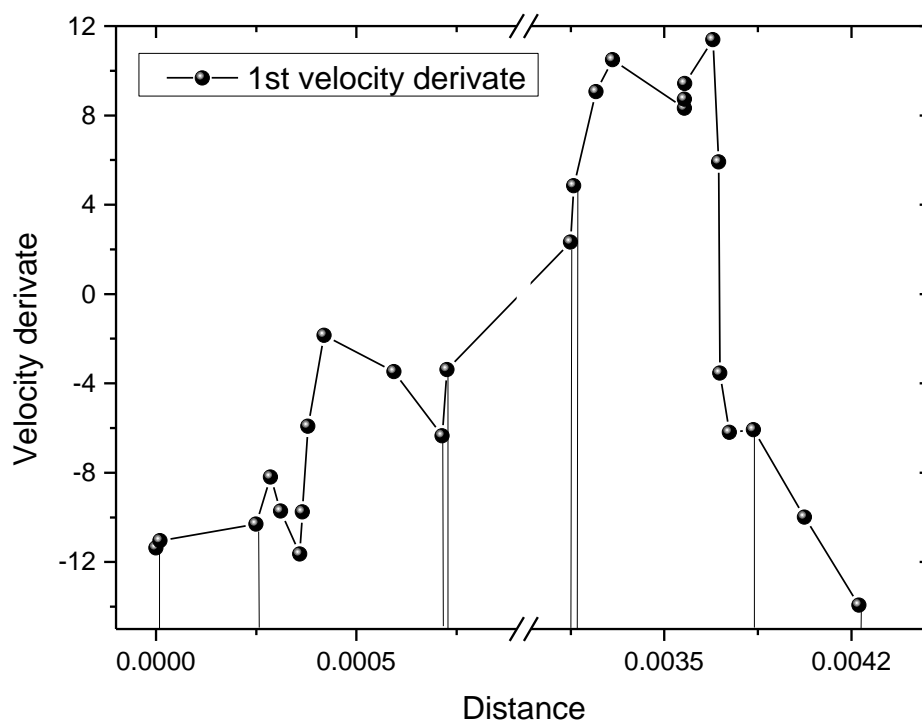
**Figura 3.2.2** Gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a  $0^\circ$  y  $180^\circ$  en el plano de corte  $xy$ .

Una vez obtenida la gráfica de la derivada de la velocidad realizamos el análisis y se observó que se encontraba una sección que pertenece al pellet como se muestra en la figura 3.2.3, por lo cual se realizó un corte en esta sección para poder observar de manera correcta los datos que corresponden a ambos lados de la partícula y determinar así los valores que corresponden a la capa que la rodea, resultado la gráfica con el corte de la escala, como se muestra en la figura 3.2.4.





**Figura 3.2.3** Pellet comparado con la gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a  $0^\circ$  y  $180^\circ$  en el plano de corte  $xy$



**Figura 3.2.4** Gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del líquido en el pellet 2 plato 10 a  $0^\circ$  y  $180^\circ$  en el plano de corte  $xy$  con un corte de sección.

Una vez realizado el corte en la escala, podemos observar más claramente el lugar donde se encuentra la capa límite, ya que corresponde al lugar donde el valor de la derivada no tiene un cambio considerable.

Después de determinar gráficamente el lugar de la capa límite procedimos a realizar su cálculo con los datos correspondientes mostrado en la tabla 3.2.3, realizando la diferencia entre ambos valores, resultando:

**Tabla 3.2.3** Datos obtenidos para realizar el cálculo del espesor de la capa límite

<b>Velocidad liquido</b>			
<i>Longitud</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>	<i>Correspondiente</i>
0.000713844	8.33794E-05	-6.34763	Lado izquierdo del pellet (180°)
0.000726146	5.12433E-19	-3.38869	
0.003149063	2.29723E-18	2.3198	Lado derecho del pellet (0°)
0.003161122	5.59527E-05	4.84795	

$$\text{Espesor de capa límite } 180^\circ = 0.000726146 - 0.000713844 = 0.000012302 = 0.1230 \times 10^{-4}$$

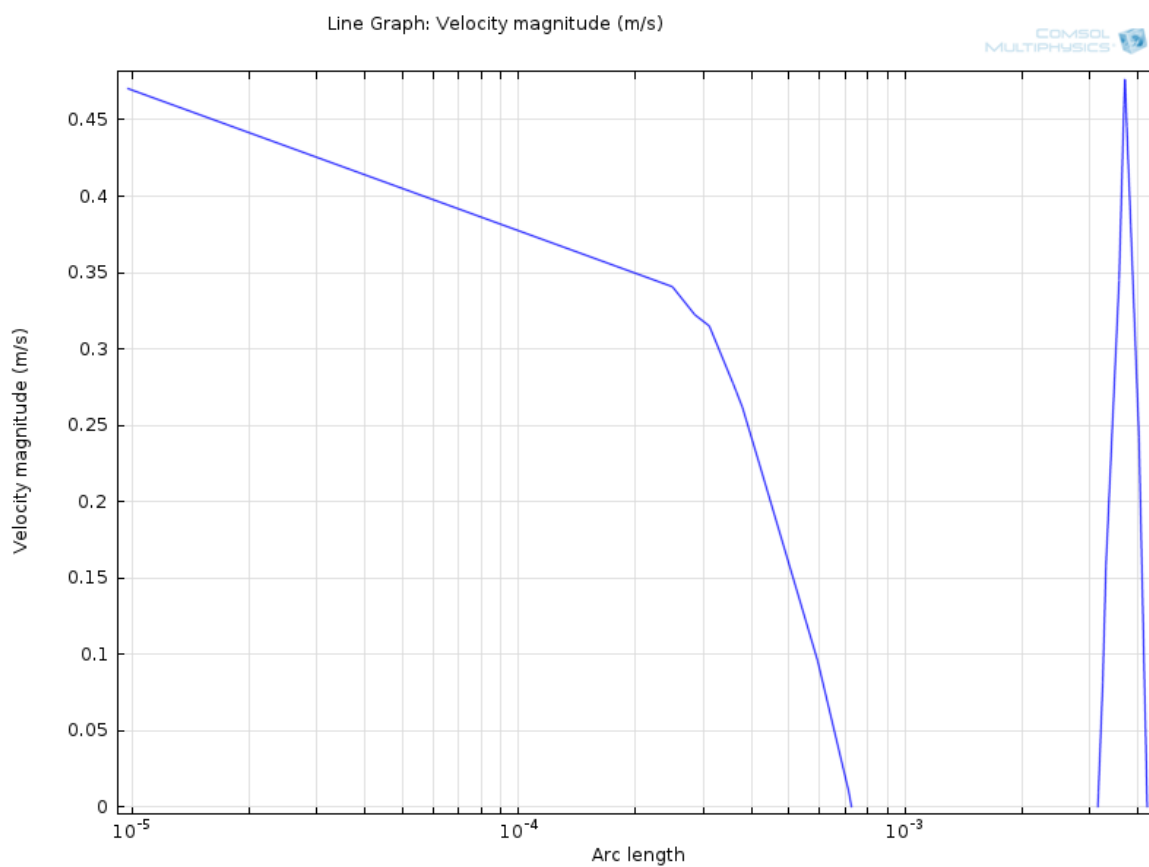
$$\text{Espesor de capa límite } 0^\circ = 0.003161122 - 0.003149063 = 0.000012059 = 0.1206 \times 10^{-4}$$

De forma semejante realizamos el proceso anterior para obtener los datos de velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy y su gráfica como se muestra en la tabla 3.2.4 y en la figura 3.2.5:

**Tabla 3.2.4** Datos obtenidos de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte xy .

<b>Velocidad gas</b>	
<i>Longitud</i>	<i>Velocidad</i>
0	0.476211069
9.6991E-06	0.47063374
0.000249714	0.340793056
0.000285386	0.322419285
0.000311147	0.315073527
0.000358298	0.277560891
0.000365379	0.272139633
0.000379035	0.26179322

0.0004195	0.224579806
0.000593429	0.095817585
0.000713844	0.010501236
0.000726146	6.45385E-17
0.003149063	3.95524E-16
0.003161122	0.00963364
0.00324402	0.081801689
0.003306043	0.157942426
0.003575227	0.344714904
0.003575815	0.345223179
0.003576271	0.345616315
0.00368139	0.460176465
0.003703457	0.476609022
0.00370779	0.474041313
0.003744134	0.445304705
0.003833473	0.380563375
0.004025128	0.242291968
0.004228437	7.96264E-16

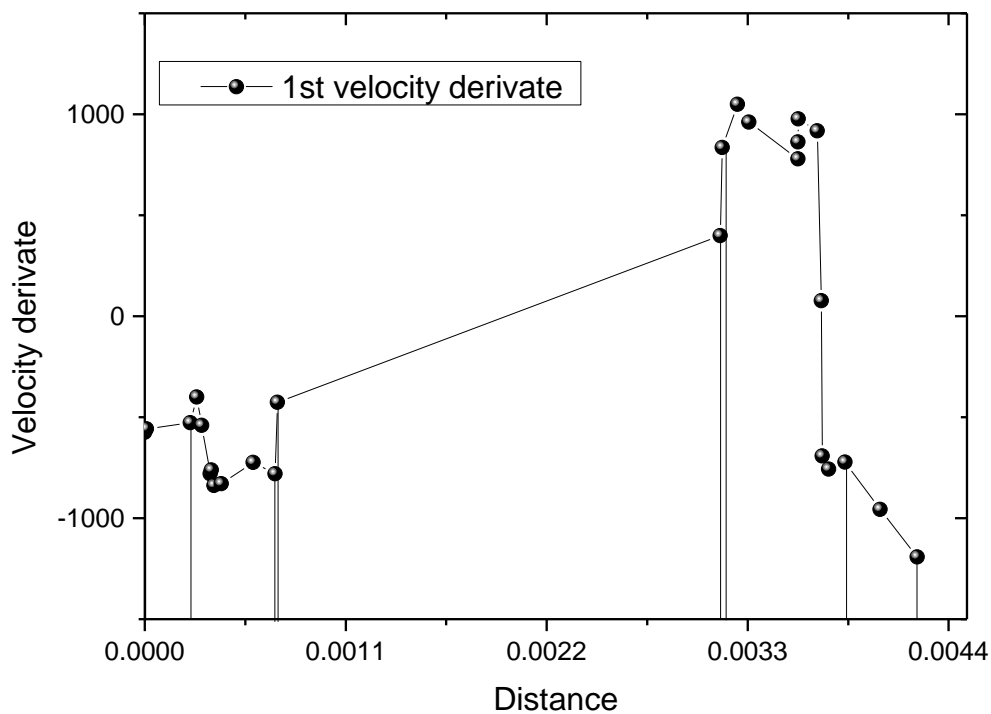


**Figura 3.2.5** Gráfica obtenida de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a 0° y 180° en el plano de corte  $xy$  .

Una vez obtenidos estos datos, se colocaron en el software OriginPro 9.0 para obtener el valor de su derivada y su gráfica como se muestra en la tabla 3.2.5 y en la figura 3.2.6:

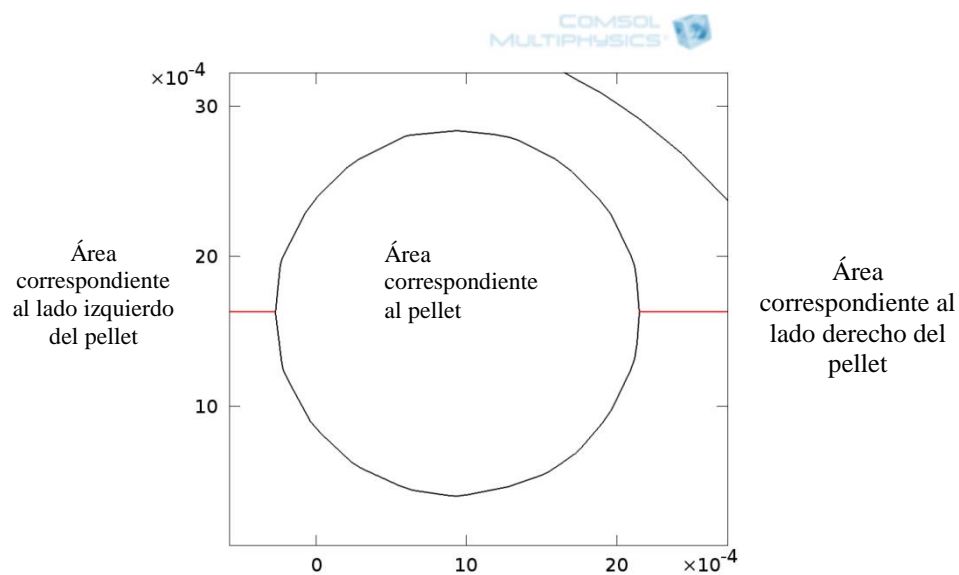
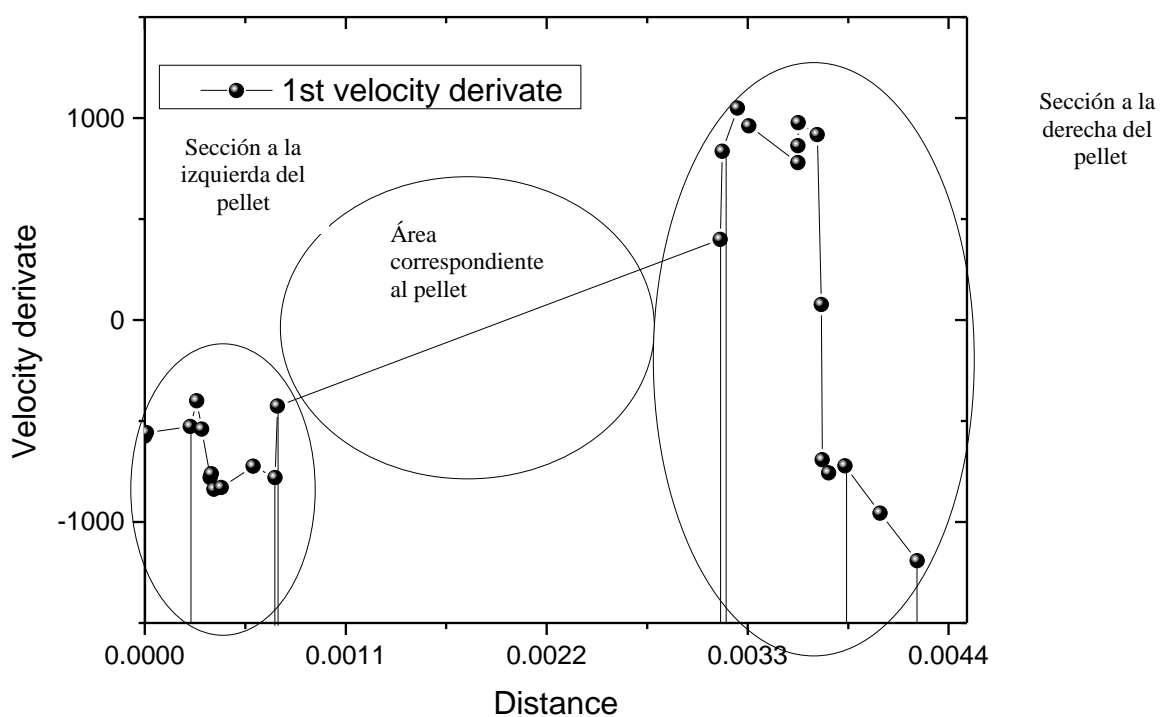
**Tabla 3.2.5** Datos obtenidos de los valores de la derivada de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a  $0^\circ$  y  $180^\circ$  en el plano de corte  $xy$ .

<b>Velocidad gas</b>		
<i>Longitud</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0	0.476211069	-575.03593
9.6991E-06	0.47063374	-558.0024
0.000249714	0.340793056	-528.02058
0.000285386	0.322419285	-400.11137
0.000311147	0.315073527	-540.36979
0.000358298	0.277560891	-780.57973
0.000365379	0.272139633	-761.62707
0.000379035	0.26179322	-838.6573
0.0004195	0.224579806	-829.97431
0.000593429	0.095817585	-724.41821
0.000713844	0.010501236	-781.04812
0.000726146	6.45385E-17	-426.78883
0.003149063	3.95524E-16	399.41017
0.003161122	0.00963364	834.69474
0.00324402	0.081801689	1049.09627
0.003306043	0.157942426	960.73537
0.003575227	0.344714904	778.54722
0.003575815	0.345223179	863.25096
0.003576271	0.345616315	976.53322
0.00368139	0.460176465	917.24505
0.003703457	0.476609022	76.09081
0.00370779	0.474041313	-691.59744
0.003744134	0.445304705	-757.68165
0.003833473	0.380563375	-723.06434
0.004025128	0.242291968	-956.60157
0.004228437	7.96264E-16	-1191.73973

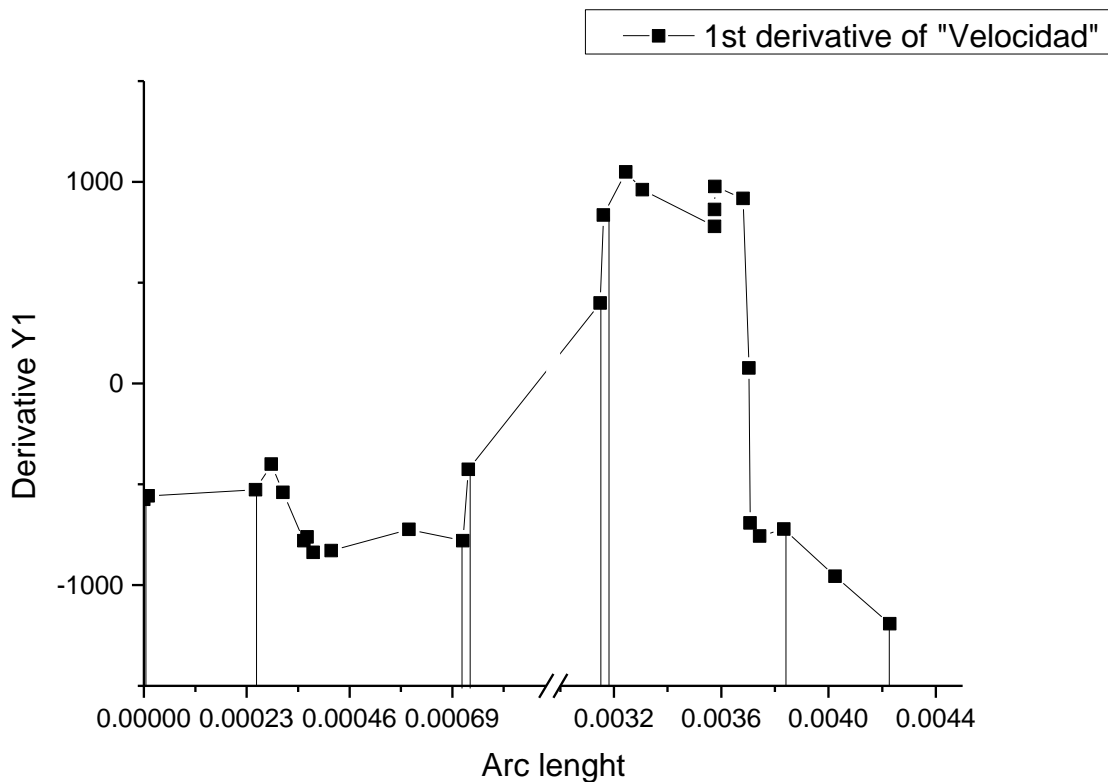


**Figura 3.2.6** Gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a  $0^\circ$  y  $180^\circ$  en el plano de corte  $xy$ .

Una vez obtenida la gráfica de la derivada de la velocidad realizamos el análisis y se observó que se encontraba una sección que pertenece al pellet, por lo cual se realizó un corte en esta sección como se muestra en la figura 3.2.7 para poder observar de manera correcta los datos que corresponden a ambos lados de la partícula y determinar así los valores que corresponden a la capa que la rodea, resultado la gráfica con el corte como se muestra en la figura 3.2.8.



**Figura 3.2.7** Pellet comparado con la gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a  $0^\circ$  y  $180^\circ$  en el plano de corte  $xy$ .



**Figura 3.2.8** Gráfica obtenida de la derivada de la velocidad del gas en el pellet 2 plato 10 a  $0^\circ$  y  $180^\circ$  en el plano de corte  $xy$  con un corte de sección.

Una vez realizado el corte en la escala, podemos observar más claramente el lugar donde se encuentra la capa límite, ya que corresponde al lugar donde el valor de la derivada no tiene un cambio considerable.

Después de determinar gráficamente el lugar de la capa límite procedimos a realizar su cálculo con los datos correspondientes mostrado en la tabla 3.2.6, realizando la diferencia entre ambos valores, resultando:

**Tabla 3.2.6** Datos obtenidos para realizar el cálculo del espesor de la capa límite.

Velocidad gas			
<i>Longitud</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>	<i>Correspondiente</i>
0.000713844	0.010501236	-781.04812	Lado izquierdo del pellet ( $180^\circ$ )
0.000726146	6.45385E-17	-426.78883	
0.003149063	3.95524E-16	399.41017	Lado derecho del pellet ( $0^\circ$ )
0.003161122	0.00963364	834.69474	

Espesor de capa límite  $180^\circ = 0.000726146 - 0.000713844 = 0.000012302 = 0.1230 \times 10^{-4}$

Espesor de capa límite  $0^\circ = 0.003161122 - 0.003149063 = 0.000012059 = 0.1206 \times 10^{-4}$

Con ello podemos corroborar que éste es el lugar donde se encuentra la capa límite debido a que los valores donde la derivada no tiene un cambio significativo concuerdan en ambas y en todos los parámetros hidrodinámicos graficados.

### 3.2.1 DETERMINACIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN DE FASES

Una vez determinado el espesor de la capa límite, el siguiente objetivo es determinar las características de la película, establecer cuál es la fase en la que se encuentra, líquida o gaseosa.

#### 3.2.1.1 Criterio de la velocidad

El primer parámetro para realizarlo es comprar la relación que existe en el incremento de los valores de la velocidad líquida y gas y la velocidad de entrada al reactor líquida y gas mostrados en la tabla 3.2.1.1.1

$$\text{Velocidad de entrada líquido} = V_{OL} = 0.002 \frac{m}{s}$$

$$\text{Velocidad de entrada gas} = V_{OG} = 0.22 \frac{m}{s}$$

**Tabla 3.2.1.1.1** Datos obtenidos para realizar la caracterización de la de la película.

<i>Variable</i>	$\Delta V_L \times 10^4$	$\Delta V_L / \Delta V_L^0$	<i>Comparación</i>	$\Delta V_G \times 10^4$	$\Delta V_G / \Delta V_G^0$
$0^\circ$	0.5595	0.0280	<	96.3364	0.0438
$180^\circ$	-0.8337	0.0417	<	-105.0124	0.0477

Y al comprar ambos valores, podemos observar que el valor del incremento líquido es menor que el valor del incremento del valor del gas, concluyendo así que la película que existe en ese lugar es líquida, ya que la definición del concepto de capa límite es el lugar donde se

encuentra estancado el flujo, por lo que el menor valor de velocidad es el estado de agregación de esta capa.

### 3.2.1.2 Criterio de la Presión

El segundo parámetro para corroborar que el estado de agregación anteriormente propuesto es el correcto, es el incremento de los valores de la presión líquida y gas y la presión de salida del reactor mostrados en la tabla 3.2.1.2.1

$$\text{Presión de salida} = P_0 = 101.3 \text{ Pa}$$

**Tabla 3.2.1.2.1** Datos obtenidos para realizar la caracterización de la de la película.

<i>Variable</i>	$\Delta P_L \times 10^4$	$\Delta P_L / P_L^0$	<i>Comparación</i>	$\Delta P_L \times 10^4$	$\Delta P_G / P_G^0$
0°	-0.3326	3.34E-06	>	3.3852	3.28E-07
180°	10.4441	1.03E-05	>	-1.2825	1.27E-06

Y al comprar ambos valores, podemos observar que el valor del incremento líquido es mayor que el valor del incremento del valor del gas, concluyendo así que la película que existe en ese lugar es completamente líquida, porque concuerda con el principio que relaciona de manera inversamente proporcional a la velocidad y la presión del flujo, en este caso la velocidad del líquido es menor y la presión del líquido es mayor, corroborando la fase encontrada.

### 3.2.1.3 Criterio de las fuerzas de interacción

El tercer y último parámetro para corroborar que el estado de agregación anteriormente propuesto es el correcto, es el valor de las fuerzas resultantes del líquido y del gas mostradas en la tabla 3.1.1.3.1, cuyo significado es la fuerza con la una fase experimenta la presencia de las otras 2 fases presentes en el reactor.

**Tabla 3.1.1.3.1** Datos obtenidos para realizar la caracterización de la de la película.

<i>Variable</i>	$\Delta F_L$		$\Delta F_G$
0°	7537.99	<	33510.44

$$\frac{180^\circ \quad -67536.22 \quad < \quad -8104.31}{\text{-----}}$$

Y al comprar ambos valores, podemos observar que el valor de la fuerza resultante del líquido es menor que el valor de la fuerza resultante del gas, concluyendo así que la película que existe en ese lugar es completamente líquida, porque coincide con la definición de la fuerza líquida, que es la fuerza con la que la fase líquida experimenta la presencia de las fase sólida y gas y la fuerza de gas es la fuerza con la que la fase gaseosa experimenta la presencia de las fase líquida y sólida, corroborando con ello la fase encontrada. El procedimiento antes descrito se utilizó de la misma manera para la determinación de las dimensiones y características de la capa límite de los 3 pellets restantes.

## 4. ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

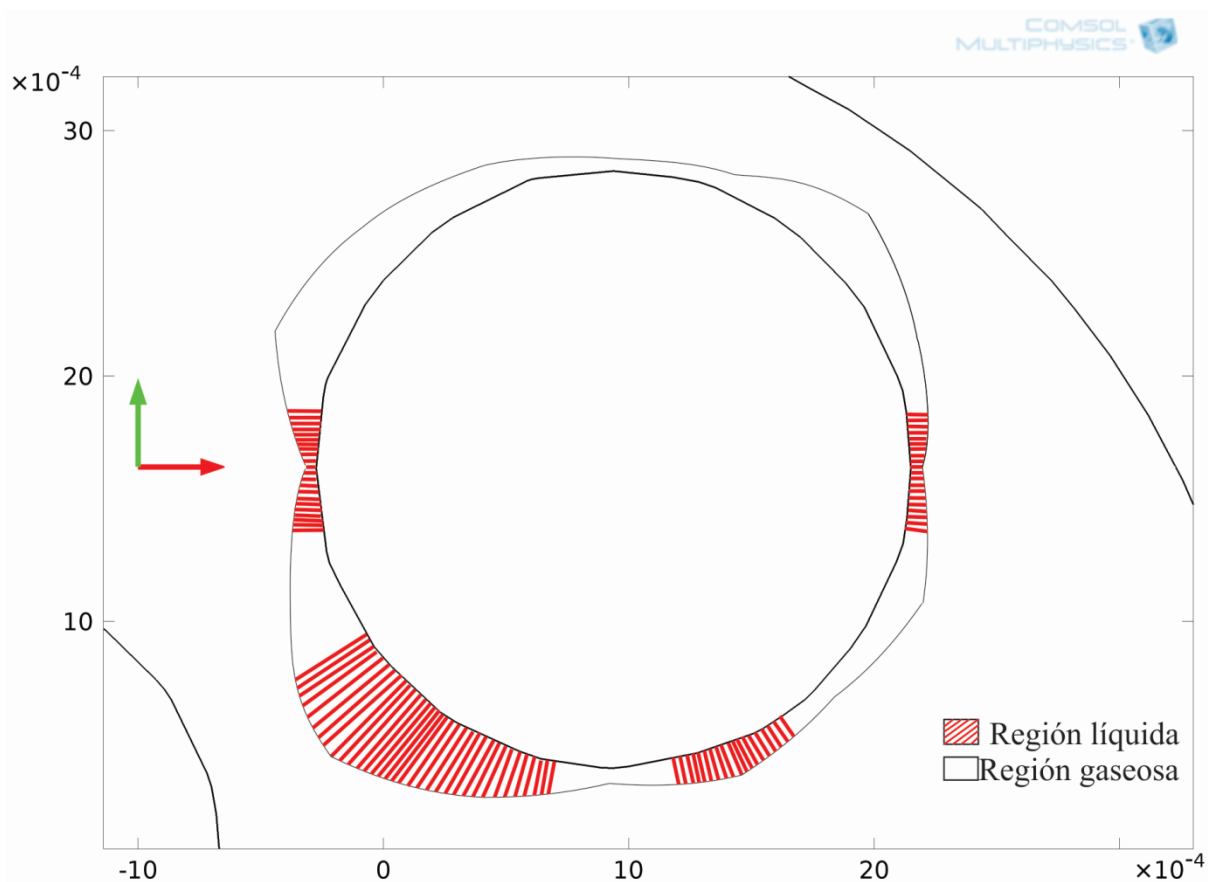
Los resultados obtenidos de las simulaciones y la realización de los cálculos para obtener las dimensiones y características de la capa límite de los pellets analizados son los mostrados en las tablas 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6, 4.7 y 4.8 y su representación gráfica se muestra en las figuras 4.1, 4.2, 4.3 y 4.4:

**Tabla 4.1** Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 3 colocado en el layer 5 con el plano de corte  $xy$ , parte 1.

<i>Layer 5, Pellet 3 plano XY</i>								
<i>Variable</i>	<i>Coordenada (x,y)</i>	$\square x10^4$	<i>L ó G</i>	$\square VL/VL0$		$\square VG/VG0$	$\square PL/P0$	$\square PG/P0$
0°	(2.6182E-4, -16E-4)	0.0182	L	0.0034	<	0.0055	8.69E-05	> 1.18E-06
22.5°	(2.3499E-4, -11.2E-4)	0.7499	L	0.0373	<	0.1375	2.34E-05	> 1.58E-05
45°	(-0.2811E-4, -7.3E-4)	0.5189	G	0.0774	>	0.0573	1.03E-05	< 1.67E-05
67.5°	(-4.5361E-4, -5.2E-4)	0.0639	L	0.0090	<	0.0147	4.03E-06	> 1.97E-06
90°	(-9.5E-4, -3.4422E-4)	0.5578	G	0.0933	>	0.0638	1.27E-05	< 4.20E-05
112.5°	(-14.2E-4, -4.9519E-4)	0.3481	L	0.0319	<	0.0893	1.04E-05	> 6.81E-06
**135°	(-18.0451E-4, -7.9E-4)	0.0549	L	0.3013	<	0.3625	3.96E-08	< 8.42E-05
157.5°	(-21.4438E-4, -11.3E-4)	0.9438	G	0.0699	>	0.0547	4.15E-06	< 1.44E-05
180°	(-22.0503E-4, -16.2E-4)	0.0503	G	0.0210	>	0.0192	5.33E-07	< 1.89E-06
202.5°	(-20.8349E-4, -20.9E-4)	0.3349	G	0.0634	>	0.0431	1.32E-06	< 3.22E-05
225°	(-18.2021E-4, -24.9E-4)	0.2021	L	0.0055	<	0.0236	9.03E-05	> 7.47E-06
247.5°	(-14.3E-4, -27.7943E-4)	0.4943	G	0.2666	>	0.2326	2.40E-06	< 2.20E-05
270°	(-9.3E-4, -28.8503E-4)	0.4503	G	0.1173	>	0.0346	3.81E-06	< 1.48E-05
292.5°	(-4.5E-4, -27.3879E-4)	0.1879	G	0.0600	>	0.0511	1.18E-05	< 4.31E-05
315°	(0.1E-4, -25.5258E-4)	0.8258	L	0.0273	<	0.0227	2.27E-05	> 1.07E-06
337.5°	(1.997E-4, -20.7E-4)	0.097	G	0.6090	>	0.4833	5.50E-07	< 7.67E-05

**Tabla 4.2** Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 3 colocado en el layer 5 con el plano de corte  $xy$  , parte 2.

<b>Layer 5, Pellet 3 plano XY</b>			
<i>Variable</i>	$\Delta FL$		$\Delta FG$
0°	0.0938	<	0.3500
22.5°	2.4294	<	10.7151
45°	1.0253	>	-5.4031
67.5°	-2.6387	<	-0.3197
90°	1.1362	>	-32.8476
112.5°	1.5785	<	23.0104
135°	14.5115	<	6.6602
157.5°	0.9263	>	-7.1744
180°	0.3225	>	-2.0842
202.5°	0.7186	>	-32.5142
225°	-30.8456	<	0.4117
247.5°	5.6034	>	-22.2378
270°	0.6176	>	-34.3190
292.5°	0.8538	>	-7.9103
315°	-2.6714	<	0.3795
337.5°	-8.8235	>	-42.1473



**Figura 4.1** Representación gráfica de la capa límite del pellet 3 colocado en el plato 5 con el plano de corte xy (COMSOL Multihypisics)

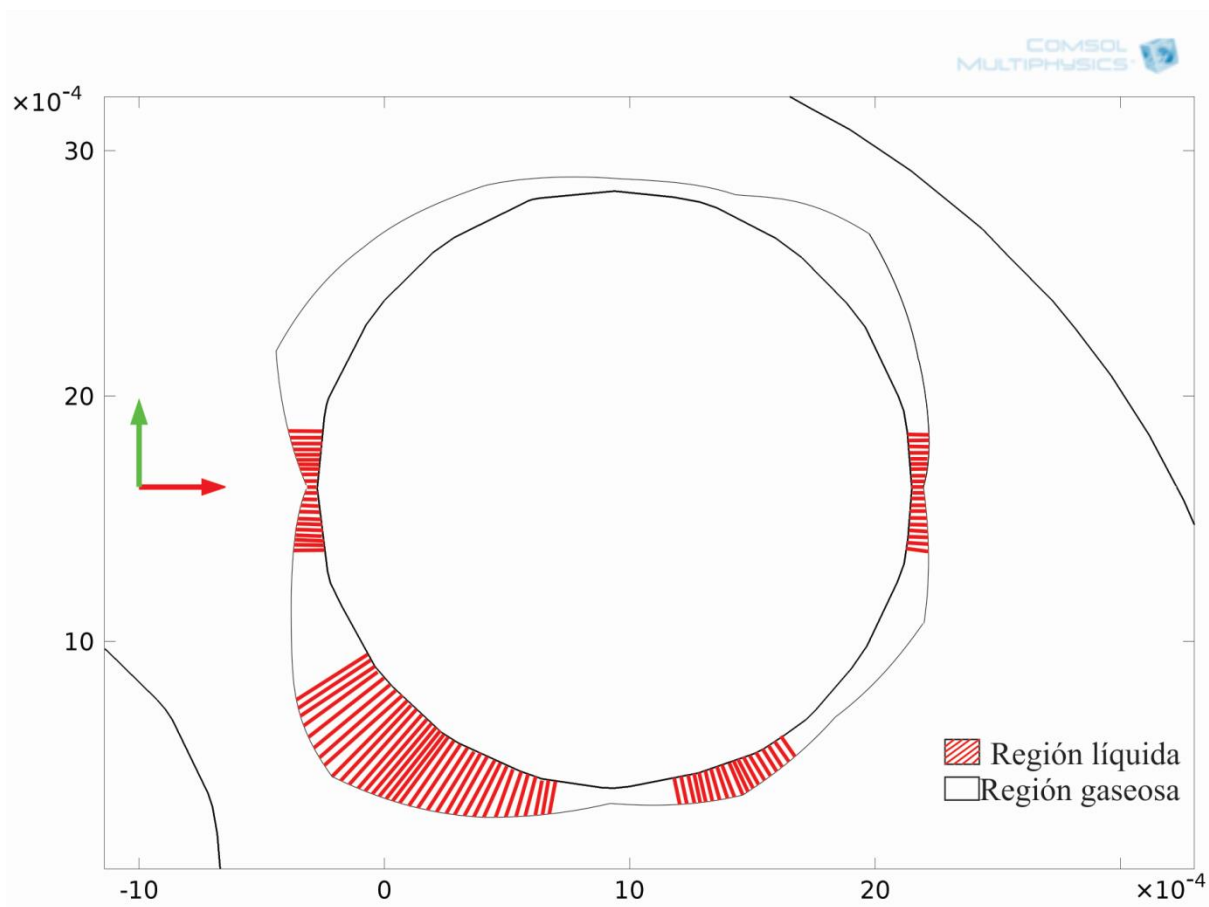
**Tabla 4.3** Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 3 colocado en el layer 5 con el plano de corte yz , parte 1.

<i>Layer 5, Pellet 3 plano YZ</i>							
<i>Variable</i>	<i>Coordenada (x,y)</i>	$\square x10^4$	<i>L ó G</i>	$\square VL/VL0$	$\square VG/VG0$	$\square PL/P0$	$\square PG/P0$
**0°	(31.0763E-4, 0.01415)	0.0763	G	2.030E-150	> 0	1.79E-06	< 3.82E-06
22.5°	(29.0207E-4, 0.0149)	0.0207	L	0.0125	< 0.0149	3.97E-07	> 1.49E-06
45°	(26.113E-4, 0.0153)	1.1130	L	0.7390	< 0.7917	8.66E-05	> 1.97E-04
67.5°	(24.0048E-4, 0.0154)	0.0048	G	0.0053	> 0.0036	1.29E-05	< 7.91E-07
90°	(16.5E-4, 0.0163)	0.3849	G	0.2001	> 0.1637	2.50E-04	< 4.38E-05
112.5°	(8.8E-4, 0.0156)	0.3765	G	0.0501	> 0.0171	7.50E-06	< 9.93E-06
135°	(2.2163E-4, 0.0146)	0.0837	G	0.0610	> 0.0203	1.74E-06	< 5.60E-06
157.5°	(1.6672E-4, 0.0145)	0.1672	G	0.0536	> 0.0374	1.97E-06	< 4.29E-06
180°	(1.8362E-4, 0.01415)	0.3362	L	0.0748	< 0.1453	6.98E-06	> 4.67E-06
202.5°	(1.5882E-4, 0.0134)	1.4118	G	0.3447	> 0.1771	1.72E-05	< 4.53E-05
225°	(5.62186E-4, 0.013)	0.0781	G	0.0403	> 0.0324	1.24E-06	< 1.78E-05
247.5°	(6.6518E-4, 0.013)	0.3482	G	0.2095	> 0.1726	7.91E-06	< 3.39E-05
**270°	(16.5E-4, 0.0121)	1.2116	G	0.9715	> 0.6210	4.38E-04	> 2.64E-07
292.5°	(25.7431E-4, 0.013)	0.2431	G	0.3397	> 0.2505	6.68E-07	< 5.27E-05
315°	(26.1917E-4, 0.0131)	0.1917	L	0.0295	< 0.0309	2.48E-06	> 1.68E-05

337.5° (29.1437E-4, 0.0133) 0.1437 G 0.1100 > 0.1070 8.32E-08 < 6.53E-07

**Tabla 4.4** Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 3 colocado en el layer 5 con el plano de corte yz , parte 2.

<i>Plato 5, Pellet 3 plano YZ</i>			
<i>Variable</i>	<i>ΔFL</i>		<i>ΔFG</i>
0°	0.7658	>	-9.82E-07
22.5°	-5.2379E-148	<	0.2499
45°	14.3743	<	34.1683
67.5°	0.6449	>	0.0597
90°	17.5115	>	2.7968
112.5°	10.9494	>	0.2794
135°	17.4154	>	0.3606
157.5°	18.7706	>	0.6621
180°	-49.6688	<	-2.6796
202.5°	-3.3488	>	-113.2370
225°	-0.5423	>	-3.7619
247.5°	-2.9553	>	-15.6460
**270°	-12.4649	>	-87.3482
292.5°	-4.5398	>	-25.7818
315°	-1.8536	<	-0.5260
337.5°	-1.8731		-7.5393



**Figura 4.2** Representación gráfica de la capa límite del pellet 3 colocado en el layer 5 con el plano de corte  $yz$ .

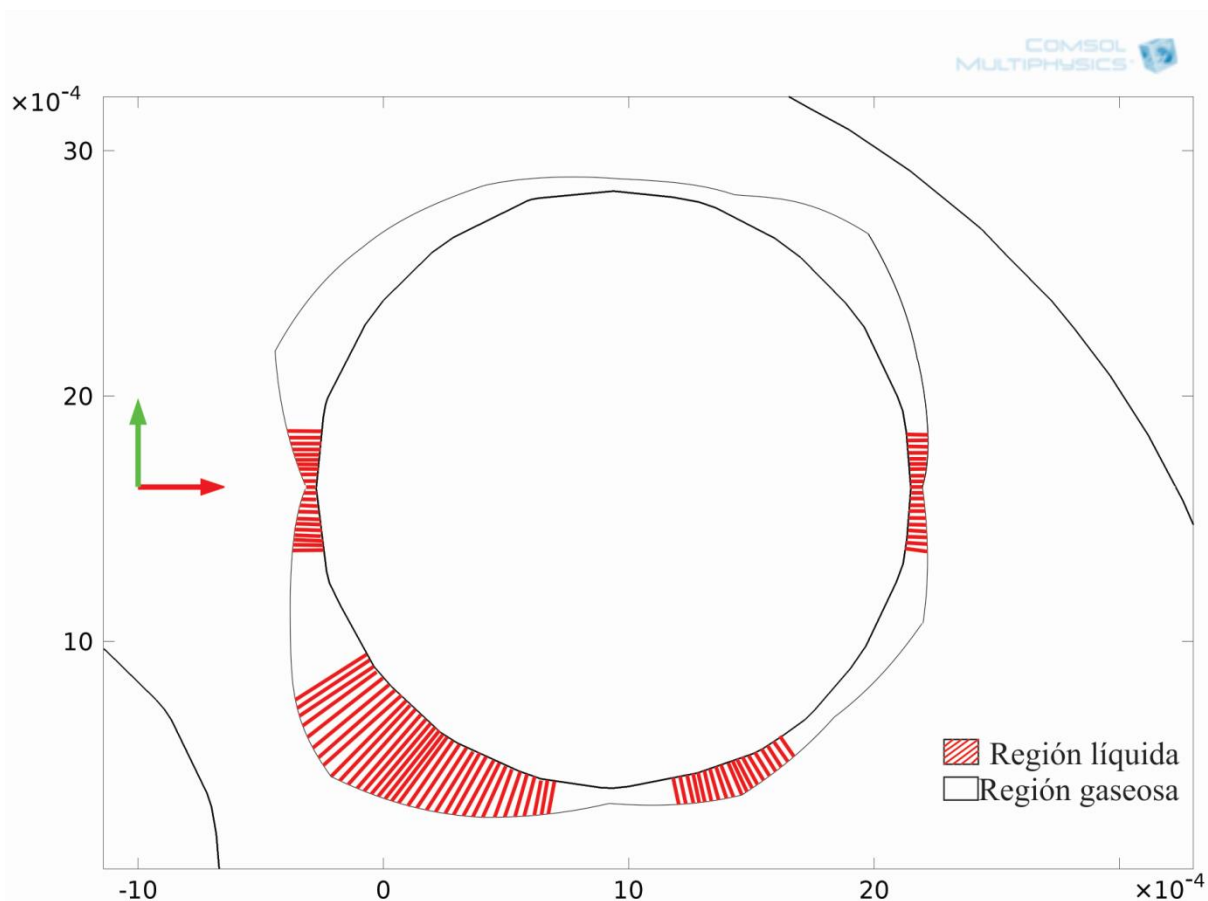
**Tabla 4.5** Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 2 colocado en el layer 10 con el plano de corte  $xy$ , parte 1.

<i>Plato 10, Pellet 2 plano XY</i>									
<i>Variable</i>	<i>Coordenada (x,y)</i>	<i><math>\delta \times 10^4</math></i>	<i>L ó G</i>	<i><math>\Delta VL/VL0</math></i>	<i><math>\Delta VG/VG0</math></i>	<i><math>\Delta PL/P0</math></i>	<i><math>\Delta PG/P0</math></i>		
0°	(12.5E-4, 6.3182E-4)	0.1230	L	0.0280	<	0.0438	3.34E-06	>	3.28E-07
22.5°	(21.5313E-4, 21.3E-4)	0.9578	G	0.1330	>	0.0240	2.23E-05	<	9.11E-05
45°	(19.4099E-4, 26.2E-4)	1.2260	G	0.2472	>	0.1209	1.02E-05	<	7.06E-05
67.5°	(14.5E-4, 28E-4)	0.4465	G	0.2457	>	0.0224	2.91E-05	<	2.96E-05
90°	(9.5E-4, 28.7558E-4)	0.2465	G	0.0362	>	0.0209	5.38E-07	<	1.18E-05
112.5°	(4.4E-4, 28.5640E-4)	0.7574	G	0.6042	>	0.2315	3.44E-05	<	3.49E-05
135°	(0.3E-4, 25.3857E-4)	1.3619	G	0.3930	>	0.3437	3.20E-05	<	7.22E-06
157.5°	(-2.9098E-4, 21.5E-4)	1.7627	G	0.8752	>	0.7346	6.77E-05	>	2.08E-05
180°	(-2.8205E-4, 16.3E-4)	0.1206	L	0.0417	<	0.0477	1.03E-05	>	1.27E-06
202.5°	(-2.5578E-4, 11.2E-4)	1.0313	G	0.2203	>	0.1396	2.05E-05	<	2.83E-05
225°	(-0.3E4, 6.374E-4)	2.4099	L	0.1058	<	0.2565	7.65E-05	>	3.68E-06
247.5°	(4.5E-4, 4.5535E-4)	1.3371	L	0.0583	<	0.4004	3.23E-06	>	1.51E-05
**270°	(9.5E-4, 3.7535E-4)	0.2558	G	0.0639	>	0.0082	3.84E-06	<	3.89E-06

292.5°	(14.6E-4, 4.036E-4)	1.0640	L	0.2092	<	0.5826	8.47E-05	>	2.66E-05
315°	(19.4E-4, 5.8373E-4)	0.5857	G	0.8978	>	0.7788	2.64E-05	<	2.84E-05
337.5°	(22.5627E-4, 10.7E-4)	1.2098	G	0.9918	>	0.9120	3.79E-05	<	9.43E-05

**Tabla 4.6** Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 2 colocado en el layer 10 con el plano de corte  $xy$ , parte 2.

<b>Layer 10, Pellet 2 plano XY</b>			
<i>Variable</i>	$\Delta FL$		$\Delta FG$
0°	7537.99	<	33510.44
22.5°	648973.64	>	26243.85
45°	867199.85	>	22842.10
67.5°	198220.57	>	4179.50
90°	137705.25	>	3804.38
112.5°	-116973.58	>	-451814.68
135°	-62898.70	>	-196781.05
157.5°	-148424.94	>	-492576.51
180°	-67536.22	<	-8104.31
202.5°	-3578.56	>	-540538.90
225°	-761106.07	<	-47279.97
247.5°	-525367.66	<	-74865.19
270°	-173869.95	<	-1579.34
292.5°	41387.12	<	279718.00
315°	531309.74	>	154128.70
337.5°	625749.66	>	179930.34



**Figura 4.3** Representación gráfica de la capa límite del pellet 2 colocado en el layer 10 con el plano de corte  $xy$ .

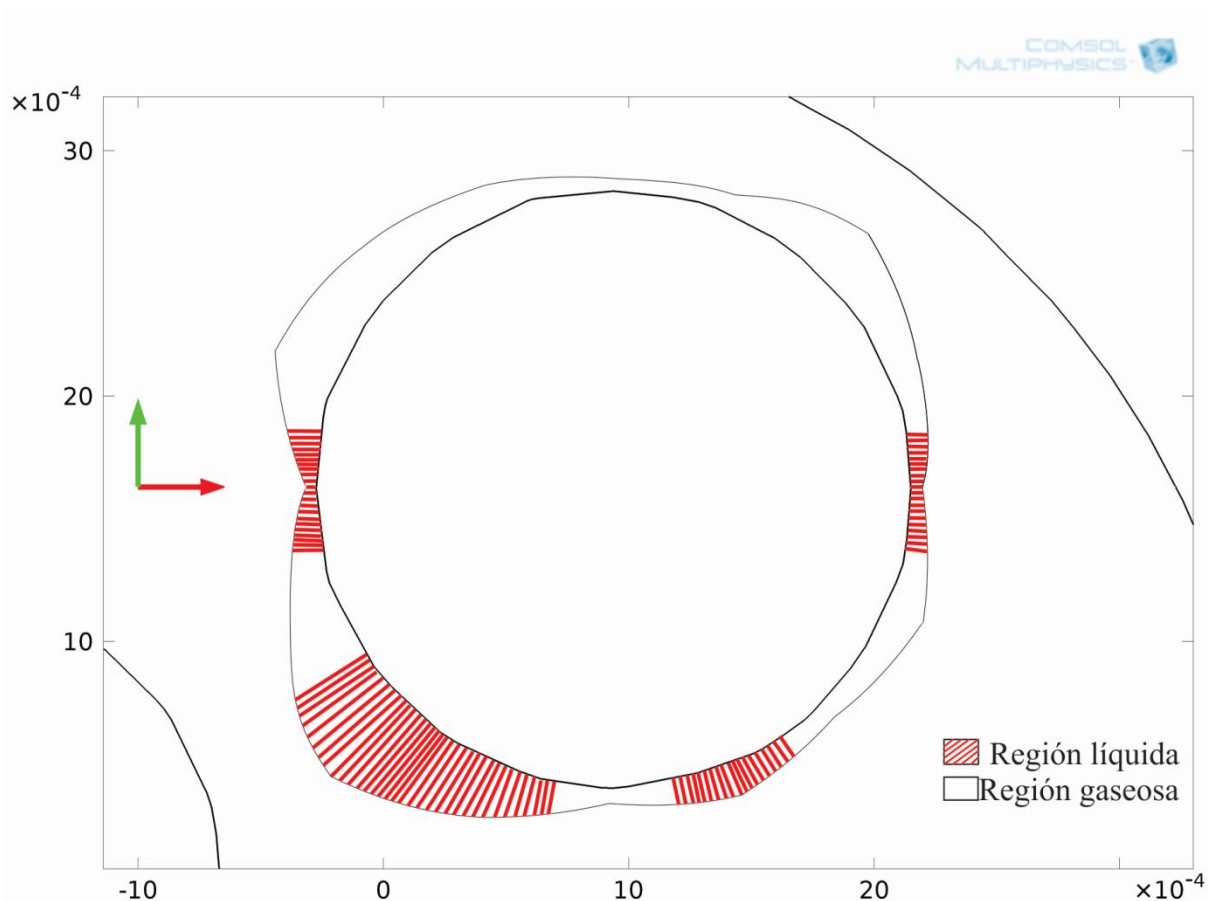
**Tabla 4.7** Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 2 colocado en el layer 10 con el plano de corte  $yz$ , parte 1.

<i>Plato 10, Pellet 2 plano YZ</i>									
<i>Variable</i>	<i>Coordenada (x,y)</i>	$\delta \times 10^4$	<i>L ó G</i>	$\Delta VL/VL0$		$\Delta VG/VG0$	$\Delta PL/P0$		$\Delta PG/P0$
0°	(-2.5017E-4, 0.0298)	0.0017	G	0.0018	>	0.0016	1.34E-08	<	1.83E-08
22.5°	(-2.3362E-4, 0.0305)	1.9638	L	0.2502	<	0.9136	9.17E-06	>	6.71E-06
45°	(5E-4, 0.031)	27.6237	L	0.0000	<	0.0000	5.41E-03	>	4.54E-03
**67.5°	(-7.7285E-4, 0.0309)	0.7715	L	0.6128	<	5196.8641	5.01E-053	>	.37E-05
90°	(-16E-4, 0.0317)	0.0434	G	0.0216	>	0.0188	6.89E-07	<	3.35E-06
112.5°	(-23.5582E-4, 0.031)	1.5582	G	0.4495	>	0.4373	1.59E-05	<	2.21E-04
135°	(-24.3976E-4, 0.0312)	0.3976	G	0.7543	>	0.3765	9.81E-06	<	2.24E-05
157.5°	(-28.0082E-4, 0.0306)	0.0082	L	0.0122	<	0.0199	3.14E-06	>	2.20E-06
180°	(-30.3733E-4, 0.0298)	0.3733	L	0.1472	<	0.3059	6.56E-05	>	1.85E-05
202.5°	(-29.4524E-4, 0.0290)	0.9524	L	0.4224	<	0.6200	9.80E-05	>	3.89E-05
225°	(-25.8259E-4, 0.0288)	0.0259	L	0.0045	<	0.0060	1.84E-06	>	1.72E-07
247.5°	(-22.5E-4, 0.028)	0.5916	L	0.0979	<	0.1287	1.43E-05	>	6.83E-08
270°	(-16E-4, 0.0279)	0.7353	G	0.4382	>	0.4029	1.42E-05	<	3.48E-05

**292.5°	(-11E-4, 0.0278)	1.9444	G	2.7133	>	1.5560	9.23E-06	<	1.49E-04
315°	(-5E-4, 0.0285)	0.2532	G	0.8781	>	0.4368	6.50E-06	<	6.38E-05
337.5°	(-5.0811E-4, 0.029)	0.0811	G	0.0153	>	0.0092	5.47E-07	<	1.52E-06

**Tabla 4.8** Datos obtenidos de las coordenadas, dimensiones y características de la de la película del pellet 2 colocado en el layer 10 con el plano de corte yz, parte 2

<b>Plato 10, Pellet 2 plano YZ</b>			
<i>Variable</i>	$\Delta FL$		$\Delta FG$
0°	0.13	>	0.03
22.5°	-76.23	>	-12.56
45°	0.000000000000033	<	0.14
67.5°	-9.10	<	9.15
90°	1.71	>	0.31
112.5°	35.95	>	7.60
135°	-7.11	>	-94.22
157.5°	-2.02	<	0.34
180°	-40.44	<	-5.69
202.5°	18.81	<	227.71
225°	-1.07	<	-0.0000000000000098
247.5°	-2.18	<	38.00
270°	-7.15	>	-20.80
292.5°	-88.12	<	-39.64
315°	-25.31	>	-241.26
337.5°	2.00	>	-0.15



**Figura 4.4** Representación gráfica de la capa límite del pellet 2 colocado en el layer 10 con el plano de corte  $yz$ .

Una vez colocados todos los resultados obtenidos de las dimensiones y características de la película que rodea a los pellets podemos observar que la mayor parte de los datos siguen el mismo patrón de comportamiento para su determinación y cumplen con los parámetros establecidos para su descripción, aproximadamente entre un 94% y 88% de los datos, con lo que podemos establecer estos valores como las probables capas límite de estos pellets y con estos datos explorar alternativas para mejorar la eficiencia de mojado en las partículas catalíticas para realizar de forma más eficiente el proceso de hidrodesulfuración.

Lo que nos restaría por realizar en trabajos futuros es el análisis de los valores que no continúan con los parámetros establecidos, los cuales están señalados en las tablas con el símbolo \*\*, los cuales 1 de los 3 parámetros no concuerdan con lo establecido y estudiar cuáles son las causas de su incompatibilidad y comprender los fenómenos que ocurren en esos puntos.

## **5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

Con los resultados obtenidos podemos concluir que se cumplieron los objetivos planteados al inicio de este trabajo, ya que se determinó una probable distribución de las 2 fases alrededor de los pellets catalíticos (líquido-gas), sus dimensiones y características.

Una vez observados los datos, podemos indicar que este sistema puede ser la referencia como un procedimiento modelo para determinar las capas límite en otras partículas catalíticas con parámetros similares en otros reactores de lecho escurrido donde se lleve a cabo el mismo proceso de hidrodesulfuración.

Como recomendación se sugiere realizar con el método antes mencionado la obtención de las dimensiones y características de la película en otro arreglo y diferente número de pellets dentro del reactor, arreglo cuadrangular o triangulas con 3 o 4 partículas catalíticas cada uno de manera correspondiente, además en otro tipo de geometría de pellets como lo son cilíndricos, trilobulares, cilíndricos con cruz y pellets anulares cilíndrico con 3 y 4 agujeros para poder comparar cuál de todos es más eficiente y cual tiene mayor porcentaje de mojado y reacciona de una manera más favorable.

## 6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGA, P. L. (s.f.). *Petroquímica y refinerías de petróleo*. Recuperado el 18 de Octubre de 2010, de <http://www.aga.com.ar/international/web/lg/ve/likelgagave.nsf/docbyalias>
- Beaudry, E.G., Mills, P.L., and Dudukovic, M.P. (1986) Gas-Liquid Downflow, Upflow and Countercurrent Flow in Packed Beds: Reactor Performance for a Gas-Limiting Reaction. *Proceed. World Congress III Chem. Eng. Tokyo, Vol. IV, 173*
- Biscaia, E.C., and Cid, E.A. (1986) Isothermal Trickle-Bed Reactor Modeling for Reactions with a Gas-Phase Limitant Reactant. *Proceed. World Congress III Chem. Eng. Tokyo, Vol. IV, 784*
- Bondi, A. (March, 1971) *Handing Kinetics from Trickle-Phase Reactors*. *Chem. Tech.* 185
- Botchwey, C. (June de 2010). *Syntheses, Characterization and Kinetics of Nickel-Tungsten Nitride Catalysts for Hidrotreating of Gas Oil*. Saskatoon.
- Chao, Y.-C., Chang, J.-S., and Huang, H.-P. (1990) Set Point Optimization of an Adiabatic Trickle-Bed Reactor System. *Can. J. Chem. Eng.* 68,139
- Charpentier, J.,C., C. Prost, and P. LeGoff, (1969) *Chute de pression pour des écoulements 11 garnissage acrose: comparaison avec le gamissage noyé* *Chemical Engineering Science*, 24, 1777
- Davidson, J.F., E.G. Cullen, D. Hanson, and D. Roberts, (1959) *The Holdup and Liquid Film Coefficient of Packed Towers, Part I: Behaviour of a String of Spheres, Part II: Statistical Models of Random Packings*, *Transactions of the Institute of Chemical Engineers*, 37,122
- Ellman, MJ., N. Midoux, A Laurent, and J.e. Charpentier, (1988) *A New, Improved Pressure Drop Correlation for Trickle Bed Reactors*, *Chemical Engineering Science*, 43, 2201
- Froment, G., & Bischoff, K. (1979). *Chemical Reactor Analysis and Design*. the United States of America: John Wiley and Sons.
- Funk, G.A., Harold, M.P., and Ng, K.M. (1991) Experimental Study of Reaction in a Partially Wetted Catalytic Pellet. *AICHE. J.* 37, 202
- Goto, S., Lakota, A., and Levee, J. (1981) Effectiveness Factors of nth. Order Kinetics in Trickle-Bed Reactors. *Chem. Eng. Sci.* 36,157
- Haure, P.M., Hudgins, R.R., and Silveston, P.L. (1990) Steady-State Models for SO<sub>2</sub> Oxidation in a Trickle-Bed Reactor. *Chem. Eng. J.* 43,121

- Herskowitz, M. Carbonell, R.G., and Smith, J.M. (1979) Effectiveness Factors and Mass Transfer in Trickle-Bed Reactors. *AICHE J.* 25,272
- Lakota, A., and Levee, J. (1990) Solid-Liquid Mass Transfer in Packed Beds with Cocurrent Downward Two-Phase Flow *AICHE J.* 36, 1444
- Lee, H.M., and Smith J.M. (1982) Trickle-bed Reactors: Criteria of Negligible Transport Effects and of Partial Wetting. *Chem. Eng. Sci.* 37,223
- Leung, P.C., Recasens, F., and Smith, J.M. (1987b) Hydration of Isobutene in a Trickle-bed Reactor: Wetting Efficiency and Mass Transfer. *AICHE J.* 33,996
- Levenspiel, O. (1987). *El minilibro de los reactores químicos*. Barelona: Reverté.
- Mata, A. R., and Smith, J. M. (1981) *Oxidation of Sulfur Dioxide in a Trickle-Bed Reactor*. *Chem. Eng. J.* 22,229
- Mendiburu Diaz, H. (04 de Febrero de 2001). *Galeon*. Recuperado el 09 de Octubre de 2011, de <http://www.galeon.com/hamd/pdf/reactorquimico.pdf>
- Mills, P.L., and Dudukovic, M.P. (1980) Analysis of Catalyst Effectiveness in Trickle-Bed Reactors Processing Volatile and Nonvolatile Reactants. *Chem. Eng. Sci.* 35, 2267
- Mills, P.L., and Dudukovic, M.P. (1981) Evaluation of Liquid-Solid Contacting in Trickle-Bed Reactors by Trancer Methods. *AICHE J.* 27, 893
- Montagna, A.A., Shah, Y.T., and Paraskos, J.A. (1977) Effect of Catalyst Particle Size Performance of a Trickle-Bed Reactor *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.* 16,152
- Morita, S., and Smith, J.M. (1978) Mass Transfer and Contacting Efficiency in a Trickle-Bed Reactor *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 17, 113
- Ramachandran, P.A., and Smith, J.M. (1979a) Effectiveness Factors in Trickle-Bed Rractors. *AICHE J.* 25 538
- Ranade, V., Chaudhari, R., & Gunjal, P. (2011). *Trickle Bed Reactors*. Oxford: Elsevier.
- Ring, Z.E., and Missen, R.W. (1986) *Trickle-Bed reactors: Effect of Wetting geometry on Overall Effectiveness Factors*. *Can. J. Chem. Eng.* 64,117
- Ruecker, C.M., and Akgerman, (1987) *A Determination of Wetting Efficiencies for a Trickle-Bed Reactor at High Temperatures and Pressures* *Ind. Eng. Chem. Res.* 26, 164

- Ruiz, P., Crine M., Germain, A., and L'Homme, G. (1984) *Influence of the Reactional System on the Irrigation Rate in Trickle-Bed Reactors* ACS Symp. Ser. 237, 15
- Saez, A.E., and R.G. Carbonell, (1985) Hydrodynamic Parameters for Gas-Liquid Cocurrent Flow in Packed Beds, *AIChE Journal*, 52
- Sato, Y, T. Hirose, F. Takahashi, M. Toda, and Y. Hashiguchi (1973b), *Flow Pattern of Cocurrent Gas-Liquid Downflow in Packed Bed Reactor*, *Journal of Chemical Engineering Japan*, Q, 315
- Satterfield, C.N. (1975) *Trickle-Bed Reactors* *AICHE J.* 21, 209
- Scoot Fogler, H. (2006). *Elements of Chemical Reaction Engineering*. United States of America: Prentice Hall.
- Sedriks, W., and Kennedy, C.N. (1973) Partial Wetting in Trickle-Bed Reactors: the Reduction of Crotonaldehyde over a Palladium Catalyst. *Chem. Eng. Sci.* 28, 559
- Sicardi, S., Baldi, G., Gianetto, A., and Specchia, V. (1980) Catalyst Area Wetted by Flowing and Semistagmant Liquid in Trickle-Bed Reactors. *Chem.Eng.Sci.*35, 67
- Specchia, V., and G. Baldi (1977) *Pressure Drop and Liquid Holdup for Two Phase Concurrent Flow in Packed Beds*. *Chemical Engineering Science*, 32, 515
- Sweeney, D.E., (1967) *A Correlation for Pressure Drop in Two Phase Concurrent Flow in Packed Beds*. *AIChE Journal*, 13,663
- Tan, C.-S., and Smith, J.M. (1980) Catalyst Particle Effectiveness with Unsymmetrical Boundary Conditions. *Chem. Eng. Sci.* 35, 1601
- Tukac, V., and Hanika, J. (1989) The Effect of Mass Transfer on the Oxidation of Ethanol in a Trickle-Bed Reactor *Int. Chem. Eng.* 29, 177
- Turpin, J .,L., and R.L. Huntington, (1967) *Prediction of Pressure Drop for Two-Phase Two-Component Concurrent Flow in Packed Beds*, *AIChE Journal*, Q, 1196
- Van Klinker, J., and van Dongen, R.H. (1980) *Catalyst Dilution for Improved Performance of Laboratory Trickle-Bed Reactors* *Chem, Eng. Sci.* 35,59
- Warner van der, M. (27 de Noviembre de 2007). *Trickle Bed Hydrodinamic Multiplicity*. Sur Africa.

## 7. ANEXO

Muestra de algunos parámetros hidrodinámicos obtenidos del software COMSOL Multipysics y OriginPro 9.0

**Tabla A.1** Datos obtenidos de la velocidad del líquido y su derivada en el pellet 3 plato 5 en el plano de corte xy a 0°

<i>Velocidad liquido (vL) spf.U</i>		
<i>Arc lenght</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0	0.00409214	-3.26422
7.50E-05	0.00384722	-3.21881
8.06E-05	0.003829688	-3.12837
1.46E-04	0.003628372	-3.6041
1.49E-04	0.003617076	-4.10505
2.23E-04	0.003311045	-5.50077
3.73E-04	0.002274068	-6.8743
3.75E-04	0.002260467	-6.8216
3.98E-04	0.002105549	-6.79977
3.99E-04	0.002099565	-6.77779
4.18E-04	0.001968975	-7.56489
4.29E-04	0.001883635	-8.34375
4.31E-04	0.001862391	-8.27182
4.58E-04	0.001641954	-7.12366
6.07E-04	7.44E-04	-6.03586
7.16E-04	8.43E-05	-7.1969
7.21E-04	4.20E-05	-8.35039
7.26E-04	3.32E-18	-4.1752
0.003148979	9.75E-19	1.8698
0.003150804	6.82E-06	3.73961
0.003158694	3.63E-05	5.80259
0.003247752	7.37E-04	6.93487
0.003293103	0.001009118	7.74345
0.003352661	0.001573886	9.12548
0.003365092	0.001682889	8.79639
0.003399636	0.001987721	8.86029
0.003461001	0.002533623	8.91443
0.003478664	0.002691407	8.93789
0.003491667	0.002807691	8.95297
0.003561037	0.003429456	8.97237
0.003599653	0.003776293	5.21001

0.003658441	0.003860847	1.45289
0.003685891	0.003901131	2.82433
0.003712384	0.004011901	-1.50892
0.003766385	0.00362315	-6.51485
0.003837015	0.003211326	-5.44624
0.003892553	0.002930204	-5.05146
0.003973152	0.002523895	-5.02827
0.004014696	0.002315533	-5.00366
0.004053991	0.002119379	-4.97976
0.004080395	0.001988214	-9.38238
0.004153356	9.82E-04	-13.79713
0.004177977	6.42E-04	-13.79713
0.004218854	7.79E-05	-13.79713
0.004224498	4.86E-18	-13.79713

**Tabla A.2** Datos obtenidos de la velocidad del líquido y su derivada en el pellet 3 plato 5 en el plano de corte yz a 0°

<i>Velocidad liquido (vL) spf.U</i>		
<i>Arc lenght</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0	1.50E-04	2.24E-10
4.05E-05	1.50E-04	2.24E-10
1.94E-04	1.50E-04	-2.22531
2.27E-04	4.12E-20	-2.22531
0.003144266	5.39E-148	-7.06E-18
0.003151899	5.39E-148	-4.57E-144
0.003210898	0	-4.57E-144
0.00344983	0	0

**Tabla A.3** Datos obtenidos de la velocidad del líquido y su derivada en el pellet 2 plato 10 en el plano de corte xy a 0°

<i>Velocidad liquido (vL) spf.U</i>		
<i>Arc lenght</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0	0.005093413	-11.37648
9.6991E-06	0.004983072	-11.0415
0.000249714	0.002413345	-10.30447
0.000285386	0.002060104	-8.20218
0.000311147	0.001892607	-9.72486
0.000358298	0.00128211	-11.64189
0.000365379	0.001208917	-9.761
0.000379035	0.001083479	-5.92092

0.0004195	0.000976009	-1.84545
0.000593429	0.000795982	-3.47647
0.000713844	8.33794E-05	-6.34763
0.000726146	5.12433E-19	-3.38869
0.003149063	2.29723E-18	2.3198
0.003161122	5.59527E-05	4.84795
0.00324402	0.000475109	9.0643
0.003306043	0.00128589	10.49655
0.003575227	0.00341804	8.32454
0.003575815	0.003423179	8.72836
0.003576271	0.003427154	9.41949
0.00368139	0.004489968	11.38517
0.003703457	0.004769327	5.91502
0.00370779	0.004765731	-3.54744
0.003744134	0.004538035	-6.18903
0.003833473	0.003991909	-6.07735
0.004025128	0.002833975	-9.9905
0.004228437	9.31352E-18	-13.93922

**Tabla A.4** Datos obtenidos de la velocidad del líquido y su derivada en el pellet 2 plato 10 en el plano de corte yz a 0°

<i>Velocidad liquido (vL) spf.U</i>		
<i>Arc lenght</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0.0000000000	0.00136607	15.63159
0.0001030659	0.002977153	-0.16276
0.0002083242	0.001297534	-13.24695
0.0003035356	0.0002943114	-9.21049
0.0003408649	2.45E-18	-3.94209
0.0031018694	1.22E-17	10.73257
0.0031020396	0.0000036518	21.46514
0.0031425271	0.0008727222	18.50015
0.0032196243	0.00207044	7.35283
0.0033019992	0.002002109	-0.81626
0.0033460577	0.001966729	-1.34224
0.0035747805	0.001536396	-7.19351
0.0036185806	9.89E-04	-12.50555
0.0036976376	0	-12.50555

**Tabla A.5** Datos obtenidos de la velocidad del líquido y su derivada en el pellet 3 plato 5 en el plano de corte xy a 22.5°

<i>Velocidad liquido (vL) spf.U</i>		
<i>Arc lenght</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0	2.52E-04	5.26178
1.58E-07	2.53E-04	3.96225
3.01E-05	3.32E-04	2.67363
6.20E-05	4.18E-04	2.68908
7.67E-05	4.58E-04	2.69908
1.92E-04	7.70E-04	2.70719
1.93E-04	7.73E-04	2.70988
1.95E-04	7.78E-04	2.95996
2.22E-04	8.64E-04	2.27178
2.46E-04	8.96E-04	1.85963
3.06E-04	0.001039885	2.72512
3.20E-04	0.001082849	3.24206
3.60E-04	0.001219211	1.00104
3.85E-04	0.001184332	-1.40613
3.85E-04	0.001182994	-1.13677
3.88E-04	0.001180569	-0.87808
3.89E-04	0.001179987	-0.85551
4.89E-04	0.001096796	-0.80434
5.12E-04	0.001078909	-2.64041
5.82E-04	7.63E-04	-4.31457
6.01E-04	6.82E-04	-3.94767
6.27E-04	5.87E-04	-3.26852
6.53E-04	5.15E-04	-2.75794
6.96E-04	3.95E-04	-2.73956
7.16E-04	3.41E-04	-3.25798
7.73E-04	1.27E-04	-3.78765
8.06E-04	0	-1.89383
3.22E-03	8.57E-19	0.49708
3.30E-03	7.46E-05	0.99417
0.003328922	1.04E-04	0.99417
0.003349064	1.24E-04	1.24199
0.003510588	3.65E-04	1.56262
0.003519816	3.80E-04	1.64057
0.003557888	4.43E-04	1.38596
0.003582023	4.70E-04	1.18347
0.003615598	5.12E-04	0.26746
0.003637082	4.96E-04	-0.59965
0.003668523	4.81E-04	-0.96354

0.003690137	4.50E-04	-1.43077
0.003746103	3.70E-04	-1.42077
0.003807777	2.83E-04	-1.407
0.003811995	2.77E-04	-1.38503
0.003882786	1.80E-04	-1.34538
0.003885513	1.76E-04	-1.30639
0.003906908	1.49E-04	-2.07122
0.003959074	4.16E-18	-2.8508

**Tabla A.6** Datos obtenidos de la velocidad del líquido y su derivada en el pellet 3 plato 5 en el plano de corte yz a 22.5°

<i>Velocidad liquido (vL) spf.U</i>		
<i>Arc lenght</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0	8.95E-04	2.52502
8.55E-05	0.001111148	1.43054
1.01E-04	0.00111626	0.36466
1.34E-04	0.001129186	-1.45444
1.87E-04	9.52E-04	-3.20704
2.10E-04	8.82E-04	-3.05885
2.25E-04	8.37E-04	-3.94406
2.55E-04	6.89E-04	-4.88237
3.96E-04	2.12E-18	-2.44118
0.003301785	1.57E-18	6.05607
0.003303854	2.51E-05	12.11214
0.00331798	1.96E-04	6.75763
0.00338314	2.88E-04	0.40041
0.003483379	2.27E-04	-0.27666
0.003716615	2.39E-04	-3.43798
0.003751074	1.63E-18	-6.92495

**Tabla A.7** Datos obtenidos de la velocidad del líquido y su derivada en el pellet 2 plato 10 en el plano de corte xy a 22.5°

<i>Velocidad liquido (vL) spf.U</i>		
<i>Arc lenght</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0	8.65503E-20	4.80512
3.78782E-05	0.000182009	3.53743
0.000147504	0.000430832	2.64575
0.000330336	0.000983305	3.41752
0.000363125	0.001108339	4.88862
0.000417586	0.001433139	2.81041

0.000520411	0.001397858	-2.05035
0.000645807	0.000926669	-3.74402
0.000710264	0.000686215	-4.70563
0.00073305	0.000556772	-5.18317
0.000739187	0.000528018	-4.47863
0.000759665	0.000440543	-4.2717
0.000862796	7.5686E-19	-2.13585
0.003280686	2.65257E-18	1.38873
0.003376474	0.000266048	2.97438
0.003448185	0.000493466	2.07128
0.003571526	0.000613262	1.0076
0.003596713	0.000639556	2.27481
0.00364034	0.000792498	3.50677
0.003667012	0.000886062	0.52597
0.003676833	0.000861942	-2.78316
0.003704546	0.000775744	-3.08656
0.003717086	0.000737339	-3.14383
0.003737198	0.000672476	-3.22449
0.003773597	0.000555125	-2.77545
0.00401217	1.33357E-18	-2.32686

---

***Velocidad liquido (vL) spf.U***

<i>Arc lenght</i>	<i>Velocidad</i>	<i>Derivada</i>
0.0000000000	0.002381171	5.62317
0.0000138523	0.002459065	5.39695
0.0000254920	0.002519251	5.17073
0.0000286142	0.002535395	6.16388
0.0000493411	0.002683738	6.9569
0.0000512132	0.002696387	6.75784
0.0000526683	0.002706222	3.64349
0.0000653405	0.002712914	0.53592
0.0000692063	0.002715016	-1.84924
0.0003709202	0.001435072	-4.19689
0.0003849455	0.001376846	-6.71365
0.0004370808	8.93E-04	-9.07344
0.0004425323	8.45E-04	-8.87112
0.0005377729	5.40E-18	-4.43556
0.003294832	4.68E-19	1.27428
0.00349121	5.00E-04	2.54855
0.003491938	5.02E-04	2.86587
0.003533118	6.33E-04	3.9438
0.003555722	7.40E-04	5.55385

0.003568691	8.23E-04	4.1031
0.003573092	8.31E-04	-2.50117
0.003574381	8.22E-04	-6.66025
0.003602749	6.37E-04	-3.89283
0.004020706	1.06E-04	-1.94388
0.004061268	4.20E-18	-2.61735

**Tabla A.8** Datos obtenidos de la velocidad del líquido y su derivada en el pellet 2 plato 10 en el plano de corte yz a  $22.5^\circ$