

# Tabla de Contenido

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Marco Teórico</b>	<b>3</b>
1.1. Reacciones Catalíticas . . . . .	3
1.2. Cinética de reacciones . . . . .	4
1.3. Metanación . . . . .	7
1.3.1. Componentes activos . . . . .	7
1.3.2. Soportes . . . . .	8
1.4. Recientes avances en catalizadores de metanación . . . . .	9
1.4.1. Reacciones . . . . .	10
1.4.2. Metanación: $H_2$ , $CO$ y $CO_2$ . . . . .	11
1.5. Mecanismos . . . . .	15
1.6. Método de Monte Carlo . . . . .	17
1.7. Hipótesis y Objetivos . . . . .	19
1.7.1. Hipótesis . . . . .	20
1.7.2. Objetivo general . . . . .	20
1.7.3. Objetivos específicos . . . . .	20
<b>2. Metodología</b>	<b>21</b>
2.1. Modelo del catalizador . . . . .	21
2.2. Asignación de características a cada sitio activo . . . . .	25
2.3. Algoritmo de simulación y secuencia de eventos . . . . .	30
<b>3. Resultados Parte I: Monte Carlo General</b>	<b>36</b>
3.1. Variación de tamaños . . . . .	36
3.2. Variación de la temperatura . . . . .	41
<b>4. Discusiones: Parte I</b>	<b>46</b>
<b>5. Resultados Parte II: Difusión de Hidrógeno</b>	<b>49</b>
5.1. Variación de tamaños . . . . .	49
5.2. Variación de la temperatura . . . . .	56
<b>6. Discusiones: Parte II</b>	<b>62</b>
<b>7. Resultados Parte III: Difusión Basal de Hidrógeno</b>	<b>65</b>

<b>8. Discusiones: Parte III</b>	<b>72</b>
<b>9. Simulación gráfica</b>	<b>75</b>
<b>Conclusión</b>	<b>78</b>
9.1. Recomendaciones . . . . .	79
<b>Bibliografía</b>	<b>80</b>
<b>Anexos</b>	<b>87</b>
<b>A. Anexo I: Ejemplo de código</b>	<b>88</b>
A.1. Algoritmo Monte Carlo . . . . .	88
A.1.1. Cálculo de eventos . . . . .	104
A.1.2. Cálculo de probabilidades . . . . .	106
A.1.3. Cálculo de velocidades . . . . .	107
A.1.4. Inicialización de matrices . . . . .	109
A.1.5. Sitio: ¿ Ocupado o vacío ? . . . . .	110
A.1.6. Llenado de matriz inicial desde excel . . . . .	111
A.1.7. Funciones de aleatoriedad . . . . .	112
A.1.8. Cálculo de cubrimiento fraccional simple . . . . .	113
A.1.9. Cálculo de cubrimiento fraccional condicionado . . . . .	113
A.1.10. Simulación Visual Basic .NET . . . . .	114