

V Jornadas en Ciencias Aplicadas “Dr. Jorge J. Ronco”

Empleo de un modelo unidimensional para estimar el factor de efectividad en monolitos con recubrimiento catalítico no uniforme

M. J. Taulamet, N. J. Mariani, S. D. Keegan, O. M. Martínez, G. F. Barreto

Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas “Dr. J. J. Ronco”

(CINDECA) CONICET- CIC - UNLP - Calle 47 No. 257, La Plata, Argentina

Dpto de Ingeniería Química, Fac. de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina

javier.mariani@gmail.com

Palabras claves: FACTOR DE EFECTIVIDAD, MONOLITOS, DEPOSITO NO UNIFORME, DIFUSION-REACCION, MODELOS UNIDIMENSIONALES

RESUMEN

En este trabajo se propone un modelo unidimensional (1D) para estimar el factor de efectividad en monolitos con depósito no uniforme (genéricamente bidimensionales 2D), denominado Modelo de dos Cuerpos (1D-2C). En el mismo se plantea dividir la sección transversal del recubrimiento catalítico en dos regiones que pueden modelarse como cuerpos independientes, en cada uno de los cuales la difusión (y simultánea reacción química) tiene lugar en una única dirección. Uno de los cuerpos se considera una placa plana, mientras que al otro cuerpo se le aplica el modelo de difusividad variable (1D-DV), desarrollado previamente por el grupo de trabajo y cuya capacidad de predicción ha sido comprobada en trabajos anteriores para una gran variedad de expresiones cinéticas y geometrías de catalizadores granulares. En este trabajo el objetivo es valorar la capacidad predictiva del modelo 1D-2C para distintas formas de la sección transversal del canal del monolito y distintas expresiones cinéticas (una cinética de primer orden irreversible e isotérmica y dos alternativas de expresiones tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson, que se diferencian en la magnitud

V Jornadas en Ciencias Aplicadas “Dr. Jorge J. Ronco”

del efecto de auto-inhibición, pudiendo una de ellas conducir a dos máximos locales en el valor del factor de efectividad conforme se varía el módulo de Thiele). Respecto a la geometría, se analizaron secciones cuadrada y triangular, modificando las cantidades del depósito no uniforme. Se comprobó que el modelo 1D-2C conduce a errores en la estimación de la velocidad de reacción efectiva inferiores al 8.5% en todos los casos analizados para el rango completo de módulos de Thiele.