
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
IZTAPALAPA**

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

*" Estudio de los Procesos de Transferencia
de Calor en un Lecho Empacado "*

PRESENTA

I. Q. Carlos Omar Castillo Araiza



ASESOR

Dr. Héctor Felipe López Isunza

SINODALES

Dr. Mario Gonzalo Vizcarra Mendoza

Dr. Hugo Jiménez Islas

Septiembre 2004

Mis mas sinceros Agradecimiento:

Principalmente a **Dios** por que él es la persona que ha decidido que yo tenga y sea lo que soy, **gracias**.

A mis padres **Alicia y Carlos** con especial reconocimiento por su cariño, comprensión, y paciencia que me han tenido, **gracias**.

A mis hermanos **Luis, Víctor y Lesly** por su apoyo y cariño otorgado, **gracias**

Un agradecimiento especial a mi Asesor **Dr. Felipe López Isunza**, por todos los conocimientos que compartió con migo, dedicación y gran apoyo brindado para la elaboración de este trabajo.

A mis **amigos** del TESE, especialmente a **Víctor y Lalo** por estar siempre conmigo, **gracias**.

A todo el grupo de trabajo con el que me toco convivir: **Margarita, Celia, Noemí, Víctor Hugo, Felipe y Hugo** por su amistad y apoyo mostrado en todo momento.

A mi novia **Nei** y mis amigos **Víctor, Lalo, Amapola, Celia, Noemí, Nei, Dago y Rosa María** por su apoyo en varios de los momentos más difíciles por los que pase, **gracias**.

Mis mas sinceros Agradecimiento:

A la **UAMI** por la oportunidad de permitirme alimentar mi formación profesional de su inagotable fuente de conocimientos.

A los sinodales de este trabajo: **Dr. Mario G. Vizcarra Mendoza** y **Dr. Hugo Jiménez Islas**, quienes con sus acertados comentarios y sugerencias enriquecieron el contenido técnico y mejoraron la presentación final del trabajo, además de su apoyo brindado para que esta faceta en mi formación este finalizado, **gracias**.

A todas las **personas** que me apoyaron y están disfrutando estos momentos conmigo, **gracias**.

A **CONACyT** por el apoyo económico otorgado para la realización de este trabajo, **gracias**.

Resumen General

En los pasados 50 años, se han desarrollado diferentes modelos de reactores tubulares con calentamiento-enfriamiento en la pared, comenzando con el más simple modelo homogéneo de flujo pistón unidimensional a uno de los más complejos, como el heterogéneo en dos dimensiones, o el modelo de flujo pistón considerando la dispersión axial. Los parámetros de transporte de calor en estos modelos agrupan diferentes mecanismos de transporte de calor, los cuales ocurren a diferentes escalas. Dentro de estos modelos el factor controlante para el transporte de calor está dado principalmente por la no homogeneidad del lecho empacado, ya que los parámetros efectivos son valores promediados.

También, han sido propuestas diversas correlaciones empíricas para la estimación de los parámetros de transporte, las cuales difieren ampliamente dependiendo del sistema experimental utilizado, geometría, relación de diámetros de partícula a tubo, etc. Con respecto a los modelos empleados en la descripción de los fenómenos de transporte que ocurren en estos sistemas, estos normalmente predicen satisfactoriamente el comportamiento observado de los lechos empacados, lo cual ha hecho pensar que su descripción utilizando estos modelos es adecuada.

El estudio de la transferencia de calor en las direcciones radial y axial es de suma importancia en el diseño de reactores catalíticos de lecho empacado. El reactor tubular de lecho fijo es comúnmente usado en reacciones altamente exotérmicas (ej. la oxidación parcial del n-Butano y reacciones de hidrogenación), en las cuales se requieren diámetros de tubo muy pequeños, dados los efectos de transferencia de calor que inciden en estos sistemas. Por otra parte en las plantas industriales, se tiene la necesidad de manejar altas velocidades de flujo lo que provocarían razonables caídas de presión en el lecho, como consecuencia se requiere de catalizadores con un diámetro considerable, para evitar dicho efecto. Mismo que provoca la obtención de bajas relaciones de diámetro de tubo a diámetro de partícula.

En este trabajo se presenta un estudio del fenómeno de transferencia de calor, estimando los parámetros efectivos de transporte de calor del lecho empacado a través de números y coeficientes como; el número de Peclet axial, Pe_z , el coeficiente global de transferencia de calor, U_i , el número de Peclet Radial, Pe_r y el número de Biot en la pared, Bi_w . La relevancia de este estudio radica en el hecho de que la relación de diámetro de partícula a diámetro de tubo es pequeña (~ 3.25), encontrándose en la literatura muy pocos trabajos que tratan este caso.

Se llevó a cabo una estimación independiente de los parámetros de transferencia de calor en un sistema que tiene características diferentes a los de la mayoría de los estudios publicados a la fecha sobre la transferencia de calor en lechos empacados como son: porosidad, altas temperaturas, relación de diámetro de tubo a diámetro de partícula pequeña, e hidrodinámica en el lecho.

Para estimar la conductividad térmica axial en términos del Pe_z , el sistema empleado es similar al utilizado por Yagui y *col.*^[14], y Hlavacek y *col.*^[16]. En este, la fuente puntual de generación de calor es una lámpara infrarroja (250 W) colocada en el extremo superior del lecho, mientras que el flujo de aire proviene de la parte inferior, teniéndose así que el flujo de calor está en dirección opuesta al flujo del aire, que se alimenta a temperatura ambiente. Los experimentos en estado estacionario fueron registrados aproximadamente después de una hora que el flujo de aire se alimentó al lecho empacado, y se consideraron diversos flujos de alimentación.

Con respecto al estudio de transferencia radial de calor para la obtención de los parámetros: U_i , Pe_r y Bi_w , el equipo experimental usado es similar al empleado por la mayoría de los investigadores^[8,10]. El equipo consta de un lecho empacado, que se calienta a través de la pared por un horno que opera con una resistencia eléctrica. Una corriente de aire se alimenta por la parte superior del lecho, variando el flujo de alimentación que cubre el rango de interés para el caso de la oxidación parcial de hidrocarburos, que se llevará a cabo en estudios *a posteriori* en el sistema experimental empleado.

Los resultados experimentales muestran la presencia de importantes gradientes de temperatura en ambas direcciones, axial y radial. Para la estimación de los parámetros se utilizó un método de regresión no lineal (método de Levenberg-Marquardt), aplicado a los modelos que describen el sistema de estudio. Los modelos utilizados describieron adecuadamente el comportamiento del estado estacionario observado del lecho empacado.

Índice

Resumen General	iv
Índice	vii
Lista de Figuras	x
Lista de Tablas	xii
Objetivos	xiii
Capítulo 1. "Introducción General"	1
Capítulo 2. " La Transferencia de Calor en un Lecho Empacado"	6
2.1 Los Mecanismos de Transporte de Calor	7
2.1.1 Introducción	7
2.1.2 Los Mecanismos de Transporte de Calor en Lechos Empacados	7
2.2 Correlaciones para Calcular los Parámetros de Transporte de Calor Efectivos	13
2.2.1 Introducción	13
2.2.2 La Conductividad Térmica Efectiva Axial	14
2.2.3 La Conductividad Térmica Efectiva Radial	15
2.2.4 El Coeficiente de Transferencia de Calor en la Pared	18
2.2.5 El Coeficiente Global de Transferencia de Calor	19
Capítulo 3. " El Equipo Experimental Utilizado en el Estudio de la Transferencia de Calor"	22
3.1 El Equipo Experimental	22
3.2 La Medición de la Conductividad Térmica Efectiva de Experimentos con Dispersión Axial de Calor	24
3.2.1 Los Experimentos en Estado Estacionario	25

3.2.2	Los Experimentos Dinámicos	26
3.3	La Medición de la Conductividad Térmica Efectiva de Experimentos con Dispersión Axial y Radial de Calor	27
3.3.1	Los Experimentos	29
Capítulo 4.	“ Resultados y Discusión ”	32
4.1	Los Experimentos de Transferencia de Calor en un Lecho Fijo	33
4.1.1	La Estimación de la Conductividad Axial Efectiva	33
4.1.2	Los Modelos de Transferencia de Calor	35
4.1.3	Los Resultados de los Experimentos en Dirección Axial en Estado Estacionario	36
4.1.4	Una Correlación Propuesta	39
4.1.5	Los Perfiles de Temperatura de Experimentos Dinámicos	41
4.2	Transferencia Radial de Calor	44
4.2.1	La Estimación de Parámetros de Transporte Radial de Calor	44
4.2.2	La Transferencia de Calor Radial en Estado Estacionario	52
4.2.3	Resultados de Transferencia de Calor Radial y Axial	55
4.2.3.1	Los Perfiles de Temperatura Axiales	55
4.2.3.2	El Coeficiente Global de Transferencia de Calor	58
4.2.3.3	Los Parámetros de Transferencia de Calor Radial	65
4.3	Distorsión en los Perfiles de Temperatura	70
4.3.1	Antecedentes	70
4.3.2	Sistema Experimental y Resultados	71
Capítulo 5.	“Conclusiones”	74
Capítulo 6.	“Apéndices”	78
6.1	Estimación de Parámetros en Sistemas no-Lineales	79
6.2	El Método de Colocación Ortogonal	88

6.2.1	Colocación Ortogonal para Sistemas con Simetría	89
6.2.2	Colocación Ortogonal para Sistemas no Simétricos	91
6.3	Coeficientes del Polinomios Utilizado para Ajustan los Perfiles Axiales de Temperatura dentro de la Pared Interna del Lecho	93
	"Referencias"	96
	"Nomenclatura"	101

Índice de Figuras

Figura 1.1.	Reactor Tubular Industrial de Lecho Empacado	2
Figura 2.1.	Mezclado de los elementos de Fluido entre las Partículas	9
Figura 2.2.	Transferencia de Calor entre Partículas Sólidas	11
Figura 3.1.	La Medición de Temperatura en el Lecho Empacado	23
Figura 3.2.	Arreglo del Catalizador en el Lecho. a) Perfil de Velocidad, b) Arreglo del Catalizador Esférico, c) Vista de las Esferas de Catalizador en el Lecho y d) Patrones de Flujo en el Lecho Empacado	24
Figura 3.3.	Equipo Usado para Medir la Conductividad Térmica Efectiva Axial por Yagi y <i>col.</i>	25
Figura 3.4.	Forma de Alimentación al Lecho	26
Figura 3.5.	Sistema de Reacción	28
Figura 3.6.	Sistema de Medida Empleado de la Unidad de Microreacción para la Estimación de Parámetros Radiales	29
Figura 3.7	Posición Radial Dentro del Lecho	30
Figura 3.8	Posición Axial en el interior del Lecho	31
Figura 4.1.	a) Perfil Axial de Temperatura en Estado Estacionario a Diferentes Re_p b) Dependencia del Pe_z con el Re_p	37
Figura 4.2.	Perfiles de Temperatura Utilizando el Valor de el Pe_z Obtenido con la Correlación y con el Método de Regresión	38
Figura 4.3.	Perfiles de Temperatura Utilizando la Correlación Propuesta	40
Figura 4.4.	Perfiles de Temperatura Dinámicos a lo Largo de el Lecho	41
Figura 4.5.	Perfiles de Temperatura Dinámicos, con Flujos de Alimentación de 10 y 15 Lt/min	42
Figura 4.6.	Perfiles de Temperatura en Estado Estacionario en un Lecho Empacado con Intercambio de Calor	53
Figura 4.7.	Perfiles de Temperatura Axiales en el Lecho a Diferentes Posiciones Radiales	56
Figura 4.8.	Perfil de Temperatura Axial en Dos Posiciones Radiales	57

Figura 4.9.	Perfil de Temperaturas: en la Pared (T_w), en el centro (T_c) y promedio (\bar{T})	61
Figura 4.10.	Perfiles de Temperaturas en la Pared, Experimental, (T_w) y por Medio del Polinomio	62
Figura 4.11.	Comparación entre Perfiles de Temperatura con Datos Experimentales, el Modelo y la Correlación	63
Figura 4.12.	Efecto de la Velocidad Másica en el Coeficiente Global de Transferencia de Calor, U_i	64
Figura 4.13.	Perfiles de Temperatura Radiales a Diferentes Posiciones Axiales y Re_p	66
Figura 4.14.	Comportamiento de los Parámetros (Bi_w , Pe_r) de Calor	69
Figura 4.15.	Dispositivos de Registro de Temperatura en el Lecho	72
Figura 4.16.	Perfiles de Temperatura Radiales a un $Re_p=25$	73

Índice de Tablas

Tabla 3.1.	Catalizador Utilizado para la Oxidación Parcial (COP)	22
Tabla 3.2.	Condiciones de Experimentación	26
Tabla 3.3.	Condiciones de Operación para los Experimentos de Transferencia Radial de Calor	30
Tabla 3.4.	Posiciones Radiales en las cuales se Midió la Temperatura	30
Tabla 3.5.	Posiciones Axiales en las cuales se Midió la Temperatura	31
Tabla 4.1.	Diferencias entre el Número de Pe_z Obtenido	41
Tabla 4.2.	Resultados Obtenido de U_i : Correlación y Modelo	59
Tabla 4.3.	Parámetros de Transferencia de Calor Encontrados	68
Tabla 6.1.	Coeficientes de los Polinomios	93

Objetivos

El Objetivo General de este trabajo es el estudio de los procesos de transferencia de calor en un lecho empacado con esferas de catalizador, en el cual se llevará a cabo la estimación independiente de los parámetros efectivos (Pe_r , Pe_z , Bi_w y U_i) de transferencia de calor.

Objetivos Particulares.

- Estudiar detalladamente los diferentes procesos de transporte de calor en un lecho empacado.
- El estudio experimental de la transferencia de calor en la dirección axial y el uso de un modelo unidimensional quasi-homogéneo para la estimación de la conductividad térmica efectiva en estado estacionario.
- El estudio experimental de la transferencia de calor en la dirección axial y radial, y la estimación de los parámetros efectivos radiales en términos de los números adimensionales como: Peclet radial de calor, Biot en la pared y el coeficiente global de transferencia de calor en el lecho empacado, (Pe_r , Bi_w , y U_i), en estado estacionario.
- Realizar una revisión cualitativa de la distorsión de los perfiles de temperatura radiales en el lecho como consecuencia de los dispositivos de medición de temperatura.

Capítulo 1

Introducción General

Capítulo 1

Introducción General

Resumen.

Se presentan los antecedentes del estudio teórico y experimental del transporte de calor en un reactor de lecho empacado con esferas de un catalizador no poroso. Los experimentos se llevaron a cabo en ausencia de reacción, y servirán de base para estudios posteriores sobre la oxidación parcial del n-butano en el mismo lecho. En este trabajo se desarrollan modelos que describen los transportes de calor por conducción y dispersión en las direcciones axial y radial, así como el transporte de calor a través de la pared del lecho empacado. Lo anterior permitió estimar los números de Peclet axial (Pe_r), y radial (Pe_z), así como el número de Biot en la pared (Bi_w). De esta forma, los parámetros de transporte de calor fueron estimados en forma independiente ya que serán usados en estudios posteriores.

Los reactores tubulares de lecho empacado con intercambio de calor a través de la pared son usados en la industria de proceso para llevar a cabo diversos tipo de reacciones, algunas de las cuales con un desprendimiento considerable de calor como en el caso de la oxidación parcial de hidrocarburos e hidrogenaciones.

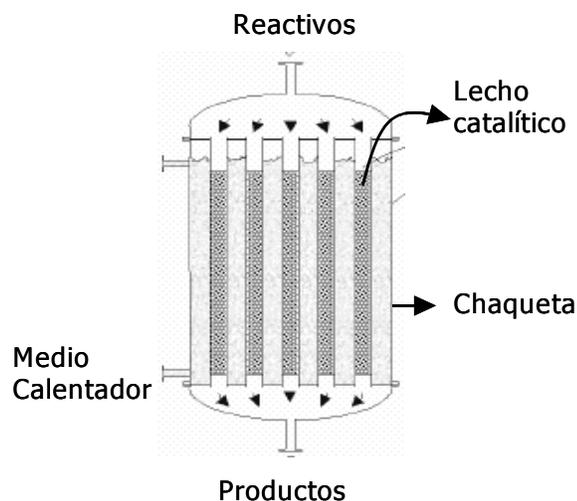


Figura 1.1. Reactor Tubular Industrial de Lecho Empacado.

El reactor industrial utilizado en este tipo de reacciones consiste de un gran número de tubos colocados en un arreglo paralelo en el interior de una chaqueta, como se muestra en la Figura 1.1. La alimentación, normalmente en fase gaseosa, fluye descendientemente a través de los tubos empacados con partículas de catalizador. El medio de transferencia de calor externo en la chaqueta puede ser agua, vapor, aceite o mezclas de sales fundidas, dependiendo de las condiciones de operación.

El diseño de estos sistemas, y en particular para el caso de reacciones altamente exotérmicas, ha descansado cada vez más en la construcción de modelos matemáticos que permiten el análisis de los fenómenos físicos y químicos que determinan el comportamiento del sistema y en la experimentación en reactores de escala de banco y piloto. De esta forma, su diseño y escalamiento basados en la simulación numérica del modelo constituye actualmente la mejor estrategia a seguir, si se le compara con muchos de los estudios previos que se han basado en largos y costosos programas experimentales, y que solo en algunos casos se han considerado el uso de modelos matemáticos como un complemento para el análisis sistemático del proceso.

El diseño basado en modelos matemáticos de reactores catalíticos de lecho fijo, que operan en forma no isotérmica y no adiabática, requiere de la estimación independiente de los parámetros efectivos de transporte de calor ínter-partícula, así como de los parámetros cinéticos^[2,8,10,28]. Para el primer caso, esto se lleva a cabo realizando experimentos de transferencia de calor en el mismo lecho empacado con el catalizador en ausencia de reacción. Complementariamente, se deberán llevar a cabo estudios que permitan discriminar de entre los posibles esquemas, el modelo cinético de reacción. De esta forma, la estimación independiente de los parámetros de transporte de calor y cinéticos, permite un diseño más confiable de la operación del reactor industrial^[2,10,28].

En el presente estudio la estimación de los parámetros de transporte de calor es necesaria debido a las grandes diferencias que existen en el cálculo de estos, basado en las correlaciones publicadas por diversos investigadores^[2,20], provenientes de diversos estudios de transferencia de calor en lechos empacados utilizando diferentes sistemas,

geometrías, relación de diámetro de tubo a diámetro de partícula, números de Reynolds de Partícula (Re_p), de Prandtl (Pr), tipo de material y forma del empaque. Es importante destacar el hecho de que en el 95 % de los estudios de transporte de calor en lechos empacados se han utilizado relaciones de diámetro de tubo a diámetro de partícula, d_t/d_p mayores a 10, y únicamente en el 5% de estos se han utilizado relaciones en el rango de 3 a 5. La relación d_t/d_p se vuelve muy importante ya que tiene un papel determinante en el transporte de calor, debido a los perfiles de fracción hueca y velocidad que se generan, afectando así a la hidrodinámica en el lecho empacado^[44-50].

En el presente estudio, la estimación de los parámetros efectivos de transferencia de calor se lleva a cabo realizando dos tipos diferentes de experimentos en un lecho empacado con esferas de un catalizador industrial de V_2O_5/TiO_2 , siendo en su mayoría TiO_2 en su forma de anatasa. La relación diámetro de tubo a diámetro de partícula, d_t/d_p es de 3.25. Los experimentos se llevarán a cabo en un lecho calentado por un horno a base de una resistencia eléctrica (lo cual provoca no uniformidad en la temperatura de la pared de el lecho). El empaque mencionado se utilizará en estudios posteriores para llevar a cabo la oxidación parcial de anhídrido maléico.

El capítulo 2 fue dividido en dos secciones; En la primera sección se destacan todos los mecanismos de transporte de calor que pueden estar involucrados en el lecho empacado con calentamiento a través de la pared, y en la segunda sección se presenta una revisión sobre las correlaciones propuestas en los trabajos mas relevantes sobre el estudio de transferencia de calor en un lecho empacado.

En el capítulo 3 se presentan los dos tipos de experimentos para el estudio de la transferencia de calor: En la dirección axial en el primer caso, y en las direcciones axial y radial para el segundo caso.

En el capítulo 4 se presenta un análisis de los resultados encontrados, y se da una discusión sobre los experimentos de transferencia de calor en la dirección axial y radial en función de los números de Peclet axial (Pe_1), y radial (Pe_2), y el número de Biot en la

pared (Bi_w). Se analizan las distorsiones en los perfiles radiales de temperatura ocasionados por la medición de esta.

En el capítulo 5 se da las conclusiones globales acerca de esta investigación, mencionando el trabajo a futuro que se realizará después de este estudio. Finalizando así con el capítulo 6, en donde se presentan los apéndices de este trabajo.

Capítulo 2

La Transferencia de Calor en un Lecho Empacado

Capítulo 2

Sección 2.1. Los Mecanismos de Transporte de Calor

Resumen.

En este capítulo se describen los procesos de transferencia de calor en un lecho empacado con calentamiento a través de la pared, y los modelos mecanísticos que los describen.

2.1.1 Introducción

La elección del modelo matemático para describir con cierto detalle el transporte de calor en reactores de lecho empacado se hace de acuerdo con la calidad y número de mediciones experimentales realizadas, y el tipo de modelo seleccionado determinará los requerimientos computacionales para la solución del modelo. Por lo tanto, para la simulación del comportamiento de un reactor en estado estacionario con reacciones medianamente exotérmicas un modelo pseudo-homogéneo de flujo pistón en una dimensión es suficiente (cumpliendo que el número de Darcy es pequeño $<10^{-7}$, de otra manera se tiene la presencia de perfiles quasi-parabólicos en el lecho), pero para el diseño detallado de un reactor tubular para una reacción altamente exotérmica se requiere de un modelo heterogéneo en dos dimensiones, que incluya las dispersiones axial y radial de calor^[1]. Por otro lado, asociados con los diversos modelos están los parámetros efectivos de transporte, los cuales no solo dependen de las propiedades físicas del catalizador y de la fase gaseosa utilizadas, sino que también son función del flujo de alimentación (Número de Reynolds) y dimensiones del reactor, y de las condiciones de operación. Los modelos comúnmente usados han sido descritos con gran detalle en la literatura^[2-9].

2.1.2 Los Mecanismos de Transporte de Calor en Lechos Empacados.

En todos los modelos bidimensionales que describen el transporte de calor en lechos fijos en ausencia de reacción, se considera que existe una simetría radial en los perfiles de temperatura, y se puede suponer que el lecho empacado está dividido en dos zonas; una es interna alrededor del eje de simetría, y la otra es anular y esta delimitada por la pared

interna del reactor. En estos modelos el flux radial de calor en la pared, j_H , se describe como proporcional a la diferencia de temperaturas entre el fluido en la capa límite de la zona anular y la de la pared, y este se expresa de la siguiente forma:

$$j_H = h_w (T_{R_T} - T_w) \quad (2.1.1)$$

Donde h_w es el coeficiente de transferencia de calor en la pared. Por otro lado, el flux radial de calor en el lecho empacado se puede describir, de acuerdo con la ley de Fourier para la conducción de calor, de la siguiente forma:

$$j_H = -k_e \frac{\partial T}{\partial r} \quad (2.1.2)$$

Siendo k_e un coeficiente efectivo de conductividad térmica. Las ecuaciones anteriores nos dan una de las condiciones de frontera en la pared del lecho empacado en los modelos bidimensionales, que estará caracterizada, como se describe más adelante, por uno de los números adimensionales más importante en el caso de lechos empacados con gradientes de temperatura apreciables entre el fluido y la pared, que es el número de Biot.

En los lechos empacados la dispersión de calor es causada principalmente por la presencia del catalizador, que ocasiona variaciones en la fracción hueca (radial y axial) del lecho empacado, lo cual produce variaciones en los perfiles radiales de velocidad del fluido, resultando en un retro-mezclado de este^[44-50,52,54]. En los modelos que se describen a continuación, los coeficientes de conductividad térmica de las dos fases, gaseosa y sólida, son remplazadas por un coeficiente efectivo k_e , que se determina por la combinación de las propiedades físicas de ambas fases, las condiciones de operación y la geometría del catalizador, así como por ocho diferentes mecanismos de transporte de calor, como se señalan a continuación^[40]:

Mecanismos de transporte de calor independientes de la velocidad del fluido:

1. Conducción a través del sólido
2. Conducción a través de los puntos de contacto sólido-sólido
3. Transferencia de calor por radiación entre las superficies de partículas
4. Conducción dentro del fluido

Mecanismos de transporte de calor dependientes de la velocidad del fluido:

5. Convección por el fluido en la dirección axial
6. Mezclado del fluido axial y transversal
7. Transferencia calor entre fluido y el sólido
8. Conducción a través de la película del fluido cerca del punto de contacto sólido-sólido

El proceso de dispersión de calor en un lecho empacado se ilustra esquemáticamente en la Figura 2.1, aquí el retro-mezclado debido a la turbulencia y difusión molecular, conforman parte de los términos de dispersión de calor, los cuales se vuelven más importantes a altas velocidades de flujo y relaciones (d_p/d_t) pequeñas, lo cual es una situación típica en reactores industriales de lecho empacado^[44-47, 51-54].

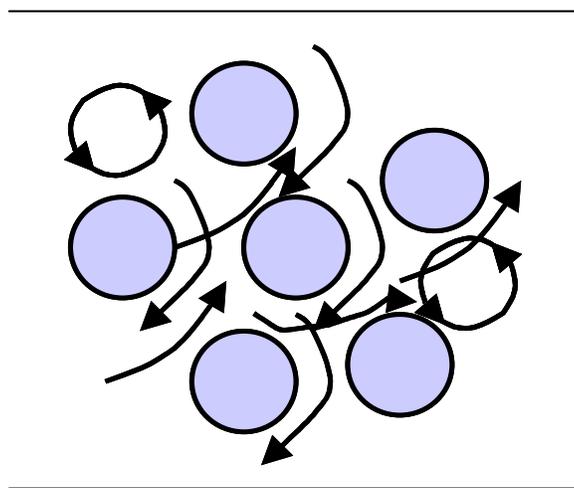


Figura 2.1. Mezclado de los Elementos de Fluido entre las Partículas.

De esta forma, el término de dispersión de calor se asocia con gradientes axiales y radiales de temperatura dentro del lecho empacado y puede ser descrita de acuerdo con la ley de Fourier.

Por otro lado, el transporte de calor por convección en un lecho empacado se expresa de la siguiente forma:

$$-\varepsilon u_r C_{pf} \frac{\partial T}{\partial z'} \quad (2.1.3)$$

Si la temperatura de la partícula difiere de la de la fase fluida, tendrán lugar el intercambio de calor entre el fluido y el sólido. De acuerdo con la teoría de la capa límite, el flux de calor se puede expresar como el producto del coeficiente de transferencia de interfacial de calor, h_p , y la diferencia de temperatura entre las fases; esto es:

$$j_H = h_p (T_f - T_s^i) \quad (2.1.4)$$

En el caso de una reacción exotérmica, puede existir una diferencia importante entre las temperaturas de la superficie de la partícula y en el seno del gas, y aunque solo en casos extremos o en cambios dinámicos en el sistema existirían gradientes importantes dentro de la partícula, ésta normalmente se considera isotérmica y la Ecuación (2.1.4) no es considerada.

La contribución del calor por conducción entre las partículas sólidas puede ser significativa, dependiendo de la conductividad térmica de éste y de la magnitud de la velocidad del fluido. Entre dos partículas adyacentes el calor es transferido por un mecanismo combinado de conducción y dispersión (el retro-mezclado del fluido entre ellas), como se muestra esquemáticamente en la Figura 2.2. Aunque no se muestra la transferencia de calor por radiación entre las superficies de las partículas sólidas, esta depende de la diferencia local de temperaturas (a la cuarta potencia) en el lecho, y se sabe que juega un papel importante a temperaturas mayores de 400°C [2,8-10].

En la Figura 2.2 se muestra esquemáticamente el caso en que a una pequeña distancia de la superficie de la partícula, para un elemento de fluido contenido entre las partículas, el transporte de calor ocurre principalmente por conducción a través de los puntos de contacto entre partículas sólidas y el gas.

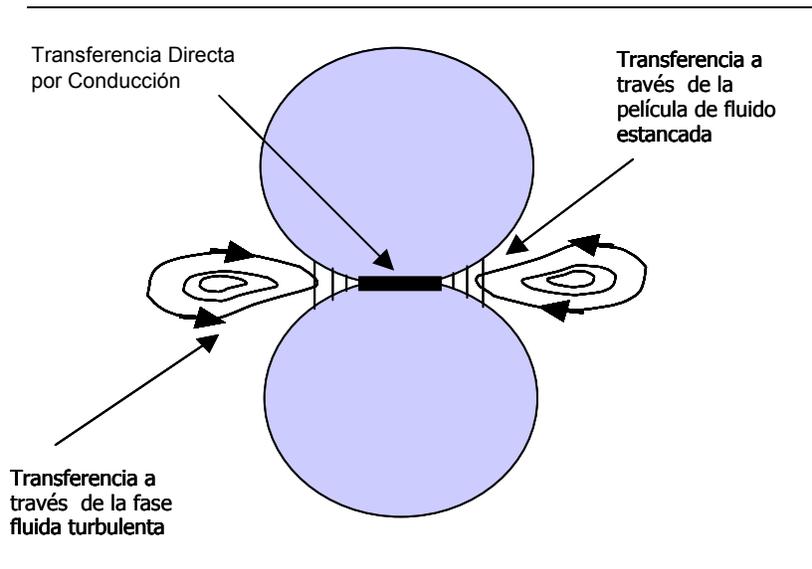


Figura 2.2. Transferencia de Calor entre Partículas Sólidas.

Los primeros modelos de reactores tubulares con intercambio de calor en la pared no contenían términos de resistencia a la transferencia de calor cerca de la pared. Estos modelos son adecuados a bajas velocidades de flujo, esto es, cuando la temperatura del fluido se aproxima gradualmente a la temperatura de pared. Sin embargo, para altas velocidades de flujo se observa una disminución importante de temperatura en la región anular cercana a la pared. Este fenómeno es atribuido a un cambio en la conductividad térmica efectiva radial en esta región, sin embargo, también juega un papel importante el valor local de la porosidad del lecho particularmente a relaciones d_t/d_p bajas^[44-50]. La resistencia a la transferencia de calor cerca de la pared esta determinada por las magnitudes de la conductividad térmica efectiva radial y del coeficiente de transporte de calor en la película de fluido en la pared^[10]. Inicialmente, el coeficiente de transferencia de calor en la pared fue introducido para predecir cambios pequeños de temperatura cerca de está, pero su uso se ha mantenido para describir la mayor parte de los casos

estudiados. A la fecha, existen una gran cantidad de correlaciones empíricas para calcular los coeficientes de transferencia de calor en la pared, que han sido desarrolladas por diversos autores, y aunque la dependencia radial de la conductividad térmica efectiva es compleja, esta es determinada por la distribución de porosidad radial y la velocidad del fluido^[13,22,43-50].

Sección 2.2. Correlaciones para Calcular los Parámetros de Transporte de Calor Efectivos

Resumen.

En esta sección se presentan algunas correlaciones para los parámetros de transporte de calor efectivos en términos de los números adimensionales que los contienen (Pe_r , Pe_z y Bi_w). Se ha revisado la literatura destacando los puntos principales que se consideran más relevante, y que indica que existe una buena cantidad de re-evaluaciones de los primeros trabajos experimentales realizado. Entre esta gran gama de trabajos se encuentran los de Colburn (1930)^[11], J. M. Smith y *col.* (1949)^[12], J. M. Smith y *col.* (1951)^[13], Yagi, Kunii y Wakao (1960)^[14], Littman y *col.* (1968)^[15] Hlavacek V. y *col.* (1978)^[16], Kalthoff y Vortmeyer (1979)^[17], Dixon y Cresswell (1982, 1986)^[18,20], Cresswell y Newson (1982)^[19], Schiffino y Harriott (1988)^[21], Dixon (1997)^[22], Logtenberg y Dixon (1998)^[23], Longtenberg, y *col.* (1999)^[24], Fujii y *col.*(1999)^[8], Nijemeisland (2000)^[26], y G. Wilhelmus (2002)^[10].

2.2.1 Introducción

Los estudios publicados a la fecha^[10-23,51-54], han demostrado que los parámetros efectivos de transporte de calor (Pe_z , Pe_r y Bi_w), pueden ser calculados como la suma de dos contribuciones: una estática (o cero flujo) y una dinámica. La contribución estática es evaluada por la combinación de resistencias en serie y en paralelo, correspondientes a los mecanismos de transporte no dependientes del flujo presentados en la sección anterior. Se ha encontrado que la contribución estática decrece conforme se incrementa la porosidad del lecho empacado al incrementarse la presencia de la fase fluida, como se presenta en el caso de una relación d_i/d_p pequeña^[21]. La contribución dinámica depende de los mecanismos de transporte de calor que a su vez dependen del flujo de alimentación al lecho. Esta contribución es función principalmente de los números de Reynolds (Re_p), y de Prandtl (Pr).

2.2.2 La Conductividad Térmica Efectiva Axial

La conductividad efectiva axial en los modelos pseudo-homogéneos y heterogéneos de lechos empacados o reactores catalíticos, agrupa a todos los mecanismos de transferencia de calor tanto dependientes del flujo como no dependientes, los cuales contribuyen directamente a la transferencia de calor en dirección axial. Tomando en cuenta lo mencionado, las correlaciones para k_{ez} tienen la siguiente forma [2,10]:

$$k_{ez} = k_{ez}^o + k_{ez}^f \quad (2.2.1)$$

En esta relación k_{ez}^f es la conductividad térmica efectiva debida al flujo convectivo del gas en el lecho empacado (contribución dinámica), y k_{ez}^o es la conductividad térmica efectiva asociada por la conducción en la fase sólida (contribución estática).

La determinación de la conductividad térmica efectiva axial se ha obtenido normalmente de experimentos en los cuales la pared del lecho es calentada o enfriada, sin embargo, existe otro tipo de experimentos donde el calor se propaga en dirección axial en dirección opuesta al flujo, utilizando un lecho empacado cuya pared ha sido aislada [26,27]; o aplicando una variación periódica en la temperatura de entrada del lecho. Hlavacek V. y col. [16], utiliza el segundo método usando distintos tipos de materiales de geometría esférica y de anillo, obteniendo la siguiente correlación empírica para la conductividad térmica efectiva;

$$\frac{k_{ez}}{k_f} = \frac{k_{ez}^o}{k_f} + \frac{14.46}{d_p \left(1 + \frac{C_3}{Re_p * Pr} \right)} Re_p * Pr \quad \text{para; } 100 < Re_p < 1000 \quad (2.2.2)$$

En esta ecuación, C_3 es una constante dependiente de las propiedades del sólido y tiene un valor entre 0 y 5. La contribución estática, esta dada por la relación de Krupiczka [10]:

$$\frac{k_{ez}^o}{k_f} = \frac{k_s^{asf}}{k_f} \quad (2.2.3)$$

donde

$$asf = 0.28 - 0.757 \log e - 0.57 * \log \left\{ \frac{k_s}{k_f} \right\} \quad (2.2.4)$$

Wakao y *col.*^[26] ha desarrollado una expresión empírica derivada de un sistema experimental que utiliza una fuente de calor puntual en la superficie normal al flujo en un extremo del lecho empacado, y una corriente de aire alimentada por el otro extremo. De esta forma, el calor por dispersión se propaga en dirección contraria al transporte convectivo. En este caso se utilizan empaques de forma esférica o cilíndrica, para el intervalo $5 < d_t/d_p < 12$. La relación propuesta es:

$$\frac{k_{ez}}{k_f} = \frac{k_{ez}^o}{k_f} + \delta Re_p Pr \quad (2.2.5)$$

El parámetro δ toma valores entre 0.7-0.8, dependiendo del sistema con el cual se este trabajando. En cuanto a k_{ez}^o , esta es estimada utilizando la correlación de Krupiczka (Ecuación (2.2.3)).

En este trabajo la Ecuación (2.2.5) será utilizada para estimar k_{er} , como resultado de las condiciones experimentales a las cuales fue obtenida; con el correspondiente valor de Re_p , el tipo de empaque y el sistema de experimentación empleado.

2.2.3 La Conductividad Térmica Efectiva Radial

La conductividad efectiva radial en modelos pseudo-homogéneos y heterogéneos, al igual que la k_{ez} , agrupa a todos los mecanismos de transferencia de calor dependientes e independientes del flujo. Análogamente a k_{ez} , las correlaciones de k_{er} tienen la siguiente estructura:

$$k_{er} = k_r^o + k_r^f \quad (2.2.6)$$

En esta relación k_r^f es la contribución dinámica y k_r^o es la contribución estática. Yagi y Kunii^[26] estudiaron la transferencia de calor en la dirección radial en un sistema experimental que consiste de un lecho empacado con esferas o cilindros, el cual es calentado por la pared y se alimenta una corriente de aire. Con base en sus resultados experimentales proponen la siguiente correlación empírica que ajusta bien a sus resultados:

$$\frac{k_{er}}{k_f} = \frac{k_r^o}{k_f} + 0.1 * Re_p Pr_r \quad (2.2.7)$$

donde k_r^o es evaluada con la Ecuación (2.2.3).

Specchia y *col.*^[10], proponen, basados en la Ecuación (2.2.7), una expresión para estimar la conductividad efectiva radial en un lecho empacado con partículas esféricas, para Re_p mayores a 100 y relaciones d_t/d_p mayores a 10.

$$\frac{k_{er}}{k_f} = \frac{k_{Conv.}}{k_f} + \frac{k_{Cond.}}{k_f} \quad (2.2.8)$$

Donde:

$$\frac{k_{Conv.}}{k_f} = \frac{Re_p Pr}{K}, \quad (2.2.9)$$

$$\frac{k_{Cond.}}{k_f} = \varepsilon + \frac{\beta(1-\varepsilon)}{\varphi + \gamma \frac{k_f}{k_s}}, \quad \gamma \quad (2.2.10)$$

$$K = 8.65 \left[1 + 19.4 \left(\frac{d_p}{d_t} \right)^2 \right], \quad \beta = 1, \quad \varphi = \frac{2}{3}, \quad \gamma = 0.22e^2 \quad (2.2.11)$$

Y como es señalado en el trabajo de A. Iordanidis^[25]; Dixon y Cresswell, proponen una correlación empírica, con base en sus estudios de transferencia de calor. Utilizando el sistema experimental similar al de Specchia y *col.* (1980), pero usando diferentes flujos ($Re_p > 50$), y utilizando tres diferentes empaques (cilindro, esferas, y cilindros huecos). La relación propuesta es:

$$\frac{1}{Pe_r} = \frac{1}{Pe_{fr}} + \frac{\lambda_{rs}/k_f}{Re_p Pr} \left[\frac{Bi_f + 4}{Bi_f} \right] \left[\frac{8}{N_s} + \frac{Bi_s + 4}{Bi_s} \right]^{-1} \quad (2.2.12)$$

Donde:

$$\frac{1}{Pe_{fr}} = \frac{1}{Pe_{fr}(\infty)} + \frac{0.74\varepsilon^{-1}}{Re_p Pr} \quad (2.2.13)$$

$$Pe_{fr}(\infty) = \begin{cases} 12; & \text{para esferas,} \\ 7; & \text{para cilindros, y} \\ 6; & \text{para cilindros huecos} \end{cases}$$

$$\frac{\lambda_{rs}}{k_f} = \sqrt{1-\varepsilon} \frac{2}{M} \left[\frac{B(k_s - 1)}{M^2 k_s} \right] \ln \left(\frac{k'_s}{B} \right) - \frac{B+1}{2} - \frac{B-1}{M} \quad (2.2.14)$$

$$M = \frac{k_s - B}{k_s}, \quad k'_s = \frac{k_s}{k_f}, \quad B = C \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right)^{10/9} \quad (2.2.15)$$

$C=1.25$; para partículas esféricas y $C=2.5$; para partículas cilíndricas,

$$Bi_f = Nu_{wf} (dt/2dp) (Pe_{fr}/(Re_p Pr)) \quad (2.2.16)$$

$$Nu_{wf} = 0.523(1-d_p/d_t) Pr^{0.33} Re_p^{0.738} \quad (2.2.17)$$

$$Bi_s = 2.41 + 0.156(d_t/d_p - 1)^2; \text{ para esferas,} \quad (2.2.18)$$

$$Bi_s = 0.48 + 0.192 \left(d_t/d_p - 1 \right)^2 ; \text{ para cilindros ,} \quad (2.2.19)$$

$$N_s = \frac{0.25(1-\varepsilon) \left(\frac{A_p}{V_p} \right) \left(\frac{d_t^2}{d_p} \right)}{\frac{\lambda_{fs}}{k_f} \left[\frac{1}{Nu_{fs}} + \frac{1}{\beta k_s} \right]} , \quad (2.2.20)$$

$$Nu_{fs} = 2.0 + Pr^{1/3} Re_p^{0.60} , \text{ y} \quad (2.2.21)$$

$\beta=10$; Para esferas y $\beta=8$; para cilindros

Aunque el número de correlaciones publicadas en la literatura es muy grande, aquí solo se presentan algunas de la que consideramos a nuestro criterio más relevantes, por aspectos prácticos y lo trascendental que son en los estudios de transferencia de calor.

2.2.4 El Coeficiente de Transferencia de Calor en la Pared

Como en los casos de conductividad axial y radial efectiva, el coeficiente de transferencia de calor en la pared es comúnmente definido como la suma de los coeficientes de transferencia de calor dependientes e independientes del flujo, como se muestra en la siguiente expresión^[10]:

$$h_w = h_w^o + h_w^f \quad (2.2.22)$$

En esta expresión h_w es usualmente expresado en la forma del número de Nusselt, (Nu_w), el cual está definido como sigue:

$$Nu_w = \frac{h_w d_p}{k_{er}} \quad (2.2.23)$$

Li y Finlayson^[39] correlacionan varios de los resultados reportados en la literatura expresando Nu_w como una función de Re_p y Pr , con partículas esféricas como empaque, para los rangos: $5 < d_i/d_p < 20$, y entre $70 < Re_p < 7600$, siendo esta relación:

$$Nu_w = 0.19 Re_p^{0.79} Pr^{0.33} \frac{d_p}{d_h} \quad (2.2.24)$$

En donde:

$$d_h = \frac{6V_p}{A_p} \quad (2.2.25)$$

En el mismo trabajo Li y Finlayson^[39], en base a análisis similares, ajustan sus resultados por regresión, proponiendo la siguiente relación:

$$\frac{h_w d_p}{k_f} = 0.17 \left(\frac{G d_p}{\mu} \right)^{0.79} \quad \text{Para; } 20 < Re_p < 800 \quad \text{y} \quad 3.3 < d_i/d_p < 20 \quad (2.2.26)$$

2.2.5 El Coeficiente Global de Transferencia de Calor

Sin ser la excepción, y análogamente a los parámetros efectivos anteriores, las expresiones empíricas para el coeficiente global de transferencia de calor, tienen la siguiente forma:

$$U_i = U_i^o + U_i^f \quad (2.2.27)$$

Li y Finlayson^[39], en su estudio de transferencia de calor en la dirección radial, proponen una correlación para el coeficiente global de transferencia de calor cuando el empaque es de partículas esféricas, para Re_p en el rango de 20 y 7600. La cual tiene la siguiente forma:

$$\frac{U_i d_t}{k_f} = 2.26 \text{Re}_p^{0.8} \text{Pr}^{0.33} \exp\left(-\frac{6d_h}{d_t}\right) \quad (2.2.28)$$

Por otra parte Wasch y Froment^[32], correlacionan sus resultados experimentales con la siguiente relación empírica:

$$\frac{U_i d_t}{k_f} = 5.783 \frac{k_{er}}{k_f} + 0.092 \left(\frac{C_{pf} G d_p}{k_f} \right) \left(\frac{d_t}{L} \right) \quad \text{Para; } 10 < \text{Re}_p < 3450 \quad (2.2.29)$$

Esta última expresión será con la que se trabajará en este estudio, debido al procedimiento experimental (Re_p , Pr) con que fue obtenida.

Finalmente, es oportuno comentar que en la actualidad se sabe de las grandes diferencias que existe en la estimación de Pe_z , Pe_r , U_i y Bi_w obtenidas por diferentes investigadores. Varios autores^[8,10,27] atribuyen estas diferencias a errores experimentales, como limitaciones de la chaqueta de calentamiento y a la cantidad y posición de los dispositivos de lectura de temperatura en el lecho los cuales deforman los perfiles radiales de temperatura^[28,38], y en parte a la no-uniformidad en el empaque del lecho (por lo tanto los perfiles axial y radial de la fracción hueca) en cada uno de los sistemas experimentales.

Capítulo 3

El Equipo Experimental Utilizado en el Estudio de la Transferencia de Calor

Capítulo 3

El Equipo Experimental Utilizado en el Estudio de la Transferencia de Calor

Resumen.

En este capítulo se presenta el equipo experimental empleado para los estudios de la transferencia de calor en el lecho empacado, así como las dimensiones de las esferas de catalizador utilizadas y se describe el procedimiento experimental.

3.3 El Equipo Experimental

En este estudio se utiliza un catalizador comercial esférico no poroso de pentóxido de vanadio (V_2O_5), depositado externamente en un núcleo de dióxido de titanio (TiO_2)^[56], cuyas propiedades se presentan en la Tabla 3.1. Este catalizador fue codificado como COP.

Tabla 3.1.
Catalizador Utilizado para la Oxidación Parcial (COP)^[28]

Propiedad	COP
Diámetro	0.8 cm
Conductividad Térmica	0.001047 W/cm °C
Calor Especifico	0.1047 W*s/g °C

El lecho empacado utilizado es un tubo cilíndrico de acero inoxidable 316 con diámetro interno de 2.6 cm y una longitud de 42 cm, en el cual hay 10 puntos axiales de muestreo cuya distribución no es equidistante. Para las mediciones de temperatura se usaron termopares tipo K (Chromel- Alumel) de 0.5mm y 0.7mm de diámetro externo; en la Figura 3.1 se describe esquemáticamente el sistema experimental. Este lecho empacado está contenido en un horno calentado eléctricamente con resistencias, con un aislamiento de fibra de vidrio y una cubierta de aluminio.

Los experimentos llevados a cabo utilizando el tubo cilíndrico empacado con esferas de catalizador fueron de dos tipos. En el primero de ellos, el suministro de calor al lecho se realizó utilizando un foco de luz infrarroja en el extremo superior del lecho vertical, haciendo pasar aire por el otro extremo, con el propósito de medir los perfiles de temperatura cuando el calor se propaga en dirección opuesta al flujo convectivo del gas, suponiendo que el lecho es adiabático, ya que después de alcanzarse el estado estacionario, se esperaría tener gradientes de temperatura radial insignificantes. En el segundo tipo de experimentos, el lecho empacado fue calentado a través de la pared dentro del horno que lo contiene, se suministra calor en dirección perpendicular al flujo convectivo de gas, generándose así perfiles de temperatura en las direcciones axial y radial.

En todos los experimentos, el catalizador se empaco en el tubo una sola vez formando un arreglo como el que se describe cualitativamente en las figuras 3.2b y 3.2e. Es importante mencionar que debido a la forma como el catalizador esta empacado en el tubo, este tiene una influencia directa sobre la hidrodinámica al interior del lecho, ya que se generan perfiles de porosidad y velocidad como se ilustra cualitativamente en las figuras 3.2a y 3.2c ^[28,45-50,52,54], lo que tendrá una incidencia directa en las velocidades de transferencia de calor.

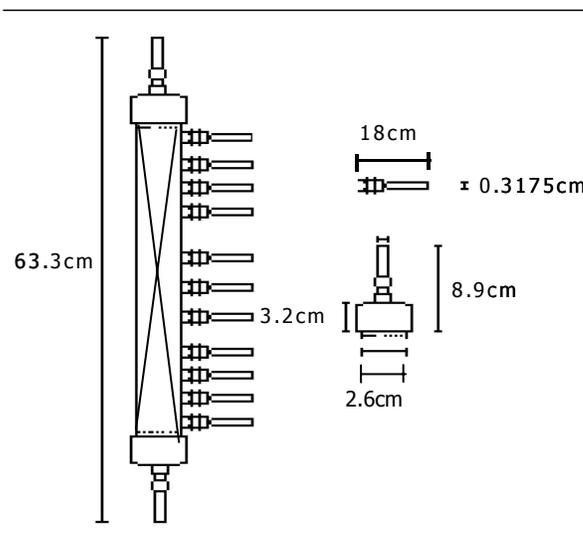


Figura 3.1. La Medición de Temperatura en el Lecho Empacado.

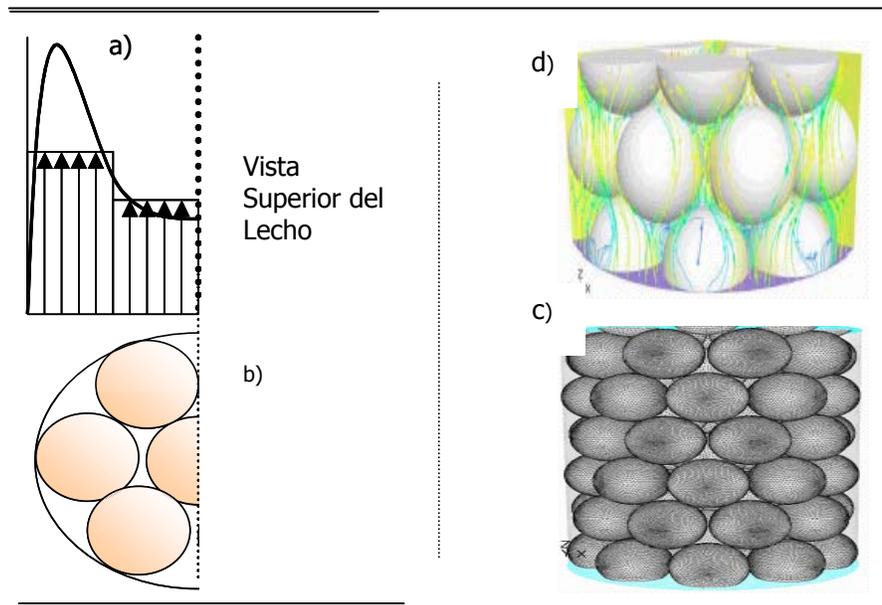


Figura 3.2. Arreglo del Catalizador en el Lecho. a) Perfil de Velocidad, b) Arreglo del Catalizador Esférico, c) Vista de las Esferas de Catalizador en el Lecho y d) Patrones de Flujo en el Lecho Empacado.

3.4 La Medición de la Conductividad Térmica Efectiva de Experimentos con Dispersión Axial de Calor

El uso del equipo experimental para medir la conductividad térmica axial es, en principio, similar al utilizado por Yagi y *col.*^[14] y Hlavacek V. y *col.*^[16], esquematizado en la Figura 3.3. En este sistema las pérdidas de calor por radiación y convección externas son insignificantes debido al aislamiento del lecho, y se considera que no existen perfiles radiales de temperatura en ninguna posición axial debido al aislamiento del lecho empacado. La fuente puntual de generación de calor es una lámpara infrarroja de 250 W, la cual está colocada en el extremo superior del lecho, que se encuentra en posición vertical. El flujo de aire dentro del tubo empacado se alimenta en la parte inferior a temperatura ambiente ($\sim 20\text{-}24\text{ }^{\circ}\text{C}$), teniéndose así que el flujo axial de calor está en dirección opuesta al flujo del aire. Los perfiles axiales de temperatura fueron registrados a intervalos de 15 segundos en un dispositivo de adquisición de datos, usando los 10 termopares tipo K colocados a lo largo del lecho. El registro de temperaturas se realizó hasta haberse alcanzado el estado estacionario en el sistema. Los experimentos en

estado estacionario fueron registrados aproximadamente después de una hora de iniciar la alimentación del flujo de aire al lecho. Para fines de este estudio se observó el efecto que tuvo el Re_p en el lecho.

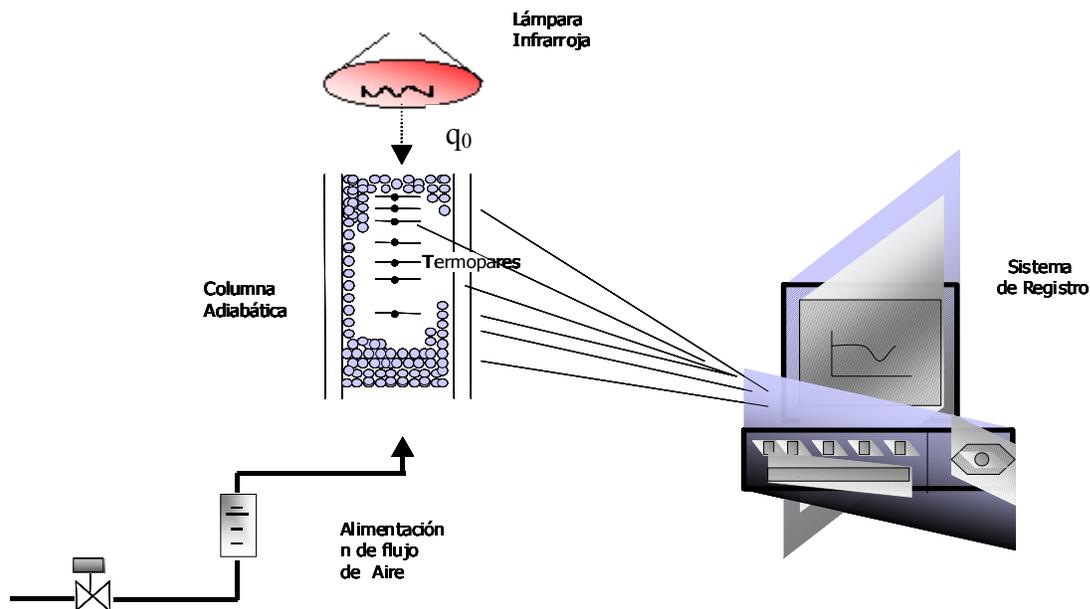


Figura 3.3. Equipo Usado para Medir la Conductividad Térmica Efectiva Axial por Yagi y *col.* [14].

3.4.1 Los Experimentos en Estado Estacionario

En la Tabla 3.2 se presentan las condiciones de operación empleadas en los experimentos axiales. En cada experimento la fuente de calor, (q_0), fue encendida aproximadamente dos horas antes de iniciar la alimentación de aire, tiempo en el cual se alcanzó el estado estacionario en el lecho. Al tener en estas condiciones en el lecho, se alimento una corriente de aire, lo cual produjo gradientes apreciables de temperatura hasta los 20-25 cm de profundidad del lecho (tomando como referencia la parte superior del lecho). Una vez que se alcanzó el estado estacionario en el lecho, la corriente de aire (fluido utilizado para el estudio de transferencia de calor), se incremento a un nuevo valor prefijado, hasta alcanzarse un nuevo estado estacionario. Este procedimiento continuó hasta abarcar los flujos indicados en la Tabla 3.2.

Tabla 3.2.
Condiciones de Experimentación

Flujo de Aire, (Lt/min)	Velocidad Másica G, (g/cm ² min)	Temperatura del Aire a la Salida del lecho, (°C)	Re _p
5	1.3393	185	63
10	2.7638	138	130
20	5.6764	98	267
30	8.5859	75	406
40	11.5867	68	545

El flujo de alimentación al lecho provoca variaciones en la temperatura de entrada y los valores reportados en la Tabla 3.2 corresponden al estado estacionario. Para este sistema la fracción hueca promedio medida en el lecho (ε), es igual a 0.45.

3.2.2 Los Experimentos Dinámicos

Para el seguimiento de los perfiles de temperatura en estado transitorio se llevaron a cabo variaciones en la cantidad de aire alimentado al lecho empacado. Los flujos de aire en el lecho se alimentaron en forma de escalón como se describe en la Figura 3.4.

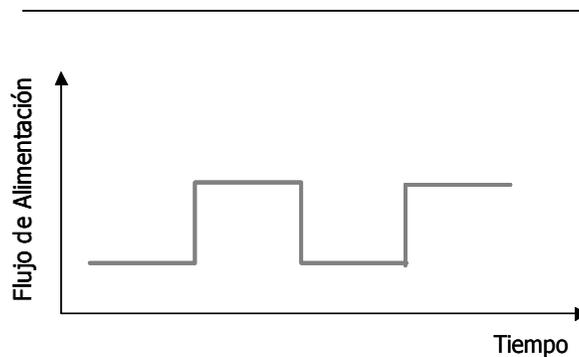


Figura 3.4. Forma de Alimentación al Lecho.

Inicialmente se alimentó aire con un flujo de 10 Lt/min ($Re_p=130$ y $G=2.7638$ g/cm²min) hasta alcanzar el estado estacionario (aproximadamente en una hora) en el lecho; una

vez alcanzado este, el flujo de aire se incremento a 15 Lt/min ($Re_p=195$ y $G=4.1457$ g/cm²min) hasta alcanzar nuevamente un estado estacionario y así sucesivamente este procedimiento se siguió durante 4 horas. La adquisición de lecturas de temperatura se llevo a cabo en el sistema de adquisición de datos a intervalos de 15 segundos. El monitoreo de las temperaturas en el lecho empacado durante los experimentos en estado transitorio se llevo a cabo únicamente en las posiciones axiales; 0, 5, 10.1, 14.7, 20.9 y 27.32 cm de profundidad, por ser la longitud donde se observaron los máximos gradientes de temperatura.

3.5 La Medición de la Conductividad Térmica Efectiva de Experimentos con Dispersiones Axial y Radial de Calor

Como parte de este trabajo se diseño y construyo una unidad de reacción de escala de banco semiautomatizada en la cual pueden ser efectuadas pruebas con diversos catalizadores, aditivos, estudios de variables de operación y de transferencia de calor, siendo este ultimo el objetivo primordial de este trabajo. El esquema de esta unidad se ilustra en la Figura 3.5.

La unidad de reacción de escala de banco se diseñó primordialmente para llevar a cabo una reacción altamente exotérmica (la oxidación parcial del n-butano a anhídrido maléico), y que será la continuación de este proyecto. La unidad esta compuesta básicamente de 5 zonas, que son:

- Zona de alimentación de gases al mezclador
- Zona de alimentación de la carga al reactor
- Zona de reacción y regeneración
- Zona de análisis de productos
- Zona de recolección de productos (gas)

Para los fines de este estudio se utilizó únicamente la zona de alimentación de gases, y del lecho empacado. Esta parte de la unidad se acoplo con un sistema de adquisición de datos, para tener un completo análisis de los resultados experimentales.

Este sistema esta compuesto por una computadora personal, y una tarjeta de adquisición de datos con 6 canales (Modelo SCC1000).

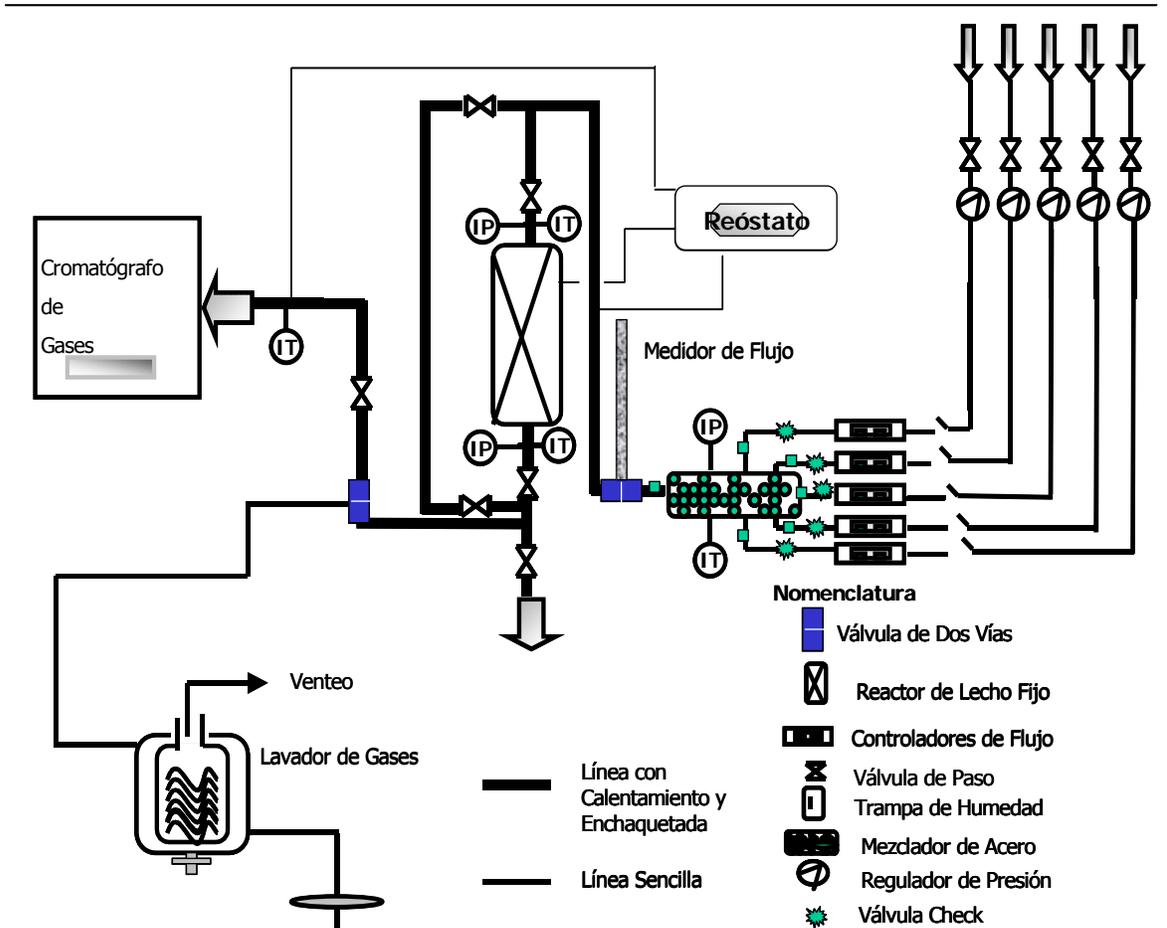


Figura 3.5. Sistema de Reacción

En la Figura 3.6 se muestra el esquema experimental utilizado, donde el aire se alimenta por la parte superior del lecho para disminuir la caída de presión en éste. La pared del reactor se calienta a través del horno que utiliza una resistencia eléctrica, controlando (Chromalox modelo 3910-11208) la temperatura en el punto central de la pared externa del lecho empacado a 400 °C. Los perfiles axiales de temperatura, en distintas posiciones radiales, fueron medidos con los termopares tipo K a intervalos de 15 segundos, hasta haberse alcanzado el estado estacionario. Los experimentos en estado estacionario fueron registrados aproximadamente después de una hora de iniciar la alimentación de

aire al lecho empacado. Durante la experimentación el flujo de alimentación fue la variable manipulada, para flujos de 3, 6 y 12 Lt/min.

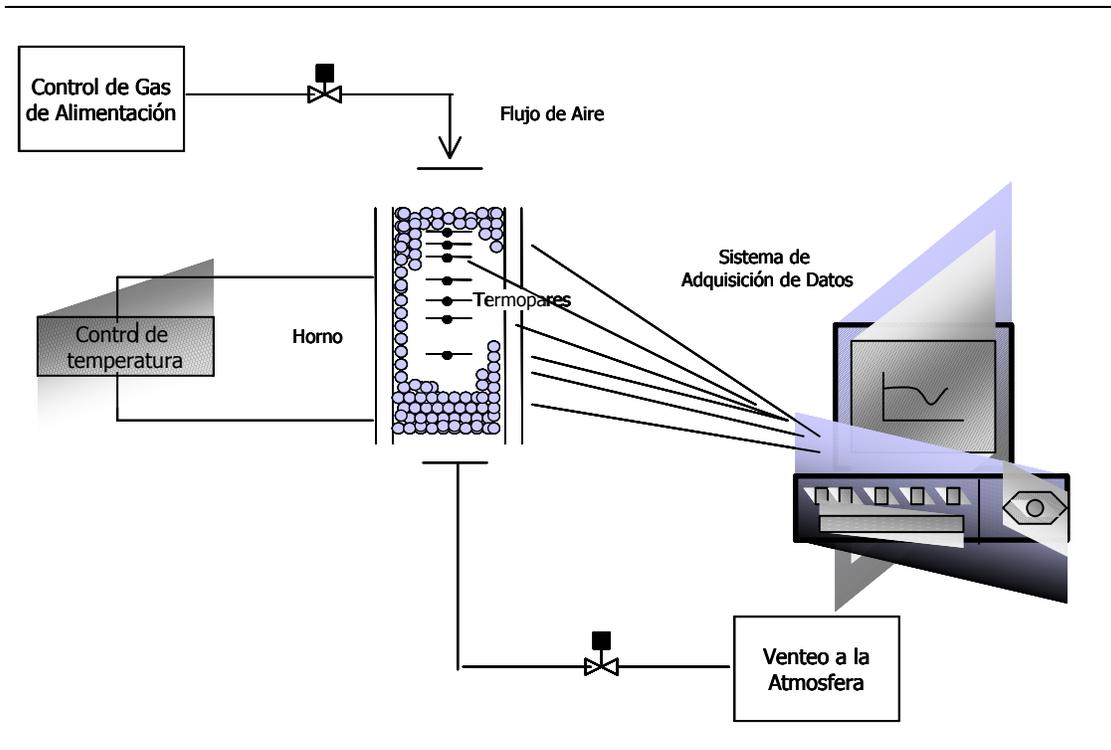


Figura 3.6. Sistema de Medida Empleado en la Unidad de Microreacción para la Estimación de Parámetros Radiales.

3.5.1 Los Experimentos

El objeto de estos experimentos es obtener un registro axial de temperaturas en diferentes posiciones radiales para llevar a cabo la estimación de los parámetros de transferencia de calor en un modelo bidimensional (Pe_r , Bi_w), y en su versión reducida via la solución numérica de este modelo (U_i). Los experimentos se llevaron a cabo a diferentes flujos de aire de alimentación al lecho empacado. El horno se calentó por 5 horas hasta que la pared externa del lecho empacado alcanzó la temperatura establecida como punto de referencia ($400^\circ\text{C} \pm 5$). Una vez alcanzado este valor, se alimentó una corriente de aire, la cual, en ocasiones, se suprimió cuando se alcanzó el estado

estacionario. Esta operación se repitió con cada uno de los flujos utilizados en las cinco posiciones radiales que se indican en las tablas 3.3 , 3.4 y 3.5.

Tabla 3.3*.
Condiciones de Operación para los Experimentos de Transferencia Radial de Calor

Flujo Másico de Alimentación, G, (g/cm ² *min)	Temperatura de Alimentación al Lecho, (°C)	Numero de Reynolds de Partícula. Re _p	Temperatura en el Punto de Control en la Pared, (°C)
0.5315	160	25	400±5
1.0630	120	50	400±5
2.1260	79	101	400±5

* Los experimentos se llevaron a cabo a condiciones normales de presión y temperatura: T=25 °C y P=585 mmHg.

Las caídas de presión registradas en el lecho fueron insignificantes, esto debido a las características geométricas en las que nos encontramos ($d_i/d_p=3.25$) y los bajos flujos de alimentación que se manejaron. Lo mencionado se corrobora con los resultados de las caídas de presión mostrados en la tesis doctoral de F. López-Isunza^[28], ya que maneja un sistema con la misma relación d_i/d_p .

Tabla 3.4.
Posiciones Radiales en las cuales se Midió la Temperatura

Posición Radial	Distancia (cm)
R ₁	0.0
R ₂	0.2
R ₃	0.5
R ₄	0.8
R ₅	1.3

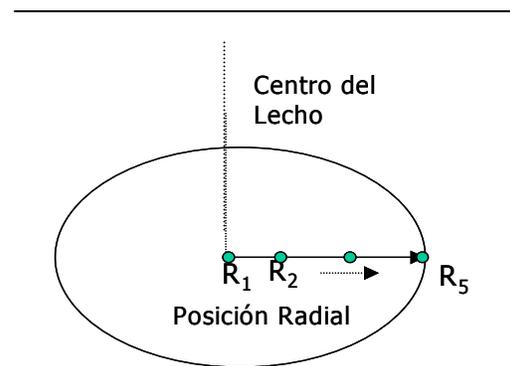


Figura 3.7. Posición Radial Dentro del Lecho

Tabla 3.5.
Posiciones Axiales en las Cuales se
Midió la Temperatura

Posición Axial	Distancia (cm)
Z ₁	0.0
Z ₂	5.0
Z ₃	10.1
Z ₄	14.7
Z ₅	20.1
Z ₆	24.0
Z ₇	27.32
Z ₈	32.26
Z ₉	36.86
Z ₁₀	41.86

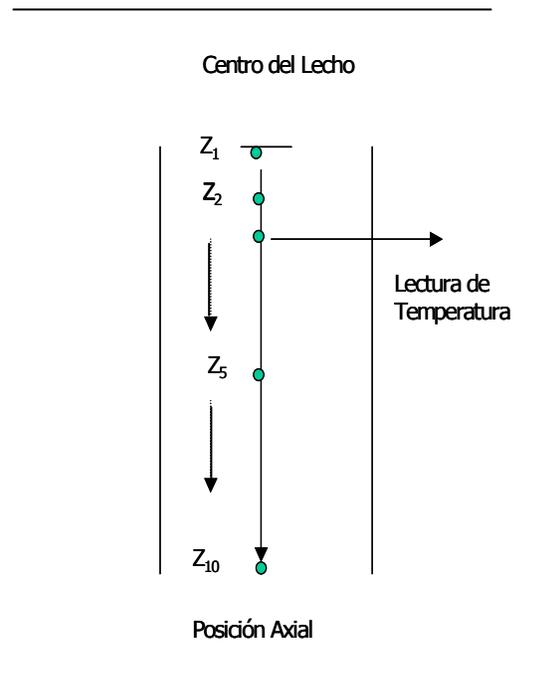


Figura 3.8. Posición Axial en el Interior del Lecho.

Capítulo 4

Resultados y Discusión

Capítulo 4

Sección 4.1. Los Experimentos de Transferencia de Calor en un Lecho Fijo

Resumen.

En este capítulo se presentan los resultados experimentales del transporte de calor en un lecho empacado y se describen los modelos utilizados en la estimación de la conductividad térmica efectiva del lecho empacado con esferas de catalizador. En el primer caso se utiliza una fuente de calor puntual en uno de los extremos del lecho empacado, para un rango de Re_p de 63 a 545. Debido a que los perfiles radiales de temperatura son insignificantes, se utiliza un modelo pseudo-homogéneo en una dimensión para estimar la conductividad efectiva axial, a través de la estimación del número de Pe_z ; comparándose estos resultados con los obtenidos usando una de las correlaciones de la literatura. Finalmente, se propone una expresión empírica para ajustar los valores de Pe_z obtenidos en el lecho, en función de los números Re_p y Pr .

4.1.1 La Estimación de la Conductividad Axial Efectiva

El transporte radial de calor en lechos empacados ha sido ampliamente estudiado tanto en forma experimental como teórica^[10,25,26,27,28,51-54], sin embargo, el transporte de calor en la dirección axial ha sido muy poco estudiado^[14,16]. Smith y *col.*^[12] realizaron estudios experimentales en un lecho empacado donde se producen gradientes radiales y axiales de temperatura. La estimación de la conductividad térmica fue obtenida mediante estudios de simulación. También desarrollaron una relación empírica para estimar la conductividad térmica efectiva en función de la velocidad, viscosidad del fluido y la forma del catalizador. Hatta y Maeda^[26], correlacionaron sus datos de conductividad térmica efectiva en función del Re_p , de la forma: $k_{er}/k_f = a' + Re_p^{b'}$, obteniendo a' y b' de datos experimentales. En otros experimentos independientes Coberly y Marshall^[29] encontraron que sus datos se ajustaban mejor si se usa una función lineal del número de Reynolds, de la forma: $k_{er}/k_f = a + bRe_p$.

Yagi y *col.*^[14] y Hlavacek V. y *col.*^[16], estudiaron experimentalmente la transferencia de calor en la dirección axial en un lecho empacado. En sus experimentos trabajaron en un amplio rango de números de Reynolds (1-1000). Sus datos en estado estacionario permitieron la estimación de la conductividad térmica efectiva en la dirección axial, k_{ez} , en términos del número de Peclet axial, Pe_z . Los experimentos consistieron de mediciones axiales de temperatura en el centro del lecho empacado, el cual está aislado para minimizar los gradientes radiales de temperatura. El modelo empleado por ambos grupos de investigadores fue del tipo pseudo-homogéneo, dado por la siguiente ecuación:

$$\epsilon u \rho_F C_{pF} \frac{\partial T}{\partial z'} - k_{ez} \frac{\partial^2 T}{\partial z'^2} = 0 \quad (4.1.1)$$

La solución analítica para el modelo anterior se usó para realizar la estimación de Pe_z . Yagi y *col.*^[14] reportan la siguiente solución analítica:

$$\ln(T - T_0) = \ln C_2 - Pe_z \epsilon \quad (4.1.2)$$

Por su parte, Hlavacek V. y *col.*^[16] dan la siguiente solución analítica para el modelo dado por la Ecuación (4.1.2), que es prácticamente la misma que la de Yagi y *col.*^[14]:

$$T = C_1 + C_2 \exp(Pe_z \epsilon) \quad (4.1.3)$$

Las estimaciones de Pe_z utilizando la Ecuación (4.1.1) fueron realizadas por medio de un método de regresión no lineal. Ambos grupos propusieron relaciones empíricas como resultado del ajuste a los datos experimentales obtenidos.

Sin embargo, ha existido una gran controversia en el uso de las relaciones empíricas encontradas por diversos autores, ya que como lo menciona Dixon y *col.*^[20], los parámetros de transferencia de calor están relacionados con las propiedades del lecho, y éstos no pueden ser realmente obtenidos de correlaciones extrapoladas a partir de experimentación en cierto tipo de equipos de nivel laboratorio a las condiciones de otros

equipos o a una planta industrial inclusive, por lo que se requiere de una estimación independiente en el lecho empacado que se quiere estudiar, o en el reactor empacado sin reacción, para obtener de forma independiente, estos parámetros.

Por esta razón, en este estudio se llevó a cabo la estimación independiente de $k_{e,z}$, en términos del Pe_z , en un sistema que tiene características diferentes a la mayoría de los estudios reportados de transferencia de calor, en el cual se llevará a cabo posteriormente una reacción de oxidación parcial. El diseño experimental empleado es similar al utilizado por Hlavacek V. y *col.*^[14] y Yagi y *col.*^[16]. La estimación del Pe_z se llevó a cabo utilizando la solución analítica reportada por Hlavacek V. y *col.*^[16] y corroborada en este trabajo. Para la estimación del número de Pe_z se aplicó un método de regresión no lineal (método de Marquardt) a la expresión analítica obtenida, utilizando los datos experimentales obtenidos en este estudio. Los detalles sobre el método de Marquardt se resumen en el apéndice A de este trabajo.

4.1.2 Los Modelos de Transferencia de Calor

Los parámetros de transferencia de calor involucrados en los modelos pseudo-homogéneos están directamente relacionados con algunas características del lecho empacado (propiedades y geometría del empaque, el fluido, la fracción hueca y la hidrodinámica)^[44-50], de aquí la importancia por la cual estos parámetros no pueden ser obtenidos usando correlaciones, las cuales fueron obtenidas a ciertas condiciones específicas (flujo, tipo de empaque, relación d_p/d_t , Re_p , Pr , etc.), que normalmente son diferentes al sistema de interés. Para modelos en estado estacionario, se ha demostrado^[8,10] que es posible obtener relaciones entre los parámetros pseudo-homogéneos efectivos y los parámetros de modelos heterogéneos en dos dimensiones, por tal motivo éstos pueden ser correlacionados y extrapolados. Estas relaciones han sido empleadas en el diseño de reactores y en su escalamiento^[10,26,27]. Para el modelamiento en estado transitorio, Dixon y *col.*^[18] han demostrado que los mismos parámetros pueden ser usados para estado estacionario. Sin embargo, se han encontrado diferencias importantes entre los parámetros encontrados con un modelo dinámico y aquellos obtenidos con modelos en

estado estacionario. En particular, las formulas derivadas para k_{ez} con los modelos en estado estacionario suelen ser usadas solamente para el modelamiento en estado transitorio de sistemas con bajas velocidades de flujo^[18] ($Re_p < 10$), ya que de otra forma, se requiere de experimentos dinámicos para la estimación de estos parámetros.

El modelo pseudo-homogéneo en estado estacionario empleado en este estudio, mostrado en la Ecuación (4.1.1), se muestra a continuación en forma adimensional:

$$\frac{\partial Y}{\partial \epsilon} - \frac{1}{Pe_z} \frac{\partial^2 Y}{\partial \epsilon^2} = 0 \quad (4.1.4)$$

De la misma forma, las condiciones de frontera expresadas en forma adimensional se muestran a continuación:

$$\text{en } \epsilon = 0 \quad Y = 1 \quad (4.1.5)$$

$$\text{en } \epsilon = L/\epsilon = \wp \quad \frac{\partial Y}{\partial \epsilon} = -Pe_z Q_0 \quad (4.1.6)$$

A continuación se presenta la solución analítica del modelo:

$$Y = 1 + \frac{Q_0}{\exp(Pe_z \wp)} (1 - \exp(Pe_z \epsilon)) \quad (4.1.7)$$

Donde Y , Q_0 , ϵ , \wp y Pe_z son parámetros adimensionales, los cuales están definidos en la nomenclatura.

4.1.3 Los Resultados de los Experimentos en Dirección Axial en Estado Estacionario

Los perfiles de temperatura en el estado estacionario, para diferentes flujos (Re_p : 0, 63, 130, 267, 406, 545), se ilustran en la Figura 4.1a. El perfil de temperatura en ausencia de flujo de aire presenta los mayores gradientes axiales de temperatura, mostrando la

contribución de las conductividades moleculares del sólido y el gas estancado en el lecho. Se observa que conforme el flujo de aire se incrementa, estos gradientes disminuyen debido a la mayor extracción de calor a flujos más altos.

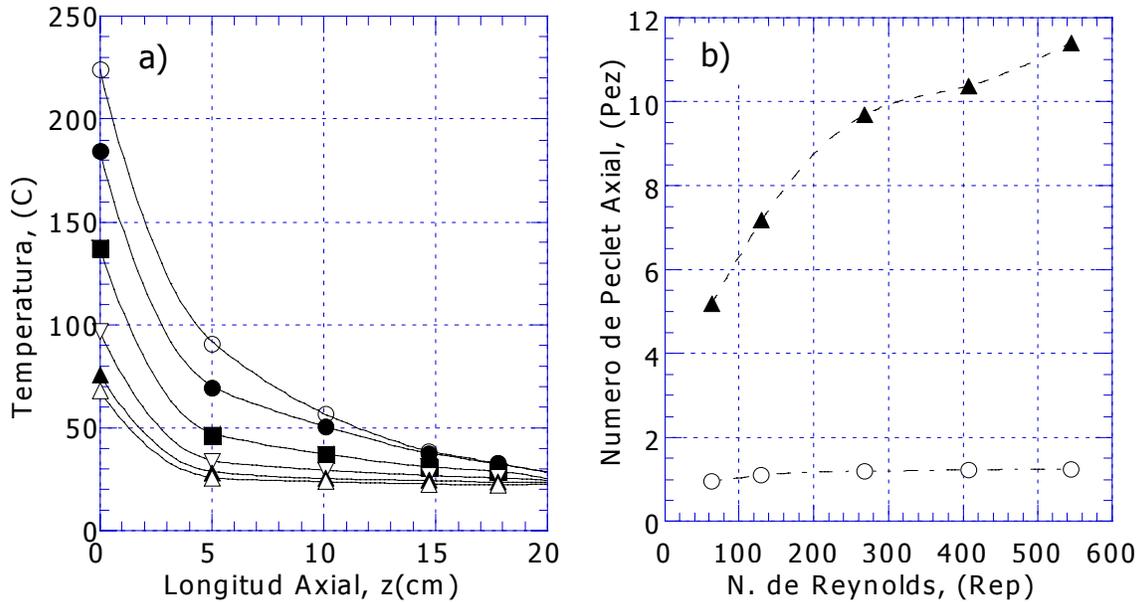


Figura 4.1. a) Perfil Axial de Temperatura en Estado Estacionario a Diferentes Re_p : (○)Sin flujo, (●) $Re_p=63$, (■) $Re_p=130$, (▽) $Re_p=267$, (▲) $Re_p=406$ y (△) $Re_p=545$.
b) Dependencia del Pe_z con el Re_p : (○)Correlación y (▲)Modelo.

La Figura 4.1b, muestra la comparación de los valores encontrados para el Pe_z , mediante la técnica de regresión no lineal aplicada a la Ecuación (4.1.7) y utilizando la correlación dada por la Ecuación (2.2.5), que fue obtenida con experimentos similares a los del presente estudio, misma que utiliza un valor de $\delta=0.7$. La comparación de los valores encontrados del Pe_z usando la correlación y el modelo, arrojaron diferencias arriba del 100%. Este efecto es debido principalmente a que las correlaciones que se encuentran en la literatura, describen sistemas diferentes y existen pocos trabajos que usan una relación d_t/d_p como la de este trabajo; esto tiene un efecto importante en el transporte de calor en el lecho, debido a los perfiles de fracción hueca que se encuentran en éste^[44-50].

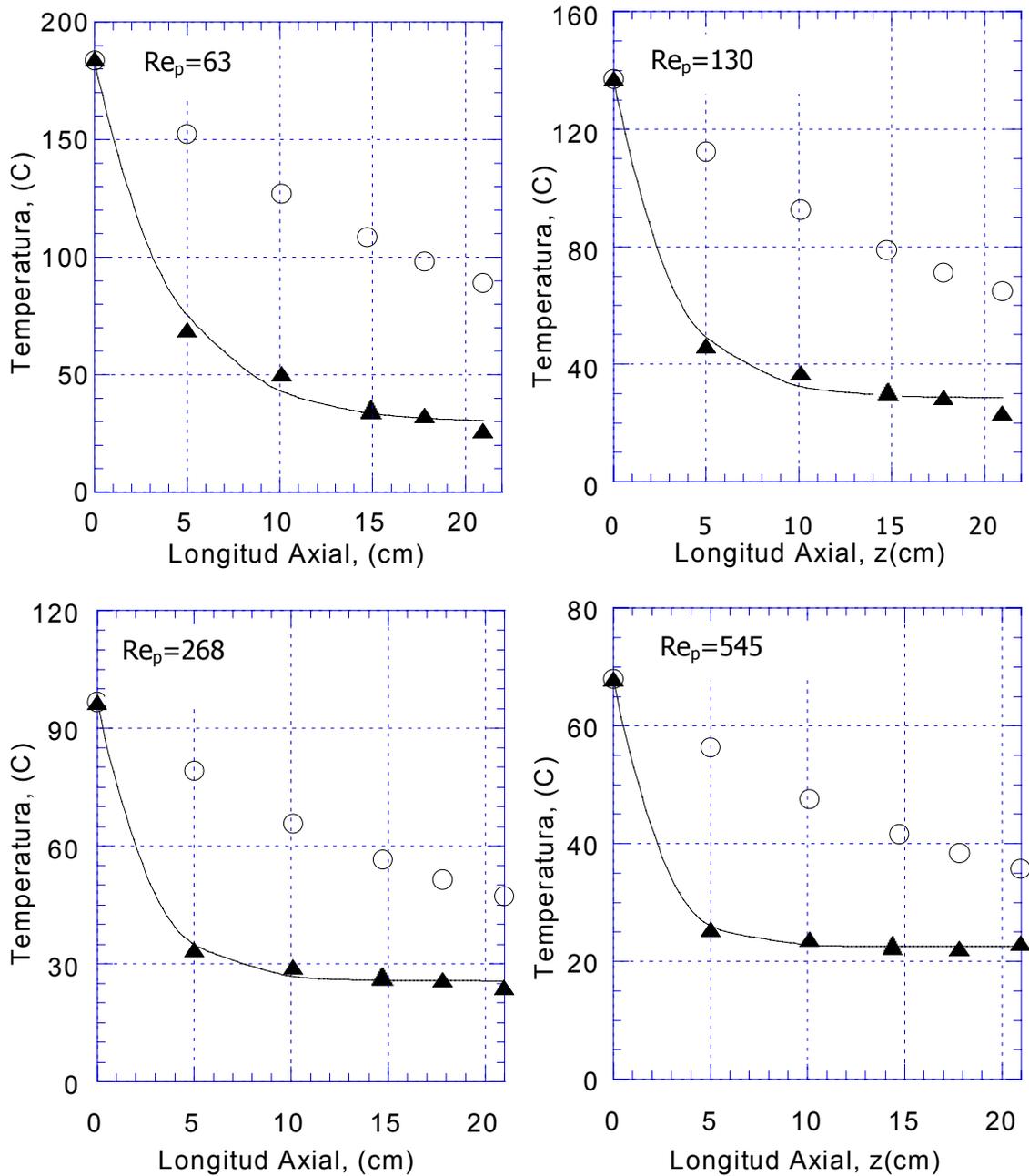


Figura 4.2. Perfiles de Temperatura Utilizando el Valor de el Pe_z Obtenido con la Correlación y con el Método de Regresión:(-)Modelo, (o)Correlación y (▲)Experimentos.

La Figura 4.2 muestra la comparación entre los perfiles de temperatura para diferentes Re_p : los obtenidos con el modelo, los experimentales y los derivados con la correlación. En

esta figura se observa claramente que el modelo predice muy bien el proceso fenomenológico (corroborando lo mencionado por Hlavacek V. y *col.*^[14], al utilizar este modelo) que ocurre en el sistema, representando adecuadamente los datos experimentales (ver Tabla 4.1 en donde se muestran los valores de la función a minimizar). A diferencia de los perfiles de temperatura encontrados utilizando la correlación, donde las diferencias son importantes.

4.1.4 Una Correlación Propuesta

Se observó que cuando se usa la correlación propuesta por Yagi y Wakao^[14] (Ecuación (2.2.5)) y se utiliza un valor diferente para el parámetro δ (0.05), el cual está fuera del rango dado en la literatura^[10,25], esta ecuación arroja resultados muy similares a los obtenidos con el modelo. Sin embargo, esta diferencia se hace cada vez menor cuando se incrementa el valor del Re_p . Lo anterior se muestra en la Tabla 4.1 y en la Figura 4.3. Esto nos hace pensar que la correlación desarrollada por Yagi y Wakao^[26] puede ser utilizada para predecir las observaciones experimentales de varios experimentos, siempre que δ sea el parámetro de ajuste. Es probable que esta constante refleje las diferencias que puedan existir entre un sistema y otro, ya que precisamente este parámetro toma en cuenta la contribución de la parte dinámica debida al flujo, la cual, dependiendo de la relación d_t/d_p (que produce un cierto perfil de fracción hueca y de velocidad), afectará a el Re_p y por lo tanto a la contribución de la hidrodinámica generada. La ecuación a que se refiere lo anterior es:

$$\frac{1}{Pe_z} = \frac{1}{Pe_z^o} + \frac{0.7}{Pe_f} Re_p Pr \quad (4.1.8)$$

Por lo anterior, se ha propuesto una correlación que contiene las contribuciones estática y dinámica en el lecho, pero que, solamente es aplicable para la relación d_t/d_p usada en este trabajo, y tiene la siguiente forma:

$$\frac{1}{Pe_z} = \frac{1}{Pe_z^o} + \frac{0.05}{Pe_f} Re_p Pr \quad (4.1.9)$$

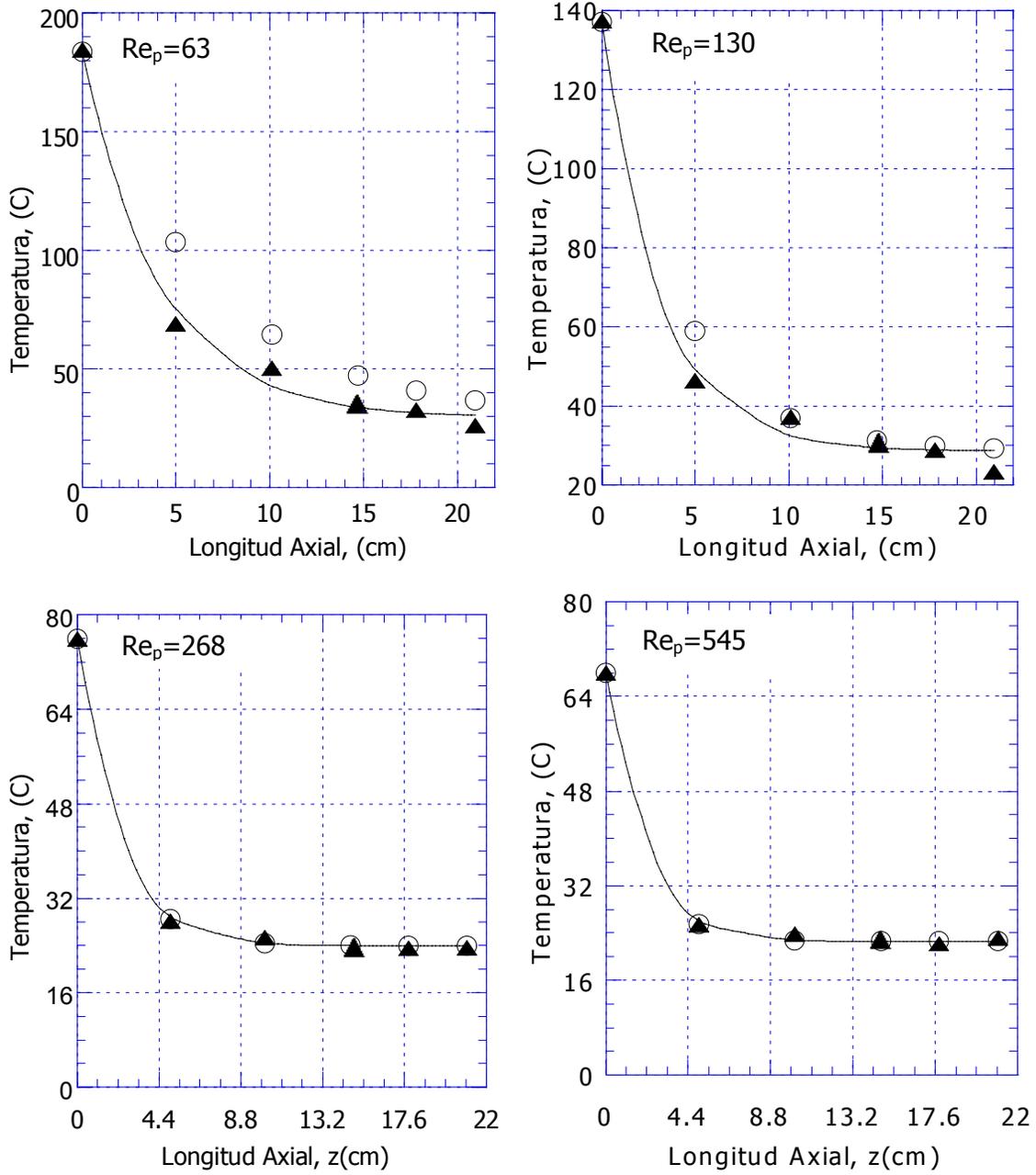


Figura 4.3. Perfiles de Temperatura Utilizando la Correlación Propuesta: (-)Modelo, (o)Correlación y (▲)Experimentos.

Tabla 4.1.
Diferencias entre el Número de Pe_z Obtenido

Variable.		Número de Peclet, (Pe_z)			
Número de Reynolds, (Re_p)	Correlación (Ec. 4.1.8)	Correlación (Ec. 4.1.9)	Modelo (Ec. 4.1.1)	Función Objetivo (RQS)	% de Confiabilidad
63	0.9528	3.0875	5.187	0.5178	69.3733
130	1.1001	5.3592	7.171	0.2116	88.7900
268	1.1905	8.3485	9.685	0.0236	98.8093
407	1.2242	10.2200	10.374	0.0101	99.1859
545	1.2414	11.4919	11.404	0.0112	99.4384

4.1.5 Los Perfiles de Temperatura de Experimentos Dinámicos

En la Figura 4.4 se presentan los perfiles axiales de temperatura a lo largo del tiempo hasta alcanzar el estado estacionario, para flujos de 10 y 15 lt/min. Se puede observar que a la entrada del lecho se tienen los mayores gradientes de temperatura, los cuales disminuyen en magnitud hacia la salida, hasta hacerse despreciables.

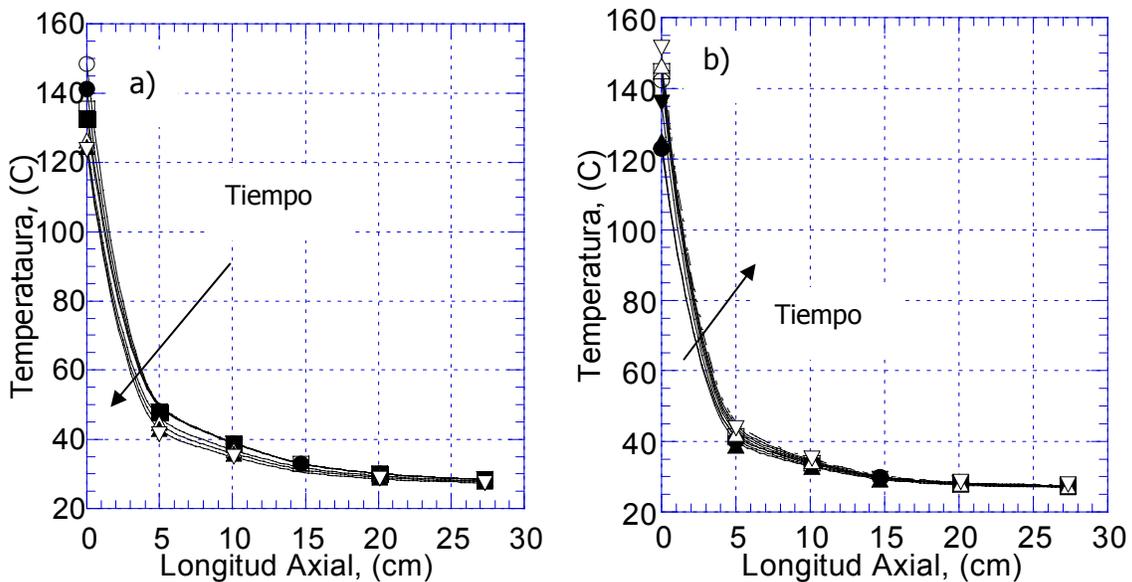


Figura 4.4. Perfiles de Temperatura Dinámicos a lo Largo de el Lecho: a) Alimentación de 15 Lt/min: (●)t=0 s,(▲)t=30 s,(▼) t=60 s,(○)t=90 s,(□)t=360 s,(Δ)t=600 s,(▽)t=1500 s, b)Alimentación a 10 Lt/min.:(●)t=1500 s,(▲)t=1530 s,(▼) t=1605 s,(○)t=1740 s,(□)t=1905 s,(Δ)t=2130 s y (▽)t=3015 s

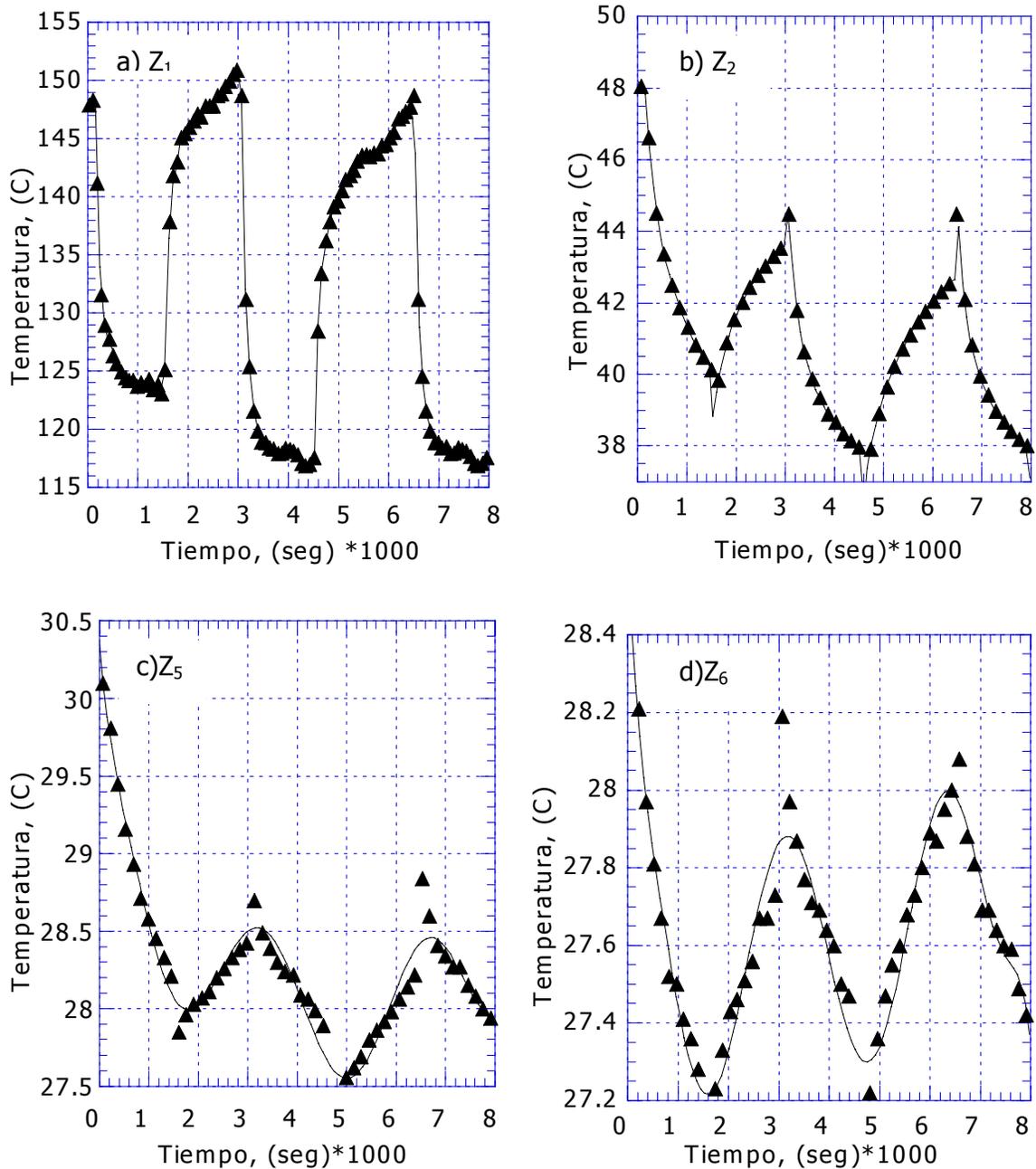


Figura 4.5. Perfiles de Temperatura Dinámicos, con Flujos de Alimentación de 10 y 15lt/min

En la Figura 4.5 se presenta la evolución de los perfiles en las posiciones axiales de medición 1, 2, 5 y 6, mostradas en la Figura 3.8. También se muestra en esta figura una serie de experimentos dinámicos, en los cuales se modifica el flujo de alimentación en

forma de pulsos, hasta que se restablece el estado estacionario. En la Figura 4.5a se observa que los máximos gradientes (entre 20-40 °C) de temperatura se localizan a la entrada del lecho cuando se perturba al sistema, efecto que no se observa en la salida (entre 1-2 °C), como se muestra en la Figura 4.5d.

Sección 4.2. Transferencia Radial de Calor

Resumen.

En esta sección se analizan los experimentos de transferencia de calor a través de la pared del lecho empacado, en donde los perfiles axial y radial de temperatura se describen utilizando un modelo bidimensional pseudo-homogéneo, que se resuelve numéricamente con colocación ortogonal usando un punto interior en la dirección radial, lo que permite agrupar a la conductividad térmica efectiva con el coeficiente de transporte de calor en la pared en un solo coeficiente global de transferencia de calor, que es el que se estima con el método de Marquardt.

4.2.1 La Estimación de Parámetros de Transporte Radial de Calor

El estudio que caracteriza a la transferencia de calor en un lecho empacado puede simplificarse con la evaluación del sistema en ausencia de reacción. En donde el modelo esta basado en las siguientes suposiciones:

1. Propiedades termodinámicas constantes:

Viscosidad (μ), calor específico (C_{pf}) y densidad (ρ_f): donde estas propiedades corresponden al fluido.

2. Se considera que la conductividad térmica efectiva se comporta isotrópicamente en el lecho.

3. El fluido es Newtoniano, mismo que se mueve en flujo laminar, y el sistema se encuentra en estado estable.

En este caso el balance de transferencia de calor es:

$$GC_{pf} \frac{\partial T}{\partial z'} = k_{er} \left(\frac{\partial T^2}{\partial r'^2} + \frac{1}{r'} \frac{\partial T}{\partial r'} \right) \quad (4.2.1)$$

Para este modelo, las condiciones de frontera son:

$$\text{en } z'=0 \quad T = T_0 \quad (4.2.2)$$

$$\text{en } r'=0 \quad \frac{\partial T}{\partial r'} = 0 \quad (4.2.3)$$

$$\text{en } r'=R_T \quad -k_{er} \frac{\partial T}{\partial r'} = h_w (T - T_w) \quad (4.2.4)$$

Existen varios métodos para resolver la Ecuación (4.2.1), sujeta a las condiciones de frontera (4.2.2-4.2.4). Lo más fácil es usar alguna de las soluciones analíticas reportadas, aunque también se han usado soluciones numéricas con métodos de diferencias finitas o de colocación ortogonal.

Al principio la estimación de h_w vía el número de Biot, Bi_w , y k_{er} a través del Pe_r se llevó a cabo trabajando con la siguiente solución [30,31]:

$$\frac{T(r', z') - T_w}{T_0 - T_w} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi_w J_0(x_n) \exp(-X_n^2 z' / LP' e_r)}{(Bi_w^2 + X_n^2) J_0(X_n)} \quad (4.2.5)$$

En donde:

$$Bi_w = \frac{h_w R}{k_{er}} = X_n \frac{J_1(X_n)}{J_0(X_n)} \quad (4.2.6)$$

$$x_n = \lambda_n r' \quad \text{y} \quad X_n = \lambda_n R_T \quad (4.2.7)$$

En donde J_0 y J_1 son las funciones de Bessel de orden cero y orden 1 respectivamente. De tal forma que λ_n son las raíces de la Ecuación (4.2.6).

La temperatura axial promedio se define como:

$$T_a(z') = \frac{1}{\pi R_T^2} \int_0^R T(r', z') 2\pi r' dr' \quad (4.2.8)$$

Donde la temperatura promedio a la salida del lecho es:

$$\frac{T_a - T_w}{T_o - T_w} = 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi_w J_1(X_n) \exp(-X_n^2 / Pe_r)}{(Bi_w^2 + X_n^2) J_0(X_n) X_n} \quad (4.2.9)$$

En donde la magnitud de los valores propios se incrementa conforme n aumenta, de tal forma que existen ciertos rangos (ej. $\lambda_1 = 2.4048$; para Bi_w cercano a 10) para los cuales únicamente el primer término de la serie en las expresiones (4.2.5) y (4.2.9) es importante^[30].

Varios autores han trabajado con la solución analítica para la estimación de h_w y k_{er} , y está es función del número y localización de las mediciones de temperatura en el lecho empacado. Algunas formas de estimación de los parámetros de transferencia de calor (Bi_w y Pe_r) utilizando la solución analítica se muestran en el trabajo de Tsang y col.^[30] y en el libro de Wakao y col.^[26]. A continuación se comentan algunas formas de estimación de Pe_r y Bi_w , empleando tanto la solución analítica como una numérica (a partir del método de colocación ortogonal).

a) Método de Medidas de Cuatro Puntos:

En sus experimentos de transferencia de calor en un lecho empacado, Cybulski^[30] hace la suposición de que el lecho es lo bastante largo, con la idea de que únicamente el primer término de la serie presentada en la Ecuación (4.2.5) sea importante. Así, la temperatura local axial a la salida del gas (en $x_1=0$) es:

$$\frac{T_L - T_w}{T_o - T_w} = \frac{2Bi_w J_o(x_1) \exp(-X_1^2 / Pe'_r)}{(Bi_w^2 + X_1^2) J_o(X_1)} \quad (4.2.10)$$

Al dividir el primer término de la serie de la Ecuación (4.2.9) entre el primer término de la serie de la expresión (4.2.10) se tiene:

$$\frac{T_a - T_w}{T_L - T_w} = \frac{2J_1(X_1)}{X_1} \quad (4.2.11)$$

La solución de la ecuación anterior da el valor de X_{1r} , de tal forma que con la Ecuación (4.2.6) se obtiene el valor de Bi_{wr} , y por consiguiente h_w . Posteriormente se obtiene k_{er} con la Ecuación (4.2.9) considerando únicamente el primer término de la serie, lo que permite conocer Pe_r . Este método de estimación de Bi_w y Pe_r necesita de cuatro lecturas de temperatura en lecho; la temperatura promedio a la entrada, la temperatura de la pared, la temperatura promedio a la salida del gas y la temperatura local a la salida del gas. La limitación de la aplicación del método de Cybulski a nuestro caso se debe a la suposición de que el lecho debe ser lo bastante largo, para que únicamente el primer término de la serie sea significativo, lo cual no se cumple para nuestro sistema. Además, este método es aplicable cuando la magnitud de $(1/Pe'_r)$ se encuentra entre 0.215 y 0.365, y para números de Bi_w entre 1 y 25. Estos rangos de aplicabilidad son un resultado del análisis estadístico de los resultados de Cybulski.

b) Método del Perfil de Temperatura Axial

Este método fue propuesto por Yagi y Wakao ^[26]. Requiere que la longitud del lecho sea lo suficientemente grande para que únicamente el primer término en la serie infinita de la Ecuación (4.2.5) sea importante. Experimentalmente se necesitan lecturas de temperatura en el centro del lecho a diferentes posiciones axiales, además de la temperatura promedio del gas a la salida. Con esto, el valor propio X_1 se obtiene de la Ecuación (4.2.11), y la sustitución de X_1 en la Ecuación (4.2.6) nos da el valor de Bi_w . La conductividad térmica efectiva la obtienen con la siguiente Ecuación:

$$\frac{T_{ax} - T_w}{T_0 - T_w} = \frac{2Bi_w \exp(-X_1^2 z'/LPe'_r)}{(Bi_w^2 + X_1^2) J_0(X_1)} \quad (4.2.12)$$

Con los datos experimentales obtenidos en el lecho, la temperatura se grafica contra la coordenada axial y la recta resultante tendrá una pendiente igual a $(1/Pe'_r)$. De esta relación se obtiene k_{er} y por lo tanto Pe_r . Este método tiene las mismas desventajas que el método desarrollado por Cybulski para la estimación de parámetros de transferencia de calor para el sistema estudiando en este trabajo.

c) Método del Perfil Radial de Temperaturas

Coberly y Marshall [29] estimaron tanto Bi_w como Pe_r tomando lecturas de temperatura en diferentes posiciones radiales a ciertas posiciones axiales en el lecho. Sin embargo, no se obtuvieron buenas estimaciones debido a las distorsiones provocadas en los perfiles medidos como consecuencia de las pérdidas de calor a través de los termopares y termopozos utilizados para medir estas temperaturas.

Por esta razón, los métodos previamente discutidos hacen suposiciones como la de que el lecho debe ser lo bastante largo para que únicamente el primer término de la serie sea importante. Sin embargo, si el lecho no es lo suficientemente largo, ninguno de los métodos anteriores puede aplicarse. Por otro lado, De Wash y Froment [32] propusieron el método del perfil radial de temperaturas, el cual está libre de estas limitaciones antes mencionadas. La temperatura promedio a la salida y los perfiles de temperatura axiales no son necesarios para la estimación. El método se describe a continuación.

Se define la función objetivo que debe ser minimizada.

$$F = \sum_1^N \left\{ T_{exp}(r', L) - T_{cal}(r', L) \right\}^2 \quad (4.2.13)$$

N es el número de mediciones, y la ecuación anterior está sujeta a:

$$T_{\text{cal}}(r', L) = T_w + 2(T_o - T_w) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi_w J_o(x_n) \exp(-X_n^2 / Pe'_r)}{(Bi_w^2 + X_n^2) J_o(X_n)} \quad (4.2.14)$$

Así, para un valor propuesto de Bi_w se obtienen los valores propios, X_n , de la solución de la Ecuación (4.2.6). En la práctica solo tres o cuatro términos son necesarios en la Ecuación (4.2.14). Con estos términos y con el valor de X_1 , el valor de T_{cal} y k_{er} estarán cambiando hasta que la función objetivo representada con la Ecuación (4.2.13) sea minimizada. Sin embargo aunque esta técnica es muy buena requiere de bastante tiempo de cómputo y de una buena elección del valor de Bi_w .

- La Solución Numérica de los Modelos para la Estimación de h_w y k_{er}

Los métodos anteriores hacen uso de soluciones analíticas, sin embargo, es posible usar un método numérico como el de colocación ortogonal, que se sabe que es una técnica muy eficiente en la solución de este tipo de modelos, como lo ha demostrado Finlayson^[33,34,35] con respecto al uso del método de diferencias finitas.

Tsang y *col.*^[30] y Michelsen y *col.*^[31], usaron este método para estimar tanto Pe'_r como Bi_w , en donde la ventaja más importante con respecto a la solución analítica, es que no fue necesario evaluar los valores propios. La estimación consistió en minimizar la función objetivo RSQ (Ecuación 4.2.15) con un método de regresión no lineal (método de Marquardt).

$$RSQ = \sum_{k=1}^{N_{\text{exp}}} (T_{\text{calc},k} - T_{\text{exp},k})^2 \quad (4.2.15)$$

Para el empleo de la colocación es necesario que las expresiones (4.2.1-4.2.4) sean presentadas en forma adimensional, utilizando las variables adimensionales definidas en la sección de Nomenclatura. El balance adimensional de calor y sus condiciones de frontera son:

$$\frac{\partial T^*}{\partial z} = \frac{1}{P'e_r} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T^*}{\partial r} \right) \quad (4.2.16)$$

$$\text{en } z=0 \quad T^*=T^*_d \quad (4.2.17)$$

$$\text{en } r=0 \quad \frac{\partial T^*}{\partial r} = 0 \quad (4.2.18)$$

$$\text{en } r=1 \quad -\frac{\partial T^*}{\partial r} = Bi_w T^* \quad (4.2.19)$$

El método de colocación ortogonal discretiza las expresiones (4.2.16-4.2.19), considerando un sistema simétrico para producir un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias, como se muestra a continuación:

$$\frac{dT^*_j}{dz} = \frac{1}{P'e_r} \sum_{i=1}^{N+1} B_{ij} T^*_i \quad j=1,2,\dots,N \quad (4.2.20)$$

Para las condicione de frontera radial:

$$\text{en } r=1 \quad -\sum_{i=1}^{N+1} A_{N+1,i} T^*_i = Bi_w T^*_{N+1} \quad (4.2.21)$$

Y teniendo como condición inicial:

$$\text{en } z=0 \quad T^*_j(0) = T^*_d \quad (4.2.22)$$

Las matrices A y B han sido reportadas en la literatura^[34,41], y discretizan los términos $\partial T^*/\partial r$ y $\partial^2 T^*/\partial r^2$ respectivamente:

$$\left(\frac{\partial T^*}{\partial r} \right)_{r=r_i} = \sum_{j=1}^{N+1} A_{ij} T_j^* \quad (4.2.23)$$

$$\left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial r^2} \right)_{r=r_i} = \sum_{j=1}^{N+1} B_{ij} T_j^* \quad (4.2.24)$$

Tsang y *col.*^[30] encontraron que la colocación ortogonal es un método eficaz ya que da resultados cercanos al los obtenidos con las soluciones analíticas. Además demostraron que con este método ya no se tienen las mismas limitaciones que cuando se usa la solución analítica. Sin embargo, el problema en la forma en que fue resuelto por Tsang y *col.*^[30] no resultó ser correcto, y por esto, Michelsen y *col.*^[31] demostró que Bi_w es un parámetro muy sensible debido a la no-linealidad del modelo, aclarando que este efecto se debe a la forma en que Tsang y *col.*^[30] manipularon los puntos de colocación con respecto a la posición de las mediciones de temperatura. Michelsen y *col.*^[31] demuestra en su artículo la forma correcta de abordar, tanto el problema de la solución numérica como el de estimación de parámetros.

En este estudio la estimación de los parámetros Pe_r y Bi_w se llevó a cabo utilizando la técnica de colocación ortogonal, en donde los parámetros de transferencia de calor son agrupados en un solo parámetro, el coeficiente global de transferencia de calor, U_i , cuando se utiliza un punto interior de colocación^[30,42].

Un resumen sobre el método de colocación ortogonal se presenta en el apéndice B. Esta forma de estimar Pe_r y el Bi_w , ha sido utilizada por diversos autores^[21,28,30] y como es comentado por Tsang y *col.*^[30], cuando estos parámetros son estimados vía un coeficiente global de transferencia de calor, éste describe adecuadamente al sistema experimental, encontrándose como resultado de la estimación los límites de confiabilidad para este parámetro.

Así con el modelo unidimensional derivado por Finlayson^[42] y corroborado en este estudio, se realizó la estimación de U_i . Estimando en términos de dos números adimensionales Pe_r ,

y Bi_w , los parámetros k_{er} y h_w , respectivamente, variables que inciden directamente en la transferencia de calor radial en el lecho. Su estimación se logró con la siguiente relación [30,42].

$$\frac{1}{U_i} = \frac{1}{h_w} + \frac{R_o}{3k_{er}} \quad (4.2.25)$$

Es oportuno resaltar que k_{er} se evalúa mediante la Ecuación (4.1.9), la cual se obtuvo en los experimentos axiales de la sección anterior, este parámetro es interpolado a las condiciones de experimentación radial (Re_p , Pr). Considerando que el lecho se comporta de forma isotrópica, los valores encontrados de Pe_z servirán para encontrar el valor del Pe_r en estos experimentos. Teniendo el valor de la k_{er} y con el valor estimado de U_i mediante el método de Marquardt se estima h_w mediante la Ecuación (4.2.25). Los resultados de estos parámetros de transferencia de calor (k_{er} , h_w) se muestran al final de esta sección en términos de dos números adimensionales (Pe_r , Bi_w).

4.2.2 La Transferencia de Calor Radial en Estado Estacionario

La transferencia de calor juega un papel importante en varios procesos catalíticos, ej. Oxidación parcial de hidrocarburos y en este caso en particular de la oxidación parcial del n-butano, sistema en el cuál se tienen características físicas especiales del lecho (Altas temperaturas y bajas relaciones d_t/d_p). La importancia de este estudio resalta por la poca cantidad de estudios que se han hecho en lechos empacados con relaciones de d_t/d_p menores a 5 y altas temperaturas [8,19, 43-50].

Como fue comentado en el capítulo anterior, como sistema experimental se utilizó un lecho empacado con esferas de catalizador y con intercambio de calor en la pared. En el cual debido a la transferencia de calor que existe desde la pared del reactor hasta el centro del lecho, tendrán lugar gradientes de temperatura radiales, esto como consecuencia del empaque y flujo de gas en el lecho. En condiciones de estado estacionario en el lecho, una diferencia entre la temperatura local del fluido y las

partículas puede existir, pero en este estudio, el perfil de temperatura global (fluido y sólido) es considerado idéntico, como se muestra en la Figura 4.6. Al hacer esta suposición, el lecho empacado heterogéneo, puede considerarse como un medio efectivo consistiendo de una única fase, en donde los perfiles de temperatura se calculan en términos del coeficiente global de transferencia de calor interno en el lecho, la conductividad térmica efectiva y el coeficiente de transferencia de calor en la pared^[14,16,26]. En los siguientes puntos se llevará a cabo la estimación de U_i y Bi_w .

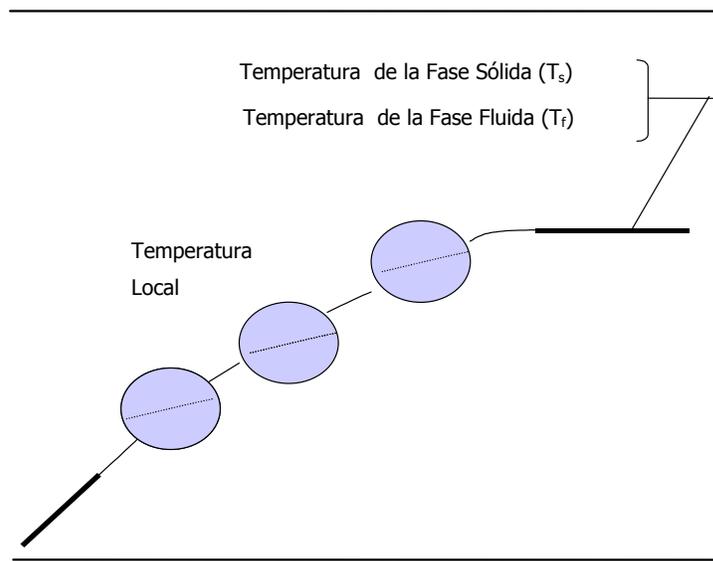


Figura 4.6. Perfiles de Temperatura en Estado Estacionario en un Lecho Empacado con Intercambio de Calor^[27].

El coeficiente global de transferencia de calor interno es determinado normalmente en experimentos en estado estacionario s/reacción^[8,21,28,30,42], en el cuál el aire entra a temperaturas más bajas que la del horno, por lo que éste es calentado a través del lecho. Esta resistencia interna esta entre la pared interna del lecho y el empaque.

Una gran variedad de trabajos ha estimado este coeficiente^[8,10], sin embargo, la mayoría de los métodos reportados están restringidos a experimentos con temperaturas bajas en la pared, la cual permanece constante a lo largo del lecho. Está situación es comúnmente registrada en reactores de laboratorio en donde el calentamiento es llevado a cabo con un baño de sal^[19,7], o una chaqueta de vapor saturado^[36]. Sin embargo, en este estudio las variaciones axiales de la temperatura de pared (T_w) son encontradas como resultado del

tipo de calentamiento (resistencia eléctrica colocada a lo largo de la pared del lecho) y las altas temperaturas que se están manejando.

Con base en los perfiles de temperatura observados en la pared del lecho (Figura 4.7), se sugiere representar y en su caso aproximar estos perfiles axiales de temperatura con una función polinomial de segundo grado la cual dependa directamente de la posición axial en la que nos encontremos, como se muestra a continuación.

$$T_w(z') = az'^2 + bz' + c \quad (4.2.26)$$

Los valores de las constantes para cada experimento se pueden encontrar en el Apéndice C de este estudio.

El valor de U_i se estima con el modelo que se obtiene a partir de la Ecuación (4.2.1) aplicando un punto de colocación (lo cual es suficiente cuando se tienen en el sistema números de Biot menores a 10) como es realizado por Finlayson^[42], el cual da como resultado un modelo pseudo-homogéneo en una dimensión en flujo pistón, aunque en este sistema no se mantiene uniforme el perfil de velocidad dentro del lecho, los resultados nos proporcionan un 95% de confiabilidad en este tipo de estudios^[43], el cual está dado con la siguiente relación:

$$\frac{d\bar{T}}{dz'} = \frac{4U_i}{GCp_f d_i} (\bar{T} - T_w(z')) \quad (4.2.27)$$

Con la condición de frontera inicial:

$$\text{en } z'=0 \quad \bar{T} = \bar{T}_0 \quad (4.2.28)$$

En donde \bar{T} es la temperatura media transversal en el lecho^[42] y \bar{T}_o es la temperatura media transversal a la entrada del reactor. Para estimar U_i , se propone dar una solución al problema incorporando dos rutinas numéricas; por un lado el método de Runge Kutta de cuarto orden, empleado para la solución de las ecuaciones (4.2.27) y (4.2.28), que nos muestra las variaciones axiales de temperatura dentro del lecho. Los perfiles encontrados con el modelo, se emplearán al aplicar el método de Marquardt, el cuál como se explicó no es mas que un método de regresión no lineal para minimizar la función objetivo (ver apéndice A) y es utilizado para la estimación del parámetro de interés (U_i).

4.2.3 Resultados de Transferencia de Calor Radial y Axial

En este punto se revisaron los resultados obtenidos en estado estacionario, en donde se discuten los perfiles de temperatura encontrados con el tipo de calentamiento manejado, culminando con la estimación de los parámetros de transferencia de calor que inciden directamente con los gradientes de temperatura radiales en el lecho. Es importante mencionar que el análisis de resultados mostrado, tendrá siempre relación con los fundamentos teóricos revisados al principio de esta sección.

4.2.3.1 Los Perfiles de Temperatura Axiales

Como fue comentado en la mayoría de los trabajos de transferencia de calor en lechos empacados, el calentamiento de la pared se hizo con un baño de sal o una chaqueta de vapor saturado. En este estudio se utilizó como fuente de calor un horno eléctrico, sistema de operación que regularmente se utiliza en microplantas a nivel laboratorio para estudios de investigación^[8].

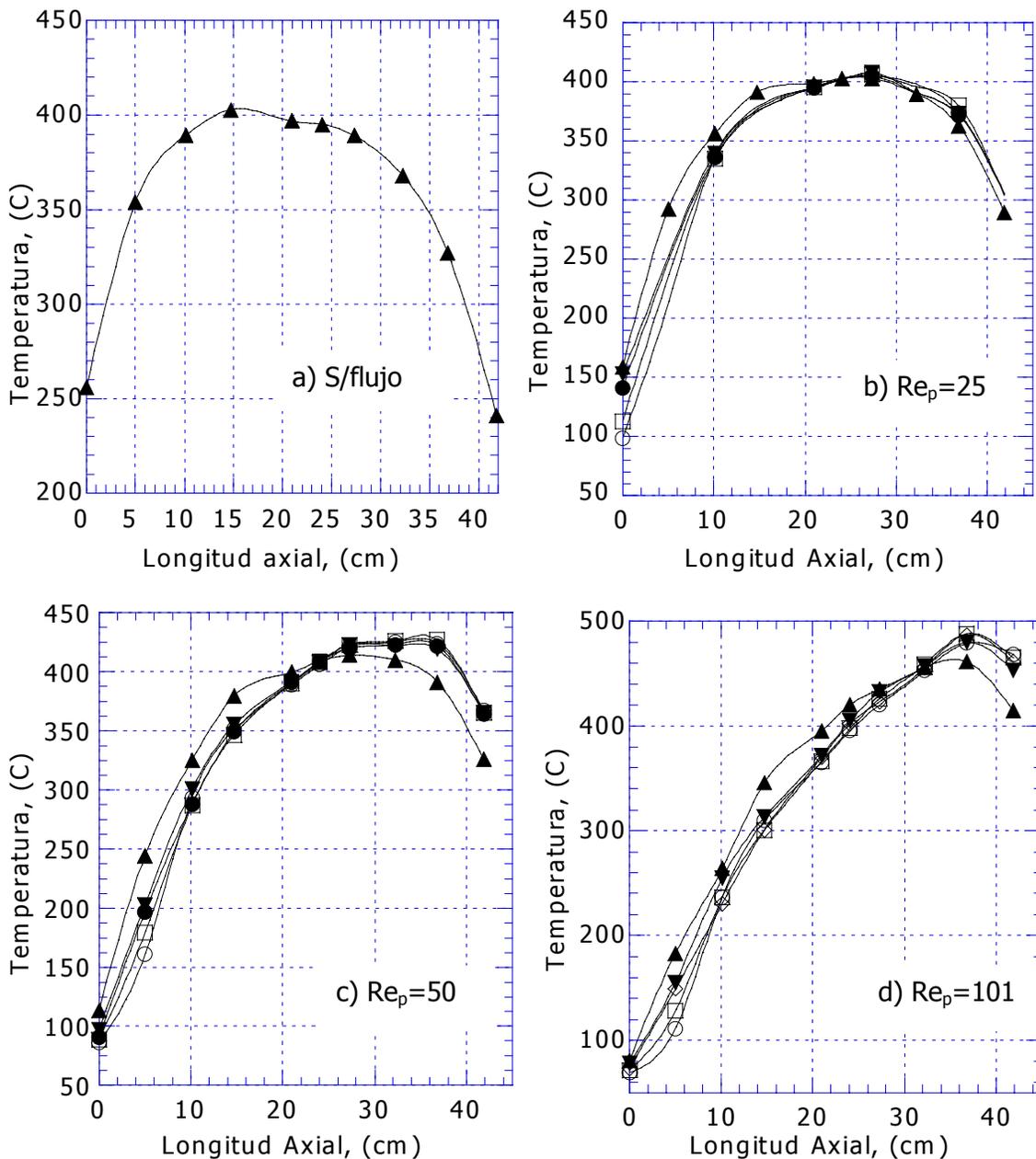


Figura 4.7. Perfiles de Temperatura Axiales en el Lecho a Diferentes Posiciones Radiales: $(-\circ-)$ R_1 , $(-\bullet-)$ R_3 , $(-\square-)$ R_2 , $(-\blacktriangledown-)$ R_4 y $(-\blacktriangle-)$ R_5 .

En la Figura 4.7 se muestran los perfiles de temperatura axiales a diferentes posiciones radiales (R_1 , R_2 , R_3 , R_4 , R_5), ya sea cuando no se alimenta una corriente de aire en el lecho (Figura 4.7a), o cuando diferentes flujos de aire son alimentados al reactor (figuras 4.7b, 4.7c y 4.7d). Los resultados encontrados son de tomar en consideración ya que los

perfiles de temperatura en la pared no permanecen constantes a lo largo del lecho (ver Figura 4.7), a diferencia de los baños de sal^[8]. Este comportamiento principalmente es atribuido a la pérdida de calor por conducción en los extremos del lecho.

Particularmente en la Figura 4.7a se observa como el perfil de temperaturas es considerablemente simétrico cuando al reactor se encuentra s/flujo, por lo que se podría pensar que los perfiles de temperatura en la pared del lecho son simétricos. Sin embargo conforme el flujo de alimentación se incrementa, la simetría en el perfil de temperatura se pierde (figuras 4.7b, 4.7c y 4.7d), efecto debido principalmente al arrastre de energía provocado por la extracción de calor como consecuencia de los flujo del aire manejados.

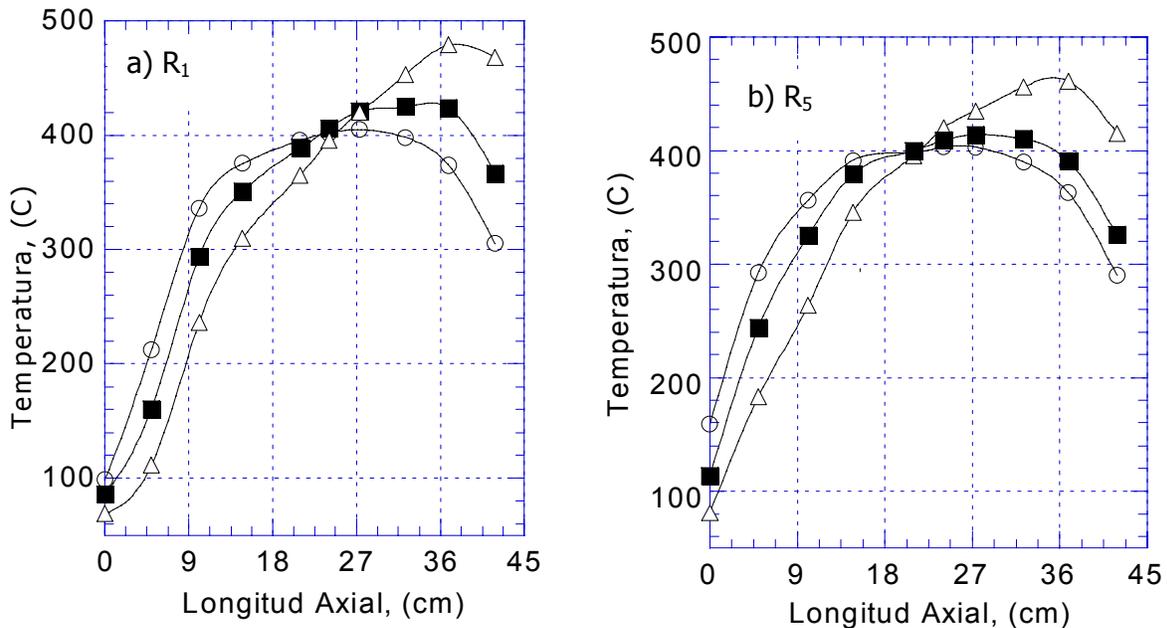


Figura 4.8. Perfil de Temperatura Axial en Dos Posiciones Radiales: (O) $Re_p=25$, (■) $Re_p=50$ y (Δ) $Re_p=101$.

En la Figura 4.8 se muestran los perfiles axiales de temperaturas a diferentes posiciones radiales (R_1 y R_5), en los cuales claramente se observa que después de un determinado flujo de alimentación ($Re_p=101$) el comportamiento de la temperatura en el lecho es similar al de un reactor que esta operando en forma adiabática. Entre los perfiles de temperatura axiales en cada una de las diferentes posiciones radiales, se mostraron

comportamientos similares (Figura 4.7), en los cuales son considerables las diferencias de temperatura entre las posiciones radiales R_1 y R_5 , efecto debido a las resistencias radiales a la transferencia de calor que inciden en el lecho.

En la Figura 4.8 se observa un punto de interceptación de los perfiles de temperatura para los diferentes números de Re_p , este punto es consecuencia de la posición en que se llevo a cabo el control del lecho, lo que provoca que en esta posición axial la temperatura no dependa del flujo que se maneje y la distribución de temperaturas radial permanezca constante. Ahora bien, el modelo fenomenológico utilizado en este estudio, predice adecuadamente el comportamiento observado como consecuencia del tipo de calentamiento manejado en este estudio (ver Figura 4.2.11).

4.2.3.2 El Coeficiente Global de Transferencia de Calor

Se sabe que el coeficiente global de transferencia de calor interno incide directamente en el lecho empacado, fenómeno que fue y es estudiado en las últimas décadas. Sin embargo la importancia de este proyecto radica principalmente por la poca cantidad de trabajos que estudian el comportamiento de los parámetros (Pe_r , Bi_w y U_i) de transferencia de calor en lechos empacados con partículas esféricas con relaciones d_t/d_p menores a 5 y temperatura de pared alta y no-uniforme^[8,37].

El uso de U_i en la simulación de reactores catalíticos requiere del conocimiento de la temperatura en la pared, lo cual es complejo de evaluar en lechos donde el calentamiento de la pared es a través de un horno que se calienta a partir de energía eléctrica. Efecto que se ve reflejado en las variaciones de temperatura a lo largo de la pared de éste. Tres posibilidades para tener la temperatura en la pared del lecho se usarían en esta situación, la primera es usar la temperatura de control del horno como referencia, una segunda, es obtener una temperatura promedio a lo largo de la pared del reactor, ambas opciones implicarían que el modelamiento tenga menos dificultades, sin embargo, sería muy cuestionado, tomando esto como consideración se propone una tercera forma de contrarrestar el comportamiento de la temperatura observada en la pared, esto es

trabajando la temperatura de la pared del lecho como una función de la longitud de la pared del reactor $T_w(z)$.

Para comenzar con este desarrollo, en cada posición axial, se declara una temperatura promedio transversal al flujo (\bar{T}), asumiendo un perfil de temperaturas parabólico como se muestra en figuras posteriores, (Además de no ser una mala hipótesis, especialmente por las condiciones de no-reacción estudiadas aquí). En la Figura 4.9 se muestran los perfiles de temperatura para los Re_p manejados, en el centro (T_c), pared (T_w) y promedio (\bar{T}), los cuales muestran considerables gradientes tanto en las entradas (Z_1 a Z_5) y salidas (Z_7 a Z_9) del lecho, a diferencia del centro (Z_6 y Z_7), en el cual se presentan gradientes de 1 a 2 grados. Esta situación se debe principalmente a que en esta parte del lecho se controló la temperatura. Para lechos en donde la temperatura de pared no se mantiene constante, se utiliza un modelo uni-dimensional como el observado en la Ecuación (4.2.27), en donde se sugiere que la temperatura de la pared sea aproximada como un polinomio de segundo orden, como fue mostrado en la Ecuación (4.2.26) ya que simula perfectamente el comportamiento de la temperatura en la pared del lecho (ver Figura 4.10).

Tabla 4.2.
Resultados Obtenido de U_i ; Correlación y Modelo

Flux másico ($\text{gcm}^{-2}\text{min}^{-1}$)	Numero de Reynolds de Partícula, (Re_p)	Correlación de Wasch y Froment U_i ($\text{Wm}^{-2}\text{k}^{-1}$)	Modelo Uní-dimensional U_i ($\text{Wm}^{-2}\text{k}^{-1}$)	Función Objetivo (RQS)	% de Confiabilidad
0.5315	25	4.4426	3.9572	0.0180	98.18
1.063	50	8.2871	5.6189	0.0189	98.08
2.126	101	15.4691	17.1887	0.0190	98.00

Trabajando en conjunto con las ecuaciones (4.2.27), (4.2.28) y (4.2.29) se encontró U_i , minimizando la función objetivo mediante el método de Marquardt (cuyos valores se muestran en la Tabla 4.2). Las diferencias de los valores encontrados de U_i tanto con el

modelo como la correlación (2.2.28) en cada uno de los fluxes de alimentación manejados, se muestran en la Tabla 4.2.

En la Tabla 4.2 y en la Figura 4.12 se observa como el coeficiente global de transferencia de calor interno se incrementa con la velocidad de flujo, este efecto también es observado en los trabajos de Wellauer y *col.*^[19], López-Isunza^[28] y Harriott y *col.*^[21].

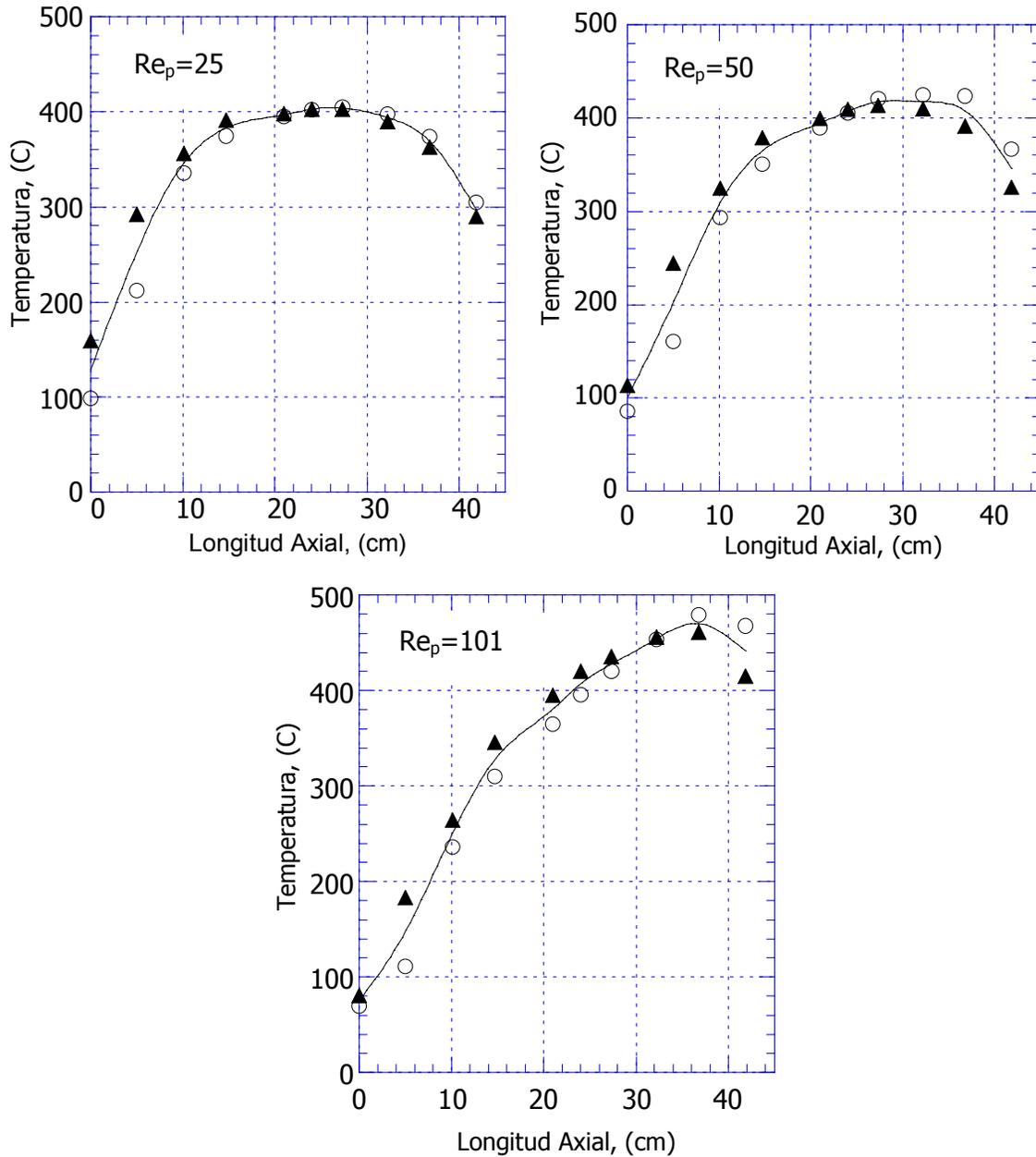


Figura 4.9. Perfil de Temperaturas en la Pared (T_w), en el Centro (T_c) y Promedio (\bar{T}):
 (o) T_c , (▲) T_w y (-) \bar{T} .

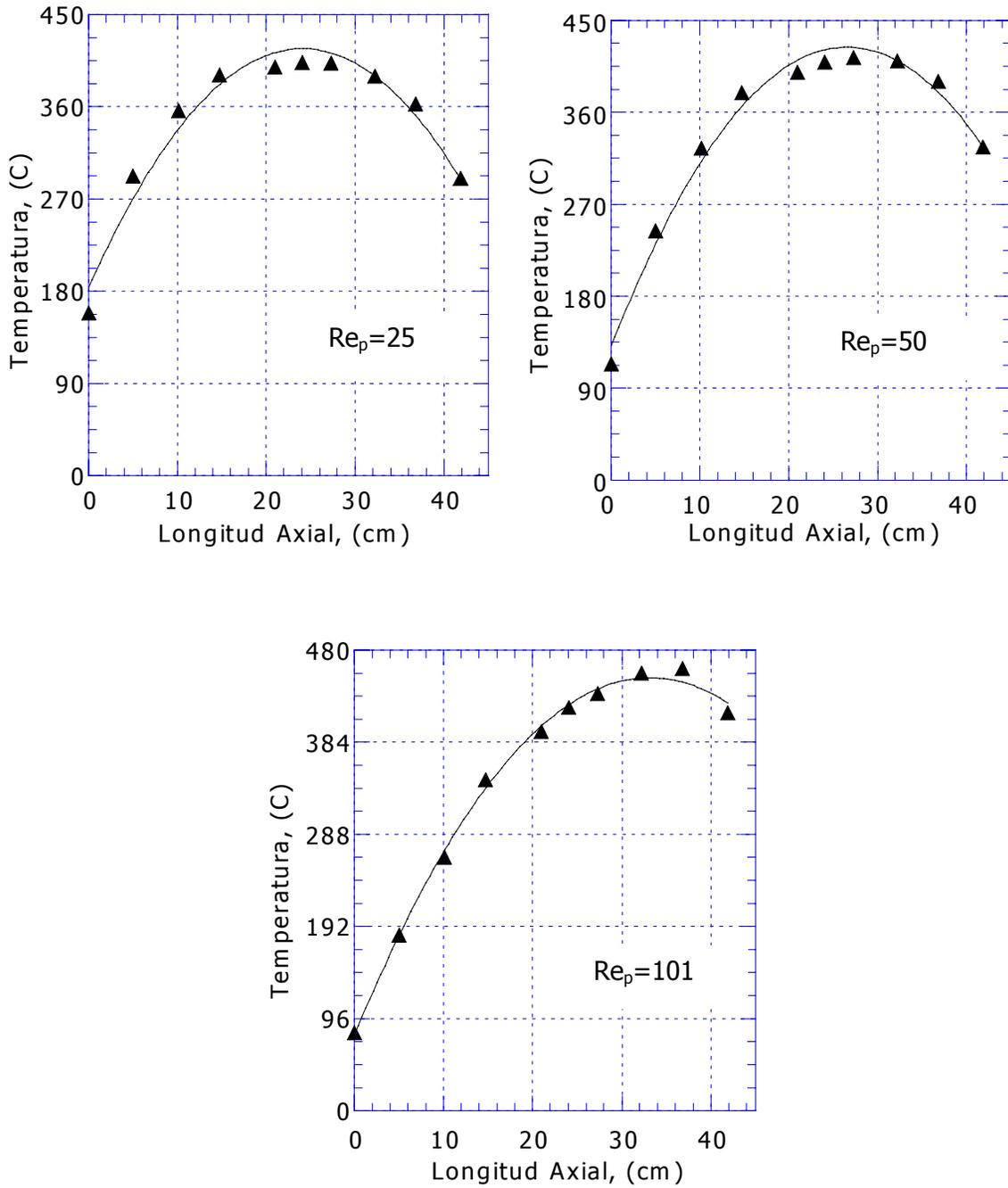


Figura 4.10. Perfiles de Temperaturas en la Pared, Experimental (T_w) y por medio del Polinomio, (T_{pol}): (\blacktriangle) T_w y (-) T_{pol} .

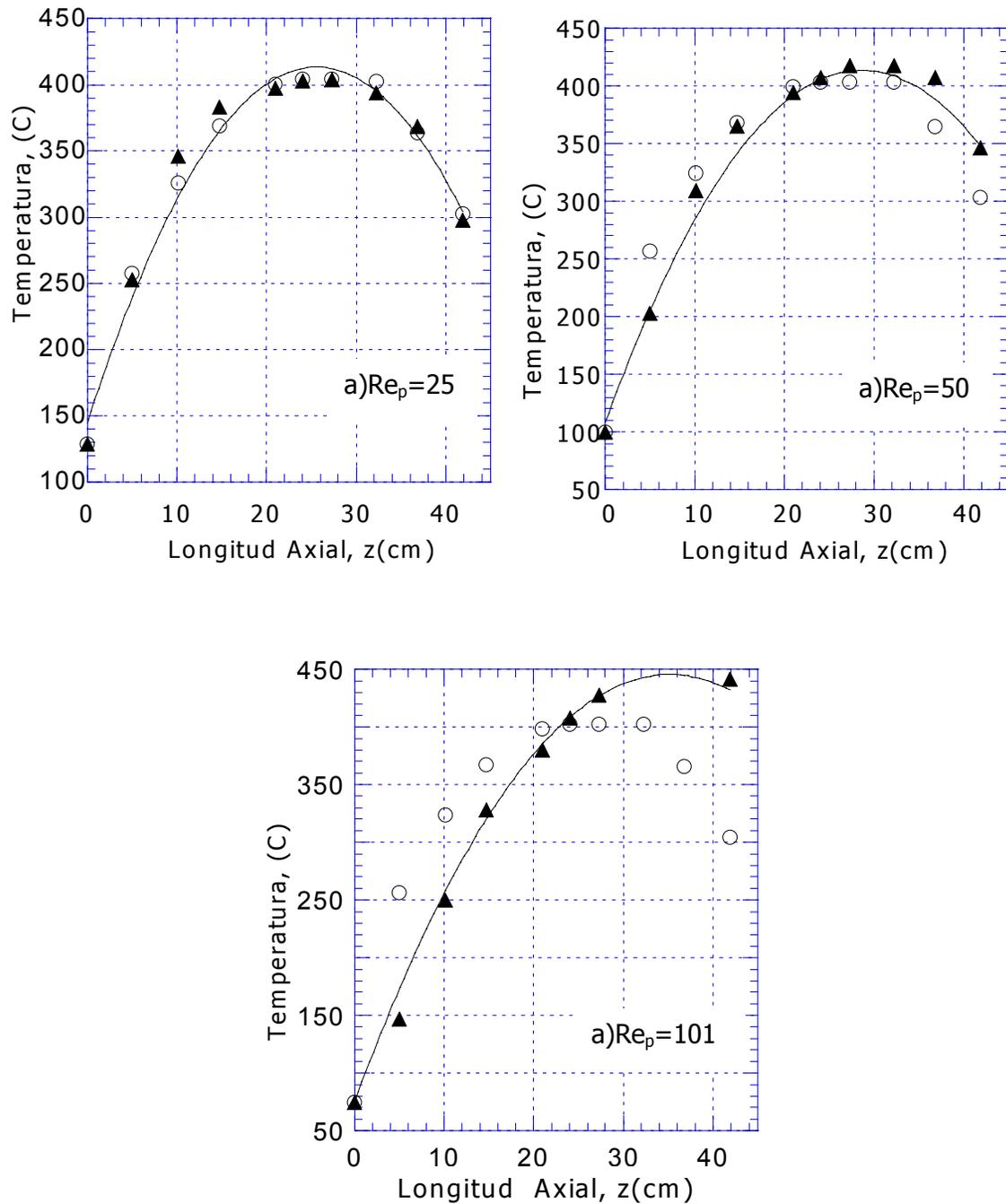


Figura 4.11. Comparación entre Perfiles de Temperatura con Datos Experimentales, el Modelo y la Correlación: (▲)Experimentos, (○)Correlación, (-) Modelo.

En la Figura 4.11 se observa una comparación entre los perfiles de temperatura axiales encontrados con el modelo uni-dimensional, la correlación y los resultados experimentales. En esta figura se muestra claramente que al incrementarse el Re_p , método de regresión de Marquardt predice con mayor precisión el comportamiento del sistema. Por el contrario usando la correlación, cuando aumenta el Re_p la predicción fue menos precisa. De esta forma las diferencias entre los perfiles de temperatura axiales obtenidos se encontraron entre el 5% al 50% al usar el valor de U_i obtenido por la correlación y el modelo.

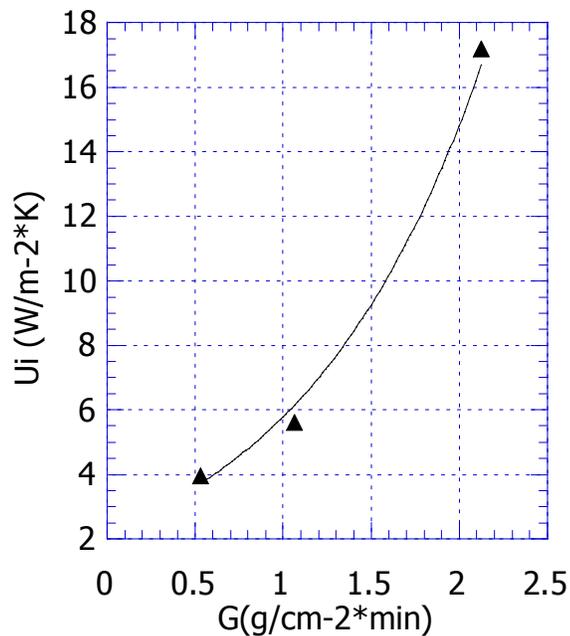


Figura 4.12. Efecto de la Velocidad Másica en el Coeficiente Global de Transferencia de Calor, U_i : (▲)Modelo, (-)Correlación.

Los resultados experimentales mostrados en la Tabla 4.2, se pueden representar por una correlación sencilla, en la cual el coeficiente global de transferencia de calor puede evaluarse como una función del Reynolds de partícula, tal como se muestra en la siguiente expresión:

$$U_i = \frac{1}{0.45} \exp\left(\frac{0.45}{2.0} Re_p\right) \quad (4.2.29)$$

Una vez estimados los valores del coeficiente global de transferencia de calor a diferentes velocidades de flujo vía el modelo pseudo-homogéneo, mismo que considera que no hay diferencias de temperatura entre la fase sólida-gas, es posible estimar el coeficiente de transferencia de calor en la pared en términos del Bi_w .

4.2.3.3 Los Parámetros de Transferencia de Calor Radial

- Perfiles de Temperatura Radiales en el Lecho;

En este punto será estimado el coeficiente de transferencia de calor en la pared (h_w), en términos de un número adimensional, (Bi_w). Parámetro que junto con el Pe_r , nos da una idea de los fenómenos de transferencia de calor que rigen el sistema, así como su relación con los gradientes de temperatura encontrados en el lecho.

A continuación en esta sección se discuten los efectos de la velocidad de flujo en los mecanismos radiales y axiales de transferencia de calor a través de los gradientes de temperatura observados en el lecho.

En los gráficos que se muestran en la Figura 4.13, se presentan los perfiles radiales de temperatura observados a diferentes profundidades del lecho y su comportamiento con respecto al Re_p . En todos estos gráficos (4.13a, 4.13b, 4.13c y 4.13d) se observa que a una distancia de 2 mm de la pared del reactor las caídas de temperatura son alrededor de 10–30 °C, dependiendo de la posición axial y flujo que se manejen. Lo cual corresponde del 20 a 40% de la diferencia total de temperatura en la dirección radial. Lo cual señala la presencia de resistencias de transferencia de calor en la pared. Esta caída de temperatura se podría deber principalmente a que en este punto se encuentra una zona con alta fracción hueca lo cual provoca que la velocidad en este punto sea considerable, provocando apreciables resistencias a la transferencia de calor en la parte anular del lecho.

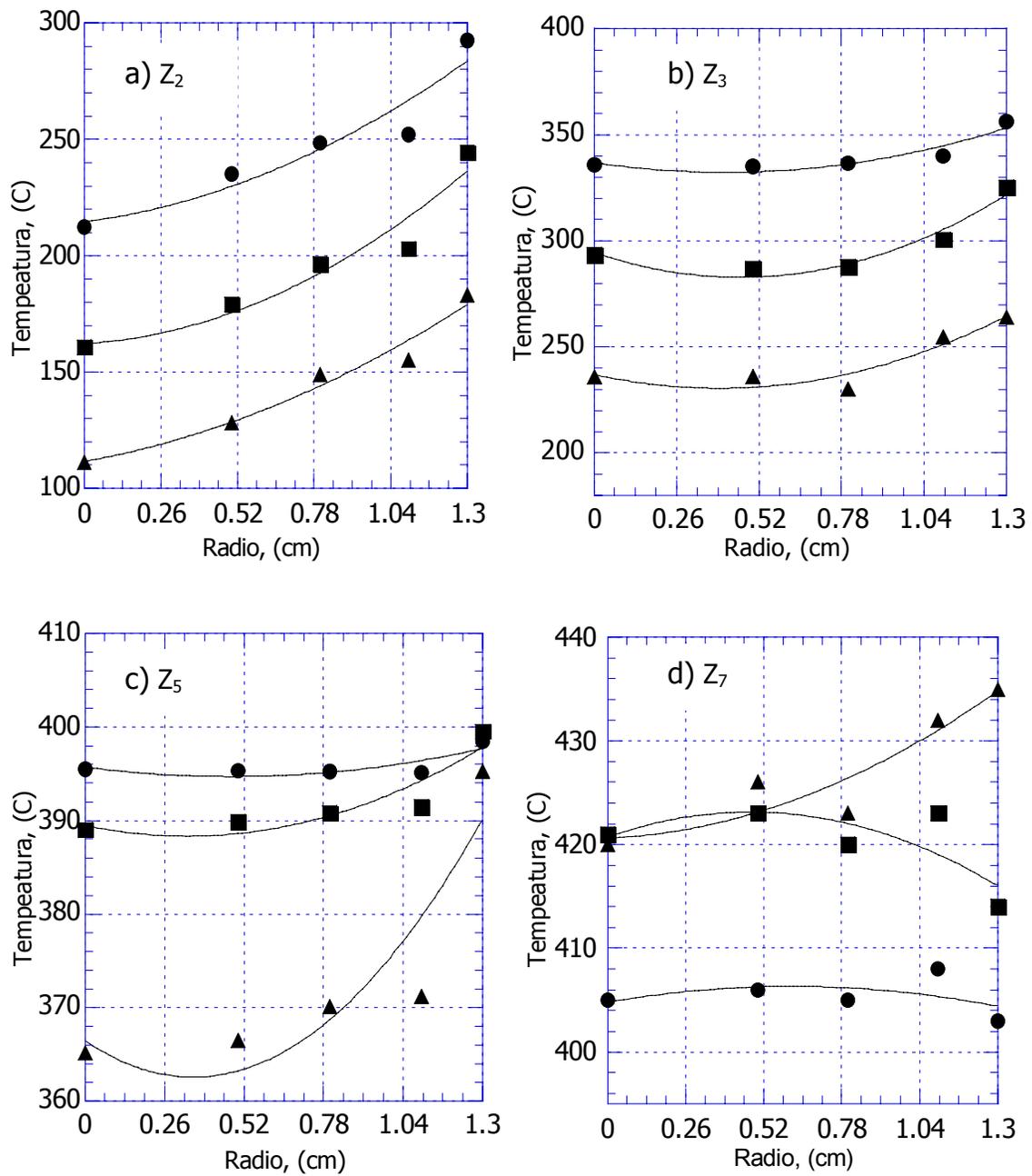


Figura 4.13. Perfiles de Temperatura Radiales a Diferentes Posiciones Axiales y Re_p : (-●-) $Re_p=25$, (-■-) $Re_p=50$, (-▲-) $Re_p=101$.

En la Figura 4.13 se observa que dependiendo de la posición axial, los perfiles radiales de temperatura varían significativamente, situación causada en mayor grado por la variación

de temperatura que se tiene a lo largo de la pared del lecho, fenómeno comentado y discutido en puntos anteriores. Es apreciable que en las posiciones cerca de la entrada del lecho (Z_2, Z_3), los gradientes de temperatura observados en el lecho son independientes del Re_p que se maneje, lo cual es un reflejo de las diferentes velocidades de alimentación (ver Figura 4.13a-b). A diferencia del centro del reactor (Z_5), donde a bajas velocidades ($Re_p; 25, 50$), el perfil de temperaturas radial permanece casi constante, no así cuando se maneja un alto flujo ($Re_p; 101$), donde son considerables los gradientes de temperatura (ver Figura 4.13c).

En la Figura 4.13d se observa como los perfiles de temperatura en la posición Z_7 del lecho cuando se manejan bajas velocidades ($Re_p; 25$ y 50), los perfiles de temperatura radiales cambian su comportamiento, a diferencia de cuando se maneja un alto flujo ($Re_p; 101$), en donde se sigue un comportamiento similar a las posiciones anteriores en el lecho. Este comportamiento es debido principalmente a las extracciones de flujo de calor provocadas por la diferentes velocidades de flujo manejadas.

- La Conductividad Térmica Efectiva y Coeficiente Global de Transferencia de Calor en la Pared:

Si bien los coeficiente globales de transferencia de calor no pueden dar información sobre los perfiles de temperatura radiales existentes, su estimación a partir de perfiles axiales de temperatura (ver Figura 4.10), junto con los perfiles radiales (ver Figura 4.13), permiten la estimación tanto del número Biot en la pared (Bi_w) como el número de Peclet radial (Pe_r).

El valor estimado de U_i donde se consideraron condiciones de no-reacción y que los perfiles radiales de temperatura son parabólicos, aunado a los valores interpolados de la k_{er} , presentados en términos de el Pe_r en la Tabla 4.3, se obtendrá el coeficiente de transferencia de calor en la pared (h_w), en términos del Bi_w (ver Tabla 4.3).

Los resultados mostraron la complejidad que se tiene cuando se presentan variaciones en la temperatura de pared a lo largo del lecho, observándose la existencia de mecanismos de transferencia de calor que actúan radialmente incidiendo en formas diferentes dependiendo de la posición axial. Aunque el Pe_r y el Bi_w varían tanto en forma radial como axial, en el diseño de reactores, estos parámetros se manejan como un valor promedio. A continuación se muestran valores del Bi_w y Pe_r En la Tabla 4.3.

Tabla 4.3.
Parámetros de Transferencia de Calor Encontrados

Average Value		
Re_p	Bi_w	Pe_r
25	0.8070	2.4187
50	1.1062	9.8404
101	4.4359	14.2460

Basándonos en los resultados de la Tabla 4.3 y Figura 4.14, se observa claramente que tanto el Pe_r como el Bi_w aumentan conforme se incrementa el Re_p , es decir, para el caso del Pe_r la contribución dinámica adquiere una mayor importancia al incrementarse el Re_p , a diferencia del Bi_w que sigue la misma tendencia que U_i .

Estos resultados demuestran que para este tipo de sistema tan complejo, cuando existe un aumento en el Bi_w y el Re_p , h_w se incrementa más rápidamente que k_{er} , es decir, la resistencia en la película del fluido inmediata a la pared ($1/h_w$) disminuye más rápidamente que la resistencia en el lecho ($1/k_{er}$). Se puede concluir que al incrementarse el Re_p , la resistencia en el lecho dominará, provocando que los perfiles de temperatura sean más pronunciados en esta misma región en contraste con la vecindad de la pared, como se observa en las figuras 4.8 y 4.13.

Finalizando con los resultados mostrados en la Tabla 4.3 se obtuvo una correlación para estimar el Bi_w únicamente a las condiciones del sistema en estudio. Esta expresión se muestra a continuación:

$$Bi_w = 0.40726 * \exp(0.023131 * Re_p) \quad (4.2.30)$$

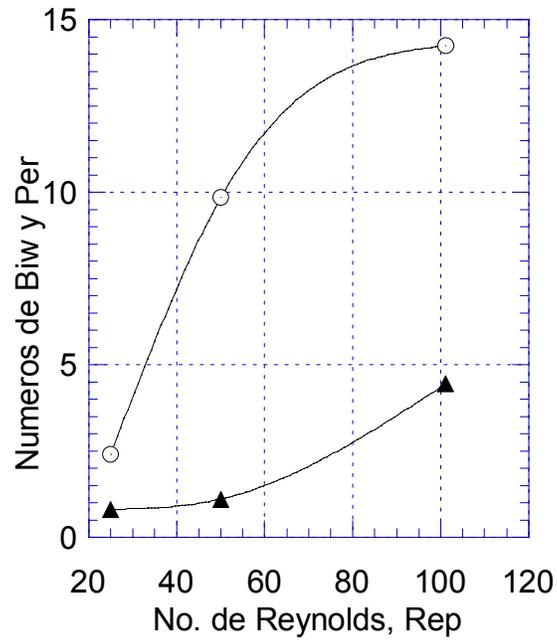


Figura 4.14. Comportamiento de los Parámetros (Bi_w , Pe_r) de Calor
(-▲-) Bi_w , (-○-) Pe_r .

Sección 4.3. Distorsión en los Perfiles de Temperatura

Resumen.

En esta sección se hablará brevemente sobre las incertidumbres y posibles distorsiones que se tienen en los perfiles radiales de temperatura debidos a la presencia de dispositivos indicadores de temperatura en los reactores catalíticos de lecho fijo, en donde los resultados mostraron que estos dispositivos pueden proporcionar una significativa área adicional a la transferencia de calor en el reactor con los alrededores, lo cual se ve reflejado en una considerable asimetría en los perfiles de temperatura dentro del reactor.

4.3.1 Antecedentes

Es bien conocido que las medidas de temperatura, en reactores catalíticos de lecho fijo pueden ser diferentes de los valores verdaderos en esos puntos. La dificultad de medir la temperatura en sistemas de dos o más fases, está relacionada por la presencia del error provocado al introducir el sensor de temperatura^[55]. Estos problemas experimentales se ven reflejados a través de varios mecanismos, los cuales inciden en las perturbaciones debidas al flujo, donde se esperaría un incremento en el coeficiente de transferencia de calor, debido a la turbulencia y a la conducción de calor en los elementos de medida de temperatura.

En sistemas sin reacción, la asimetría de los perfiles de temperatura se visualizan notablemente, pero en el caso donde tienen lugar reacciones altamente exotérmicas, se debe estar consciente que el tipo de reacción contribuirá a los gradientes de temperatura, los cuales ocurren tanto en la dirección axial como radial^[20].

Los investigadores en la actualidad se han sido introduciendo en este tipo de problemas, sin embargo pocos son los trabajos que consideran este efecto ^[37,38] en la literatura. López-Isunza^[28,38], estudia el efecto de los dispositivos de temperatura introducidos al

reactor para el registro de los perfiles radiales de temperatura observados. En su trabajo estudia el efecto de estos dispositivos en un lecho empacado, donde toma lugar una reacción altamente exotérmica. Estos dispositivos contribuyeron al incremento de los gradientes de temperatura, tanto en la dirección axial como radial. En este trabajo también se reportaron significantes pérdidas de calor a través de los dispositivos de monitoreo de temperatura. Estos efectos se reflejaron en la distorsión de los perfiles de temperatura radiales dentro del lecho.

Por otra parte a bajas temperaturas y con partículas relativamente pequeñas ($d_p=3\text{mm}$), Sgarlatta Lattmann^[37] sugirió que la inserción de termopares distorsiona los perfiles de temperatura radiales, efecto causado principalmente por la conducción de calor a través los elementos de medida y el retromezclado axial provocado por su presencia.

Como consecuencia de lo anterior en este estudio, se realiza un análisis cualitativo sobre las distorsiones encontradas en los perfiles de temperatura radiales, efecto provocado por los termopares colocados dentro del lecho.

4.3.2 Sistema Experimental y Resultados

El diagrama esquemático que muestra la planta de microrreacción donde se llevó a cabo la parte experimental es la misma que se revisó en el capítulo anterior (ver Figura 3.5). En este sistema los dispositivos de temperatura fueron colocados a lo largo del lecho, con la idea de registrar los perfiles de temperatura axial y radial. En la Figura 4.15 se muestra el esquema de los dispositivos utilizados. Los termo-pozos se construyeron de acero inoxidable con las siguientes dimensiones: 0.3175 cm de diámetro interior y 10 cm de longitud. En esta figura la parte del termo-pozo que se encuentra desde la pared del lecho hasta afuera del horno, podría ser considerada como una área adicional para la transferencia de calor en el lecho. Los termopares utilizados (causantes del retromezclado dentro del lecho) tenían un libre desplazamiento dentro del lecho, lo cual hizo posible mapear el perfil de temperaturas radial.

En la Figura 4.16 se presentan los perfiles de temperatura radiales registrados, los cuales muestran la existencia de severos gradientes de temperatura, como se comentó en la sección anterior.

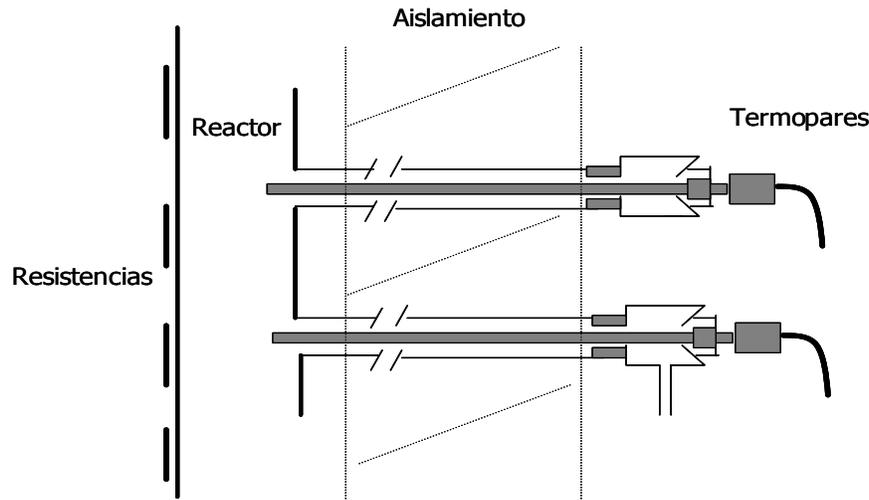


Figura 4.15. Dispositivos de Registro de Temperatura en el Lecho.

En la Figura 4.16 los máximos gradientes de temperatura fueron observados aproximadamente a 2 mm de la pared del lecho. Por otro lado, la menor temperatura observada en dirección radial en el lecho, se encontró aproximadamente a 2 mm de la línea central y la diferencia entre las temperaturas en las paredes del lecho (con termopozo y sin este) fue aproximadamente de 30 °C.

Por lo tanto, como fue comentado por López-Isunza^[28,38], se concluye que la asimetría mostrada en los perfiles radiales de temperatura, fue causada principalmente por la pérdidas de calor vía conducción a lo largo de los dispositivos de registro de temperatura. Estos dispositivos contribuyen al retromezclado axial y radial dentro del lecho, siendo esto una causa adicional a los gradientes de temperaturas tanto axiales como radiales.

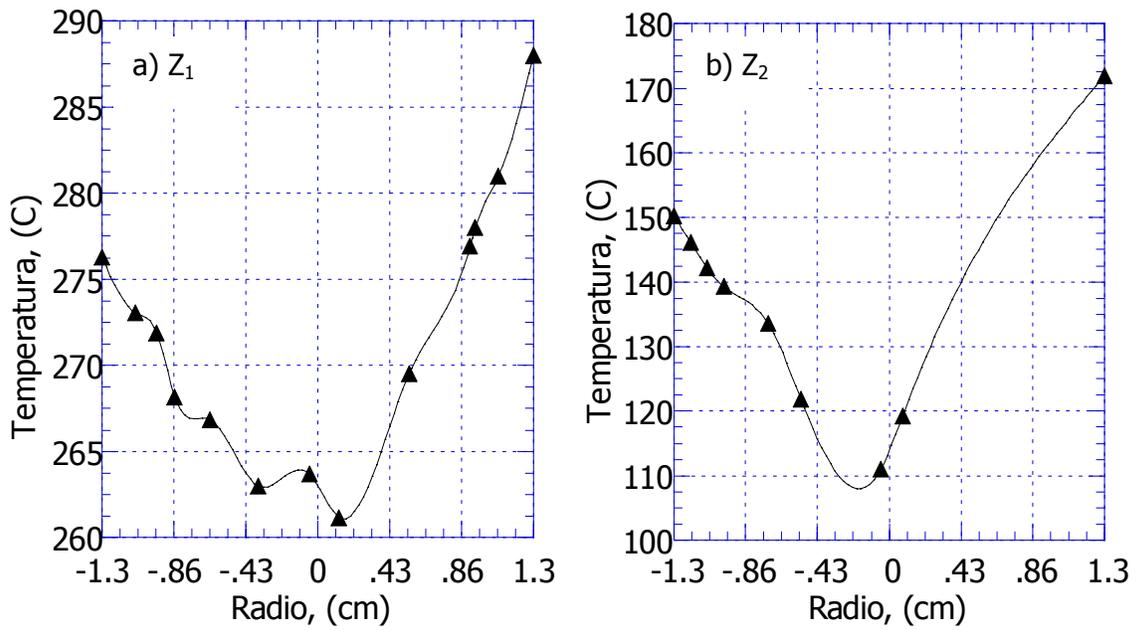


Figura 4.16. Perfiles de Temperatura Radiales a un $Re_p=25$.

En forma de conclusión y con base en lo mencionado anteriormente, se puede asumir que los dispositivos de medición de temperatura se suman a las incertidumbres que se tienen al estudiar los procesos de transporte en lechos empacados.

Capítulo 5

Conclusiones

Conclusiones

El estudio del comportamiento de los distintos procesos de transporte de calor en un lecho empacado a las condiciones mencionadas se culmina satisfactoriamente. Estudio que implicó la estimación de los parámetros efectivos de transporte de calor, (k_{ez} , k_{er} y h_w), en términos de números adimensionales, (Pe_z , Pe_r , B_{iw}). Parámetros que serán utilizados para su fin; el modelamiento en estado dinámico y estable de un reactor de lecho fijo en donde una reacción (Oxidación parcial del n-butano) altamente exotérmica tendrá lugar.

Los valores de los parámetros estimados por mínimos cuadrados con el método de Marquadt, describieron satisfactoriamente los comportamientos del sistema, ya que los perfiles de temperatura encontrados con los modelos, siguieron un comportamiento similar (desviaciones del 30 al 0.5 % dependiendo del flujo que se maneje) al de los resultados experimentales obtenidos en el sistema de estudio.

Las diferencias principales de los valores obtenidos del Pe_z , Pe_r , B_{iw} y U_i , por medio de correlaciones obtenidas por diferentes métodos experimentales y investigadores, se deben a los errores experimentales, como resultado principalmente de la no uniformidad del empaque en el lecho, claro esto para el caso donde un mismo sistema empaque-carga es manejado. Para el caso donde el sistema difiere notablemente, ($d_t/d_p=3.25$) como es el caso, la diferencia entre los valores de los parámetros encontrados por correlaciones y la estimación empleada vía resultados experimentales es más evidente, (teniendo diferencias arriba del 100%). De esta manera aún cuando las correlaciones realizadas por una gran gama de investigadores, son de gran utilidad debido al ahorro de tiempo que se tiene con su empleo, cuando se tomen estas correlaciones para estudios sofisticados se debe tener en mente las incertidumbres que se tendrán debido a esto. Por lo que es recomendable realizar estudios independientes de transferencia de calor en el lecho de estudio, ya que de lo contrario se tendrán problemas importantes al predecir el comportamiento real del sistema.

En particular en este sistema de estudio las variaciones de temperatura a lo largo del lecho contribuyeron a que los gradientes de temperatura tanto axiales como radiales fueran mas apreciables. Situación que incidió con mayor importancia en la transferencia de calor axial en este estudio. Ya que este perfil de temperatura que se presento en la pared, simulo un punto caliente en el lecho, (el cual únicamente ocurre cuando una reacción altamente exotérmica toma lugar), por lo que el estudio de transferencia de calor se llevo en condiciones considerables.

La relación entre los valores derivados de Bi_w y Pe_r son ampliamente dependientes de las medidas de temperatura cercanas a la pared del lecho, mostrándose en este caso considerables gradientes de temperatura, lo cual reflejo la importancia de las resistencias de transferencia de calor en la dirección radial. En este estudio se manejaron valores promedio de los parámetros efectivos, parámetros que son función del lecho que se este estudiando, situación que provoca cierta incertidumbre. Es decir, la heterogéneidad del empaque (como consecuencia de las bajas relaciones d_t/d_p), en nuestro sistema, posiblemente provocaría que los parámetros efectivos de transporte varíen tanto longitudinal como radialmente, efecto que es debido a los perfiles de fracción hueca que se presentan. De ser así, estos efectos en estudios posteriores deben ser considerados.

Distorsiones en los perfiles de temperatura radiales fueron encontradas, efecto que se debe principalmente a la introducción de dispositivos, (Termopozo-Termopar), en el lecho. Situación que provoca incertidumbres en la mayoría de los estudios de transferencia de calor. Ya que siempre quedara la duda si la temperatura tomada es realmente la que debería de ser, si este instrumento no estuviera. Aún y con esta incertidumbre los fenómenos de transferencia de calor en el sistema son descritos satisfactoriamente.

Si bien el comportamiento del sistema en este estudio fue entendido, como trabajo a futuro se deben de proponer modelos más sofisticados para predecir con una mayor exactitud los procesos fenomenológicos de calor que se manifiestan en el lecho. Por lo que se deben considerar además de las ecuaciones de calor, las ecuaciones de momento, con el propósito de tener los perfiles de velocidad reales que caractericen el lecho en

estudio. De igual forma pueden ser usadas relaciones empíricas que representen la variación de la fracción hueca en el hecho. Todo esto con el objetivo de tener un estudio más cuantitativo de los procesos de transferencia de calor que rigen este tipo de sistemas.

Capítulo 6

Apéndices

Apéndice A

6.1 Estimación de Parámetros en Sistemas no-Lineales

El programa utilizado en este estudio para obtener los valores de los parámetros desconocidos, (θ) , en modelos no lineales, es mediante mínimos cuadrados. La estimación de estos parámetros se logra al resolver un sistema de n ecuaciones no lineales, con n incógnitas ($n < 50$). Para conocer estas incógnitas, (θ) , es usada una técnica iterativa. En este estudio se aplicó el método de Marquardt (1963), el cual combina el método de Gauss (series de Taylor) y Descenso más Pronunciado^[57,58], combinación que da como resultados la estimación del vector θ , cuya dimensión es $(p \times 1)$, donde p ; es el número total de parámetros contenidos en un modelo no-lineal.

Una breve explicación sobre los fundamentos en los cuales se basa este método de regresión se muestra a continuación:

Suponga que tentativamente se considera un modelo matemático de la forma:

$$\eta = f(\theta, \xi) \quad (6.1.1)$$

Donde θ es un vector que contiene los parámetros desconocidos y ξ es el vector de la variable independiente. Sí (Y) es el vector que representa la variable dependiente y contiene los valores de las n observaciones hechas. Cuando u observaciones, Y_u , son muestreadas, el valor de la variable independiente es ξ_u . Sin embargo, a causa del error experimental, las observaciones Y_u , difieren de la respuesta real, de tal forma que:

$$Y_u = \eta_u + \varepsilon_u, \quad u = 1, \dots, n \quad (6.1.2)$$

Para obtener el valor del θ , se usan los datos experimentales. De esta forma una estimación de θ se obtiene minimizando a $S(\theta)$:

$$S(\theta) = \sum_{u=1}^n (Y_u - \eta_u)^2 = \sum_{u=1}^n (Y_u - f(\theta, \xi_u))^2 \quad (6.1.3)$$

Procedimiento que comúnmente es llamado; estimación por mínimos cuadrados. Ahora bien, el programa que se utiliza en este estudio, da el estimado de θ por mínimos cuadrados, ya sea cuando el modelo (Ecuación (6.1.1)) es lineal o no, con respecto a los parámetros desconocidos, θ .

Para asegurar una óptima estimación por mínimos cuadrados, algunas suposiciones son hechas con respecto al vector error, ε :

- A. El vector error ε , son variables aleatorias independientes, con una varianza igual a la probabilidad de distribución.
- B. El ε esperado es cero (no hay vías sistemática para obtenerlo experimentalmente).
- C. La distribución de probabilidad del ε , es la distribución normal con varianza, σ^2 .

Cuando el modelo (Ecuación 6.1.1) es lineal con respecto a los parámetros θ , esta ecuación se puede expresar como:

$$\eta = X\theta \quad (6.1.4)$$

Donde $\boldsymbol{\eta}$ y $\boldsymbol{\theta}$ son vectores con dimensiones $(n \times 1)$ y $(p \times 1)$ respectivamente, y \mathbf{Z} es una matriz de dimensiones $(n \times p)$, y no es función de $\boldsymbol{\theta}$, la cual tiene la forma :

$$\mathbf{Z}_{n \times p} = \left\{ \begin{array}{l} \partial \eta_u \\ \partial \theta_i \end{array} \right\} \begin{array}{l} u = 1, \dots, n \\ i = 1, \dots, p \end{array} \quad (6.1.5)$$

Al tener esta característica los valores del vector $\boldsymbol{\theta}$, son factibles obtenerlos por mínimos cuadrados, asumiendo únicamente las suposiciones (A) y (B), y que la Ecuación (6.1.4) es el modelo.

El teorema de Gauss, deduce que todos los estimados del $\boldsymbol{\theta}$, son una combinación lineal de las observaciones \mathbf{Y}_u , de tal forma, que los valores estimados del $\boldsymbol{\theta}$ tienen pequeñas varianzas. Con esto, la única solución que se obtiene para él $\boldsymbol{\theta}$ es:

$$\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1} \mathbf{Z}'\mathbf{Y} \quad (6.1.6)$$

Donde \mathbf{Z}' es la transpuesta de la matriz \mathbf{Z} . Considerando la suposición (C), se puede aclarar que los parámetros estimados, $(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_p)$, se encuentran normalmente distribuidos.

Cuando el modelo no es lineal con respecto al $\boldsymbol{\theta}$, el problema se vuelve más complicado. En este caso el nuevo vector que contiene los parámetros estimados, $(\hat{\boldsymbol{\theta}})$, por mínimos cuadrados, presenta múltiples soluciones o mínimos relativos con respecto a la suma de cuadrados $S(\hat{\boldsymbol{\theta}})$.

Para la estimación del $\hat{\theta}$ en sistemas no lineales, el término $F(\xi_u, \hat{\theta}_u)$ de la Ecuación (6.1.1) es linealizado y por lo tanto aproximado por medio de series de Taylor (Método de Gauss), resultando:

$$f(\xi_u, \hat{\theta}) = f(\xi_u, \theta_0) + \sum_{i=1}^p \left[\frac{\partial f(\xi_u, \hat{\theta})}{\partial \hat{\theta}_i} \right]_{\hat{\theta}=\theta_0} (\hat{\theta}_i - \theta_{i0}) \quad (6.1.7)$$

Con;

$$\theta_0 = (\theta_{10}, \theta_{20}, \dots, \theta_{p0}) \quad (6.1.8)$$

Donde, θ_{i0} es el valor inicial (i) de los parámetros a estimar, $(\hat{\theta})$, estos valores deben ser "supuestos" inteligentemente o estimados con base en la información disponible sobre el sistema que se tenga, y estar acotados de acuerdo con la circunstancias del sistema físico, ya que estos valores hacen que el método de estimación no lleva a posibles mínimos no factibles, o que no se tenga convergencia

Teniendo en mente lo antes mencionado, se definen nuevas variables, las cuales son:

$$f_u^0 = f(\xi_u, \theta_0) \quad (6.1.9)$$

$$\beta_i^0 = \theta_i - \theta_{i0} \quad (6.1.10)$$

$$Z_{iu}^0 = \left[\frac{\partial f(\xi_u - \hat{\theta})}{\partial \theta_i} \right]_{\hat{\theta}=\theta_0} \quad (6.1.11)$$

Con esto la de aproximación de la Ecuación (6.1.2) es:

$$\mathbf{Y}_u - f_u^0 = \sum_{i=1}^p \beta_i^0 Z_{iu}^0 + \varepsilon_u; \quad (6.1.12)$$

Con estas ecuaciones (6.1.9-6.1.12) se estiman los valores de β_i^0 , para $i=1,2,\dots,p$. Donde aplicando la teoría de mínimos cuadrados para sistemas aproximadamente lineales se tiene que:

$$\mathbf{Z}_0 = \begin{pmatrix} Z_{11}^0 & \dots & Z_{p1}^0 \\ \cdot & \dots & \cdot \\ Z_{1n}^0 & \dots & Z_{pn}^0 \end{pmatrix} = \{Z_{iu}^0\}, n \times p \quad (6.1.13)$$

$$\mathbf{b}_0 = \begin{pmatrix} b_1^0 \\ b_2^0 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_p^0 \end{pmatrix}, \mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} Y_1 - f_1^0 \\ Y_2 - f_2^0 \\ \cdot \\ \cdot \\ Y_n - f_n^0 \end{pmatrix} = \mathbf{Y} - \mathbf{f}^0 \quad (6.1.14)$$

De tal forma que la estimación del vector $\boldsymbol{\beta}_0 = (B_1^0, B_2^0, \dots, B_p^0)'$ esta dado por:

$$\boldsymbol{\beta}_0 = \mathbf{b}_0 = (\mathbf{Z}_0' \mathbf{Z}_0)^{-1} \mathbf{Z}_0' (\mathbf{Y} - \mathbf{f}^0) \quad (6.1.15)$$

Donde el vector \mathbf{b}_0 minimiza la suma de cuadrados con respecto a $\beta_i^0, i=1,2,\dots,p$.

Obteniendo una nueva función a minimizar:

$$SS(\hat{\theta}) = \sum_{u=1}^n \left(Y_u - f(\boldsymbol{\theta}_0, \xi_u) - \sum_{i=1}^p \beta_i^0 Z_{iu}^0 \right)^2 \quad (6.1.16)$$

De tal forma que el proceso iterativo para tomar los nuevos valores de los parámetros que se están estimando es el siguiente:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{j+1} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_j + \mathbf{b}_j \quad (6.1.17)$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{j+1} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_j + (\mathbf{Z}_j' \mathbf{Z}_j)^{-1} \mathbf{Z}_j' (\mathbf{Y} - \mathbf{f}^j) \quad (6.1.18)$$

Donde:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_j &= \{Z_{iu}^j\}, \\ \mathbf{f}_j &= (f_1^j, f_2^j, \dots, f_n^j)', \\ \hat{\boldsymbol{\theta}}_j &= (\hat{\theta}_{1j}, \hat{\theta}_{2j}, \dots, \hat{\theta}_{pj})'. \end{aligned} \quad (6.1.19)$$

Este proceso iterativo continúa hasta que la solución converge, y cuyo criterio de convergencia es:

$$\left| \frac{\hat{\theta}_{i(j+1)} - \hat{\theta}_{ij}}{\hat{\theta}_{ij}} \right| \leq \delta, \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (6.1.20)$$

Donde δ es una cantidad especificada por el usuario. En cada paso del proceso iterativo $S(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ puede ser evaluado para observar si se logra una reducción en su valor.

En este proceso debido a Gauss (1821), frecuentemente la aproximación dada por la Ecuación (6.1.7) no es lo suficientemente buena, ya que se hace una pobre aproximación para $S(\hat{\boldsymbol{\theta}})$. Ya que en algunas ocasiones $S(\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(1)}) \supset S(\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(0)})$, efecto que por supuesto es opuesto a lo que se persigue. De tal manera que se tiene la necesidad de controlar la

región sobre la cual la aproximación lineal de $f(\boldsymbol{\theta}, \xi)$ se manifiesta. Esto es posible controlando el tamaño de paso del vector \mathbf{b} . El algoritmo de Marquardt (1963) es muy bueno a este respecto, y con unas pequeñas modificaciones, es usado en este estudio. Un breve resumen se cita a continuación:

Si una corrección en el vector \mathbf{b} es hecha, a la Ecuación (6.1.15), esta se representaría como:

$$\mathbf{b}_j = (\mathbf{Z}_j' \mathbf{Z}_j + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{Z}_j' (\mathbf{Y} - \mathbf{f}^0) \quad (6.1.21)$$

Donde λ es un número non-negativo. Donde los siguientes puntos deben cumplirse:

- (1) La solución del vector \mathbf{b}_j a partir de la Ecuación (6.1.21), minimiza a $SS(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ sobre la frontera de una esfera centrada en $\hat{\boldsymbol{\theta}}_0$, de tal manera que el radio esta dado por la siguiente relación:

$$\sqrt{\mathbf{b}_j' \mathbf{b}_j} = \|\mathbf{b}_j\| \quad (6.1.22)$$

- (2) $\|\mathbf{b}_j\|$ esta en un continuo descenso como incrementa el valor de λ , de tal modo que $\|\mathbf{b}_j\|$ tiende a cero cuando λ tiende al infinito.
- (3) Si γ es el ángulo entre el vector corregido, (\mathbf{b}_j) y el vector del descenso más pronunciado (\mathbf{b}_g) , entonces, cuando γ tiende a cero, λ tiende al infinito, y como consecuencia \mathbf{b}_j rota hacia \mathbf{b}_g .

Así, como es indicado por (3), la corrección hecha a través de \mathbf{b}_j es una interpolación entre el vector producido por el método de Gauss y el método de Descenso mas

Pronunciado. Donde se conoce perfectamente que el segundo método es invariante a escalar hacia la solución, y considerando que es necesario tener un escalamiento del vector $\hat{\theta}$ en el espacio. Marquardt elige escalar en unidades de los segundos momentos a través de $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \hat{\theta}}$, la cual disfraza a la matriz \mathbf{Z}_j . Marquardt para lograr esto supone que \mathbf{D} es una matriz diagonal cuyos elementos diagonales i -th son los mismos que los de $\mathbf{Z}_j' \mathbf{Z}_j$. De tal manera que después del escalamiento hecho, la ecuación resultante, es un nuevo vector corregido:

$$\mathbf{b}_j = \mathbf{D}^{-1/2} \left(\mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{Z}_j' \mathbf{Z}_j \mathbf{D}^{-1/2} + \lambda \mathbf{I} \right)^{-1} \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{Z}_j' (\mathbf{Y} - \mathbf{f}^0) \quad (6.1.23)$$

Donde el principio del algoritmo de Marquardt, se baso en las siguientes observaciones:

El método de Descenso más Pronunciado, frecuentemente trabaja bien en las iteraciones iniciales, pero la aproximación al mínimo es progresivamente muy lento. Por el otro lado, el Método de Gauss trabaja bien cuando el mínimo de $S(\hat{\theta})$ se encuentra cerca, pero frecuentemente se tienen problemas en las iteraciones iniciales. Así que considerando las ecuaciones (6.1.15), (6.1.21) y la suposición (3), se observo que el fenómeno mencionado en las líneas anteriores es representado cuando $\lambda \rightarrow \infty$ y $\lambda \rightarrow 0$ respectivamente.

En las primeras iteraciones, cuando el mínimo está lejos, existe la posibilidad que se el vector corregido, (\mathbf{b}_j) , llegue a ser tan grande que la aproximación caiga notablemente. Sin embargo de las suposiciones (1) y (2), se puede corregir esto. Para hacerlo de inicio se debe de dar un valor de λ grande, y este posteriormente debe disminuir conforme las iteraciones siguen su curso. Siempre teniendo en mente que si el progreso es satisfactorio, λ debe disminuir, (con esto la región de la aproximación lineal incrementa, de lo contrario ya se sabe lo que se tiene que hacer.

Así las estrategias principales que toma Marquardt para llevar a cabo las iteraciones, son las siguientes:

Si nos referimos a $S(\lambda)$ en vez de $S(\hat{\theta})$, (valor que fue obtenido usando λ en la Ecuación (6.1.23) para obtener $\hat{\theta}_i$ de $\hat{\theta}_{i-1}$). De tal forma que λ^{i-1} sea el valor de λ en las previa iteración.

Marquadt introduce una nueva constante representada como v y cuyo valor es mayor a 1.

Teniendo claro lo anterior se calcula $S(\lambda^{(i-1)})$ y $S(\lambda^{(i-1)}/v)$, y se deben tomar en cuenta los siguientes criterios.

- i. Si; $S(\lambda^{(i-1)}/v) \subseteq S(\lambda^{(i-1)})$, entonces; $\lambda^{(i)} = \lambda^{(i-1)}/v$
- ii. Si $S(\lambda^{(i-1)}/v) \supset S(\lambda^{(i-1)})$, y $S(\lambda^{(i-1)}) \subseteq S(\hat{\theta}^{(i-1)})$, entonces; $\lambda^{(i)} = \lambda^{(i-1)}$
- iii. Por otra parte, si se incrementa λ como resultado de sucesiva multiplicación con v , se debe considerar otra nueva constante, (w), la cual debe tener valores muy pequeños, de tal forma que si: $S(\lambda^{(i-1)}v^w) \subseteq S(\hat{\theta}^{(i-1)})$, entonces; $\lambda^{(i)} = \lambda^{(i-1)}v^w$

Esté algoritmo debe compartir la habilidad de los métodos de Gradientes y Descenso más Pronunciado, la cual es converger de una región lejana a una región donde existe un mínimo, y de debe comportarse como el método de Gauss, donde una vez que la vecindad del mínimo sea registrada, el problema debe converger rápidamente.

Apéndice B

6.2 El Método de Colocación Ortogonal

Este método desarrollado por Villadsen & Stewart en 1967, es presentado detalladamente por Finlayson^[34]. Aquí solo se da una breve descripción del método. La colocación ortogonal, es un caso especial del método de Residuos Ponderados, donde la solución se expande en una serie de funciones conocidas con coeficientes desconocidos, como se muestra a continuación:

$$Y(u) \approx Y_N(u) = Y_o(u) + \sum_{j=1}^N a_j Y_j(u) \quad (6.2.1)$$

En esta expresión, $Y_j(u)$ son las funciones de posición conocidas, las cuales por facilidad se escogen como un polinomio, y normalmente se eligen de tal forma que satisfagan las condiciones de frontera. Por otra parte, los coeficientes desconocidos $\{a_i\}$ son determinados de tal forma que satisfagan las ecuaciones diferenciales. En este método se requiere que la ecuación diferencial sea idénticamente cero en los puntos de colocación, y cuando estas funciones son sustituidas en la ecuación diferencial, el resultado es llamado el residuo. El residuo puede ser cero en todo el dominio de posición $0 \leq u \leq 1$ para la solución exacta $Y(u)$. Para la solución aproximada $Y_N(u)$, el residuo debe ser cero solo en los puntos de colocación, y esta condición determina los coeficientes $\{a_i\}$ en las funciones.

En la utilización de este método se encuentran dos tipos diferentes de problemas normalmente; uno es aquel en donde en el dominio $0 \leq u \leq 1$, exactamente en $u=0$ el sistema es simétrico (ejemplo de esto es cuando se trabaja con perfiles de temperatura en la dirección radial), y el otro es cuando en este mismo dominio el sistema no es simétrico (Esto es cuando no existe variación angular de la variable dependiente en la condición de frontera exterior).

6.2.1 Colocación Ortogonal para Sistemas con Simetría.

En muchos problemas es posible probar que la solución es una función simétrica, esto es una función únicamente de potencias pares de r y se excluyen las potencias impares. En tales casos, al incluir esa información en la elección de la función aproximante, se construyen polinomios que son funciones de r^2 , por lo que la función es expandida de la siguiente forma:

$$Y(r^2) \approx Y_N(r^2) = Y(1) + (1-r^2) \sum_{j=1}^N a_j P_j(r^2) \quad (6.2.2)$$

En donde N es el número de puntos interiores de colocación, los cuales son las raíces de polinomios ortogonales, $P_N(r^2)$. Normalmente, los polinomios $P_N(r^2)$ son únicamente de tipo Jacobi, los cuales por naturaleza satisfacen la condición de ortogonalidad representada como:

$$\int_0^1 W(r^2) P_k(r^2) P_M(r^2) r^{a-1} dr = 0 \quad (6.2.3)$$

para; $k \leq N-1$

y donde:

$a=1$; para placa, $a=2$; para cilindro y $a=3$; para esfera

En este caso $W(r^2)$ es la función peso, la cual es específica de cada polinomio de Jacobi, la cual esta definida como:

$$W(r^2) = (r^2)^\beta (1-r^2)^\alpha \quad (6.2.4)$$

En esta función peso, α y β son parámetros característicos de los polinomios de Jacobi, en donde $P_N(r^2) = P_N^{\alpha, \beta}(r^2)$. Villadsen y Stewart^[34] demuestran que estos parámetros, para un caso similar al que se trata en este trabajo, toma los siguientes valores:

$$\alpha=0 \text{ y } \beta = \frac{S-1}{2}; \quad (S=0 \text{ para placa; } S=1 \text{ para cilindro, y } S=2 \text{ para esfera)}^{[28]}.$$

Para concluir, Villadsen y Stewart^[34] también muestran que la Ecuación (6.2.2) puede ser simplificada a la forma:

$$Y(r^2) = \sum_{j=1}^N b_j P_{j-1}(r^2) \quad (6.2.5)$$

Mostrando que también se puede representar como:

$$Y(r^2) = \sum_{j=1}^{N+1} d_j X^{2j-2} \quad (6.2.6)$$

Si para la Ecuación (6.2.6) se obtiene la primera y la segunda derivada, y arreglando estas expresiones en forma matricial^[34], se obtienen que la función de Y puede ser representadas como:

$$\frac{dY}{dr} = \sum_{j=1}^{N+1} A_{i,j} Y_j \quad (6.7)$$

$$\frac{d^2Y}{dr^2} = \sum_{j=1}^{N+1} B_{i,j} Y_j \quad (6.8)$$

para:

$i=1, \dots, N$; es el número de puntos interiores de colocación.

Lo anterior nos permitirá aproximar a una ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones algebraicas lineales (o no lineales), cuyas incógnitas serán las soluciones en cada punto de colocación.

6.2.2 Colocación Ortogonal para Sistemas no Simétricos.

De igual forma para este caso la solución se expande en polinomios ortogonales, pero teniendo un primer término que satisfaga las condiciones de frontera, seguido por una serie de términos que tienen coeficientes desconocidos, con cada término satisfaciendo las condiciones de frontera.

$$Y(z) \approx Y_N(z) = z + z(1-z) \sum_{j=1}^N a_j P_j(z) \quad (6.2.9)$$

En donde N también es el número de puntos de colocación interiores y también siendo polinomios de Jacobi, deben satisfacer la condición de ortogonalidad, la cual es:

$$\int_0^1 W(z) P_k(z) P_N(z) dz = 0 \quad (6.2.10)$$

para; $k \leq N-1$

Para este caso, Villadsen y Stewart muestran que la Ecuación (6.2.9) puede ser simplificada a la forma:

$$Y(z) = \sum_{j=1}^{N+2} d_j X^{j-1} \quad (6.2.11)$$

Donde al utilizar esta expresión y obteniendo su primera y segunda derivada, las cuales se pueden representar como:

$$\frac{dY}{dr} = \sum_{j=1}^{N+2} A_{i,j} Y_j \quad (6.2.12)$$

$$\frac{d^2Y}{dr^2} = \sum_{j=1}^{N+2} B_{i,j} Y_j \quad (6.2.13)$$

para:

$i=1, \dots, N$; el cual es el punto de colocación.

Para todos los casos, las matrices A y B son fácilmente calculadas con el programa reportado en el libro de Villadsen y Michelsen.

Apéndice C**6.3 Coeficientes del Polinomio Utilizado para Ajustar los Perfiles Axiales de Temperatura Dentro de la Pared Interna del Lecho Empacado**

Para ajustar los perfiles axiales de temperatura, medidos dentro de la pared interna del lecho empacado, se desarrolló una relación empírica basada en un polinomio de segundo grado, dada por la Ecuación (6.1), cuyos coeficientes se dan en la Tabla 6.1, correspondientes a cada uno de los Re_p manejados en este estudio.

$$T(z') = a(z')^2 + b(z') + c \quad (6.1.1)$$

Tabla 6.1.
Coeficientes de los Polinomios

No. de Reynolds	a	b	c
25	-0.4024	19.381	183.49
50	-0.4157	22.062	131.22
101	-0.3387	22.455	79.044

Referencias

Referencias

- [1] L. C. Young and B. A. Finlayson, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 1973, Vol. 12, No.4, pp. 412-422.
- [2] Froment & Bischoff, *Chemical Reactor Analysis and Design*, J. Wiley, New York 1979.
- [3] K. R. Westerp, *Chemical Reactor Design and Operation*, Amsterdam, 1963.
- [4] J. J. Carberry, *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*, United States of America 1976.
- [5] R. Aris, *Elementary Chemical reactor Analysis*, Stoneham 1989.
- [6] F. López Isunza, "Solución Numérica de Modelos de Reactores Catalíticos Heterogéneos", Reporte, UAMI, México D.F. 1998.
- [7] F. López Isunza., "Múltiples Estados Estacionarios y Desactivación Reversible en Reactores Catalíticos de Oxidación Parcial" , Reporte Interno 1997.
- [8] F. Fujii, L. M. M. Jorge, R. M. M. Jorge and R. Giudici, "Evaluation of Heat Transfer in a Catalytic Fixed Bed reactor at High Temperatures", Reporte Interno de la universidad de Sao Paulo, Brazil ,1999
- [9] A. G. Dixon, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1997, Vol. 36, pp. 3053-3064.
- [10] G. Wilhelmus, "Heat and Mass Transport in Tubular Packed Bed Reactors", Ph. D. Thesis Doctoral, University of Twente 2002.
- [11] A. P. Colburn, *Industrial and Engineering Chemistry*, 1931, Vol. 23, No. 8,

- pp. 910-913.
- [12] D. G. Burnnell, H. B. Irvin and J. M. Smith, *Industrial and Engineering Chemistry*, 1977, Vol. 41, No. 9, pp.1977-1981.
- [13] S. S. Kwong and J.M. Smith, *Industrial and Engineering Chemistry*, 1957, Vol. 49, No.5, pp. 894-903.
- [14] S. Yagi, D. Kunii. and N. Wakao, *A.I.C.H.E. Journal*, 1960, Vol. 6, PP. 543-555.
- [15] H. Littman and R. G. Barile, I. & E.C Fund., 1968, Vol. 7, No. 4, pp. 554-560.
- [16] V. Hlavacek and Vortuba, *Chemical Engineering Science*, 1978, Vol. 27, pp. 1845-1851.
- [17] O. Kalthoff and D. Vortmeyer, *Chemical Engineering Science*, 1979, Vol. 35, pp. 1637-1643.
- [18] A.G. Dixon and D.L. Creswell, *AICHE Journal*, 1982, Vol. 28, pp. 511-513.
- [19] T. Wellauer, D.L. Creswell, and E.J. Newson, *ACS Symp. Series*, 1982, Vol. 146, No.92, pp. 527-542.
- [20] A.G. Dixon and D.L. Creswell, *AICHE Journal*, 1986, Vol. 32, pp. 809-819.
- [21] E. P. Patrick and P. Harriott, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1988, Vol. 27, pp. 226-233.
- [22] A. G. Dixon, *Ind. Eng. Chem. Res*, 1997, Vol. 36, pp. 3053-3064.

- [23] S. A. Logtenberg and A. G. Dixon, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1998, Vol. 37, pp. 739-747.
- [24] L. M. Nijemeisland and A.G. Dixon, *Chemical Engineering Science*, 1999, Vol. 54, pp. 2433-2439.
- [25] A. A. Iordanidis, "Modeling of Reactors Fixed Beds", Ph. D. Thesis, University of Twenty 2002.
- [26] N. Wakao and S. Kaguei, "Heat and Mass Transfer in Packed Beds", Vol. 1, Science Publishers Ltd., New York 1982.
- [27] M. Nijemeisland, "Verification Studies of Computational fluid Dynamics in Fixed Bed Heat Transfer", Thesis of Master, Faculty of the Worcester Polytechnic Institute, 2000.
- [28] F. Lopez Isunza, "Steady State and Dynamic Behavior, of an Industrial Fixed Bed Catalytic Reactor", Imperial College, Ph. D. Thesis, University of London, 1983.
- [29] C.A. Coberly and W.R. Marshall, *Chem. Eng. Prog.*, 1951, Vol. 47, pp. 141-148.
- [30] T.H. Tsang, T.F. Edgar and J.O. Hougen, *Chemical Engineering Journal*, 1976, Vol. 11, pp. 57-65.
- [31] M. L. Michelsen, *Chemical Engineering Journal*, 1979, Vol. 18, pp. 59-65.
- [32] A. P. De Wasch and G. F. Froment, *Chemical Engineering Science*, 1972, Vol. 27, pp. 567-581.
- [33] V. Sastha , S. K. Das, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2002, Vol. 45, pp. 3681-3688.

- [34] B.A. Finlayson, "The Method of Weighted Residuals and Variational Principles", Academic Press N.Y., 1972.
- [35] B.V. Babu and K. K. N. Sastry, Computers and Chemical Engineering, 1999, Vol. 23, pp. 327-339.
- [36] H. Verschoor, and Schuit H., Appl. Sci. Res., 1950, Vol. 2, pp. 97-119.
- [37] Sgarlatta Lattmann F., PH.D. Thesis Doct., Zurich 1969.
- [38] F. Lopez Isunza , T. Monghonsi, and L. S. Kershenbaum, Trans IChemE, 1992, Vol. 70, Part A, pp. 255-264.
- [39] C. H. Li and B. A. Finlayson, Chemical Engineering Science, 1977, Vol. 32, pp. 1055-1066.
- [40] J. M. Smith, "Chemical Engineering Kinetics", 3a. Edición, McGraw Hill, 1970.
- [41] Villadsen, "Solution of Differential Equations Models by Polynomial Approximation", Prentice Hall, 1978.
- [42] B. A. Finlayson, Chemical Engineering Science, 1971, Vol. 26, pp. 1081.
- [43] J. J. Lerou y G. F. Froment, Chemical Engineering Science, 1977, Vol. 32, pp. 853-861.
- [44] Arno de Klerk, AIChE Journal, 2003, Vol. 49, No. 8, pp. 2022-2029.
- [45] M. Winterberg and E. Tsotsas, AIChE Journal, 2002, Vol. 46, No. 5, pp. 1084-1088.

- [46] J. R. F. Guedes de Carvalho and J. M. P. Q. Delgado, *AIChE Journal*, 2003, Vol. 49, No. 8, pp. 1980-1985.
- [47] Ttsuya Suekane, Yasuo Yokouchi and Shuichiro Hirai, *AIChE Journal*, 2003, Vol. 49, No. 1, pp. 10-17.
- [48] M. Nijemeisland and A. G. Dixon, *Chemical Engineering Journal*, 2001, Vol. 82, pp. 231-246.
- [49] P. Magnico, *Chemical Engineering Science*, 2003, Vol. 58, pp. 5005–5024.
- [50] A. Heyounia, M. Roustana and Z. Do-Quangb, *Chemical Engineering Science*, 2002, Vol. 57, pp. 3325–3333.
- [51] N. J. Mariani, O. M. Martinez and G. F. Barreto, *Chemical Engineering Science*, 2001, Vol. 56, pp. 5995-6001.
- [52] T. Schildhauer, E. Newson, P. Binkert and F. V. Roth, "Improvement of the Heat Transfer in Catalytic Fixed Bed Reactors by Means of Structured Packings", *Reporte Interno* 2002.
- [53] L. M. Ferreira and A. E. Rodriguez, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2002, Vol. 45, pp. 951-961.
- [54] Vilemas and E. Uspuras, "Overview of Lei Investigations on Heat Transfer and Flow Structure in Gas-Cooled Spheres Packings and Channels", *Reporte interno Lithuanian Energy Institute* 2000.
- [55] J. C. Thomeó, C. O. Rouiller, and J. T. Freire, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2004, Vol. 43, pp. 4140-4148.
- [56] Y. Peng and J.T. Richardson, *Applied Catalysis A: General*, 2004, Vol. 266,

pp. 235–244.

- [57] N. R. Draper and H. Smith, "Applied Regression Analysis)", Second Edition, John Wiley & Sons, U.S.A. 1981.
- [58] Duane A. Meeter and J. P. Wolfe, "Non-Linear Least Squares", Reporte Interno, U.S.A. 1965.

Nomenclatura

A_p	Área superficial externa de la partícula, cm^2
A_{ij}	Elementos de la matriz de colocación A
B_{ij}	Elementos de la matriz de colocación B
a, b, c	Constantes de los polinomios en la ecuación
$Bi_w = R_T h_w / k_{er}$	Número de Biot
B	Parámetro geométrico
C_{pf}	Calor específico del fluido, $\text{W}^*\text{s/g } ^\circ\text{C}$
C_3	Parámetro geométrico
C_1, C_2	Constantes de integración
d_p	Diámetro del tubo, cm
d_t	Diámetro de la partícula esférica, cm
D_e	Difusividad efectiva en el lecho, cm^2/s
G	Flux másico de alimentación al lecho, $\text{g}/\text{cm}^2 \text{ s}$
h_p	Coefficiente de transferencia de calor partícula-fluido, $\text{W}/\text{cm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$
h_w	Coefficiente de transferencia de calor en la pared, $\text{W}/\text{cm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$
h_w^0	Coefficiente de transferencia de calor en la pared, no dependiente del flujo, $\text{W}/\text{cm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$
h_w^f	Coefficiente de transferencia de calor en la pared, dependiente del flujo, $\text{W}/\text{cm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$
J_i	Funciones de Bessel de orden i .
J_H	Flux de calor radial en la pared, W/cm^2
J_M	Flux de masa en el lecho, $\text{g}/\text{cm}^2 \text{ s}$
k_g	Coefficiente de transferencia de masa entre la partícula y el fluido, cm/s
k_{ez}	Conductividad térmica efectiva axial, $\text{W}/\text{cm } ^\circ\text{C}$
k_{ez}^0	Conductividad térmica axial no dependiente del flujo, $\text{W}/\text{cm } ^\circ\text{C}$
k_{ez}^f	Conductividad térmica axial dependiente del flujo, $\text{W}/\text{cm } ^\circ\text{C}$
k_e	Conductividad térmica efectiva, $\text{W}/\text{cm K}$
k_e^0	Conductividad Térmica efectiva axial o radial no dependiente del flujo, $\text{W}/\text{cm } ^\circ\text{C}$

k_f	Conductividad térmica del fluido, W/cm °C
k_s	Conductividad térmica de las partículas de catalizador, W/cm °C
k_{er}	Conductividad térmica efectiva radial, W/cm °C
k_r^o	Conductividad térmica radial no dependiente del flujo, W/cm °C
k_r^f	Conductividad Térmica radial dependiente del flujo, W/cm °C
$k_{conv.}$	Conductividad térmica debida a la convección, W/cm °C
$k_{cond.}$	Conductividad Térmica Debida a la conducción, W/cm °C
L	Longitud del lecho, cm
M	Parámetro geométrico
$Nu_w = R_T h_w / k_f$	Número de Nusselt en la pared
$Pr = \mu C_{pf} / k_f$	Número de Prandtl
$Pe_z = GC_{pf} L / k_{er}$	Número de Peclet Axial
$Pe_r = R_T^2 GC_{pf} / L k_e$	Número de Peclet Radial 1
$Pe_r = dp GC_{pf} / k_{er}$	Número de Peclet Radial 2
$Pe_r(\alpha)$	Peclet de transferencia de calor radial, con flujo totalmente desarrollado
$Q_o; q_o / \varepsilon C_{pf} T_o G$	Parámetro del modelo de conducción axial de calor
q_o	Flux de calor proveniente de la lámpara de luz infrarroja, W/cm ²
$Re_p = G d_p / \mu$	Numero de Reynolds de partícula
R_t	Radio del tubo, cm
R_i	Posición radial en la posición i dentro del lecho, cm
r'	Posición radial en el lecho empacado, cm
$r = r' / R_T$	Posición radial adimensional
t'	Tiempo, s
T_w	Temperatura de pared
T	Temperatura, °C
T_a	Temperatura promedio perpendicular al flujo de aire, °C
T_o	Temperatura a la entrada, °C
T_L	Temperatura a la salida de el lecho, °C
$T^* = T - T_w$	Temperatura, °C
$T_d^* = T_o - T_w$	Temperatura constante, °C

T_s	Temperatura del sólido
T_f	Temperatura del fluido
T_{RT}	Temperatura en $r=R_T$, °C
$\bar{T}=(T_c+ T_{RT})/2$	Temperatura radial promedio en el lecho, °C
\bar{T}_0	Temperatura radial promedio a la entrada de el lecho, °C
T_{exp}	Temperatura experimental, °C
T_{cal}	Temperatura calculada con el modelo, °C
T_c	Temperatura en el centro de el lecho, °C
u	Velocidad de el fluido, cm/s
U_i	Coficiente global de transferencia de calor, $W/cm^2 \cdot ^\circ C$
U_i^o	Coficiente global de transferencia de calor, no dependiente de el flujo, $W/cm^2 \cdot ^\circ C$
U_i^f	Coficiente global de transferencia de calor, dependiente de el flujo, $W/cm^2 \cdot ^\circ C$
V_p	Volumen de la superficie de la partícula, cm^3
$Y=T/T_0$	Temperatura adimensional en l problema axial de calor
z'	Posición axial en el lecho, cm
Z_i	Posición axial en el punto i dentro del lecho, cm
$z; z'/L$	Posición axial adimensional

Letras Griegas

ρ_f	Densidad del fluido, g/cm^3
β	Parámetro geométrico
φ	Parámetro geométrico
δ	Parámetro geométrico
ε	Porosidad de lecho
$\tau=tL/u$	Tiempo adimensional
λ_n	Valor propio n
μ	Viscosidad, $g/cm^2 \cdot s$
$\varepsilon =z'/d_p$	Variable adimensional

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
IZTAPALAPA**

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

***" Estudio de los Procesos de Transferencia
de Calor en un Lecho Empacado "***

PRESENTA

I. Q. Carlos Omar Castillo Araiza



ASESOR

Dr. Héctor Felipe López Isunza

SINODALES

Dr. Mario Gonzalo Vizcarra Mendoza

Dr. Hugo Jiménez Islas

Septiembre 2004