

Apéndices

Apéndice A. Consulta en bases de datos académicas

Para la búsqueda y recopilación de información relevante en este trabajo, se utilizaron diversas bases de datos científicas y académicas. A continuación, se describe el proceso general de consulta en cada una de ellas:

Tabla 10

Metodología de consulta en bases de datos

Bases de datos	Definición	Modo de acceso	Estrategia de búsqueda
Google Scholar (Google Académico)	Google Scholar es un motor de búsqueda enfocado en la literatura académica. La consulta se realizó mediante ecuaciones de búsqueda, es decir, palabras clave y operadores booleanos (AND, OR, NOT).	Disponible de forma gratuita en scholar.google.com	No se utilizaron filtros por año, en cambio, se ordenó por relevancia o número de citas.
ScienceDirect	ScienceDirect es una plataforma de Elsevier que proporciona acceso a artículos científicos revisados por pares.	A través de la biblioteca virtual de la Universidad Industrial de Santander en www.sciencedirect.com	Uso de las ecuaciones de búsqueda en el campo de búsqueda avanzada, aplicando filtros como tipo de publicación (“Review articles” “Research articles”) y disciplina (“Chemical Engineering”)
American Chemical Society (ACS)	ACS es una de las fuentes más relevantes en cuanto a publicaciones en química, ingeniería química y ciencia de materiales.	A través de la biblioteca virtual de la Universidad Industrial de Santander en pubs.acs.org	Uso de ecuaciones de búsqueda, además de filtros por tipo de publicación (“Article” “Review”) y por campo de estudio (“Kinetics, Catalysis and Reaction Engineering”).
Springer	Springer es una de las principales bases de datos interactivas, en los campos de las ciencias, la técnica, la medicina	A través de la biblioteca virtual de la Universidad Industrial de Santander	Aplicación de ecuaciones de búsqueda y filtro por tipo de publicación (“Articles” “Review”).

y la recopilación de archivos en línea. link.springer.com

Las ecuaciones de búsqueda aplicadas en las bases de datos, se diseñaron para garantizar resultados asertivos, de acuerdo con la información requerida. En la siguiente tabla, se describen estas ecuaciones de búsqueda:

Tabla 11

Ecuaciones de búsqueda bibliográfica

Concepto	Ecuación de búsqueda
Ecuación de continuidad y criterios que evalúen el efecto de las limitaciones de transferencia de masa	("mass transfer limitations" OR "mass transfer resistance" OR "mass transfer controlling" OR "diffusion control" OR "effectiveness factor" OR "rate controlling steps") AND ("slurry reactors" or "two-phase reactors") AND ("batch reactor") AND ("stirred tank" or "agitated vessel")
Correlaciones del coeficiente de difusividad efectiva	("diffusivity coefficient" OR "effective diffusivity" OR "diffusion coefficient") AND ("porous media" OR "porous catalyst" OR "solid particles") AND ("liquid mixture" OR "multicomponent diffusion" OR "binary diffusion" OR "molecular diffusion")
Correlaciones de transferencia de masa interfacial líquido-sólido	("solid-liquid mass transfer" OR "solid-liquid mass transfer" OR "mass transfer coefficient" OR "Sherwood number" OR "mass transfer correlation") AND ("slurry reactors" or "two-phase reactors") AND ("batch reactor") AND ("stirred tank" or "agitated vessel").
Propiedades termodinámicas y de transporte de los líquidos puros y de la mezcla, como volumen molar, densidad y viscosidad	("thermodynamic properties" OR "transport properties") AND ("pure liquids" OR "liquid mixtures") AND ("molar volume" OR "density" OR "viscosity"). Además, fue fundamental la consulta de la documentación de Aspen Plus, simulador donde se determinaron estas propiedades.

Los artículos seleccionados fueron analizados en función de su relevancia o número de citas y su relación con la metodología que se desarrolló en este trabajo. Además, se consultaron sus referencias bibliográficas y citas mediante las herramientas Litmaps, Research Rabbit y Connected Papers.

Apéndice B. Desarrollo de la ecuación de transporte

Usualmente, la transferencia de masa en reactores por lotes es modelada macroscópicamente a través de un balance de masa aplicado al seno del líquido (Scott Fogler, 1987), que relaciona el cambio temporal de la concentración con el término de generación R_i :

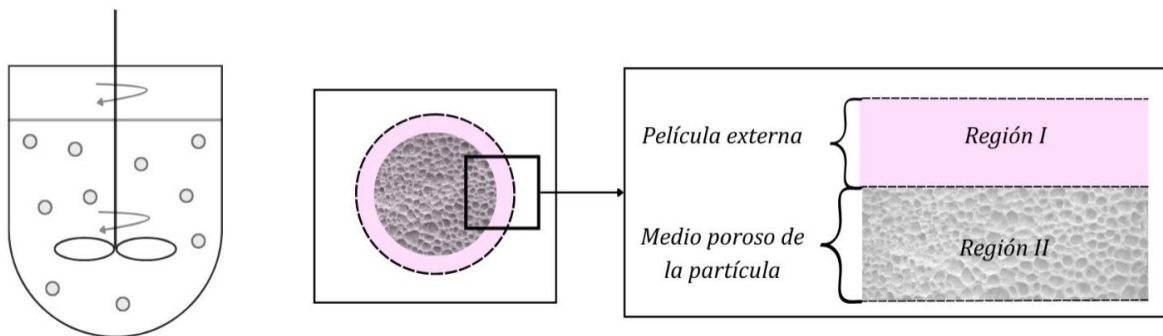
$$\frac{dC_{ib}}{dt} = R_i \quad (\text{Ec.1})$$

Donde C_{ib} es la concentración de la sustancia i en el seno del líquido. En esta ecuación, se suele asumir que la concentración medida en el seno del líquido es la misma que la concentración en la superficie del poro. Sin embargo, en una escala microscópica y mesoscópica, en los alrededores de cada una de las partículas de catalizador se presenta una disminución de la velocidad del líquido que las rodea, provocando la formación de una película viscosa (Bird et al., 2006), como se observa en la Región I de la Figura 12, donde la concentración es homogénea y las propiedades (Densidad, viscosidad y difusividad) no son necesariamente isotrópicas, apareciendo así un perfil de concentración. Cuando se tienen este tipo de películas alrededor de sólidos, Weisz y Prater sugirieron examinar la condición hidrodinámica del flujo (Weisz & Prater, 1954), ya que el desarrollo de una subcapa viscosa alrededor del sólido, donde la viscosidad juega un papel clave (Lightfoot et al., 2010), se debía al régimen turbulento en el seno del líquido.

Análogamente, en el interior de la partícula (Región II), debido a la tortuosidad de los poros, la velocidad del líquido no es la suficiente para transportarse por convección, por ende, el mecanismo de transferencia en esta región es difusivo, formándose un perfil de concentración adicional (Cussler, 1997) (Figura 13).

Figura 12

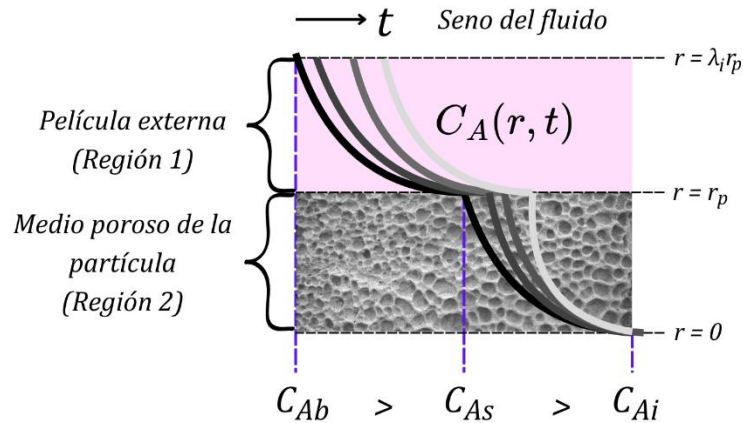
Regiones de flujo interno y externo



Además, dada la ausencia de una corriente de salida en los reactores por lotes y con base en el balance de masa macroscópico, se espera que la concentración tanto en la película externa (Región I) como en el interior de la partícula (Región II), disminuya conforme avanza la reacción, tal como se observa en la Figura 13.

Figura 13

Evolución del perfil de concentración interno y externo en el tiempo



Con base en las consideraciones mencionadas, es necesario sustituir el balance de masa macroscópico de la Ecuación 1, por un balance de masa diferencial (ecuación de continuidad) que describe la distribución de la concentración a lo largo del espacio-tiempo (Ecuación 2).

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + (\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_i) = R_i \quad (\text{Ec.2})$$

Donde la divergencia $(\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_i)$, físicamente, indica la entrada o salida de masa en el sistema con base en el sistema de coordenadas definido, en este caso, coordenadas esféricas. Por lo que, al desarrollar la divergencia, la ecuación de continuidad resulta en:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 J_{ir})}{\partial r} + \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial(J_{i\theta} \sin(\theta))}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial(J_{i\varphi})}{\partial \varphi} = R_i \quad (\text{Ec.3})$$

Simplificando la ecuación anterior, se considera que la difusión no es dispersiva, es decir, es uniforme a lo largo de los ejes angulares θ y φ , lo que implica que la densidad de flujo molar es solamente función de la coordenada radial. Obteniendo:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 J_{ir})}{\partial r} = R_i \quad (\text{Ec.4})$$

Posteriormente, esta ecuación de continuidad se aplica en las Regiones I y II, modelando la transferencia de masa, dependiendo de las consideraciones en cada región.

Apéndice C. Ajuste de la ecuación de continuidad dentro de la red porosa del catalizador

$$\varepsilon_p \left(\frac{\partial C_i}{\partial t} \right)_{II} = -\frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial (r^2 J_{ir})}{\partial r} \right)_{II} + (1 - \varepsilon_p) R_i \quad (\text{Ec.5})$$

Donde ε_p es la fracción volumétrica de vacío de la partícula, que en la Ecuación 5 funciona como un factor de corrección para el cambio temporal de la concentración, haciendo que este sólo corresponda al volumen vacío dentro de la partícula (volumen de los poros), que puede ser ocupado por el líquido. Simultáneamente, el término de generación acompañado por el factor $(1 - \varepsilon_p)$, representando la fracción volumétrica sólida de la partícula, indicando que la reacción química no ocurre en el volumen total de la partícula, sino que se limita al volumen sólido de ésta. Estos factores de corrección son consecuencia de asumir la densidad de flujo molar como una cantidad promedio y de considerar matemáticamente la reacción química como homogénea.

Apéndice D. Consideraciones y aproximaciones del sistema

Tabla 12

Consideraciones y aproximaciones del sistema

Sistema	Consideraciones
Líquido y partículas de catalizador	<ul style="list-style-type: none"> • Medio continuo. • Seno del líquido perfectamente mezclado. • Solución diluida. • Sistema isotérmico e isobárico. • Turbulencia isotrópica en el seno del líquido • Propiedades isotrópicas y concentración homogénea en el seno del líquido.

	<ul style="list-style-type: none"> • Partículas esféricas de igual tamaño, es decir, no existe una distribución de partículas. • Líquido incompresible, densidad constante independiente de la posición ($\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$). • Líquido newtoniano. • Estado transitorio. • Sistema de coordenadas esférico. • Se ignoran los efectos de difusión dispersiva, eliminando los términos angulares $J_{i\theta} = J_{i\varphi} = 0$. • Se considera el llenado de los poros de la partícula.
Película externa a la partícula	<ul style="list-style-type: none"> • Mecanismo de transporte netamente difusivo $\vec{v} = 0$ (contraflujo equimolar). • Espesor de la película constante $\lambda_i \neq \lambda_i(t)$. • Coeficiente de difusividad molecular isotrópico ($\vec{\nabla} \cdot D_{i,m} = 0$). • Reacción química inexistente.
Red porosa de la partícula de catalizador	<ul style="list-style-type: none"> • Reacción química descrita por una ley de potencias de orden m. • Partícula de catalizador macroporosa. • No existe una distribución en el tamaño de los poros. • Difusión radial como único mecanismo de transporte de masa. • Se promedia el mecanismo de transporte a partir del coeficiente de difusividad efectiva (Difusión de Knudsen). • En el balance considera el término de reacción, como si se tratase de una reacción homogénea, válido sólo si se considera la anterior aproximación. • Perfil de concentración simétrico. • El reactivo limitante puede ser o no la sustancia i.

Apéndice E. Modelos y correlaciones para el coeficiente de difusividad molecular y efectiva y el factor de tortuosidad

Correlación de Hayduk y Laudie (Hayduk & Laudie, 1974) para la difusividad de un soluto diluido (<10 mol%) en agua.

$$D_{ij}^0 = \frac{8.621 \times 10^{-14}}{\mu_j^{1.14} V_i^{0.589}} \quad (\text{Ec.6})$$

Correlación de Judson y colaboradores (King et al., 1965) para la difusión de un soluto diluido (<10 mol%) en cualquier solvente excepto agua

$$D_{ij}^0 = 4.4 \times 10^{-15} \frac{T}{\mu_j} \left(\frac{V_j}{V_i} \right)^{\frac{1}{6}} \left(\frac{L_j^{\text{vap}}}{L_i^{\text{vap}}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Ec.7})$$

Correlación de Scheibel (Scheibel, 1954) para la difusión de un soluto diluido (<10 mol%) en solventes comunes como agua, benceno y metanol.

$$D_{i,j}^0 = \frac{8.2 \times 10^{-8}}{\mu_j V_i^{1/3}} \left[1 + \left(\frac{3V_j}{V_i} \right)^{2/3} \right] \quad (\text{Ec.8})$$

Correlación de Perkins y Geankopolis (Perkins & Geankopolis, 1969) para la difusividad de una mezcla concentrada multicomponente:

$$D_{i,m} \mu_m^{0.8} = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq A}}^n x_i D_{i,j}^0 \mu_j^{0.8} \quad (\text{Ec.9})$$

Donde D_{ij} [cm^2/s], es el coeficiente de difusividad molecular binario D_{ij}^0 [cm^2/s] es el coeficiente de difusividad binario a dilución infinita y L_i^{vap} [$J/kmol$] es la entalpía de vaporización de la sustancia i .

Físicamente la tortuosidad se define como la relación de la distancia real recorrida por la sustancia Δl por unidad de longitud del medio Δx (Shen & Chen, 2007), tal que así:

$$\tau = \frac{\Delta l}{\Delta x} \quad (\text{Ec.10})$$

Sin embargo, puede estimarse con correlaciones semi empíricas, como la ecuación de Wakao y Smith (Wakao & Smith, 1962)

$$\tau = \frac{1}{\varepsilon_p} \quad (\text{Ec.11})$$

Suzuki y Smith (Suzuki & Smith, 1972):

$$\tau = 1.5 - 0.5\varepsilon_p \quad (\text{Ec.12})$$

La ecuación de Beeckman, comúnmente utilizada en catálisis heterogénea (Beeckman, 1990):

$$\tau^2 = \varepsilon_p \left(1 - (1 - \varepsilon_p)^{\frac{1}{3}}\right) \quad (\text{Ec.13})$$

En cuanto al coeficiente de difusividad efectiva, se tiene la ecuación modificada con constantes empíricas para la difusión de un soluto en poros llenos de solvente, (Mukherjee & Vannice, 2006):

$$D_e = D_{i,m} \left(\frac{\varepsilon_p}{\tau}\right) (Ae^{-B\lambda t}) \quad (\text{Ec.14})$$

Donde, $\lambda = r_{molecula}/r_{poro}$, si existe una distribución de poro su radio puede promediarse a partir de $r_{poro} = 2\varepsilon_p/(a_p\rho_p)$; A y B son constantes empíricas. La siguiente correlación tiene las

mismas consideraciones que la anterior, sin embargo, esta necesita de un parámetro empírico adicional P (Vannice, 2005):

$$D_e = D_{i,m} \frac{(1 - \lambda)^2}{1 + P\lambda} \quad (\text{Ec.15})$$

Apéndice F. Correlaciones del coeficiente de transferencia de masa y propiedades termodinámicas y de transporte

En principio, las correlaciones generadas a partir de la teoría de Kolmogoroff, producen coeficientes de transferencia de masa que son, exclusivamente, función de la potencia suministrada por el agitador, por unidad de masa de líquido ($e [W/g]$), en tanques geoméricamente similares. Sin embargo, es de vital importancia conservar esta similitud geométrica, ya que al alejarse de la configuración geométrica del tanque donde se construyó la correlación, los valores del coeficiente de transferencia de masa empiezan a variar, así se encuentren a la misma “ e ” (Shinnar & Church, 1960).

Por otro lado, las correlaciones basadas en el análisis dimensional son simples, pero su aplicabilidad es limitada, ya que dependen de la geometría y el sistema líquido-sólido. Además, estudios detallados muestran que, el coeficiente de transferencia de masa varía con múltiples factores que estas correlaciones no consideran, como la velocidad del agitador y la diferencia de densidad líquido-sólido, lo que genera discrepancias significativas en sus predicciones. (Pangarkar et al., 2002).

Tabla 13

Propiedades termodinámicas de la mezcla líquida

Referencia	Correlación	Limitaciones
Correlaciones basadas en el análisis dimensional		
(Hixson & Baum, 1941)	$Sh = 0.16Re^{0.62}Sc^{0.5}$ $Sh = 2.5 \times 10^{-5}Re^{1.4}Sc^{0.5}$ <p style="text-align: center;">Donde</p> $Sh = \frac{k_s d_T}{D_{i,m}}; Re = \frac{Nd_T^2 \rho_L}{\mu_L}$	$Re > 6.7 \times 10^4$ $Re < 6.7 \times 10^4$
(Barker & Treybal, 1960)	$Sh = 0.02Re^{0.833}Sc^{0.5}$ $Re = \frac{N\pi d_I^2 \rho_L}{\mu_L}$	
(Sykes & Gomezplata, 1967)	$Sh = 2 + 0.109Re^{0.38}Sc^{0.5}$ $Re = \frac{\left(\frac{N_p \text{ del impulsor}}{N_p \text{ de la turbina}}\right)^{0.33} d_I^2 \rho_L}{\mu_L}$	
(Boon-Long et al., 1978)	$Sh = 0.046Re^{0.283}Ga^{0.173}\vartheta^{-0.011}\left(\frac{d_T}{d_p}\right)^{0.019}Sc^{0.461}$ $Re = \frac{2d_p \rho_L d_T \pi^2 N}{\mu_L}$ $Ga = \frac{\rho_L^2 g d_p^3}{\mu_L^2}; \vartheta = \frac{wV_{TL}}{\rho_L d_p^3}; Sc = \frac{\mu_L}{\rho_L D_{i,m}}$	$Re = \frac{2d_p \rho_L d_T \pi^2 N}{\mu_L}$ $1.1 \times 10^5 < Ga < 10^6$ $27 < \vartheta < 2900$ $30 < \frac{d_T}{d_p} < 215$ $300 < Sc < 2000$
Correlaciones basadas en la teoría de Kolmogoroff de turbulencia isotrópica		
(Armenante & Kirwan, 1989)	$Sh = 2 + 0.52Re^{0.52}Sc^{0.33}$ $Re = \frac{e^{0.33} d_p^{1.33} \rho_L}{\mu_L}$	
(Lal et al., 1988)	$Sh = 2 + 0.02Re^{0.67}Sc^{0.33}$ $Sh = 2 + 2.02Re^{0.25}Sc^{0.33}$ $Re = \frac{\pi d_I^2 N \rho_L}{\mu_L}$ $Sh = 2 + 0.088Re'^{0.67}N_{Sc}^{0.33}$ $Sh = 2 + 3.98Re''^{0.25}N_{Sc}^{0.33}$ $Re' = \frac{\pi N D d_p \rho_L}{\mu_L}$ $Sh = 2 + 0.474Re'''^{0.67}Sc^{0.33}$ $Sh = 2 + 7.525Re''''^{0.25}Sc^{0.33}$	$Re < 8.5 \times 10^4$ $Sc > 1 \times 10^2$ $Re > 8.5 \times 10^4$ $Re' < 10^4$ $Re' > 10^4$ $1 < Re'' < 800$ $Re'' > 800$

$$Re'' = \frac{Nd_p^{1.33} d_l^{1.67} \rho_L}{d_T^{0.67} H^{0.33} \mu_L}$$

Donde H es la altura del líquido en el reactor [cm]

Nota. Adaptado de (Joshi et al., 2023).

Apéndice G. Cálculo de las propiedades puras

Correlación de Andrade (Poling et al., 2001) para calcular la viscosidad del líquido puro i :

$$\log_{10} \mu_i = A_i + \frac{B_i}{T} + C_i T + D_i T^2 \quad (\text{Ec.16})$$

Donde A_i , B_i , C_i y D_i son constantes empíricas del líquido.

Correlación de (Yaws, L, 2003) para calcular la densidad del líquido puro i :

$$\rho_i = A_i (B - (1 - \frac{T}{T_c})^n) \quad (\text{Ec.17})$$

Donde A_i , B_i y n_i son parámetros empíricos del líquido.

En el caso del glicerol, estas dos correlaciones sólo aplican en el rango de temperatura de los 291.3 [K] hasta su temperatura crítica de 723 [K].

En cuanto a la estimación de las propiedades críticas puras, se utilizó el método de contribución de grupos de Joback (Marrero-Morejón & Pardillo-Fontdevila, 1999).

Apéndice H. Estimación de parámetros de la ecuación de Rackett

Dicha ecuación, está sujeta a los siguientes rangos de aplicación: $5[^\circ\text{C}] < T_{ci} < 2000[^\circ\text{C}]$
 $; 10^5[P_a] < p_{ci} < 10^8[P_a] ; 0.1 < Z_i^{RA} < 1$

$$T_c = \sum_i \sum_j x_i x_j V_{ci} V_{cj} \sqrt{T_{ci} T_{cj}} (1 - k_{ij}) / V_{cm}^2 \quad (\text{Ec.18})$$

$$k_{ij} = 1 - 8 \frac{(V_{ci}V_{cj})^{1/2}}{\left(V_{ci}^{1/3} + V_{cj}^{1/3}\right)^3} \quad (\text{Ec.19})$$

$$\frac{T_c}{p_c} = \sum_i x_i \frac{T_{ci}}{p_{ci}} \quad (\text{Ec.20})$$

Donde Z_m^{RA} se puede estimar a partir de Z_i^{RA} , el cual se calcula a partir de un volumen molar de referencia V_{iR} (Mjalli et al., 2015).

$$Z_m^{RA} = \sum_i x_i Z_i^{*RA} \quad (\text{Ec.21})$$

$$Z_i^{RA} = \left(\frac{V_{iR} p_i}{RT_{ci}}\right)^{1/\left[1 + \left(1 - \frac{T}{T_{ci}}\right)^{2/7}\right]} \quad (\text{Ec.22})$$

$$V_{cm} = \sum_i x_i V_{ci} \quad (\text{Ec.23})$$

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (\text{Ec.24})$$

Apéndice I. Determinación del factor λ_i

Para determinar el factor λ_i se lleva a cabo un balance en la ecuación de transporte de la Región 1 (Ecuación 5), asumiendo un estado *pseudoestacionario*, en otras palabras, se descarta la variación en el tiempo, obteniendo de esta manera la siguiente expresión:

$$D_{i,m} \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) = 0 \quad (\text{Ec.25})$$

$$CF1: C_i(r_p) = C_{is}$$

$$CF2: C_i(\lambda_i r_p) = C_{ib}$$

Inicialmente se resuelve el perfil en $t = 0$, por tanto:

$$D_{i,m} \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) = 0 \quad (\text{Ec.26})$$

$$\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C_i}{\partial r} = 0 \quad (\text{Ec.27})$$

Se considera que C_i tiene la siguiente forma:

$$C_i = r^k \quad (\text{Ec.28})$$

Sustituyendo:

$$r^2 \frac{\partial^2 (r^k)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial (r^k)}{\partial r} = 0 C_i = r^k \quad (\text{Ec.29})$$

$$r^2(k(k-1)r^{k-2}) + 2r(kr^{k-1}) = 0$$

$$r^k(k(k-1) + 2k) = 0$$

$$r^k(k^2 + k) = 0$$

$$r^k(k(k+1)) = 0$$

Como $k \neq -\infty$, entonces $k = 0$ y $k = -1$, por lo que C_i tiene la forma:

$$C_i = C_1 + \frac{C_2}{r} \quad (\text{Ec.30})$$

Aplicando las condiciones de frontera, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$C_{ib} = C_1 + \frac{C_2}{\lambda_i r_p}$$

$$C_{is} = C_1 + \frac{C_2}{r_p}$$

Que al resolverse da como resultado el perfil externo de concentración inicial:

$$C_i = \left(\frac{\lambda_i C_{ib} - C_{is}}{\lambda_i - 1} \right) + \left(\frac{\lambda_i C_{is} - \lambda_i C_{ib}}{\lambda_i - 1} \right) \left(\frac{r_p}{r} \right) C_i = r^k \quad (\text{Ec.31})$$

Determinación del factor λ_i :

$$\begin{aligned} -D_{i,m} \frac{\partial C_i}{\partial r} \Big|_{r=r_p} &= k_s (C_i|_{r=r_p} - C_i|_{r=\lambda_i r_p}) & (\text{Ec.32}) \\ \Rightarrow -D_{i,m} \frac{\partial C_i}{\partial r} \Big|_{r=r_p} &= k_s (C_{is} - C_{ib}) \\ \Rightarrow \frac{\partial C_i}{\partial r} \Big|_{r=r_p} &= \frac{\partial}{\partial r} \left(\left(\frac{\lambda_i C_{ib} - C_{is}}{\lambda_i - 1} \right) + \left(\frac{\lambda_i C_{is} - \lambda_i C_{ib}}{\lambda_i - 1} \right) \left(\frac{r_p}{r} \right) \right) \Big|_{r=r_p} \\ \Rightarrow \frac{\partial C_i}{\partial r} \Big|_{r=r_p} &= - \left(\frac{\lambda_i C_{is} - \lambda_i C_{ib}}{\lambda_i - 1} \right) \left(\frac{r_p}{r^2} \right) \Big|_{r=r_p} \\ \Rightarrow -D_{i,m} \left(- \left(\frac{\lambda_i C_{is} - \lambda_i C_{ib}}{\lambda_i - 1} \right) \left(\frac{r_p}{r^2} \right) \Big|_{r=r_p} \right) &= k_s (C_{is} - C_{ib}) \\ \Rightarrow \left(\frac{D_{i,m}}{r_p} \right) \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_i - 1} \right) (C_{is} - C_{ib}) &= k_s (C_{is} - C_{ib}) \\ \Rightarrow \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_i - 1} \right) &= \left(\frac{k_s r_p}{D_{i,m}} \right) \\ \lambda_i &= \frac{k_s r_p}{k_s r_p - D_{i,m}} & (\text{Ec.33}) \end{aligned}$$

Apéndice J. Metodología y algoritmo detallado de cálculo del factor de efectividad

Las Figuras 12 y 13, muestran la metodología y algoritmo diseñado para calcular el factor de efectividad externo e interno para una reacción catalítica en fase líquida en un reactor por lotes agitado e isotérmico, respectivamente.

Apéndice K. Ecuación del perfil de concentración interno en estado estacionario con una reacción química de orden uno

Siguiendo la metodología de Li (Li, 2017) para solucionar analíticamente la ecuación diferencial ordinaria no lineal, se obtiene el siguiente perfil de concentración, que puede ser diferenciable y reorganizado para encontrar otra expresión que defina el flux de transferencia de materia. Esto sólo es válido para una cinética de reacción de ley de potencias con orden uno.

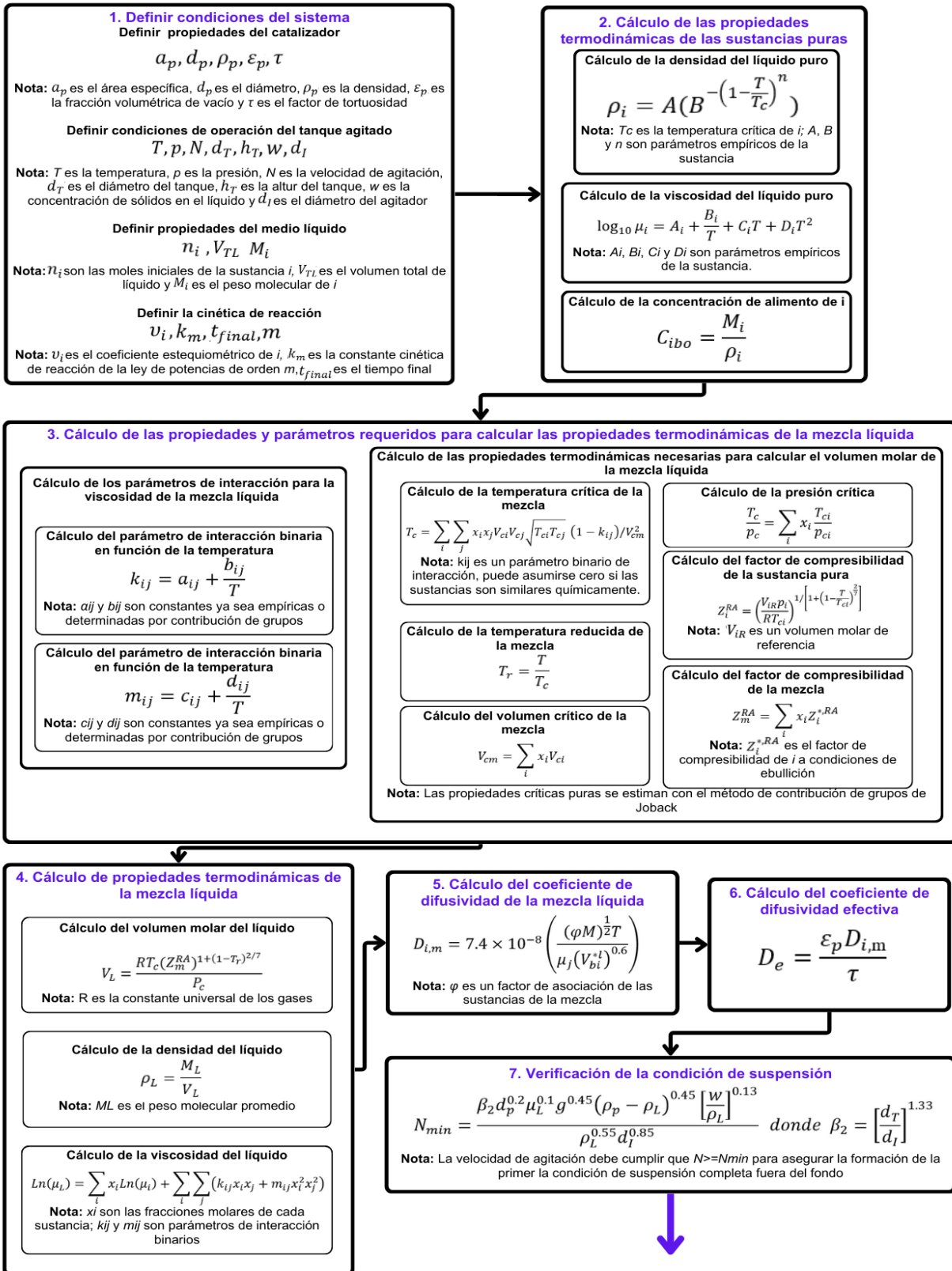
$$C_i = C_i(r_p) \frac{\sinh\left(\phi \left(\frac{r}{r_p}\right)\right)}{\left(\frac{r}{r_p}\right) \sinh(\phi)} \quad \text{donde } \phi = r_p \sqrt{\frac{k_1 \cdot w}{D_e}} \quad (\text{Ec.34})$$

Figura 14

Metodología para el cálculo de limitaciones de transferencia de masa

METODOLOGÍA PARA EL CÁLCULO DE LIMITACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA EXTERNAS E INTERNAS

Luis Camilo Sanabria Ardila - Diego Alejandro Rojas Salcedo
Escuela de Ingeniería Química - Universidad Industrial de Santander



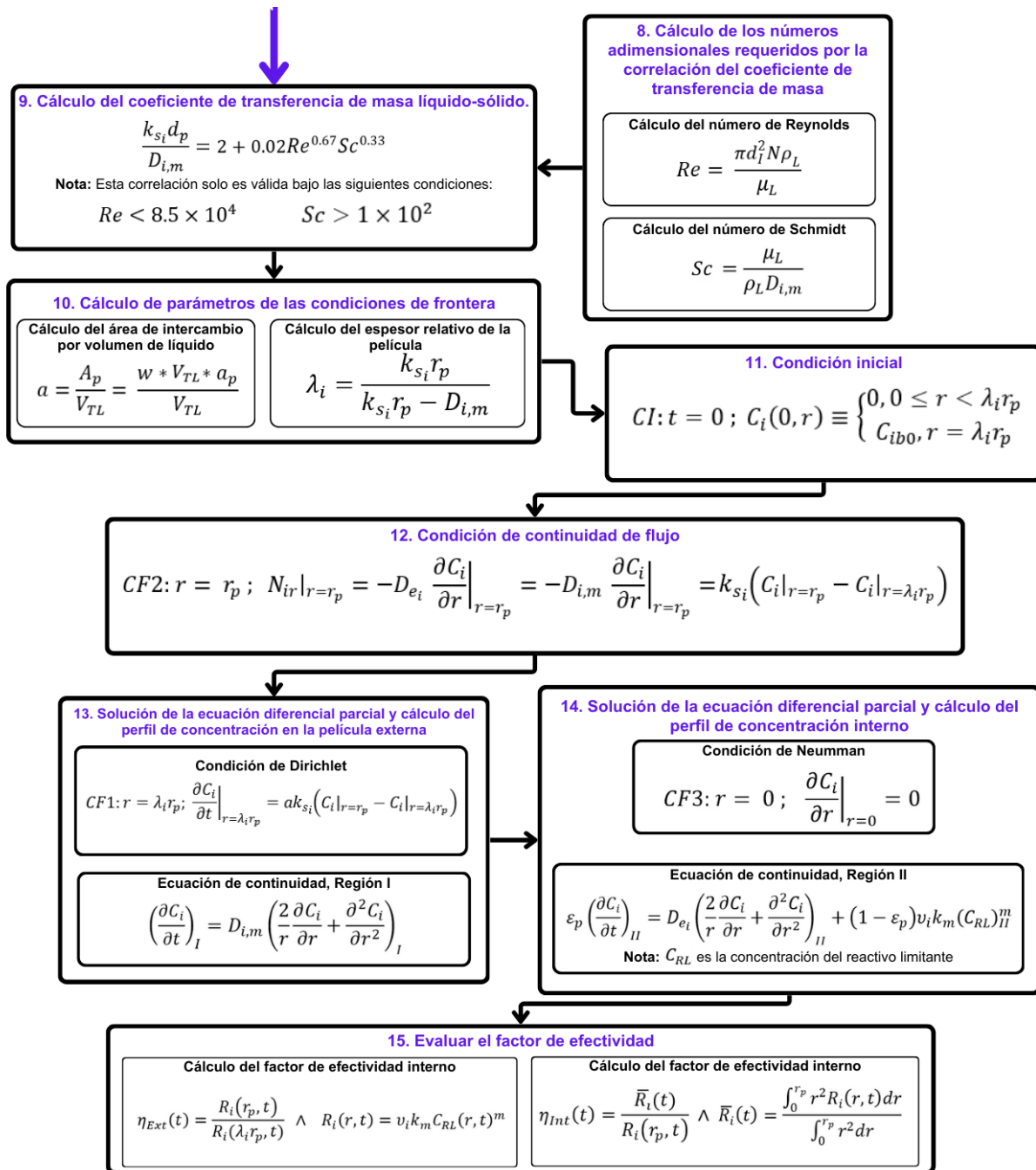
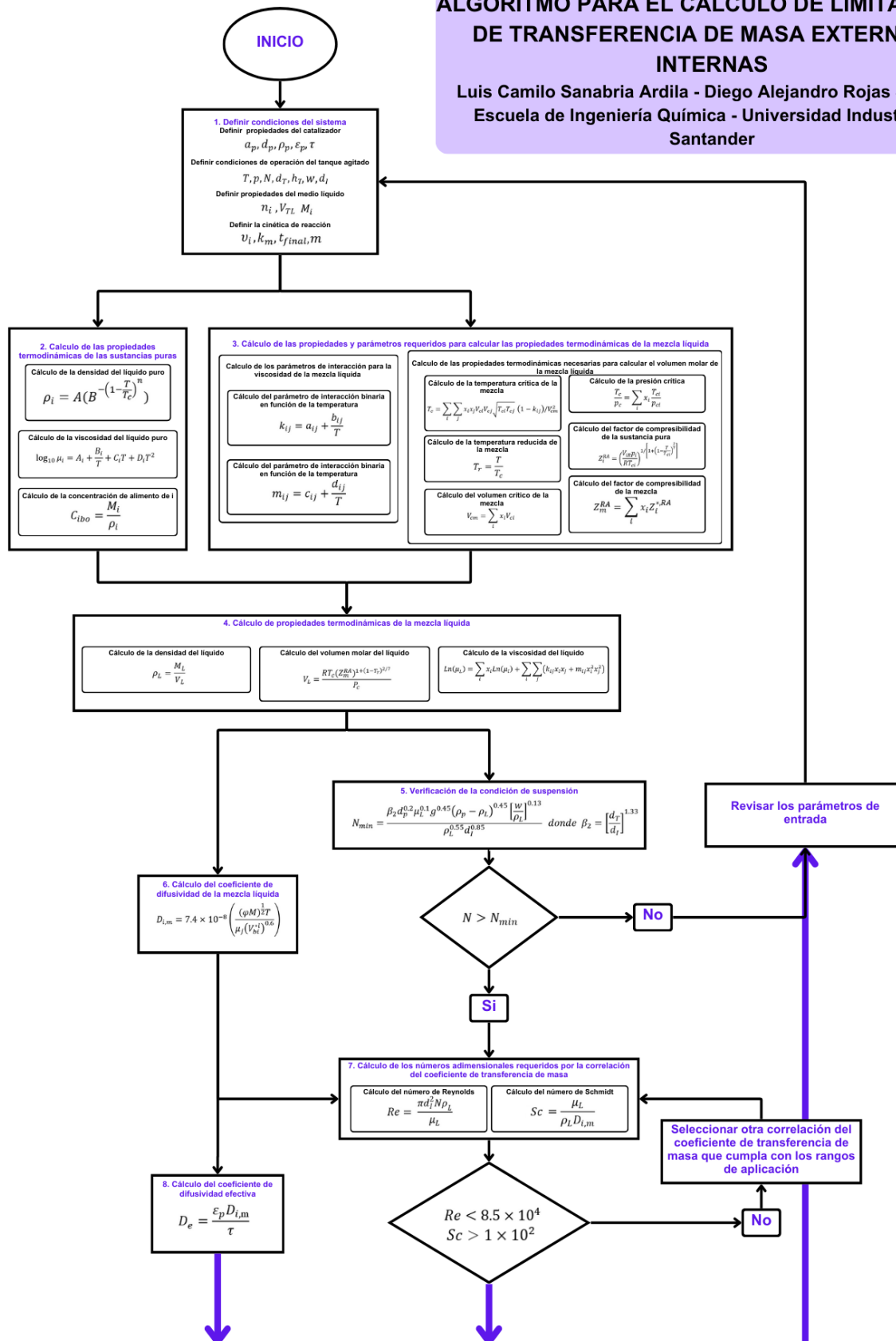
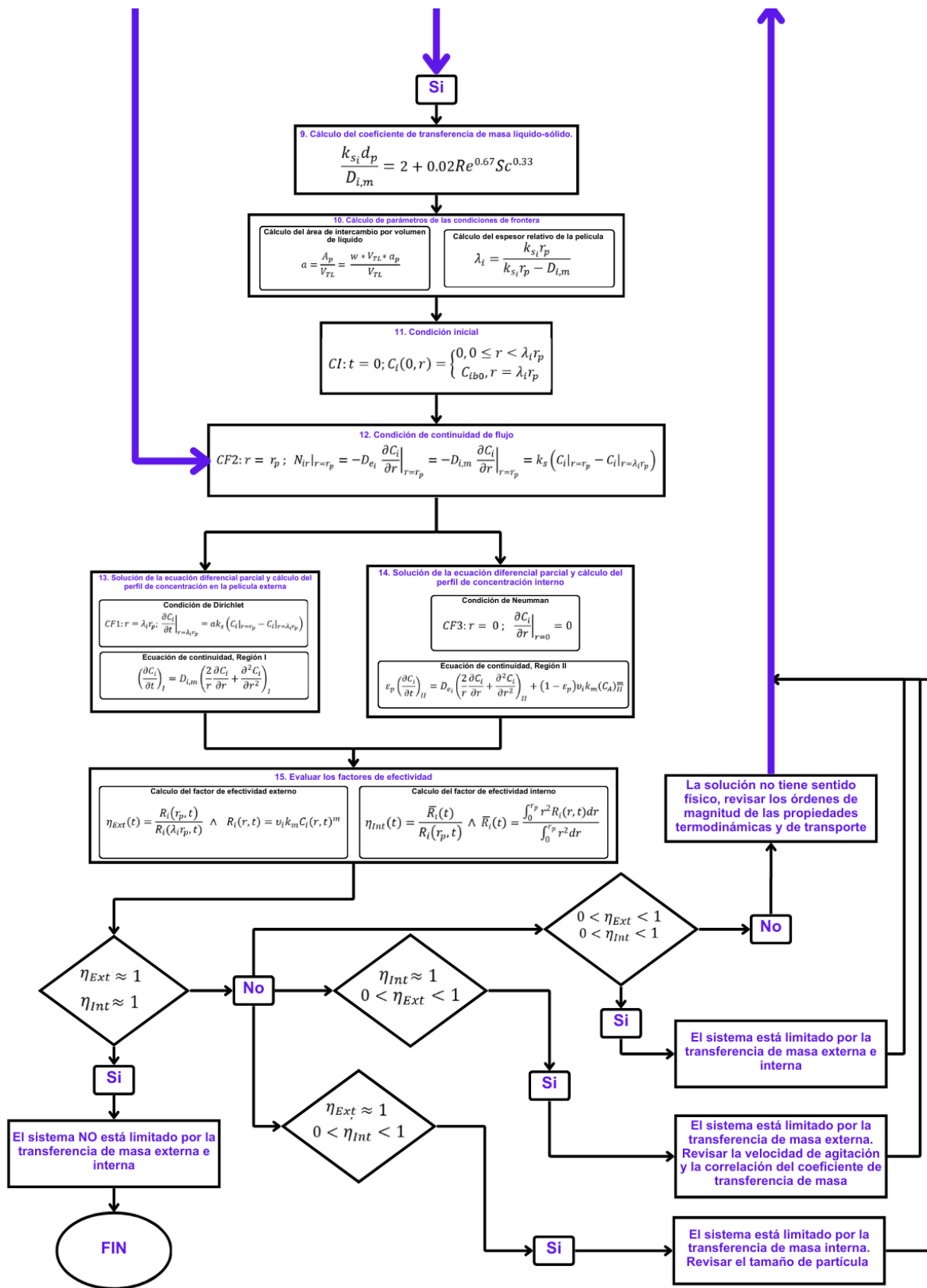


Figura 15

Algoritmo para el cálculo de limitaciones de transferencia de masa

ALGORITMO PARA EL CÁLCULO DE LIMITACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA EXTERNAS E INTERNAS
 Luis Camilo Sanabria Ardila - Diego Alejandro Rojas Salcedo
 Escuela de Ingeniería Química - Universidad Industrial de Santander





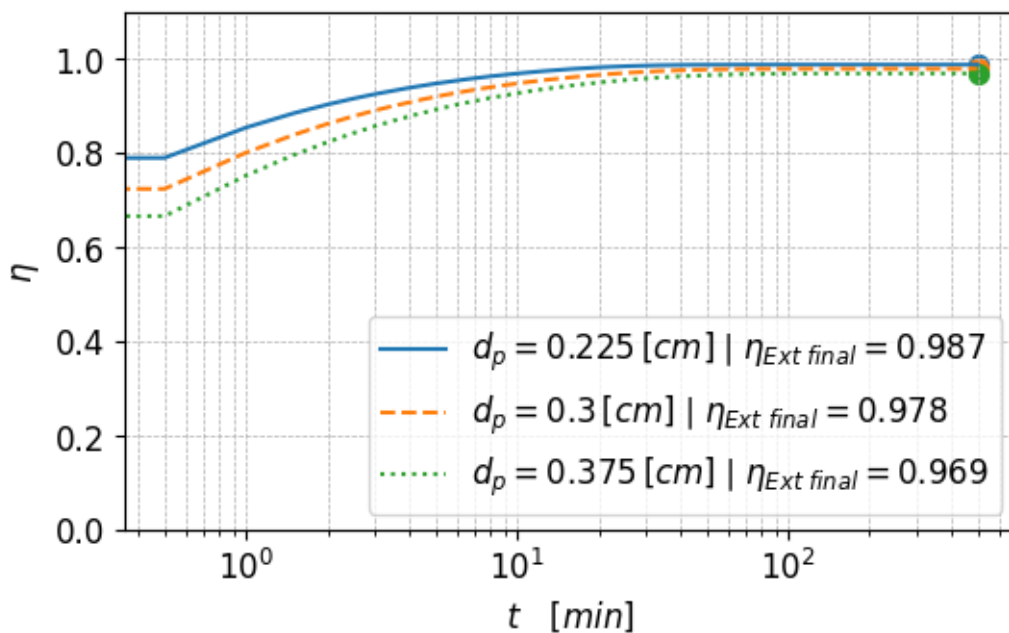
Apéndice L. Metodología de cálculo codificada en Google Colab Python 3

Adjunto se encuentra un enlace que contiene la rutina de cálculo utilizada para llevar a cabo la aplicación del algoritmo de evaluación de las limitaciones de transferencia de masa externas e internas.

https://drive.google.com/drive/folders/1PqIEEOEnw0_NRgdOGXaM_QTPWLMNKMjy?usp=drive_link

Apéndice M. Variación del factor de efectividad externo en el tiempo**Figura 16**

Factor de efectividad externo variando el diámetro de partícula

**Figura 17**

Factor de efectividad externo variando la velocidad de agitación

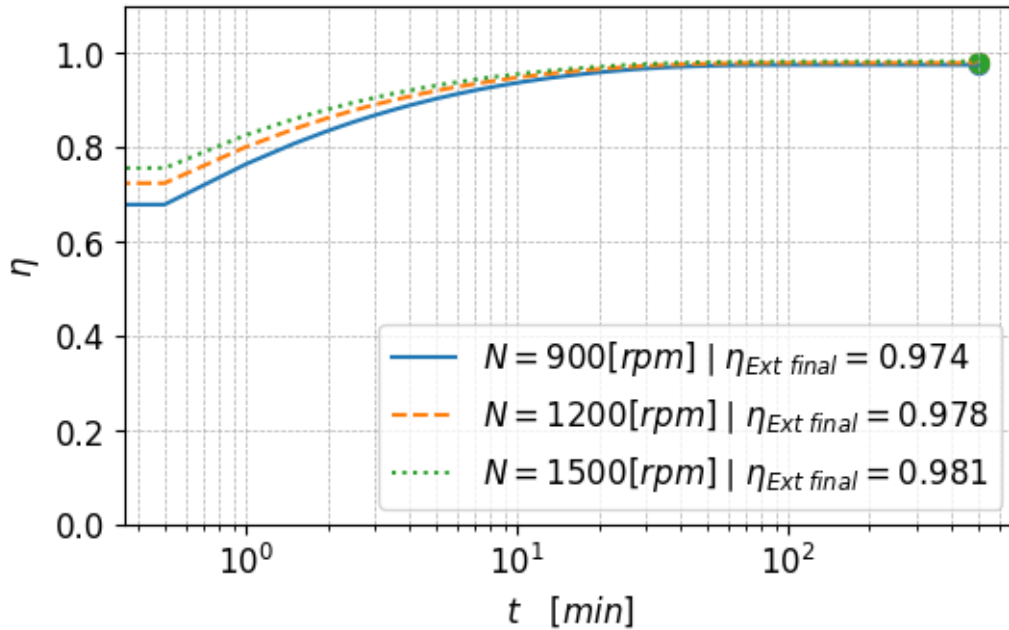
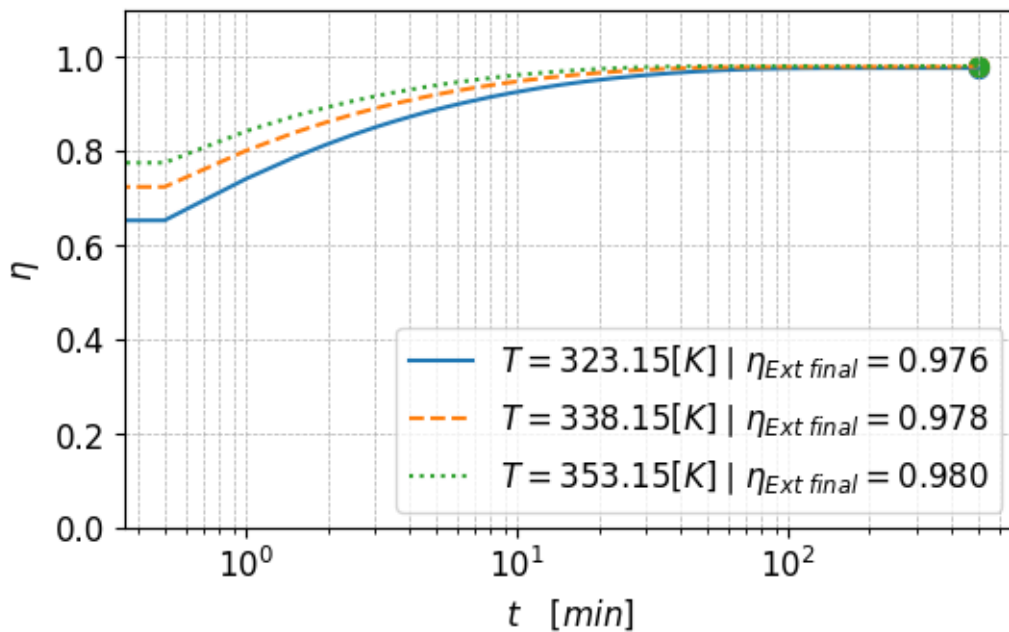


Figura 18

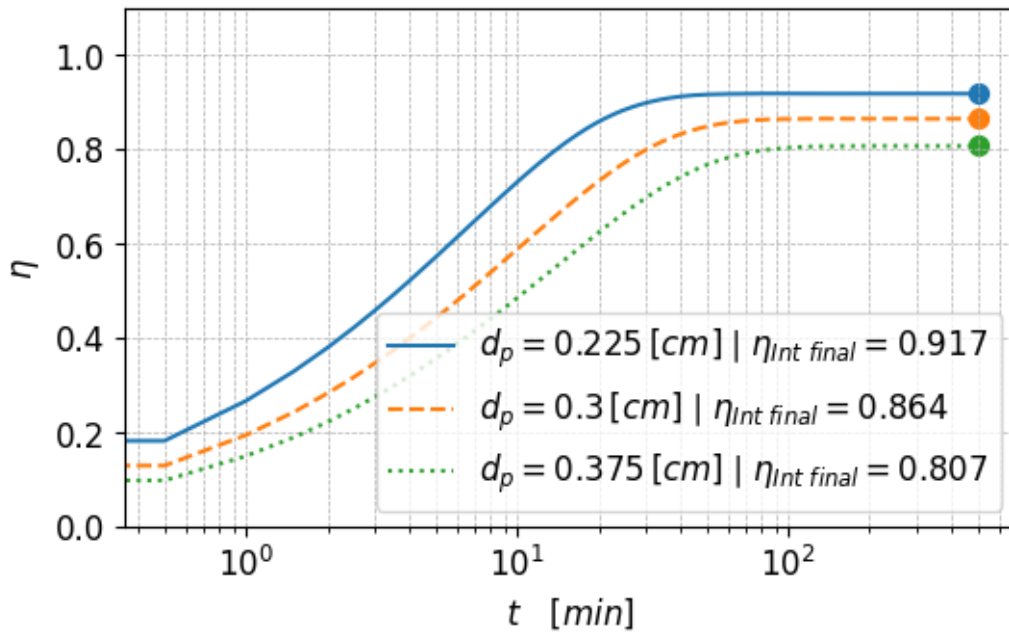
Factor de efectividad externo variando la temperatura



Apéndice N. Variación del factor de efectividad interno en el tiempo

Figura 19

Factor de efectividad interno variando el diámetro de partícula

**Figura 20**

Factor de efectividad interno variando la velocidad de agitación

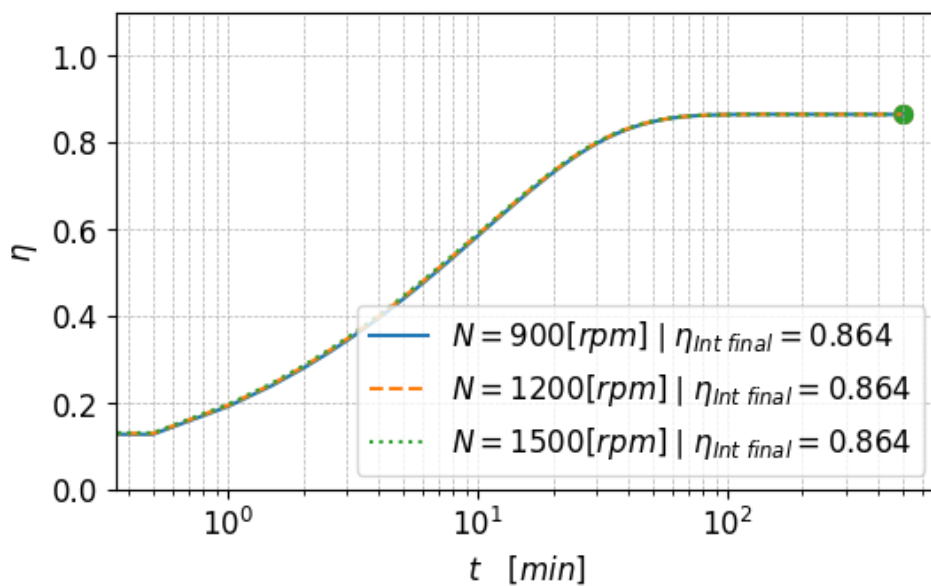
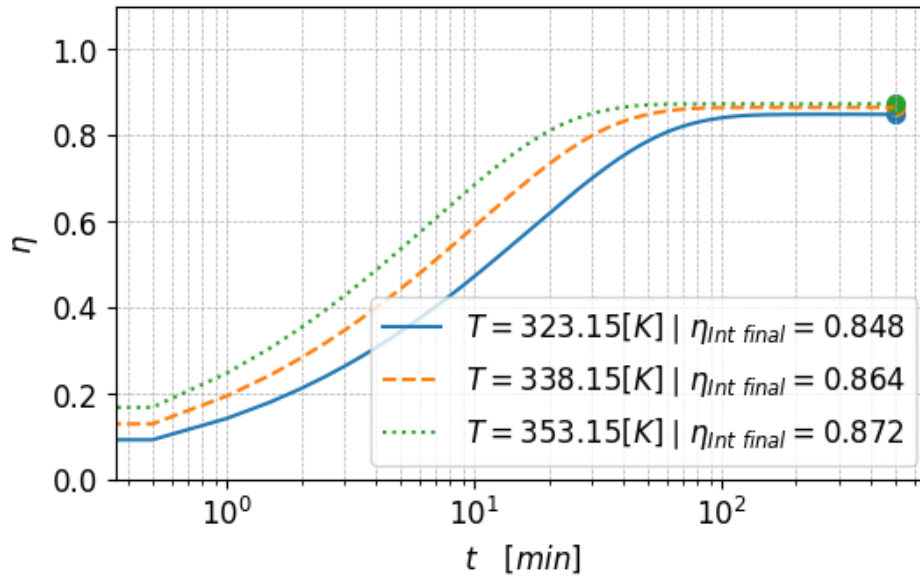


Figura 21

Factor de efectividad interno variando la temperatura



Apéndice O. Conversión de glicerol en el tiempo

Figura 22

Conversión de glicerol variando el diámetro de partícula

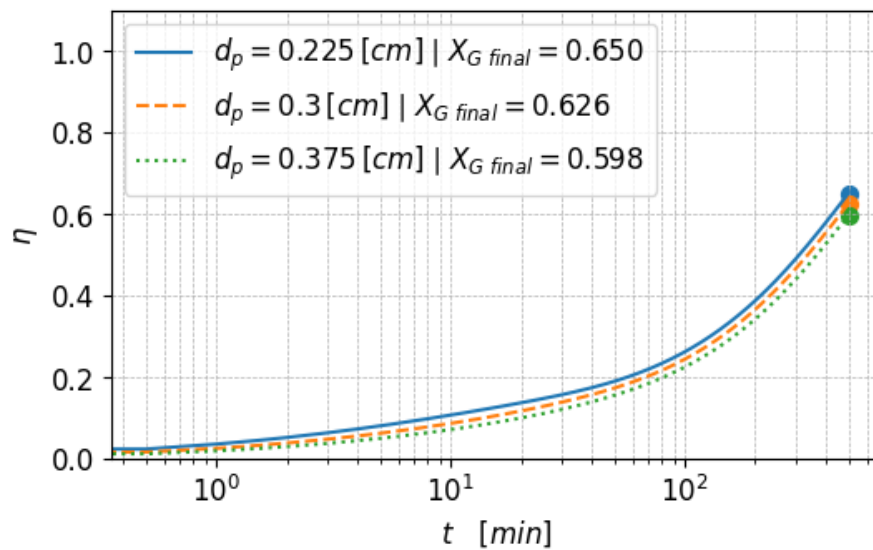
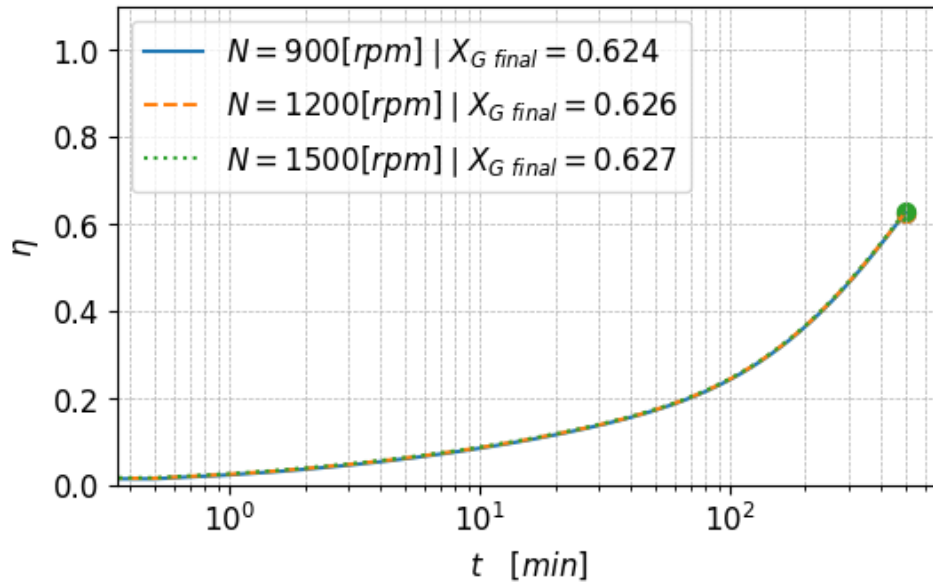


Figura 23

Conversión de glicerol variando la velocidad de agitación

**Figura 24**

Conversión de glicerol variando la temperatura

