

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE GUADALAJARA

Incorporada a la Universidad Nacional Autónoma de México

ESCUELA DE CIENCIAS QUIMICAS



TESIS CON
FALLA LA ORIGEN

SIMULACION POR COMPUTADORA DEL SISTEMA REACCIONANTE $A + B = C$
EN FASE GASEOSA PARA REACTORES IDEALES ISOTERMICOS Y
ADIABATICOS EN ESTADO ESTACIONARIO

TESIS PROFESIONAL

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO

PRESENTA:

GUILLERMO FRANCISCO ESCUTIA NUÑEZ

ASESOR: I.Q. MARIA DEL CONSUELO LOPEZ LIMON

GUADALAJARA, JALISCO, 1986



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN	5
CAPÍTULO UNO	7
Reactores ideales	7
Condiciones isotérmicas	7
Reactor de flujo de pistón	7
Reactor de mezcla completa	8
Condiciones adiabáticas	9
CAPÍTULO DOS	11
Balances de materia y energía	11
Balance de materia	13
Constantes de velocidad	15
Balance de energía	16
CAPÍTULO TRES	19
Reactores isotérmicos	19
Reactor de mezcla: ecuación de balance de materia	19
Reactor de pistón: ecuación de balance de materia	20
CAPÍTULO CUATRO	22
Reactores adiabáticos	22
Balance de energía: reactor de pistón o mezcla	24
CAPÍTULO CINCO	26
Obtención del volumen mínimo	26
Desarrollo de ecuaciones	28
Velocidad de reacción constante	29
CAPÍTULO SEIS	31
Algoritmo y diagrama de flujo	31
Algoritmo	33
Datos necesarios	35
Cálculo para reactores isotérmicos	38
Cálculo para reactor de mezcla adiabático	40
Cálculo para reactor de pistón adiabático	41
Cálculo de conversión de equilibrio	42
Cálculo de curvas de velocidad de reacción constante	43
Diagrama de Flujo	44

CAPÍTULO SIETE	73
Programa de computadora	73
Opción uno	76
Opción dos	79
Opción tres	81
Opción cuatro	82
CAPÍTULO OCHO	85
Simulación de un sistema real	85
Reactores isotérmicos	87
Reactor de mezcla adiabático	88
Reactor de pistón adiabático	89
Conversion de equilibrio	90
Curvas de velocidad de reacción constante	91
Resumen	92
Conclusiones	94
BIBLIOGRAFÍA	95
APENDICE	96

SIMULACIÓN POR
COMPUTADORA DEL
SISTEMA REACCIONANTE
 $A + B \rightarrow C$ EN FASE
GASEOSA PARA REACTORES
IDEALES ISOTÉRMICOS
Y ADIABÁTICOS
EN ESTADO ESTACIONARIO

INTRODUCCIÓN

El advenimiento del equipo de computación ha representado en todos los ámbitos una forma de hacer más eficiente el trabajo, ya que permite concentrarse más en la forma de utilizar los resultados que en cómo obtenerlos.

Esto es particularmente cierto en las ramas de ingeniería, donde abundan los métodos de prueba y error, que traen consigo sesiones interminables de tediosos cálculos, o métodos que implican una serie de complicadas operaciones.

Para evitar esto, se dio un gran auge al desarrollo de métodos que facilitarían las operaciones haciéndolas mucho más rápidas, los llamados 'Short-cut methods', los cuáles adolecían desafortunadamente de una inconveniencia: la poca exactitud.

Ahora las computadoras permiten tener ambas ventajas: exactitud y velocidad. De esta manera, el ingeniero puede concentrarse más profundamente en el análisis del sistema y el desarrollo del modelo matemático más conveniente.

Uno de los trabajos con los que el Ingeniero Químico debe enfrentarse usualmente, es determinar el tamaño o característica(s) de un equipo para lograr un objetivo (conversión, grado de separación, humedad residual, etc.), o bien, teniendo un equipo, desea averiguar qué es lo que puede lograr con él.

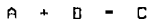
Bajo este enfoque está realizado el presente trabajo, siendo el equipo un reactor y el objetivo lograr una conversión dada.

En el presente trabajo haremos uso de la computadora para un campo que es de especial importancia para el Ingeniero Químico: 'Ingeniería de las Reacciones Químicas'.

Industrialmente nos encontramos con muchos tipos de reactores que operan bajo condiciones muy variadas, tales como Flujo en pistón, Flujo en mezcla completa, por lotes, homogéneos, heterogéneos, etc.

Querer integrar todas las posibilidades en un modelo matemático único es una tarea extremadamente compleja y, afortunadamente, innecesaria. Es más conveniente desarrollar el modelo matemático que describa un sistema reaccionante específico bajo unas condiciones particulares.

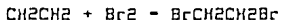
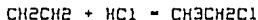
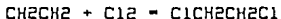
El sistema reaccionante estudiado es la reacción (general) homogénea, reversible, exotérmica, en fase gaseosa:



Este sistema se presenta muy comúnmente en muchas operaciones

industriales.

Las reacciones más conocidas que encajan con dicho sistema son:



Es decir, adición de halógenos y halogenuros de hidrógeno a alquenos.

Sin embargo, muchas otras reacciones pueden entrar en este sistema:

- Adición de halógenos y halogenuros de hidrógeno a alquinos (controlada).
- Hidrogenación de alquenos y alquinos (controlada).
- Alquilación de alquenos (por ejemplo la dimerización).
- Arilación de alquenos (por ejemplo la síntesis de etilbenceno).
- y en general reacciones de adición al doble enlace C-C.

Debemos hacer notar nuevamente que al sistema simulado implica no sólo la reacción, sino que también es en una sola fase gaseosa; es decir, la misma reacción en fase líquida, o en dos fases, o catalizada por un catalizador sólido, requerirán necesariamente, de otro modelo matemático.

Asimismo, se han escogido como condiciones de operación dos flujos continuos ideales: flujo en pistón y flujo en mezcla completa.

CAPÍTULO UNO

Reactores Ideales

Al analizar el comportamiento de reactores continuos (y en general de cualquier situación real) no se intenta determinar el comportamiento exacto del reactor, puesto que esto presenta dos dificultades que lo hacen de poca utilidad: una complejidad extrema del modelo, que resulta impráctica y el hecho de que dicho modelo serviría únicamente para un reactor o, a lo sumo, para un limitado número de éstos.

Otra forma más conveniente de abordar el problema consiste en establecer un modelo del comportamiento ideal y explicar el real como una desviación de dicho modelo.

Para el caso de reactores continuos, los dos modelos ideales utilizados para reacciones homogéneas son: el reactor de flujo de pistón (PUG FLOW REACTOR) y el reactor de mezcla completa (BACK MIX REACTOR o CONSTANT FLOW STIRRED TANK REACTOR).

CONDICIONES ISOTÉRMICAS

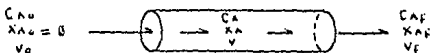
Cuando la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción se mantiene constante, el modelo sólo tiene que cumplir el balance de materia, en ese caso, el tamaño del reactor (volumen) se convierte en el punto crítico para lograr una conversión dada.

Reactor de Flujo de Pistón

Es característico de este reactor que el fluido tiene un flujo ordenado, en el cual puede haber mezcla lateral, pero, de ninguna manera, un elemento de flujo puede mezclarse con otro que este adelante o atrás de aquél. La única condición para que exista flujo en pistón es que el tiempo de residencia sea igual para cualquier elemento del fluido.

Los reactores reales que tienen un comportamiento similar al de flujo en pistón son los tubulares o compuestos por haces de tubos.

El balance de materia para un reactor de flujo en pistón (2) nos lleva a la siguiente ecuación:



$$1.1) \quad \tau = \frac{V}{v_0} = C_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

Donde:

- τ : tiempo espacial (tiempo)
- V : volumen del reactor (volumen)
- v_0 : caudal del flujo (volumen/tiempo)
- C_{A0} : concentración inicial del reactivo limitante (mol/volumen)
- X_A : conversión fraccional del reactivo limitante (adim.)
- $-r_A$: velocidad de reacción (mol/(volumen.tiempo)) como función de la conversión
- f : subíndice que denota 'Final'

Un análisis cualitativo de esta ecuación nos lleva a estas conclusiones:

- 1.- A mayor tiempo de residencia, dejando todas las demás condiciones constantes, la conversión fraccional será mayor.
- 2.- Una velocidad de reacción alta, requerirá un reactor de menor tamaño, para una conversión dada.

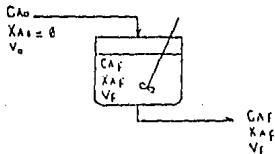
Reactor de Mezcla Completa

El reactor de mezcla completa es aquél en el cuál su contenido se halla perfectamente agitado, su composición y temperatura en cualquier punto del reactor es la misma, e igual a la corriente de salida.

Este reactor es tipificado por el tanque con agitador, usado en muchas reacciones en fase líquida.

Cabe hacer notar que los ejemplos de reactores que tienen un comportamiento similar a los modelos ya mencionados, son sólo representativos, ya que un reactor de cualquier forma o construcción puede comportarse -o no-, como alguno de estos modelos.

El balance de materia para este reactor (2) nos lleva a la siguiente ecuación:



$$1.2) \quad \tau = \frac{V}{V_0} = \frac{C_{A0} X_{Af}}{-r_{Af}}$$

Las conclusiones a que llegamos después del análisis cualitativo de esta ecuación, son idénticos a los del reactor de flujo en pistón.

CONDICIONES ADIABÁTICAS

Al llevarse a cabo una reacción química, se presentan efectos caloríficos en la forma de un desprendimiento o una absorción de calor. Teóricamente, es posible que no se absorba ni desprenda calor (cuando el calor de reacción es cero), pero éste no es el caso en la abrumadora mayoría de las reacciones.

De esta forma, el llevar a cabo una reacción a condiciones isotérmicas es posible únicamente de forma artificial, es decir, eliminando o proveyendo calor, según sea el caso.

Efectuar una reacción bajo condiciones adiabáticas quiere decir que se impide la transferencia de calor del sistema reaccionante a los alrededores aislando térmicamente el reactor (intercambio neto de calor igual a cero).

Al trabajar bajo estas condiciones, se debe cumplir no sólo el balance de materia, como en el caso de condiciones isotérmicas, sino también el balance de energía.

La ecuación a que nos lleva el balance de energía (2) es:

$$1.3) \quad X_A = - \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p dT}{\Delta H_r}$$

Donde:

- T : temperatura
- C_p : capacidad calorífica de la alimentación (energía/mol de A entrando)
- ΔH_r : calor de reacción (energía/mol)
- 1 : subíndice que denota 'entrada'
- 2 : subíndice que denota 'salida'
- X_A : conversión fraccional del reactivo limitante (adim)

Bajo estas condiciones, el tamaño del reactor ya no es el punto crítico para lograr una conversión deseada, sino que ahora es necesario, además, equilibrar dicho punto con un control del calor que se está produciendo (o consumiendo).

En la práctica industrial son muy comunes las reacciones altamente exotérmicas y reversibles, lo que da lugar a varios aspectos interesantes (y problemáticos).

Como es sabido, la velocidad de una reacción se incrementa con el aumento de temperatura; al trabajar con reacciones irreversibles o reversibles endotérmicas, es conveniente trabajar a la mayor temperatura posible (limitada por aspectos económicos y operacionales) para lograr la mayor conversión con el menor tamaño de reactor posible. Sin embargo, en el caso de las reacciones exotérmicas y reversibles tenemos dos puntos en oposición: por un lado, al aumentar la temperatura ciertamente aumenta la velocidad de la reacción directa, pero eso mismo ocurre con la reacción en el otro sentido, por lo que a mayores temperaturas los productos tienden a descomponerse más rápidamente en los reactivos que los formaron (conversión fraccional pequeña), por otro lado, si efectuamos la reacción a bajas temperaturas, la velocidad de reacción será menor y el tamaño de reactor deberá ser mayor para lograr una conversión dada. Es evidente entonces, que para llegar a la solución óptima desde el punto de vista económico, tendremos que aceptar un término medio, pues tenemos dos puntos que se contraponen.

CAPÍTULO DOS

Balances de Materia y Energía

Para poder predecir el comportamiento de un sistema reaccionante en reactores continuos, ideales, es necesario, primeramente, encontrar su expresión de velocidad.

La determinación de dicha expresión debe, necesariamente, ser realizada mediante una serie de pruebas de laboratorio, ajustando estadísticamente los datos a curvas matemáticas. Actualmente, no se cuenta con una base teórica suficiente para determinar cuantitativamente la velocidad de una reacción cualquiera.

Muy probablemente, al ajustar los datos a las curvas, varias de éstas darán correlaciones satisfactorias; desde el punto de vista ingenieril debemos escoger entonces la ecuación más sencilla; no tiene objeto trabajar con ecuaciones más complicadas si éstas van a llevarnos a resultados que nos pueden proporcionar ecuaciones más sencillas. Aún disponiendo de un computador, ésto es válido. Sin embargo, si llegamos a ecuaciones complicadas que nos dan resultados muy cercanos a los reales y no es posible que ecuaciones sencillas den aproximaciones comparables, es factible su uso, pues la computadora hace la diferencia.

En el caso de la reacción que vamos a estudiar, se ha encontrado que, en muchas ocasiones, puede considerarse como elemental, es decir, es posible deducir su expresión cinética a partir de su estequiometría, de acuerdo a la ley de acción de masas (2).

Esta ley nos dice que la velocidad de una reacción debe ser proporcional, en cualquier instante, a la concentración de los reactivos, con cada concentración elevada a una potencia igual al número de moléculas de cada especie participando en el proceso.

Por ejemplo, para las reacciones siguientes:

- a) $A \rightarrow \text{productos}$
- b) $A + B \rightarrow \text{productos}$
- c) $2A \rightarrow \text{productos}$

Sus ecuaciones de velocidad, tomando como base al reactivo limitante (A), serán:

- a') $-r_A = kCA$
- b') $-r_A = kCAC_B$
- c') $-r_A = kCA^2$

Así, para la reacción en estudio y definiendo a A como el reactivo limitante, B como el reactivo en exceso y C como producto, la expresión de desaparición de A por reacción es:

$$2.1) \quad -r_A = k_1 C_A C_B - k_2 C_C$$

Donde:

- r_A : velocidad de desaparición de A por reacción
mol/(volumen.tiempo)
- C_i : concentración de la especie i en cualquier momento
(mol/volumen)
- k_1, k_2 : son funciones de la temperatura. A una temperatura dada son constantes.
- A, B, C : especies químicas reaccionantes

Para la reacción elemental $A + B = C$ la ecuación (2.1) describe la velocidad de desaparición de A por reacción, tanto si es catalizada (por un catalizador gaseoso) como si no, aunque evidentemente los valores de las constantes k_1 y k_2 serán diferentes en cada caso.

En el caso de la reacción catalizada podemos mostrar que se apega a la ecuación (2.1) de esta forma:

En realidad, ocurren simultáneamente dos reacciones, cada una con su ecuación cinética correspondiente.

REACCIÓN NO CATALIZADA



REACCIÓN CATALIZADA



en este caso:

- W : catalizador
- C_w : conc. de catalizador en cualquier instante

La velocidad global de desaparición de A es:

$$-r_A = -r_{A1} + (-r_{A2})$$

$$-r_A = k_1 C_A C_B - k_2 C_C + (k_1' C_A C_B C_W - k_2' C_C C_W)$$

Como C se mantiene constante:

$$-r_A = K_1 C_A C_B - K_2 C_C + K_1'' C_A C_B - K_2'' C_C$$

$$-r_A = (K_1 + K_1'') C_A C_B - (K_2 + K_2'') C_C$$

$$-r_A = K_1''' C_A C_B - K_2''' C_C \quad \text{que es equivalente a (2.1)}$$

Balance de Materia

Para poder emplear la ecuación (2.1) en las ecuaciones que caracterizan al flujo en pistón y en mezcla completa, debemos poner todas las concentraciones en función de una sola especie.

Obrando de esta manera, un balance de materia para el componente A nos indica que, las moles del reactivo limitante en cualquier momento, serán iguales a las que había en un principio, menos las que han reaccionado hasta ese momento. Expresado matemáticamente:

$$2.2) \quad N_A = N_{A_0} - N_{A_0} X_A$$

para las demás especies:

$$2.3) \quad N_B = N_{B_0} - N_{A_0} X_A$$

$$2.4) \quad N_C = N_{C_0} + N_{A_0} X_A$$

$$2.5) \quad N_I = N_{I_0}$$

La nomenclatura empleada es:

- N_i : moles de la especie i en cualquier momento (moles)
- N_{i_0} : moles de la especie i iniciales (moles)
- X_A : fracción molar de reactivo limitante que ha reaccionado (adim.)
- A, B, C : especies químicas reaccionantes
- I : inertes

Para sustituir en la expresión (2.1) necesitamos las concentraciones, definidas por:

$$2.6) \quad C_i = N_i / V$$

Ahora bien, sabemos que en fase gaseosa, el volumen es directamente proporcional a la cantidad de moles de gas que haya presente, por tanto, al haber una disminución de moles al efectuarse la reacción, el volumen ocupado por los gases disminuirá necesariamente.

Se ha encontrado en gases ideales y a temperatura constante

(2), que el volumen varía linealmente con la conversión de esta manera:

$$2.7) \quad V = V_0 (1 + \epsilon_A X_A)$$

$$2.8) \quad \epsilon_A = \frac{N_{T_{X_A=1}} - N_{T_{X_A=0}}}{N_{T_{X_A=0}}}$$

- U : volumen total del sistema en cualquier momento (volumen)
V₀ : volumen inicial del sistema (volumen)
N_{T_{X_A=1}} : moles totales cuando A ha reaccionado completamente (X_A = 1) (moles)
N_{T_{X_A=0}} : moles totales cuando A aun no ha reaccionado (X_A = 0) (moles)

En el caso del reactivo limitante, substituyendo las ecuaciones (2.2) y (2.7) en la (2.6):

$$C_A = \frac{N_{A_0} - N_{A_0} X_A}{V_0 (1 + \epsilon_A X_A)}$$

$$C_A = \frac{N_{A_0} (1 - X_A)}{V_0 (1 + \epsilon_A X_A)}$$

$$2.9) \quad C_A = \frac{C_{A_0} (1 - X_A)}{1 + \epsilon_A X_A}$$

Operando igualmente con las demas especies:

$$2.10) \quad C_B = \frac{C_{B_0} - C_{A_0} X_A}{1 + \epsilon_A X_A}$$

$$2.11) \quad C_C = \frac{C_{C_0} - C_{A_0} X_A}{1 + \epsilon_A X_A}$$

$$2.12) \quad C_I = \frac{C_{I_0}}{1 + \epsilon_A X_A}$$

Únicamente nos restan por definir las constantes k₁ y k₂ para poder emplear la ecuación (2.1).

Constantes de Velocidad

La gran mayoría de las reacciones tienen constantes de velocidad que siguen aproximadamente la ecuación de Arrhenius (2):

$$2.13) \quad k = k_0 \exp(-E/RT)$$

- k : constante de velocidad como función de la temperatura
- k_0 : constante de proporcionalidad
- R : constante de los gases ideales (energía/(mol.temperatura))
- T : temperatura absoluta
- E : energía de activación (energía/mol)

Sacando logaritmos a ambos extremos:

$$2.14) \quad \ln k = \ln k_0 - E/R (1/T)$$

que es la ecuación de una recta de la forma $y = mx + b$.

Para caracterizarla por completo necesitamos:

- 2 puntos (constantes a dos temperaturas) ó,
- punto y pendiente (una constante a una temperatura y la energía de activación)

Aunque para minimizar el error experimental es usual hacer una regresión con los datos de temperatura ($1/T$) contra la constante de velocidad ($\ln k$).

En este caso habrá dos ecuaciones:

$$A + B \frac{k_1}{k_2} = C$$

$$2.15) \quad \ln k_1 = \ln k_{01} - E_1/R (1/T)$$

$$2.16) \quad \ln k_2 = \ln k_{02} - E_2/R (1/T)$$

Pero como:

$$2.17) \quad K = k_1/k_2$$

Podemos obtener k_2 teniendo k_1 y K , por medio de datos termodinámicos únicamente (2,6).

$$2.18) \quad \Delta G^\circ = - R T \ln K$$

Además la variación de $\Delta G^*/RT$ con la temperatura (2,6):

$$2.19) \quad \frac{d(\Delta G^*/RT)}{dT} = -\frac{\Delta H}{RT^2}$$

en consecuencia:

$$2.20) \quad \frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H_r}{RT^2}$$

esta ecuación nos permite conocer K a cualquier temperatura, así:

$$d \ln K = \frac{\Delta H_r}{R T^2} dT$$

En un rango pequeño de temperatura, o cuando ΔH_r es constante

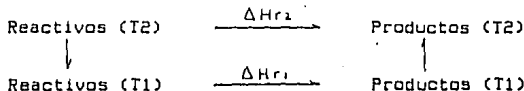
$$2.21) \quad \ln \frac{K_2}{K_1} = -\frac{\Delta H_r}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

Más frecuentemente, ΔH_r varía con la temperatura apreciablemente, procederemos, por consiguiente, a integrar la ecuación (2.20) tomando ésto en cuenta.

Balace de Energía

Para calcular el calor de reacción a una temperatura cualquiera, conociéndolo a una temperatura estándar, se procede a un balance de energía.

calor absorbido por la reacción a T2 = calor suministrado a los reactivos para llevarlos de T2 a T1 + calor absorbido por la reacción a T1 + calor suministrado a los productos para llevarlos de T1 a T2



Matemáticamente:

$$\Delta H_{r2} = (H_2 - H_1)_{\text{react}} + \Delta H_{r1} - (H_2 - H_1)_{\text{prod}}$$

$$\Delta H_{r2} = \Delta H_{\text{react}} + \Delta H_{r1} - \Delta H_{\text{prod}}$$

ya que: $\Delta H = \int_{T_1}^{T_2} C_p dT$

$$\Delta H_{r2} = \Delta H_{r1} + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p dT$$

donde: $\Delta C_p = C_{p_c} - (C_{p_A} + C_{p_B})$

Se encuentran tabulados datos de ΔH_f° a una temperatura estándar (25 C) en tablas (6).

Las capacidades caloríficas de las sustancias también se encuentran en tablas (6), en muchas ocasiones expresadas como funciones de la temperatura, por medio de ecuaciones empíricas de la forma:

a) $C_p = a + bT + cT^2$ ó

b) $C_p = \alpha + \beta T + \gamma T^{-2}$

Para abarcar ambos casos supondremos que vienen dadas por una ecuación única:

c) $C_p = \alpha + \beta T + \sigma T^2 + \delta T^{-2}$

Entonces:

$$\Delta H_{r2} = \Delta H_{r1} + \int (\Delta\alpha + \Delta\beta T + \Delta\sigma T^2 + \Delta\delta T^{-2}) dT$$

Integrando, resulta:

$$\Delta H_{r2} = \Delta H_{r1} + \Delta\alpha T + \Delta\beta \frac{T^2}{2} + \Delta\sigma \frac{T^3}{3} - \Delta\delta \frac{1}{T} + I$$

$$E = \Delta H_{r1} + I$$

$$2.22) \quad \Delta H_{r_T} = E + \Delta\alpha T + \Delta\beta \frac{T^2}{2} + \Delta\sigma \frac{T^3}{3} - \Delta\delta \frac{1}{T}$$

Con esta ecuación podemos determinar ΔH_r a cualquier temperatura. E se determina conociendo el calor de reacción a una temperatura.

Substituyendo en la ecuación (2.20)

$$\ln K = \frac{1}{R} \int \left(\frac{E + \Delta\alpha T + \Delta\beta T^2/2 + \Delta\sigma T^3/3 - \Delta\delta/T}{T^2} \right) dT$$

$$\ln K = \frac{1}{R} \int \left(\frac{E}{T^2} + \frac{\Delta\alpha}{T} + \frac{\Delta\beta}{2} + \frac{\Delta\sigma T}{3} - \frac{\Delta\delta}{T^3} \right) dT$$

$$2.23) \quad \ln K = -\frac{E}{RT} + \frac{\Delta\alpha}{R} \ln T + \frac{\Delta\beta}{2R} T + \frac{\Delta\sigma}{6R} T^2 + \frac{\Delta\delta}{2RT^2} + Q$$

La constante Q se puede evaluar si se conoce la constante de equilibrio a una temperatura.

Ahora, podemos proceder a utilizar la ecuación (2.1) para desarrollar el modelo del comportamiento del sistema reaccionante en los reactores isotérmicos.

CAPÍTULO TRES

Reactores Isotérmicos

Para el diseño de un reactor hemos de establecer el tamaño, tipo de reactor y las condiciones de operación más adecuadas para lograr un objetivo propuesto.

En el caso de la reacción homogénea bajo estudio, el parámetro que definirá el tamaño será el volumen del reactor; el tipo de reactor será de pistón o mezcla, y para encontrar las condiciones de operación óptimas, trabajando isotérmicamente, tendremos que fijar la temperatura a la cuál operaremos nuestro reactor con objeto de lograr una conversión deseada (objetivo), de acuerdo a las características de nuestra corriente de alimentación.

Ya en el primer capítulo mencionamos brevemente en qué consistían los reactores ideales a tratar y las ecuaciones que definían su comportamiento (ecs. 1.1 y 1.2).

Estas ecuaciones están en función de la velocidad de reacción, que, para nuestra reacción, está dada por la ecuación 2.1 .

Para simular su comportamiento en reactores ideales, sólo falta substituir esta ecuación, en la ecuación del reactor correspondiente, poniendo todas las especies químicas en función del reactivo limitante (ecs 2.9 a 2.12).

Reactor de mezcla: ecuación de balance de materia

La ecuación de diseño para este reactor es la 1.2

$$\tau = \frac{V}{V_0} = \frac{C_{A0} X_{Af}}{-r_{Af}}$$

donde $-r_{Af}$ quedó definida por:

$$2.1) \quad -r_{Af} = K_1 C_{Af} C_{Bf} - K_2 C_{Cf}$$

sustituyendo las ecuaciones 2.9 a 2.12 en ésta obtenemos:

$$-\tau_{Af} = K_1 \left[\frac{C_{A0}(1-X_A)}{1+E_A X_A} \right]_f \left[\frac{C_{B0}-C_{A0} X_A}{1+E_A X_A} \right]_f - K_2 \left[\frac{C_{C0} + C_{A0} X_A}{1+E_A X_A} \right]_f$$

$$-r_A = \frac{K_1 C_{A_0}^2 (1 - X_A)(C_{A_0} - X_A)}{(1 + E_A X_A)^2} - \frac{K_2 C_{A_0} (C_{C_0} / (C_{A_0} + X_A))}{1 + E_A X_A}$$

Haciendo: $M = C_{B_0} / C_{A_0}$

$$M' = C_{C_0} / C_{A_0}$$

$$-r_A = \frac{K_1 C_{A_0}^2 (1 - X_A)(M - X_A)}{(1 + E_A X_A)^2} - \frac{K_2 C_{A_0} (M' + X_A)}{1 + E_A X_A}$$

$$-r_A = \frac{K_1 C_{A_0}^2 (1 - X_A)(M - X_A) - K_2 C_{A_0} (M' + X_A)(1 + E_A X_A)}{(1 + E_A X_A)^2}$$

Despejando el volumen:

$$3.1) \quad V_m = \frac{V_0 X_A (1 + E_A X_A)^2}{K_1 C_{A_0} (1 - X_A)(M - X_A) - K_2 (M' + X_A)(1 + E_A X_A)}$$

Esta ecuación nos permitirá calcular el volumen del reactor para una conversión deseada, directamente.

Calcular lo contrario, la conversión máxima en un reactor de cierto volumen, también es factible, aunque, como resulta imposible despejar X_A , tendremos que hacerlo por prueba y error.

Hacerlo con calculadora (por no decir a mano), resulta largo y tedioso, pero la computadora lo efectúa en unos pocos segundos, sobre todo sabiendo que el rango práctico de X_A es de 0 a 1. (en realidad, al hacer las corridas de prueba salieron varias dificultades que serán comentadas más adelante).

Reactor de pistón: ecuación de balance de materia

Operando de la misma manera que el reactor de mezcla, pero utilizando la ecuación 1.1 llegamos a:

$$3.2) \quad V_P = v_0 \int_0^{X_A} \frac{(1 + E_A X_A)^2 dX_A}{K_1 C_{A_0} (1 - X_A)(M - X_A) - K_2 (M' + X_A)(1 + E_A X_A)}$$

Aquí, podemos calcular el volumen por medio de una integración gráfica o por métodos numéricos (SIMPSON).

Igual que en el caso anterior, calcular la conversión a partir del volumen, resulta larguísimo a mano o por calculadora, pues debemos de estar suponiendo el límite superior de la integral, calcular ésta por aproximación y luego checar si resultó correcta la suposición, es un camino lento y susceptible a que sean cometidos errores, y aún la computadora emplea un tiempo significativamente mayor que en el caso del reactor de mezcla, es este caso hablamos no de unos pocos segundos, sino de algunos minutos, no obstante, la computadora nos ahorra muchísimo tiempo.

CAPÍTULO CUATRO

Reactores Adiabáticos

Mantener una temperatura constante, dado que prácticamente toda reacción química absorbe o desprende calor, no es fácil en la mayoría de los sistemas.

Cuando se requiere operar a una sola temperatura, el reactor de mezcla facilita mucho la operación, puesto que al trabajar a las condiciones de salida, la tasa de calor que hay que eliminar o proporcionar es constante en cualquier punto del reactor; una chaqueta o serpentín pueden ser empleados para eliminar (o proporcionar) el calor de exceso (o faltante), siempre y cuando éste no sea excesivo, pues tales medios son relativamente limitados en cuanto a su capacidad.

En el caso del reactor de pistón, es más difícil mantener la temperatura invariable, puesto que al cambiar las condiciones a lo largo de este reactor, el calor producido o absorbido varía, debido a que la tasa de producción de calor está en función de la longitud del reactor.

Para enfriar o calentar estos sistemas en la medida adecuada, son necesarios procedimientos más elaborados.

Uno de ellos consiste en llevar a cabo la reacción en un reactor semejante a un intercambiador de calor de un paso en tubos. La alimentación pasa por los tubos y el agua de enfriamiento (si es una reacción exotérmica) por la coraza.

Por esta dificultad y por razones económicas, es más deseable en muchas ocasiones operar adiabáticamente (aislando al reactor), y si la reacción es muy exotérmica, pueden emplearse inertes en el flujo de alimentación, para que absorban el calor de exceso.

Al operar adiabáticamente, las temperaturas de entrada y salida de los flujos no serán iguales; por lo que para simular estas condiciones correctamente, debemos tener estos factores en cuenta.

Por qué son diferentes estas temperaturas? La respuesta es sencilla, supongamos que nuestra reacción es exotérmica y enviamos la alimentación al reactor a una temperatura T_1 , al reaccionar se produce un desprendimiento de calor, que calienta las especies químicas, por lo que saldrán a una temperatura mayor.

Tenemos, pues, que considerar ahora no sólo el balance de materia, como en el capítulo anterior, sino que debemos incluir también el balance de energía.

Debido a que este nuevo balance complica un poco las cosas,

este capítulo tratará sobre qué conversión se logrará con un reactor existente, dejando para el siguiente la manera de encontrar el volumen si queremos una conversión fija.

Las ecuaciones para el balance de materia son las mismas de los reactores isotérmicos correspondientes (ecs. 3.1 y 3.2).

Estas ecuaciones nos indicarán cómo, para un reactor existente, la conversión fraccional depende de la temperatura:

$$X_A = f_n(T) \quad T = \text{CONST.}$$

El balance de energía, nos lleva a una ecuación en la cuál:

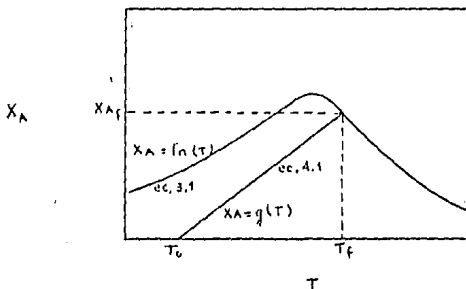
$$X_A = g(T)$$

Por lo que tenemos dos ecuaciones con dos incógnitas; la resolución de este sistema de ecuaciones se realiza por métodos numéricos en el caso del reactor de pistón, ya que diversos puntos satisfacen los balances de materia y energía.

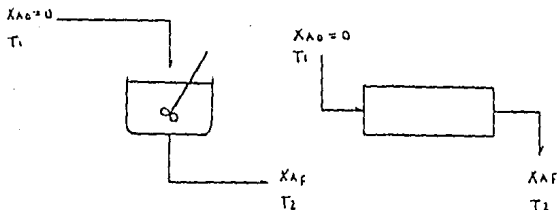
Para el reactor de mezcla completa, la situación es un poco diferente, en este caso, sólo un punto (generalmente), satisface ambas ecuaciones, por lo que la resolución común es gráfica (debido a que las ecuaciones son complejas).

No obstante, la computadora nos tabulará los datos y nos hará la gráfica en pantalla, de manera que podamos ver el punto respuesta.

Reactor de Mezcla



Balance de Energía: reactor de pistón o mezcla



Nomenclatura:

C_p' = cap. calorífica de la corriente de alim. que no ha reacc.
mol de reactante A alimentado

C_p'' = cap. calorífica de la corriente de prod. compl. convertida
mol de reactante A alimentado

H' = entalpía de la corriente de alim. que no ha reaccionado
mol de reactante A alimentado

H'' = entalpía de la corriente de producto compl. convertida
mol de reactante A alimentado

ΔH_r = calor de reacción
mol de reactante A que reacciona

Ya que la nomenclatura de la capacidad calorífica no es usual, la explicaremos con un ejemplo.

Supongamos que trabajamos con la reacción reversible $A \rightleftharpoons B$

La corriente de alimentación contiene:

20% A
40% B
40% Inertes

Bajo estas condiciones las capacidades caloríficas que se hacen mención en la nomenclatura serían:

$$C_p' = C_{p_A} + 2 C_{p_B} + 2 C_{p_z}$$

$$C_p'' = 2 C_{p_B} + 2 C_{p_B} + 2 C_{p_z}$$

$$C_p''' = 4 C_{p_B} + 2 C_{p_z}$$

El balance de energía para el estado estacionario (2) nos da:

$$1.3) \quad X_A = - \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p' dT}{\Delta H_r}$$

ΔH_r quedó definida por la ecuación 2.22, mientras que el término C_p' se va a definir, para la reacción bajo estudio, a continuación:

$$4.1) \quad C_p' = C_{pA} + C_{pB} \frac{\gamma_o \beta}{\gamma_o \lambda} + C_{pC} \frac{\gamma_o \xi}{\gamma_o \lambda} + C_{pI} \frac{\gamma_o \pi}{\gamma_o \lambda}$$

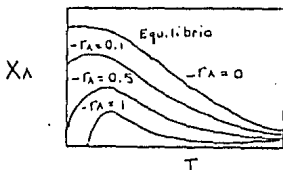
La ecuación 4.1 es ahora fácilmente procesable por la computadora.

CAPÍTULO CINCO

Obtención del Volumen Mínimo

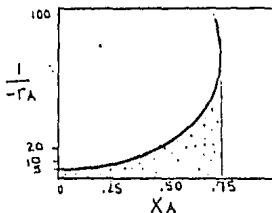
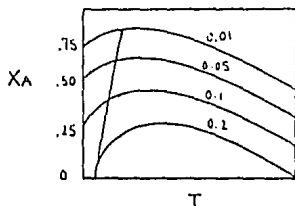
La obtención del volumen para lograr una conversión dada, para una progresión de temperatura determinada, ya ha sido explicada en otros libros (2), sin embargo, haremos una breve recapitulación.

Debemos partir, ante todo, de una gráfica de conversión fraccional (X_A) contra temperatura (T), dejando constante la velocidad de reacción ($-r_A$).



El procedimiento del cálculo del volumen es el siguiente (2):

- 1.- Se traza el camino de reacción en la gráfica de X_A frente a T , siendo ésta la línea de operación.
- 2.- Se calcula la velocidad para varios valores de X_A a lo largo de este camino.
- 3.- Se representa la curva de $1/(-r_A)$ frente a X_A para este camino.
- 4.- Se calcula el área bajo esta curva, que nos da $V/F A_0$.



En el caso de la obtención del volumen mínimo, hay una progresión de temperatura óptima.

Cuando tratamos con reacciones reversibles endotérmicas no tenemos problemas, puesto que un aumento de temperatura hace aumentar tanto la conversión de equilibrio como la velocidad de reacción. Por consiguiente, hemos de emplear la temperatura más alta posible, limitada únicamente por razones económicas, de operación o el aumento en la importancia de reacciones secundarias no deseadas.

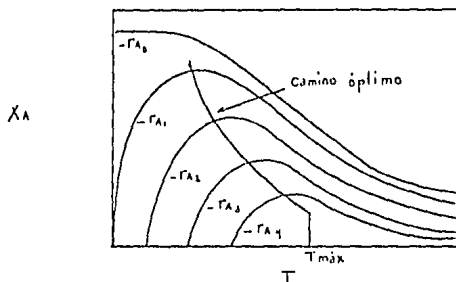
Lo mismo ocurre con reacciones irreversibles, un aumento de la temperatura nos lleva a un aumento de la velocidad de reacción.

Para las reacciones exotérmicas, como es el caso de la que estamos estudiando, ya mencionamos que tenemos dos factores en oposición: al aumentar la temperatura aumenta la velocidad de reacción directa y disminuye la conversión de equilibrio.

El camino más adecuado es emplear entonces la temperatura más alta permisible cuando el sistema se encuentra lejos del equilibrio; una vez que se han alcanzado condiciones cercanas a las del equilibrio se disminuye la temperatura, para que el equilibrio se desplace a valores mas favorables de conversión.

La progresión óptima consiste pues, en una variación de temperatura de la más alta permisible y que disminuye gradualmente como se observa en la figura.

Esta curva se denomina 'lugar geométrico de velocidades máximas' y se obtiene uniendo los máximos de las curvas de velocidad.



El método de solución es gráfico, debiendo partir de la gráfica de conversión fraccional (X_A) frente a la temperatura (T). El programa de computadora nos proporcionará los datos para la gráfica (y además la hará en pantalla), para que el trazado de volumen mínimo o volumen para cualquier progresión sea sencillo.

Desarrollo de Ecuaciones

Partiendo de la ecuación de velocidad de desaparición de A para nuestra reacción:

$$-r_A = k_1 C_A C_B - k_2 C_C$$

en el equilibrio $-r_A = 0$

$$k_1 C_A C_B = k_2 C_C$$

$$\left(\frac{k_1}{k_2}\right)_e = \left(\frac{C_C}{C_A C_B}\right)_e$$

$$K_d = \frac{C_C + C_{A0} X_{Ae}}{1 + \epsilon_A X_{Ae}} \frac{C_{A0}(1 - X_{Ae})}{1 + \epsilon_A X_{Ae}}$$

$$5.1) \quad K_e = \frac{(1 + \epsilon_A X_{Ae})(M' + X_{Ae})}{C_{A0}(1 - X_{Ae})(M - X_{Ae})}$$

Sin embargo, ya que tenemos una ecuación con la que podemos obtener X_{Ae} con datos termodinámicos, los cuales son más accesibles, y que queremos llegar a la conversión de equilibrio (X_{Ae}) para un rango de temperaturas, podemos reordenar la ecuación anterior:

$$K_e = \frac{M' + X_{Ae} + \epsilon_A M' X_{Ae} + \epsilon_A X_{Ae}^2}{C_{A0}(M - X_{Ae} - M X_{Ae} + X_{Ae}^2)}$$

$$K_e C_{A0} (M - X_{Ae} - M X_{Ae} + X_{Ae}^2) = M' + X_{Ae} + \epsilon_A M' X_{Ae} + \epsilon_A X_{Ae}^2$$

$$(M' - K_e C_{A0} M) + (X_{Ae} + \epsilon_A M' X_{Ae} + K_e C_{A0} X_{Ae} + K_e C_{A0} M X_{Ae}) + (\epsilon_A X_{Ae}^2 - K_e C_{A0} X_{Ae}^2) = 0$$

$$5.2) \quad X_{Ae}^2 (\epsilon_A - K_e C_{A0}) + X_{Ae} (1 + \epsilon_A M' + K_e C_{A0} + K_e C_{A0} M) + (M' - K_e C_{A0} M) = 0$$

Esta ecuación es de la forma $Ax^2 + Bx + C = 0$

donde:

$$A = \epsilon_A - K_e C_{A_0}$$

$$B = K_e C_{A_0} (1 + M) + 1 + \epsilon_A M'$$

$$C = M' - K_e C_{A_0} M$$

$$x = X_{Ae}$$

y cuya solución es:

$$x = \frac{-B \pm (B^2 - 4AC)^{1/2}}{2A}$$

Velocidad de Reacción Constante

Para el caso de que $-r_A$ no sea igual a cero:

$$-r_A = k_1 \frac{C_{A_0}(1-X_A)}{1+\epsilon_A X_A} \frac{C_{A_0}(M-X_A)}{1+\epsilon_A X_A} - k_2 C_{A_0} \frac{(M'+X_A)}{1+\epsilon_A X_A}$$

$$-r_A = \frac{C_{A_0}}{1+\epsilon_A X_A} \left[\frac{C_{A_0} k_1}{1+\epsilon_A X_A} (1-X_A)(M-X_A) - k_2 (M'+X_A) \right]$$

$$-r_A \frac{(1+\epsilon_A X_A)^2}{C_{A_0}} = k_1 C_{A_0} (M-X_A - M X_A + X_A^2) - k_2 (M'+X_A + \epsilon_A M' X_A + \epsilon_A X_A^2)$$

manejando únicamente la expresión del lado derecho

$$k_1 C_{A_0} M - k_1 C_{A_0} X_A - k_1 C_{A_0} M X_A + k_1 C_{A_0} X_A^2 - k_2 M' - k_2 X_A - k_2 \epsilon_A M' X_A - k_2 \epsilon_A X_A^2$$

Factorizando:

$$X_A^2 (k_1 C_{A_0} - k_2 \epsilon_A) - X_A (k_1 C_{A_0} + k_1 C_{A_0} M + k_2 + k_2 \epsilon_A M') + (k_1 C_{A_0} M - k_2 M')$$

$$X_A^2 (k_1 C_{A_0} - k_2 \epsilon_A) - X_A [k_1 C_{A_0} (1+M) + k_2 (1+\epsilon_A M')] + (k_1 C_{A_0} M - k_2 M')$$

$$5.3) \quad \frac{-r_A}{C_{A_0}} = \frac{P X_A^2 - R X_A + S}{(1 + \epsilon_A X_A)^2}$$

la nomenclatura empleada es:

$$P = K_1 C_{A_0} - K_2 E_A$$

$$R = K_1 C_{A_0} (1 + M) + K_2 (1 + E_A M')$$

$$S = K_1 C_{A_0} M - K_2 M'$$

Con esta última ecuación podemos encontrar la conversión fraccional, fijando la temperatura y la velocidad de reacción.

El cálculo es por prueba y error.

CAPÍTULO SEIS

Algoritmo y diagrama de flujo

Desarrollar un programa de computadora, sobre todo cuando es complejo, es un trabajo en tres etapas: primero es necesario elaborar el algoritmo, es decir, definir, deducir o crear las ecuaciones y método que nos han de llevar a obtener los valores buscados (objetivo); es el equivalente de realizar el trabajo "a mano" y dejarlo asentado en papel.

Las ecuaciones que componen nuestro algoritmo ya han sido deducidas en los capítulos anteriores, mencionando brevemente cómo habremos de llegar a los resultados deseados. Más adelante lo pondremos en forma esquemática.

El algoritmo es obviamente la parte más importante del trabajo, pues sin él es imposible continuar con las otras dos etapas, no obstante, el tener el algoritmo no indica que tenemos ya la mayor parte del programa de computadora, simplemente es el cimiento donde hemos de construir el edificio.

Si bien el algoritmo sería suficiente para que un ingeniero realizara los cálculos por su cuenta, la computadora es incapaz de procesar ninguna información que no este en un lenguaje que pueda entender, hemos de convertir, entonces, nuestro algoritmo en una serie de instrucciones que la computadora comprenda, este paso se denomina "codificación".

Cuando se trabaja con programas relativamente sencillos y se tiene experiencia codificando, este paso es directo; podemos convertir rápidamente nuestro algoritmo en un código de computadora.

La codificación puede ser efectuada en lenguaje máquina, como lo hacen muchos programadores, sin embargo entre los ingenieros es mucho más común emplear lenguajes de alto nivel, como son el BASIC, FORTRAN, C, Pascal, COBOL, etc. Esto depende del programador.

Este trabajo se realizó empleando el BASIC.

Cuando se trabaja con programas muy extensos o complicados, resulta muy difícil codificar el algoritmo directamente. Esto ocurre por varias razones:

El número de variables empleadas es muy grande.

El programa utiliza muchas subrutinas que es necesario elaborar adecuadamente.

El programa consta de una serie de alternativas, cada una de las cuáles es un programa en sí, y es necesario pasar de una parte a otra con facilidad.

Quizás la más importante de todas: el método de resolución empleado en el algoritmo no es susceptible a ser convertido en código directamente, etc.

Abundando un poco sobre esto; cuando un ingeniero tiene el algoritmo es capaz de realizar los cálculos porque tiene ciertos conocimientos básicos y una lógica que le ayuda a determinar qué es lo que hay que hacer cuando tiene cierta información mínima, o qué le sirve y qué no. La computadora carece de ambos -desafortunadamente-, y tenemos que guiarla de la mano a lo largo de todo el camino, la ventaja de emplearla radica que una vez que ya ha "aprendido", hará los cálculos mucho más rápido que cualquier ingeniero.

Ejemplificando un poco para el programa que estamos creando, en el cálculo de la conversión fraccional en un reactor de pistón de volumen conocido (ecuación 3.2), la forma de efectuarlo está suficientemente explicada para cualquier ingeniero, empero la computadora no puede saber (si no le decimos cómo), dónde ha de tomar los datos necesarios para realizar los cálculos, si éstos son dimensionalmente correctos o si físicamente son lógicos (por ejemplo, si la conversión requerida es mayor que uno o mayor que la de equilibrio a esas condiciones), no sabe tampoco cómo realizar una integración gráfica o por el método de Simpson o qué significa hacerlo por 'prueba y error', etc.

Lo que se hace en estos casos es pasar por una etapa intermedia: desarrollar un diagrama de flujo. El diagrama de flujo corresponde, pues, a la segunda etapa del desarrollo de un programa de computadora.

Todos los procedimientos antes mencionados deben de estar incluidos en dicho diagrama.

Los diagramas de flujo se elaboran con una simbología más o menos estándar y, por sí solos, explican detenidamente cuáles son los datos necesarios para procesar los resultados, cuáles son estos resultados y en qué consiste el procesamiento.

Otra ventaja de crear un diagrama de flujo es que, a partir de él, resulta muy sencillo programar en cualquier lenguaje.

La codificación se convierte, ahora, en traducir el diagrama de flujo en comandos que la computadora pueda entender, por lo que su elaboración resulta rutinaria (aunque consume mucho tiempo de cualquier forma).

El diagrama de flujo se incluye un poco más adelante y la codificación (que se convierte entonces en la tercera etapa del desarrollo de un programa de computadora) en el apéndice.

Ya que no existe una estandarización completa en los lenguajes empleados en la computadora, hemos de decir para qué computadora se efectuó la codificación y qué lenguaje se empleó:

La computadora utilizada es una Commodore 64, se utilizó el Commodore BASIC con un intérprete adicional denominado comercialmente SIMONS' BASIC (S).

Algoritmo

Las opciones del programa son:

A) Reactores isotérmicos

1. cálculo del volumen conocida la conversión.
2. cálculo de conversión conocido el volumen.
3. reactores en serie.

B) Reactor de mezcla adiabático

1. conversión posible para un reactor de volumen dado.

C) Reactor de pistón adiabático

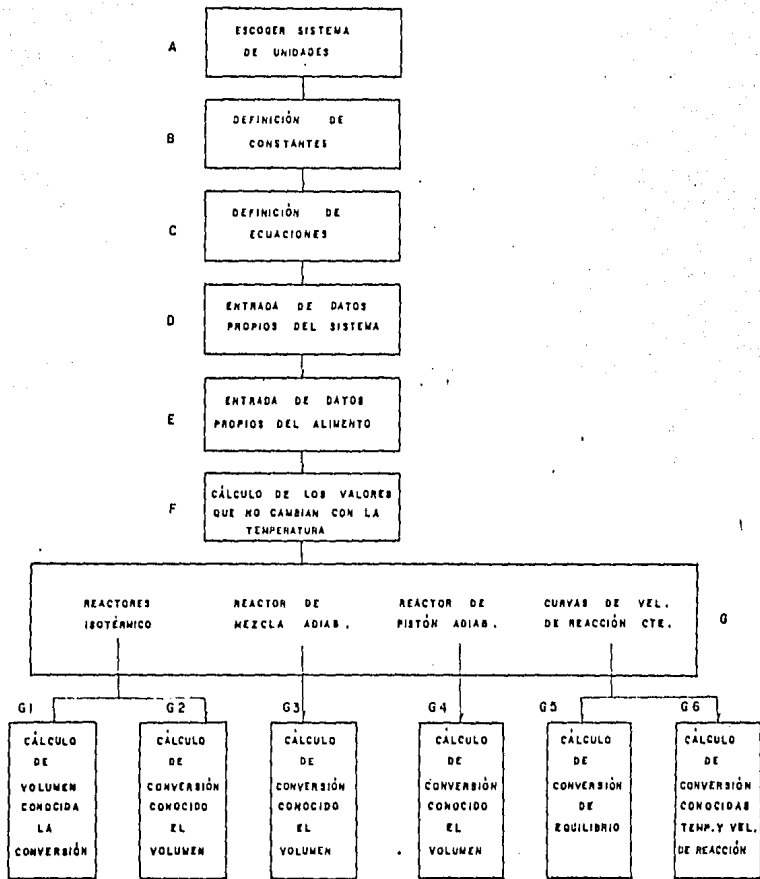
1. conversión posible para un reactor de volumen dado.

D) Curvas de velocidad de reacción constante

1. conversión de equilibrio.
2. conversión para una velocidad de reacción fija.

Con objeto de facilitar el seguimiento del algoritmo y del diagrama de flujo, se incluye, enseguida, un diagrama de bloques, que muestra esquemáticamente los grandes grupos en que se subdivide el programa.

DIAGRAMA DE BLOQUES



Datos necesarios

I. Del sistema

II. De la alimentación

I. DATOS DEL SISTEMA

- a) ΔH_f^0 calor de Formación std. del react. limitante
- b) ΔH_f^0 calor de formación std. del reactivo en exceso
- c) ΔH_f^0 calor de Formación std. del producto

Las unidades son en cal/mol o J/mol

- d) C_{pA} capacidad calorífica del react. limitante
- e) C_{pB} capacidad calorífica del react. en exceso
- f) C_{pC} capacidad calorífica del producto
- g) C_{pI} capacidad calorífica de los inertes

Las unidades son en cal/(mol.K) o J/(mol.K)

Como son funciones de la temperatura, serán necesarios sus coeficientes según la ecuación

$$C_p = \alpha + \beta T + \gamma T^2 + \delta / T^2$$

T es la temperatura absoluta

Para cada especie química debemos dar sus coeficientes ($\alpha, \beta, \gamma, \delta$).

- h) A1,B1 coeficientes para la cte. de velocidad de la reacción directa en L/(mol.min)
- i) A2,B2 coeficientes para la cte. de velocidad de la reacción inversa en l/min

Las ecuaciones de velocidad siguen la ley de Arrhenius:

$$k = A \exp(B/T)$$

T es la temperatura absoluta

II. DATOS DE LA ALIMENTACIÓN

- a) v_0 Flujo volumétrico en L/min a las condiciones en que fue tomado
- b) P_0 presión en atm o kPa
- c) T_0 temperatura absoluta en K
- d) %A porcentaje en volumen del react. limitante
- e) %B porcentaje en volumen del react. en exceso
- f) %C porcentaje en volumen del producto

CÁLCULOS INICIALES

Los siguientes cálculos tienen por objeto encontrar los valores que permanecen fijos para una alimentación dada, y NO son afectados por subsiguientes cambios en la temperatura.

- 1) El porcentaje de inertes se calcula por diferencia:

$$\%I = 100 - (\%A + \%B + \%C)$$

- 2) El flujo molar inicial (mol/min) se obtiene con las condiciones del alimento:

$$m_0 = P_0 v_0 / (RT_0)$$

- 3) Flujos molares de las especies químicas:

$$F_{A_0} = m_0 \%A / 100$$

$$F_{B_0} = m_0 \%B / 100$$

$$F_{C_0} = m_0 \%C / 100$$

$$F_{I_0} = m_0 \%I / 100 = F_I$$

- 4) Moles totales cuando 'A' aun no ha reaccionado:

$$N_{T_{XA=0}} = m_0$$

Moles totales cuando 'A' ha reaccionado completamente:

$$N_{T_{XA=1}} = F_{I_0} + F_{C_0} + F_{A_0} + (F_{B_0} - F_{A_0})$$

$$= F_{I_0} + F_{C_0} + F_{B_0}$$

$$= m_0 - F_{A_0}$$

Variación relativa del volumen

$$\epsilon_A = (N_{T_{XA=1}} - N_{T_{XA=0}}) / N_{T_{XA=0}}$$

$$= [(m_0 - F_{A_0}) - m_0] / m_0 = -F_{A_0} / m_0 = -\%A / 100$$

$$5) M = F_{C_0} / F_{A_0}$$

$$M' = F_{C_0} / F_{A_0}$$

6) Cálculos para obtener el calor de reacción a cualquier temperatura y las constantes para la ecuación de la capacidad calorífica global:

$$\Delta H_r^\circ = \Delta H^\circ f_c - (\Delta H^\circ f_A + \Delta H^\circ f_U)$$

$$\Delta \alpha = \alpha_c - (\alpha_A + \alpha_B)$$

$$\Delta \beta = \beta_c - (\beta_A + \beta_B)$$

$$\Delta \delta = \delta_c - (\delta_A + \delta_B)$$

$$\Delta \epsilon = \epsilon_c - (\epsilon_A + \epsilon_B)$$

$$T_0 = 298 \text{ K}$$

$$E = \Delta H_r^\circ - \left(\Delta \alpha T_0 + \Delta \beta \frac{T_0^2}{2} + \Delta \delta \frac{T_0^3}{3} - \Delta \epsilon \frac{1}{T_0} \right)$$

$$C_A = \alpha_A + \alpha_B \frac{T_0}{T_0 A} + \alpha_C \frac{T_0^2}{T_0 A} + \alpha_I \frac{T_0^3}{T_0 A}$$

$$C_B = \beta_A + \beta_B \frac{T_0}{T_0 A} + \beta_C \frac{T_0^2}{T_0 A} + \beta_I \frac{T_0^3}{T_0 A}$$

$$C_T = \gamma_A + \gamma_B \frac{T_0}{T_0 A} + \gamma_C \frac{T_0^2}{T_0 A} + \gamma_I \frac{T_0^3}{T_0 A}$$

CÁLCULO PARA REACTORES ISOTÉRMICOS

1) Se requiere la temperatura 'T' a la que se efectuará la reacción. La presión se toma igual a la que se dió como dato cuando se tomaron las características del alimento. En otras palabras, entre el punto en que se tomaron los datos del alimento y la entrada al reactor: $dP = 0$ (proceso isobárico).

2) Se ajusta el volumen de entrada al reactor, puesto que la temperatura ha cambiado:

$$V_0 = n_0 RT / P_0$$

3) Concentración inicial del react. limitante:

$$C_{A_0} = F_{A_0} / V_0$$

4) Se calculan las constantes de velocidad y de equilibrio a la temperatura T:

$$K_1 = A_1 e^{D_1/T}$$

$$K_2 = A_2 e^{D_2/T}$$

$$K = K_1 / K_2 \quad K = K_e$$

5) Cálculo de volumen, conocida X_{Af} ($0 < X_{Af} < X_{Ae}$), es directo con las fórmulas 3.1 y 3.2. El cálculo de la conversión, conocido el volumen, es por prueba y error, con las mismas fórmulas:

$$V_m = \frac{V_0 X_{Af} (1 + \epsilon_A X_{Af})^2}{K_1 C_{A_0} (1 - X_{Af})(M - X_{Af}) - K_2 (M' + X_{Af})(1 + \epsilon_A X_{Af})}$$

$$V_p = V_0 \int_0^{X_{Af}} \frac{(1 + \epsilon_A X_A)^2 dX_A}{K_1 C_{A_0} (1 - X_A)(M - X_A) - K_2 (M' + X_A)(1 + \epsilon_A X_A)}$$

6) Cálculo de la conversión de equilibrio:

$$A = \epsilon_A - K C_{A_0}$$

$$B = K C_{A_0} (1 + M) + 1 + \epsilon_A M'$$

$$C = M' - K C_{A_0} M$$

$$X_{Ae} = \frac{-B + (B^2 - 4AC)^{1/2}}{2A}$$

7) Cálculo del calor de reacción a T de operación (ec. 2.22):

$$\Delta H_r = f_n \Delta H_r(T)$$

$$\text{Calor producido} = \Delta H_r F_{A_0} X_{A_f}$$

8) Datos de la corriente del producto (salida del reactor):

$$V_f = V_0 (1 + \epsilon_A X_{A_f})$$

$$F_{A_f} = F_{A_0} (1 - X_{A_f})$$

$$F_{B_f} = F_{B_0} - F_{A_0} X_{A_f}$$

$$F_{C_f} = F_{C_0} + F_{A_0} X_{A_f}$$

$$F_{I_f} = F_{I_0}$$

$$C_{A_f} = F_{A_f} / V_f$$

$$C_{B_f} = F_{B_f} / V_f$$

$$C_{C_f} = F_{C_f} / V_f$$

OPCIONES

- Otra conversión u otro volumen a la misma temperatura:

Se pasa al paso (5), (7) y (8)

- Otra temperatura para el mismo alimento (el equivalente de calentar o enfriar nuestro alimento):

Se pasa nuevamente a (1) y de ahí en adelante

- Utilizar los resultados (salidas) como datos (entradas), para simular reactores en serie (el proceso se lleva a cabo isotérmicamente):

Se actualizan los resultados:

$$V_0 = V_f$$

$$C_{A_0} = C_{A_f}$$

$$C_{B_0} = C_{B_f}$$

$$C_{C_0} = C_{C_f}$$

$$F_{A_0} = F_{A_f}$$

$$F_{B_0} = F_{B_f}$$

$$F_{C_0} = F_{C_f}$$

$$M = F_{B_0} / F_{A_0}$$

$$M' = F_{C_0} / F_{A_0}$$

$$NT_{X_{A=0}} = F_{A_0} + F_{B_0} + F_{C_0} + F_{I_0}$$

$$NT_{X_{A=1}} = F_{B_0} + F_{C_0} + F_{I_0}$$

$$\epsilon_A = (NT_{X_{A=1}} - NT_{X_{A=0}}) / NT_{X_{A=0}}$$

Se pasa al paso (5), (7) y (8), estableciendo una nueva conversión deseada.

CÁLCULO PARA REACTOR DE MEZCLA ADIABÁTICO

1) Se requiere un rango de temperaturas: la temperatura de entrada al reactor y una temperatura cualquiera, mayor que la de entrada

T_1, T_2

2) Se ajusta el volumen (entrando al reactor) a cada temperatura, en el intervalo dado:

$$v_{0i} = m_0 R T_i / P_0$$

3) F_{A0} es constante, pero al variar v_{0i} , C_{A0} cambia:

$$C_{A0} = F_{A0} / v_{0i}$$

4) cálculo de las constantes de velocidad a cada temperatura:

$$k_1 = A_1 e^{D_1/T_i}$$

$$k_2 = A_2 e^{D_2/T_i}$$

5) Para un V_m dado, se calcula X_{Af} por prueba y error, con la ecuación 3.1:

$$V_m = \frac{v_0 X_{Af} (1 + \epsilon_A X_{Af})^2}{k_1 C_{A0} (1 - X_{Af})(M - X_{Af}) - k_2 (M + X_{Af})(1 + \epsilon_A X_{Af})}$$

6) Tenemos las funciones:

4.1) $f_n C_p^i(T)$

2.22) $f_n \Delta H_r(T)$

formamos: $f_n g(T) = f_n C_p^i(T) / f_n \Delta H_r(T)$

7) Se evalúa la integral:

$$X_A = - \int_{T_1}^{T_i} f_n g(T) dT$$

Tenemos dos ecuaciones con dos incógnitas (X_{Af} , T_f), la solución es gráfica; se realiza haciendo una gráfica de T vs X_A .

CÁLCULO PARA REACTOR DE PISTÓN ADIABÁTICO

1) Ocupamos la temperatura de entrada al reactor T_1 y calculamos un ΔX_A para un intervalo pequeño de temperatura:

$$\Delta X_A = - \int_{T_1}^{T_i} f_n g(T) dT$$

T_1 es la T de entrada

$$T_i = T_1 + \Delta T$$

2) Ya que la conversión de entrada es cero ($X_{A1} = 0$), la conversión posible según el balance de energía, para dicho incremento de temperatura, es:

$$X_{Ai} = X_{A1} + \Delta X_A$$

3) Se calcula el volumen necesario (por el balance de materia) para lograr X_{Ai} :

$$\Delta V_{P_i} = \bar{v}_{0i} \int_{X_{A1}}^{X_{Ai}} \frac{(1 + \epsilon_A X_A)^2 dX_A}{\bar{r}_i \bar{C}_{A0} (1 - X_A)(M - X_A) - \bar{r}_2 (M' + X_A)(1 + \epsilon_A X_A)}$$

Para obtener las constantes de velocidad, el flujo volumétrico de entrada y la concentración de entrada, se utiliza una temperatura promedio, por lo que es imperativo que el ΔT sea pequeño.

$$\bar{T} = (T_1 + T_i) / 2$$

$$\bar{r}_1 = A_1 e^{B_1 / \bar{T}}$$

$$\bar{r}_2 = A_2 e^{B_2 / \bar{T}}$$

$$\bar{v}_{0i} = m_0 R \bar{T} / P_0$$

$$\bar{C}_{A0} = F_{A0} / \bar{v}_{0i}$$

$$4) \quad V_p = \sum \Delta V_{P_i}$$

5) Si el volumen del reactor conocido es mayor que V_p hacemos:

$$T_1 = T_c$$

$$X_{A1} = X_{Ai}$$

y volvemos al paso (1)

6) Si V_p es mayor o igual que el volumen del reactor conocido, entonces:

$$T_1 = T_c \quad \text{temp. de salida}$$

$$X_{Af} = X_{Ai} \quad \text{conversión Final}$$

CÁLCULO DE CONVERSIÓN DE EQUILIBRIO

1) Ocupamos un rango de temperatura: T_1 a T_2 , que nos indica el intervalo donde se calculará la conversión de equilibrio, en este caso, T_1 NO es la temperatura de entrada al reactor, sino únicamente el límite inferior de búsqueda.

2) Se ajusta el volumen a cada temperatura, en el intervalo dado:

$$V_{0i} = m_c RT_i / P_j$$

3) Se ajusta la concentración inicial:

$$C_{A_0} = F_{A_0} / V_{0i}$$

4) Cálculo de las constantes de velocidad a cada temperatura:

$$K_1 = A_1 e^{B_1/T_i}$$

$$K_2 = A_2 e^{B_2/T_i}$$

$$K = K_1 / K_2 \quad \text{equilibrio}$$

$$5) \quad A = \varepsilon_A - K C_{A_0}$$

$$B = K C_{A_0} (1 + M) + 1 + \varepsilon_A M'$$

$$C = M' - K C_{A_0} M$$

conversión de equilibrio a cada temperatura:

$$X_{Ae_i} = \frac{-B + (B^2 - 4AC)^{1/2}}{2A}$$

OPCIONES

- Si se desea otro rango de temperaturas, volver a (1) y seguir hasta (5)

CÁLCULO DE CURVAS DE VELOCIDAD DE REACCIÓN CONSTANTE

1) Se requiere un rango de temperatura, para la búsqueda:

T_1, T_2

2) Se ajusta el flujo volumétrico inicial con la temperatura y la concentración inicial del reactivo limitante:

$$V_{0i} = m_0 R T_i / P_0$$

$$C_{A0} = F_{A0} / V_{0i}$$

3) Se calculan las constantes de velocidad:

$$K_1 = A_1 e^{B_1/T_i}$$

$$K_2 = A_2 e^{B_2/T_i}$$

$$K = K_1 / K_2 \quad \text{equilibrio}$$

4)
$$P' = K_1 C_{A0} - K_2 \epsilon_A$$

$$R' = K_1 C_{A0} (1+M) + K_2 (1 + \epsilon_A M')$$

$$S' = K_1 C_{A0} M - K_2 M'$$

5) Se fija un valor de $-\Gamma_A$ y, por prueba y error, se calcula X_{A_i} para cada temperatura, con la ecuación:

$$\frac{-\Gamma_A}{C_{A0}} = \frac{P' X_{A_i}^2 - R' X_{A_i} + S'}{(1 + \epsilon_A X_{A_i})^2}$$

Habrás entonces una X_{A_i} para cada T_i , fijando $-\Gamma_A$.

Para otro rango de temperatura, se vuelve al paso (1) y se sigue hasta el (5). Para otra $-\Gamma_A$, efectuar (5) de nueva cuenta.

Diagrama de Flujo

El diagrama de flujo consta de dos partes: un esqueleto (pág. 45 a 57) y una serie de subrutinas (pág. 58 a 72).

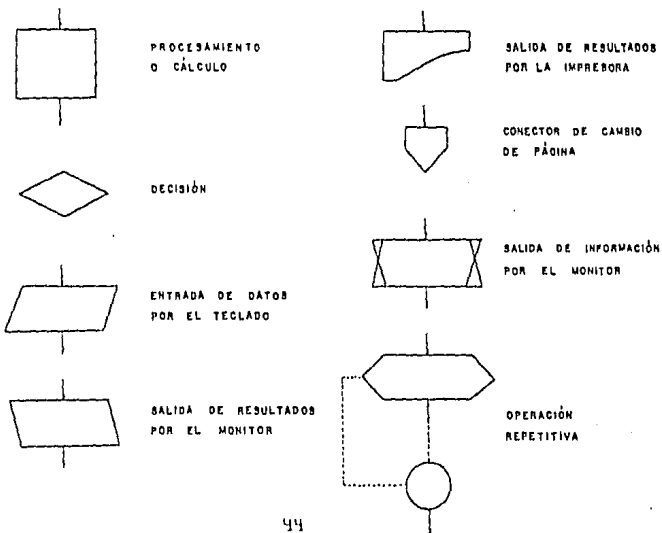
El esqueleto del programa es, en realidad, la estructura sobre la cual está soportado el mismo, su función es, primero, seguir los lineamientos del algoritmo, es decir, el método de solución y las decisiones que haya que tomar, y, segundo, delimitar el comportamiento del programa, por ejemplo, dónde van a estar los menús, los caminos a seguir dependiendo de qué escogió el usuario, etc, pero sin entrar (en general) a hacer cálculos.

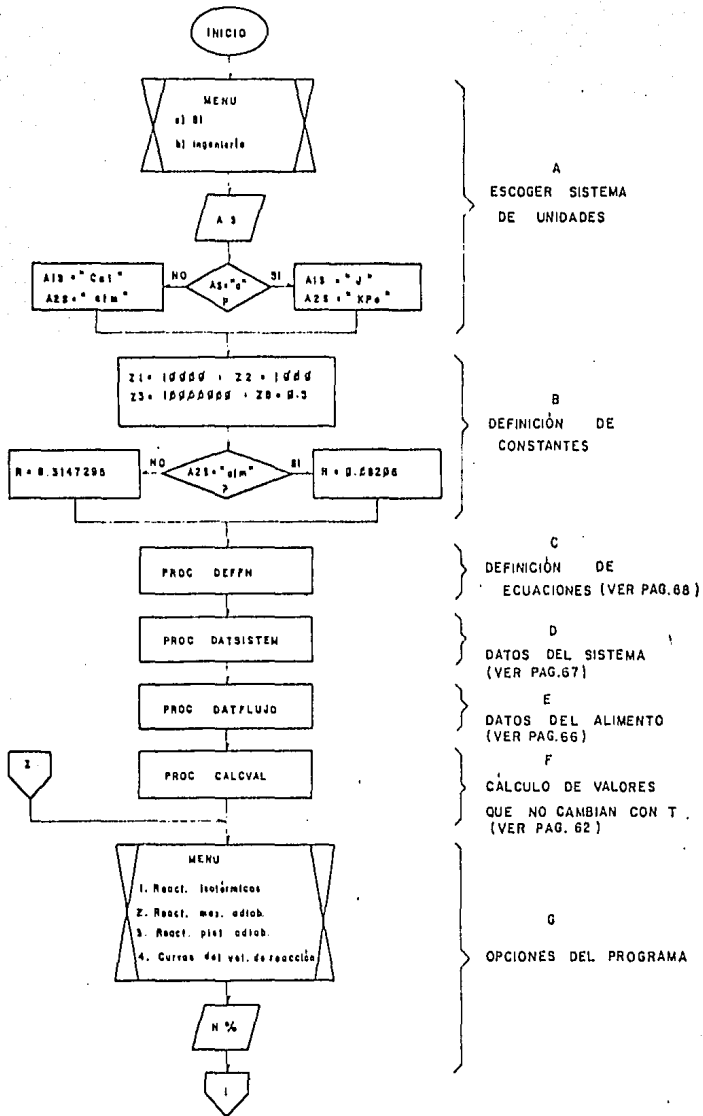
Los cálculos están agrupados en diferentes subrutinas, cada una con su particular función.

Se decidió hacerlo de esta forma por dos motivos: uno, que se puede hacer una subrutina, checar que funcione correctamente y luego incorporarla al programa principal, con lo que se facilita mucho la detección de errores, y dos, que al hacerse en forma modular, es bastante más sencillo que el programa lo puedan entender otras personas.

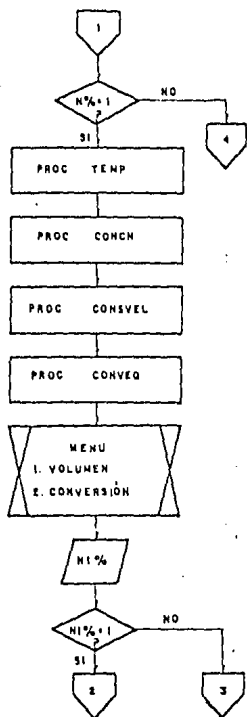
A continuación se presenta el diagrama de flujo detallado y la simbología utilizada.

SIMBOLOGIA





REACTORES ISOTÉRMICOS



SI $N1\% = 1$ SIGUE EL CAMINO DE REACT. ISOTÉRMICOS CON LA SUBROUTINA QUE PIDE LA TEMP. DE OPERACIÓN SI NO, RAMIFICA (VER PAG.72)

AJUSTA V_0 CON T Y CALCULA CONCNS INICIALES (VER PAG. 63)

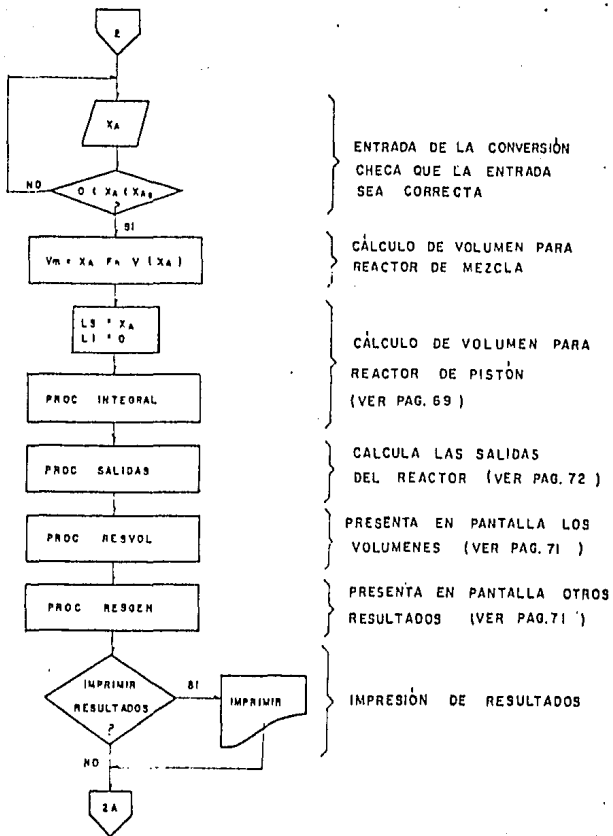
CALCULA LAS CONSTANTES DE VELOCIDAD DE R_1 (VER PAG.63)

CALCULA LA CONVERSIÓN DE EQUILIBRIO A DICHA T (VER PAG.64)

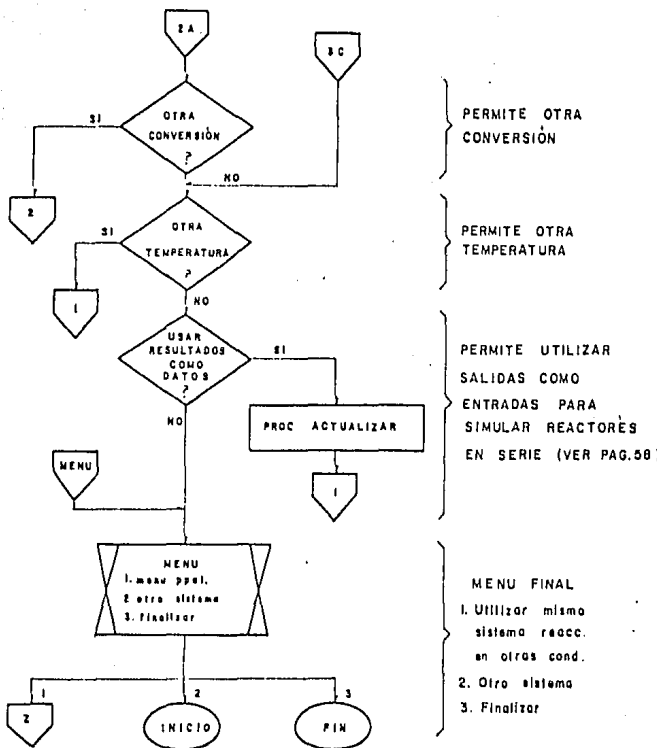
OPCIONES DE PROGRAMA :

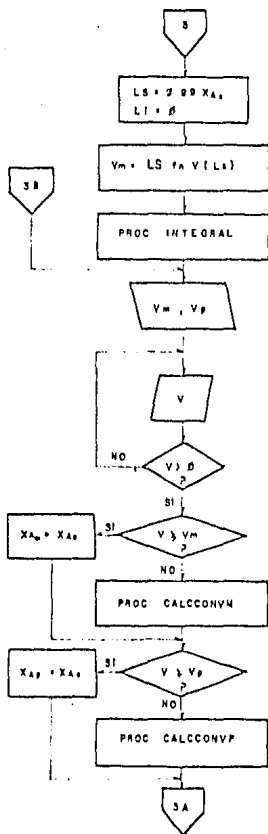
- 2) CÁLCULO DE VOLUMEN PARA UNA CONVERSIÓN CONOCIDA
- 3) CÁLCULO DE CONVERSIÓN POSIBLE PARA UN REACTOR DE VOLUMEN DADO

GI. CÁLCULO DE VOLUMEN (REACT. ISOTÉRMICOS)



61. CÁLCULO DE VOLUMEN (CONTINUA)





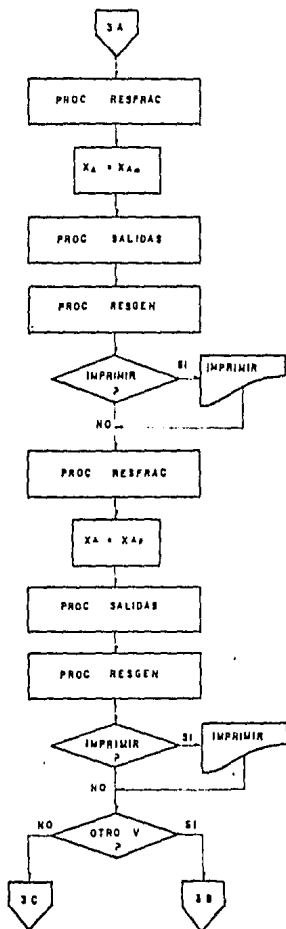
CÁLCULO DE LOS VOLUMENES DE AMBOS REACTORES A UNA CONVERSIÓN CERCANA AL EQUILIBRIO. SE PRESENTAN LOS RESULTADOS EN PANTALLA CON OBJETO DE SITUAR AL USUARIO (VER PAG.69)

ENTRADA DEL VOLUMEN, SÓLO SE ACEPTA SI ES POSITIVA

SI EL VOLUMEN DADO ES MAYOR QUE EL CALCULADO PARA EL REACT. DE MEZCLA, LA CONVERSIÓN ES LA DE EQUILIBRIO, SI NO, SE CALCULA POR APROXIMACIONES (VER PAG.60)

TIENE EL MISMO PROPÓSITO QUE EL PASO ANTERIOR PERO PARA EL REACT. DE PISTÓN (VER PAG.61)

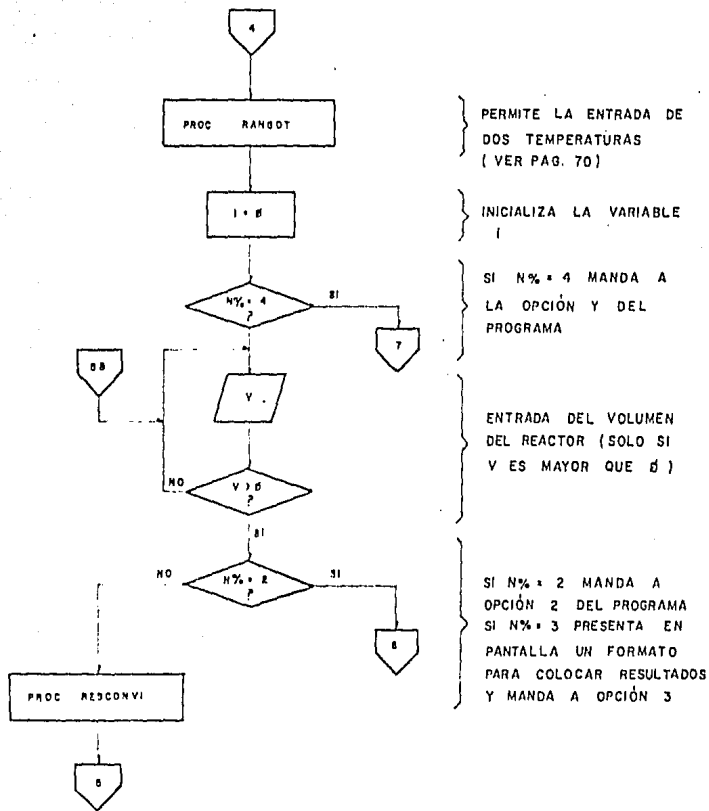
G2. CÁLCULO DE CONVERSIÓN (CONTINUA)



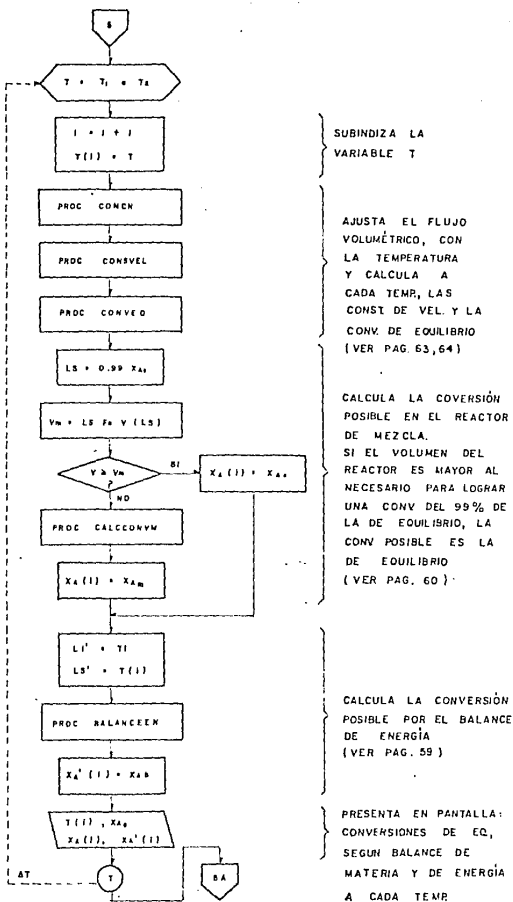
CÁLCULO DE SALIDAS
PARA LA CONV. EN REACT.
DE MEZCLA Y PRESENTACIÓN
DE RESULTADOS EN PANTALLA
CON OPCIÓN A IMPRIMIR
(VER PAG. 70,71,72)

CÁLCULO DE SALIDAS
PARA LA CONVERSIÓN EN
REACTOR DE PISTÓN Y
PRESENTACIÓN DE
RESULTADOS EN PANTALLA
CON OPCIÓN A IMPRIMIR
(VER PAG. 70,71,72)

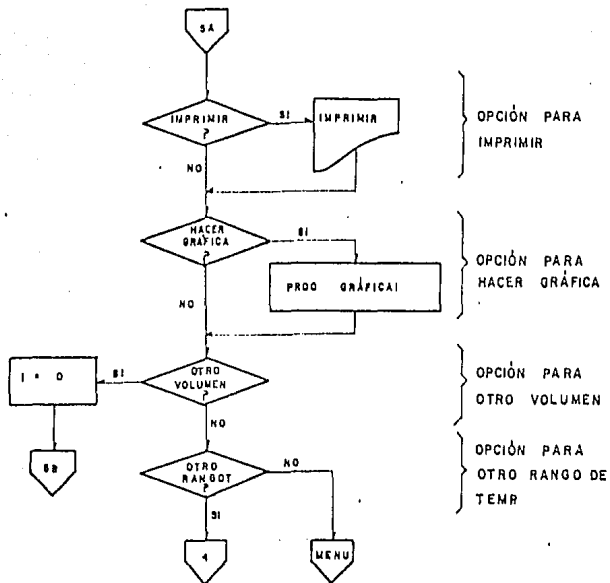
PERMITE OTRO VOLUMEN



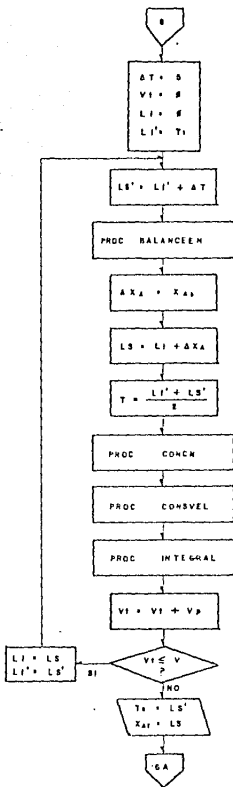
0.3 CÁLCULO DE CONVERSIÓN PARA REACTOR DE MEZCLA ADIABÁTICO



G3. CÁLCULO DE CONV. PARA REACT. DE MEZCLA



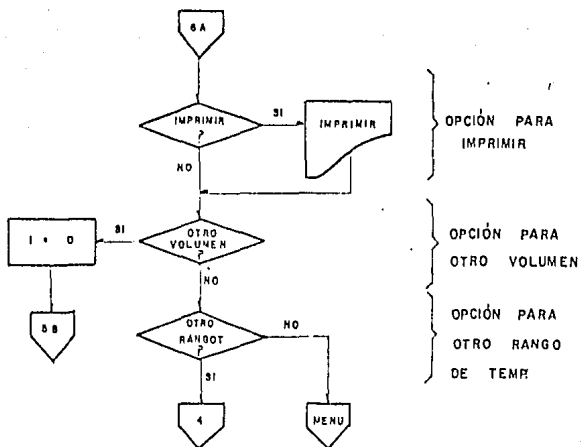
04. CÁLCULO DE CONVERSIÓN PARA REACTOR DE PISTÓN ADIABÁTICO



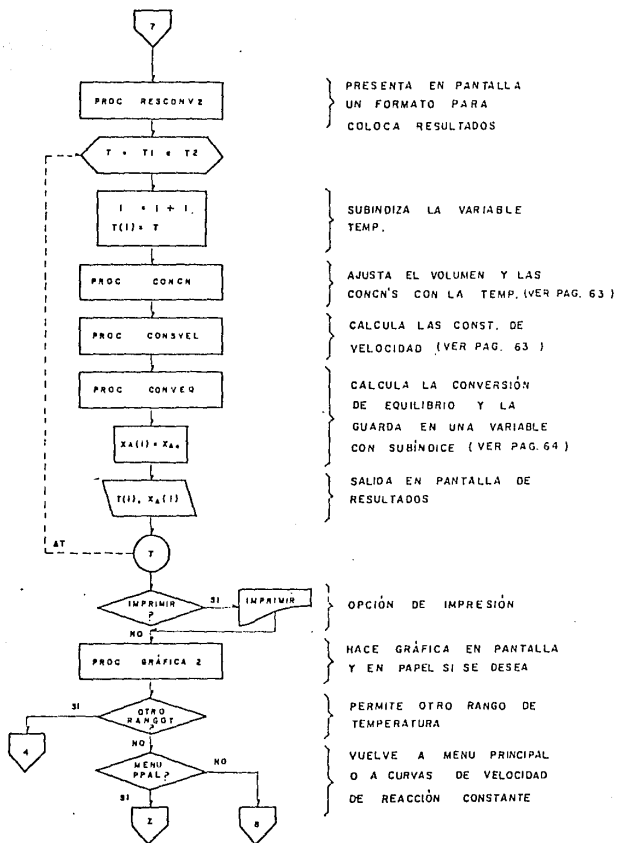
INICIALIZA LOS LÍMITES INFERIORES DE LAS INTEGRALES PARA BALANCE DE MAT = 0 PARA BALANCE DE ENERGÍA = T1 EL INCREMENTO DE TEMP ES DE 5 K

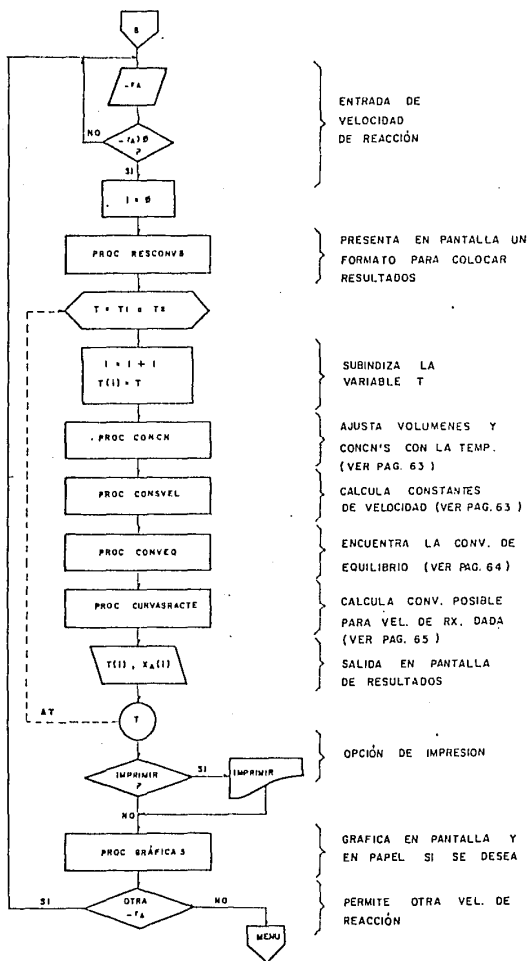
EVALÚA LA CONVERSIÓN POSIBLE POR BALANCE DE ENERGÍA ENTRE LOS LÍMITES L1 Y L1 + 5 ESTA CONVERSIÓN SE GUARDA COMO UN INCREMENTO Y SE DEFINE EL LIM. SUPERIOR (PARA EL BALANCE DE MATERIA) COMO EL LIM. INFERIOR MÁS DICHO INCREMENTO (VER PAG. 59)

EVALÚA LA INTEGRAL DEL BALANCE DE MATERIA CON LOS LÍMITES DADOS Y CON UNA TEMP. PROMEDIO DEL RANGO DEL BALANCE DE ENERGÍA. CON ESTA TEMP. SE HACEN LOS AJUSTES NECESARIOS (VOLUMENES, CONCENTRACIONES Y CONST. DE VELOCIDAD) EL VOLUMEN PARA LOGRAR UNA CONV. ES V1 (SUMATORIA) (VER PAG. 63, 69) SI EL VOLUMEN CALCULADO ES AL MENOS IGUAL AL DADO DE DATO, LA CONVERSIÓN LOGRADA Y LA TEMP. DE SALIDA SON LAS DE LOS LÍMITES SUPERIORES DE LAS INTEGRALES SI NO, SE TOMAN LOS LÍMITES INFERIORES COMO LOS SUPERIORES HASTA ESE MOMENTO Y SE CALCULAN NUEVOS LÍMITES SUPERIORES



65. CÁLCULO DE CONVERSIÓN DE EQUILIBRIO



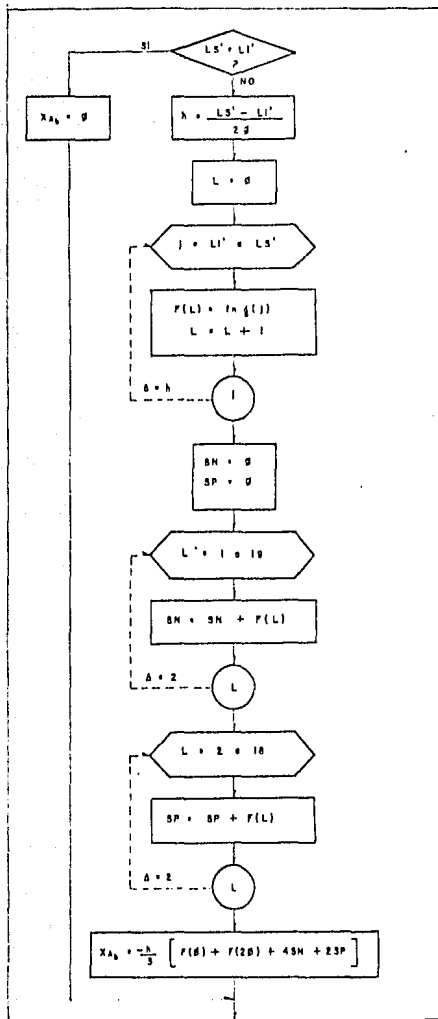


$$\begin{aligned}
 V_0 &= V_1 \\
 C_{A0} &= C_A \\
 C_{B0} &= C_B \\
 C_{C0} &= C_C \\
 F_{A0} &= F_A \\
 F_{C0} &= F_C \\
 m_0 &= F_A + F_B + F_C + F_I \\
 NT_{X_{A1}} &= m_0 - F_A \\
 C_A &= \frac{NT_{X_{A1}} - m_0}{m_0}
 \end{aligned}$$

UTILIZA LOS RESULTADOS OBTENIDOS PARA LOS REACTORES ISOTÉRMICOS (UNICAMENTE EN LA OPCIÓN DE CÁLCULO DE VOLUMEN), COMO DATOS DE ENTRADA.

ESTA OPCIÓN ES IMPORTANTE, PUES PERMITE SIMULAR REACTORES EN SERIE, AL UTILIZAR LA CORRIENTE DE PRODUCTO COMO SI FUERA LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN DE UN REACTOR NUEVO.

(VER PAG. 48)

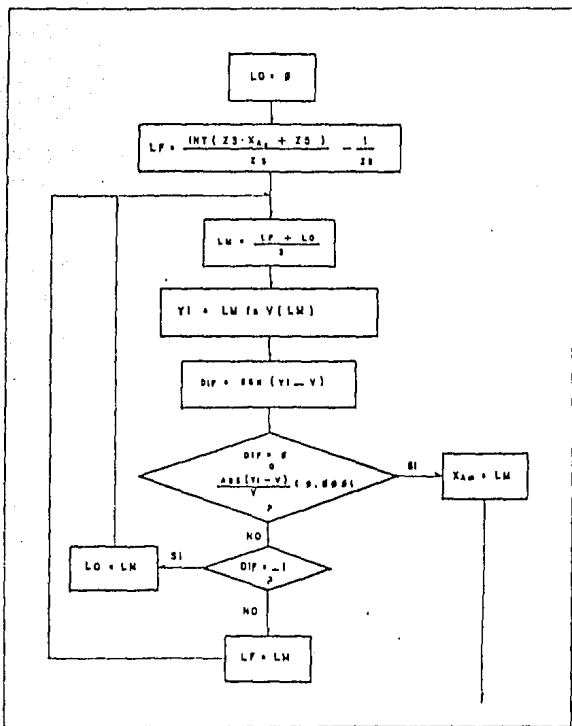


EVALUAR LA INTEGRAL DE LA FUNCIÓN f POR EL MÉTODO DE SIMPSON

LA VARIABLE INDEPENDIENTE ES LA TEMPERATURA

LA VARIABLE DEPENDIENTE ES LA CONVERSIÓN

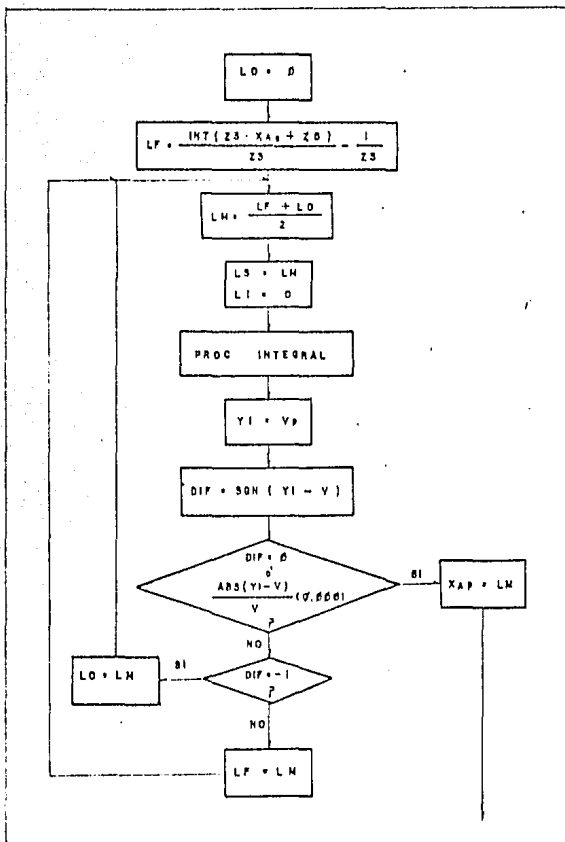
SU FUNCIÓN BÁSICA ES OBTENER LA CONVERSIÓN POSIBLE SEGÚN EL BALANCE DE ENERGÍA, DADOS LOS LÍMITES INFERIOR Y SUPERIOR DE TEMPERATURA (VER PAG. 52, 54)



CALCULA LA CONVERSION POSIBLE PARA UN REACTOR DE MEZCLA DE VOLUMEN CONOCIDO.

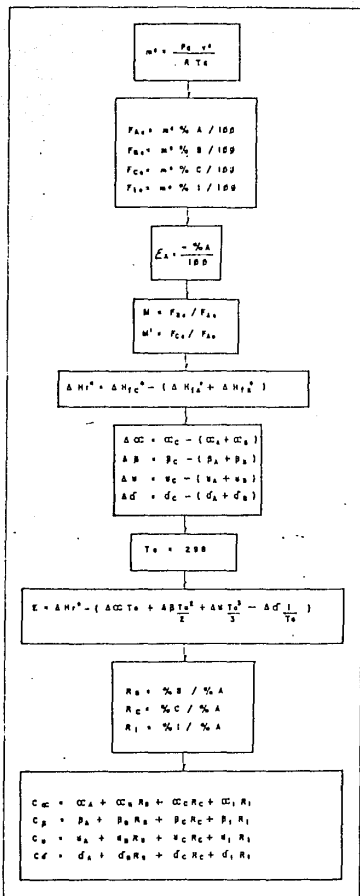
LA APROXIMACION SE REALIZA AL IR CORTANDO POR MITAD EL INTERVALO DE BUSQUEDA.

(VER PAG. 49, 52)



CALCULA LA CONVERSION POSIBLE PARA UN REACTOR DE PISTON DE VOLUMEN CONOCIDO.

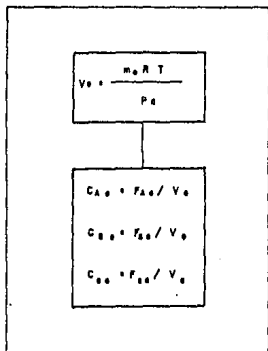
EL MÉTODO ES SEMEJANTE AL DE LA SUBROUTINA 'CALCCONVM' (VER PAG. 49)



SUBROUTINA QUE CALCULA
LOS VALORES QUE PERMANECEN
FIJOS PARA UNA ALIMENTACIÓN
DADA, Y QUE NO SON
AFECTADOS POR CAMBIOS DE
TEMPERATURA.

OBTIENE ADEMAS, LAS
CONSTANTES QUE SON
NECESARIAS PARA LA
FUNCIÓN C_p DE T
(VER PAG. 45)

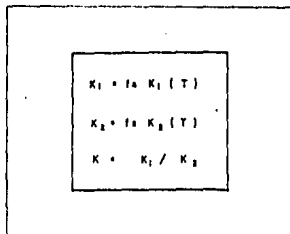
PROC CONC



AJUSTA EL FLUJO VOLUMÉTRICO A LA TEMPERATURA DE OPERACIÓN PUES HA CAMBIADO.

CALCULA LAS CONCENTRACIONES A LA ENTRADA DEL REACTOR (VER PAG. 46, 52, 54, 56, 57)

PROC CONSVEL



CALCULA LAS CONSTANTES DE VELOCIDAD SEGÚN ECS.

DE ARRHENIUS

CALCULA LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO

(VER PAG. 46, 52, 54, 56, 57)

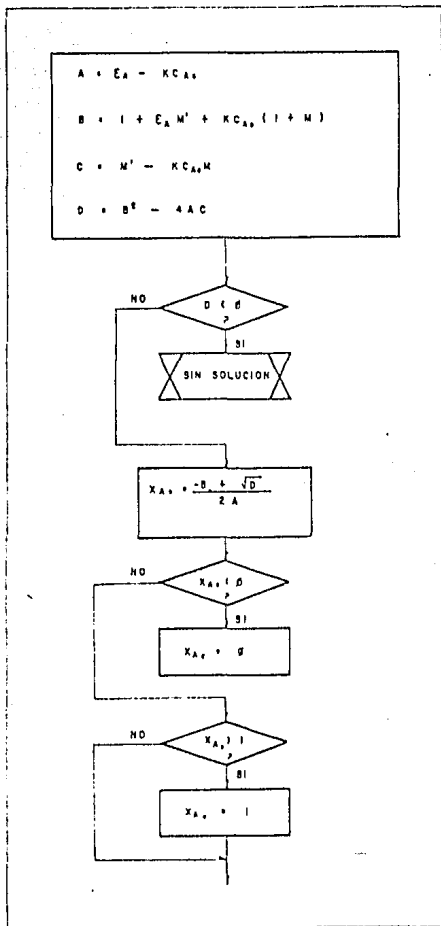
$$A = E_A - KC_{A_0}$$

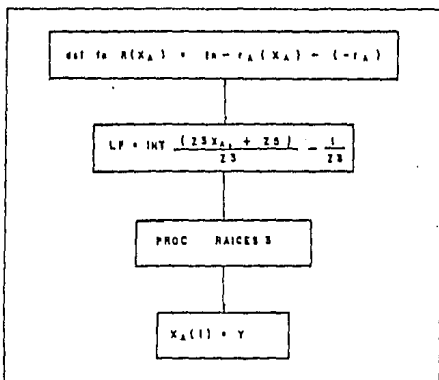
$$B = I + E_A M' + KC_{A_0} (I + M)$$

$$C = M' - KC_{A_0} M$$

$$D = B^2 - 4AC$$

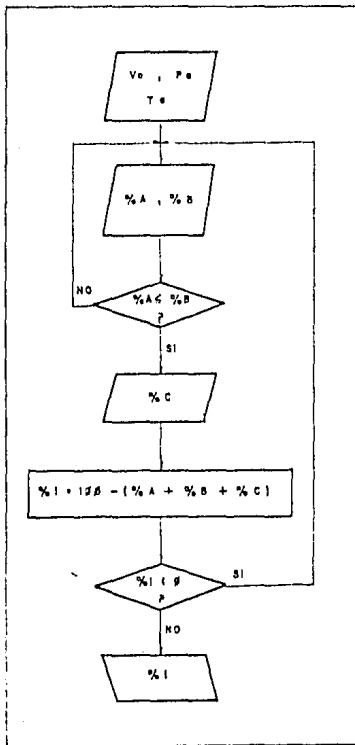
CALCULA LA CONVERSIÓN
DE EQUILIBRIO A LA
TEMPERATURA DADA
(VER PAG. 46, 52, 56, 57)





EVALÚA LA CONVERSIÓN POSIBLE A UNA TEMPERATURA, SI SE CONOCE LA VELOCIDAD DE REACCIÓN.

LA SUBROUTINA " RAICES 3 " SE TOMÓ DE LA LITERATURA (4). (VER PAG. 57)



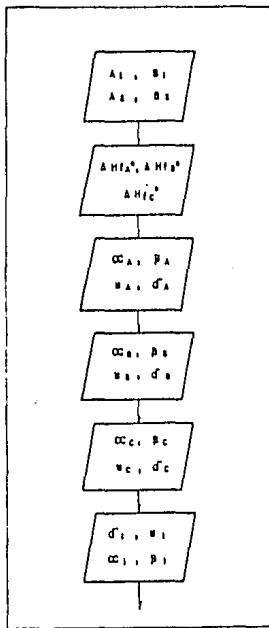
SUBROUTINA PARA LA ENTRADA DE
DATOS RELATIVOS AL ALIMENTO

1.- flujo volumétrico y condiciones
(temperatura y presión) a la cual
fué tomada

2.- porcentajes en volumen de las es-
pecies reaccionantes

los inertes se obtienen por di-
ferencia

(VER PAG. 45)



SUBROUTINA PARA LA ENTRADA DE DATOS PROPIOS DEL SISTEMA :

- 1.- Constantes para las funciones de velocidad de Arrhenius.
- 2.- Calores de formación estándar de las especies químicas reaccionantes.
- 3.- Constantes para las expresiones de capacidad calorífica de los espacios reaccionantes e inertes.

(VER PAG. 45)

```

def fn K1 (T) = A1 eα1/T
def fn K2 (T) = A2 eα2/T
def fn rA (XA) = 
$$-\frac{K_2 C_A}{(1 + E_A X_A)^2} (A X_A^2 + B X_A + C)$$

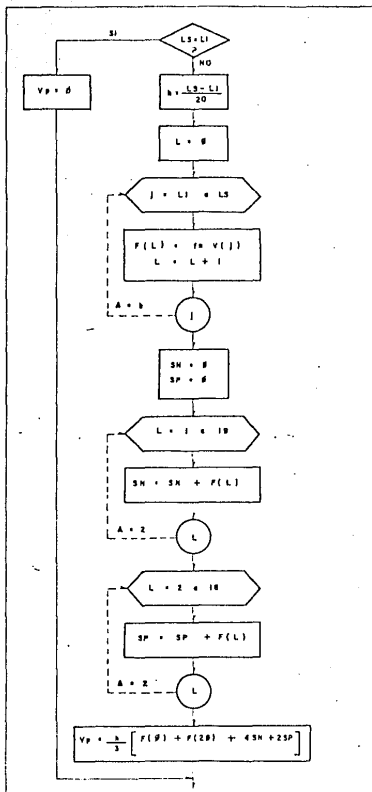
def fn V (XA) = 
$$\frac{V_0 (1 + E_A X_A)}{K_1 C_A (1 - X_A)(M - X_A) - K_2 (M' + X_A)(1 + E_A X_A)}$$

def fn ΔHr (T) = E + Δα T + Δβ  $\frac{T^2}{2}$  + Δγ  $\frac{T^3}{3}$  - Δδ  $\frac{1}{T}$ 
def fn Cp (T) = Cα + Cβ T + Cγ T2 + Cδ  $\frac{1}{T^2}$ 
def fn g (T) = 
$$\frac{\text{fn Cp}(T)}{\text{fn ΔHr}(T)}$$


```

SUBROUTINA QUE DEFINE LAS FUNCIONES QUE SE EMPLEARAN EN EL PROGRAMA (VER PAG. 45)

PROC INTEGRAL



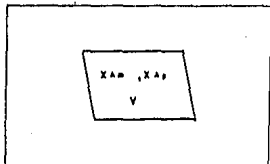
EVALÚA LA INTEGRAL DE LA FUNCIÓN VOLUMEN POR EL MÉTODO DE SIMPSON

LA VARIABLE INDEPENDIENTE ES LA CONVERSIÓN

LA VARIABLE DEPENDIENTE ES EL VOLUMEN

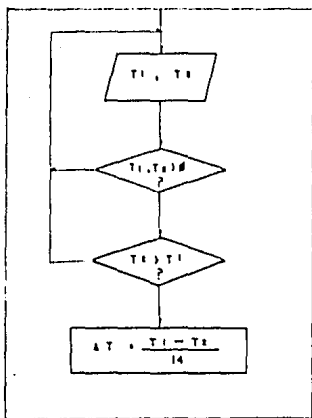
SU FUNCIÓN BÁSICA ES OBTENER EL VOLUMEN DE PISTÓN NECESARIO PARA LOGRAR UNA CONVERSIÓN DADA. LOS DATOS NECESARIOS SON LOS LÍMITES INFERIOR Y SUPERIOR DE CONVERSIÓN. [VER PAG. 47, 49, 54]

PROC RESFRAC



PRESENTA EN PANTALLA
LAS CONVERSIONES PA-
RA LOS REACTORES DE
PISTÓN Y MEZCLA, CON UN
VOLUMEN DADO
(VER PAG. 50)

PROC RANGOT



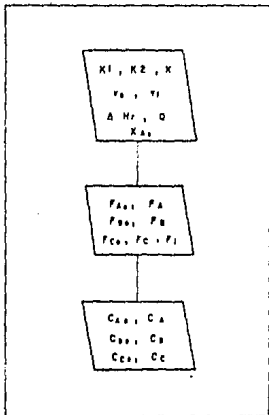
SOLICITA UN RANGO DE TEMPERATURAS:
EL LÍMITE INFERIOR REPRESENTA LA
TEMPERATURA DE ENTRADA AL REACTOR

EL LÍMITE SUPERIOR ES UNA TEMPE-
RATURA MAYOR QUE T1, PUEDE O NO,
SER IGUAL A LA TEMPERATURA DE
SALIDA.

CALCULA EL INCREMENTO DE TEMP QUE
SE VA A USAR EN EL CICLO.

(VER PAG. 51)

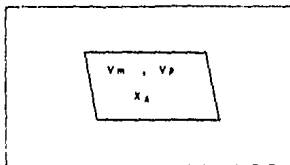
PROC RESGEN



PRESENTA EN PANTALLA LOS SIGUIENTES RESULTADOS :

- Conc. de entrada y salida
 - Flujos molares de entrada y salida
 - Conversión de equilibrio
 - Color producido
 - Color de reacción
 - Flujo volumetrico de entrada y salida
 - Constantes de velocidad
 - Constantes de equilibrio
- (VER PAG. 47, 50)

PROC RESVOL



PRESENTA EN PANTALLA LOS VOLUMENES DE LOS REACTORES DE PISTÓN Y MEZCLA PARA LA CONVERSIÓN DESEADA (VER PAG. 47)

PROC SALIDAS

$$\Delta H_r = f_n \Delta H_r (T)$$

$$Q = \Delta H_r F_{A0} X_A$$

$$V_f = V_0 (1 + \epsilon_A X_A)$$

$$F_A = F_{A0} (1 - X_A)$$

$$F_B = F_{B0} - F_{A0} X_A$$

$$F_C = F_{C0} + F_{A0} X_A$$

$$C_A = F_A / V_f$$

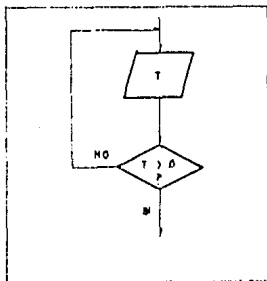
$$C_B = F_B / V_f$$

$$C_C = F_C / V_f$$

CALCULA LOS RESULTADOS SIGUIENTES:

- Flujos molares a la salida del reactor
- Concentraciones de salida
- Calor producido
- Calor de reacción (VER PAG. 47, 50)

PROC TEMP



SOLICITA LA TEMPERATURA DE OPERACIÓN PARA LOS REACTORES ISOTÉRMICOS CHECA QUE SEA POSITIVA.

(VER PAG. 46)

CAPÍTULO SIETE

Programa de computadora

Para utilizar el programa, lo primero que es necesario hacer es tenerlo en la memoria de la computadora, esto se consigue mediante la instrucción LOAD "A+B->C SIMULACION", si se está utilizando una unidad de disco, o simplemente LOAD "A+B->C SIMULACION", si lo que se utiliza es una unidad de cassette.

Una vez en la memoria, el programa se activa escribiendo "RUN" y presionando la tecla RETURN; aparecerá entonces en pantalla el nombre del programa: "SIMULACION POR COMPUTADORA DEL SISTEMA REACCIONANTE A + B - C EN FASE GASEOSA PARA REACTORES IDEALES ISOTERMICOS Y ADIABATICOS EN ESTADO ESTACIONARIO", esta pantalla dura aproximadamente 10 segundos o hasta que se presione la tecla RETURN, lo que ocurra primero. Hecho esto, aparece en el video la pantalla de la figura 1.

M E N U

	S I	Ingenieria
Presion	kPa	atm
Volumen	l	l
Cant.de materia	mol	mol
Temperatura	K	K
Energia	J	cal

Que sistema de unidades desea

- a) S I .
- b) Ingenieria

Fig. 1

Se tienen dos opciones, utilizar el Sistema Internacional de Unidades o el de Ingenieria, para escoger, Únicamente se selecciona la letra apropiada.

Una vez elegida la opción, el programa pregunta si ya se introdujeron los datos del sistema. Si la respuesta es negativa, el programa muestra una serie de pantallas con instrucciones, que indican al usuario, como se han de introducir los datos.

Ya que simular un sistema reaccionante requiere muchos datos, y es necesario recurrir a la misma opción varias veces cuando se desea realizar un estudio completo, resulta muy poco productivo tener que introducir dicha información una y otra vez.

Mientras estemos trabajando con un sistema reaccionante dado, las constantes de las ecuaciones de velocidad, los calores de formación y las capacidades caloríficas, no cambian. Estos son los DATOS QUE DEFINEN AL SISTEMA. Dichos datos se introducen en sentencias DATA con dos propósitos:

1. sólo hay que introducir los datos de un sistema reaccionante una sola vez, puesto que al grabar el programa en disco o cassette, las sentencias DATA no se borran.
2. Se puede grabar el programa en un disco, varias veces, con diferentes datos en las sentencias DATA, de manera que cada programa así grabado, es en realidad un programa que simula un sistema específico.

De esta forma, al revisar una gama de temperaturas, composiciones, conversiones, etc., podemos prestar toda nuestra atención a las condiciones que queremos realizar nuestra reacción, sin necesidad de indicar cada vez, cuál es dicha reacción.

Las pantallas de instrucciones nos indican en que línea tenemos que poner la sentencia DATA de cada dato específico.

Mabiendo definido los parámetros de nuestro sistema reaccionante, (o si se contestó afirmativamente la pregunta), pasamos ahora a una pantalla como la de la figura 2, titulada: DATOS DEL FLUJO EN CONDICIONES DADAS, indicando ésto que los datos solicitados son los de la corriente de alimentación en un momento arbitrario.

Estos datos son presión, caudal, porcentajes en volumen del alimento y temperatura; nos permitirán calcular la cantidad de materia presente en la corriente de entrada (al reactor) por medio de la ley de los gases ideales.

Al dar los porcentajes en volumen, el programa no permite que el porcentaje de reactivo en exceso sea inferior al del reactivo limitante (por razones obvias), además, una vez dados los tres primeros porcentajes el programa calcula automáticamente el de inertes presentes.

La computadora solicitará confirmación respecto a la validez de los datos, con objeto de permitir al usuario corregir algún error.

DATOS DEL FLUJO EN CONDICIONES DADAS

~~PROCESO DE REACCION EN UN REACTOR DE PISTON~~
Presion (kPa) = 506.6
Temperatura (K) = 373
Caudal (L/min) = 250

PORCENTAJES EN VOLUMEN DEL ALIMENTO

% React.limitante = 30
% React.en exceso = 50
% Producto = 0
% Inertes = 20

Fig. 2

Hecho ésto se pasa automáticamente al MENU PRINCIPAL, el cuál nos permite escoger las opciones que tiene el programa:

- 1 - Reactores isotérmicos: de pistón y mezcla completa
- 2 - Reactor de mezcla adiabático
- 3 - Reactor de pistón adiabático
- 4 - Curvas de velocidad de reacción constante

OPCIÓN UNO

Esta opción simula el comportamiento de reactores de mezcla completa y de pistón, trabajando isotérmicamente de acuerdo a las ecuaciones deducidas en el capítulo tres.

La computadora nos solicita primeramente, la temperatura a la cual se ha de desarrollar la reacción (en K).

Aquí es posible:

a') - Calcular el tamaño (volumen) de los reactores para conseguir una conversión deseada

b') - Calcular la conversión que es posible lograr con un reactor existente.

En el caso de escoger la opción (a'), nos es solicitada la conversión que deseamos, en este caso aparece en pantalla la conversión de equilibrio.

La conversión requerida será, necesariamente, menor que la de equilibrio.

Ahora el programa procede a calcular los volúmenes de los reactores de mezcla completa y de pistón en litros.

Si la que se escoge es la opción (b'), el dato necesario es, precisamente, el volumen del reactor. El programa mostrará en pantalla, los volúmenes de los reactores de mezcla y pistón necesarios para lograr una conversión del 99% de la de equilibrio, con objeto de que el usuario introduzca datos de volumen razonables y de proporcionarle una forma de estimar, a simple vista, si su reactor será adecuado.

El programa calcula ahora las conversiones posibles para ambos reactores.

La pantalla de resultados es idéntica para ambos casos, (ver fig. 3), presenta, principalmente, volúmenes de los reactores y las conversiones que son capaces de lograr a la temperatura deseada.

Aparecen también, las características de los flujos de entrada y salida del reactor: flujos molares y concentraciones.

El resto de los datos que proporciona esta pantalla son:

- temperatura a la que se lleva a cabo la reacción
- valor de la constante de velocidad de la reacción directa
- valor de la constante de velocidad de la reacción inversa
- valor de la constante de equilibrio

- calor de reacción a dicha temperatura
- calor total producido por la reacción

ENTRADAS		SALIDAS	
Temp. (K)	660		
K1 (L/mol min)	66.9890012		
K2 (1/min)	.0672224174		
K Eq.	1450.2979		
Conv. Eq.	.9662		
Calor R: (J)	-129747		
Qprod. (J/min)	-1465024		
Caudal	447.7	L/min	320.1
Flujo A	12.251	mol/min	.617
Flujo B	20.418	mol/min	0.78
Flujo C	@	mol/min	11.678
Flujo I	0.167	mol/min	6.157
Conc. A	.0274	mol/L	1.9e-03
Conc. B	.0456	mol/L	.0274
Conc. C	@	mol/L	.0264
			Imprimir resul. (s/n)7

Fig. 3

Tenemos ahora la posibilidad de imprimir los resultados, volver a las opciones (a') o (b'), o utilizar otra temperatura de reacción: la computadora va haciendo las preguntas consecutivamente.

Al utilizar otra temperatura, no se volverán a calcular los flujos molares con la ley de los gases ideales, sino que se tomarán los flujos calculados inicialmente con los datos de porcentaje de volumen de especies químicas presentes.

Esto permite una gran flexibilidad en el diseño, puesto que es el equivalente de realizar los cálculos a una temperatura cualquiera, para una alimentación con cierta composición, y si la temperatura no es conveniente, podemos simular qué pasaría si enfriáramos o calentáramos el alimento, antes de llegar al reactor, simplemente dando una nueva temperatura. No hacerlo de esta manera, es decir, recalculando los flujos molares con la ecuación de los gases ideales cada vez que quisieramos otra temperatura, impediría lograr la simulación de un calentamiento o enfriamiento de la alimentación, ya que los flujos molares variarían y en realidad estaríamos estudiando otra alimentación diferente.

Finalmente tenemos la última opción, en caso de no desear simular el proceso a otra temperatura.

Esta opción es la de reactores en serie.

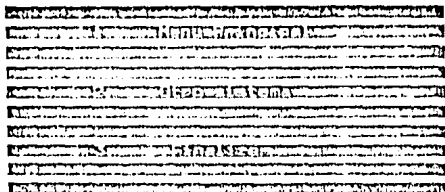
Para ello la computadora pregunta:

Usar resultados como datos (s/n)?

Si la respuesta es 'sí', el programa volverá de nueva cuenta a la OPCIÓN UNO, la única diferencia en este caso, estriba en que los cálculos son realizados ahora tomando los flujos de salida como si fueran los datos de la alimentación, todo lo demás es idéntico.

Ahora bien, si tampoco queremos esta opción, el programa nos lleva a la pantalla final, que es como la de la figura 4.

M E N U



Escoja un numero

menu final
Fig. 4

Aquí se nos presentan tres opciones:

Opción 1: Se escoge cuando el usuario desea utilizar el mismo sistema reaccionante con las otras tres alternativas principales del programa. Nos lleva de nuevo al MENU PRINCIPAL.

Opción 2: Se utiliza si se quiere seguir en el programa, pero definiendo un nuevo sistema reaccionante. El programa corre desde el principio.

Opción 3: Cuando se ha terminado con el trabajo tomamos esta opción; Finaliza el programa.

Con esta opción, simulamos un reactor de mezcla completa que trabaje adiabáticamente (aislado).

Se nos son solicitadas dos temperaturas:

Temperatura inicial (K) -

Temperatura final (K) -

La temperatura inicial es la de la corriente de alimentación al entrar al reactor.

La temperatura final es cualquier temperatura mayor que la temperatura inicial y es la que determina el límite del rango a estudiar. Nótese que esta temperatura no representa la temperatura de la corriente de salida del reactor.

Ahora el programa nos solicita el volumen del reactor:

Volumen del reactor (L) -

La computadora calcula entonces, para el rango de temperatura deseado, las conversiones posibles según los balances de materia y de energía; el punto de intersección nos da la conversión posible bajo esas condiciones y la temperatura de la corriente que abandona el reactor.

Asimismo, son calculadas las conversiones de equilibrio para este rango.

Es posible obtener una copia en papel, de la pantalla, de resultados si así se desea.

Como es mucho más fácil apreciar el punto de intersección de una gráfica que de una tabla con datos, se añadió al programa una rutina que dibuja en pantalla dicha gráfica, también en este caso se tiene la opción de imprimirla en papel.

La pantalla de resultados es como la mostrada en la figura 5.

Una vez realizados los cálculos es posible utilizar otro rango de temperaturas u otro volumen, pero si no se desea, se vuelve al MENÚ FINAL (Fig. 4)

Temp. (K)	Balance de masa	Balance energia	Equil.
500	.4899	0	1
536	.9433	.0567	1
571	.9997	.1146	.9997
607	.9987	.1733	.9987
643	.9946	.2329	.9946
679	.9806	.2929	.9806
714	.9413	.3533	.9413
750	.8537	.4139	.8537
786	.7052	.4744	.7052
821	.5168	.5348	.5168
857	.3359	.5949	.3359
893	.1995	.6546	.1995
929	.1131	.7137	.1131
964	.0636	.7721	.0636
1000	.0362	.8298	.0362

TEMPERATURE RESULTS

Fig. 5

OPCIÓN TRES

Aquí se simula el comportamiento de un reactor de pistón que trabaja adiabáticamente.

Como en el caso anterior, los datos necesarios son el volumen del reactor y las temperaturas (de entrada al reactor y una temperatura cualquiera, mayor que la primera).

La resolución es por método numérico, va presentando en pantalla la conversión lograda progresivamente en el reactor y la temperatura hasta ese punto, conforme la corriente va avanzando en el mismo.

Finalmente, presenta en pantalla la temperatura y la conversión a la entrada y a la salida del reactor.

También es posible utilizar nuevos datos (temperaturas, volumen) o volver al MENÚ FINAL (ver fig.4).

OPCIÓN CUATRO

Escoger la alternativa número cuatro en el MENÚ PRINCIPAL nos permitirá obtener los datos y trazar las gráficas que nos servirán para la obtención del volumen del reactor necesario para lograr una conversión determinada, siguiendo una progresión de temperatura cualquiera.

Con estas mismas gráficas es posible obtener el volumen mínimo mediante una progresión de temperatura óptima.

Ambos aspectos fueron delineados en el capítulo cinco.

Igual que en las opciones dos y tres, nos es solicitado un rango de temperaturas.

Hecho esto, obtendremos una tabla de resultados que nos muestra las conversiones de equilibrio de la alimentación que hemos caracterizado (por medio de los datos introducidos en la pantalla DATOS DEL FLUJO EN CONDICIONES DADAS), para el rango de temperaturas solicitado. Se muestra un ejemplo de esta tabla en la Figura 6.

Temp. (K)	Conv. Equil.
400	1
429	1
457	1
486	1
514	.9999
543	.9996
571	.9983
600	.9937
629	.9797
657	.942
686	.8583
714	.712
743	.5211
771	.3363
800	.1981

Fig. 6

Esta tabla puede ser impresa en papel si lo deseamos.

La computadora hace a continuación una gráfica de los datos de la tabla de Conversiones de Equilibrio.

Tenemos ahora varias posibilidades, que la computadora hace saber una después de la otra:

- otro rango de temperaturas
- volver al menú principal
- introducir una velocidad de reacción para la construcción de la gráfica del volumen mínimo.

Ya que al estudiar un sistema reaccionante generalmente no se conoce de antemano su comportamiento, se diseñó el programa de tal forma que el ingeniero que lo usara se diera cuenta rápidamente de los rangos que debe manejar.

De esta forma puede, al iniciar el programa y una vez introducidos los datos que definen al sistema reaccionante, pasar directamente a la opción número cuatro para encontrar en forma rápida, el rango de temperatura en que tendrá que moverse para lograr su objetivo, ya que la conversión de equilibrio nos muestra la máxima conversión posible a esas condiciones.

Si el primer rango que decidió no resultó adecuado, puede escoger otro, hasta estar satisfecho.

Entonces pude pasar al menú principal y escoger cualquiera de las tres primeras opciones, según el modelo con que desea trabajar, o bien, puede decidirse por construir la gráfica de temperatura contra conversión, fijando constantes las velocidades de reacción.

Es posible dar tantas velocidades de reacción como el usuario desee, (una después de la otra).

Un ejemplo de tabla de resultados es mostrado en la figura 7, mientras que la gráfica para el volumen mínimo puede apreciarse en la figura 8.

Cuando ya no se desea seguir dando datos de velocidades de reacción, el programa nos lleva al menú final explicado (ver Fig.4).

XX
XX
XX

Vel.Fn: = 2

Temp. (K)	Conversion
550 .	0
582.1	0
614.3	0
646.4	0
678.6	0
710.7	0
742.9	0
775	0
807.1	0
839.3	.026
871.4	.055
903.6	.043
935.7	.028
967.9	.017
1000	.01

XX

Fig 7

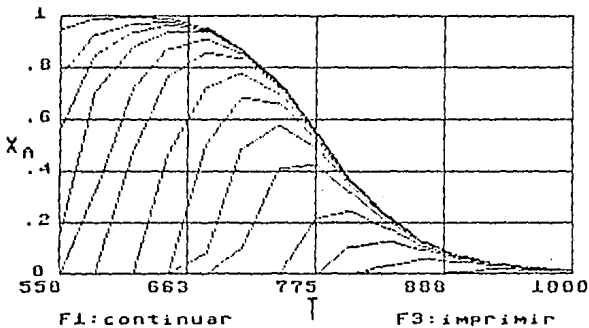
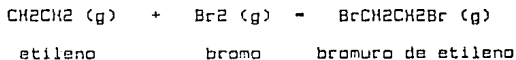


Fig. 8

CAPÍTULO OCHO

Simulación de un sistema real

Con objeto de probar el programa, se simulará una reacción real: la bromación de etileno en fase gaseosa.



Se considerará que el alimento también contiene Nitrógeno como inerte.

La mayoría de los datos se consiguen fácilmente (capacidades caloríficas y calores de formación) para la mayoría de las reacciones, no obstante, los datos cinéticos son muy difíciles de conseguir, a menos que se realicen corridas de laboratorio.

Ofortunadamente, para este caso particular se consiguieron las ecuaciones cinéticas por medio de datos de la literatura.

La reacción puede considerarse como elemental y la energía de activación de la reacción directa es de 24,400 cal (1).

Ya que las ecuaciones cinéticas definidas por la ecuación de Arrhenius pueden linearizarse:

$$\ln K_1 = \ln K_0 - E_1/RT$$

La energía de activación nos da la pendiente de la recta, por lo tanto, solo nos hace falta un punto para definir la ecuación.

Tal punto lo encontramos a 500 K de temperatura, donde el valor de K_1 es de 500 litros/mol.hr (2).

La ecuación de la velocidad de reacción como función de la temperatura para la reacción directa queda:

$$K_1 = 6.445 \times 10^4 e^{-12280/T} \quad \text{L (mol. min)}$$

La ecuación cinética de la reacción inversa es, entonces, fácilmente obtenible ahora, puesto que:

$$K_2 = K_1/K_{eq}$$

Y la constante de equilibrio se obtiene de datos termodinámicos únicamente.

Tenemos entonces:

$$K_2 = 1.262 \times 10^{17} e^{-28148/T} \text{ min}^{-1}$$

Los datos restantes para simular el modelo son los siguientes (6,7,8):

calor de formación de bromo = 31 254 J/mol

calor de formación de etileno = 52 283 J/mol

calor de formación del bromuro de etileno = -38 325 J/mol

Capacidades caloríficas (J/(mol.K)) (6,7,8):

Cp bromo = 37.35 + (5.024E-04)T - (1.256E+05)/T²

Cp etileno = 11.849 + (1.1975E-01)T - (3.653E-05)T²

Cp bromuro de etileno = 86.67

Cp nitrógeno = 28.60 + (3.768E-03)T - (5.024E+04)/T²

Como condiciones de marcha para todas las pruebas, tomamos alimento a las siguientes condiciones:

Presión = 506.6 kPa (5 atmósferas)

Temperatura = 373 K (100 C)

Flujo volumétrico = 250 L/min

El alimento considerado tiene la siguiente composición:

% bromo = 30 %

% etileno = 50 %

% bromuro de etileno = 0 %

% inertes (nitrógeno) = 20 %

Reactores Isotérmicos

Se efectuaron varias corridas para encontrar la temperatura óptima (que minimiza el tamaño del reactor) en ambos tipos de reactores, con una conversión deseada de 95%.

Los resultados obtenidos fueron los siguientes:

T (K)	U mez. (litros)	U pist. (litros)
500	894 136	130 541
600	22 368	3 173
620	13 117	1 782
630	10 479	1 366
640	8 738	1 067
650	7 792	855
654	7 662	791
655	7 657	777
656	7 665	763
660	7 850	716
667	9 199	664
669	9 596	662
669	10 084	662
670	10 692	664
675	18 188	754

Puede verse fácilmente, como la temperatura afecta marcadamente el tamaño de los reactores, la temperatura óptima es muy cercana para ambos tipos de reactores:

T opt. reactor de mezcla = 655 K
T opt. reactor de pistón = 666 K

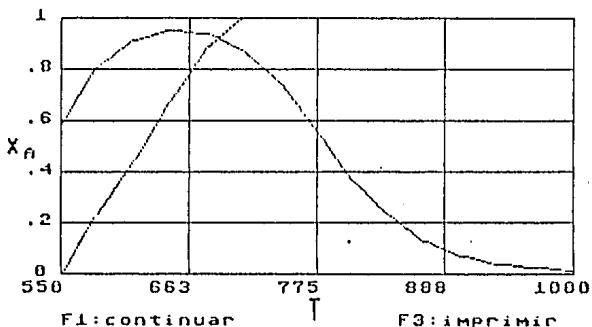
Reactor de mezcla adiabático

El reactor simulado tiene una capacidad de 7 500 litros.

A 550 K como temperatura de entrada del alimento (cuya composición ya ha sido mencionada), se obtiene una conversión de 93% aproximadamente con una temperatura de salida de casi 700 K.

El reporte de salida del computador es el siguiente:

Temp. (K)	Balance de masa	Balance energía	Equil.
550	.582	0	1
582.1	.601	.221	.999
614.3	.609	.443	.996
646.4	.948	.664	.985
678.6	.936	.884	.952
710.7	.875	1	.875
742.9	.739	1	.739
775	.556	1	.556
807.1	.368	1	.368
839.3	.219	1	.219
871.4	.122	1	.122
903.6	.067	1	.067
935.7	.037	1	.037
967.9	.021	1	.021
1000	.012	1	.012



Reactor de piston adiabático

El reactor simulado tiene una capacidad de 2 000 litros.

Bajo condiciones similares al reactor de mezcla adiabático de la página anterior, se obtiene una conversión de 96% aproximadamente con una temperatura de salida de 690 K.

El reporte de salida del computador es el siguiente:

REACTOR DE PISTÓN ADIABÁTICO

temp.entrada	550 K
conv.entrada	0
temp.salida	690 K
conv.salida	.963

Conversión de equilibrio

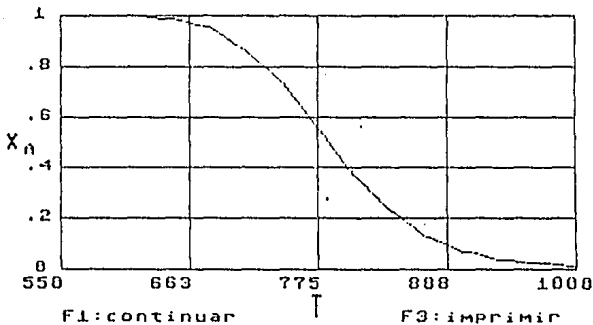
Las conversiones máximas posibles a cada temperatura son las de equilibrio. Con los resultados obtenidos con esta opción, podemos apreciar que abajo de los 600 K la conversión posible es esencialmente de 100%, a partir de ese momento declina gradualmente, hasta que la reacción en sentido inverso comienza a ser la más importante a los 1000 K aproximadamente.

Los resultados que nos da la computadora son los siguientes:

```
*****
***** (GENERAL PURPOSE) VPPC Program *****
*****
```

Temp. (K)	Conv. Equil.
550	1
582.1	.999
614.3	.996
646.4	.985
678.6	.952
710.7	.875
742.9	.739
775	.556
807.1	.368
839.3	.219
871.4	.122
903.6	.067
935.7	.037
967.9	.021
1000	.012

```
*****
***** (GENERAL PURPOSE) VPPC Program *****
*****
```



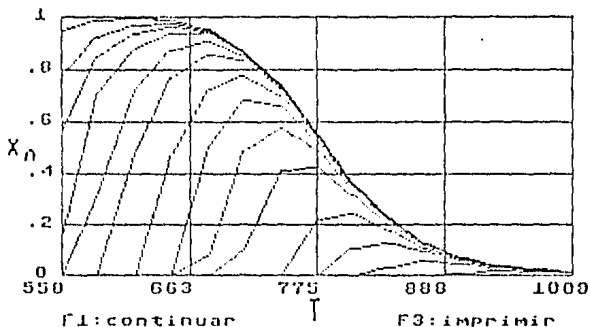
Curvas de velocidad de reacción constante

Empleamos esta opción con las siguientes velocidades de reacción:

Vel. de reacción
mol/(litro.min)

0.0001
0.0005
0.0010
0.0020
0.0050
0.0100
0.0250
0.0500
0.1000
0.2000
0.5000
1.0000
2.0000
5.0000

Se muestra la gráfica obtenida en pantalla.



Resumen

La computadora efectúa los cálculos con la suficiente velocidad como para permitirnos estudiar una gama completa de temperaturas, conversiones, alimentos con composiciones diversas, etc.

Teniendo los datos suficientes, puede realizarse un estudio completo de un sistema reaccionante en un solo día, esto es evidentemente ventajoso, puesto que el modelo matemático desarrollado es intrincado, debiendo efectuarse cientos y en ocasiones, decenas de miles de cálculos.

La obtención de un volumen conocida la conversión, para reactores isotérmicos, es la opción más rápida, puesto que en ningún caso tardó mas de quince segundos en dar los resultados.

Para encontrar la conversión posible en un reactor existente (isotérmico) se requieren de uno a dos minutos.

La simulación del reactor de mezcla adiabático requiere de 2 minutos aproximadamente, mientras que la del reactor de pistón ocupa hasta 5-7 minutos.

Los resultados de conversión de equilibrio tardan 3 minutos, pero la gráfica completa de velocidades de reacción (como la mostrada anteriormente) necesitó de 3 horas y media.

En la gráfica de velocidades de reacción se nota una pequeña distorsión, ésta es debida a que los puntos se unen por medio de líneas rectas; entre menor sea el número de puntos mayor sera la distorsión y viceversa, el programa puede modificarse para permitir más puntos a cada velocidad de reacción (y así reducir la distorsión), pero ello nos lleva a aumentar considerablemente el tiempo empleado en los cálculos.

El programa tiene muchos puntos que fué necesario afinar en la codificación y que no siempre están en el diagrama de flujo. Esto se debe, principalmente, a que el modelo matemático es riguroso y la computadora efectúa redondeos que muchas veces nos afectan marcadamente.

Algunos de problemas que se encontraron fueron los siguientes:

Las ecuaciones 3.1 y 3.2 son discontinuas en la conversión de equilibrio, esto ocasionó dos dificultades principalmente:

a) Cuando se calculaba el volumen a partir de la conversión y se daba como dato un valor mayor que la conversión de equilibrio, el volumen resultante es negativo, significando obviamente, que una conversión mayor o igual que la de equilibrio es imposible de lograr.

Este problema se resolvió calculando, a esas condiciones, la conversión de equilibrio e impidiendo que el usuario empleara un valor mayor o igual a éste.

b) Cuando se deseaba obtener la conversión posible para un reactor de volumen dado, no siempre era posible encontrar el valor, este problema se presentaba cuando el volumen del reactor era muy grande, debido a que la subrutina de aproximación no lograba acercarse lo suficiente a la conversión de equilibrio para hacer cero la ecuación.

Este problema se resolvió al limitar el valor que el usuario puede dar al volumen del reactor, además se hizo que si el volumen dado como dato es mayor al necesario para lograr una conversión del 99% de la de equilibrio, la conversión posible se toma como la de equilibrio simplemente. Una ventaja extra de hacerlo así, radicó en que aceleró los cálculos en muchas ocasiones.

Otro problema se presentó en la simulación del proceso a altas temperaturas, en este caso, si había presente producto, la conversión resultante era negativa (indicando que la reacción inversa se convirtió en la más importante); en este caso se decidió que, dado que el objetivo es hacer reaccionar los reactivos, se le dio a la conversión un valor de cero arbitrariamente. De cualquier forma, al estudiar las gráficas de velocidad de reacción constante, es fácilmente observable que llega un momento que la conversión de equilibrio es cero, a partir de ese momento al producto comenzará a disociarse.

Se observó también que en las subrutinas que realizaban la integración numérica, los resultados variaban ligeramente, en ocasiones, al repetir los cálculos. Esto se debe a que la computadora, al realizar un ciclo con números reales, da pequeñas variaciones al redondear de binario a decimal, con lo que el último valor del ciclo en ocasiones se lo saltaba.

Se corrigió esto al sumarle al límite superior del ciclo un número pequeño, que finalmente fue $1e-04$, puesto que más pequeño se suscitaba el problema ocasionalmente, y más grande puede afectar los resultados.

No fue posible comparar los resultados que se obtuvieron en la computadora con datos reales, puesto que no se consiguen fácilmente datos de plantas o de laboratorios en que se lleva a cabo la bromación del etileno en reactores con comportamientos semejantes a los ideales. No obstante, P.H. Groggins (cit.) nos indica que hasta los 700 C (aprox. 1000 K) el equilibrio de la reacción se desplaza hacia la derecha; tal resultado se obtuvo con la opción de conversiones de equilibrio. Ya que estos cálculos se realizaron con los valores obtenidos de las constantes de velocidad (ecuaciones de Arrhenius), presumimos que el modelo matemático se ajusta razonablemente bien.

Conclusiones

Se concluye entonces que, aún cuando el modelo matemático en ocasiones es complejo, es posible simular en la computadora una reacción química que se desarrolla en reactores industriales.

Es fácilmente apreciable que aún cuando el desarrollo del algoritmo lleva mucho tiempo, éste se compensa en forma más que suficiente, por el ahorro que trae consigo al estudiar las opciones posibles al diseñar un reactor, estudiar el comportamiento de la reacción o analizar las capacidades de reactores ya existentes.

- 1 .- Groggins P.H.
Procesos industriales de síntesis orgánica
Editorial Gustavo Gili, S.A.
1953
- 2 .- Levenspiel O.
Ingeniería de las reacciones químicas
Editorial Reverte S.A.
1981
- 3 .- Peters M. & Timmerhaus K.
Plant design and economics for chemical engineers
Editorial McGraw-Hill
1981
- 4 .- Poole L., Borchers M. & Donahue C.
Algunos programas de uso común en BASIC
Editorial OSBORNE/McGraw-Hill
1980
- 5 .- Smith M.
SIMONS' BASIC
COMMODORE BUSINESS MACHINES
1983
- 6 .- Smith & Van Ness
Introducción a la termodinámica en ingeniería química
Editorial McGraw-Hill
1980
- 7 .- Perry J.
CHEMICAL ENGINEERS' HANDBOOK
Ed. McGraw-Hill
1950
- 8 .- Himmelblau D.
Principios y cálculos básicos de la ingeniería química
Editorial CECSA
1980

APÉNDICE

LISTADO DEL PROGRAMA

```

10 rem codificacion para la tesis:
20 rem simulacion por computadora del
30 rem sistema reaccionante a + b = c
40 rem en fase gaseosa para reactores
50 rem ideales isotermicos y adiabaticos
60 rem en estado estacionario
61 :
62 rem programa guillermo escutia /1965-1966
64 :
65 rem *** esqueleto del programa ***
66 rem *** entre lineas 60 , 7000 ***
67 rem *** subrutinas de formato ***
68 rem *** entre lineas 7000 y 5000 ***
69 rem *** subrutinas de calculos ***
70 rem *** entre lineas 5000 y 7000 ***
71 rem *** subrutinas de graficos ***
72 rem *** entre lineas 7000 y 8000 ***
73 rem *** sentencias data ***
74 rem *** lineas arriba de 8000 ***
75 :
80 lex &."run"&chr(17)
85 rem **pantalla de presentacion**
90 callcur 0,11:print "2":cset 0
100 print "S":print at(0,5)""
110 centre"simulacion por computadora del":print:print
120 centre"sistema reaccionante a + b = c":print:print
130 centre"en fase gaseosa para reactores":print:print
140 centre"ideales isotermicos y adiabaticos":print:print
150 centre"en estado estacionario"
160 inv 5,7,35,11
170 pause 10
175 rem **fin pantalla**
180 rem ***menu inicial***
190 print "S":cset 1:print
200 print
210 centre"R C H U":print
220 print at(10,7) " S I "at(20,7) "Ingenieria"
230 print at(0,10) "Presion"at(15,10) "RPa"at(25,10) "atm"
240 print at(0,11) "Volumen"at(20,11) "L"at(34,11) "L"
250 print at(0,12) "Cent.de materia"at(15,12) "mol"at(25,12) "mo
1"
260 print at(0,13) "Temperatura"at(20,13) "K"at(34,13) "K"
270 print at(0,14) "Energia"at(20,14) "J"at(35,14) "cal"
280 print:print:centre"Que sistema de unidades desea":print
290 print at(12,10) "%a" S I"
300 print at(12,20) "%b" S I "Ingenieria"
310 rem **fin menu**

```

ready.

```

305 rem #escoger sist.unidades#
310 get a1:if a1="" then 310
320 if a1="a" then reset 8010:goto 350
330 if a1="b" then reset 8020:goto 350
340 goto 310
350 read a1,a2
365 rem #fin#
380 rem #iniciar operaciones#
390 dim x(15),a(15),t(15),f(20)
395 q1="":for i=1 to 40:q1=q1+" "inext:z1=10000:z2=1000:z5=0.5:z
z=10000000
395 if z01="ata" then r=0.08205:else:r=8.3147295
397 colour 11,11
399 exec defin
400 print "S":print at(2,12)"#A INTRODUCIÓ LOS DATOS DEL SISTEM
A #
402 get a1:if a1="" then 393
404 if a1="s" then 401
405 if a1="n" then exec data1sistem
406 if a1="a" and a10="s" then 393
407 print "S"
408 print at(0,22)"#Operacione #F5# una vez que haya#"
409 print at(0,24)" introducido todos los datos#"
400 list 0100-9000:end
401 reset 8120:read a1,b1,a2,b2
402 reset 8150:read aa,ab,ac
403 reset 8180:read aa,ba,ga,da
404 reset 8200:read ab,bb,gb,db
405 reset 8210:read ac,bc,gc,dc
406 reset 8220:read ai,bi,gi,di
408 exec validacion
410 if def1="" then 397
411 a es detfluj0
412 a es caloval
415 rem #fin fin #
420 rem #menu ppal.#
430 print "S":print:contra"MENU P R I N C I P A L":print
440 print at(5,6)"1. Reactores isotermticos"
450 print at(5,6)"2. Reactor de mezcla adiabatico"
460 print at(5,10)"3. Reactor de piston adiabatico"
470 print at(5,12)"4. Curvas de velocidad de Rx cte."
480 in: 0,0.40,4:in: 15,0.40,6
485 print at(12,15)"#Escriba un numero#"
487 rem #fin menu#
488 rem #escoger opcion#
490 get n1:if n1="" then 490
500 n1=val(n1):if n1>4 or n1<1 then 485
520 if n1=1 then 530:else:goto 1429
525 rem #fin#

```

ready.

```

507.
508 rem ***react.isotermicos***
509 :
510 print "S":print:center "REACTORES ISOTERMICOS":print:print:print
511 exec temp
512 exec conch
513 exec conavel
514 exec conveq
515 rem #linea#1
516 print "S":print:center "R E C I B O"
517 print at(11,6)"Que desea calcular"
518 print at(4,6)"1. Volumen de los reactores para"
519 print at(7,10)"una conversion dada"
520 print at(4,12)"2. Conversion fraccional para un"
521 print at(7,17)"volumen de reactor dado"
522 print at(12,17) "3. Recorra un numero"
523 rem #fin linea#1
524 rem #reactor unico#
525 get n1:if n1="" then 480
526 n1:=val(n1):if n1<0 or n1>1 then 670
527 go n1:goto 710,480
528 rem #fin#
529 rem #calc.vol.#
530 at:=arbol
531 print "S":print:center "C O N V E R S I O N":print
532 print at(10,20)"0 < Conv. < Conv.Eq"
533 print (at:=10)/21
534 print at(4,6)"Conversion de Equilibrio = ":o
535 if o<0.0001 then print:pause "Conversion insignificante!"
536 .S:goto 420
537 print at(4,6)"conversion deseada = ":
538 for i=1 to 5:print
539 eval(n1):if n1=0 or n1=1 then print at:goto 750
540 eval((n v(x)
541 la=
542 li=0
543 exec integral
544 exec salidae
545 exec resul
546 exec resgen
547 rem #fin calc.vol.#
548 rem #opcione#
549 print at(12,20)"Imprimir resul.(s/n)?"
550 get at:if at="" then 850
551 if at="n" then 670
552 if at="s" then hrdcony:else:goto 850

```

end.

```

870 print at(19,21)"otra Conv.(s/n)?"
880 get a;if a="" then 890
890 if a="n" then 900
900 if a="a" then 710;else:goto 880
910 print at(19,22)"otra Temp.(s/n)?"
920 get a;if a="" then 910
930 if a="s" then 570
940 if a="n" then 950;else:goto 910
950 print at(19,27)"User resultados como"
960 print at(19,24)"nuevas entradas(s/n)?";
970 get a;if a="" then 985
980 if a="s" then 989
990 if a="n" then 960;else:goto 955
995 e es actualizar
999 goto 940
990 r#r #fin opciones#
995 r#r #fin final#
970 print "B":print:center"R E N U"
980 print at(2,2)"1.      Menu Principal "
1000 print at(3,11)"2.      Otro sistema "
1010 print at(2,14)"3.      Finalizar "
1015 r#r 7,0,40,10
1020 print at(12,20)"Escriba un numero"
1025 r#r #fin menu#
1027 r#r #esperar opcion#
1030 get n;if n="" then 1070
1040 n#e#el(n#);if n#13 or n#11 then 1020
1050 on n# goto 420,1050,1070
1060 run
1070 print"B":end
1075 r#r #fin#
1080 r#r #f#alc.conv.#
1090 l#=#.99#e
1095 l#=#
1100 v#e#l#f#n v(1#)
1110 e#e# integral
1120 print"B":print:center"V O L U M E N E S"
1130 print at(2,5)"Volumenes de los reactores para"
1140 print at(1,7)"eleccionar una conversion cercana a"at(1,9)
    "l# de equilibrio"
1145 v#e#int(v#);v#e#int(vp)
1150 print at(2,12)"Vol.reactores de mezcla ="#v1;"L"
1160 print at(2,14)"Vol.reactores de piston ="#v2;"L"
1170 print at(13,21)" Volumen > 0"
1175 print at(2,18)"Vol.del reactor (L) = ";
1180 fetch "B",6,v#
1190 v#e#el(v#);if v#=#0 then print a#;goto 1170
1200 if v#=#m then x#e#e#;goto 1220

```

ready.

```

1210 exec calconv
1220 if v=vp then rpn:goto 1240
1230 exec calconv
1240 exec resfrac
1250 n=m
1260 a1="mecla"
1270 a=ac salidas
1280 a=ac resgen
1290 print at(17,20)"Imprimir resul.(s/n)?"
1300 get a1;if a1="" then 1320
1310 if a1="n" then 1315
1320 if a1="s" then hrdcv:else:goto1300
1330 a=ac resfrac
1340 n=p
1350 a1="platon"
1360 a=ac salidas
1370 a=ac resgen
1380 print at(17,20)"Imprimir resul.(s/n)?"
1390 get a1;if a1="" then 1370
1400 if a1="n" then 1390
1410 if a1="s" then hrdcv:else:goto1370
1420 print at(17,21)"Otro Vol.(s/n)?"
1430 get a1;if a1="" then 1400
1440 if a1="s" then 1400
1450 if a1="n" then 900:else:goto 1400
1455 rem ***fin calc.conv.***
1460 :
1465 :
1467 rem ***Termina react.isotermicos***
1468 :
1469 print "B"
1470 a=ac rangot
1475 i=0
1478 if n=4 then 1355
1480 print:print:print " Vol.del reactor (L) = ":fatch "B",6
1485 :
1490 if i(1):if v=0 then print "2 ERROR !! Vol.00 ":goto 149
1495 :
1500 if n=5 then 1515:else:goto 1755
1510 :
1515 rem ****react.mecla adiab.****
1516 :
1517 a=ac resconv 1
1520 for i=1 to t2*1e-05 step dt
1525 i=i+1
1530 i(i)=t
1535 a=ac concn
1540 a=ac convol
1545 a=ac convex

```

ready.

```

1575 ls=0.991ne
1540 vmla1sf(n v(1s)
1550 if .le.vm then a(i)=x:goto 1575
1558 exec calcconvm
1570 .(i)=m
1575 la=t1
1577 lb=t(i)
1580 exec balanceen
1582 wa(i)=ab
1585 b(i)=int(10*t(i)+z5)/10:a(i)=int(z2*t(i)+z5)/z2
1587 wa(i)=int(z2*wa(i)+z5)/z2:ue=int(z2*ue+z5)/z2
1590 print b(i),z(i),wa(i),ue
1600 next
1602 :
1607 rem ***termina reactor mezcla***
1605 :
1607 rem ***opciones***
: 10 print "¿Terminar local. (s/n)?"
1620 get a:if a="" then 1600
1625 if a="n" then 1640
1630 if a="s" then hndcpy:else:goto1620
1640 print "¿Local. grafica (s/n)?"
1650 get a:if a="" then 1650
1655 if a="n" and a!="s" then 1650
1660 if a="s" then exec grafica 1
1665 hndcpyt1
1670 print "¿Temp Val. (s/n)?"
1680 get a:if a="" then 1680
1690 if a="s" then r=0:goto 1690
1695 if a="n" then 1700:else:goto 1680
1700 print "¿Temp rango de Temp. (s/n)?"
1710 get a:if a="" then 1710
1715 if a="n" then 165
1720 if a="s" then 1680:else:goto 1710
1730 rem ***termina opciones***
1732 :
1735 rem *** react.piston adiabatico ***
1736 :
1740 dt=5:vt=0:li=0:la=t1
1745 print "S":print"vt="vt,"vp=0"
1750 print "x =0","t ="t1a
1754 lb=la+dt
1762 exec balanceen
1770 ls=li+wb:lt=(la+lb)/2

```

ready.

```

1775 exec concn
1780 exec consval
1785 exec integral
1800 vt=vt+vp:print"vt=";vt,"vp=";vp
1801 if vp<=0 then 1805
1802 if vt<=v then 1804;else:goto 1806
1804 li=ls;ls=lb:print "x =" ;ls,"t =" ;lb:goto 1784
1805 print "a"
1806 continue "REACTOR DE PISTON ADIABATICO":print
1810 print at(0,5)"temp.entrada " ;t1; " K"
1815 print at(0,7)"conv.entrada " 0"
1820 print at(0,11)"temp.salida " ;lb; " K"
1825 ls=int((2+ls+5)/2)
1830 print at(0,17)"conv.salida " ;ls
1835 :
1836 rem *** termina reactor piston ***
1837 :
1838 rem *** opciones ***
1840 print at(0,17)"¿Imprimir resultados (s/n)?"
1842 get a1;if a1="" then 1842
1844 if a1="n"then 1848
1846 if a1="s" then hrdcpy;else:goto1842
1848 print "¿Otro volumen (s/n)?"
1849 get a1;if a1="" then 1849
1850 if a1="s" then 1850;goto 1490
1851 if a1="n" then 1852;else:goto 1849
1852 print "¿Otro rango de temp. (s/n)?"
1853 get a1;if a1="" then 1853
1854 if a1="n" then 965
1855 if a1="s" then 1430;else:goto 1853
1856 rem *** termina opciones ***
1857 :
1858 rem *** graficas vel.reaccion ***
1859 :
1860 exec resconv 2
1865 for t=t1 to t2+1e-05 step dt
1867 i=i+1
1868 t(i)=t
1871 exec concn
1875 exec consval
1877 exec convap
1880 ..(i)=e
1885 t(i)=int(10*t(i)+5)/10;x(i)=int((2*x(i)+5)/2)
1890 print at(2,5+i)t(i)at(24,5+i)x(i)
1900 next

```

ready.


```

1910 print:print "Temperatura resul.(s/n)?"
1920 get a$:if a$="" then 1920
1925 if a$="n" then 1935
1930 if a$="s" then hrdcopy:else:goto1920
1935 exec grafica 2
1937 nm:reset1
1940 print "Rango Temp.(s/n)?"
1950 get a$:if a$="" then 1950
1955 if a$="n" then 1960
1960 if a$="s" then 1970:else:goto 1950
1965 print"Solucion al Menu ppal.(s/n)?"
1974 get a$:if a$="" then 1984
1985 if a$="n" then 2000
1985 if a$="s" then 420:else:goto 1984
2000 print" Val.de Reaccion = ":fatch "a",5,ra$
2010 raval(ra$):if ra<0 or ra>10 then print"Valores entre 0 y
10":goto 2000
2020 i=0
2025 exec resconv 3
2030 for t=t1 to t2+1e-0C step dt
2035 i=i+1
2040 t(i)=t
2045 exec concn
2050 exec consval
2055 t(i)=int(10*t(i)+z5)/10:x(i)=int(z2*x(i)+z5)/z2
2060 print at(6,5+1)t(i)at(24,5+1)x(i)
2070 next
2080 print:print "Temperatura Resul.(s/n)?"
2090 get a$:if a$="" then 2090
2100 if a$="s" then hrdcopy
2110 exec grafica 3
2115 nm:reset1
2120 print "Tem. Val.de Reaccion (s/n)?"
2130 get a$:if a$="" then 2130
2135 if a$="n" then 965
2140 if a$="s" then 2000:else:goto 2130
2154 ;
2155 ram +++termina val.rx.cte+++
2160 ;

```

ready.

```

3000 rem ***subrutinas de formato***
3005 rem ** entre líneas 3000 y 3008 **
3007 :
3010 proc validation
3015 if a1<=0 or a2<=0 or b1>0 or b2>0 then det="S120":goto 3070
3020 if abs(a3)=1e+7 or abs(a4)=1e+7 or abs(a5)=1e+7 then det="
  "B150":goto 3070
3025 det="":goto 3040
3030 print "S":print:print:print "ERROR EN LINEA : ":det:pause 5
3040 end proc
3050 rem 1)
3060 proc detststem
3070 print "S":print:print "DATOS QUE DEFINEN AL SISTEMA":centre st
3080 print at(2,5) "El programa supone que las constantes"
3090 print "de velocidad se ajustan a la ecuacion de"
3100 print "Arrhenius:"
3110 centre "L = A * exp (E/T)":print:print
3120 centre "k1 en L/(mol min)    k2 en 1/min"
3140 print at(1,12) "Constantes de la Rx directa A + B -> C"
3150 print at(0,14) "A1"
3160 print at(0,15) "B1"
3170 print at(1,17) "Constantes de la Rx inversa C -> A + B"
3180 print at(0,19) "A2"
3190 print at(0,20) "B2"
3200 print at(1,22) "Introduzca los datos en línea 3120"
3210 print at(0,24) "Presione cualquier tecla para continuar"
3210 get a0:if a0="" then 3210
3220 fchr 4,0,40,20,76
3230 print at(3,2) "Entalpias de Formación Std."
3240 print at(1,7) "React.Limitante (":a14:"/mol)"
3250 print at(1,11) "React.en exceso (":a11:"/mol)"
3260 print at(1,17) "Producto (":a11:"/mol)"
3270 print at(1,22) "Introduzca los datos en línea 3150"
3280 print at(0,24) "Presione cualquier tecla para continuar"
3280 get a0:if a0="" then 3280
3290 print "S":print:print:print "
3300 print at(2,4) "El programa supone que las capacidades"
3310 print "de calorificas se ajustan a la ecuacion"
3320 print "siguiente":print
3330 centre "Cp = a + bT + cT2 + d/T2"
3340 print at(11,10) "Cp en (":a14:"/ (mol K))"
3350 print at(0,12) "Reactivo limitante:"
3360 print at(0,14) "Utilice línea 3150"
3370 print at(0,16) "Reactivo en exceso:"
3380 print at(0,20) "Utilice línea 3220"
3390 print at(23,12) "Producto:"

```

rem 1..

```

3650 print at(22,14)"Utilice linea 8210"
3660 print at(23,18)"Inertes:"
3670 print at(22,20)"Utilice linea 8220"
3680 print at(0,24)"Presione cualquier tecla para continuar"
3690 get a0:if a0="" then 3650
3700 end proc
3710 rem *
3720 proc detilujo
3730 print "S":centra"DATOS DEL FLUJO EN CONDICIONES DADAS"
3740 print at(0,3)"S":q#
3750 print at(0,5)"Presion (":t#":") = ";
3760 fetch "S",S,p1:pa=val(p1):if p<=0 then print at(0,5)q#:got
o 3740
3770 print at(0,5)"Temperatura (K) = ";
3780 fetch "S",A,t#1:t=val(t#):if t<=0 then print at(0,6)q#:
igoto 3755
3790 print at(0,7)"Caudal (L/min) = ";
3800 fetch "S",S,v#1:v#0=val(v#):if v#<=0 then print at(0,7)q#:
igoto 3750
3810 print:print:centra"PORCENTAJES EN VOLUMEN DEL ALIMENTO"
3820 print at(0,11)"% React.limitante = ";
3830 fetch "S",S,pa:pa=val(pa):if pa<=0 then 3790
3840 print at(0,17)"% React.en exceso = ";
3850 fetch "S",S,pb:pb=val(pb):if pb<pa then 3830:else:goto
3650
3860 pause "S": React.en exceso >= que lim.",3:fahr 10,0,40,1,9
6:goto3810
3870 print at(0,15)"% Producto = ";
3880 fetch "S",S,pc:pc=val(pc):if pc<0 then 3850
3890 pi=100-(pa+pb+pc)
3900 if pi<0 then pause "S ERROR EN LOS PORCENTAJES !",3:goto 3
700
3910 print at(0,17)"% Inertes = ":pi
3920 print at(0,20)"S:asea corregir (s/n)?"
3930 get a#:if a#="" then 3695
3940 if a#="s" then 3720
3950 fahr 20,8,21,1,96
3960 end proc
3970 rem *
3980 proc temp.
3990 print " Temperatura (K) = ";
4000 fetch "S",-1,t#:t=val(t#)
4010 if t#<=0 then pause "S Error !!, Temperatura >= 0",3:igoto 3
950
4020 end proc
4030 rem *
4040 proc resval
4050 print "S"
4060 vm=int(vm+25)
4070 if vm>999999 then vms=">999999":goto 4030
4080 vm#=str$(vm)
4090 vp=int(vp+25)

```

```

4035 if vp>999999 then vp:=>999999:goto 4040
4037 vp:=str(vp)
4040 print at (26.7)"Conv."at (26.7):
4050 print at (26.8)"Vmsz (L)"at (26.8)vm#
4060 print at (26.9)"Vpis (L)"at (26.9)vp#
4070 inv 3.26.14.7
4080 end proc
4090 res: t
4100 proc resfrac
4110 print "S"
4120 o:=int(wmz1+z5)/z1
4130 print at (26.7)"Vol. (L)"at (26.7)v
4140 print at (26.8)"Conv.m"at (26.8)o
4150 o:=int(wp1+z5)/z1
4160 print at (26.7)"Conv.p"at (26.9)o
4170 inv 3.26.14.7
4180 end proc
4190 res: t
4200 proc resgen
4210 print at (10.1)"R E S U L T A D O S"
4220 o:=int(z1+z5)
4230 print at (0.2)"Temp. (°)"at (15.7)o
4240 print at (0.4)"F1 (L/mol min)":k1
4249 print at (0.5)"F2 (L/min)"at (17.3)+2
4250 print at (0.6)"E. eq."at (17.6)+1
4260 o:=int(wmz1+z5)/z1
4270 print at (0.7)"Conv.Eq."at (15.7)o
4280 o:=int(er+z5)
4290 print at (0.8)"Calor. Eq. (:a1t):"at (15.8)o
4300 o:=int(q+z5)
4310 print at (0.9)"Qprod. (:a1t):/min"at (15.9)o
4320 print at (0.10)"REACTOR: "s3t
4330 print at (0.10)"COND.: Isotermicas"
4340 print at (0.11)"ENTRADA"at (29.11)"SALIDAS"
4340 o:=int(v0*10+z5)/10
4350 print at (0.12)"Caudal"at (10.12)o
4360 o:=int(vf*10+z5)/10
4370 print at (21.12)"L/min"at (29.12)o
4380 o:=int(fl*at2+z5)/z2
4390 print at (0.17)"Flujo A"at (10.17)o
4400 o:=int(fb*2+z5)/z2
4410 print at (20.17)"mol/min"at (29.17)o
4420 o:=int(fb*2+z5)/z2
4430 print at (0.14)"Flujo B"at (10.14)o
4440 o:=int(fb*2+z5)/z2

```

ready.

```

4450 print at(20,14)"mol/min"at(29,14)0
4450 o=rint(f3c+z2+z5)/z2
4470 print at(0,15)"Flujo C"at(10,15)0
4480 c=rint(fc+z2+z5)/z2
4490 print at(20,15)"mol/min"at(29,15)0
4500 o=rint(f1+z2+z5)/z2
4510 print at(0,15)"Flujo I"at(10,15)0
4520 print at(20,16)"mol/min"at(29,16)0
4530 o=rint(c1a+z1+z5)/z1
4540 print at(0,17)"Conc.A"at(10,17)0
4550 c=rint(ca+z1+z5)/z1
4560 print at(21,17)"mol/L"at(29,17)0
4570 o=rint(c2b+z1+z5)/z1
4580 print at(0,18)"Conc.B"at(10,18)0
4590 c=rint(cb+z1+z5)/z1
4600 print at(21,18)"mol/L"at(29,18)0
4610 o=rint(c3c+z1+z5)/z1
4620 print at(0,19)"Conc.C"at(10,19)0
4630 c=rint(cc+z1+z5)/z1
4640 print at(21,19)"mol/L"at(29,19)0
4650 print at(0,20)"A : React.lim."at(0,21)"B : React.exceso"
4660 print at(0,22)"C : Producto"at(0,23)"I : Inertes"
4670 inv 0,0,40,3;inv 10,0,40,1;inv 20,0,40,5
4680 end proc
4690 rem †
4700 proc resconv 1
4710 print "B"
4720 centre"CONVERSIONES FRACCIONALES":print
4730 centre"a una Temperatura":print
4740 inv 0,0,40,4
4750 print
4760 print"Temp. (K)", "Balance", "Balance", "Equil."
4770 print" ", "de masa", "energia", " "
4780 end proc
4790 rem †
4790 proc resconv 2
4790 print"B"
4790 centre"TEMPERATURA vs. CONV.CO."
4790 inv 0,0,40,3
4790 print at(5,4)"Temp. (K)"at(24,4)"Conv.Equil."
4790 end proc
4790 rem †
4790 proc resconv 3
4790 print"B"
4790 centre"TEMPERATURA vs. CONVERSION"
4790 inv 0,0,40,3

```

read,.

```

4750 print at(5,5)"Temp. (t)"at(24,5)"Conversion"at(13,3)"Vel.
      Rn =":ra
4800 end proc
4810 rem #
4820 proc:rengot
4830 print"Temp.inicial (t) = ";
4840 fetch "3".4.t1:t1=val(t1)
4850 if t1<=0 then print "Error! T > 0" :goto 4820
4860 print:print"Temp.(final (t) = ";
4870 fetch "3".4.t2:t2=val(t2)
4880 if t2<=0 or t2<=t1 then print "Error! T > 0 y T fin. > T i
      nic.":goto 4650
4890 dt=(t2-t1)/14
4900 end proc
4910 ;
5000 rem ****subrutinas de calculo***
5010 rem # entre lineas 5000 , 7000 **
5011 ;
5020 proc defn
5030 def fn f1(t)=a1*exp(b1/t)
5040 def fn f2(t)=a2*exp(b2/t)
5050 def fn ra(x)=(-1/2*c1a/(1+t*x)^2)*(a1*f2+(b*x+c)
5060 def fn v(x)=v0*(1+t*x)^2/(1.1*c1a*(1-x)+(-m)-1.2*(m+x)*(1+
      x))
5070 def fn er(t)=a1+1.2*t*b1*t1/2+ig*t1/2-id/t
5080 def fn ce(t)=1.2*b1*t+1.9*t1/2+d/t12
5090 def fn g(t)=fn ce(t)/fn er (t)
5100 end proc
5110 rem #
5120 proc:convcal
5130 t1=fn f1(t)
5140 t2=fn f2(t)
5150 if t1<=0 and t2<=0 then 5016
5160 if t2<=0 then 5016
5170 goto 5000
5180 proc "ERROR EN LAS CONSTANTES DE VELOCIDAD",4:print"3":d
      um:end
5190 t=1.1/10
5200 end proc
5210 rem #
5220 proc:condn
5230 v0=m0/r1/p
5240 c1a=f1a/v0
5250 c1b=f1b/v0
5260 c1c=f1c/v0
5270 end proc
5280 rem #
5290 proc:calcal
5300 m0=m*(C*(r1/a)

```

real.

```

5340 f1a=m0*pa/100
5350 f2b=m0*pb/100
5360 f3c=m0*pc/100
5370 f1a=m0*pi/100
5380 a=-pa/100
5390 a=i2b/f1a;ap=f3c/f1a
5400 ar=ac-(aa+ab)
5410 ia=ai-(aa+ab);ib=bc-(ba+bb)
5420 ig=gc-(ga+gb);id=dc-(da+db)
5430 t=27B;el=er-(ia*t+ibr*t12/2+igt*t13/3-id/t)
5440 rb=pb/pt;rc=pc/pa;ri=pi/pa
5450 la=aa+ab+rb+ac+rc+ai*ri;lb=ba+bb+rb+bc+rc+bi*ri
5460 lg=ga+gb+rb+gc+rc+gi*ri;ld=da+db+rb+dc+rc+di*ri
5470 end proc
5480 rem **
5490 proc conver
5500 a=-l*cia
5510 b=1+em*pl+clat*(1+m)
5520 c=mp-k*clata
5530 d=b12-4*atc
5540 if d<0 then pause "2 NO HAY SOLUCION REAL ! ",4;p
5550 print "3":d;end
5560 re=(-b+sqrt(d))/(2*a)
5570 if re>1 then re=1
5580 if re<0 then re=0
5590 end proc
5600 rem *
5610 proc integral
5620 if ls=li then vp=0;goto 5710
5630 h=(ls-li)/20
5640 l=0
5650 for j=li to ls+la-04 step h
5660 f(1)=fn v(j)
5670 l=l+1
5680 next j
5690 sn=0;sp=0
5700 for l=1 to 19 step 2
5710 sn=sn+f(1)
5720 next l
5730 for l=2 to 18 step 2
5740 sp=sp+f(1)
5750 next l
5760 vp=h/3*(f(0)+f(20)+4*sn+2*sp)
5770 end proc
5780 rem *

```

ready.

```

5730 proc salidas
5740 er=fn er(t)
5750 a=erf(1a*x)
5760 v=exp(t*(1+a*x))
5770 fa=61a*(1-x)
5780 fb=(2b-f1a*x)
5790 fc=f2c+f1a*x
5800 ca=fa/vf
5810 cb=fb/vf
5820 cc=fc/vf
5830 end proc
5840 rem **
5850 proc actualizar
5860 v=0/vf
5870 d1=da:c2b+cb:c2c+d
5880 f1=fa:c2b+fb:c2c+fc
5890 a1=fa*(b+fc)+f1
5900 n1=n0-fa
5910 ee=(n1-n0)/n0
5920 end proc
5930 rem **
5940 proc calcdconva
5950 la=0:1f=int(z3*(a+z3)/z3-1/z3)
5960 la=(la+1)/2
5970 y1=ln(1+v(1a):subasn(y1-v))
5980 if suba0 or abs(y1-v)/v<0.0001 then xx=lm:goto 6000
5990 if suba=-1 then la=lm:goto 5950
6000 lf=lm:goto 5950
6010 end proc
6020 rem **
6030 proc calcdconvp
6040 la=0:1f=int(z3*(a+z3)/z3-1/z3)
6050 la=(la+1)/2
6060 la=lm:la=0
6070 er=er integral
6080 y1=v:subasn(y1-v)
6090 if suba0 or abs(y1-v)/v<0.0001 then xx=lm:goto 6110
6100 if suba=-1 then la=lm:goto 6040
6110 lf=lm:goto 6040
6120 end proc
6130 rem **
6140 proc balanceen
6150 if lb=1a then wb=@:goto 6250
6160 h=(1b-1a)/20
6170 l=0

```

ready.


```

6170 for j=1a to 1b+1e-04 step h
6180 f(1)=fn g(j)
6190 l=1+1
6200 next j
6210 an=0:sp=0
6220 for l=1 to 19 step 2
6230 an=an+f(1)
6240 next l
6250 for l=2 to 18 step 2
6260 sp=sp+f(1)
6270 next l
6280 sb=h/2*(f(0)+f(20)+4*an+2*sp)
6290 if sb>1 then sb=1:goto 6290
6300 if sb<0 then sb=0
6310 end proc
6410 rem 1†
6420 proc curvasracte
6430 def fn r(x)=fn ra(x)-ra
6440 lf=x
6450 end raices 3
6470 x(i)=y
6480 end proc
6770 rem 1†
6780 proc raices 3
6790 h1=sgn(fnr(0))
6800 if lf=0 then 6850
6810 j1=sgn(fnr(1f))
6820 if h1*j1=0 then 6850
6830 if h1fj1=0 then 6870
6840 for l=1 to 1000
6850 w=nd(2)*lf
6860 w1=sgn(fnr(w))
6870 if w1=0 then y=w:goto 6990
6880 if h1w1=0 then 6860
6890 next l
6900 y=0:goto 6990
6910 lf=w
6920 d(2+h1)=0
6930 d(2-h1)=1f
6940 y=(d(1)+d(3))/2
6950 y1=sgn(fnr(y))
6960 if y1=0 then 6990
6970 d(2+y1)=y
6980 if abs(d(1)-d(3))/abs(d(1)+abs(d(3)))<1e-04 then 6990
6990 goto 6890

```

ready.

```

6550 if h1=0 then 6560
6560 y=1f
6570 goto 6590
6580 y=0
6590 end proc
7000 :
7010 rem ****subrutinas de graficas****
7020 rem **entre lineas 7000 y 8000**
7030 :
7040 rem
7050 proc grafica 1
7060 exec presentation
7070 exec curva wt
7080 e=(1)+20:e=(1)+15
7090 for i=1 to 15
7100 e=(2)=220/(t2-t1)*(e(1)-t(1))+20
7110 e=(2)=150+e(1)+15
7115 line e=(1),e(1),e(2),e(2),1
7120 e=(1)=e(2):e=(1)=e(2)
7130 next
7140 exec escoger
7150 end proc
7160 rem 1
7170 proc presentation
7180 hires 0,10
7190 for i=0 to 10 step 2
7200 a=-150*(i/10)+155
7210 line 20,e=(1),e(1),1
7220 next
7230 for i=1 to t2+1e-05 step(t2-t1)/4
7240 etaint(1+e):etfstrf(et)
7250 e=cos(2*(t2-t1)*(1-t1)+20
7260 line e=(1),e(1),155,1
7270 t=t+e-20,170,et+1,1,1.0
7280 next
7290 text 15,160,"51",1,1,0
7300 text 10,120,"5.2",1,1,0
7310 text 10,96,"5.4",1,1,0
7320 text 10,64,"5.6",1,1,0
7330 text 10,32,"5.8",1,1,0
7340 text 10,0,"51",1,1,0
7350 text 10,75,"5",1,1,0
7360 text 10,35,"5.",1,1,0
7370 text 10,150,"5]5]:continuar
7380 text 10,110,100,"5.",1,1,0
7390 end proc

```

ready.

5]5]:imprimir",1,1,0

```

7380 rem #
7390 proc curva xt
7400 ax(1)=20:ey(1)=165
7410 for l=1 to 15
7420 ax(2)=260/(t2-t1)*(t(1)-t1)+30
7430 ey(2)=-140*x(1)+165
7440 line ax(1),ey(1),ax(2),ey(2),1
7450 ex(1)=ax(2):ey(1)=ey(2)
7460 next
7470 end proc
7480 rem #
7490 proc escoger
7500 a=lnkey
7510 if a=1 then 7540
7520 if a=7 then copy
7530 goto 7500
7540 end proc
7550 rem #
7560 proc grafica 2
7570 exec presentacion
7580 exec curva xt
7590 exec escoger
7600 end proc
7610 rem #
7620 proc grafica 3
7630 exec curva xt
7640 csetc
7650 exec escoger
7660 end proc
7670 :
8000 rem ** sentencias data **
8001 rem ** arriba de lineas 8000 **
8010 data "J","IFA"
8020 data "asl","atm"
8100 rem ** constantes de velocidad *** 8110 rem ** utilice line
a 8120 para ***
8115 rem # los valores de a1,b1,a2,b2 #
8120 data 6.445e+07,-12280,1.242e+17,-28148
8130 rem ** calores de formacion de **
8135 rem ** las especies a, b, c **
8140 rem ** utilice la linea 8150 **
8150 data 31254,52290,-38325
8160 rem ** parametros de cap calor. **
8170 rem ** son a,b,c,d utilice lineas 8180 rem ** 8190,8200,8
210 ; 8220 **
8185 rem # una linea para cada especie#
8190 data 37.30,5.024e+04,0,-1.256e+05
8200 data 11.649,0,11975,-3.652e+05,0
8210 data 86.67,0,0,0
8220 data 28.60,3.758e+07,0,-5.024e+04

```

ready.