

# Aproximación numérica en un reactor de lecho empacado estructurado sobre la influencia de la transferencia de masa en la conversión química

The influence of mass transfer on chemical conversion. A Numerical approximation in a structured packed bed reactor

Raamses Díaz<sup>1\*</sup>, Fernando Ruetter<sup>2</sup>, Leonardo Di G. Sigalotti<sup>3</sup>, Jaime Klapp<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Centro de Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC), Miranda, Venezuela. E-mail: raamsesdiazsoto@gmail.com

<sup>2</sup> Centro de Química, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC), Miranda, Venezuela.

<sup>3</sup> Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana (UAM), Azcapotzalco, México.

<sup>4</sup> Departamento de Física, Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ), Toluca, México.

Recibido 11/12/2019

Aceptado para publicación 28/10/2020

## Resumen

Se realizó una aproximación numérica sobre un reactor monolítico de canales circulares, en el cual la transformación de metanol a olefinas se llevó a cabo en condición adiabática, en presencia de un catalizador ZSM-5. Cuantificando el efecto de la transferencia de masa. La simulación mostró una muy buena correlación con el experimento y que para diversos espesores de la pared de canal ( $t_w$ ), la convertibilidad del metanol fue mayor a medida que el espesor de la pared fue mayor. Se pudo deducir que al 50% de la longitud del reactor, casi toda la composición de metanol ha sido transformada.

*Palabras clave: Lecho Monolítico, Catálisis, Fluidos, Metanol, Propileno.*

## Abstract

A numerical approximation was carried out on a monolithic reactor with circular channels, in which the transformation of methanol to olefins was carried out under adiabatic condition, in the presence of a ZSM-5 catalyst. Quantifying the effect of mass transfer. The simulation showed a good correlation with the experiment and that for various channel wall thicknesses ( $t_w$ ), the convertibility of methanol was greater as the wall thickness was greater. It could be deduced that at 50% of the length of the reactor, the entire methanol composition has been transformed.

*Keywords: Monolithic Bed, Catalysis, Fluids, Methanol, Propylene.*

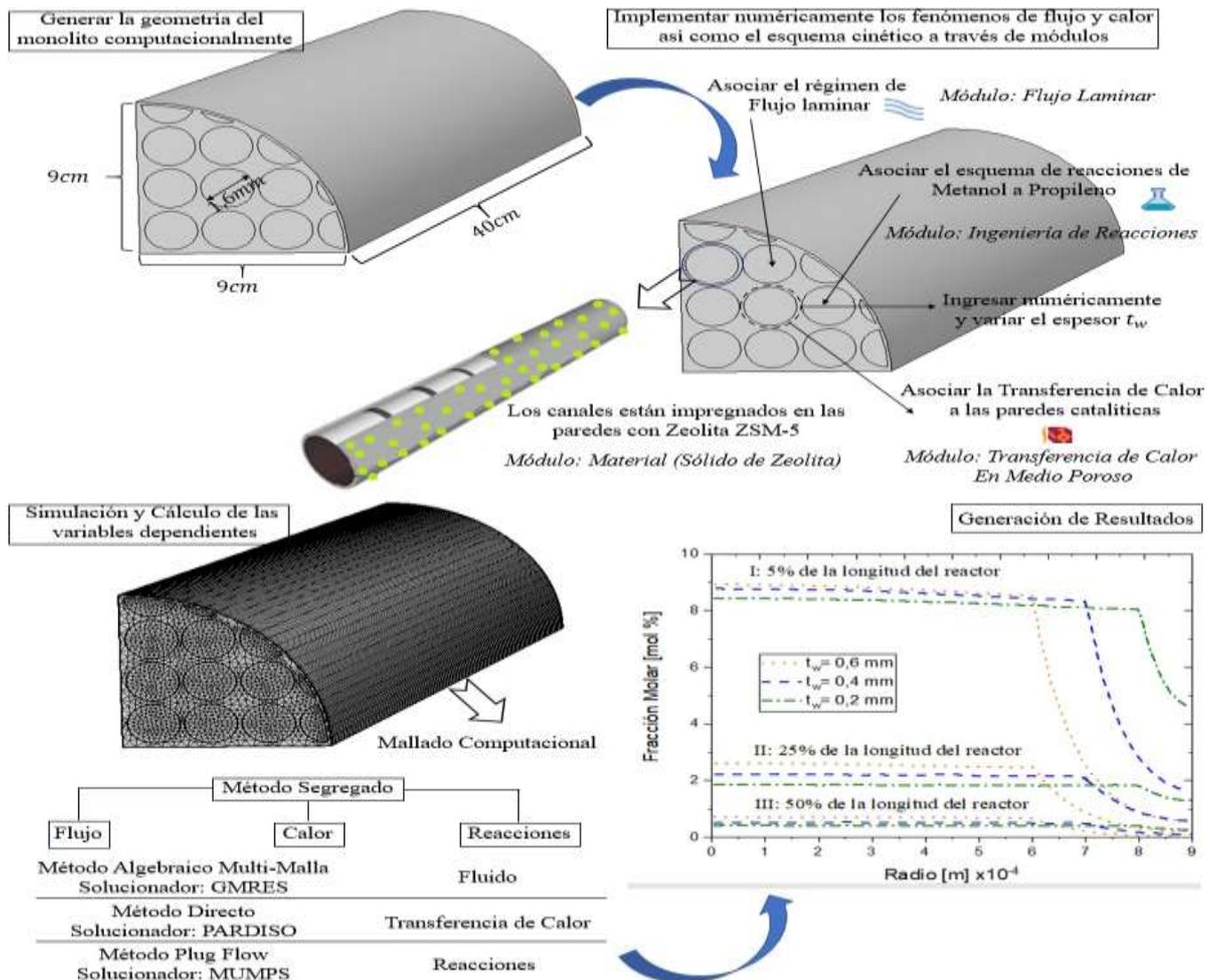
## Highlights

1. La metodología numérica elegida para modelar los procesos de flujo y reacciones en el monolito, permitió obtener una alta correspondencia entre los datos experimentales y los datos computacionales, en términos de la selectividad ( $S_i$ ) de los productos.
2. Al aumentar los valores del espesor de la pared catalítica ( $t_w$ ) en un rango de (0,2-0,6)mm, aumenta la resistencia a la transferencia de masa y por lo tanto se genera un gradiente de concentración mayor.
3. En la dirección radial del monolito se pudo constatar que la convertibilidad de metanol aumenta a medida que aumenta el espesor de la pared de los canales. A 0,6mm se sucede la mayor transferencia de masa y la convertibilidad se incrementa.

4. A partir de la simulación del reactor se pudo determinar que la transferencia de masa sucede principalmente en la zona gaseosa o interior de los canales del monolito y disminuye a medida que se incrementa la distancia longitudinal del reactor, con un punto de máxima transformación de metanol a propileno al 50% de la longitud total del monolito.

© Sociedad Venezolana de Catálisis.

### Resumen Gráfico / Graphical Abstract



## 1. Introducción

Los reactores de lecho fijo son un tipo de reactor ampliamente utilizado en los procesos químicos industriales. Entre algunas aplicaciones, dichos reactores desempeñan un rol importante en la catálisis heterogénea. La fenomenología asociada a los reactores constituye diversos procesos interrelacionados, tal como la hidrodinámica, el transporte de masa y calor, además de reacciones químicas [1].

Para el desarrollo de los procesos de transporte y procesos cinéticos de interés en una escala industrial, dos variantes de reactores de lecho fijo han sido implementadas. El reactor de partículas fijas, que consta de un entorno tubular donde han sido depositadas

aleatoriamente partículas con cierta geometría, generalmente esféricas, de diámetro de algunos micrómetros y que representan un medio poroso. Un reactor dispuesto de dicha forma se dice que es un reactor no estructurado. En contraparte, un reactor estructurado consta de un monolito que llena todo el entorno tubular y posee canales de determinado diámetro [2]. En comparación con los reactores de partículas dispuestas aleatoriamente, los reactores estructurados poseen las características de mejorar la caída de presión a lo largo de su extensión, mejor transferencia de masa en dirección longitudinal y mayor área específica utilizable para el proceso de transformación química [3]. Para ambas variantes de reactor, se considera al sistema como una combinación gas-sólido, donde el gas es una mezcla multicomponente específica que interacciona con la fase sólida que es considerada como catalizador [4].

El estudio sobre reactores de lecho fijo apunta a entender detalladamente como se acoplan y cuál es la dependencia de los fenómenos cinéticos y los de transporte además de la dinámica de fluidos. El análisis sobre dicha dependencia podrá proporcionar una mayor comprensión sobre la optimización en términos de la selectividad y la conversión que sucedan en un reactor de lecho fijo para un esquema de reacciones específicas [5].

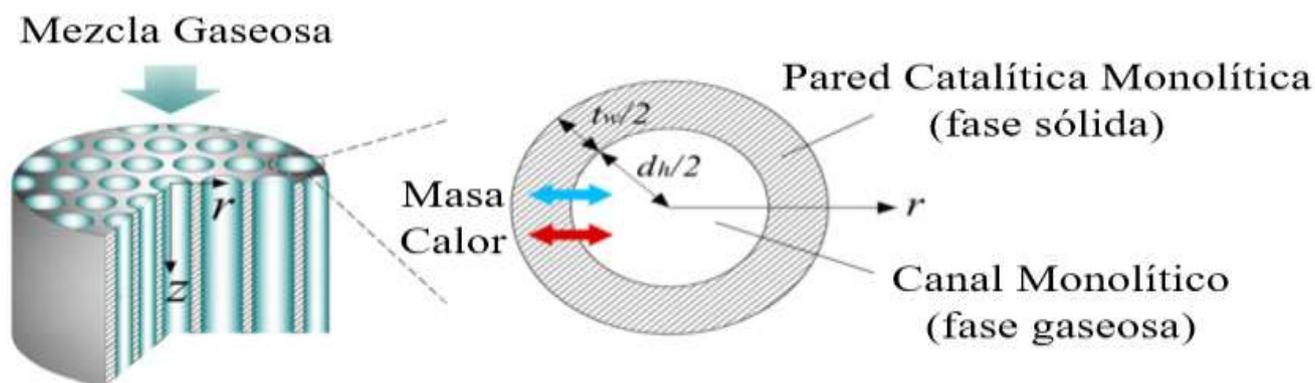
Para los reactores de lecho fijo, las aproximaciones convencionales, como los modelos analíticos pseudo-homogéneos, que resuelven las ecuaciones asociadas no proporcionan una solución adecuada al sistema, debido a que no toman en consideración los efectos de los cambios locales, que provienen de la variación permanente de las propiedades del fluido y el cambio en su composición debido a las reacciones que suceden a través del reactor [6]. Por esa razón, una forma de abordar adecuadamente los fenómenos físicos que suceden en el reactor ha sido a través de la implementación de la Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) [7]. La consideración de DFC se traduce en una aproximación computacional, que toma en consideración la geometría del reactor, los fenómenos de transporte de momento, calor y especies químicas como fenómenos acoplados y la codependencia entre los fenómenos de dispersión o difusión con los mecanismos cinéticos de transformación de las especies químicas involucradas [8].

Por lo tanto, para entender la interacción entre los procesos físicos y químicos en la interfaz gas-sólido en un reactor de lecho fijo, se propone un modelo numérico 3D a una escala de laboratorio del sistema, esto es, en el orden de magnitud de los centímetros. La validez del modelo será corroborada a través de la comparación con datos experimentales.

En este trabajo, el objetivo es, a partir de la comparación, entre el modelo numérico y los datos experimentales de una interacción gas-sólido en específico para un reactor de lecho fijo estructurado, determinar los procesos físicos que impactan en la optimización del reactor en términos de selectividad y conversión de especies químicas cuando el esquema cinético de reacciones queda definido por la transformación de metanol a propileno y utilizando una interfaz sólida de Zeolita ZSM5.

## 2. Metodología

El sistema a estudiar se basa en un proceso industrial conocido, donde varias corrientes de olefinas representadas en fracciones de C4 y C6 se mezclan con metanol y agua para obtener productos de interés petroquímico como etileno y propileno [9]. Se desarrollará un modelo de lecho empacado como se muestra en la Fig. 1. La simulación numérica correspondiente se realizará en el régimen de estado estacionario.



**Figura 1.** Modelo esquemático de un catalizador monolítico con énfasis de la sección transversal de un canal monolítico sencillo, donde ( $t_w$ ) es el espesor de la pared catalítica y ( $d_h$ ) es el diámetro hidráulico de los canales. Modificado de [10].

### 2.1. Modelo del Reactor

En el presente trabajo el modelo de reactor toma la particularidad del canal sencillo, donde se asume que cada canal en la fase sólida se comporta de la misma manera y es representativo para la totalidad de la extensión del reactor. Se considera la fase sólida o catalizador como una región que posee canales longitudinales y que las paredes de la sección tubular es un material continuo. En el interés de combinar los efectos de las reacciones químicas, la transferencia de masa y de calor tanto en la fase gaseosa y sólida en una condición adiabática. Se adopta un modelo numérico en 3D para describir el funcionamiento del proceso de conversión.

El modelo toma las consideraciones de que los flujos de masa y calor axiales son despreciables en comparación con los efectos convectivos; la conducción de calor en la fase gaseosa es despreciable y sólo la conducción en la fase sólida es considerada; las capacidades caloríficas específicas de la fase sólida y gaseosa son constantes; el flujo gaseoso entra al reactor con velocidad inicial uniforme y se comporta según la ley de gas ideal [11].

La estructura monolítica considerada en el modelo se caracteriza por el espesor de la pared catalítica y la densidad de celdas (canales por unidad de centímetro cuadrado). Para el presente estudio numérico, se construye un modelo tal que una densidad de celda de 200, un radio de canal de 0,80 mm, un espesor de pared variable de (0,20-0,60) mm, una fracción de vacíos o porosidad de canal de 0,8, una longitud total de reactor de 40 cm con un radio de 9 cm.

Las ecuaciones que gobiernan el reactor monolítico se dividen en dos dominios: los flujos en los canales o fase gaseosa y las paredes sólidas, las cuales están acopladas a través de las condiciones de borde en la superficie del monolito. La aproximación de monolito simple, comprende una geometría axisimétrica cilíndrica que constituye una componente axial o coordenada  $z$  y una componente radial o coordenada  $r$ , los cuales son variables independientes como se expuso en la Fig. 1. Las ecuaciones de balance de masa y calor son descritas en coordenadas cilíndricas y se han escrito en la Tabla 1. Dichas ecuaciones se resuelven simultáneamente con un modelo hidrodinámico y de reacciones [8].

**Tabla 1.** Ecuaciones del modelo de reactor monolítico para la masa y la energía.

Parámetro	Ecuación*
Balance de masa (fase gaseosa)	$u_z \frac{\partial c_{i,g}}{\partial z} - D_{i,f} \left( \frac{\partial^2 c_{i,g}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c_{i,g}}{\partial r} \right) = 0$
Balance de energía (fase gaseosa)	$u_z \frac{\partial T_g}{\partial z} - \frac{h_g}{\rho_g \cdot C_{p,g}} \left( \frac{\partial^2 T_g}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) = 0$
Balance de masa (fase sólida)	$D_{i,e} \left( \frac{\partial^2 c_{i,s}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c_{i,s}}{\partial r} + \frac{\partial^2 c_{i,s}}{\partial z^2} \right) + \sum_j (\lambda_{i,j} \cdot r_j) = 0$
Balance de energía (fase sólida)	$h_{s,e} \left( \frac{\partial^2 T_s}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_s}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \right) + \sum_j r_j \cdot (-\Delta H_{r,j}) = 0$

\*Las variables usadas en estas ecuaciones son:  $u_z$  es la velocidad en la dirección  $z$ ,  $c_{i,g}$  es la concentración en la fase gaseosa de determinadas especies  $i$ ,  $r$  es la coordenada radial,  $D_{i,f}$  es el coeficiente de difusión molecular de las especies  $i$ ,  $T_g$  es la temperatura de la mezcla gaseosa,  $h_g$  es la conductividad térmica de la fase gaseosa,  $\rho_g$  es la densidad en la fase gaseosa,  $C_{p,g}$  es el calor específico de la fase gaseosa,  $D_{i,e}$  coeficiente de difusión efectivo de las especies  $i$ ,  $\lambda_{i,j}$  coeficiente estequiométrico de las especies  $i$  y las reacciones  $j$ ,  $r_j$  es la velocidad de reacción de la reacción  $j$  en el esquema cinético,  $h_{s,e}$  es la conductividad térmica intrínseca del sólido catalítico,  $-\Delta H_{r,j}$  es el calor asociado a la reacción  $j$  en el esquema cinético.

Las consideraciones para el modelo son tales que el flujo por los canales del monolito es laminar, completamente desarrollado y en una dirección longitudinal, la caída de presión a lo largo de los canales del monolito es despreciables, el flujo convectivo en las paredes del monolito es irrelevantes y no se toma en consideración [10], donde el monolito se representa por una sección cilíndrica con una región circular para los canales.

Las correlaciones generales como modelo de parámetros de las propiedades físicas se toman de la literatura y en donde se parte del comportamiento de una mezcla gaseosa multicomponente [1,6,8]. Bajo las condiciones iniciales, el promedio del peso molecular, la densidad, el calor específico, la conductividad térmica y la viscosidad de la mezcla son  $30,7g.mol^{-1}$ ,  $0,53kg.m^{-3}$ ,  $2,3kJ.kg^{-1}.K^{-1}$ ,  $0,063W.m^{-1}.K^{-1}$  y  $25,2\mu.Pa.s$  respectivamente.

## 2.2 Modelo Cinético

El proceso cinético a modelar es aquel donde ocurre una reacción simultánea entre el metanol y las olefinas sobre un catalizador tipo Zeolita ZSM-5. El camino principal para la reacción y el mecanismo reactivo es la metilación y el craqueo de las olefinas, donde el propileno es principalmente producido como resultado del craqueo del hexeno-buteno y del eteno que proviene del hexeno [12], lo cual ha sido reproducido en trabajos experimentales previos [10].

Se utiliza en este trabajo un esquema cinético que pueda representar el mecanismo detallado de la conversión de metanol a propileno y a su vez pueda ser manejado sin una alta demanda de cálculo computacional, para ello se utiliza un esquema cinético basado en la metilación y craqueo catalítico de olefinas [15] como se muestra en la Tabla 2. En la Tabla 2,  $Z$  se refiere al factor de inhibición de la absorción de agua,  $E_a$  es la energía de activación y la constante de reacción para cada velocidad de reacción viene dada por  $k_i$  [10].

**Tabla 2.** Esquema Cinético. Modificado de [15].

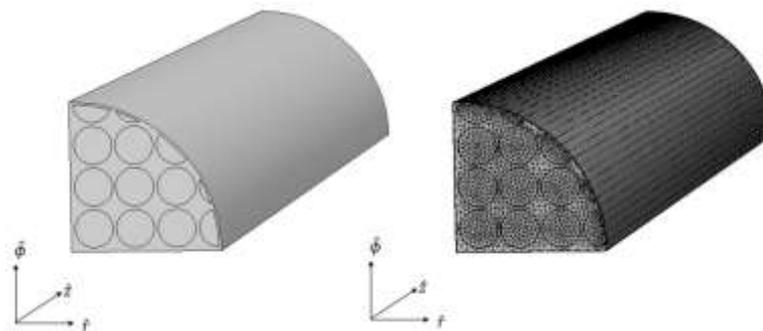
No.	Reacción	Velocidad de Reacción (mol/kg.h)	$k_0$ (mol/kg.h)	$E_a$ (kJ/mol)
1	$2CH_3OH \rightleftharpoons CH_3OCH_3 + H_2O$	Considerada en Equilibrio		
2	$CH_3OH + C_3H_6 \xrightarrow{k_1} C_4H_8 + H_2O$	$r_1 = k_1 \cdot C_{CH_3OH} \cdot C_{C_3H_6} \cdot Z^2$	71.31	$1.16 \times 10^2$
3	$CH_3OH + C_4H_8 \xrightarrow{k_2} C_5H_{10} + H_2O$	$r_2 = k_2 \cdot C_{CH_3OH} \cdot C_{C_4H_8} \cdot Z^2$	$3.39 \times 10^2$	$2.23 \times 10^2$
4	$CH_3OH + C_5H_{10} \xrightarrow{k_3} C_6H_{12} + H_2O$	$r_3 = k_3 \cdot C_{CH_3OH} \cdot C_{C_5H_{10}} \cdot Z^2$	$2.61 \times 10^2$	92.33
5	$CH_3OH + C_6H_{12} \xrightarrow{k_4} C_7H_{14} + H_2O$	$r_4 = k_4 \cdot C_{CH_3OH} \cdot C_{C_6H_{12}} \cdot Z^2$	$2.14 \times 10^2$	55.26
6	$C_7H_{14} \xrightleftharpoons[k_5^{-1}]{k_5} C_3H_6 + C_4H_8$	$r_5 = k_5 \cdot C_{C_7H_{14}} \cdot Z - k_5^{-1} \cdot C_{C_3H_6} \cdot C_{C_4H_8}$	$2.87 \times 10^3$	45.34
7	$C_6H_{12} \xrightleftharpoons[k_6^{-1}]{k_6} 2C_3H_6$	$r_6 = k_6 \cdot C_{C_6H_{12}} \cdot Z - k_6^{-1} \cdot C_{C_3H_6}^2 \cdot Z^2$	$2.21 \times 10^2$	14.09
8	$C_6H_{12} \xrightleftharpoons[k_8^{-1}]{k_7} C_2H_4 + C_4H_8$	$r_7 = k_7 \cdot C_{C_6H_{12}} \cdot Z - k_7^{-1} \cdot C_{C_2H_4} \cdot C_{C_4H_8} \cdot Z^2$	75.70	4.05
9	$2C_5H_{10} \xrightleftharpoons[k_9^{-1}]{k_8} C_3H_6 + C_5H_{10}$	$r_8 = k_8 \cdot C_{C_5H_{10}}^2 \cdot Z^2 - k_8^{-1} \cdot C_{C_4H_8} \cdot C_{C_6H_{12}} \cdot Z^2$	33.43	$1.19 \times 10^2$
10	$2C_4H_8 \xrightleftharpoons[k_9^{-1}]{k_9} C_3H_6 + C_5H_{10}$	$r_9 = k_9 \cdot C_{C_4H_8}^2 \cdot Z^2 - k_9^{-1} \cdot C_{C_3H_6} \cdot C_{C_5H_{10}} \cdot Z^2$	30.83	3.03
11	$C_7H_{14} \xrightarrow{k_{10}} C_7H_8 + 3H_2$	$r_{10} = k_{10} \cdot C_{C_7H_{14}} \cdot Z$	25.33	$1.44 \times 10^2$
12	$2C_4H_8 \xrightarrow{k_{11}} C_8H_{10} + 3H_2$	$r_{11} = k_{11} \cdot C_{C_4H_8}^2 \cdot Z^2$	0.90	48.38
13	$2C_8H_{10} \xrightleftharpoons[k_{12}^{-1}]{k_{12}} C_7H_8 + C_9H_{12}$	$r_{12} = k_{12} \cdot C_{C_8H_{10}}^2 \cdot Z^2 - k_{12}^{-1} \cdot C_{C_7H_8} \cdot C_{C_9H_{12}} \cdot Z^2$	$2.45 \times 10^{-2}$	$1.26 \times 10^2$
14	$C_9H_{12} + H_2 \xrightarrow{k_{14}} C_8H_{10} + CH_{14}$	$r_{13} = k_{13} \cdot C_{C_9H_{12}} \cdot Z$	3.80	$1.06 \times 10^2$
15	$C_2H_4 + H_2 \xrightarrow{k_{14}} C_2H_6$	$r_{14} = k_{14} \cdot C_{C_2H_4} \cdot Z$	1.29	36.08
16	$C_3H_6 + H_2 \xrightarrow{k_{15}} C_3H_8$	$r_{15} = k_{15} \cdot C_{C_3H_6} \cdot Z$	1.16	77.22
17	$C_4H_8 + H_2 \xrightarrow{k_{16}} C_4H_{10}$	$r_{16} = k_{16} \cdot C_{C_4H_8} \cdot Z$	1.85	3.15

Los datos cinéticos fueron adquiridos bajo condiciones de presión atmosféricas y a temperaturas de 410 a 480°C. Las presiones iniciales del metanol y de los n-alcanos se modificaron desde 10 a 40kPa, diluyendo la mezcla con agua y nitrógeno [13]. El esquema cinético de reacciones que se propone es conocido de trabajos previos [14,15]. El modelo cinético consiste de 17 reacciones entre 15 especies fluidas diferentes y para las cuales se conocen los valores de constante de reacción, velocidad de reacción y energía de activación para cada una de las transformaciones.

Este trabajo está enfocado en el funcionamiento de los fenómenos de transporte en el reactor en vez de la cinética, por lo tanto, se hacen referencias a trabajos previos sobre la elección y viabilidad del esquema cinético propuesto [14,15].

### 2.3 Método Numérico

El modelo matemático consiste en un sistema complejo de ecuaciones diferenciales parciales de tipo mixtas con condiciones de borde no-lineales y que acoplan la fase sólida con la fase gaseosa, punto donde, las propiedades físicas, químicas y fenómenos de transporte son calculadas. El método de volumen finito a través de un software dedicado a flujos reactivos (COMSOL) ha sido empleado para resolver las ecuaciones diferenciales parciales numéricamente, lo cual significa que el reactor se divide en un número adecuado de celdas (440000-450000 dependiendo de la complejidad de la simulación) y que finalmente reducirá las ecuaciones a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias. El modelo se presenta en la Fig. 2.



**Figura 2.** (a) Geometría del modelo, considerando solo una porción del entorno tubular del reactor monolítico. (b) Mallado computacional para el modelo del reactor monolítico.

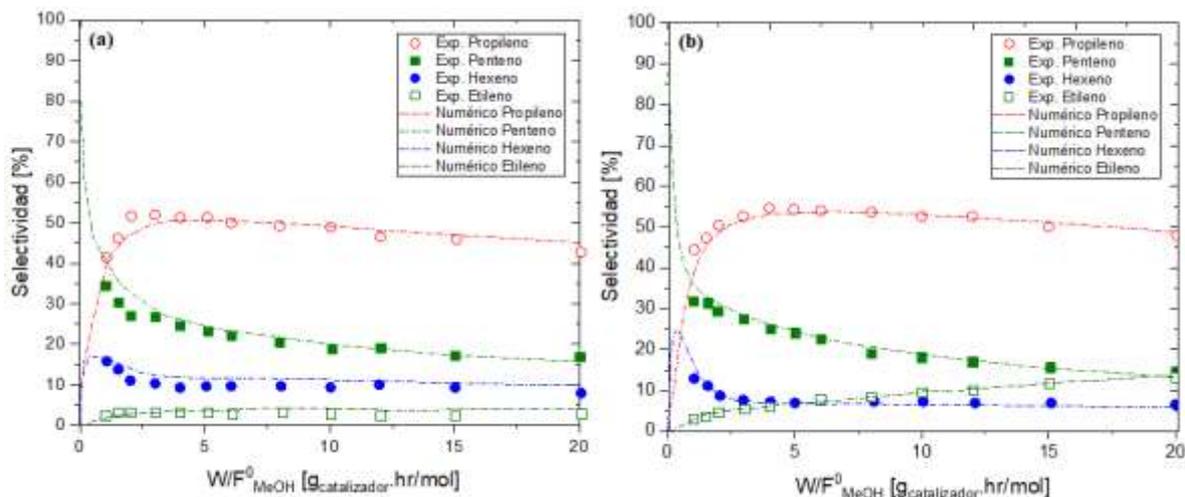
En el modelo se contempla la simulación de solo una porción del lecho monolítico, ya que es representativo debido a la alta simetría del reactor además de disminuir considerablemente el tiempo de cómputo. Dicho modelo se sometió a un mallado computacional estructurado (paredes externas del reactor) en combinación con no-estructurado (canales), como se expone en la Fig. 2 (b). En el presente trabajo, la resolución de las ecuaciones de dinámica de fluidos se realizó utilizando el método de multi-malla bajo el solucionador GMRES, la ecuación de transferencia de calor con un método directo de linealización de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales bajo el solucionador PARDISO y las reacciones químicas previamente asignadas al modelo, fueron resueltas con el método de plug-flow bajo el solucionador MUMPS. Se estableció el método numérico segregado de DFC, como el modo de solución global, en el cual los solucionadores para cada ecuación son tratados paralelamente, distribuyendo la memoria virtual de forma simultánea, es decir, son integrados simultáneamente para generar una solución aproximada al sistema.

### 3. Resultados y Discusión

Se seleccionaron dos conjuntos de datos experimentales de conversión de metanol a propileno, a escala de laboratorio para un reactor monolítico constituido de catalizador tipo ZSM-5 y con radio hidráulico de canal de 0,80 mm [14] para compararlos con los cálculos numéricos. La comparación se llevó a cabo a una temperatura de 713 K (Fig. 3 (a)) y a una temperatura de 753 K (Fig. 3 (b)), con la misma composición inicial de metanol (20%), n-buteno (10%), agua (50%) y balanceado con nitrógeno.

En la Fig. 3, se grafica la selectividad de determinados alcanos en comparación con el flujo inicial de metanol que pasa por unidad de peso de catalizador, donde  $W$  es el peso de catalizador medido en gramos ( $g_{\text{catalizador}}$ ) y  $F_{\text{MeOH}}^0$  es el flujo de metanol inicial y se mide en moles por unidad de horas (mol/hr). Se puede notar que existe concordancia entre las observaciones experimentales (símbolos) y las predicciones numéricas (líneas), justo como se muestra en la Fig. 3, lo cual demuestra que el modelo presente es capaz de describir el comportamiento del reactor de un modo satisfactorio, según una aproximación de DFC.

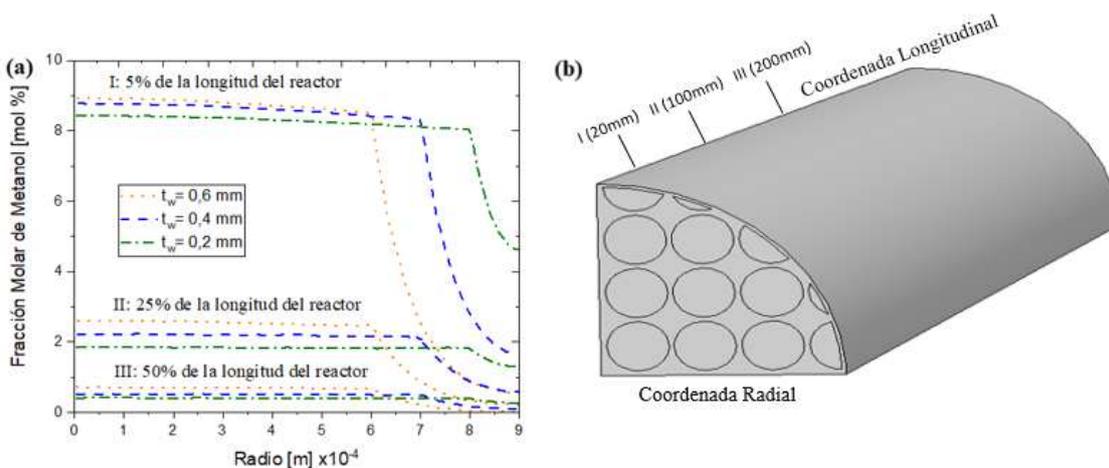
La selectividad se calcularon numéricamente acorde a una razón entre flujos tal que  $S_i = \frac{F_i - F_{oi}}{\sum_{i \neq j} (F_{oj} - F_j)}$ , donde los flujos  $F_{oi}$  y  $F_{oj}$  son los flujos iniciales o de entrada al reactor de dos especies gaseosas diferentes  $i$  e  $j$  y los flujos  $F_i$  y  $F_j$  son aquellos que corresponden a las especies gaseosas de los productos a lo largo del reactor.



**Figura 3.** Comparación entre los resultados experimentales (símbolos) y los resultados numéricos (líneas) para un reactor monolítico a: (a) 713 K y (b) 753 K. Los datos experimentales se tomaron de [14].

Para generar un mayor entendimiento de los procesos inter-relacionados en un reactor de lecho fijo estructurado, en la Fig. 4 se ha reproducido el perfil de la fracción molar de metanol en la dirección radial del reactor para 3 valores diferentes del espesor de los canales del monolito  $t_w$ , con una densidad de celdas de 200 y medidos a tres distancias longitudinales del reactor, ya sea a 5% (20 mm), 25% (100 mm) y 50% (200 mm) en relación a la medida total del reactor.

En la Fig. 4 se obtuvieron resultados sobre la conversión de metanol expresada en fracción molar para la dirección radial del reactor tomando en cuenta tres casos diferenciados: al inicio del reactor o caso I (5% de la longitud total), para una distancia un poco mayor o caso II (25% de la longitud total) y a una distancia intermedia del reactor o caso III (50% de la longitud total).

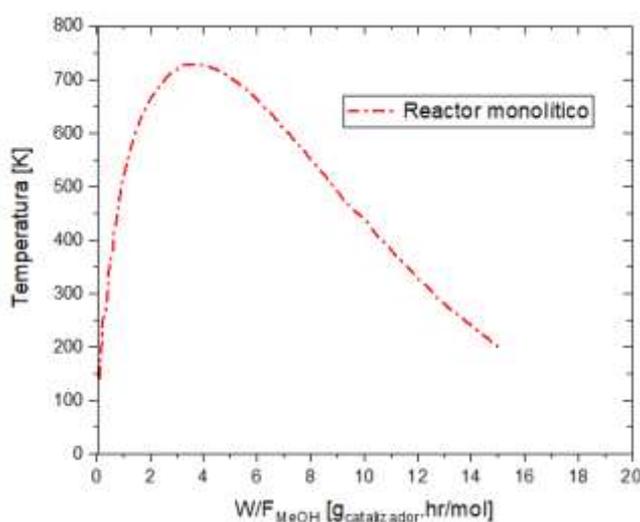


**Figura 4.** (a) Perfiles radiales de la fracción molar de metanol para tres casos diferentes del espesor de la pared monolítica ( $t_w$ ) y medidos a tres distancias longitudinales del reactor: 5% (20mm), 25% (100 mm) y 50% (200mm) de la longitud total. (b) Esquema sobre el lecho monolítico indicando las longitudes de interés.

Hacia la izquierda de las curvas se halla la zona gaseosa y a hacia la zona derecha se halla la zona sólida, separadas por un punto de inflexión o zona de interfaz entre ambas. Las pequeñas diferencia en las concentraciones radiales de metanol desde la zona gaseosa hasta la pared catalítica implica que la transferencia de masa externa contribuye de forma mínima en el proceso de conversión. En consecuencia, los cambios determinantes en el rendimiento del reactor provienen de la transferencia de masa dentro de los canales. Además, en la Fig. 4 se puede observar que los gradientes de concentración de metanol son mayores en las paredes de los canales impregnados de Zeolita ZSM-5 que en la fase fluida, lo que indica que la transferencia de masa interfásica es un proceso lento en comparación con la decomposición del metanol. Lo anterior se refleja cuando, al aumentar los valores del espesor de la pared catalítica, aumenta la resistencia a la transferencia de masa y por lo tanto se genera un gradiente de concentración mayor.

Otro resultado que se desprende de la Fig. 4 se refiere al comportamiento de los gradientes de concentraciones alrededor de la zona de interfaz, tanto en la entrada como en la región intermedia del reactor. Si la limitante difusional se incrementa a medida que aumenta la velocidad de reacción, se observa que los valores de la fracción molar de metanol posee una alta tasa de conversión a espesores de pared catalítica altos y con tendencia a valores radiales bajos. Cuando se disminuye el espesor de la pared catalítica la conversión sucede con tendencia a valores radiales mayores, por ende, a medida que aumenta el espesor, la resistencia a la transferencia de masa aumenta y por lo tanto el gradiente de concentraciones varía sin un cambio de pendiente pronunciado en la fase sólida. Al mismo tiempo se evidenció que al aumentar la coordenada longitudinal del 5% al 50% de la longitud total del reactor (20 a 200)mm, la variación del espesor de la pared catalítica tiende a ser menos influyente en la conversión de metanol. Finalmente, la conversión de metanol es más alta al inicio del reactor que en la zona intermedia del mismo, debido a una alta limitante difusional en la zona inicial comparada con la zona intermedia.

Por otro lado, en la Fig. 5 se muestra como la temperatura se comporta de forma diferenciada en el reactor monolítico. El cambio de comportamiento y el valor máximo de temperatura se debe a una mayor velocidad de reacción por unidad de catalizador, que a su vez es producto del efecto de la transferencia de masa dentro de los canales, por ende, la temperatura decrece cerca de la zona intermedia del reactor ya que el metanol a esa longitud ha sido agotado y simultáneamente ocurren reacciones endotérmicas de craqueo catalítico de alcanos que toman calor del sistema.



**Figura 5.** Perfil de temperatura para el reactor monolítico en condición adiabática y para un espesor de catalizador de  $t_w = 0,2$  mm.

La conexión entre la transferencia de calor y de masa se puede expresar a través de la difusión molecular del gas, que es proporcional a la temperatura en un factor de  $T^{3/2}$ , por lo tanto, en la sección donde aumenta la temperatura se espera que ocurra una alta conversión como consecuencia de una mayor transferencia de masa, en comparación con la sección donde una alta proporción de metanol ha sido consumido. En consecuencia, los mecanismos difusivos en conjunto con la transferencia de calor son determinantes para el proceso de conversión. Una mayor densidad de celdas podría contribuir a una mayor conversión, pero también puede aumentar de un modo indebido el rango de temperatura en el que opere el reactor.

#### 4. Conclusiones

En este trabajo algunas características de los fenómenos interrelacionados de la geometría, fenómenos de transporte y cinética en un reactor de lecho empacado estructurado han sido estudiadas, cuando se establece la transformación de metanol a propileno. Los resultados de la simulación revelan lo siguiente: (a) El modelo numérico se ajusta considerablemente bien a los datos experimentales de selectividad (b) Se obtuvo que para diversos espesores  $t_w$  de la pared de los canales, la convertibilidad de metanol es mayor a medida que se elige un espesor mayor,  $t_w = 0,6\text{mm}$ . (c) El aumento de convertibilidad de metanol a medida que aumenta el espesor de canal indica que existe una conducción de calor mayor que favorece la transformación química. (d) Al 50% de la longitud del reactor casi todo el metanol ha sido transformado. (e) A partir de este modelo numérico se pueden determinar parámetros óptimos de espesor y longitud, para mejorar la eficiencia y diseño del reactor.

#### Agradecimientos

Los cálculos de este artículo se realizaron utilizando las instalaciones informáticas del Centro de Matemática Aplicada y Computación de Alto Rendimiento (ABACUS-CINVESTAV-ININ) de México y el Centro de Cómputo de Cedia de Ecuador. Agradecemos a RICAP.

#### Referencias

1. N. Jurtz, M. Kraume, G.D. Wehinger; *Rev. Chem. Eng.* 10 (2018) 1-51.
2. V. Tomasic, F. Jovic; *Appl. Catal. A* 311 (2006) 112-121.
3. H. Santos, M. Costa; *Chem. Eng. J.* 148 (2009) 173-183.
4. A. Zamaniyan, Y. Mortazavi, A.A. Khodadadi, H. Manafi; *Appl. Catal. A* 385 (2010) 214-223.
5. K. Kaltz, R. Kraehnert, M. Dvoyashkin, R. Dittmeyer R. Gläser, U. Krewer, K. Reuter, J. Grunwaldt; *ChemCatChem.* 9 (2017) 17-29.
6. G. Dixon, M. Nijemeisland, H. Stitt; *Adv. Chem. Eng.* 31 (2006) 307-389.
7. M. Maestri, A. Cuoci; *Chem. Eng. Sci.* 96; (2013) 106-117.
8. S. Fogler in *Essentials of Chemical Reaction Engineering*, (Ed. 2). Pearson Education, Boston (2018).
9. H. Keompel, W. Liebner; *Stud. Surf. Sci. Catal.* 167 (2007) 261-267.
10. W. Wu; Ph.D. Dissertation, East China University of Science and Technology. Shanghai, China (2012).
11. J. Chen, H. Yang, N. Wang, Z. Ring, T. Dabros; *Appl. Catal. A* 345 (2008) 1-11.
12. D. Mier, A.G. Gayubo, A.T. Aguayo, M. Olazar, J. Bilbao; *AIChE J.* 57 (2011) 2841-2853.
13. W. Wu, W. Guo, W. Xiao, M. Luo; *Chem. Eng. Sci.* 66 (2011) 4722-4732.
14. W. Wu, W. Guo, W. Xiao, M. Luo in *The 6th Sino-US Conference of Chemical Engineering, China*, (2011): 10.
15. W. Guo, W. Wu, M. Luo, W. Xiao; *Fuel Process. Technol.* 108 (2013) 133-138.