

# PREDICCIÓN DEL FACTOR DE EFECTIVIDAD EN MONOLITOS DE MATRIZ METÁLICA CON RECUBRIMIENTO CATALÍTICO NO UNIFORME

Taulamet María J., Mariani Néstor J., Martínez Osvaldo M., Barreto Guillermo F.



Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina,

Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "Dr. J. J. Ronco" (CINDECA) CONICET - CIC - UNLP - CCT La Plata, Calle 47 No. 257, CP B1900AJK, La Plata, Argentina



## OBJETIVO

Emplear el **modelo de dos zonas (1D-2Z)** para predecir la velocidad de reacción efectiva en monolitos de matriz metálica y sección transversal sinusoidal con distintos grados de no uniformidad en el recubrimiento catalítico (*washcoat*), empleando diferentes expresiones cinéticas.

Tres expresiones cinéticas

- $r = Y$  (primer orden irreversible isotérmica)
- $r = 36 Y / (1 + 5 Y)^2$  (LHHW1)
- $r = 81 Y / (1 + 8 Y)^2$  (LHHW2)

## BALANCE DE CONSERVACIÓN PARA LA PASTILLA 3D

$$\nabla^2(Y) = \phi^2 r(Y) \text{ en } V_p^*$$

$$Y=1 \text{ sobre } S_p^*$$

Módulo de Thiele:  $\phi = \ell (r_{A,S} / C_{A,S} D_A)^{1/2}$

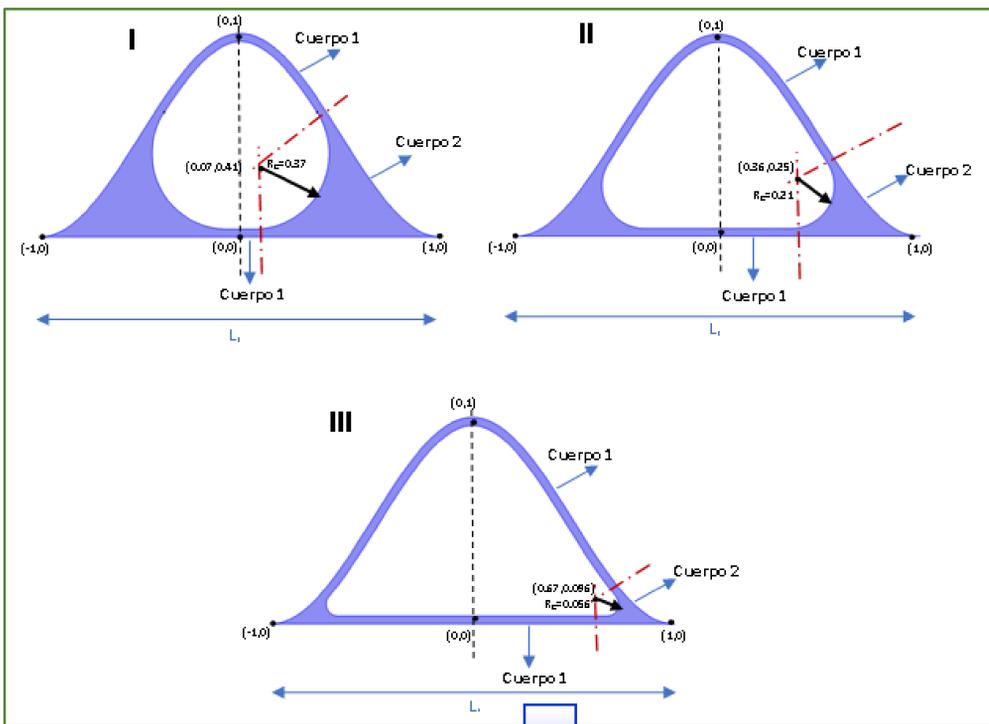
Factor de efectividad:  $\eta = \int_{V_p^*} r(Y) dV^*$

Hipótesis: reacción única, composición uniforme sobre la superficie de la pastilla, difusión isotrópica, actividad uniforme.

$Y = C_A / C_{A,S}$   $r = r_A / r_{A,S}$   
 $\ell = V_p / S_p$ : longitud característica de difusión  
 $V_p^*$  y  $S_p^*$ : volumen y superficie externa adimensional de la pastilla  
 $D_A$ : coeficiente de difusión de la especie A  
 $s$ : evaluado en la superficie del *washcoat*

En monolitos normalmente  $L \gg d_h$   
 ↓  
 Difusión axial despreciable  
 ↓  
 Problema 2D

El *washcoat* presenta un espesor no uniforme (acumulación de material activo en las esquinas).

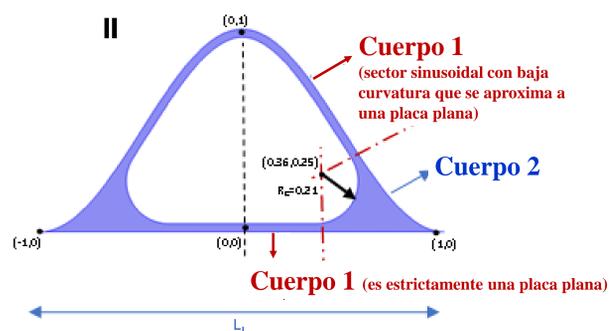


## MODELO DE DOS ZONAS (1D-2Z)

Se divide el *washcoat* en dos regiones (se modelan como dos cuerpos con difusión y reacción independiente, en una única dirección y con actividad unitaria):

- **Cuerpo 1:** Placa plana
- **Cuerpo 2:** Modelo 1D-DV (Mocciaro y col., 2011)

$$\eta = \frac{\eta_1 V_{c1} + \eta_2 V_{c2}}{V_{c1} + V_{c2}}$$

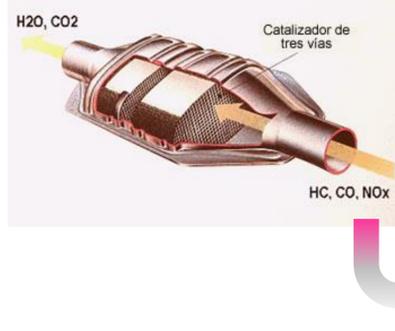


El modelo 1D-2Z fue aplicado previamente a monolitos cerámicos con sección transversal cuadrada y triangular y distintos espesores de *washcoat* no uniforme, para distintas expresiones cinéticas con una precisión aceptable (Taulamet y col., 2021).

## INTRODUCCIÓN

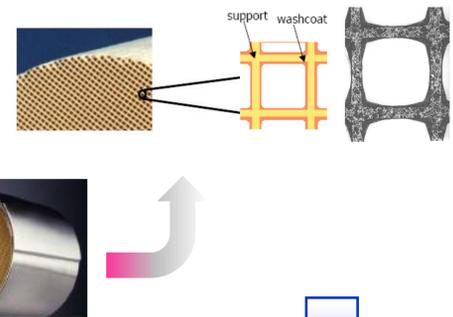
### MONOLITOS

Reactores estructurados del tipo de canales rectilíneos.



### APLICACIÓN PRINCIPAL

Tratamiento catalítico de corrientes gaseosas. Eliminación de contaminantes (e.g., escapes catalíticos de vehículos).



## PROBLEMÁTICA

Caso general: problema de **reacción-difusión** en canales de monolitos **2D** ( $L \gg d_h$  con  $L$ : largo,  $d_h$ : diámetro hidráulico de la sección transversal)  $\Rightarrow$  resolución numérica.

- Complejidad moderada para casos sencillos (reacción única / cálculos no recurrentes)
- Inviabile para casos prácticos (simulación recurrente en optimización o diseño de una planta de procesos, múltiples reacciones, etc.).

**Alternativa: empleo de modelos que reduzcan la dimensión espacial del problema**

## RESULTADOS

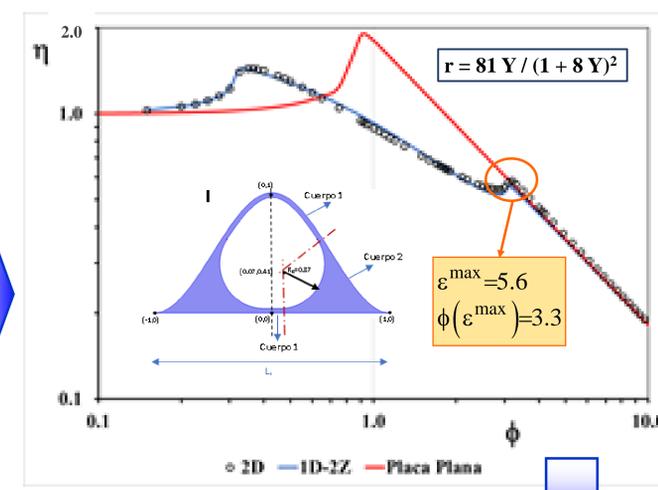
$$\epsilon = \frac{(\eta_{1D-2Z} - \eta)}{\eta} 100$$

$\eta_{1D-2Z}$ : factor de efectividad para el modelo 1D-2Z  
 $\eta$ : factor de efectividad para el monolito real

| Geometría     | $\epsilon^{\max} = \max  \epsilon $ |       |       |
|---------------|-------------------------------------|-------|-------|
|               | Primer orden                        | LHHW1 | LHHW2 |
| Sinusoide I   | 3.4                                 | 5.0   | 5.6   |
| Sinusoide II  | 1.7                                 | 2.6   | 3.4   |
| Sinusoide III | 0.8                                 | 1.1   | 5.6   |

$\epsilon^{\max}$  aumenta con la cantidad de depósito no uniforme (cuerpo 2). La complejidad de la cinética asociada al mayor peso de la contribución de la región considerada una placa plana, hacen que se ponga de manifiesto el haber ignorado la curvatura del sector que comprende la sinusoide.

$\epsilon^{\max}$  aumenta con la complejidad de la expresión cinética



Los mayores errores se presentan a valores intermedios de  $\phi$

El modelo logra reproducir apropiadamente la forma de la curva real de  $\eta$  para el rango completo de  $\phi$ , capturando los dos máximos que se generan.

## CONCLUSIONES

El modelo 1D-2Z puede ser utilizado con una precisión completamente adecuada en monolitos metálicos con sección transversal sinusoidal para las cinéticas analizadas:

- $|\epsilon^{\max}| \leq 3.4 \%$  para la cinética de primer orden irreversible isotérmica
- $|\epsilon^{\max}| \leq 5.6 \%$  para la cinética tipo LHHW2