

## Región de Inestabilidad y Optimización de las Condiciones de Producción de Metanol en un Reactor Lurgi

Miguel Á. Gómez<sup>(1a,2)</sup>, Izabela Dobrosz-Gómez<sup>(1b,2)</sup> y Edison GilPavas<sup>(1,2)</sup>

(1) PRISMA: Grupo de Investigación en Procesos Reactivos Intensificados con Separación y Materiales Avanzados. <sup>a</sup>Depto. de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería y Arquitectura. <sup>b</sup>Depto. de Física y Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Univ. Nacional de Colombia, Sede Manizales, Campus La Nubia, Manizales, Caldas, Colombia (e-mail: magomez@unal.edu.co, idobrosz-gomez@unal.edu.co)

(2) GIPAB: Grupo de Investigación en Procesos Ambientales, Universidad EAFIT, Medellín, Colombia (e-mail: egil@eafit.edu.co)

*Recibido Oct. 26, 2015; Aceptado Dic. 21, 2015; Versión final Feb. 9, 2016, Publicado Jun. 2016*

---

### Resumen

En este trabajo se analiza el proceso de producción de metanol en un reactor Lurgi. El análisis se desarrolló con base a la información reportada en la literatura que incluye datos de planta en un reactor multitubular empacado (de 1620 tubos de 7 metros de longitud). Inicialmente, se simula el reactor industrial mostrando excelente reproducibilidad. Luego, se establece la región de inestabilidad como una envolvente o separatriz en el cuadrante cartesiano conversión-temperatura, definiendo las condiciones que se deben evitar en la operación del reactor. Se definen las condiciones óptimas de operación del reactor, las cuales corresponden con la progresión óptima de temperatura en el diagrama de curvas de isovelocidad en el cuadrante conversión-temperatura. Finalmente, se establece que para alcanzar una conversión definida de 6.3 %, la temperatura del fluido de servicio debe estar en 230 °C y la transferencia de calor debe garantizar un valor de 118 J/(s.K.m<sup>2</sup>).

*Palabras clave: síntesis de metanol; análisis de inestabilidad; simulación; optimización; reactor Lurgi.*

## Instability Analysis and Optimization of Operational Conditions for Methanol Production in a Lurgi Reactor

### Abstract

In the present work, the operational conditions for methanol synthesis in a Lurgi reactor are analyzed. The industrial data for a packed reactor (consisting of 1620 tubes of 7 m long) are the basis of this study. At first, the industrial reactor is simulated achieving excellent agreement with plant data. Then, the instability region is defined as a boundary in the conversion-temperature diagram and defines the conditions that must be avoided during reactor operation. The optimization of the operational conditions is performed based on the optimal temperature progression from the iso-reaction rate curves. Finally, it was found that the cooling fluid must be at 230 °C and that the heat transfer coefficient must guarantee a value of 118 J/(s.K.m<sup>2</sup>).

*Keywords: methanol synthesis; instability analysis; simulation; optimization; Lurgi reactor.*

## INTRODUCCIÓN

El metanol es un compuesto químico versátil obtenido principalmente a partir del gas natural. Con el potencial de convertirse en un combustible alternativo, es ampliamente utilizado como materia prima para la obtención de numerosos productos (v.g., resinas, plásticos, etc.). Como consecuencia de esto, su volumen de producción mundial se ha incrementado notablemente en los últimos años superando las 50 mil millones de toneladas en el 2012 (methanex, 2015). En el proceso de producción de metanol, el reactor es una de las partes más importantes. En él, la conversión a metanol está limitada a valores muy bajos debido a las restricciones que el equilibrio químico y la selectividad del catalizador le imponen al proceso (Lloyd, 2011). Así, para alcanzar altas conversiones, se han propuesto esquemas de reacción entre las que incluyen: varias etapas de reactores adiabáticos en serie con enfriamiento entre cada etapa (ya sea usando intercambiadores de calor o mediante la inyección de alimento fresco) y reactores multitubulares, del tipo coraza y tubos, con diferentes patrones de flujo, entre otros (Riaz *et al.*, 2013).

En la literatura abierta se han reportado varios trabajos teóricos enfocados en determinar las condiciones óptimas de la operación del reactor: maximizando el rendimiento, controlando el perfil de temperatura, variando la composición de alimento y/o la relación de recirculación (Shahrokhi y Baghmisheh, 2005; Kordabadi y Jahanmiri, 2007; Rahimpour *et al.*, 2010; Chen *et al.*, 2011; Manenti *et al.*, 2011; Sidharth y Hilton, 2012; Manenti *et al.*, 2013;). Muchos de estos estudios se basan en el desarrollo de herramientas computacionales para la simulación del reactor. Estos modelos, debido a que la conversión a metanol es particularmente baja, tienden a subestimar algunas características importantes del proceso tales como la formación de puntos calientes y su posición en el reactor. De esta forma, dado que el proceso es altamente exotérmico, una de las mayores restricciones en el diseño de estos reactores lo constituye el máximo valor de temperatura permisible para garantizar que las propiedades del catalizador no se alteren o que el sistema no se salga de control. De hecho, en el interior de los reactores tubulares se distinguen dos tipos de condiciones extremas condicionadas a la evolución de la temperatura (Levenspiel, 2004): (i) La generación de puntos calientes (característicos de lechos empacados sin recirculación de gas). Los puntos calientes ocurren comúnmente durante la operación adiabática de reactores tubulares de lecho empacado en el caso que la pendiente de la línea de operación adiabática sea pronunciada (elevación moderada de la temperatura). Los puntos calientes usualmente son estacionarios y se originan en la diferencia de velocidades que se generan entre diferentes partes del fluido que atraviesa un reactor empacado; y (ii) La temperatura de “run-away”, condiciones de no-retorno o descontrol, característica de reactores empacados con recirculación importante (es decir, con mezcla). La presencia de una línea de operación adiabática plana supondrá un aumento extremo en la temperatura adiabática.

En este trabajo se analiza el proceso de producción de metanol en un reactor Lurgi (del tipo coraza y tubos empacados de catalizador). El análisis se desarrolló con base en la información reportada por Chen *et al.* (2011) para un reactor industrial. Inicialmente, se propone un modelo matemático para la simulación del reactor. Los resultados se comparan con los datos de planta. Para establecer la región de inestabilidad, se utilizaron las pioneras, aunque esquemáticas, ideas de Kimura y Levenspiel (1977) cuyo modelo fue parametrizado y resuelto utilizando un método de continuación por homotopía (Rahimiana *et al.*, 2011). Así, la combinación de las dos metodologías (solución de los balances y determinación de región de inestabilidad) se propone como un nuevo aporte al análisis y diseño de sistemas reactivos. Los casos (i) y (ii) arriba mencionados se analizan mediante la construcción de las cartas de diseño de tiempo de residencia-temperatura-conversión ( $\tau$ -T- $X_A$ ), en la cual una envolvente o separatriz en el cuadrante cartesiano conversión-temperatura define la región de operación. De esta forma, las condiciones óptimas de operación se definen en correspondencia con la progresión óptima de temperatura, en el diagrama de curvas de isovelocidad y las condiciones recomendadas para el uso del catalizador industrial. Finalmente, se analizan dos diferentes opciones de operación del reactor (caso adiabático y con intercambio de calor). Todas las simulaciones fueron implementadas en el software MatLab®.

## EL MODELO

### Modelo Cinético

Aunque la síntesis de metanol es un proceso comercial de aproximadamente cien años de existencia, su mecanismo de reacción es aún motivo de debate. Sin embargo, la hipótesis más aceptada incluye la hidrogenólisis del CO. En este trabajo se utilizó el modelo propuesto por van den Bussche y Froment (1996) por dos razones: la primera, porque en su estudio cinético utilizaron un catalizador comercial (Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>); y la segunda, porque las condiciones analizadas (de operación y composición de alimento) son también similares a las industriales (Presión = 51 bar, 180°C < T < 280°C). El gas de síntesis que se alimenta al reactor usualmente proviene de la gasificación del carbón, reformado con vapor, u oxidación parcial de hidrocarburos (usualmente gas natural). Este es una mezcla compuesta principalmente de CO, CO<sub>2</sub>, e H<sub>2</sub> junto con N<sub>2</sub>, metano, y otros

gases inertes (Tabla 1). Las principales reacciones involucradas en el proceso de síntesis de metanol se presentan en las ecuaciones (1) y (2) junto con valores termodinámicos asociados a ellas.



El  $\text{CO}_2$  y el  $\text{H}_2$  producen metanol y agua, reacción (1). Tanto el  $\text{CO}_2$  como el  $\text{CO}$  están involucrados en la reacción (2), la reacción de water gas shift, que también es catalizada en el proceso reactivo. Las dos reacciones son exotérmicas, y la reacción (1) está acompañada por una disminución en el número de moles (volumen). Las leyes de velocidad ajustadas para las reacciones (1) y (2) vienen dadas por las expresiones (3) y (4) (Van den Bussche y Froment (1996)).

$$-r_1 = \frac{k_1 P_{\text{CO}_2} P_{\text{H}_2} \left( 1 - \frac{1}{K_{e,1}} \frac{P_{\text{H}_2\text{O}} P_{\text{CH}_3\text{OH}}}{P_{\text{CO}_2} P_{\text{H}_2}^3} \right)}{\left( 1 + K_1 P_{\text{H}_2}^{0.5} + K_2 P_{\text{H}_2\text{O}} + K_3 \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{\text{H}_2}} \right)^3} \quad (3)$$

$$-r_2 = \frac{k_2 P_{\text{CO}_2} \left( 1 - \frac{1}{K_{e,2}} \frac{P_{\text{H}_2\text{O}} P_{\text{CO}}}{P_{\text{CO}_2} P_{\text{H}_2}} \right)}{\left( 1 + K_1 P_{\text{H}_2}^{0.5} + K_2 P_{\text{H}_2\text{O}} + K_3 \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{\text{H}_2}} \right)} \quad (4)$$

En estas ecuaciones,  $r$  está en  $\text{mol}/(\text{s} \cdot \text{kg}_{\text{cat}})$ ,  $k_1 = 1.07 \exp(36696 \text{ (kJ/kmol)}/RT)$ ;  $k_2 = 1.22 \exp(-94765 \text{ (kJ/kmol)}/RT)$ ;  $P_i$  es la presión parcial del componente  $i$  ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ), en bar;  $\log_{10} K_{e,1} = (3066/T) - 10.592$ ;  $\log_{10} K_{e,2} = (-2073/T) + 2.029$ ;  $K_2 = 6.62 \times 10^{-11} \exp(124119 \text{ (kJ/kmol)}/RT)$ ; y  $K_3 = 3453.38$  (Van den Bussche y Froment, 1996).

#### Modelo del Reactor

Para este estudio se asumirá un modelo unidimensional no isotérmico, de un reactor multi-tubular de coraza y tubos (reactor Lurgi), en flujo pistón, sin gradientes radiales en el lecho catalítico, enfriado por agua en ebullición a alta presión. El factor de efectividad se asumirá contante e igual a 1. Las especificaciones del reactor, del catalizador, y de la corriente de alimento se presentan en la Tabla 1. El fluido de servicio (agua de enfriamiento) ingresa a la chaqueta del reactor a  $220^\circ\text{C}$  con un flujo másico de  $13800 \text{ kg/h}$  (Chen *et al.*, 2011).

$$-U_z \frac{dC_j}{dz} = \rho r_j \quad (5)$$

$$U_z \rho C_p \frac{dT}{dz} = (-\Delta H) \rho r_j - 4 \frac{U}{d_t} (T - T_a) \quad (6)$$

$$-\frac{dP}{dz} = \frac{2f_p U_z^2}{g d_p} \quad (7)$$

Tabla 1: Datos de operación del reactor industrial útiles para la simulación (Chen *et al.*, 2011).

Reactor		Catalizador		Corriente de alimento		Flujos individuales en la corriente de alimento, kg/h	
Diámetro de los tubos, m	0.04	Forma de la partícula	Cilíndrica	Temperatura, $^\circ\text{C}$	225	CO	10727.9
Longitud de los tubos, m	7	Diámetro, mm	5.4	Presión, bar	69.7	CO <sub>2</sub>	23684.2
Número de tubos	1620	Altura, mm	5.2	Flujo molar, kmol/h	6264.8	H <sub>2</sub>	9586.5
$\varepsilon$ , m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>	0.285			Flujo másico, kmol/h	57282.8	N <sub>2</sub>	8072
						CH <sub>4</sub>	4333.1
						Metanol	756.7
						H <sub>2</sub> O	108.8
						Etanol	0.6
Coeficiente de transferencia de calor, U, J/(s.K.m <sup>2</sup> )	118.44	Densidad, kg/m <sup>3</sup>	1190	Flujo volumétrico, m <sup>3</sup> /h	3835.4	Formiato de metilo	13

## DETERMINACION DE LA REGIÓN DE OPERACIÓN INESTABLE

Siguiendo el esquema teórico propuesto por Kimura y Levenspiel (1977), es claro que en condiciones de inestabilidad térmica siempre se cumple la siguiente relación:

$$\left( \begin{array}{c} \text{pendiente de la curva del} \\ \text{balance de materia} \end{array} \right) > \left( \begin{array}{c} \text{pendiente de la línea del} \\ \text{balance de energía} \end{array} \right) \quad (8)$$

El balance de energía se puede reorganizar de la forma (Fogler, 2006):

$$X_A = A + JT \quad (9)$$

Ahora, los límites entre la región estable y la inestable corresponden al lugar geométrico de los puntos en los cuales la pendiente de la línea a  $\tau'$  constante es igual a la pendiente de la línea de operación adiabática (calculada a partir del balance de energía). Es decir:

$$\left( \begin{array}{c} \text{pendiente de la curva a} \\ \tau' \text{ constante} \end{array} \right) > J = \left( \frac{C_{pA}}{-\Delta H_{Rxn}} \right) \quad (10)$$

Luego, el objetivo es encontrar los puntos coordinados  $(X_A, T)$ , de las curvas a  $\tau'$  constante, que tienen como pendiente  $J$ . Para esto se debe resolver una ecuación de la forma:

$$G(X_A, T) = J - \left( \frac{dX_A}{dT} \right)_{\tau} = 0 \quad (11)$$

donde la derivada se evalúa a partir del balance de materia, ecuación (5), de forma que:

$$\left( \frac{dX_A}{dT} \right)_{\tau} = \frac{\tau' \left( \frac{\partial(-r_A)}{\partial T} \right)_{X_A}}{1 + \tau' \left( \frac{\partial(-r_A)}{\partial X_A} \right)_{T}} \quad (12)$$

Este es la expresión general que corresponde al criterio de estabilidad presentado en la ecuación (8). La complejidad de aplicar y solucionar la ecuación (12) depende de la expresión de la ley de velocidad. Así, para poder dar solución al criterio de inestabilidad, se define la siguiente función del balance de materia:

$$F(X_A, T, \tau') = X_A - \tau'(r_A) = 0 \quad (13)$$

Las ecuaciones (11) y (13) deben resolverse simultáneamente. Para esto, se implementó numéricamente en MatLab® el método de continuación por Homotopía (expuesto en detalle por Rahimiana *et al.*, 2011). Para tal fin, estas dos ecuaciones se agrupan en una nueva variable  $H$  como se muestra en la ecuación (14).

$$H(X_A, T, \tau') = H(Z, \tau') = \begin{bmatrix} G \\ F \end{bmatrix} = 0 \quad (14)$$

La ecuación (14) contiene  $X_A$  y  $T$ , las cuales están agrupadas en la nueva variable  $Z$ . Como  $X_A = X_A(T)$ , o  $T = T(X_A)$ , básicamente, el algoritmo consiste en encontrar los valores de la nueva variable  $Z$ , para un valor fijo de  $\tau'$ . Esto se puede hacer usando un método de Newton-Raphson multivariable como lo muestra la ecuación (15).

$$Z^{k+1} = Z^k - \frac{\partial H / \partial \tau'}{\partial H / \partial Z} \Delta \tau' \quad (15)$$

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las ecuaciones (5) a (7) se resolvieron simultáneamente, utilizando un método de Runge-Kutta de 4<sup>to</sup> orden (MatLab®). Los perfiles de conversión, presión, y temperatura se presentan en la Figura 1. Esta figura incluye los valores medidos en planta (a la salida del reactor) reportados por Chen *et al.* (2011). El modelo representa con excelente precisión los valores industriales. Los porcentajes de error para la presión,

temperatura, y conversión fueron del 0,05%, 0,07%, 0,16%, respectivamente. El perfil de temperatura aumenta inicialmente alcanzando un máximo de temperatura de 251 °C, a 1,74 m de longitud, y una conversión de 3,84%. Después de ese punto, la temperatura disminuye progresivamente hasta la salida del reactor debido a la disminución de la velocidad de reacción (reacción a condiciones cercanas al equilibrio). La presión disminuye continuamente a lo largo del reactor hasta 66,7 bar.

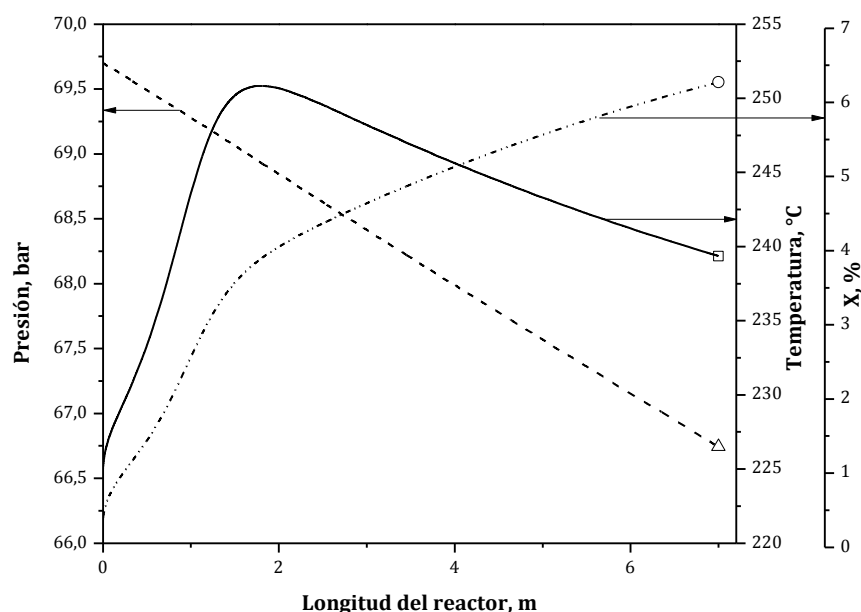


Fig. 1: Perfiles de conversión, temperatura y presión para el reactor de producción de metanol. Símbolos: datos de planta reportados por Chen *et al.* (2011).

Para determinar las condiciones de inestabilidad del reactor se sigue un procedimiento de tres etapas: en primer lugar, considerando que las reacciones (1) y (2) se encuentran limitadas por el equilibrio químico, se analiza cómo influye la variación de las condiciones de operación (v.g., temperatura) sobre la conversión de equilibrio y la velocidad de reacción. En segundo lugar, debido a la exotermicidad de las mismas reacciones, es importante determinar cómo esos efectos calóricos modifican la evolución de temperatura en el reactor. Esto permite proponer diferentes esquemas de reactores y/o intercambio de calor que se aproximen al esquema óptimo de operación (tercera etapa). Los resultados obtenidos de estas tres etapas se encuentran resumidos en la Figura 2.

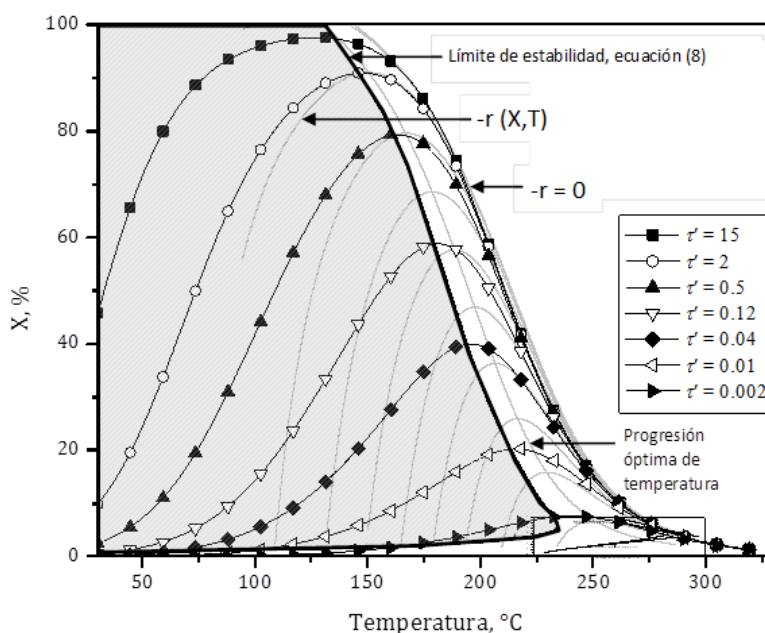


Fig. 2: Región de inestabilidad (zona sombreada) en el reactor tubular para la síntesis de metanol. Se incluyen las curvas a  $\tau'$  constante, de isovelocidad, y la progresión óptima de temperatura.

Así, para las condiciones de alimento presentadas en la Tabla 1, inicialmente se muestra cuantitativamente como, para este proceso reactivo exotérmico, la conversión de equilibrio disminuye con el aumento en la temperatura de reacción (curva señalada con  $-r = 0$ ). Para valores diferentes de velocidad de reacción, se incluyen en la misma figura las curvas de parejas  $X$  vs.  $T$  (curvas de isovelocidad,  $-r(X,T)$ ) y la curva correspondiente al lugar geométrico de las velocidades máximas de reacción (o progresión óptima de temperatura, que equivale a las temperaturas a las que la velocidad de reacción es máxima). Los resultados obtenidos de aplicar el algoritmo propuesto para determinar la región de inestabilidad se presentan en la Figura 2 (curvas a  $\tau'$  constante y lugar geométrico de los puntos que cumplen con el criterio de la ecuación (8)). Se observa que la región de inestabilidad está alejada de la condición de equilibrio ( $-r = 0$ ) y a la izquierda de la curva de progresión óptima de temperatura. La trayectoria de la región de inestabilidad tiene un máximo de temperatura el cual representa la temperatura límite de operación y puede correlacionarse con las condiciones de operación del reactor (v.g., línea de operación, la temperatura mínima de la corriente de alimento, información sobre estabilidad del catalizador, etc...). Así, considerando que la temperatura de operación de catalizador está limitada al intervalo  $180^{\circ}\text{C} < T < 280^{\circ}\text{C}$ , que la temperatura de entrada del fluido de servicio es de  $220^{\circ}\text{C}$ , y que la temperatura de alimento reportada para el proceso industrial es de  $225^{\circ}\text{C}$ , es posible definir que el área límite de operación del reactor debe coincidir con la que se encuentra demarcada en la esquina inferior derecha de la Figura 2. Esta incluye dos simples líneas rectas: una vertical a una temperatura de  $220^{\circ}\text{C}$  (que equivale al hipotético caso isotérmico,  $U \rightarrow \infty$ ) y otra que inicia en la temperatura de alimento al reactor y que no puede sobre pasar la curva de equilibrio (que equivale al caso adiabático,  $U \rightarrow 0$ ). Una ampliación de esta zona se presenta en la Figura 3. En ella se incluyen dos posibilidades de operación (esquemas) del proceso reactivo: operar en forma adiabática o con intercambio de calor.

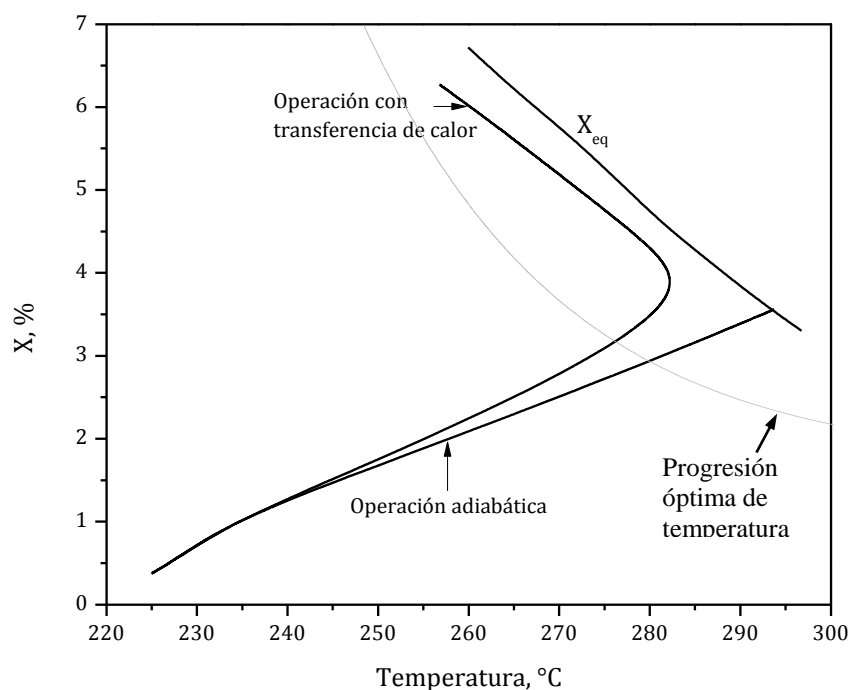


Fig. 3: Diagramas de operación para el reactor de producción de metanol. Se muestran los casos con transferencia de calor y adiabático. Se incluye la línea de conversión de equilibrio.

En el caso de la operación adiabática, después de alimentar el reactor a  $225^{\circ}\text{C}$ , se genera un incremento de temperatura que alcanza los  $294^{\circ}\text{C}$  ( $14^{\circ}\text{C}$  mayor al límite superior de aplicación del catalizador) y una conversión final de 3.55%. Es importante recalcar que la pendiente de esta línea depende de la cantidad de inertes presentes en la mezcla reactiva. Considerando que la conversión está tan limitada por el equilibrio químico, existen ventajas de utilizar un reactor más complejo. Por ejemplo, se podría utilizar una operación en múltiples etapas adiabáticas con enfriamiento entre ellas. Sin embargo, esto solo se recomienda cuando no es práctico realizar el intercambio de calor necesario dentro del reactor. Este caso es bien común de las reacciones en fase gaseosa, con sus relativamente inadecuadas características de intercambio de calor. Además, el punto caliente que deja entrever la simulación del proceso industrial (Figura 1), con un máximo de temperatura de  $251^{\circ}\text{C}$  está muy cercano del límite de aplicabilidad del catalizador. Por estas razones, es necesario la eliminación radical de calor dentro del reactor. Así, en el caso del reactor con transferencia de calor (del tipo coraza y tubos), el lecho catalítico debe enfriarse mediante el calentamiento del fluido de servicio que pasa por la chaqueta del reactor. Esta se debe hacer de tal forma que la línea de operación se aproxime a la óptima (es decir, a la que define la progresión óptima de temperatura).

Ajustando el grado de enfriamiento a través del reactor, es posible acercar el comportamiento de la línea de operación del reactor (conversión vs. temperatura) a la de progresión óptima de temperatura (máxima velocidad de reacción). Es decir, el comportamiento óptimo inherente a esta forma de operación se reduce a minimizar la cantidad total de catalizador necesario para alcanzar una conversión dada. Así, el reactor cuyo perfil de temperatura se ajuste a la progresión óptima de temperatura tendrá el menor volumen de reactor que cualquier otro tipo de arreglo. Para esto se determina un valor del coeficiente de transferencia de calor ( $U$ ) que permita alcanzar una conversión de salida determinada (en este caso correspondiente con los valores reportados en la Tabla 1). Esta se muestra en la Figura 3 como la línea de operación con transferencia de calor.

Esta trayectoria inicialmente sigue la línea de operación adiabática, cruza luego la curva de progresión óptima de temperatura, para después aumentar la conversión hasta alcanzar el valor especificado. Esta trayectoria compensa una velocidad de reacción lo suficientemente alta para definir un tamaño de reactor pequeño y una conversión cercana a la del equilibrio aceptable (en términos operativos ya que la velocidad de reacción disminuye al acercarse a las condiciones de equilibrio). Así, los valores de operación finalmente obtenidos incluyen usar una temperatura del fluido de servicio de 230 °C y un coeficiente de transferencia de calor de 118 J/(s.K.m<sup>2</sup>).

## CONCLUSIONES

En este trabajo se propuso un modelo para la simulación de un reactor Lurgi para la producción de metanol. Los valores obtenidos mostraron estar en concordancia con valores industriales. Se implementó numéricamente en MatLab® una herramienta para el análisis y la visualización de los límites de estabilidad de este proceso reactivo. Se analizó la evolución de la temperatura en el reactor y se establecieron valores de operación que explican el comportamiento industrial reportado. Se recalcularon los valores relacionados con la transferencia de calor del equipo y se estableció que para alcanzar una conversión definida de 6.3 %, la temperatura del fluido de servicio debe estar en 230 °C y la transferencia de calor debe garantizar un valor de 118 J/(s.K.m<sup>2</sup>).

## NOTACIÓN

A: Agrupación de términos del balance molar  
 $C_A$ : Concentración del reactivo límite  
 $C_p$ : Capacidad calorífica de la mezcla reactiva  
 $d_i$ : Diámetro del reactor  
 $d_p$ : Diámetro de las partículas de catalizador  
 $F$ : Función para el método de Homotopía  
 $F$ : Factor de fricción para el balance de energía mecánica  
 $G$ : Función para el método de Homotopía  
 $g$ : Factor de conversión para el balance de energía mecánica  
 $H$ : Función para el método de Homotopía  
 $J$ : Agrupación de términos del balance molar  
 $k_j$ : Constante cinética de la reacción  $j$   
 $K_{e,j}$ : Constante de equilibrio de la reacción  $j$   
 $K_n$ : Constante de adsorción  
 $r_j$ : Velocidad neta de reacción del componente  $j$   
 $P$ : Presión  
 $p_i$ : Presión parcial del componente  $i$ .  
 $T$ : Temperatura  
 $T_a$ : Temperatura del fluido de servicio  
 $U_z$ : Velocidad volumétrica de flujo  
 $z$ : longitud del reactor  
 $X$ : Conversión  
*Símbolos griegos*  
 $\rho$ : Densidad del fluido reactivo  
 $\Delta H_{298}^o$ : Entalpía de reacción a condiciones estándar.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Dirección de Investigación y Extensión de la Universidad Nacional de Colombia, Sede Manizales, por su apoyo económico para el desarrollo de esta investigación.

## REFERENCIAS

- Chen, L., Q. Jiang, Z. Song, y D. Posarac, "Optimization of methanol yield from a Lurgi reactor", doi: 10.1002/ceat.201000282, Chem. Eng. Technol., 34(5), 1 - 7 (2011)
- Fogler, H. S. "Elements of chemical reaction engineering", 4ta Edición, Prentice Hall, Hoboken, USA (2006)
- Kimura, S. y O. Levenspiel, "Temperature excursions in adiabatic packed bed reactors", doi: 10.1021/i260061a610, Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., 16(1), 145 – 148 (1977)
- Kordabadi, H. y A. Jahanmiri, "A pseudo-dynamic optimization of a dual-stage methanol synthesis reactor in the face of catalyst deactivation", doi:10.1016/j.ces.2006.10.015, Chem. Eng. Proc., 46(12), 1299 – 1309 (2007).
- Levenspiel, O., "Ingeniería de las Reacciones Químicas", 3ra Edición. Limusa-Wiley, México, México (2004)
- Lloyd, L., "Handbook of Industrial Catalysts", Springer, London, England (2011)
- Manenti, F., S. Cieri, y M. Restelli, "Considerations on the steady-state modeling of methanol synthesis fixed-bed reactor", doi:10.1016/j.ces.2010.09.036, Chem. Eng. Sci. 66(2), 152 – 162 (2011)
- Manenti, F., S. Cieri, M. Restelli, G. Bozzano, "Dynamic modelling of the methanol synthesis fixed-bed reactor", doi:10.1016/j.compchemeng.2012.09.013, Computers & Chemical Engineering 48, 325-334 (2013).
- Rahimiana, S. K., F. Jalali, J. D. Seader, R. E. White, "A new homotopy for seeking all real roots of a nonlinear equation", doi:10.1016/j.compchemeng.2010.04.007, Computers and Chem. Eng., 35(3), 403 – 411 (2011)
- Rahimpour, M. R., M. Bayat, y F. Rahmani, "Dynamic simulation of a cascade fluidized-bed membrane reactor in the presence of long-term catalyst deactivation for methanol synthesis", doi:10.1016/j.ces.2010.04.018, Chem. Eng. Sci., 65(14), 4239 – 4249 (2010).
- Shahrokhi, M. y G. R. Baghmisheh, "Modeling, simulation and control of a methanol synthesis fixed-bed reactor", doi:10.1016/j.ces.2004.12.051, Chem. Eng. Sci., 60(15), 4275 – 4286 (2005).
- Sidharth, A., y C. M. Hilton, "Modeling, simulation and advanced control of methanol production from variable synthesis gas feed" doi:10.1016/j.compchemeng.2012.02.005, Computers & Chemical Engineering, 40, 117 – 131 (2012).
- Riaz, A.; G. Zahedi, y J. Klemeš, "A review of cleaner production methods for the manufacture of methanol", doi:10.1016/j.jclepro.2013.06.017, J. Cleaner Prod., 57, 19 – 37 (2013).
- van den Bussche, K. M. y G. F. Froment, "A steady-state kinetic model for methanol synthesis and the water gas shift reaction on a commercial Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst", doi:10.1006/jcat.1996.0156, J. Catal., 161(1), 1–10 (1996)