

ESTUDIO DE UN REACTOR MULTITUBULAR DE LECHO EMPACADO CON TRANSFERENCIA DE MASA EXTERNA PARA LA PRODUCCION DE ETILENO

Juan Alvaro León*

Universidad Nacional de Colombia, sede Manizales, departamento de Ingeniería Química.

**Jaleonma@unal.edu.co*

Resumen

En el presente trabajo se estudia el comportamiento de un reactor multitubular con lecho empacado, este cuenta con un catalizador Ni-Nb-O, el cual es altamente selectivo para la producción de etileno a partir de etano en reacciones de deshidrogenación oxidativa (DO). El reactor propuesto cuenta con una alimentación lateral con el fin de aumentar la selectividad y disminuir la temperatura del fluido alimentado. Para el estudio del comportamiento del reactor se desarrollaron simples modelos de balance de materia y energía. Para modelar el comportamiento del reactor de forma realista se acopla un modelo de transferencia de masa entre el seno del fluido y la superficie del catalizador.

Los resultados que se obtienen muestran una marcada diferencia entre un modelo ideal y un modelo basado en la transferencia de masa dentro del reactor, estos resultados sugieren que la velocidad de reacción es significativamente superior para el reactor simulado con el acoplamiento de la transferencia de masa. El hecho de adicionar una alimentación lateral en el reactor afirma el incremento de la selectividad y de un mejor aprovechamiento del volumen del reactor.

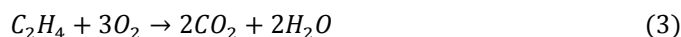
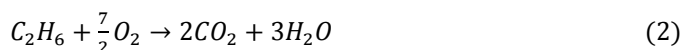
Palabras claves: Reactor de lecho empacado, convección, velocidad de reacción, factor de efectividad, transferencia de masa externa.

Manizales 2011.

Introducción

El importante papel del reactor químico en la industria ha motivado al desarrollo de innumerables modelos capaces de predecir su comportamiento lo más acertadamente posible. La gran dificultad del desarrollo de modelos matemáticos que cumplan aquel objetivo es la complejidad de los fenómenos que ocurren en este dispositivo. Una sencilla solución a este problema es el acoplamiento de la transferencia de masa sobre el catalizador del reactor. Usualmente los modelos simplificados para el diseño de reactores están basados en las condiciones del seno del fluido para el cálculo de velocidades de reacción, transferencia de calor a un dispositivo de enfriamiento (o calentamiento) y demás fenómeno que ocurren dentro del reactor. Lo anterior no presenta validez, debido a que siempre las reacciones catalizadas se efectúan a las condiciones del catalizador, para que las sustancias puedan transferirse al catalizador tiene que existir un gradiente de potencial químico entre el seno del fluido y la superficie de catalizador, o entre la superficie del catalizador y el interior del catalizador. Lo anterior infiere que las condiciones entre estas dos fases pueden variar.

Las reacciones de deshidrogenación oxidativa, son reacciones de oxidación parcial, las cuales son fuertemente exotérmicas, estas reacciones no están limitadas por un equilibrio y su conversión es casi completa, las reacciones que ocurren para la producción de etileno a partir de etano están representadas de la siguiente forma:



Al tener la presencia de más de una reacción hay un consumo del reactivo que genera productos no deseados. La reacción (2) representa la oxidación completa del etano, mientras la reacción (3) muestra la oxidación del etileno, en cuyo caso es el producto deseado. Al presentarse un esquema de este tipo de reacción, el diseño del reactor tiene que estar basado en una alta selectividad (reacción (1)), promoviendo una alta generación del producto deseado que amerite el diseño del dispositivo. Nuevos estudio sobre catalizadores, Heracleous y Lemonidou [3, 4] han reportado un nuevo tipo de catalizador basado en níquel, que tiene una alta selectividad para este tipo de reacción. Esta selectividad puede tener valores superiores a 40% a temperaturas inferiores a 500°C, de forma que la estabilidad del intervalo óptimo de temperatura es crucial para obtener una alta selectividad a través del reactor.

Para el presente caso se tomaron las condiciones de operación del reactor estudiadas por López, et.al [2] y se desarrollaron los balances de materia y energía para el reactor, con el fin de simplificar los modelos se desprecia la dispersión radial.

Metodología

Se presenta un modelo heterogéneo en estado estable, el diámetro de los tubos d_t se definen para que sean lo suficientemente pequeños para despreciar la dispersión axial, de forma que se desarrolla un modelo unidimensional. El reactor cuenta con una fracción de su longitud (L_0) solo para precalentar el fluido, una longitud (L_1) donde se desarrolla la reacción antes de la alimentación lateral y una longitud (L_2) donde se desarrolla la reacción después de haber alimentado el reactor por su lateral. Este reactor debe contar con una chaqueta, en la cual estarán sumergidos los tubos con catalizador, esto se efectúa con motivo de un precalentamiento y posterior a este la remoción de calor. La coraza del reactor deberá contar con baffles de modo que la temperatura de la chaqueta será uniforme en cualquier L .

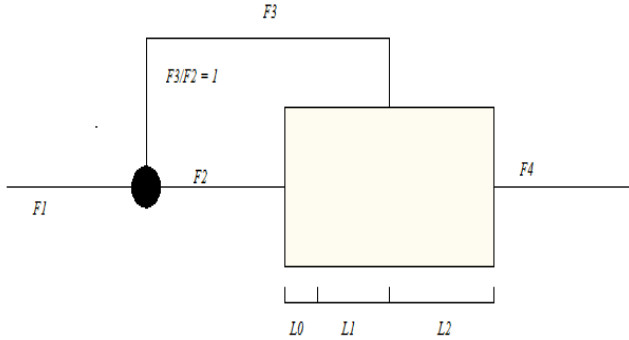


Fig.1. Diagrama simplificado del reactor.

Las condiciones iniciales de la corriente F_2 y F_3 son las mismas como se muestra en la figura. 1, las composiciones iniciales (x_{i0}), la temperatura de entrada (T_0) y el flujo de alimentación (F_2 & F_3) se muestran en la tabla.3. El reactor trabaja de forma isobárica (situación ideal), el sistema de intercambio de calor trabaja en paralelo, ingresando a una temperatura (T_{C0}) con un flujo másico (m_c). Los balances de materia y energía quedan expresados de forma que:

Balance de masa:

$$\frac{dF_j}{dL} = \alpha \sum_{i=1}^3 v_{ij} r_i \quad j = 1 \dots, 6 \quad (4)$$

Donde,

$$\alpha = n_t A_T \rho_B$$

v_{ij} , coeficiente estequiometrico.

r_i , velocidad de reacción [mol/kg_{cat}s].

n_t , numero de tubos.

A_T , área transversal del tubo [m²].

ρ_B , densidad del catalizador [kg/m³].

Balance de energía:

Gas del proceso:

$$\frac{dT}{dL} = \frac{\alpha \sum_{i=1}^3 r_i (-\Delta H_i) - \frac{\alpha}{\rho_B} \left(\frac{4}{d_t} \right) U (T - T_c)}{\sum_{j=1}^6 F_j C_{pj}} \quad (5)$$

Siendo,

ΔH_i , calor de reacción [J/(mol K)].

d_t , diámetro del tubo [m].

U , coeficiente global de transferencia de masa [W/m² K].

T , temperatura de gas de proceso [K].

F_j , Flujo molar del componente j [mol/s].

C_{pj} , capacidad calorífica del componente j [J/(mol K)].

Fluido de servicio:

$$\frac{dT_c}{dL} = \frac{n_t \pi d_t U (T - T_c)}{m_c C_{pc}} \quad (6)$$


Donde,

m_c , flujo másico del fluido de servicio [kg/s].

C_{pc} , capacidad calorífica del fluido de servicio [J/(kg K)].

Un catalizador de óxidos mixtos de Ni-Nb-O fue aplicado para la DO, cuya cinética es reportada por Heracleous y Lemonidou [2, 3]. El catalizador tiene una geometría esférica de con un diámetro de 6 mm, las condiciones del catalizador se resumen en la tabla 1.

Tabla.1. Características físicas del catalizador.

Geometría del catalizador	Diámetro (mm)	Porosidad ϵ	Composición (Ni-Nb)	Densidad ρ_B (kg/m ³)
 Esfera	6	0.38	0.85-0.15	50

La ley de velocidad para las ecuaciones (4)-(6) está dada de la siguiente forma:

$$r_i = k_i e^{-\left(\left(\frac{E_i}{RT}\right)\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R}\right)\right)} P_{HCi}^{a_i} P_{O_2}^{b_i} \quad (7)$$

Siendo,

r_i , velocidad de reacción del reactivo limite en la reacción i [mol/kg_{cat} s].

E_i , energía de activación de la reacción i [J/mol].

R , constante universal de los gases: 8.314 J/mol.

T_R , temperatura de referencia: 543 K.

P , presión parcial [atm].

El coeficiente cinético y las constantes de la ley de velocidad se encuentran a continuación.

Tabla.2. Parámetros de la ley de velocidad (7)

Reacción (i)	k_i (kmol/kg _{cat} /s/Pa ^{a+b})	E_i J/mol	a_i	b_i
1	$4.177 \cdot 10^{-10}$	96180	0.520	0.213
2	$1.272 \cdot 10^{-13}$	76210	0.547	0.829
3	$9.367 \cdot 10^{-11}$	98420	0.475	0.19

De forma que si se desea entender el comportamiento de este tipo de reacción en un reactor se utiliza las ecuaciones (1)-(7), aplicando los valores de la tabla 1 y 2. Para el presente caso las condiciones de operación del reactor fueron tomadas de [2] y se encuentran resumidas en la tabla 3.

Tabla.3. Condiciones de operación del reactor y características.

$Y_{O_2,0}$ 0.1	F_2 0.8333 kmol/s	L_0 0.5 m
$Y_{N_2,0}$ 0.4	$T_{g,0}$ 100°C	d_i 0.0266 m
$Y_{C_2H_6,0}$ 0.5	P_0 5 atm	n_i 10000
m_c 300 kg/s	$T_{C,0}$ 367.5 °C	L 4 m
L_1 1.7 m	L_2 1.8 m	F_1 1.666 kmol/s

En base a lo anterior se puede simular el comportamiento ideal del reactor, pero el objetivo del presente trabajo es estudiar el comportamiento de este con un modelo heterogéneo. De manera que se debe tener en cuenta la transferencia de masa entre el seno del fluido y la superficie del catalizador. La ley de velocidad muestra claramente que se está despreciando la transferencia de masa interna en el catalizador, ya que no posee ningún término en función de la transferencia de masa hacia el interior del catalizador por adsorción. Esto indica que solo se tendrá en cuenta la transferencia de masa externa.

El fenómeno de transferencia de masa (interna o externa) toma suma importancia en este tipo de operación, esto se debe a que las condiciones no sean optimas así el comportamiento ideal lo reporte. Cuando se tienen que dos fenómenos están ocurriendo simultáneamente como el de transferencia-reacción, usualmente hay una obstaculización entre estos dos fenómenos, ya sea que la transferencia de masa es muy rápida y la velocidad de reacción muy lenta o viceversa. Otro aspecto importante de esta situación es que la velocidad de reacción puede variar significativamente con respecto a las condiciones de operación, en el presente caso se dispone de una reacción exotérmica, hay gradientes de temperatura en la partícula catalítica, la mayor temperatura se encuentra en el centro de esta y disminuye conforme aumenta su diámetro, es evidente que la temperatura en la superficie del catalizador será mayor que la temperatura del seno del fluido, como consecuencia la velocidad de reacción tiende a ser más alta en la zona de mayor temperatura.

Para la modelación del comportamiento del reactor donde ocurre este fenómeno, Smith [9] propone que para desarrollar el modelo

debe haber un estado estable entre la transferencia de masa y la velocidad de reacción, si la transferencia de masa se desarrolla por convección en la película gaseosa se obtiene que:

$$k_g(y_j - y_{js}) = r_{js}(T_s, y_{js}) \quad (8)$$

Donde,

k_g , coeficiente de transferencia de masa [mol/m²s]

y_j , y_{js} , fracciones molares del componente j en el seno y en la superficie del catalizador respectivamente.

$r_{js}(T_s, y_{js})$, velocidad de reacción a las condiciones de la superficie del catalizador [mol/m²s].

En el caso de la transferencia de energía queda:

$$\sum_1^i (-\Delta H r_i) = h a_m (T_s - T) \quad (9)$$

Siendo,

h , coeficiente de transferencia de calor [w/m²K].

a_m , área específica del catalizado [m⁻¹].

T_s , temperatura en la superficie del catalizador [K].

El coeficiente de transferencia de masa y calor se obtiene por el desarrollo de los números adimensionales J_D y J_H aplicando la analogía del *Chilton-Colburn*.

El coeficiente de transferencia de masa puede ser correlacionado en términos del factor- J_D de la siguiente forma:

$$J_{D,i} = \frac{k_{g,i} M_m Sc^{2/3}}{G} \quad (10)$$

Donde,

Sc , numero de Schmidt = $(\mu/\rho_f D)$.

μ , viscosidad cinemática [kg/m s].

ρ_f , densidad del fluido de proceso [kg/m³].

D , coeficiente de difusividad del componente j con respecto a la mezcla [m²/s].

M_m , peso molecular del fluido del proceso [kg/kmol].

G , flujo másico del fluido de proceso [kg/s].

Hougen, et al [5] proponen una correlación del factor- J_D para lechos empacados con partículas de geometría esférica para $\epsilon = 0.37$ y $Re = d_p G/\mu < 190$.

$$J_D = 1.66(Re)^{-0.51} \quad (11)$$

Para $Re > 190$

$$J_D = 0.983(Re)^{-0.41} \quad (12)$$

Las ecuaciones (11) y (12) proporcionan un método directo para el cálculo del factor- J_D en función números de Reynolds en régimen laminar y turbulento.

Para el cálculo de las difusividades del componente j en la mezcla (difusividad efectiva) se usa el método propuesto por Froment [6], el cual es una simplificación de la ecuación de Wilke (1950).

$$\frac{1}{D_{jm}} = \frac{1}{1 - y_j} \sum_{k \neq j}^N \frac{y_k}{D_{j,k}} \quad (13)$$

En el caso de la transferencia de energía, el coeficiente de transferencia de calor h es calculado a partir de la correlación del factor- J_H de la siguiente forma:

$$J_H = \frac{h}{C_p G} Pr^{2/3} \quad (14)$$

Siendo Pr el número de Prandtl ($C_p \mu / k$) donde k es la conductividad térmica en [W/m K]. De acuerdo con la analogía de *Chilton-Colburn* se puede expresar que $J_D = J_H$. El cálculo de la expresión (11) o (12) proporciona el valor de J_H y por consiguiente el valor del coeficiente de transferencia de calor.

El factor de efectividad es la relación entre la velocidad de reacción en la superficie del catalizador y la velocidad de reacción a las condiciones del seno del fluido. Según García et. Al [10] "...es el conjunto de efectos difusionales y térmicos sobre la reacción que tiene lugar en un proceso heterogéneo en un material no poroso...". Carberry [1] define el factor de efectividad como:

$$\eta = \frac{r_{superficial}}{r_{seno}} \quad (15)$$

Finalmente la selectividad instantánea se expresa como:

$$S_i = \frac{r_1 - r_3}{r_1 + r_2} \quad (16)$$

EL valor de la expresión (16) indicara que tan factible es que ocurra la reacción deseada, también altos valores de selectividad promoverán la generación del producto deseado, que ocurra una reacción de DO y no una oxidación total del gas de proceso.

Algoritmo de solución

Para la solución del sistema de las ecuaciones (4) – (14) se debe conocer primero las condiciones de la superficie del catalizador,

se desarrolla un sistema iterativo con el fin de determinar dichas condiciones, esto se logra suponiendo valores de las condiciones de la superficie del catalizador hasta que se cumpla (8) – (9). Se aplica la ecuación (15), el factor de efectividad para la solución del modelo con el fin de desarrollar el comportamiento del reactor a velocidades de reacción observada y no a condiciones del seno del fluido. Una solución más práctica es el desarrollo de métodos iterativos retroalimentados como el Newton-Raphson, se acopla el sistema de ecuaciones provenientes de (8) y (9) para j componentes, este se resuelve. Con las condiciones obtenidas, las cuales corresponden a las de la superficie del catalizador, se halla la velocidad de reacción observada y se reemplaza en las ecuaciones de diseño (4), (5) y (6). El procedimiento anterior se desarrolla para cada elemento diferencial del reactor.

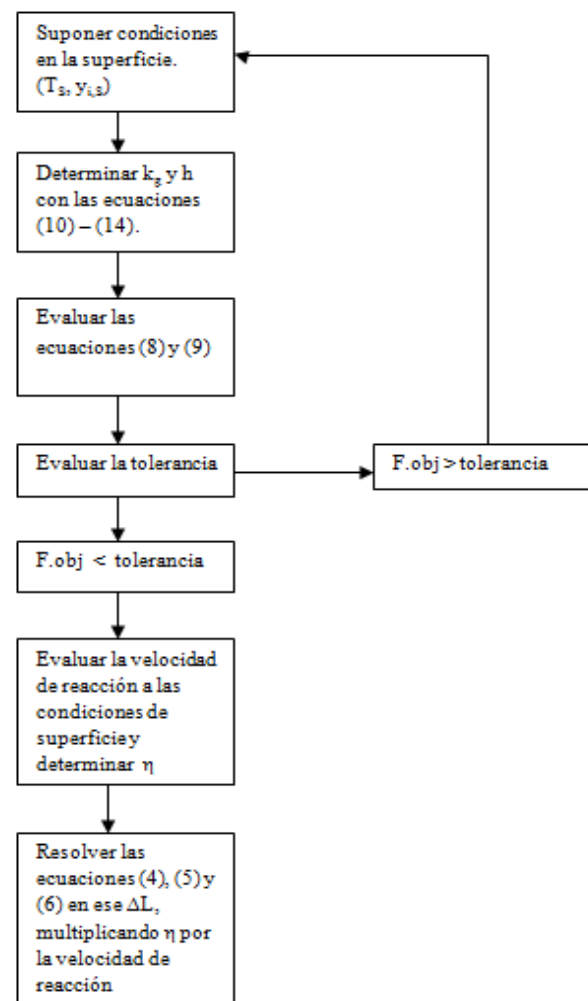


Fig.2. Diagrama de bloques para el algoritmo de solución del reactor.

Análisis de resultados

La solución del modelo se resolvió con el software matlab®, se aplicó un Newton-Raphson multivariable y también se aplicó un Runge-Kutta de cuarto orden con el fin de resolver las ecuaciones

diferenciales. Al desarrollar completamente los balances, se obtienen 6 ecuaciones diferenciales ordinarias que describen la variación de moles de los componente presente en las ecuaciones (1) – (3), 1 ecuación diferencial ordinaria que describe el cambio de temperatura dentro del reactor y 1 ecuación diferencial ordinaria que muestra la variación de temperatura de la chaqueta del reactor.

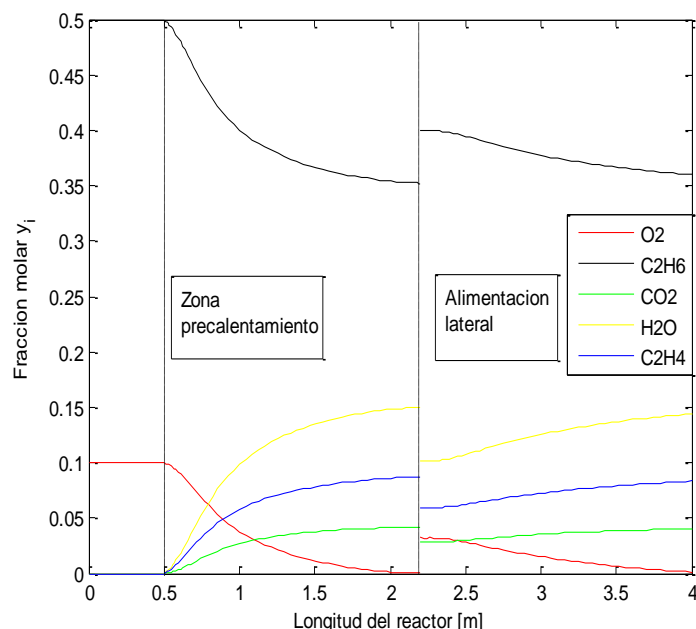


Fig.3. Variación de las composiciones a través del reactor en las zonas de precalentamiento, primer tramo de reacción y segundo tramo de reacción.

Al desarrollarse una oxidación parcial, es clave la cantidad de oxígeno que ingresara al sistema, ya que una cantidad en exceso genera una oxidación total y no parcial, en el presente caso el oxígeno es el reactivo límite, esto se especifica con el fin de lograr condiciones optima en la DO. En base a la figura 3 se puede ver que en la zona de precalentamiento las composiciones son invariables, debido a la suposición de que las reacciones solo se desarrollaran cuando las sustancias entren en contacto con el catalizador. Las composiciones comienzan a variar en el momento en que los reactivos ingresan a la primera zona de reacción, la composición de oxígeno comienza a disminuir rápidamente ya que este interviene en las 3 reacciones, su composición tiende a cero en la zona cercana al final de la primera zona de reacción, como se mencionaba con anterioridad este es el reactivo limite. Similarmente ocurre con el etano, este se debe consumir rápidamente, este participa en la reacción (1) y (2), pero no se consume totalmente debido a su exceso en la alimentación. La producción de vapor de agua es elevada, este producto se está generando en las 3 reacciones. Finalmente se puede ver una selectividad relativamente alta con respecto al producto deseado, metileno, lo cual se puede verificar, siendo la composición del etileno casi el doble que la del dióxido de carbono (reacción (2) y (3)). Con el propósito de aumentar la

producción y selectividad del etileno se agrego una alimentación lateral al reactor, en la segunda zona de reacción se puede ver cómo cambia esporádicamente las composiciones, debido al ingreso de dicha alimentación. Todas las composiciones de los productos disminuyen, mientras la de los reactivos aumenta, de manera que esto produce un aumento en la generación de los productos, manteniendo constante en lo posible la selectividad de la reacción (1).

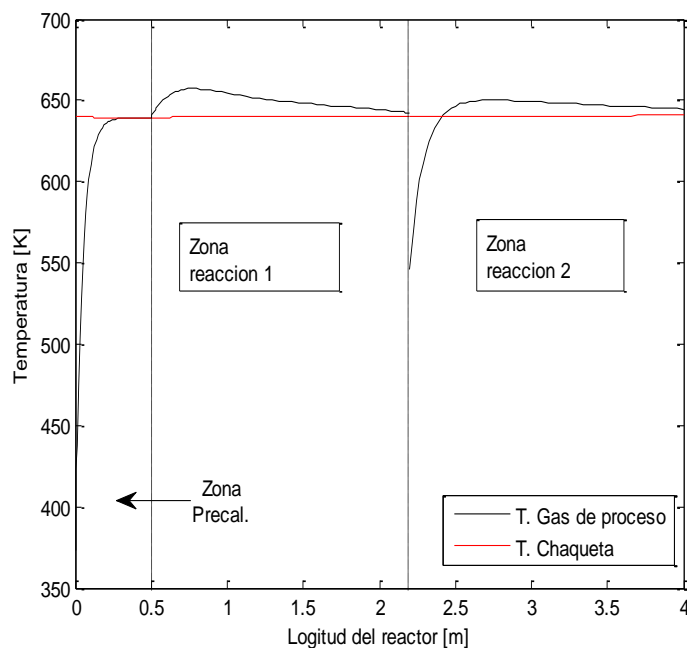


Fig.4. Variación de la temperatura del gas de proceso y de la temperatura de la chaqueta a través del reactor en las zonas de precalentamiento, primera zona de reacción y segunda zona de reacción.

De acuerdo con la figura 4 se puede apreciar la alta eficiencia de la zona de precalentamiento, la temperatura deseada de alimentación a la zona de reacción 1 se consigue rápidamente, debido a la alta capacidad térmica del fluido de servicio. En el momento de que las sustancias ingresan a la primera zona de reacción, comienzan a liberar energía en forma de calor, el fluido que sirvió para calentar el gas de proceso ahora le esta removiendo el calor. Se puede apreciar un máximo de temperatura de 620 K aproximadamente, donde la velocidad de reacción es máxima, principalmente debido a la alta concentración de reactivos. La temperatura del gas de proceso tiende a tomar un valor igual a la temperatura del fluido de servicio. Al ingresar la alimentación lateral, la temperatura del gas de proceso cae espontáneamente y posterior a esto se incrementa rápidamente, tanto el calor que libera la reacción y el calor que el fluido de servicio cede ocasionan este comportamiento, igualmente que en la zona de precalentamiento, en la zona de reacción 2 hay un calentamiento, seguido a este un enfriamiento en la misma zona. Este tipo de arreglo asegura una alta eficiencia térmica del proceso.

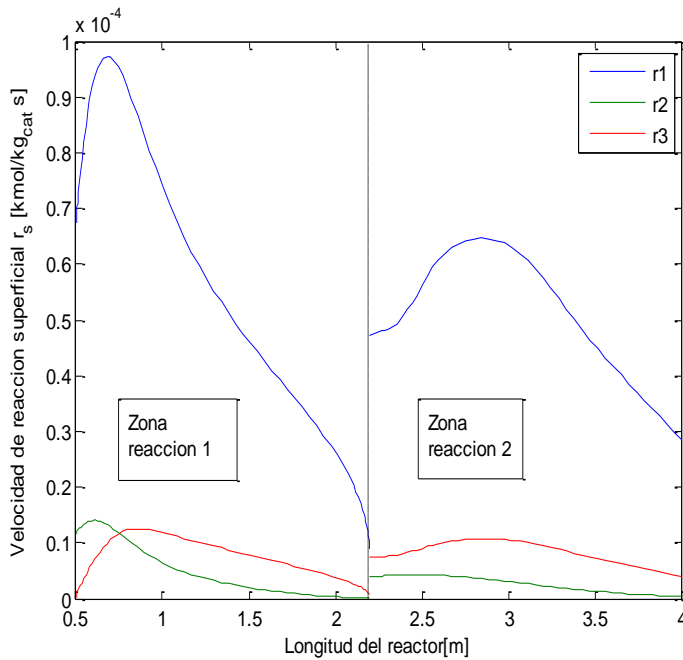


Fig.5. Variación de la velocidad de reacción a través del reactor, para la primera y segunda zona de reacción.

Es clave mantener la velocidad de reacción alta para la reacción deseada (ecuación (1)), de esta forma se mantiene una alta selectividad y alta generación del producto clave. En la figura 5 se puede relacionar lo mencionado anteriormente, la velocidad de reacción 1 (r_1) es significativamente alta, casi 10 veces más alta que las reacciones no deseadas. Se había dicho que la temperatura máxima era aproximadamente de 620 K, la cual corresponde a una posición axial del reactor de 0.7 m, este valor también corresponde al máximo valor de velocidad de reacción. Al comenzar a haber una presencia pequeña de oxígeno, las velocidades de reacción comienza a disminuir hasta el punto de que la reacción que forma el etileno tiene casi la misma magnitud que la velocidad de reacción de la descomposición del mismo. Al ingresar la alimentación lateralmente las velocidad de reacción comienza a crecer, pero igualmente manteniendo la alta selectividad. La presencia de los máximos, tanto en la zona 1 como en la zona 2 indica el valor de mayor temperatura, de forma que la velocidad de reacción es proporcional a esta.

Factor de efectividad (η)

En la figura 7 se puede apreciar el factor de efectividad como varía, siendo la propiedad determinante para el estudio del comportamiento del reactor. Como se menciona a principio del presente trabajo hay una diferencia de la velocidad de reacción entre el seno del fluido y a las condiciones en la superficie del catalizador (o dentro de él).

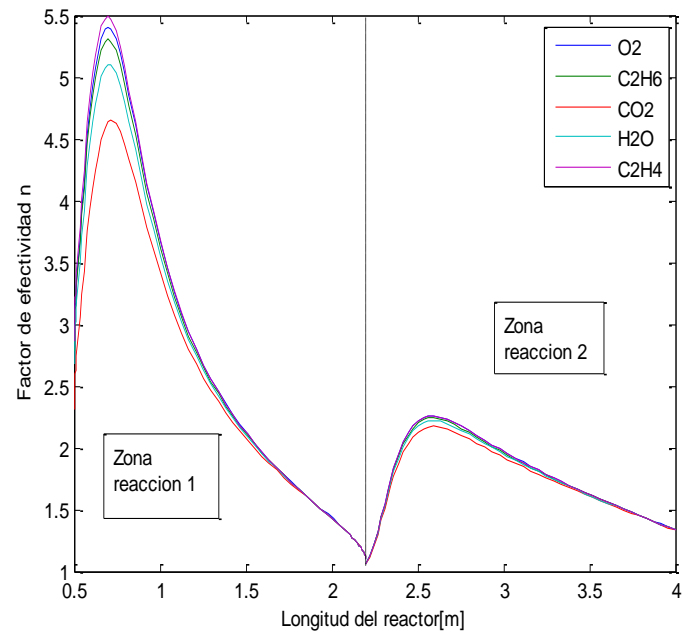


Fig.6. Variación del factor de efectividad en cada zona de reacción del reactor.

De acuerdo con la figura 6, se puede apreciar que el factor de efectividad siempre es superior a 1, por consiguiente la velocidad de reacción superficial es siempre mayor que la velocidad de reacción a las condiciones del seno del fluido. También estos valores nos dan información sobre las características energéticas de la reacción que se está llevando a cabo, en este caso es una reacción exotérmica, donde los máximos se encuentran posicionados en el punto de mayor temperatura (mayor velocidad de reacción). El factor de efectividad del etileno posee el valor más alto de los 5 componentes, principalmente a su alta selectividad y el factor de efectividad del dióxido de carbono sea el más bajo. Esto relativamente altos factores de efectividad muestran información sobre el volumen requerido del reactor, siendo la velocidad de reacción superficial alta, hay un consumo y producción más alta de la especie química, influenciando directamente a la disminución del volumen del reactor en el caso en que se utilizaran modelos pseudo homogéneos. En la zona donde está ubicada la alimentación lateral ocurre un cambio de magnitud del factor de efectividad, pero no tan diferenciado como en los demás casos, esto ocurre porque la velocidad de reacción es muy pequeña antes de este punto y sigue siendo muy pequeña después de este punto, aunque este factor de efectividad también depende de la temperatura, al mezclarse las corrientes F_2 y F_3 la temperatura del gas de proceso cae y por consiguiente también la temperatura superficial debe disminuir, estas razones hacen que el factor de efectividad sea casi constante a través de esta zona de alimentación.

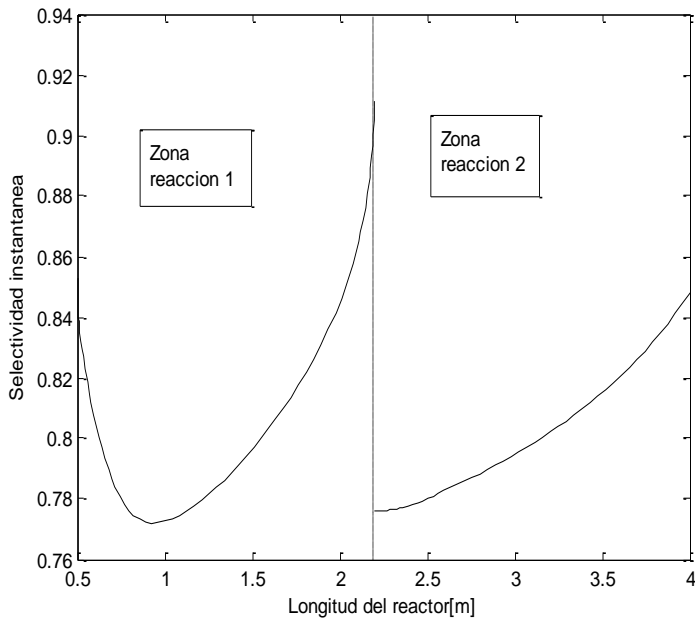


Fig.7. Selectividad a través del reactor en la primera y segunda zona de reacción.

En secciones anteriores del presente trabajo se había dicho que este tipo de reacción tenía una alta selectividad con las presentes condiciones, la figura 7 afirma lo anterior. La selectividad siempre se mantiene superior al 0.76 lo cual indica que hay un alto rendimiento en la producción de etileno sin que el reactivo se consuma apreciablemente para reacciones no deseadas. Los puntos de menor selectividad son donde hay velocidades de reacción alta, debido a que hay una alta producción de productos y una alta concentración de reactivos, de manera que esto promueve a que ocurran reacciones no deseadas. En la zona de la alimentación lateral la selectividad instantánea cae espontáneamente debido a que el ingreso de reactivos dispara la velocidad de reacción de la ecuación (1) y por consiguiente la de las demás reacciones ((2) – (3)). A medida de que los reactivos se comienza a disminuir y las velocidades de reacción también, la selectividad comienza a aumentar, lo cual infiere que para tener altos valores de selectividad se debe mantener bajas concentraciones de reactivo límite (oxígeno).

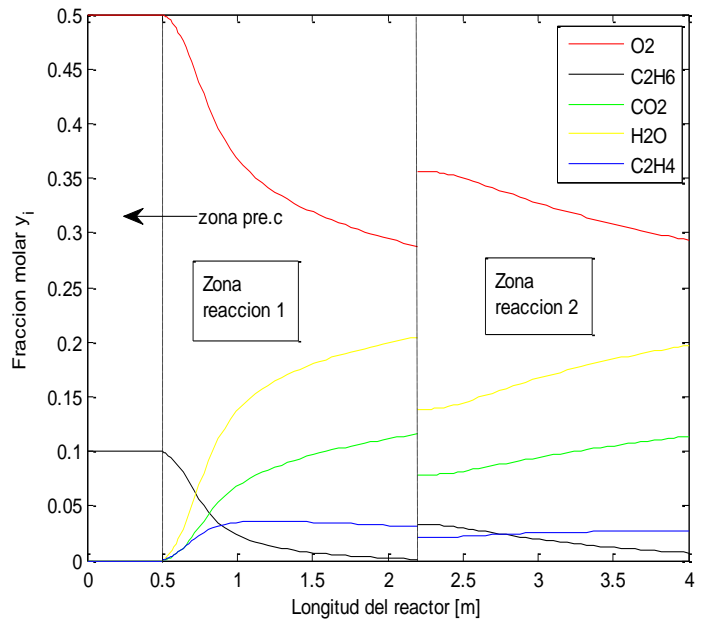


Fig.8. Perfiles de concentración con exceso de oxígeno.

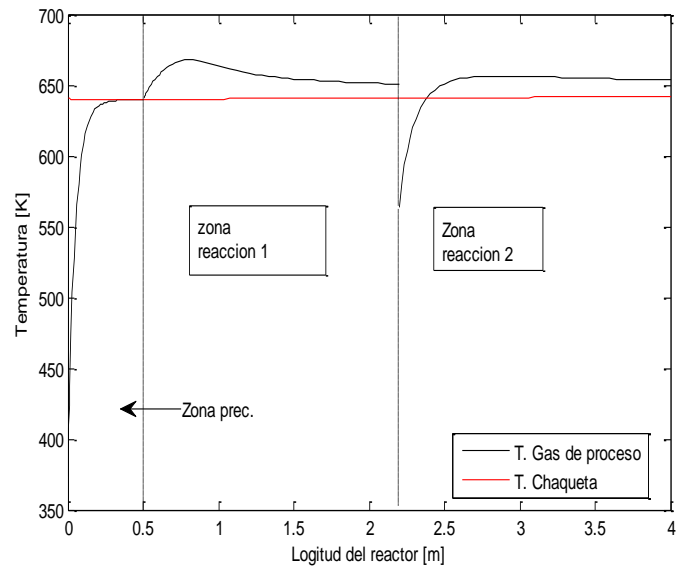


Fig.9. Perfiles de temperatura en el reactor con exceso de oxígeno.

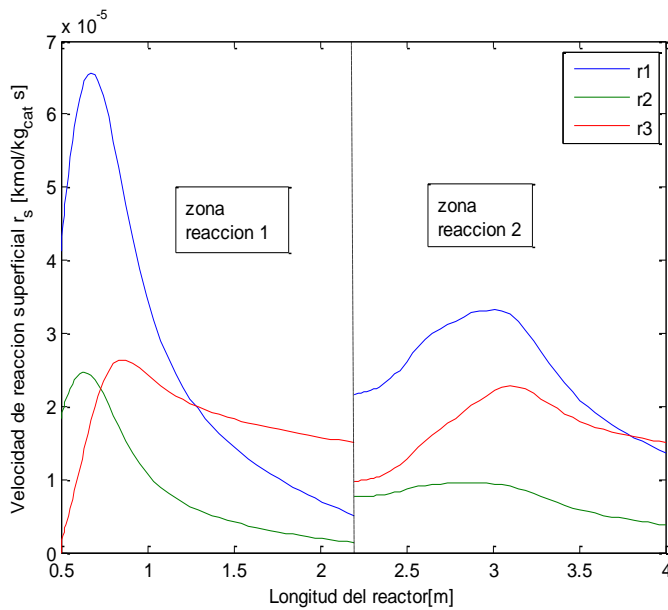


Fig.10. Variación de la velocidad del reactor a través del reactor con exceso de oxígeno.

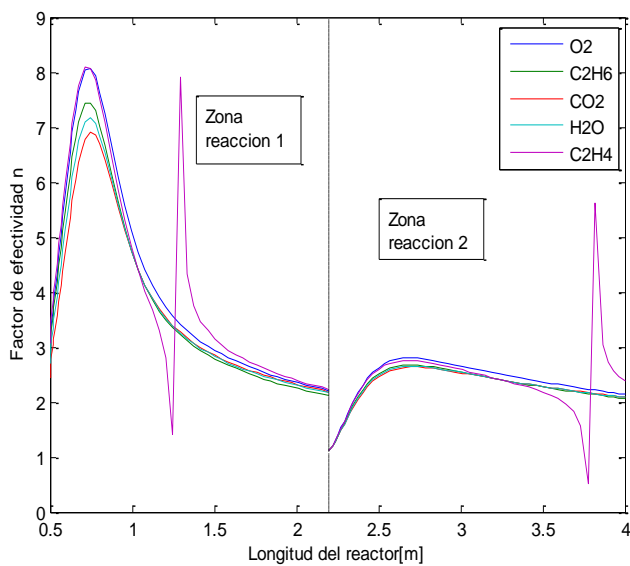


Fig.11. Factor de efectividad a través del reactor con exceso de oxígeno.

El fenómeno que ocurre para las figuras 8-12 es similar al analizado anteriormente, salvo a que hay una cantidad de exceso de oxígeno, de manera que la DO será superada por la oxidación total para formar dióxido de carbono y agua. La producción de agua y dióxido de carbono es alta, superior a la producción de etileno, de forma que se deberá consumir el producto deseado debido a la presencia adicional de oxígeno, la cual fomentará las reacciones de oxidación total (figura 8). Como se está desarrollando reacciones de oxidación total, hay una mayor liberación de calor, en la figura 9 se puede visualizar que la temperatura del gas de proceso se mantiene significativamente superior que la del fluido de servicio y por encima de la DO. En la zona cercana a la entrada de los diferentes tramos de reacción,

la velocidad de reacción r_1 se mantiene alta, a medida que se consume el etano esta velocidad de reacción comienza a disminuir y la velocidad de reacción r_3 comienza a aumentar debido a la gran cantidad de etileno que se ha producido (fig.11).

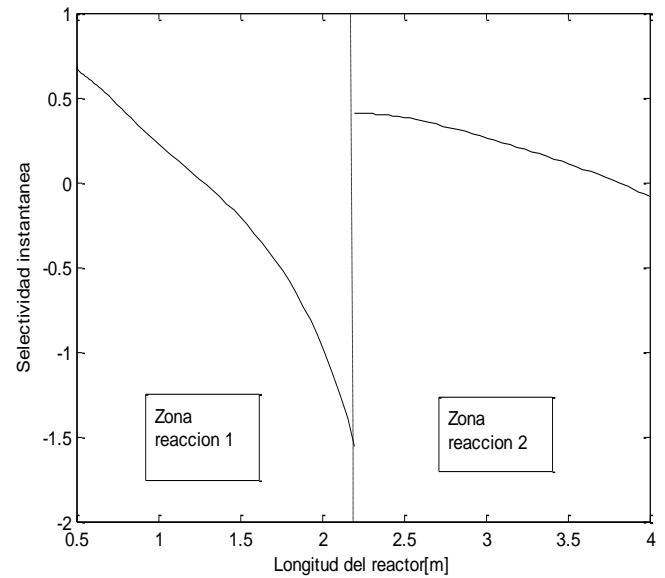


Fig.12. Selectividad instantánea en el reactor con exceso de oxígeno.

El factor de efectividad tiene magnitudes superiores en una oxidación total que en una DO, esto principalmente se debe a que crece la cantidad de calor generado aumentando así la velocidad de reacción (figura 11), se presentan unos picos los cuales no tienen significado físico, ya que la figura 11 tiene una tendencia definida, este cambio súbito de pendiente es una inestabilidad del método generado por el exceso de oxígeno en la simulación. Cuando se está desarrollando una oxidación total la selectividad es muy baja y a medida que se va desplazando a través del reactor la selectividad va disminuyendo para bajas concentraciones de etano (figura 12), contrario a lo que ocurre en la DO.

Conclusiones

Se pudo determinar el comportamiento de un reactor de lecho empacado para la deshidrogenación oxidativa, el factor de efectividad externo es un parámetro de gran importancia en el entendimiento del comportamiento de un reactor catalítico, ya que las condiciones de reacción son muy diferentes para el modelo en estudio (modelo heterogéneo) que para modelos pseudo homogéneos, esto principalmente se ve influenciado en la selección del volumen del reactor y en el sistema de remoción de calor.

Para mantener una alta selectividad se debe mantener una concentración baja de oxígeno, esto proporciona un buen desarrollo de reacciones de DO, la alta concentración de oxígeno ocasiona una oxidación total de los reactivos, ocasionando

pérdidas en la materia prima y aun más importante que esto, exponiendo a un riesgo la operación y la seguridad del personal, al haber una oxidación total hay una mayor liberación de calor esforzando mecánicamente al reactor, generando un riesgo a explosión.

Referencias

[1] Carberry J. J, *Chemistry and Catalytic Reaction Engineering*. McGraw-Hill- 1976.

[2] Eduardo Lopez, Eleni Heracleous, Angeliki A. Lemonidou, Daniel O. Bario, Study of a multitubular fixed-bed reactor for ethylene production via ethane oxidative dehydrogenation, *Chemical Engineering Journal*. 145 (2008) 308-315.

[3] E. Heracleous, A. A. Lemonidou, Ni-Nb-O mixed oxides as highly active and selective catalysis for ethene production via ethane oxidative dehydrogenation. Part 1. Characterization and catalysis performance, *J. Catal.* 237 (2006) 162.

[4] E. Heracleous, A. A. Lemonidou, Ni-Nb-O mixed oxides as highly active and selective catalysis for ethene production via ethane oxidative dehydrogenation. Part 2. Mechanistic aspect and kinetic modelling, *J. Catal.* 237 (2006) 175.

[5] Fumitake Yoshida, D. Ramaswami, O. A. Hougen, Temperatures and partial pressures at the surfaces of catalyst particles, *AIChE Journal*, Volume 8, Issue 1, pages 5–11, March 1962.

[6] Gilbert F. Froment, Kenneth B. Bischoff, *Chemical Reactor Analysis and Design*. John Wiley & Sons. 1979.

[7] G. V. Reklatis. *Balances de material y energía*. McGraw-Hill. 1986.

[8] H. Scott Fogler, *Ingeniería de las Reacciones químicas*, Prentice-Hall, tercera edición. 2001.

[9] J. M. Smith, *Ingeniería de la Cinética Química*, McGraw-Hill, sexta edición. 1991.

[10] Miguel Ángel Gómez, Javier Fontalvo, Wilmar Osorio. *Elementos para el análisis y diseño de reactores químicos. Volumen dos*. Universidad Nacional de Colombia, sede Manizales. 2011.

[11] Robert C. Reid, John M. Prausnitz, Bruce E. Poling, John Paul O'Connell, *Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill, fifth edition. 2001.

[12] Taylor R, Krishna R, *Multicomponent mass transfer*, John Wiley & Son. 1993.

