

# **PREDICCIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR QUÍMICO ADIABÁTICO DE LECHO FIJO UTILIZADO EN LA HIDRODESULFURACIÓN DE FRACCIONES DE PETRÓLEO**

## **PREDICTION OF BEHAVIOR OF A FIXED BED CHEMICAL ADIABATIC REACTOR USED IN THE HYDRODESULFURIZATION OF PETROLEUM FRACTIONS**

**Ignacio Elizalde-Martínez<sup>1\*</sup>, Ma. del Carmen Monterrubio-Badillo<sup>1</sup>, Ninfa Casillas-Reyes<sup>1</sup>,  
Saraí Reyes-Carballo<sup>1</sup>, Ma. del Pilar Bremauntz-Michavila<sup>2</sup>, Román Ramírez-López<sup>3</sup>**

(1) Instituto Politécnico Nacional, Centro Mexicano para la Producción más Limpia. Av. Acueducto s/n, La Laguna Ticomán, 07340 Ciudad de México - México

(2) Instituto Politécnico Nacional, Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología. Av. Acueducto s/n, La Laguna Ticomán, 07340 Ciudad de México - México

(3) Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas. Av. Instituto Politécnico Nacional s/n, Zacatenco, 07738 Ciudad de México - México

\*autor de contacto (e-mail: ielizaldem@gmail.com)

*Recibido: 19/06/2018 - Evaluado: 14/08/2018 - Aceptado: 31/08/2018*

### **RESUMEN**

Se desarrolló un modelo de un reactor de lecho fijo adiabático para la hidrodeshulfuración de fracciones de petróleo. Se utilizaron balances de materia y energía y correlaciones de la literatura para estimar las propiedades involucradas. Los parámetros cinéticos, así como condiciones típicas de operación a gran escala se tomaron de referencias previas. Se observó que los resultados del perfil de temperaturas obtenido utilizando el modelo riguroso fue ligeramente diferente a modelos en los cuales se ignoró la contribución de la corrección por presión de la capacidad calorífica, así como utilizando un factor de efectividad promedio, aunque la mayor diferencia relativa entre temperaturas calculada con esas aproximaciones fue menor al 1%.

### **ABSTRACT**

A model of an adiabatic fixed bed reactor for the hydrodesulfurization of petroleum fractions was developed. Material and energy balances and correlations of the literature were used to estimate the properties involved. The kinetic parameters as well as typical large scale operating conditions were taken from previous reports. It was observed that the results of the temperature profile obtained using the rigorous model were slightly different to models in which the contribution of pressure correction of the calorific capacity was ignored as well as using an average effectiveness factor, although the largest relative difference between temperatures calculated with those approaches was less than 1%.

Palabras clave: modelación, perfiles de concentración, balance de energía, perfil de temperaturas  
Keywords: modeling, concentration profiles, energy balance, temperature profile

## INTRODUCCIÓN

La hidrodesulfuración (HDS) es el proceso de remoción de azufre del petróleo utilizando un catalizador selectivo, a condiciones severas de presión, temperatura y espacio velocidad del líquido (LHSV) con adición de hidrógeno en exceso (Shafik & Speight, 2016).

Varios aspectos de la HDS se han estudiado y reportado en la literatura científica, dentro de los cuales la modelación matemática del proceso reviste de gran importancia. Los modelos de reactores permiten no solo obtener información de la cinética de las reacciones, sino sirven además para predecir el comportamiento del reactor a diferentes escalas (Mederos *et al.*, 2009). Particularmente el escalamiento hacia sistemas reaccionantes de dimensiones industriales es una necesidad, con la finalidad de realizar estudios de factibilidad económica principalmente, basados en resultados a escala piloto o escalas menores (Bellos *et al.*, 2005; Srinivas *et al.*, 2013).

Los balances de materia de reactores de HDS han sido reportados en varias contribuciones mientras que el balance de energía ha sido poco estudiado (Mederos *et al.*, 2009). En algunas contribuciones dicho balance se utiliza con referencia a trabajos previos sin mayor discusión del mismo (Jiménez *et al.*, 2007; Patil *et al.*, 2017); en otros casos se utilizan simuladores de procesos comerciales sin atender realmente la modelación sino solo los resultados de la simulación (Sbaaei & Ahmed, 2018). En el balance de energía, uno de los principales problemas es el cálculo de la capacidad calorífica la cual en varias contribuciones se ha modelado con correlaciones simples, mientras que las expresiones más robustas no se han explorado (ver por ejemplo McKetta & Cunningham, 1990; Fooladi *et al.*, 2014; Patil *et al.*, 2017). Otro factor importante para considerar son los perfiles intrapartícula de la concentración de compuestos de azufre, asimismo los factores de efectividad, los cuales en varios casos se consideran constantes, agrupándose junto con el coeficiente de rapidez intrínseca de reacción, lo cual no es una aproximación rigurosa.

En esta contribución, el propósito fue modelar el desempeño de un reactor de HDS a escala industrial, se utilizaron los datos cinéticos, así como las propiedades fisicoquímicas de la carga y el catalizador reportados por Korsten y Hofmann (1996); se utilizaron correlaciones reportadas en la literatura, tomando la mayoría de ellas de su fuente original, para determinar las propiedades termodinámicas y de transporte. Se usó además el balance de energía para obtener el perfil de temperaturas para representar la operación a gran escala, basándose en ecuaciones de estado para el cálculo de la capacidad calorífica residual de gases y líquidos, tomando en consideración el efecto de la presión, así como la variación del factor de efectividad a lo largo de lecho catalítico debido a la dinámica de las reacciones químicas.

## MODELO DEL REACTOR

### *Balances de materia y energía*

En esta sección se describen las expresiones de los balances de materia y energía empleados en la modelación del reactor de lecho fijo a gran escala, asumiendo el comportamiento tanto de la fase gas como líquida como flujo pistón, además del equilibrio térmico entre fases.

La expresión del balance de materia de los compuestos volátiles en la fase gas ( $G$ ) a lo largo del reactor está dada por:

$$\frac{u_G}{RT} \frac{dp_i^G}{dz} + k_i^L a_L \left( \frac{p_i^G}{H_i} - c_i^L \right) = 0, \quad i=H_2, H_2S \quad (1)$$

Donde el primer término de la ecuación (1) es el convectivo y el segundo es debido a la transferencia de materia entre las fases gas y líquida. (La notación para cada variable en esta expresión y las subsecuentes se describe en la sección Nomenclatura)

El balance de materia para los componentes volátiles en la fase líquida en el reactor ( $L$ ) se describe con la ecuación (2), en la cual el primer término es el convectivo, el segundo se debe al transporte gas-líquido y el último para el transporte líquido-sólido.

$$u_L \frac{dc_i^L}{dz} - k_i^L a_L \left( \frac{p_i^G}{H_i} - c_i^L \right) + k_i^S a_S (c_i^L - c_i^S) = 0, \quad i=H_2, H_2S \quad (2)$$

Los compuestos orgánicos sulfurados en la fase líquida se pueden modelar de la manera siguiente:

$$u_L \frac{dc_s^L}{dz} + k_s^S a_S (c_s^L - c_s^S) = 0 \quad (3)$$

En la ecuación (3) se han agrupado los distintos compuestos de azufre en uno solo. El primer término de nuevo refleja la parte convectiva y el segundo el transporte líquido-sólido (en la superficie de este último).

El flujo de materia a través de la película alrededor de la partícula catalítica es igual a su consumo en estado estacionario, lo cual se puede representar de la siguiente manera (Korsten & Hofmann, 1996):

$$k_i^S a_S (c_i^L - c_i^S) = -v_i \rho_b \zeta \eta r_c, \quad i=H_2, H_2S, S \quad (4)$$

Mientras que el balance de materia en el interior de las partículas catalíticas en coordenadas esféricas está dado por:

$$\frac{4}{\varepsilon_P d_P^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 D_e \frac{dc_s^S}{dr} \right) = r_c \frac{\rho_P}{\varepsilon_P} \quad (5)$$

El balance de energía en el reactor permite obtener el perfil de temperaturas en el líquido, el cual en su forma diferencial está dado por:

$$\frac{dT^L}{dz} = \frac{\varepsilon_L \Delta H r_c}{u_G \rho_G c_{PG} \varepsilon_G + u_L \rho_L c_{PL} \varepsilon_L} \quad (6)$$

El conjunto de condiciones iniciales para las ecuaciones diferenciales (1-3, 6) es:

$$c_s^L(z=0) = c_s^{L,0} \quad (7)$$

$$P_{H_2}^G(z=0) = P_{H_2}^{G,0} \quad (8)$$

$$P_{H_2S}^G(z=0) = 0 \quad (9)$$

$$T^L(z=0) = T_0^L \quad (10)$$

En los cuales el superíndice/subíndice  $0$  hace referencia a las condiciones de entrada al reactor.

Para el balance de materia en la partícula catalítica se tienen las condiciones siguientes (Fogler, 2006):

$$C_s = C_s^S \text{ en } r = R_p \quad (11)$$

$$\frac{dC_s}{dr} = 0 \text{ en } r = 0 \quad (12)$$

### Correlaciones para la estimación de propiedades

Las ecuaciones diferenciales que sirven para el modelo del reactor involucran una serie de propiedades, las cuales es necesario estimar. Las propiedades termodinámicas y de transporte se determinaron con las siguientes correlaciones (Tabla 1) reportadas en la literatura (Korsten & Hofmann, 1996; Mederos *et al.*, 2009).

Tabla 1: Correlaciones para la estimación de propiedades termodinámicas y transporte utilizadas en la simulación del reactor catalítico de HDS.

Propiedad	Correlación
Coefficiente de Henry	$H_i = \frac{v_N}{\lambda_i \rho_L} \quad i = H_2, H_2S$
Coefficiente de transferencia de masa gas-líquido	$\frac{k_i^L a_L}{D_i^L} = \alpha_1 \left( \frac{G_L}{\mu_L} \right)^{\alpha_2} \left( \frac{\mu_L}{\rho_L D_i^L} \right)^{1/2}$
Coefficiente de transferencia de masa líquida – superficie de catalizador	$\frac{k_i^S}{D_i^L a_S} = 1.8 \left( \frac{G_L}{a_S \mu_L} \right)^{1/2} \left( \frac{\mu_L}{\rho_L D_i^L} \right)^{1/3}$
Densidad del petróleo	$\rho_L(P, T) = \rho_0 + \Delta\rho_P - \Delta\rho_T$ $\Delta\rho_P = \left[ 0.167 + 16.181 * 10^{-0.0425\rho_0} \right] \left[ \frac{P}{1000} \right]$ $- 0.01 \left[ 0.299 + 263 * 10^{-0.0603\rho_0} \right] \left[ \frac{P}{1000} \right]^2$ $\Delta\rho_T = \left[ 0.0133 + 152.4(\rho_0 + \Delta\rho_P)^{-2.45} \right] (T - 520)$ $- \left[ 8.1 * 10^{-6} - 0.0622 * 10^{-0.764(\rho_0 + \Delta\rho_P)} \right] (T - 520)^2$
Solubilidad del H <sub>2</sub> en el hidrocarburo líquido	$\lambda_{H_2} = -0.559729 - 0.42947 * 10^{-3} T + 3.07539 * 10^{-5} \frac{T}{\rho_{20}}$ $+ 1.94593 * 10^{-6} T^2 + 0.835783 \frac{1}{\rho_{20}^2}$
Solubilidad de H <sub>2</sub> S	$\lambda_{H_2S} = \exp(3.3670 - 0.00847T)$
Viscosidad dinámica del líquido	$\mu_L = 3.141 * 10^{10} (T - 460)^{-3.444} [\log_{10}(API)]^a$ $a = 10.313 [\log_{10}(T - 460)] - 36.447$
Difusividad	$D_i^L = 8.93 * 10^{-8} \frac{v_L^{0.267} T}{v_i^{0.433} \mu_L}$
Volumen molar	$v_i^* = 0.285 v_C^{1.048}$ $v_C = 7.5214 * 10^{-3} T_{MeABP}^{0.2896} s g_{15.6}^{-0.7666}$

Para calcular la capacidad calorífica del líquido se empleó la ecuación (13) (Poling *et al.*, 2001):

$$C_p = C_p^0 - \Delta C_p \quad (13)$$

Donde  $C_p^0$  es la capacidad calorífica del líquido a baja presión y  $\Delta C_p$  es la capacidad calorífica residual, que es una corrección debido a la presión de operación.

El primer término del lado derecho de la ecuación (13) está dado por (Kesler & Lee, 1976; API, 1997):

$$C_p^0 = 420(A_1' + A_2'T + A_3'T^2) \quad (14)$$

Donde  $A_1'$ ,  $A_2'$  y  $A_3'$  se obtienen de las siguientes ecuaciones (15-17):

$$A_1' = -4.90383 + (0.099319 + 0.104281sg)K_w + \frac{4.81407 - 0.194833K_w}{sg} \quad (15)$$

$$A_2' = 10^{-4} \left[ (7.53624 + 6.214610K_w) \left( 1.12172 - \frac{0.27634}{sg} \right) \right] \quad (16)$$

$$A_3' = -10^{-7} \left[ (1.35652 + 1.11863K_w) \left( 2.9027 - \frac{0.70958}{sg} \right) \right] \quad (17)$$

La capacidad calorífica residual del petróleo está dada, de acuerdo con Lee & Kesler (1975), por:

$$\left( \frac{C_p^0 - C_p}{R} \right) = \left( \frac{C_p^0 - C_p}{R} \right)^{(0)} + \omega \left( \frac{C_p^0 - C_p}{R} \right)^{(1)} \quad (18)$$

Donde:

$$\left( \frac{C_p^0 - C_p}{R} \right)^{(i)} = 1 + \frac{T_r \left( \frac{\partial P_r}{\partial T_r} \right)_{V_r}^2}{\left( \frac{\partial P_r}{\partial V_r} \right)_{T_r}} + \left( \frac{\Delta \bar{C}_V}{R} \right)^{(i)} \quad (19)$$

Todas las derivadas involucradas se expresan explícitamente, de acuerdo con el manual API Technical Data Book (API, 1997) y el procedimiento de Lee & Kesler (1975).

La expresión del factor de compresibilidad de Lee & Kesler (1975), se utiliza para determinar el volumen reducido de la mezcla líquida de hidrocarburos. Dicha expresión está dada por:

$$z^* = 1 + \frac{B}{V_r} + \frac{C}{V_r^2} + \frac{D}{V_r^5} + \frac{c_4}{T_r^3 V_r^2} \left( \beta + \frac{\gamma}{V_r^2} \right) \exp \left( -\frac{\gamma}{V_r^2} \right) \quad (20)$$

Para el cálculo de la densidad del hidrógeno a cualquier condición de presión y temperatura, se utilizó la ecuación de estado de Peng-Robinson (Peng & Robinson, 1976).

La capacidad calorífica del hidrógeno a condiciones de reacción se determinó mediante su contribución ideal y la corrección por presión de la siguiente manera:

$$\Delta C_{PH} = \int_{\infty}^v T \left( \frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right) dv - T \frac{(\partial P / \partial T)^2}{\partial P / \partial v} - R \quad (21)$$

Donde:

$$\int_{\infty}^v T \left( \frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right) dv = T \left( \frac{a_c \kappa}{2T_c^2 \sqrt{T_c^3}} [1 + \kappa] \right)^2 \frac{1}{2b\sqrt{2}} \ln \left( \frac{v - b(1 + \sqrt{2})}{v - b(1 - \sqrt{2})} \right) \quad (22)$$

### *Solución del sistema de ecuaciones diferenciales*

Se utilizó una concentración inicial de 3% en peso de azufre en la carga, una temperatura de entrada al reactor de 380°C, presión de 8.0 MPa, relación hidrógeno-hidrocarburo de 8000 pie<sup>3</sup> H<sub>2</sub> /barril petróleo a condiciones estándar de presión y temperatura y LHSV de 1.5 h<sup>-1</sup>. Las dimensiones del lecho a nivel industrial fueron diámetro de 100 cm y longitud de 500 cm. Los parámetros cinéticos se tomaron de Korsten y Hofmann (1996).

Los valores de las concentraciones iniciales en la superficie del catalizador a la entrada del reactor se propusieron de 1X10<sup>-5</sup> mol/cm<sup>3</sup> para el azufre, hidrógeno y H<sub>2</sub>S, respectivamente con la finalidad de encontrar la convergencia de la solución. El valor inicial del coeficiente de compresibilidad de la ecuación de Peng-Robinson para el hidrógeno fue de 1.0 mientras que para el volumen molar del líquido (ecuación 20) se utilizó un valor de 0.5. El tamaño de paso para la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales fue de 1 cm; para la resolución de la ecuación (5) se utilizó el método de colocación ortogonal. El factor de efectividad calculado se actualizó en cada paso de la integración, asimismo el resto de las propiedades que dependen de la posición en el reactor.

## **DISCUSIÓN Y ANÁLISIS DE RESULTADOS**

En la Figura 1 se observan los perfiles de concentración de los compuestos de azufre como una función de la posición axial del reactor. A la salida del reactor la concentración de este contaminante es prácticamente nula. En la escala del lado izquierdo de la misma figura se observa el perfil de concentraciones de sulfuro de hidrógeno. La concentración de este compuesto se incrementa llegando a un límite aparente a la salida del reactor y ello se debe, al igual que la concentración del azufre en fase líquida, al agotamiento de los compuestos de azufre debido a la reacción de *HDS*.

La distribución de la concentración adimensional de compuestos de azufre ( $\psi_s$ ) en el interior de la partícula catalítica como función de la coordenada radial ( $\xi$ ) y la coordenada axial del lecho catalítico ( $z$ ) se muestra en la Figura 2. Se observa que a la entrada del reactor el perfil de concentraciones adimensional de compuestos de azufre en la partícula es más pronunciado y posteriormente se distribuye mejor en compuesto generando un perfil menos curvo, lo cual se debe a la mejor transferencia de masa en esta sección del lecho catalítico (intervalo de entre 0-50 cm); posteriormente la composición hacia el interior de la partícula comienza a disminuir afectando el factor de efectividad. Un hecho relevante es que no se ha encontrado el reporte de la variación de la concentración intrapartícula de compuestos de azufre orgánico en partículas catalíticas y del lecho del reactor como el estudiado en esta contribución, aunque basados en resultados del factor de efectividad referidos más abajo, se puede validar dicho comportamiento.

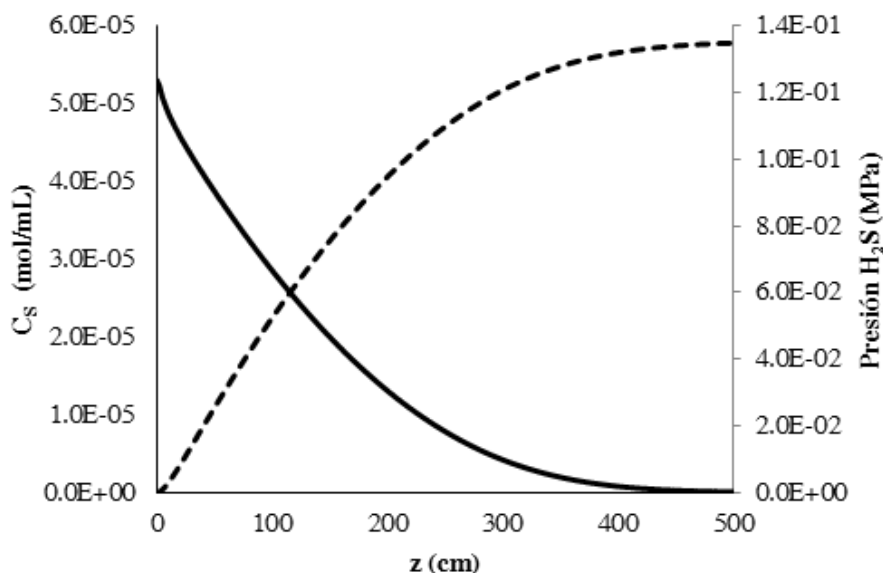


Fig. 1: Perfiles de concentración de compuestos de azufre en la fase líquida (—) y del  $H_2S$  en la fase gas (- - -)

A la salida del reactor el perfil intrapartícula se vuelve más pronunciado cerca de la superficie externa del catalizador y en los 500 cm ya no cambia apreciablemente dicha distribución. Otros perfiles (no mostrados) como para la presión parcial del  $H_2$  y su concentración en el líquido, producto de la simulación, coinciden con reportes previos (Liu *et al.*, 2008; Novaes *et al.*, 2017).

Una gráfica del factor de efectividad a lo largo del lecho catalítico se muestra en la Figura 3. Se observa adicionalmente que cerca de la entrada y hasta alrededor de 300 cm de lecho el factor de efectividad permanece relativamente alto, disminuyendo de manera pronunciada hacia la salida del lecho, debido a la disminución de la concentración de compuestos de azufre y por lo tanto de su mayor dificultad de difusión hacia el interior de la partícula catalítica. Feng *et al.* (2018), reportó un intervalo de variación del factor de efectividad entre 0.5 a 0.8 para intervalos de LHSV de 0.20 a 0.40  $h^{-1}$ , lo cual es cercano a lo reportado en esta contribución, sin embargo, en el trabajo no se determinó el valor de  $\eta$  como una función de la longitud del lecho catalítico.

En la Figura 4 se muestra el perfil de temperaturas de la fase líquida en el reactor, lo cual es típico de la primera sección de un reactor de HDS en un reactor de dos o más lechos (Bellos *et al.*, 2005). Se puede apreciar que después de los 300 cm la tasa de variación de la temperatura es menor y ello se debe primordialmente a la menor generación de calor debido a la reacción, ya que ésta es cada vez menor debido a la menor disponibilidad de los reactivos. Cerca de la salida del reactor los cambios en la temperatura son casi imperceptibles y ello coincide con los perfiles de concentración de los compuestos de azufre mostrados en la Figura 1.

Para determinar el efecto de la presión en la capacidad calorífica del líquido en una simulación posterior se omitió la corrección por presión. Se halló que la máxima diferencia absoluta entre la temperatura calculada con y sin corrección fue menor que 0.05% en todo el lecho catalítico, por lo cual se concluye que no es marcada la corrección por presión para el  $C_p$  del líquido. En el caso del hidrógeno, al ignorar la corrección de su capacidad calorífica por presión se encontró asimismo un efecto aún menor sobre el perfil de temperaturas por lo cual se puede afirmar que en estas condiciones no es necesario considerar el término  $\Delta C_{pH}$ .

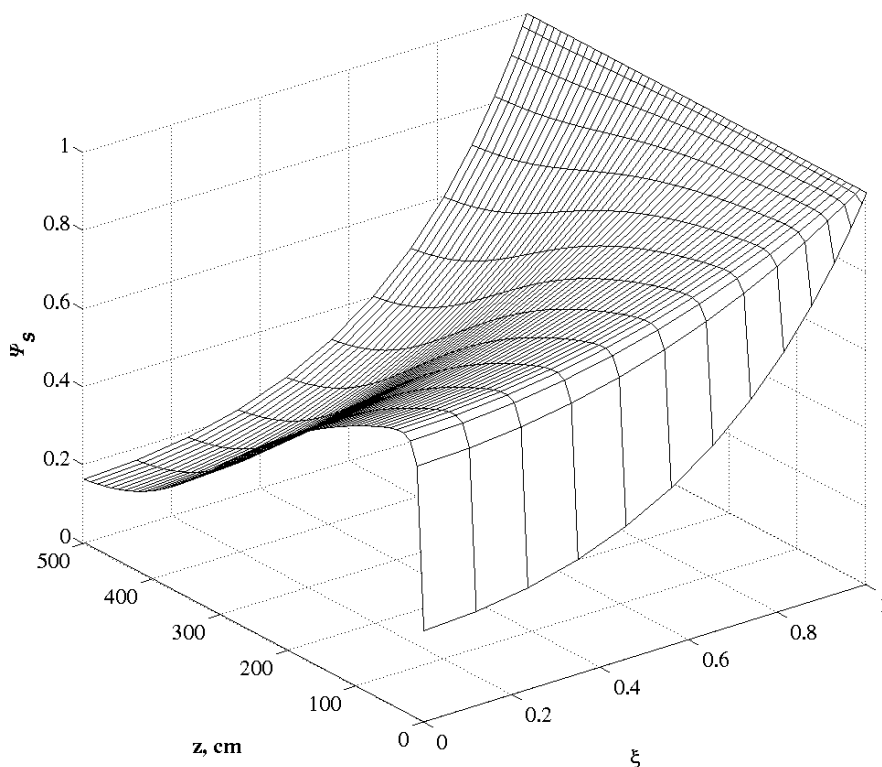


Fig. 2: Evolución de la concentración adimensional de compuestos de azufre en el interior de la partícula catalítica como función de la posición axial en el reactor

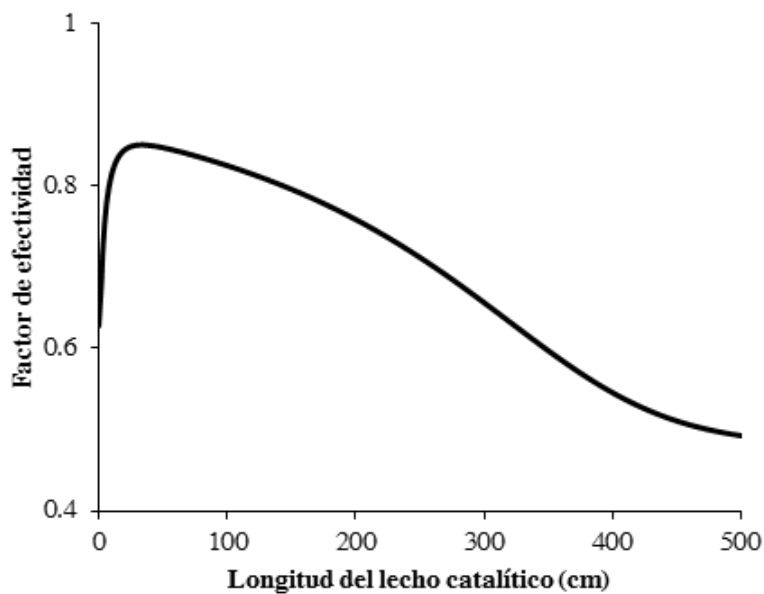


Fig. 3: Variación del factor de efectividad a lo largo del lecho catalítico.



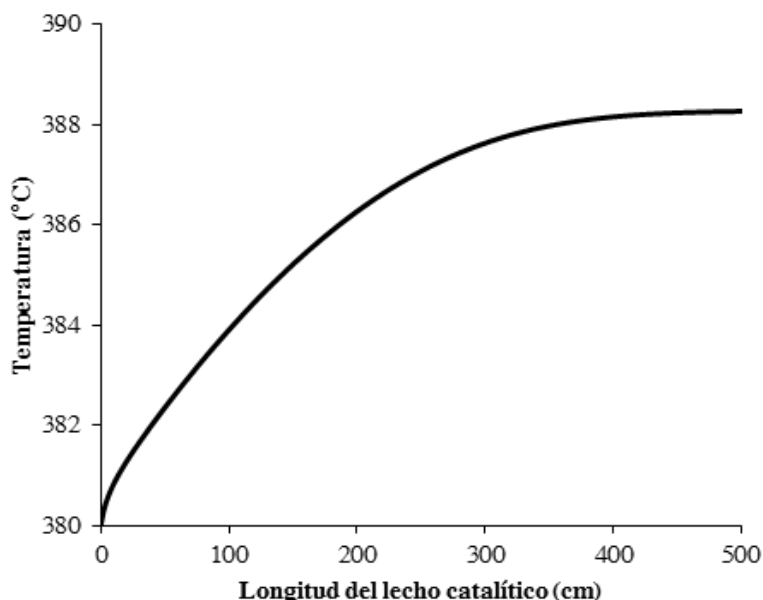


Fig. 4: Perfil de temperaturas en el reactor

Para concluir el estudio se tomó un valor medio del factor de efectividad determinado a partir de la Fig. 3 de la siguiente manera:

$$\bar{\eta} = \frac{\int_0^{500} \eta dz}{\int_0^{500} dz} \quad (22)$$

Con dicho valor se realizó de nuevo la predicción del perfil de temperaturas en el reactor manteniendo las otras condiciones sin cambio. Se encontró que el valor medio utilizado es representativo ya que la máxima diferencia porcentual en temperaturas fue menor del 1% a lo largo de todo el lecho catalítico, aunque sí afecta a esta variable.

Es necesario acotar que la poca variación encontrada con y sin correcciones por presión a la capacidad calorífica no tuvieron un efecto marcado en el perfil de temperatura para las condiciones a las cuales se efectuó la simulación y utilizando los parámetros reportados, pero eso no implica que para otro conjunto de parámetros se cumpla lo anterior, por lo cual la utilización del modelo en su forma rigurosa debe ser la primera elección para la modelación.

## CONCLUSIONES

El balance de energía en el reactor TBR junto con los balances de materia permitieron hallar el perfil de temperaturas a lo largo del lecho catalítico del reactor de HDS simulado y para los parámetros utilizados en la simulación, el efecto de la presión sobre la capacidad calorífica del líquido y el gas no afectó prácticamente dicho perfil, aunque de manera indirecta sí tiene influencia, ya que al utilizarse una presión parcial alta de hidrógeno ello permite mantener su concentración en exceso en la fase líquida permitiendo a su vez que la rapidez de reacción se mantenga también alta reduciendo el contenido de azufre con alta tasa al paso de la corriente líquida en el reactor, y asimismo generando calor debido a la conversión. La máxima diferencia relativa entre temperaturas calculadas de manera rigurosa y las alternativas planteadas no excedió el 1%.

## NOMENCLATURA

$A'_i$	Constantes de Lee-Kesler para el cálculo del $C_p$ del líquido a baja presión
$a$	Parámetro de la correlación de la viscosidad del líquido
$a_c$	Parámetro de atracción en la ecuación de Peng-Robinson
$API$	Gravedad API
$a_s$	Área superficial de las partículas catalíticas
$B$	Coefficiente de la ecuación (20)
$b$	Co-volumen de van der Waals
$C$	Coefficiente de la ecuación (20)
$c_4$	Coefficiente de la ecuación (20)
$c_i^L$	Concentración del compuesto $i$ en la fase líquida
$c_i^S$	Concentración del compuesto $i$ en la superficie de la fase sólida
$C_{PG}$	Capacidad calorífica de la fase gas a condiciones de reacción
$C_p$	Capacidad calorífica a condiciones de reacción
$C_p^0$	Capacidad calorífica a baja presión
$c_s$	Concentración de compuestos de azufre en la fase líquida
$D$	Coefficiente de la ecuación (20)
$D_i^L$	Coefficiente de difusión de $i$ en el líquido
$D_e$	Difusividad efectiva
$d_p$	Diámetro de partícula equivalente
$G_L$	Velocidad superficial másica del líquido
$H_2$	Hidrógeno
$H_2S$	Sulfuro de hidrógeno
$H_i$	Coefficiente de Henry
$k_i^L a_L$	Coefficiente de transferencia de masa gas-líquido
$k_i^L a_S$	Coefficiente de transferencia de masa líquido-sólido
$K_W$	Factor de caracterización de Watson
$P$	Presión de operación
$p_i^G$	Presión parcial del compuesto $i$ en la fase gas
$P_r$	Presión reducida
$R$	Constante de los gases
$R_p$	Radio equivalente de la partícula catalítica
$r$	Coordenada radial
$r_c$	Rapidez de reacción
$sg$	Gravedad específica
$T$	Temperatura de operación
$T^L$	Temperatura de la fase líquida
$T_c$	Temperatura crítica
$T_{MeABP}$	Temperatura normal de ebullición promedio del líquido
$T_r$	Temperatura reducida
$u_G$	Velocidad del gas en el reactor
$u_L$	Velocidad del líquido en el reactor
$V_r$	Volumen molar reducido del líquido
$z$	Coordenada axial del reactor tubular
$z^*$	Factor de compresibilidad
<i>Letras griegas</i>	
$\beta$	Parámetro de la ecuación (20)
$\gamma$	Parámetro de la ecuación (20)
$\Delta C_{pH}$	Capacidad calorífica residual del hidrógeno a presión constante

$\Delta C_{pL}$	Capacidad calorífica residual del líquido a presión constante
$\Delta \bar{C}_V$	Capacidad calorífica residual del líquido a volumen constante
$\Delta H$	Entalpía de reacción
$\Delta \rho_P$	Variación de la densidad del líquido con la presión
$\Delta \rho_T$	Variación de la densidad del líquido con la temperatura
$\varepsilon_G$	Fracción volumen del gas
$\varepsilon_L$	Fracción volumen del líquido
$\varepsilon_P$	Porosidad de la partícula
$\zeta$	Relación de dilución de las partículas catalíticas con material inerte
$\eta$	Factor de efectividad
$\bar{\eta}$	Factor de efectividad promediado a lo largo de lecho catalítico
$\kappa$	Parámetro dependiente del factor acéntrico en la ecuación de Peng-Robinson
$\lambda_i$	Coefficiente de solubilidad del gas $i$ en el petróleo
$\mu_L$	Viscosidad dinámica del líquido
$\rho_0$	Densidad del líquido a condiciones estándar
$\rho_b$	Densidad del lecho catalítico
$\rho_G$	Densidad másica del gas a condiciones de reacción
$\rho_L$	Densidad másica del líquido a condiciones de reacción
$\rho_P$	Densidad de las partículas catalíticas
$\nu$	Variable volumen en la ecuación de Peng-Robinson
$\nu_c$	Volumen crítico
$\nu_i$	Número estequiométrico
$\nu_i^*$	Volumen molar del compuesto $i$
$\nu_N$	Volumen de una mol de gas a condiciones estándar de presión y temperatura
$\omega$	Factor acéntrico
$\xi$	Posición radial adimensional en la partícula catalítica ( $r/R_p$ )
$\Psi_S$	Concentración adimensional de compuestos de azufre dentro de la partícula catalítica ( $c_S/c_S^S$ )

## AGRADECIMIENTOS

I. Elizalde agradece al Instituto Politécnico por el apoyo proporcionado para el desarrollo del presente trabajo a través del Proyecto SIP 20180385. Asimismo, al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el apoyo brindado a través del proyecto CONACYT 0274276.

## REFERENCIAS

1. API-American Petroleum Institute (1997). *Technical Data Book, Petroleum Refining: English edition*. Washington.
2. Bellos, G.D., Kallinikos, L.E., Gounaris, C.E. & Papayannakos, N. G. (2005). Modelling of the performance of industrial HDS reactors using a hybrid neural network approach. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 44 (5), 505-515.
3. Feng, X., Li, D., Li, W., Chen, J., Niu, M., Liu, X., *et al.* (2018). Kinetic parameter estimation and simulation of trickle-bed reactor for hydrodesulfurization of whole fraction low-temperature coal tar. *Fuel*, 230, 113-125.
4. Fogler, H.S. (2006). *Elements of chemical reaction engineering*. New York: Prentice Hall, pág. 825.
5. Fooladi Toosi, A., Samie, M.S., Dashti, A. & Atarian Shandiz, M. (2014). Simulation of a non-isothermal industrial hydrotreating reactor using simulink. *Energy Fuels*, 28 (7), 4828-4834.

6. Jiménez, F., Kafarov, V. & Nuñez, M. (2007). Modeling of industrial reactor for hydrotreating of vacuum gas oils. *Chemical Engineering Journal*, 134 (1), 200-208.
7. Kesler, M.G. & Lee B.I. (1976). Improve Prediction of Enthalpy Fractions. *Hydrocarbon Processing*, 55 (3), 153-158.
8. Korsten, H. & Hofmann, U. (1996). Three-phase reactor model for hydrotreating in pilot trickle-bed reactors. *AIChE J.*, 42 (5), 1350-1360.
9. Lee, B.I. & Kesler, M.G.A. (1975). Generalized thermodynamic correlation based on three-parameter corresponding states. *AIChE J.*, 21, 510-527.
10. Liu, Z., Zheng, Y., Wang, W., Zhang, Q. & Jia, L. (2008). Simulation of hydrotreating of light cycle oil with a system dynamics model. *Applied Catalysis A, General*, 339 (2), 209-220.
11. McKetta, J.J. & Cunningham, W.A. (1990). *Encyclopedia of chemical processing and design*. New York: Marcel Dekker Inc., pág. 61.
12. Mederos, F.S., Elizalde, I. & Ancheyta, J. (2009). Steady-state and dynamic reactor models for hydrotreatment of oil fractions: A review. *Catalysis Reviews*, 51 (4), 485-607.
13. Novaes, L. d. R., de Resende, N.S., Salim, V.M.M. & Secchi, A. R. (2017). Modeling, simulation and kinetic parameter estimation for diesel hydrotreating. *Fuel*, 209, 184-193.
14. Patil, R.C., Patra, P., Gupta, A. & Das, A. (2017). Effect of reactor configuration on performance of vacuum gas oil (VGO) hydrotreater: Modelling studies. *Computers and Chemical Engineering*, 104, 89-106.
15. Peng, D. & Robinson, D. (1976). A new two-constant equation of state. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15 (1), 59-64.
16. Poling, B.E., Prausnitz, J.M. & O'Connell, J.P. (2001). *The properties of gases and liquids*. New York: McGraw-Hill, Chapter 6.
17. Sbaaei, E.S. & Ahmed, T.S. (2018). Predictive modeling and optimization for an industrial coker complex hydrotreating unit – development and a case study. *Fuel*, 212, 61-76.
18. Shafik, N. & Speight, J.G. (2016). *Handbook of refinery desulfurization*. London: CRC Press, Chapter 1.
19. Srinivas, B., Karthik, S. & Sankararao, B. (2013). Optimization of trickle-bed reactors (TBRs) for hydrodesulfurization (HDS) and hydrodearomatization (HDA) of diesel using single and multiple objectives. *Chemical Product and Process Modeling*, 8 (2), 93-106.