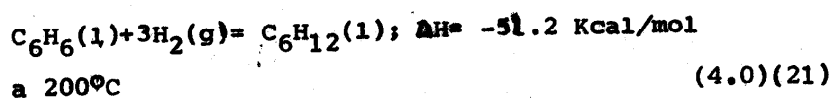


#### 4. PRACTICA PARA EJEMPLIFICAR EL FUNCIONAMIENTO DEL MICRORREACTOR.

Aunque el reactor objeto de este trabajo puede utilizarse para estudiar diversas reacciones, se escogió la reacción de hidrogenación de benceno para obtener ciclohexano para ilustrar su funcionamiento.

##### 4.1. Físico-Química Y Cinética De La Reacción

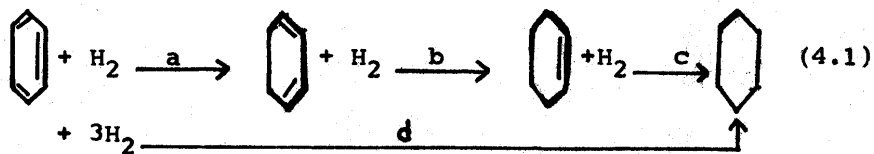
La hidrogenación de benceno se puede realizar en fase líquido-vapor o en fase vapor solamente. Esta reacción es exotérmica y se lleva a cabo con contracción de volumen. La reacción se puede expresar de la siguiente forma:



La reacción es por lo tanto favorecida por una baja temperatura y por altas presiones parciales de hidrógeno (20).

Se ha encontrado una  $K_p = 7.36$  a  $256^\circ\text{C}$  para el sistema benceno, hidrógeno y ciclohexano (21).

Es interesante observar los cambios de energía libre involucrados en la hidrogenación de benceno (21):



A continuación se tabulan las energías libres para los diferentes pasos:

TABLA 4.1

T( $^\circ\text{K}$ )	$\Delta F$ (Kcal)			
	a	b	c	d
298.16	13.2	- 17.9	- 18.7	- 23.4
400.	15.7	- 14.8	- 15.2	- 14.35
550.	19.6	- 10.2	- 9.4	0.00
700.	23.5	- 5.5	- 4.4	13.62
1,000.	31.3	4.2	6.5	41.97

En cuanto a cinética de la reacción, se ha encontrado que la reacción es aproximadamente de primer orden con respecto al hidrógeno y de orden cero con respecto al benceno (17,18,19,21,22). Aunque se ha observado una variación de primero a segundo orden con respecto al hidrógeno y de cero

a 0.5 con respecto al benceno entre las temperaturas de  $95^{\circ}$  a  $178^{\circ}\text{C}$  respectivamente (17), dependiendo del catalizador que se utilice variará este rango. La anterior observación se hizo utilizando un catalizador de cobalto.

Para llevar a cabo la hidrogenación de benceno se pueden utilizar varios catalizadores, entre ellos níquel, cobalto, cobre, platino y paladio. Hasta el momento los catalizadores más eficientes son el níquel Raney y el óxido de Platino de Adams (21). Esta reacción también se ha estudiado en catalizadores de tecnecio, renio y rutenio (23).

En el presente trabajo se utilizó un catalizador de platino sobre alúmina en pellets cilíndricos de  $\frac{1}{8}$ " de diámetro. Este catalizador exhibe su mayor actividad catalítica a aproximadamente  $203^{\circ}\text{C}$  (23). También se ha encontrado que el catalizador de platino es muy selectivo en la reacción de hidrogenación de benceno, obteniéndose solo ciclohexano como producto y además se observó que este catalizador no es activo para la reacción inversa, es decir, no cataliza la hidrogenólisis del ciclohexano (23).

Con respecto al mecanismo probable de reacción, éste puede variar según el catalizador utilizado y según el rango de temperaturas en el que se lleve a cabo el experimento.

En la literatura revisada se encontraron entre otros mecanismos:

1. Para un catalizador de cobalto en diferentes soportes en un rango de  $65$  a  $205^{\circ}\text{C}$  (17), se propone que el

benceno fuertemente adsorbido, se hidrogena simultáneamente para dar ciclohexano. Este paso se considera lento y se sigue por una hidrogenación rápida del ciclohexeno para ciclohexano.

2. El mecanismo propuesto para un catalizador de níquel sobre alúmina en un rango de temperaturas entre 127 y 232°C (24), es el siguiente: El hidrógeno molecular se adsorbe en la superficie del catalizador, y en el mismo sitio activo se adsorbe el benceno. El paso controlante es la reacción de superficie que se considera como una hidrogenación simultánea del benceno para dar ciclohexano.

3. Otro mecanismo para níquel pero soportado en una preparación de Kieselguhr (22), en un rango de 60 a 185°C, propone que el benceno adsorbido se hidrogena primero a ciclohexadieno lentamente, después a ciclohexeno y por último a ciclohexano que se desadsorbe pasando a la fase gaseosa.

#### 4.2. Obtención Industrial Y

##### Usos Del Ciclohexano.

La importancia económica del ciclohexano ha ocasionado el desarrollo de un gran número de procesos industriales para su obtención. Estos procesos difieren principalmente en los siguientes aspectos:

- Naturaleza del catalizador.
- Condiciones de operación bajo las cuales se lleva a cabo la reacción en el catalizador.

- Diseño del reactor.

- Método utilizado para disipar el calor generado debido a la exotermicidad de la reacción (20).

A continuación se describen algunos de los procesos -- más importantes.

#### 4.2.1 Proceso Bexano.

Benceno e hidrógeno de recirculación se vaporizan en un intercambiador de calor con la corriente caliente de los productos de reacción. La mezcla pasa a un reactor multitubular que contiene un catalizador a base de un metal noble.

La reacción desprende calor, el cual se disipa en la superficie de los tubos del reactor en forma de vapor de baja presión.

El área de la superficie de los tubos está calculada de tal forma que la temperatura máxima no exceda los 370°C y que la temperatura de salida de los tubos sea de 220°C.

La presión de operación es de cerca de 35 atmósferas y la pureza del producto es del orden de 99.9%. Esta pureza es la adecuada para la producción de nylon (20).

#### 4.2.2 Proceso HA-84

El catalizador para este proceso es a base de un metal noble y el mecanismo completo es similar en principio al - proceso Bexano. Aunque difiere de este último en que se tiene un evaporador adicional de benceno y una relación de reciclado de gas muy baja.

El benceno residual en el producto es de aproximadamente 5 ppm y se utiliza el 83% del hidrógeno (20).

#### 4.2.3 Proceso Hydrar.

Este fué el primer proceso industrial disponible para la hidrogenación de benceno.

Originalmente el proceso Hydrar estaba basado en un catalizador de platino promovido con sales de litio. Desde entonces se ha desarrollado un catalizador a base de níquel. Las impurezas de  $H_2S$ ,  $CO$  y  $CO_2$  actúan como venenos y deben eliminarse de la alimentación.

Al contrario del proceso Bexano y del proceso HA-84, - el proceso Hydrar utiliza reactores adiabáticos y el calor de reacción se elimina mediante enfriamiento entre cada reactor.

La temperatura del lecho catalítico varía aproximadamente de 200 a 350°C. La presión en el reactor se mantiene en aproximadamente 30 atmósferas, mientras que la relación molar hidrógeno/hidrocarburo se mantiene 2 a 1 mediante reciclado (20).

#### 4.2.4 Proceso Houdry.

Este proceso es similar, en principio, al proceso Hydrar. Los reactores son adiabáticos y el benceno se inyecta en etapas para mantener una relación de 2 a 1. Las

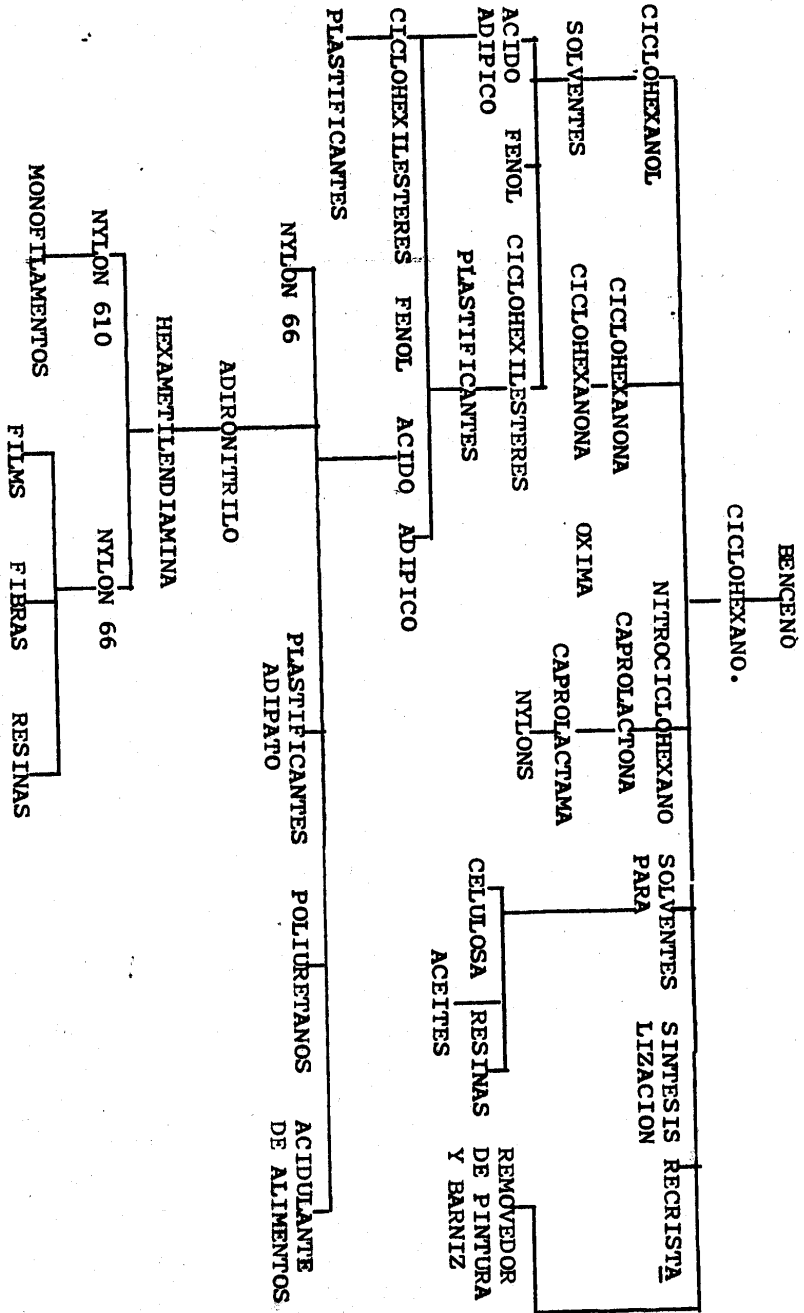
temperaturas son, sin embargo, más bajas y el contenido residual en el producto es de 10 ppm (20).

#### 4.2.5 Proceso I.F.P.

En este proceso el hidrógeno y el benceno se inyectan directamente sin precalentamiento al reactor, el cual contiene el catalizador en suspensión en ciclohexano líquido. El calor producido en la reacción se disipa por enfriamiento entre la suspensión de catalizador y agua a presión. Esto se lleva a cabo pasando la suspensión de catalizador a altas velocidades a través de un intercambiador exterior -- por medio de una bomba de recirculación. Esta operación juega un papel muy importante al mantener el catalizador en suspensión. La expansión del agua de enfriamiento produce vapor de baja presión.

La reacción se lleva a cabo en un reactor vigorosamente agitado. La concentración de benceno es, en consecuencia, muy baja; lo cual no es una desventaja ya que la velocidad de reacción permanece constante aún a altas conversiones.

El ciclohexano producido se obtiene del reactor como vapor en la corriente de los gases inertes junto con un pequeño exceso de hidrógeno, el cual es esencial para completar la conversión del benceno (20).



CUADRO 4.1. USOS COMERCIALES DEL CICLOHEXANO, DERIVADO DEL BENCENO (25).



### 4.3. Usos Del Ciclohexano.

La obtención de ciclohexano a partir de benceno es importante en la industria petroquímica, ya que de éste se derivan muchos productos de uso en industria y consumo final. En el cuadro 4.1. se muestran algunos de sus derivados.

### 4.4. Modelos Cinéticos Propuestos.

Se proponen dos modelos. El primero basado en un desarrollo del tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (modelo LHHW) y el segundo basado en la isoterma de Freundlich.

Estos modelos se denominan genéricamente modelos cinéticos de reacción de superficie y se debe entender que se consideran únicamente fenómenos de naturaleza química como quimisorción, desorción o reacción química de superficie - (26).

Se supone que los procesos de transporte de interfase e intrapartícula, son muy rápidos con respecto a la velocidad de los procesos químicos que ocurren sobre y dentro de la partícula de catalizador. También se supone gradiente ce ro en la interfase e intrafase con respecto a la difusión de calor, por lo tanto el alrededor y el interior de la par tícula de catalizador son isotérmicos (26).

#### 4.4.1 Modelo LHHW.

Estos modelos se formulan en base a ecuaciones de velocidad basadas a su vez en concentraciones de superficie de especies adsorbidas en la superficie del catalizador y en base a concentraciones de sitios activos libres. Estas concentraciones se expresan en términos de la isoterma de Langmuir (26).

Para el desarrollo del modelo se suponen tres pasos -- principalmente:

- Adsorción de reactivos en los sitios activos que se encuentran en la superficie del catalizador.
- Reacción química en los sitios activos.
- Desorción de los productos.

Como primer etapa en la formulación del modelo, se desarrollan las ecuaciones que describen cada uno de los pasos mencionados. Posteriormente, se supone que uno de estos pasos controla la velocidad de reacción, es decir, que es más lento que los dos pasos restantes y estos últimos se consideran en equilibrio.

Para la reacción problema de este ejemplo, se desarrollaron varios modelos. A continuación se muestra el modelo que resultó más útil para reproducir los datos experimentales:

$$r_3 = \frac{K_3 K_1 K_2 P_A^3 P_B}{(1 + K_2^{1/3} P_A + K_1 P_B + P_C / K_4)^4} \quad (4.2)$$

Donde  $P_A$ ,  $P_B$  y  $P_C$  son las presiones parciales del hidrógeno, benceno y ciclohexano respectivamente.  $K_3$ ,  $K_1$ ,  $K_2$  y  $K_4$  serían las constantes a determinar.

Para la obtención de este modelo se hicieron las siguientes suposiciones:

- El benceno y el hidrógeno molecular se adsorben en la superficie del catalizador para reaccionar.
- La reacción química de superficie es el paso más lento o controlante.
- El catalizador no es activo para la reacción en sentido inverso.

#### 4.4.2 Modelo tipo Freundlich.

Es posible expresar la velocidad de reacción como una simple función de potencias (26):

$$r = K \frac{P_A^{1/n}}{P_B^{1/m}} \quad (4.3)$$

Donde  $P_A$  y  $P_B$  serían las presiones parciales del hidrógeno molecular y benceno respectivamente; y  $K$  una constante global del sistema. Las constantes  $n$  y  $m$  son específicas para el sistema de gas y superficie de catalizador.

Esta ecuación resulta de introducir términos basados en la isoterma de Freundlich, en una ecuación de velocidad de reacción del tipo  $r = \Theta_A^a \Theta_B^b$ , donde  $\Theta$  representa la fracción de espacios vacíos ocupados por A y B respectivamente. Esta isoterma es la mejor para interpretar datos experimentales en las regiones donde se encuentran varias capas de moléculas adsorbidas (24).

#### 4.5. Experimentación.

Se llevaron a cabo varios experimentos para probar el sistema en cuanto a fallas de diseño y construcción. Estos experimentos también fueron útiles para observar el comportamiento en la relación conversión-cantidad de catalizador utilizado.

A continuación se muestra un resumen de los 3 principales experimentos que se realizaron y de las observaciones - llevadas a cabo durante los mismos. En todos estos experimentos se utilizó un catalizador de platino sobre alúmina al 0.5%, en pastillas cilíndricas de  $\frac{1}{8}$ " de diámetro promedio; proporcionado por Aldrich Chemical Co. U.S.A. El gas hidrógeno utilizado fué proporcionado por Infra del Pacífico S.A. quienes informaron que la pureza del gas es de 99.99%. Se utilizó benceno marca Monterrey libre de tiofeno.

En el apéndice A se encuentran las propiedades fisico-químicas utilizadas en los cálculos. En el apéndice B se muestra la ecuación para interpretar las lecturas del rotámetro y, finalmente, en el apéndice C se encuentra lo referente al análisis de muestras.

##### 4.5.1 Experimento # 1.

Se activó el catalizador por 12 horas a una temperatura de baño a  $130^{\circ}\text{C}$ , con un flujo de hidrógeno de  $520\text{ cm}^3/\text{min}$ .

Esta última medición y las posteriores se hicieron en el rotámetro a 2.36 atmósferas y 30°C.

Se realizaron 6 corridas, con intervalos de 15 minutos entre cada una de ellas, a las siguientes condiciones:

- Cantidad de catalizador: 20 pastillas, con un peso de 0.86 gr.
- Temperatura del baño de aceite: 130 y 140°C.
- Temperatura en el precalentador de benceno: 100°C.
- Temperatura ambiente: 30°C.
- Presión en el reactor: 1 atmósfera.
- Presión de entrada del gas hidrógeno: 2.36 atmósferas.

En la tabla 4.2 se muestran las condiciones de flujo de reactivos para las 6 corridas realizadas.

En este primer experimento no se obtuvieron datos satisfactorios ya que en las muestras que se analizaron se obtuvo más del 10% de conversión. Además se hicieron las siguientes observaciones:

- Se encontró filtración de aceite al reactor.
- En el momento de tomar muestras, en general, no se pudo obtener una cantidad apropiada de muestra, ya que en esta ocasión se tomaban las muestras directamente de la corriente de salida sin utilizar trampa de hielo. Esta pequeña cantidad de muestra se evaporó en 3 de los 6 frascos.

**TABLA 4.2**  
**CONDICIONES DE FLUJO DE REACTIVOS**  
**PARA EL EXPERIMENTO # 1.**

CORRIDA #	FLUJO DE H <sub>2</sub> (cm <sup>3</sup> /min) <sup>1/</sup>	FLUJO DE BENCENO (ml/min) <sup>2/</sup>	CONVERSION (%)
Temperatura: 130°C			
1	649.24	0.5	-
2	649.24	0.6	*
3	649.24	0.7	-
Temperatura: 140°C			
4	649.24	0.5	-
5	649.24	0.6	*
6	649.24	0.7	*

1/ Medidos a 30°C y 2.36 atmósferas.

2/ Medidos a 30°C y 1 atmósfera.

\* Conversión mayor del 10%

- Muestra perdida por evaporación.

De acuerdo a estas experiencias se optó por lo siguiente:

- Se disminuyó la cantidad de catalizador a 10 pastillas con un peso de 0.45 gr., diluido con 10 partículas inertes de vidrio, del mismo diámetro de las pastillas de catalizador.

- Se desarmó el reactor y se limpió completamente utilizando benceno. Posteriormente, una vez que se empacó el reactor con pastillas nuevas, se volvió a armar utilizando esta vez cinta de teflón.

- Se adaptó una trampa de hielo para obtener muestra -- condensada.

#### 4.5.2 Experimento # 2.

En este experimento, además de disminuir la cantidad de catalizador y de diluirlo con partículas inertes, se aumentó el flujo de hidrógeno para aumentar la velocidad de paso de los reactantes y disminuir la conversión. El flujo de benceno se mantuvo en el mismo rango.

Se activó el catalizador por 12 horas a una temperatura de  $130^{\circ}\text{C}$  y un flujo de  $650\text{ cm}^3/\text{min}$  de hidrógeno, medidos a  $2.36$  atmósferas y  $30^{\circ}\text{C}$ . Se llevaron a cabo 10 corridas y esperó 30 minutos entre cada una de ellas para tomar muestras. Se tuvieron las siguientes condiciones:

- Temperatura del baño de aceite:  $130$  y  $140^{\circ}\text{C}$ .
- Temperatura del precalentador de benceno:  $130^{\circ}\text{C}$ .
- Temperatura ambiente:  $30^{\circ}\text{C}$ .
- Presión en el reactor: 1 atmósfera.
- Presión de entrada del gas hidrógeno:  $2.36$  atmósferas.

Se tuvo especial cuidado en eliminar la cantidad de muestra restante en la trampa de hielo entre cada corrida. Cada

frasco de muestra se refrigeró hasta el momento del análisis. Se obtuvieron aproximadamente 2.5 ml de muestra para cada corrida.

En la tabla 4.3 se muestran las diferentes condiciones de flujo para los reactivos y los resultados obtenidos.

En este experimento se obtuvieron conversiones mayores del 6%, y además se notó que la conversión bajó a flujos de 1 ml/min en relación a la conversión obtenida con flujos de 0.5 ml/min, para los mismos flujos de hidrógeno. Esto puede representar problemas de transferencia de masa o que existe un efecto de "escurrimiento" dentro del reactor.

#### 4.5.3 Experimento # 3.

Considerando los resultados obtenidos en el experimento anterior, el experimento # 3 se llevó a cabo a las siguientes condiciones:

- Cantidad de catalizador: 4 pastillas con un peso de 0.18 gr, diluídas con 4 partículas inertes de vidrio.
- Se activó el catalizador por 12 horas a las mismas condiciones de los experimentos anteriores.
- Temperatura del precalentador de benceno: 130°C.
- Presión en el reactor: 1 atmósfera.
- Temperatura ambiente: 30°C.
- Presión de entrada de gas hidrógeno: 2.36 atmósferas.



TABLA 4.3  
CONDICIONES DE FLUJO DE REACTIVOS PARA  
EL EXPERIMENTO # 2.

CORRIDA #	FLUJO DE H <sub>2</sub> (cm <sup>3</sup> /min) <sup>1/</sup>	FLUJO DE BENCENO (ml/min) <sup>2/</sup>	CONVERSION (%)
Temperatura: 130°C			
1	1,298.48	0.5	*
2	1,168.64	0.5	*
3	1,038.79	0.5	*
4	1,298.48	1.0	*
5	1,168.64	1.0	*
Temperatura: 140°C			
6	1,298.48	0.5	*
7	1,168.64	0.5	*
8	1,038.79	0.5	*
9	1,298.48	1.0	*
10	1,168.64	1.0	*

<sup>1/</sup> Medidos a 2.36 atmósferas abs. y 30°C.

<sup>2/</sup> Medidos a 1 atmósfera abs. y 30°C.

\* Conversión mayor del 6%.

Se hicieron 10 corridas a una temperatura de 140°C y se esperó media hora entre cada corrida, de tal forma que el reactor alcanzara el estado estable. Como se observa en la tabla 4.4, en este experimento se obtuvieron conversiones

menores del 4%, de tal manera que se puede considerar reactor diferencial.

TABLA 4.4  
CONDICIONES DE FLUJO DE REACTIVOS  
Y CONVERSIONES OBTENIDAS PARA EL  
EXPERIMENTO #3

CORRIDA #	FLUJO DE H <sub>2</sub> (cm <sup>3</sup> /min) <sup>1/</sup>	FLUJO DE BENCENO (ml/min) <sup>2/</sup>	CONVERSION (%)
Temperatura: 140°C			
1	1,298.48	0.5	3.28
2	1,168.64	0.5	2.88
3	1,038.79	0.5	2.96
4	908.94	0.5	3.12
5	779.09	0.5	3.22
6	1,298.48	0.4	2.74
7	1,168.64	0.4	3.12
8	1,038.79	0.4	3.22
9	1,298.48	0.3	2.56
10	1,168.64	0.3	2.86

<sup>1/</sup> Medidos a 2.36 atmósferas y 30°C.

<sup>2/</sup> Medidos a 1 atmósfera y 30°C.

#### 4.5.4 Correlación de datos.

En la table 4.5 se muestran las velocidades de reacción correspondientes a cada corrida. Estas velocidades de

TABLA 4.5  
VELOCIDADES DE REACCION PARA LA HIDROGENACION  
DE BENCENO A 140°C

CORRIDA	FLUJO DE H <sub>2</sub> (mol/min)	FLUJO DE BENCFNO (mol/min)	CONVERSION (%)	VELOCIDAD DE REACCION X 10 <sup>3</sup> (mol/min.gr.cat.)
1	0.1242	0.0057	3.28	1.039
2	0.1118	0.0057	2.88	0.912
3	0.0994	0.0057	2.96	0.937
4	0.0870	0.0057	3.12	0.988
5	0.0745	0.0057	3.22	1.020
6	0.1242	0.0045	2.74	0.68
7	0.1118	0.0045	3.12	0.780
8	0.0994	0.0045	3.22	0.805
9	0.1242	0.0034	2.56	0.484
10	0.1118	0.0034	2.86	0.504

TABLA 4.6  
 FLUJOS DE SALIDA DE BENCENO, HIDROGENO  
 Y CICLOHEXANO.

CORRIDA #	FLUJO DE H <sub>2</sub> (mol/min)	FLUJO DE BENCENO X 10 <sup>3</sup> (mol/min)	FLUJO DE CICLO- HEXANO X 10 <sup>4</sup> (mol/min)
1	0.1236	5.513	1.870
2	0.1113	5.536	1.642
3	0.0989	5.531	1.687
4	0.0865	5.522	1.778
5	0.0739	5.517	1.835
6	0.1238	4.377	1.233
7	0.1114	4.360	1.404
8	0.0990	4.355	1.449
9	0.1239	3.313	0.870
10	0.1115	3.303	0.972

reacción se obtuvieron utilizando la ecuación de diseño (ecuación 1.5).

De acuerdo a los datos de velocidad de reacción y a la estequiometría de la reacción, se encontraron los flujos de salida de benceno, hidrógeno y ciclohexano, los cuales se muestran en la tabla 4.6 .

Tomando en cuenta los datos de la tabla 4.6, se encontraron las fracciones mol de salida de reactivos y producto. Ya que la presión dentro del reactor fué de aproximadamente

una atmósfera, las presiones parciales de salida de cada uno de ellos son iguales a sus fracciones mol. En la tabla 4.7 se muestran las presiones parciales de salida del hidrógeno, benceno y ciclohexano.

TABLA 4.7  
PRESIONES PARCIALES DE SALIDA DE  
HIDROGENO, BENCENO Y CICLOHEXANO.

CORRIDA #	PRESION PARCIAL DE H <sub>2</sub> , P <sub>A</sub> (atm)	PRESION PARCIAL DE BENCENO, P <sub>B</sub> (atm)	PRESION PARCIAL DE CICLOHEXANO, P <sub>C</sub> (atm)
1	0.9559	0.0426	0.0014
2	0.9513	0.0473	0.0014
3	0.9455	0.0529	0.0016
4	0.9382	0.0599	0.0019
5	0.9284	0.0693	0.0023
6	0.9649	0.0341	0.0010
7	0.9612	0.0376	0.0012
8	0.9565	0.0421	0.0014
9	0.9733	0.0260	0.0007
10	0.9704	0.0287	0.0008

Las presiones parciales de la tabla 4.7 y las velocidades de reacción de la tabla 4.5, son las que se utilizaron para determinar el valor de las constantes de las ecuaciones 4.2 y 4.3.

4.5.4.1. Evaluación de constantes en el modelo LHHW. En la ecuación de velocidad cinética basada en el desarrollo tipo LHHW, ecuación 4.2, se desprecia el término que contiene a la presión parcial del ciclohexano por ser ésta muy pequeña en comparación de las dos restantes. Entonces, la ecuación 4.2 queda:

$$r = \frac{k_3 K_1 K_2 P_A P_B}{(1 + K_1 P_B + K_2^{1/2} P_A)^2}$$

La ecuación 4.4 se arregló de la siguiente manera:

$$\left(\frac{P_A^2 P_B}{r}\right)^{1/4} = \frac{1}{(k_3 K_1 K_2)^{1/4}} + \frac{K_1 P_B}{(k_3 K_1 K_2)^{1/4}} + \frac{K_2^{1/2} P_A}{(k_3 K_1 K_2)^{1/4}} \quad (4.5)$$

que es una ecuación del tipo:  $x = A + By + Cz$ , donde:

$$x = \left(\frac{P_A^2 P_B}{r}\right)^{1/4} ; y = P_B ; z = P_A$$

y

$$A = (k_3 K_1 K_2)^{-1/4} ; B = K_1 (k_3 K_1 K_2)^{-1/4} ; C = K_2^{1/2} (k_3 K_1 K_2)^{-1/4}$$

De acuerdo a los procedimientos señalados en el apartado 1 del apéndice D, se obtuvieron los siguientes resultados:

$K_3 = 115.0836$  moles/minuto-gramo de catalizador.

$K_1 = 0.8208$  (atmósferas)<sup>-1</sup>

$K_2 = 3.3861 \times 10^{-4}$  (atmósferas)<sup>-3</sup>

En la tabla 4.8, se muestra el porcentaje de error entre la velocidad experimental y la calculada.

4.5.4.2. Evaluación de constantes para el modelo basado en la isoterma de Freundlich. Se tomaron logaritmos en ambos términos de la ecuación 4.3, obteniéndose lo siguiente:

$$\text{Ln}r = \text{Ln}K + \frac{1}{n} \text{Ln}P_A + \frac{1}{m} \text{Ln}P_B \quad (4.6)$$

la cual también es una ecuación del tipo:  $X=A+By+Cz$ , donde:

$$X = \text{Ln}r; y = \text{Ln}P_A; z = \text{Ln}P_B$$

y

$$A = \text{Ln}K; B = 1/n \text{ y } C = 1/m$$

De acuerdo al apartado 2 del apéndice D, se obtuvieron los siguientes resultados:

$K = 14.5153$  moles/min-gramo de catalizador.

$n = 0.0265$

$m = 0.3930$

En la tabla 4.9, se muestran los porcentajes de error para este modelo.

TABLA 4.8

PORCENTAJE DE ERROR PARA EL MODELO

LHHW

CORRIDA #	$r, \text{exp} \times 10^4$ (moles/min-gr.cat)	$r, \text{calc} \times 10^4$ (moles/min-gr.cat)	$(r, \text{exp} - r, \text{calc}) / r, \text{calc} \times 100$ (%)
1	10.390	8.082	28.6
2	9.120	8.732	4.4
3	9.373	9.444	- 0.7
4	9.880	10.250	- 3.6
5	10.200	11.210	- 9.0
6	6.850	6.809	0.6
7	7.800	7.352	6.1
8	8.050	8.013	0.5
9	4.836	5.448	11.24
10	5.402	5.917	- 8.7



TABLA 4.9  
 PORCENTAJE DE ERROR PARA EL MODELO EN BASE  
 A LA ISOTERMA DE FREUNDLICH.

CORRIDA #	$r, \text{exp} \times 10^4$ (mol/min-gr.cat)	$r, \text{calc} \times 10^4$ (mol/min-gr.cal)	$(r, \text{exp}-r, \text{calc})/r, \text{calc}$ (%)	$\times 100$
1	10.390	8.626	20.45	
2	9.120	9.387	- 2.84	
3	9.373	9.910	- 5.42	
4	9.880	10.150	- 2.68	
5	10.200	9.904	2.99	
6	6.850	6.969	- 1.71	
7	7.800	7.732	0.88	
8	8.050	8.571	- 6.07	
9	4.836	4.845	- 0.19	
10	5.402	5.568	- 2.98	