
INTRODUCCIÓN GENERAL

PRESENTACIÓN DEL PROBLEMA.

El tema de investigación de esta Tesis son los procesos catalíticos de hidrotratamiento selectivo de cortes de hidrocarburos insaturados, de cadena de cuatro carbonos, ricos en n-butenos.

Estos cortes de C₄'s contienen fundamentalmente olefinas: 1-buteno, cis y trans 2-buteno e isobuteno, y, en baja proporción, compuestos acetilénicos y 1,3-butadieno. Dada la variada composición de la materia prima, y la amplia diversidad de sus usos potenciales, la implementación tecnológica del hidrorefinado catalítico de cortes de C₄'s involucra varios procesos y objetivos. A los fines de establecer la esencia del problema se detallarán las siguientes alternativas ([Derrien, 1986](#)):

- ♣ hidrogenación selectiva de compuestos acetilénicos y 1,3-butadieno en cortes ricos en n-butenos,
- ♣ hidro-isomerización selectiva de 1-buteno a 2-butenos.

En el primer caso, el objetivo es obtener corrientes libres de compuestos acetilénicos y 1,3-butadieno atendiendo al uso de los n-butenos como monómeros en la producción de polibutenos y al empleo de 1-buteno como comonomero en la fabricación de polietileno lineal de baja densidad. En estos procesos de polimerización, la presencia de compuestos acetilénicos y 1,3-butadieno origina la formación de productos secundarios que perjudican la calidad de los productos finales.

El problema de la hidrogenación selectiva consiste en obtener una conversión casi completa de acetilénicos y 1,3-butadieno, evitando la hidrogenación de los n-butenos; o en el caso de que la sustancia valiosa sea sólo el 1-buteno, evitando sus pérdidas tanto por su hidrogenación como por su isomerización.

La hidro-isomerización selectiva de 1-buteno a 2-butenos tiene en cuenta que los 2-butenos son preferidos para la síntesis de ciertos intermediarios petroquímicos, como por ejemplo en el caso de la producción de metil etil cetona y de 1,3-butadieno. En adición, una mezcla de n-butenos e isobuteno es separada con mayor facilidad si los n-butenos consisten mayoritariamente de 2-butenos, en particular cis 2-buteno ([Derrien, 1986](#)). Finalmente, puede mencionarse que el número de octanos de los alquilados obtenidos mediante los 2-butenos es mayor que el número de octanos de los alquilados del 1-buteno.

El objetivo de los procesos de hidro-isomerización selectiva consiste en permitir la migración de la doble ligadura, 1-buteno a 2-butenos, evitando la hidrogenación de los tres n-butenos.

El sistema de reacciones ocurrientes en los procesos descritos se ilustra en la **Figura In.1**. En este esquema no se ha incluido al isobuteno, puesto que los catalizadores de mayor difusión comercial empleados en hidrotratamientos selectivos, exhiben una actividad despreciable para la hidrogenación e isomerización esquelética del mismo. Por otra parte, se ha considerado al 1-buteno como el único representante de los compuestos acetilénicos, aspecto que será justificado más adelante.

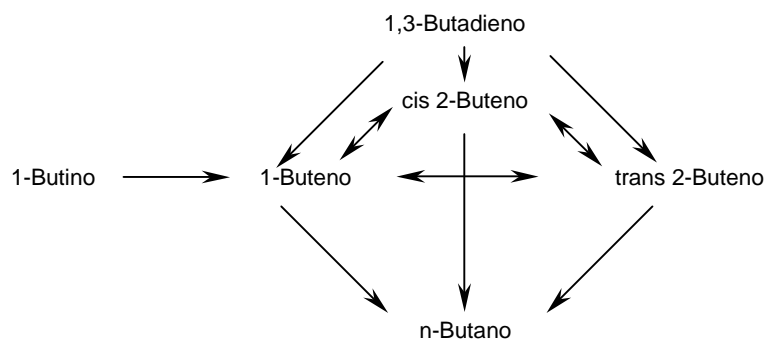


Figura In.1. Esquema global de reacciones involucrado en el hidrotratamiento de cortes de C₄'s ricos en n-butenos.

IMPLEMENTACIÓN TECNOLÓGICA DE LOS PROCESOS DE HIDROTRATAMIENTO SELECTIVO DE CORTES DE C₄'S RICOS EN n-BUTENOS.

Aspectos Generales.

La difusión tecnológica de los procesos catalíticos de hidrogenación e hidro-isomerización selectiva de cortes de C₄'s ricos en n-butenos se ha incrementado desde comienzos de 1980 con un mercado para la polimerización del 1-buteno y de los 2-butenos en continua expansión. En la actualidad, es usual encontrar en las refinerías unidades para la purificación e isomerización de cortes de C₄'s. En la Argentina, Repsol YPF posee dos procesos de hidrogenación selectiva en su destilería de Ensenada, destinados a la obtención de corrientes de n-butenos y de 1-buteno de alta pureza, y la empresa PASA lleva a cabo un proceso de purificación catalítica de 1-buteno.

La hidrogenación e hidro-isomerización selectiva ha reemplazado otros métodos de purificación por numerosas razones ([Derrien, 1986](#)):

- ♣ por ejemplo, la separación por destilación no resulta económicamente viable frente a los exigentes niveles de pureza requeridos, debido a que el 1,3-butadieno y el 1-buteno presentan puntos de ebullición cercanos;
- ♣ se emplea la tecnología usual de lechos fijos a bajas temperaturas y presiones medias cuya operación es simple y requiere bajos costos de inversión y operativos;
- ♣ es un procedimiento eficiente desde el punto de vista de que no existen prácticamente limitaciones termodinámicas para alcanzar los objetivos;
- ♣ el desarrollo de nuevos catalizadores han permitido superar exigentes requisitos de pureza,

manteniendo una operación estable durante un tiempo prolongado.

Las fuentes de corrientes ricas en n-butenos provienen de las operaciones de “ cracking ” térmico o catalítico de hidrocarburos ([Boitiaux et al.](#), 1985a). La composición de las corrientes de C₄'s depende del tipo de “ cracking ” del cual provienen. En el caso del “ cracking ” térmico, la corriente posee un alto contenido de 1,3-butadieno. Éste es removido en una unidad de destilación extractiva a los fines de su recuperación, empleando solventes altamente selectivos. De esta manera, se obtiene un primer refinado rico en butenos, siendo mayoritario el isobuteno. Esta corriente, es una fuente atractiva de isobuteno, empleado para la producción de MTBE, por lo que es procesada a los fines de recuperar el mismo. Previo a la extracción del isobuteno, puede recurrirse a la hidro-isomerización selectiva de 1 a 2-butenos. Esta operación facilitará la posterior separación entre los n-butenos y el isobuteno, y simultáneamente contribuirá a eliminar residuos indeseables de compuestos acetilénicos y diolefinas. Luego de la separación, se obtienen dos corrientes formadas esencialmente por 2-butenos e isobuteno. Otra posibilidad, es extraer directamente el isobuteno del primer refinado para producir una mezcla compuesta en **70 %** molar por n-butenos. La hidrogenación selectiva de impurezas retenidas de los procesos anteriores, aproximadamente un **1 %** molar de acetilénicos y 1,3-butadieno, a este segundo refinado, originará corrientes de 1-buteno de alta pureza. La obtención de 1-buteno y 2-butenos grado polímero requiere disminuir el contenido inicial de dichas impurezas a valores menores que **20 ppm**.

Catalizadores.

Los procesos de hidrefinado son llevados a cabo empleando catalizadores que aporten el requisito deseado de selectividad.

Es ampliamente reconocido en la literatura que, entre los elementos del Grupo VIII, el Pd es el agente más selectivo para la hidrogenación de compuestos acetilénicos y diolefinas ([Bond](#), 1962). Específicamente, la habilidad del Pd para hidrogenar selectivamente a los compuestos acetilénicos y al 1,3-butadieno en presencia de los n-butenos, se debe a la preferencia termodinámica del metal a adsorber los hidrocarburos insaturados de acuerdo al siguiente orden de estabilidad: 1-butino, 1,3-butadieno y n-butenos ([Hub & Touroude](#), 1988). En consecuencia, pequeñas cantidades de 1-butino y 1,3-butadieno serán suficientes para inhibir la adsorción y reacción de los n-butenos.

Otra característica sobresaliente del Pd es su elevada actividad para la hidrogenación de hidrocarburos insaturados y para la hidro-isomerización de olefinas. Este comportamiento del Pd ofrece ventajas y desventajas para los procesos de hidrefinado.

La elevada velocidad de hidrogenación de compuestos acetilénicos y 1,3-butadieno es una característica positiva pues permite conducir la purificación de corrientes de n-butenos a bajas temperaturas.

En los procesos de hidrogenación selectiva la facilidad de hidrogenación e hidro-isomerización del 1-buteno es perjudicial por cuanto conduce a pérdidas importantes de la sustancia valiosa. A los fines de obtener una buena selectividad, manteniendo una elevada velocidad de hidrogenación de acetilénicos y 1,3-butadieno, se recurre a modificar las propiedades electrónicas del Pd mediante la incorporación de un segundo metal ([Hightower et al.](#), 1993; [Miura et al.](#), 1993). La diversificación de fuentes para la provisión

de cortes de C₄'s, los requisitos de calidad de los productos demandados por nuevas aplicaciones tecnológicas y la superación de otras desventajas exhibidas por los catalizadores convencionales de Pd, son también causas importantes del uso de catalizadores bimetálicos de Pd ([Boitiaux et al.](#), 1985a).

La adición del segundo metal, además de promover la selectividad del catalizador, tiene por finalidad mejorar ciertas falencias del Pd tales como: sensibilidad al envenenamiento, formación de oligómeros, pérdida de metal activo por formación de complejos hiperestables con sustancias acetilénicas que lo desprenden del soporte ([Boitiaux et al.](#), 1985a).

En el caso de los procesos de hidro-isomerización selectiva, la hidrogenación de los n-butenos debe ser evitada sin disminuir la actividad de las reacciones de migración de la doble ligadura. Para ello, en la práctica industrial, se recurre a la pre-sulfuración del catalizador que reduce de manera drástica su actividad hidrogenante mejorando el rendimiento a 2-butenos ([Derrien](#), 1986).

La elevada velocidad de las reacciones del proceso puede, eventualmente, conducir al desarrollo de significativos gradientes de concentración en la pastilla catalítica, deteriorando severamente la selectividad observada. Por ello, los catalizadores comerciales son fabricados con un bajo contenido de metal activo, con el cual se impregna sólo una delgada capa situada sobre la superficie externa de la pastilla. Estas características fueron observadas en seis catalizadores comerciales disponibles. Éstos presentan capas activas con espesores entre **70 – 300 µm**, y contenidos de Pd de **0.3 – 0.05 %** en peso.

Operación de las Unidades Industriales de Hidrotratamiento.

La mayoría de las tecnologías comerciales actuales de hidrogenación e hidro-isomerización selectiva involucran reactores catalíticos de lecho fijo con flujo bifásico de vapor y líquido en cocorriente ascendente o descendente.

Inicialmente, se emplearon catalizadores de Ni o Cu con baja actividad hidrogenante, motivo por el cual los procesos se implementaron a altas temperaturas y en fase gaseosa. El empleo de catalizadores de base Pd, de elevada actividad, permitió llevar a cabo el proceso en condiciones moderadas de presión y temperatura, y operando en fase líquida, lo cual ofrece importantes ventajas. Por un lado, evita los costos de energía asociados a la evaporación de la alimentación líquida y posterior condensación del efluente. Por otra parte, la fase líquida lava la superficie catalítica disminuyendo la formación de oligómeros sobre la misma ([Boitiaux et al.](#), 1985a).

La operación se lleva a cabo en niveles de temperatura en el intervalo, **30 – 60 °C**, correspondiendo la menor temperatura al inicio de un ciclo operativo en el cual el catalizador no ha sufrido prácticamente efectos de desactivación, y presiones moderadas del orden de **10 atm**.

En tales condiciones, la mezcla reactiva se compone de una fase líquida en la cual predominan los C₄'s, con H₂ disuelto, y una fase vapor formada mayoritariamente por H₂, pero que contiene una apreciable cantidad de C₄'s debido a la volatilidad de los mismos. Las cantidades alimentadas de H₂ son muy bajas respecto a las del conjunto de hidrocarburos, debido a que las impurezas que se busca hidrogenar están presentes en contenidos de aproximadamente **10⁴ ppm**. En consecuencia, la relación másica de fase líquida a vapor resulta elevada, motivo por el cual la mayor proporción de hidrocarburos es transportada por la fase líquida.

OBJETIVOS DE LA TESIS.

El presente trabajo de Tesis se inició en el marco de un Proyecto de Investigación referente a la simulación matemática de reactores industriales de lecho fijo con flujo bifásico de vapor y líquido, aplicados al hidrot ratamiento de cortes de C_4 's.

A partir de la revisión de la bibliografía se concluyó que sería necesario desarrollar dos herramientas sobre las cuales la información disponible es insuficiente para llevar a cabo la simulación propuesta. Las dos tareas centrales requeridas son: la formulación de un modelo plausible del reactor industrial de hidrot ratamiento y la realización de un estudio cinético experimental destinado a dotar al simulador de información cinética confiable.

Ambas tareas comenzaron simultáneamente. En función de los recursos disponibles la investigación cinética experimental se inició en fase gaseosa. Habiendo avanzado en la definición del modelo del reactor industrial, se requirió de información cinética para comenzar a obtener resultados de la simulación, empleándose en principio datos cinéticos recabados en la bibliografía. No obstante, estos datos no resultaron satisfactorios y en consecuencia se decidió incorporar información cinética propia. Debido a las dificultades experimentales que fue necesario resolver en el estudio que se estaba llevando a cabo en fase gaseosa, aún no se contaba con la información requerida para la simulación. Sin embargo, en este grado de avance de la Tesis se dispuso de equipamiento para obtener datos cinéticos en fase líquida. Por lo tanto, sin alterar la planificación de las medidas en fase gaseosa y en paralelo con ellas, se realizó un conjunto de ensayos de hidrogenación de 1,3-butadieno en presencia de 1-buteno en fase líquida. El estudio en fase gaseosa se orientó al desarrollo de un modelo cinético, sustentado en un mecanismo catalítico, y a su validación mediante una base experimental suficientemente amplia. Los ensayos en fase líquida estuvieron destinados a obtener la información mínima requerida para la simulación, para la cual se empleó un modelo cinético disponible en la bibliografía, y no a la formación de un cuerpo experimental suficiente para realizar un estudio cinético.

A continuación se tratará en detalle la problemática resumida en los dos párrafos previos para cada una de las dos actividades centrales mencionadas.

Desarrollo de un Modelo Matemático de una Unidad Industrial de Purificación de 1-Buteno. Simulación de la Unidad Industrial.

En la bibliografía se han presentado modelos generales de reactores de lecho fijo con flujo bifásico en cocorriente descendente (e.g. Martínez *et al.*, 1994; Khadilkar *et al.*, 1999). No obstante, la formulación de un modelo basado en los fenómenos relevantes ocurrentes en un sistema industrial de hidrogenación selectiva de un corte de C_4 's, y su aplicación a la simulación matemática de la misma, no ha sido informado. Puede mencionarse como antecedente más cercano, afín al objetivo declarado, al trabajo de Vergel *et al.* (1995), en el cual se presenta un modelo de un reactor de hidrogenación selectiva de 1,3-butadieno aplicado a un equipo experimental. Dicho modelo describe el sistema de una manera elemental, sin desarrollar un análisis tendiente a fundamentar la validez de las simplificaciones

empleadas que permita extender su empleo de manera confiable.

En función de los antecedentes mencionados, se atendió a la primera necesidad de desarrollar y fundamentar el modelo requerido. Para ello, se realizó un estudio integral de los fenómenos ocurrientes a fin de identificar, en la complejidad del sistema, cuáles de ellos es esencial conservar para una adecuada representación del proceso y también, permitió definir una formulación cuya resolución numérica sea eficiente.

Durante la etapa del desarrollo del modelo se recurrió a información bibliográfica para adoptar el conjunto de expresiones cinéticas correspondientes a las reacciones globales del sistema ([Boitiaux et al.](#), 1985b), y para estimar sus parámetros cinéticos ([Vasudevan](#), 1982). Sin embargo, se concluyó que los datos cinéticos empleados no eran satisfactorios, pues no permitían extraer, de manera confiable, información cinética correspondiente a altas conversiones de 1,3-butadieno en presencia de un elevado contenido de 1-buteno, situación de gran importancia para evaluar la selectividad del proceso industrial.

Por tal motivo, se llevó a cabo un conjunto de experiencias de hidrogenación de 1,3-butadieno en presencia de 1-buteno en fase líquida que permitieron alcanzar las condiciones de interés mencionadas. Para la regresión de los datos experimentales obtenidos se mantuvo el mismo modelo cinético previamente referido ([Boitiaux et al.](#), 1985b).

Respecto de las impurezas acetilénicas cabe destacar que dada su adsorción preferencial sobre Pd, las mismas reaccionan hasta alcanzar una conversión completa sin dar lugar a la hidrogenación de diolefinas y olefinas, incidiendo mínimamente sobre la selectividad. En consecuencia, se consideró justificado incluir al 1-buteno como representante de los compuestos acetilénicos y emplear los parámetros cinéticos de la hidrogenación del mismo calculados a partir de mediciones reportadas en la bibliografía.

La información cinética reunida de esta manera fue satisfactoria a los fines de poner de manifiesto las tendencias de mayor relevancia del sistema simulado. Sin embargo, cabe reconocer que las experiencias propias realizadas no aportan información suficiente como para ser consideradas un estudio cinético, pues se limitaron a una única condición de temperatura, composición y presión de H₂.

Desarrollado el modelo del reactor y con la información cinética disponible, se prosiguió con el objetivo de llevar a cabo la simulación para analizar la influencia de las variables operativas y selectividad del catalizador sobre la performance del proceso, atendiendo especialmente a la selectividad del mismo.

Estudio Cinético de la Hidrogenación e Hidro-isomerización de 1-Buteno.

Una gran parte de la bibliografía revisada sobre hidrogenación e hidro-isomerización catalítica de 1-buteno, está enfocada a obtener conocimientos fundamentales de los siguientes aspectos: patrones de actividad y selectividad; relación entre el comportamiento catalítico y las propiedades de los metales; diseño, preparación y caracterización de catalizadores; sustento de los postulados mecanísticos; descripción de los estados adsorbidos de las especies superficiales; testeo de la actividad, selectividad y estabilidad de los materiales catalíticos (e.g. [Bond et al.](#), 1962; [Webb](#), 1979; [Boitiaux et al.](#), 1985a).

Los antecedentes más relevantes sobre estudios cinéticos, cuya información es de mayor utilidad para el objetivo de esta Tesis, se resumen a continuación.

Kripylo *et al.* (1975) estudiaron la hidrogenación de 1,3-butadieno en fase gaseosa sobre un catalizador comercial de Pd. A partir de la proposición de un mecanismo catalítico derivaron una expresión cinética del tipo Langmuir-Hinshelwood, y evaluaron los parámetros cinéticos de la misma. Esta información, restringida a la velocidad de consumo de 1,3-butadieno, fue obtenida en un rango de temperatura, **60 – 160 °C**, muy superior al habitual de los procesos industriales. Goetz *et al.* (1997) investigaron la hidrogenación de 1,3-butadieno sobre Pd a **0 °C**, determinando los parámetros cinéticos correspondientes a las reacciones del 1,3-butadieno y de los n-butenos cuyas expresiones fueron derivadas de un mecanismo de veintitrés etapas elementales y doce rutas. En este trabajo no se estudia la influencia de la temperatura y se empleó un catalizador de laboratorio. Boitiaux *et al.* (1985b) formularon un cuerpo de expresiones cinéticas para un esquema simplificado del conjunto de las reacciones de la **Figura In.1**, las cuales se fundamentan en conclusiones cualitativas obtenidas a partir de resultados de la hidrogenación de 1-buteno, 1,3-butadieno y 1-buteno en fase líquida presentados por Vasudevan (1982). Vergel *et al.* (1995) determinaron relaciones efectivas entre los parámetros de las expresiones propuestas por Boitiaux *et al.* (1985b) usando un catalizador comercial de Pd. Estas relaciones fueron obtenidas para una única temperatura, **40 °C**, y no se brinda información sobre coeficientes cinéticos individuales o constantes de adsorción.

La información provista en los estudios cinéticos mencionados en el párrafo anterior ha sido obtenida con una diversidad de materiales catalíticos, se refiere a reacciones aisladas de la **Figura In.1**, representadas por diversos modelos cinéticos, y corresponde a un conjunto disperso de condiciones, que en algunos casos se encuentran completamente fuera de las empleadas en la práctica industrial. Por otra parte, un ejercicio de discriminación de los diversos modelos propuestos no se encuentra disponible. En consecuencia, la reunión de estos datos cinéticos en un cuerpo unificado de reacciones vinculadas, tal como el presentado en la **Figura In.1**, no resulta factible.

Los antecedentes revisados motivaron iniciar la investigación del sistema estudiado con el objetivo de validar un modelo cinético, que incluya la totalidad de las reacciones, y determinar el conjunto de parámetros a partir de una base experimental amplia, correspondiente a condiciones próximas a las encontradas en la práctica industrial, empleando un catalizador comercial.

Se comenzó trabajando con 1-buteno como único reactivo inicial. De esta manera, fue posible estudiar de manera aislada del resto del sistema las reacciones de hidrogenación e hidro-isomerización entre los n-butenos. El estudio de este conjunto parcial de reacciones se debió a la necesidad de tratar un sistema de mayor sencillez en la etapa de diseño del equipo experimental. De haber empleado, por ejemplo, al 1,3-butadieno como reactivo inicial, además de la hidrogenación de la propia diolefina, se hubieran desarrollado las reacciones de los n-butenos (ver **Figura In.1**). Otra razón de importancia reside en el aspecto metodológico. Resulta apropiado llegar al modelado cinético del esquema completo de la **Figura In.1** incorporando dificultades a medida que se adquiere un mayor conocimiento del mismo.

Este estudio cinético forma parte de un plan experimental de mayor amplitud que deberá incluir como reactivos al 1-buteno y al 1,3-butadieno, el cual está fuera del alcance de esta Tesis, al cual podrá incorporarse directamente la información obtenida del conjunto de reacciones de los n-butenos.

Se estima que las contribuciones centrales de esta Tesis son el resultado del cumplimiento de los objetivos que se resumen a continuación.

En cuanto a la simulación de una unidad industrial de purificación de 1-buteno los objetivos planteados fueron:

- ♣ el desarrollo un modelo matemático del reactor industrial;
- ♣ el análisis de la performance del proceso, haciendo énfasis en la selectividad del mismo.

La investigación cinética del sistema de reacciones de la **Figura In.1** se inició estudiando en particular la hidrogenación e hidro-isomerización de los n-butenos en fase gaseosa sobre un catalizador comercial de Pd/Al₂O₃. Al respecto se propuso:

- ♣ obtener información cinética en un amplio rango de composición y temperatura;
- ♣ la elaboración de un modelo cinético y la determinación de sus parámetros.

ESTRUCTURA DE LA TESIS.

En la Primera Parte, que abarca los Capítulos I – IV, se desarrollará el análisis de la performance de un reactor industrial de purificación de 1-buteno mediante su simulación matemática.

El Capítulo I está destinado al análisis que condujo a la caracterización fundamental del modelo del reactor y adopción de las herramientas predictivas concernientes a la fluidodinámica del sistema, a los procesos de transporte de materia y transferencia de energía, y a la información cinética. Respecto de este último aspecto, se describen las experiencias de hidrogenación de 1,3-butadieno en presencia de 1-buteno y el análisis de los datos cinéticos recabados de la bibliografía, que permitieron definir el modelo cinético y evaluar sus parámetros.

En el Capítulo II se justificará y formulará el modelo empleado para el análisis de la performance de una unidad comercial de hidrogenación selectiva. En principio, se desarrollará un modelo riguroso cuya resolución condujo a un conjunto de resultados preliminares que permitieron la simplificación del mismo. Esta versión simplificada del modelo presenta una mayor eficiencia numérica sin pérdida de precisión, y permite una explicación conceptual más clara de los efectos observados en el estudio.

Los resultados del análisis de simulación se informarán y discutirán en el Capítulo III. Se estudió la performance del reactor en función del caudal de alimentación de H₂, contenido y composición de las impurezas en la alimentación, especificación de pureza y características del catalizador, atendiendo particularmente a la influencia de dichas variables sobre la selectividad.

En el Capítulo IV se presenta un estudio cuantitativo de la influencia de las limitaciones difusionales al transporte de materia en las interfaces líquido-vapor y líquido-sólido. A partir de estos resultados, se derivó un conjunto de expresiones sencillas que permiten evaluar la selectividad del reactor de purificación de manera analítica.

El estudio cinético de la hidrogenación e hidro-isomerización catalítica de los n-butenos en fase vapor comprende la Segunda Parte, Capítulos V – VIII.

El Capítulo V atañe a los aspectos experimentales del estudio cinético llevado a cabo en esta Parte de la Tesis: resultados exploratorios, diseño del equipo y del protocolo experimental.

La presentación y discusión de los resultados experimentales se realizará en el Capítulo VI. En este Capítulo se destacarán, de manera cualitativa, las tendencias observadas de mayor relevancia a los fines de definir el modelo cinético.

En el Capítulo VII se formulará el modelo empleado en la regresión de los datos experimentales, cuya explicación se realizará en tres niveles de análisis: el nivel del sitio catalítico, el nivel de la pastilla de catalizador, y la incorporación de los resultados obtenidos en los dos niveles previos a los balances de materia en el reactor experimental. Respecto del primer nivel de análisis, se adelanta que se propondrán dos mecanismos catalíticos, a partir de los cuales se derivarán dos modelos cinéticos intrínsecos. El nivel de la pastilla catalítica implica la resolución de las ecuaciones de conservación en el interior de la misma. A tal fin, se recurrió, en primer lugar, a normalizar la pastilla de catalizador de manera tal de resolver ecuaciones de conservación unidimensionales. Luego, se analizaron las características del sistema de manera tal de definir el modelo de transporte interno de materia.

El objetivo del Capítulo VIII es exponer los resultados del análisis de regresión de los datos experimentales. Con base en un análisis estadístico de discriminación, se procederá a justificar la selección de uno de los dos modelos cinéticos propuestos. Finalmente, el análisis de resultados se centrará en las estimaciones óptimas de los datos experimentales y de los parámetros cinéticos correspondientes al modelo cinético más probable.