

58  
2 ej



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**FACULTAD DE QUÍMICA**

**ANÁLISIS, SELECCIÓN Y PROGRAMACIÓN  
EN BASIC APPLESOFT DE LAS TÉCNICAS  
NUMÉRICAS UTILIZADAS EN EL CÁLCULO DE  
REACTORES QUÍMICOS HOMOGÉNEOS**

**T E S I S**  
**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:**  
**INGENIERO QUÍMICO**  
**P R E S E N T A :**

**JOSE MIGUEL KATOKU MARTINEZ**

**1985**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **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.

# TESIS CON FALLA DE ORIGEN

# I N D I C E

INTRODUCCION..... 001

CAPITULO I..... 004

ESTIMACION DE PARAMETROS.

CAPITULO II..... 030

MODELOS DE REACTORES QUIMICOS.

CAPITULO III..... 070

MEZCLADO.

CAPITULO IV..... 096

ESTABILIDAD DE REACTORES.

CONCLUSIONES..... 108

"VENI: VIDI: VICI"

--vine, vi y vencí--

(JULIO CESAR).

## O B J E T I V O S :

CON EL USO CRECIENTE DE LAS COMPUTADORAS, COMO HERRAMIENTAS BASICAS EN LA RESOLUCION DE MODELOS MATEMATICOS Y DADA LA DISPONIBILIDAD DE LAS MISMAS, ES DESEABLE CREAR SISTEMAS DE CALCULO QUE FACILITEN LA LABOR DE DISEÑO Y SIMULACION DE EQUIPOS, PARA DIVERSAS OPERACIONES Y PROCESOS UNITARIOS QUE SE PRESENTAN FRECUENTEMENTE EN LOS PROCESOS QUIMICOS.

ALGUNOS CALCULOS SON REPETITIVOS, LABORIOSOS Y GENERALMENTE SON DEL TIPO PRUEBA Y ERROR, ESTO ES CARACTERISTICO EN LOS PROBLEMAS QUE SE PRESENTAN EN INGENIERIA QUIMICA Y TAL ES EL CASO EN EL CALCULO DE REACTORES QUIMICOS HOMOGENEOS, LOS CUALES REQUIEREN DE UN GRAN CONJUNTO DE TECNICAS NUMERICAS, PARA SU SOLUCION.

TRATANDO DE FACILITAR LA LABOR DE CALCULO, EN EL DISEÑO DE REACTORES HOMOGENEOS, SURGIO LA IDEA DE ELABORAR ESTA TESIS, CUYO OBJETIVO FUNDAMENTAL ES PROVEER AL INGENIERO QUIMICO DE ALGORITMOS Y SISTEMAS DE CALCULO, QUE LE PERMITAN EN FORMA RAPIDA ANALIZAR MODELOS MATEMATICOS DE REACTORES QUIMICOS HOMOGENEOS Y PARA CONCLUIR SI ESTOS MODELOS ESTAN BIEN FORMULADOS, SI LAS CONDICIONES DE OPERACION SON LAS ADECUADAS O BIEN PARA CALCULAR LA CAPACIDAD DEL REACTOR, DADOS LOS REQUERIMIENTOS DE PRODUCCION.

DEBE DE QUEDAR CLARO QUE NO SE ESTA EVITANDO LA ETAPA DE FORMULACION DE MODELOS MATEMATICOS A PARTIR DEL FENOMENO CORRESPONDIENTE, YA QUE ESTA ES UNA HABILIDAD QUE EL INGENIERO QUIMICO DEBE DE POSEER; UNA VEZ FORMULADO EL MODELO, EL INGENIERO QUIMICO PODRA APLICAR UNA SERIE DE TECNICAS MATEMATICAS Y/O NUMERICAS, QUE HAN SIDO PROGRAMADAS Y CODIFICADAS EN BASIC, PARA OBTENER RESULTADOS NUMERICOS LOS CUALES DEBERAN ANALIZARSE CUIDADOSAMENTE PARA ASI OBTENER INFORMACION ACERCA DEL COMPORTAMIENTO DEL SISTEMA ESTUDIADO.

## G E N E R A L I D A D E S

AL ANALIZAR UN REACTOR QUIMICO HOMOGENEO, SE CONCLUYE QUE LA VARIABLE DEPENDIENTE FUNDAMENTAL, ES LA RAPIDEZ DE REACCION, LA CUAL CUANTIFICA CON QUE RAPIDEZ LOS REACTIVOS SE TRANSFORMAN A PRODUCTOS EN UN CIERTO VOLUMEN DE REACCION.

DICHA RAPIDEZ DE REACCION, DEPENDERA DE LA TEMPERATURA Y DE LA COMPOSICION DE LA MEZCLA REACCIONANTE. DEPENDENCIA ESTABLECIDA A TRAVES DE UN MODELO PROPUESTO POR LA APLICACION DE CONCEPTOS DE CINETICA QUIMICA. MEDIANTE EL ESTUDIO EXPERIMENTAL DEL FENOMENO DE REACCION ES FACTIBLE OBTENER EL MODELO MATEMATICO ESPECIFICO PARA LOS REACTIVOS INVOLUCRADOS.

EL MODELO DE RAPIDEZ DE REACCION, ESTARA EN FUNCION DE PARAMETROS CINETICOS CONOCIDOS COMO <CONSTANTE(S) CINETICA(S) Y ORDEN(ES) DE REACCION.> PARAMETROS QUE PUEDEN SER EVALUADOS A PARTIR DE DATOS EXPERIMENTALES.

PARA PODER CALCULAR LA CAPACIDAD DE UN REACTOR ES NECESARIO CONOCER LOS PARAMETROS CINETICOS QUE ESPECIFICAN CUAL ES EL MODELO DE RAPIDEZ DE REACCION.

PARA EL CALCULO DE PARAMETROS CINETICOS. EXISTEN TECNICAS DE AJUSTE DE MODELOS CONOCIDAS COMO TECNICAS DE ESTIMACION DE PARAMETROS.

UNA VEZ CONOCIDO EL MODELO CINETICO, LA SIGUIENTE FASE, SERA RELACIONAR ESTE MODELO CON LAS VARIABLES DE OPERACION DE UN REACTOR QUIMICO, TALES COMO : PRESION, TEMPERATURA, COMPOSICION, FLUJO ETC. ETC. ESTO SERA POSIBLE, A TRAVES DE LA APLICACION DE BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA AL SISTEMA DE REACCION QUIMICA, LOS CUALES CONDUZCAN A FORMULAR EL MODELO MATEMATICO DE UN REACTOR QUIMICO.

EL MODELO MATEMATICO DE UN REACTOR QUIMICO PODRA SER UN CONJUNTO DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES O NO LINEALES O BIEN UN CONJUNTO DE ECUACIONES DIFERENCIALES, DEPENDIENDO DEL TIPO DE OPERACION Y FORMA DEL REACTOR.

LO ANTERIOR IMPLICA EL DISPONER DE TECNICAS, PARA RESOLVER ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES, ASI COMO NO LINEALES Y ECUACIONES DIFERENCIALES.

PARA FACILITAR EL TRATAMIENTO NUMERICO DEL MODELO DE UN REACTOR, FRECUENTEMENTE SE CONSIDERA QUE EL REACTOR ES IDEAL, ES DECIR QUE LA MEZCLA REACCIONANTE ES HOMOGENEA (UNIFORME EN COM-

POSICION Y TEMPERATURA) Y POSTERIORMENTE, SE HACE UN ANALISIS DE MEZCLADO Y DISPERSION, PARA DETERMINAR QUE TANTO SE DESVIA DE LA IDEALIDAD Y CORREGIR LOS RESULTADOS OBTENIDOS DEL REACTOR IDEAL. ESTO IMPLICA, EL APLICAR TECNICAS NUMERICAS PARA EL ANALISIS DE MEZCLADO, EN REACTORES QUIMICOS, LAS CUALES TIENEN COMO OBJETIVO, COMPARAR EL COMPORTAMIENTO, REAL DE UN REACTOR, CON EL PREDICHO POR UN MODELO MATEMATICO.

FINALMENTE, ES IMPORTANTE CONOCER QUE TAN ESTABLE PUEDE OPERAR UN REACTOR QUIMICO, QUE FUE DISEÑADO PARA OPERAR EN CIERTAS CONDICIONES PRE-ESTABLECIDAS, ESTO REQUIERE DE UN ANALISIS DE SENSIBILIDAD DEL MODELO MATEMATICO.

RESUMIENDO, SE PUEDEN MENCIONAR COMO AREAS DE APLICACION DE TECNICAS NUMERICAS, EN EL CALCULO DE REACTORES QUIMICOS HOMOGENEOS, LAS SIGUIENTES :

- 1).- CINETICA QUIMICA.
- 2).- DISEÑO Y/O SIMULACION DE REACTORES QUIMICOS
- 3).- ANALISIS DE MEZCLADO.
- 4).- ESTABILIDAD DE REACTORES.

EL TRABAJO DESARROLLADO EN LA PRESENTE TESIS, SE ENFOCO FUNDAMENTALMENTE, AL DESARROLLO DE ALGORITMOS Y ELABORACION DE PROGRAMAS QUE HICIESEN POSIBLE LA RESOLUCION DE PROBLEMAS RELACIONADOS CON LAS 4 AREAS DE APLICACION ANTERIORMENTE MENCIONADAS.

LOS PROGRAMAS FUERON CODIFICADOS EN BASIC-APPLESOFT, SIENDO ESTOS DE TIPO CONVERSACIONAL, PARA FACILITAR SU USO A LAS PERSONAS QUE NO TIENEN CONOCIMIENTOS EN COMPUTACION.

EN LOS SIGUIENTES CAPITULOS SE ANALIZARAN CADA UNA DE LAS 4 AREAS DE APLICACION Y SE EXPONDRAN LAS TECNICAS NUMERICAS SELECCIONADAS PARA LA RESOLUCION DE CADA UNO DE LOS MODELOS REPRESENTATIVOS.

"EN EL MUNDO SOLO HAY DOS  
PODERES LA ESPADA Y EL  
TALENTO.....  
PERO AL FINAL EL TALENTO SIEMPRE  
VENCE AL ACERO"

(NAPOLEON BONAPARTE)

## ESTIMACION DE PARAMETROS

### CINETICA QUIMICA (ESTIMACION DE PARAMETROS).

1.1.- LA CINETICA QUIMICA ES UN RAMA DE LAS CIENCIAS FISICA Y QUIMICA QUE ESTUDIA LA RAPIDEZ CON LA CUAL SE LLEVAN A CABO LAS REACCIONES QUIMICAS, DEPENDIENTES DE LA PRESION, LA TEMPERATURA Y LA MATERIA PRESENTE.

EL OBJETIVO DE APLICAR LA CINETICA QUIMICA. ES ENCONTRAR UN MODELO MATEMATICO, QUE REPRESENTA LA RAPIDEZ CON LA QUE SE LLEVA A CABO UNA TRANSFORMACION QUIMICA. DE ACUERDO A LAS DIVERSAS TEORIAS DESARROLLADAS AL RESPECTO LOS MODELOS DE VELOCIDAD DE REACCION EN SISTEMAS HOMOGENEOS INVOLUCRAN EL TERMINO  $kC^n$  EN DONDE  $k$  ES LA CONSTANTE CINETICA,  $n$  ES EL ORDEN DE REACCION Y  $C$  ES LA CONCENTRACION DEL REACTIVO.

LAS TECNICAS DE ESTIMACION DE PARAMETROS TIENEN COMO OBJETIVO EVALUAR  $k$  Y  $n$  PARA SISTEMAS SIMPLES ( $k$ 'S Y  $n$ 'S) PARA SISTEMAS COMPLEJOS.

EN CINETICA QUIMICA SE APLICAN 2 PROCEDIMIENTOS DE ESTIMACION DE PARAMETROS.

1.- EL METODO INTEGRAL.

2.- EL METODO DIFERENCIAL.

EL PRIMERO REQUIERE DE DATOS DE CONCENTRACION DE REACTIVO(S) CONTRA TIEMPO DE REACCION.

EL SEGUNDO REQUIERE DATOS DE RAPIDEZ DE REACCION ( $R$ ) CONTRA CONCENTRACION DE REACTIVOS. POR LA DEFINICION DE RAPIDEZ DE REACCION (EN ALGUNOS TEXTOS LLAMADA VELOCIDAD DE REACCION) PARA UN REACTIVO Y APLICANDO LA TECNICA DE LAS DIFERENCIAS FINITAS, SE PUEDEN TRANSFORMAR LOS DATOS DE CONCENTRACION DE REACTIVO CONTRA TIEMPO A DATOS DE RAPIDEZ DE REACCION ( $R$ ) VS. CONCENTRACION DE REACTIVOS DE LA SIGUIENTE MANERA :

SEA ( $R_A$ ) LA RAPIDEZ CON LA QUE UN REACTIVO ( $A$ ) SE TRANSFORMA A PRODUCTOS. SI SE MIDE LA CONCENTRACION DEL REACTIVO ( $A$ ) PARA 2 TIEMPOS MUY CERCANOS SE OBTIENE LO SIGUIENTE :



$$R_A = - \frac{\partial C_A}{\partial T} \cong - \frac{C_A(T+\Delta T) - C_A(T)}{\Delta T}$$

LO CUAL EQUIVALE A REPRESENTAR LA DERIVADA MEDIANTE UNA DIFERENCIA FINITA. ENTRE MENOR SEA EL INTERVALO, DE TIEMPO  $(T_{i+1}-T_i)$ , MAYOR SERA LA APROXIMACION DE LA DIFERENCIA A LA DERIVADA.

EL METODO INTEGRAL GENERA UN MODELO NO LINEAL EL CUAL EN LA MAYORIA DE LAS OCASIONES SE RESUELVE POR PRUEBA Y ERROR Y FUNCIONA MUY BIEN PARA REACCIONES SIMPLS DE ORDENES DE REACCION DE NUMERO ENTERO.

EL METODO DIFERENCIAL PARA REACCIONES SIMPLS GENERA UN MODELO LINEAL INDEPENDIEMENTE DEL ORDEN (ENTERO O FRACCIONARIO) DE LA REACCION, ESTO PERMITE EVALUAR LOS PARAMETROS DE LA REACCION.

EN LA PRACTICA LO QUE SE RECOMIENDA HACER ES UN DISEÑO DE EXPERIMENTOS ADECUADO, DE TAL MANERA QUE AUN, PARA REACCIONES COMPLEJAS SE PUEDA APLICAR LA TECNICA DIFERENCIAL. DEBIDO A QUE EL MODELO GENERADO SERA LINEAL Y PODRA APLICARSE LA TECNICA DE ESTIMACION DE PARAMETROS DE MINIMOS CUADRADOS PARA MODELOS LINEALES.

1.2.- ALGORITMO PARA EL AJUSTE DE DATOS EXPERIMENTALES POR EL METODO DE MINIMOS CUADRADOS.

CONSIDERE EL MODELO DE UNA RECTA EN UN ESPACIO DE  $m$  DIMENSIONES Y  $n$  PUNTOS  $i$  EN EL ESPACIO VECTORIAL, REPRESENTADO POR LA SIGUIENTE ECUACION :

$$Y(I) = \sum_{j=1}^M A_j X_{ji}$$

$j = 1, 2, 3, \dots, M$

EN DONDE :

$Y(I)$  = VALOR DE LA VARIABLE DEPENDIENTE PARA LA PARTIDA DE DATOS  $i$ .

$A(j)$  = ES EL COEFICIENTE DEL MODELO CORRESPONDIENTE A LA VARIA-

BLE INDEPENDIENTE X(J).

X(J,I) = ES EL VALOR (I)ESIMO DE LA VARIABLE INDEPENDIENTE (J) ESIMA EN LA PARTIDA DE DATOS (I).

M = NUMERO DE VARIABLES INDEPENDIENTES.

N = NUMERO DE PUNTOS EN EL ESPACIO (DATOS EXPERIMENTALES O PARTIDAS DE DATOS).

SI SE DISPONE DE DATOS EXPERIMENTALES DE :

Y VS X(X1,X2,...,XN), AL APLICAR LA TECNICA DE MINIMOS CUADRADOS SE OBTENDRIAN LOS VALORES DE A1,A2,...,AM DEL MODELO GENERAL.

SI LOS DATOS EXPERIMENTALES SE AJUSTAN A UN MODELO DE LA FORMA :

$$Y = A_1 + A_2X_2 + A_3X_3 + \dots + A_NX_N$$

SIGNIFICA QUE DENTRO DEL MODELO GENERAL X1 PARA CUALQUIER PARTIDA DE DATOS ES IGUAL A UNO.

AL APLICAR LOS CONCEPTOS DE MINIMOS CUADRADOS Y DERIVAR PARCIALMENTE, EL MODELO GENERALIZADO, CON RESPECTO A (AJ) SE OBTIENE EL SIGUIENTE SISTEMA DE M ECUACIONES :

$$\sum_{j=1}^M \left( A_j * \sum_{\lambda=1}^n (X_{j\lambda} * X_{k\lambda}) \right) = \sum_{\lambda=1}^n (Y_{\lambda} * X_{k\lambda})$$

$$K = 1, 2, 3, \dots, M$$

PARA K = 1 HASTA M

EN DONDE CADA VALOR DE K GENERA UNA ECUACION POR LO QUE EXISTIRAN (M) ECUACIONES CON (M) INCOGNITAS.

(A1,A2,.....,AM).

CUYOS COEFICIENTES SE PUEDEN CONOCER A TRAVES DE LAS N PARTIDAS DE Y(I); X(1,I); X(2,I);.....; X(M,I).

ESTE SISTEMA SE ECUACIONES LINEALES, PUEDE SER RESUELTO UTILI-

ZANDO EL ALGORITMO DE GAUSS-JORDAN.

1.2.1.- PROGRAMA EN BASIC PARA LA ESTIMACION DE PARAMETROS  
UTILIZANDO EL METODO DE MINIMOS CUADRADOS

1.3.- APLICACIONES (EJEMPLOS )

1.2.1.- Listado

```

LOAD MINIMO
JPRINT CHR$(9);"65N"

```

LIST

```

10 D# = CHR$(4): DEF FN D(X) = INT (X * D + 0.5) / D:D = 1000

20 IF IN = 2 GOTO 390
30 HOME : INVERSE : PRINT "AJUSTE DE POLINOMIOS-MINIMOS CUADRADO
S": NORMAL : PRINT
40 PRINT "ESTE PROGRAMA AJUSTA UN POLINOMIO DE LA FORMA Y=F(X) O
DE LA FORMA Y=F(X1,X2,X3,...,XN) ."
50 PRINT : PRINT "ALIMENTE LOS DATOS POR JUEGOS. ALIMENTE Y,X1,X
2,X3,...XN(PRIMER JUEGO),(SEGUNDO JUEGO)...ETC.": PRINT "SI LA F
UNCION ES MULTIVARIABLE,O, ALIMENTE POR PAR Y,X...SI DEPENDEDE UN
A SOLA VARIABLE.": PRINT "ALIMENTE DATOS EN ";
60 PRINT " 1100 DATA.....": PRINT : PRINT "
SEPRE CADA CANTIDAD,EN EL DATA,POR UNA COMA,": PRINT " SI YA A
LIMENTO LOS DATOS, TECLEE:": INVERSE : PRINT "CONT": NORMAL : PRI
NT : PRINT "DE OTRO MODO CREE LA LINEA 1100 DATA..."
70 PRINT "Y TECLEE: ";: INVERSE : PRINT "RUN": NORMAL : END
80 PRINT D$"SAVE MINIMO"
90 HOME : PRINT "SELECCIONE OPCION :": PRINT "1.-MODELO: Y = A1
X1 + A2 X2 + ...": PRINT "2.-MODELO: Y = A0 + A1 X1 + A2 X2 + ...
": INPUT "TECLEE NUMERO DE OPCION :";O1: IF O1 < 1 OR O1 > 2 GOTO
90
100 PRINT : INPUT "NUMERO DE VARIABLES INDEPENDIENTES ALI- MENTA
DAS COMO DATOS=";M: IF O1 = 2 THEN M = M + 1
110 DIM Y(109),U(20,109),NX$(20),XX$(19),YC(109)
120 PRINT : PRINT : INPUT "SE ADICIONAN OTRAS VARIABLES INDEPENS
DIENTES(SI O NO)?";A$: IF A$ = "SI" THEN INPUT "NUMERO DE VARIABLE
S ADICIONALES=";MN
130 ONERR GOTO 150
140 FOR I = 1 TO 500: READ Y(I):U(0,I) = Y(I): FOR J = 01 TO M:
READ U(J,I): NEXT J,I
150 N = I - 1: IF A$ = "NO" GOTO 180
160 HOME : PRINT "LAS VARIABLES ADICIONADAS SE HARAN IGUA-LES A
VARIABLES INDEPENDIENTES YA ALIMENTADAS COMO DATOS.": VTAB (22):
PRINT "(SI TECLEA 0, SE HARA IGUAL A LA V.DEP.)": VTAB (5)
165 PRINT : FOR J = 1 TO MN: PRINT "LA V.ADICIONAL ";: INVERSE :
PRINT J: NORMAL : PRINT " SE HARA IGUAL A LA VAR.INDEP.EXISTENT
E NUMERO:";: INPUT "":JJ: IF JJ = 0 AND O1 = 2 THEN JJ = - 1
170 FOR I = 1 TO N:U(M + J,I) = U(JJ + O1 - 1,I): NEXT I,J:M = M
+ MN
180 HOME : PRINT "A CONTINUACION TECLEARA NOMBRE DE VARIA BLES C
ON ";: INVERSE : PRINT "10 CARACTERES MAXIMO": NORMAL : PRINT : I
NPUT "NOMBRE VARIABLE DEPENDIENTE=";NY$:
190 ONERR GOTO 1080
200 FOR I = 01 TO M
210 PRINT : PRINT "NOMBRES DE VARIABLES INDEPENDIENTES :": PRINT
: PRINT "NOMBRE DE X";I - O1 + 1; " :": INPUT NX$(I)
220 NEXT I: IF ABS (Y(1)) > 5000 THEN D = 100
230 IF O1 = 1 GOTO 250
240 FOR I = 1 TO N:U(1,I) = 1: NEXT I:NX$(1) = ""
250 NN = N: GOSUB 790: IF OM < > 0 THEN N = N - 1
260 IF M - O1 < > 0 GOTO 320
270 PRINT : PRINT : INPUT "GRADO DEL POLINOMIO=";MM
280 FOR I = 1 TO N: FOR J = O1 + 1 TO MM + O1 - 1:U(J,I) = U(O1,

```

```

1) ^ (J + 1 - 01): NEXT J, I: M = MM + 01 - 1
200 XX$(1) = "2": XX$(2) = "3": XX$(3) = "4": XX$(4) = "5": XX$(5) =
"6": XX$(6) = "7": XX$(7) = "8": XX$(8) = "9": XX$(9) = "10": XX$(10)
= "11": XX$(11) = "12": XX$(12) = "13": XX$(13) = "14": XX$(14) = "15
": XX$(15) = "16": XX$(16) = "17": XX$(17) = "18"
300 XX$(18) = "19": XX$(19) = "20"
310 FOR J = 01 + 1 TO M: NX$(J) = NX$(01) + "" + XX$(J - 01): NE
XT J
320 IF IN = 3 GOTO 340
330 DIM A(M, M + 1)
340 FOR K = 1 TO M: FOR J = 1 TO M: FOR I = 1 TO N: A(K, J) = A(K,
J) + U(K, I) * U(J, I): NEXT I, J: FOR I = 1 TO N: A(K, M + 1) = A(K, M
+ 1) + Y(I) * U(K, I): NEXT I, K
350 NN = N: N = M
360 IN = 1
370 PRINT CHR$(13); CHR$(4)"BLOAD CHAIN, A520"
380 CALL 520"GAUSS-JORDAN"
390 N = NN: FOR I = 1 TO N
400 FOR J = 1 TO M
410 YC(I) = YC(I) + A(J, M + 1) * U(J, I)
420 NEXT J: YM = YM + Y(I): NEXT I: YM = YM / N
430 FOR I = 1 TO N: SU = SU + (Y(I) - YC(I)) ^ 2: VE = (YC(I) - YM
) ^ 2 + VE: VT = VT + (Y(I) - YM) ^ 2: NEXT I
440 PRINT : PRINT : INVERSE : PRINT "UTILIZARA IMPRESORA (SI O N
O)"; NORMAL : INPUT A$: HOME : IF A$ < > "SI" AND A$ < > "NO"
GOTO 440
450 IF A$ < > "SI" GOTO 470
460 PRINT CHR$(13); D$"PR#1"
470 PRINT : FOR I = 1 TO 30: PRINT "*": NEXT I: PRINT "*": PRIN
T "*" : TAB( 37); "*" : PRINT "*AJUSTE POLINOMIOS-MINIMOS CUADRADOS*"
I : PRINT "*" : TAB( 37); "*" : FOR I = 1 TO 37: PRINT "*" : NEXT I
480 PRINT : PRINT : IF MM < > 0 THEN PRINT "POLINOMIO DE GRADO
": MM
490 PRINT : PRINT : PRINT NY$; " = " : IF A(1, M + 1) < > 0 THEN
PRINT A(1, M + 1); " " : NX$(1);
500 IF M = 1 GOTO 590
510 K = 0: 00 = 01: IF 01 = 1 THEN 00 = 01 + 1
520 FOR J = 00 TO M
530 K = K + ABS (A(J, M + 1))
540 S$ = "+"
550 IF A(J, M + 1) < 0 THEN S$ = " - "
560 IF K = 0 THEN S$ = " "
570 IF A(J, M + 1) < > 0 THEN PRINT S$; " "; A(J, M + 1); " " : NX$(J
);
580 NEXT J
590 PRINT : PRINT : PRINT : PRINT "% DE ERROR EN AJUSTE : "
600 PRINT : PRINT NX$(01); TAB( 11); NY$; TAB( 21); NY$; TAB( 31);
"DE ERROR": PRINT TAB( 11); "REAL": TAB( 21); "CALC."
610 FOR I = 1 TO N: IF Y(I) = 0 GOTO 630
620 ER = (YC(I) - Y(I)) / Y(I) * 100: GOTO 640
630 ER = 0: IF YC(I) < > 0 THEN ER = (YC(I) - Y(I)) / YC(I) * 10
0
640 IF ABS (ER) > VM THEN VM = ABS (ER)
650 PRINT FN D(U(01, I)); TAB( 11); FN D(Y(I)); TAB( 21); FN D(Y
C(I)); TAB( 31); FN D(ER)
660 NEXT I
670 PRINT : PRINT "SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS="; SU
680 PRINT : PRINT "COEFICIENTE DE CORRELACION = " ; SQR (VE / VT)
690 PRINT : PRINT "% DE ERROR MAXIMO = " ; FN D(VM)

```

```

700 PRINT D4;"PRIO": PRINT : INPUT "DESEA GRAFICAR(SI O NO)?";AA$
A$: IF AA$ = "SI" GOTO 730
710 INPUT "DESEA AJUSTAR SUS DATOS A OTRO MODELO(SI O NO)?";A$:
IF A$ = "NO" THEN END
720 RUN 90
730 DIM X(N): FOR I = 1 TO N: X(I) = UC(01,I): NEXT I
740 PRINT D4;"OPEN DATOS": PRINT D4;"WRITE DATOS": PRINT N;",";2;"
";A$: PRINT N4;C(1): PRINT NY4;"REAL": PRINT NY4;"CALC.": FOR I
= 1 TO N: PRINT X(I): PRINT Y(I): PRINT YC(I): NEXT I: PRINT D4;"C
LOSE DATOS": PRINT CHR$(13);D4;"PRIO"
750 PRINT : PRINT : PRINT "SELECCIONE OPCION:"; PRINT "1.- GRAFI
CA PUNTOS AISLADOS"; PRINT "2.- GRAFICA LINEAS CONTINUAS"; INPUT
"NUMERO DE OPCION=";OP: IF A$ = "NO" GOTO 770
760 PRINT : PRINT "CORRIJA PAPEL IMPRESORA PARA GRAFICA.": PRINT
"PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA": GET A$: PRINT : A$ = "
S1"
770 IF OP = 1 THEN PRINT D4;"RUN GRAFICA/MINIMOS"
780 PRINT D4;"RUN PLOT/MINIMOS"
790 HOME : PRINT "SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UT
ILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL"
800 PRINT : PRINT "OPCIONES DE TRANSFORMACION :"; PRINT "1.- X =
X (NO SE TRANSFORMAN)"; PRINT "2.- X = LN(X)"; PRINT "3.- X = EX
F(X)"; PRINT "4.- X = X^N"; PRINT "5.- X = N^X"; PRINT "6.- X = S
EN(X)"; PRINT "7.- X = COS(X)"; PRINT "8.- X = TAN(X)"
810 PRINT "9.- X = DIV.FIN.DIV.(SOLO VAR.DEPEND.)"; PRINT "10.-
X = (X(1)+X(I))/2 (PROM.ARITM.)"; PRINT "11.- X = K1 + K2 * X ; (
K1,K2,CTES.)"; PRINT "12.- X=X*Y,0,X=X/Y (Y VARIABLE YA LEIDA)":
PRINT : IF OP = 1 THEN RETURN
820 INPUT "OPCION VARIABLE DEPENDIENTE=";OP
830 ON OP GOSUB 900,910,920,930,940,950,960,970,980,1010,1020,10
30
840 FOR I = 1 TO NN:AU = Y(I):BU = Y(I + 1):Y(I) = FN F(Y(I)):
NEXT I:OD = 1
850 FOR J = 01 TO M: GOSUB 790: PRINT "OPCION VARIABLE INDEPENDI
ENTE ";J - 01 + 1;" = "; INPUT OP: ON OP GOSUB 900,910,920,930,940
,950,960,970,980,1010,1020,1030
860 FOR I = 1 TO N:AU = U(J,I):BU = U(J,I + 1):U(J,I) = FN F(U
J,I): NEXT I,J
870 HOME : INPUT "DESEA RETRANSFORMAR SUS VARIABLES (SI O NO) ?"
;A$: IF A$ < > "SI" AND A$ < > "NO" GOTO 870
880 IF A$ = "NO" THEN RETURN
890 OD = 0: GOTO 790
900 DEF FN F(X) = X: RETURN
910 DEF FN F(X) = LOG(X): RETURN
920 DEF FN F(X) = EXP(X): RETURN
930 INPUT "POTENCIA N=";PT: DEF FN F(X) = X ^ PT: RETURN
940 INPUT "BASE N=";PT: DEF FN F(X) = PT ^ X: RETURN
950 DEF FN F(X) = SIN(X): RETURN
960 DEF FN F(X) = COS(X): RETURN
970 DEF FN F(X) = TAN(X): RETURN
980 HOME : PRINT "LA DIFERENCIA CALCULADA SE ALMACENARA COMO EL
NUEVO VALOR DE LA VARIABLE DEPENDIENTE.": PRINT : PRINT "SELECC
IONE OPCION:"; PRINT "DIFERENCIA FINITA DE LA VARIABLE INDEPENDIE
NTE:"
990 FOR I = 01 TO M: PRINT I - 01 + 1;"-";" X";I - 01 + 1;" CON
RESPECTO VARIABLE DEPENDIENTE": NEXT I
1000 INPUT "TECLEE NUMERO OPCION=";OH: DEF FN F(X) = (U(OH + 01
- 1,I + 1) - U(OH + 01 - 1,I)) / (Y(I + 1) - Y(I)):NN = N - 1: R
ETURN
1010 OH = 1: DEF FN F(X) = (AU + BU) / 2:NN = N - 1: RETURN

```

```

1020 INPUT "CTE. K1=";K1;K2: INPUT "CTE.K2=";K2: DEF FN F(X) = K2
      * X: RETURN
1030 PRINT "SELECCIONE SUBOPCION ": PRINT "1.- MULTIPLICA CON V
AR.DEPENDIENTE": PRINT "2.- DIVIDE ENTRE VAR.DEPENDIENTE": PRINT
"3.- MULTIPLICA CON VAR.INDEPENDIENTE": PRINT "4.- DIVIDE ENTRE V
AR.INDEPENDIENTE": INPUT "NUMERO DE SUBOPCION=";OP
1040 FN = 1: IF OP = 2 OR OP = 4 THEN FN = - 1
1050 ON OP GOTO 1060,1060,1065,1065
1060 DEF FN F(X) = X * Y(1) ^ FN: RETURN
1065 A# = "MULTIPLICA": IF OP = 4 THEN A# = "  DIVIDE"
1070 PRINT A#; INPUT " CON VARIABLE INDEPENDIENTE NUMERO?";OP:
DEF FN F(X) = X * Y(OP + 01 - 1,1) ^ FN: RETURN
1080 PRINT D#"PRIO": PRINT "ERROR EN SUS DATOS": GOTO 71
0
1100 DATA 3.2050,0.33,2.8630,0.8,1.9790,1.2,1.4590,1.5,0.93,2,0
.7690,2.25,0.5560,2.5,0.9390,3,-0.0850,3.5,-0.3670,4,-0.6170,4.5,
-0.8950,5,1,-1.0490,5.5,-1.262,6,-1.4050,6.7,-1.62,7,-1.8740,7.5,
-2.030,8,-2.1920,8.5,-2.2660,9,-2.3890,9.5

```

LOAD GAUSS-JORDAN  
LIST

```
4 IF IN < / 0 GOTO 30
5 DATA 1,1,1,2,2,5
8 HOME : PRINT " EN LINEA 5 EN UN DATA TYPEE"
9 PRINT "LOS COEFICIENTES DE CADA ECUACION": PRINT : PRINT
10 INPUT "NUMERO DE ECUACIONES =? ":N
20 DIM A(N,N + 1)
25 FOR I = 1 TO N
26 FOR J = 1 TO N + 1
28 READ A(I,J)
29 NEXT J,I
30 FOR I = 1 TO N
40 IF A(I,I) < / 0 GOTO 130
45 IF I = N GOTO 80
50 FOR J = I + 1 TO N
60 IF A(J,I) < / 0 GOTO 90
70 NEXT J
80 PRINT "MATRIZ SINGULAR": END
90 FOR K = 1 TO N + 1
100 Z = A(I,K):A(I,K) = A(J,K)
110 A(J,K) = Z
120 NEXT K
130 FOR J = N + 1 TO I STEP - 1
140 A(I,J) = A(I,J) / A(I,I)
150 NEXT J
160 FOR K = 1 TO N
170 IF K = 1 GOTO 210
180 FOR J = N + 1 TO I STEP - 1
190 A(K,J) = A(K,J) - A(K,I) * A(I,J)
200 NEXT J
210 NEXT K
220 NEXT I
221 DEF FN D(X) = INT (X * 100000 + 0.5) / 100000
225 HOME : PRINT "SOLUCION DEL SISTEMA ": PRINT : PRINT
230 FOR I = 1 TO N
240 PRINT "X(";I;")="; FN D(A(I,N + 1))
250 NEXT I
260 IF IN = 0 THEN END
270 IN = 2
280 PRINT CHR$( 4);"BLOAD CHAIN,A520"
290 CALL 520"MINIMO"
```



1.3.1.- UNA DISOLUCION CONTIENE UNA SUBSTANCIA (A) EN LA CONCENTRACION DE 1.6 GMOL/LITRO, POR OTRO LADO EXISTE UNA SUBSTANCIA (B) EN LA CONCENTRACION DE 1.0 GMOL/LITRO. SE MEZCLAN AMBAS DISOLUCIONES, EN CANTIDADES VOLUMETRICAS IGUALES Y SE MIDE LA CONCENTRACION DE LA SUBSTANCIA (A)  $\rightarrow$  \*CA\* A INTERVALOS REGULARES DE TIEMPO, OBTENIENDOSE LOS SIGUIENTES DATOS :

TIEMPO EN MINUTOS	CA EN GMOL/LT
00.00	100.80
00.50	100.67
01.00	100.60
01.50	100.563
02.00	100.543
03.00	100.527
04.00	100.522
05.00	100.520
10.00	100.520

CALCULESE LAS VELOCIDADES ESPECIFICAS DE REACCION, SUPONIENDOSE QUE LA REACCION ES REVERSIBLE DE 1ER. ORDEN EN AMBAS DIRECCIONES.

SOLUCION :

UTILIZANDO EL PROGRAMA PROPUESTO, SE OBTIENE LO SIGUIENTE :

ILoadPRINT CHR\$(9):"70N"

IRON MINIMO  
AJUSTE DE POLINOMIOS-MINIMOS CUADRADOS

ESTE PROGRAMA AJUSTA UN POLINOMIO DE LA FORMA  $Y=F(X)$  O DE LA FORMA  $Y=F(X_1, X_2, X_3, \dots, X_N)$ .

ALIMENTE LOS DATOS POR JUEGOS. ALIMENTE Y, X1, X2, X3, ... XN (PRIMER JUEGO), (SEGUNDO JUEGO) ... ETC. SI LA FUNCION ES MULTIVARIABLE, O, ALIMENTE POR PAR Y, X ... SI DEPENDEDE UNA SOLA VARIABLE.  
ALIMENTE DATOS EN 1100 DATA.....

SEPARE CADA CANTIDAD, EN EL DATA, POR UNA COMA. SI YA ALIMENTO LOS DATOS, TECLEE:  
CONT

DE OTRO MODO CREE LA LINEA 1100 DATA...  
Y TECLEE: RUN

JCONT  
SELECCIONE OPCION :  
1.- MODELO:  $Y = A_1 X_1 + A_2 X_2 + \dots$   
2.- MODELO:  $Y = A_0 + A_1 X_1 + A_2 X_2 + \dots$   
TECLEE NUMERO DE OPCION : 1

NUMERO DE VARIABLES INDEPENDIENTES ALI- MENTADAS COMO DATOS=1

SE ADICIONAN OTRAS VARIABLES INDEPENDIENTES (SI O NO)? SI  
NUMERO DE VARIABLES ADICIONALES=1  
LAS VARIABLES ADICIONADAS SE HARAN IGUA-LES A VARIABLES INDEPENDIENTES  
YA ALIMENTADAS COMO DATOS.  
(SI TECLEA 0, SE HARA IGUAL A LA V. DEP.)

LA V. ADICIONAL 1 SE HARA IGUAL A LA VAR. INDEP. EXISTENTE NUMERO: 1  
A CONTINUACION TECLEARA NOMBRE DE VARIABLES CON 10 CARACTERES MAXIMO

NOMBRE VARIABLE DEPENDIENTE=?RA

NOMBRES DE VARIABLES INDEPENDIENTES :

NOMBRE DE X1 : ?CA

NOMBRES DE VARIABLES INDEPENDIENTES :

NOMBRE DE X2 : ?(1.3-CA)

SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

OPCIONES DE TRANSFORMACION :  
1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)  
2.-  $X = \ln(X)$   
3.-  $X = \exp(X)$   
4.-  $X = X^N$   
5.-  $X = N^X$   
6.-  $X = \sin(X)$   
7.-  $X = \cos(X)$

- 8.-  $X = \text{TANG}(X)$
- 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR. DEPEND.)}$
- 10.-  $X = (X(1+1)+X(1))/2$  (PROM.ARITHM.)
- 11.-  $X = K1 + K2 * X$  ; (K1,K2,CTES.)
- 12.-  $X=X*Y, O, X=X/Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)

OPCION VARIABLE DEPENDIENTE=71

SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

OPCIONES DE TRANSFORMACION :

- 1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)
- 2.-  $X = \text{LN}(X)$
- 3.-  $X = \text{EXP}(X)$
- 4.-  $X = X^N$
- 5.-  $X = N^X$
- 6.-  $X = \text{SEN}(X)$
- 7.-  $X = \text{COS}(X)$
- 8.-  $X = \text{TANG}(X)$
- 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR. DEPEND.)}$
- 10.-  $X = (X(1+1)+X(1))/2$  (PROM.ARITHM.)
- 11.-  $X = K1 + K2 * X$  ; (K1,K2,CTES.)
- 12.-  $X=X*Y, O, X=X/Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)

OPCION VARIABLE INDEPENDIENTE 1=71

SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

OPCIONES DE TRANSFORMACION :

- 1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)
- 2.-  $X = \text{LN}(X)$
- 3.-  $X = \text{EXP}(X)$
- 4.-  $X = X^N$
- 5.-  $X = N^X$
- 6.-  $X = \text{SEN}(X)$
- 7.-  $X = \text{COS}(X)$
- 8.-  $X = \text{TANG}(X)$
- 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR. DEPEND.)}$
- 10.-  $X = (X(1+1)+X(1))/2$  (PROM.ARITHM.)
- 11.-  $X = K1 + K2 * X$  ; (K1,K2,CTES.)
- 12.-  $X=X*Y, O, X=X/Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)

OPCION VARIABLE INDEPENDIENTE 2=711

CTE. K1=1.3

CTE. K2=-1

DESEA RETRANSFORMAR SUS VARIABLES (SI O NO) ?S1

SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

OPCIONES DE TRANSFORMACION :

- 1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)
- 2.-  $X = \text{LN}(X)$
- 3.-  $X = \text{EXP}(X)$
- 4.-  $X = X^N$
- 5.-  $X = N^X$
- 6.-  $X = \text{SEN}(X)$
- 7.-  $X = \text{COS}(X)$
- 8.-  $X = \text{TANG}(X)$
- 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR. DEPEND.)}$
- 10.-  $X = (X(1+1)+X(1))/2$  (PROM.ARITHM.)

- 11.-  $X = k_1 + k_2 * X$  ; (K1,K2,CTES.)  
 12.-  $X = X * Y, O, X = X / Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)

OPCION VARIABLE DEPENDIENTE=?  
 LA DIFERENCIA CALCULADA SE ALMACENARA COMO EL NUEVO VALOR DE LA VARIABLE DEPENDIENTE.

SELECCIONE OPCION:

DIFERENCIA FINITA DE LA VARIABLE INDEPENDIENTE:

- 1.- X1 CON RESPECTO VARIABLE DEPENDIENTE  
 2.- X2 CON RESPECTO VARIABLE DEPENDIENTE

TECLEE NUMERO OPCION=1

SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

OPCIONES DE TRANSFORMACION :

- 1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)  
 2.-  $X = \text{LN}(X)$   
 3.-  $X = \text{EXP}(X)$   
 4.-  $X = X^N$   
 5.-  $X = N^X$   
 6.-  $X = \text{SEN}(X)$   
 7.-  $X = \text{COS}(X)$   
 8.-  $X = \text{TANG}(X)$   
 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR.DEPEND.)}$   
 10.-  $X = (X(1)+X(2))/2$  (PROM.ARITM.)  
 11.-  $X = k_1 + k_2 * X$  ; (K1,K2,CTES.)  
 12.-  $X = X * Y, O, X = X / Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)

OPCION VARIABLE INDEPENDIENTE 1=?1

SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

OPCIONES DE TRANSFORMACION :

- 1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)  
 2.-  $X = \text{LN}(X)$   
 3.-  $X = \text{EXP}(X)$   
 4.-  $X = X^N$   
 5.-  $X = N^X$   
 6.-  $X = \text{SEN}(X)$   
 7.-  $X = \text{COS}(X)$   
 8.-  $X = \text{TANG}(X)$   
 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR.DEPEND.)}$   
 10.-  $X = (X(1)+X(2))/2$  (PROM.ARITM.)  
 11.-  $X = k_1 + k_2 * X$  ; (K1,K2,CTES.)  
 12.-  $X = X * Y, O, X = X / Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)

OPCION VARIABLE INDEPENDIENTE 2=?1

DESEA RETRANSFORMAR SUS VARIABLES (SI O NO) ?1

SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

OPCIONES DE TRANSFORMACION :

- 1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)  
 2.-  $X = \text{LN}(X)$   
 3.-  $X = \text{EXP}(X)$   
 4.-  $X = X^N$   
 5.-  $X = N^X$   
 6.-  $X = \text{SEN}(X)$   
 7.-  $X = \text{COS}(X)$

- 8.-  $X = \text{TANG}(X)$   
 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR. DEPEND.)}$   
 10.-  $X = (X(1)+1+X(1))/2$  (PROM.ARITH.)  
 11.-  $X = K1 + K2 * X$  ; (K1,K2,CTES.)  
 12.-  $X=X*Y, O, X=X/Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)

OPCIÓN VARIABLE DEPENDIENTE=?11

CTE. K1=0

CTE. K2=-1

SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

OPCIONES DE TRANSFORMACION :

- 1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)  
 2.-  $X = \text{LN}(X)$   
 3.-  $X = \text{EXP}(X)$   
 4.-  $X = X^N$   
 5.-  $X = N^X$   
 6.-  $X = \text{SEN}(X)$   
 7.-  $X = \text{COS}(X)$   
 8.-  $X = \text{TANG}(X)$   
 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR. DEPEND.)}$   
 10.-  $X = (X(1)+1+X(1))/2$  (PROM.ARITH.)  
 11.-  $X = K1 + K2 * X$  ; (K1,K2,CTES.)  
 12.-  $X=X*Y, O, X=X/Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)

OPCIÓN VARIABLE INDEPENDIENTE 1=?1

SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

OPCIONES DE TRANSFORMACION :

- 1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)  
 2.-  $X = \text{LN}(X)$   
 3.-  $X = \text{EXP}(X)$   
 4.-  $X = X^N$   
 5.-  $X = N^X$   
 6.-  $X = \text{SEN}(X)$   
 7.-  $X = \text{COS}(X)$   
 8.-  $X = \text{TANG}(X)$   
 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR. DEPEND.)}$   
 10.-  $X = (X(1)+1+X(1))/2$  (PROM.ARITH.)  
 11.-  $X = K1 + K2 * X$  ; (K1,K2,CTES.)  
 12.-  $X=X*Y, O, X=X/Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)

OPCIÓN VARIABLE INDEPENDIENTE 2=?1

DESEA RETRANSFORMAR SUS VARIABLES (SI O NO) ?NO

\*\*\*\*\*  
 \*  
 AJUSTE POLINOMIOS-MINIMOS CUADRADOS\*  
 \*  
 \*\*\*\*\*

CA = .589601082 CA -.374808780 (1.3-CA)

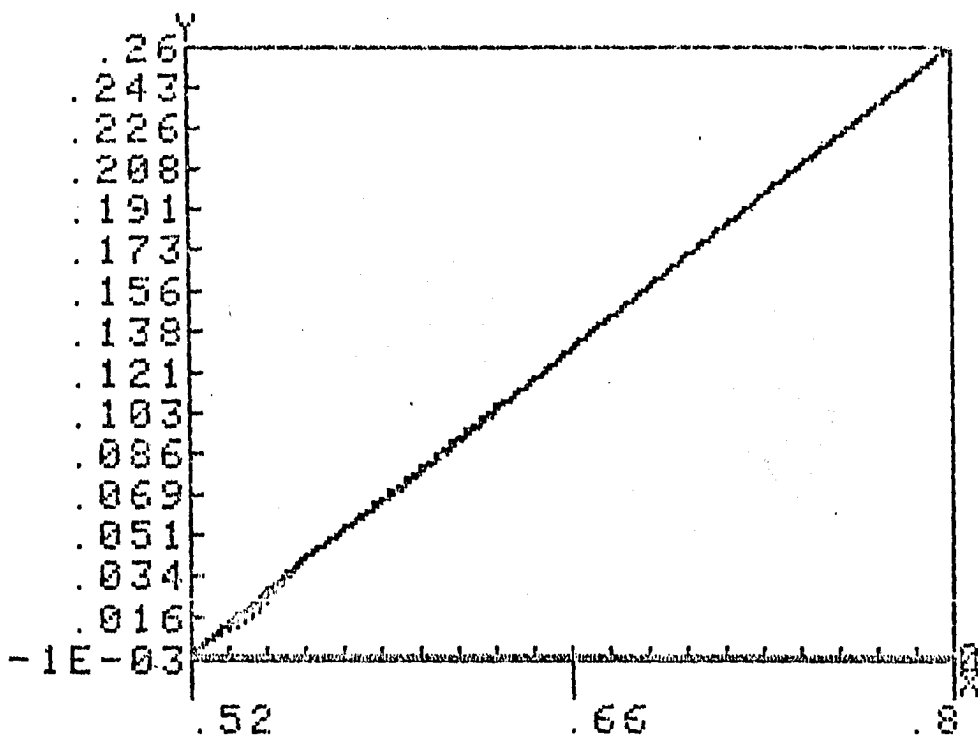
% DE ERROR EN AJUSTE :

	RA REAL	RA CALC.	%DE ERROR
.8	.20	.20	.187
.07	.14	.139	-1.73
.0	.074	.074	-0.007
.503	.04	.039	-2.58
.543	.016	.02	20.717
.527	5E-03	5E-03	0.398
.522	2E-03	1E-03	-67.072
.52	0	-1E-03	100

SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS=2.42430243E-05

COEFICIENTE DE CORRELACION = .999792778

% DE ERROR MAXIMO = 100



TAMA&O ESCALA X=.014      TAMA&O ESCALA Y=.0174471821  
 X = CA  
 Y1 = RAREAL(...)  
 Y2 = RACALC.( - )

1.3.2.- UNA SOLUCION DE DIAZOBENCENO SE DESCOMPONE EN FORMA IRREVERSIBLE DE ACUERDO A LA SIGUIENTE REACCION :



LA CINETICA ES DE PRIMER ORDEN, EN UN EXPERIMENTO A 50 GRADOS CENTIGRADOS LA CONCENTRACION INICIAL DE  $\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2\text{CL}$  FUE DE 10 G/LT. LIBERANDOSE LAS SIGUIENTES CANTIDADES DE  $\text{N}_2$ .

TIEMPO EN MINUTOS	$\text{N}_2$ LIBERADO EN $\text{CM}^3$
06.0	19.3
09.0	26.0
12.0	32.6
14.0	36.0
18.0	41.3
20.0	43.3
22.0	45.0
24.0	46.5
26.0	48.4
30.0	50.3

LA DESCOMPOSICION COMPLETA DEL DIAZOBENCENO LIBERA 58.3 CC DE  $\text{N}_2$ .

CALCULE EL VALOR APROXIMADO PARA LA  $k$  DE RAPIDEZ (VELOCIDAD).

SOLUCION :

UTILIZANDO EL PROGRAMA PROPUESTO SE OBTIENE LO SIGUIENTE :



\*\*\*\*\*  
 \*  
 \*AJUSTE POLINOMIOS-MINIMOS CUADRADOS\*  
 \*  
 \*\*\*\*\*

POLINOMIO DE GRADO 1

VEL = .0074663295 (1-X)

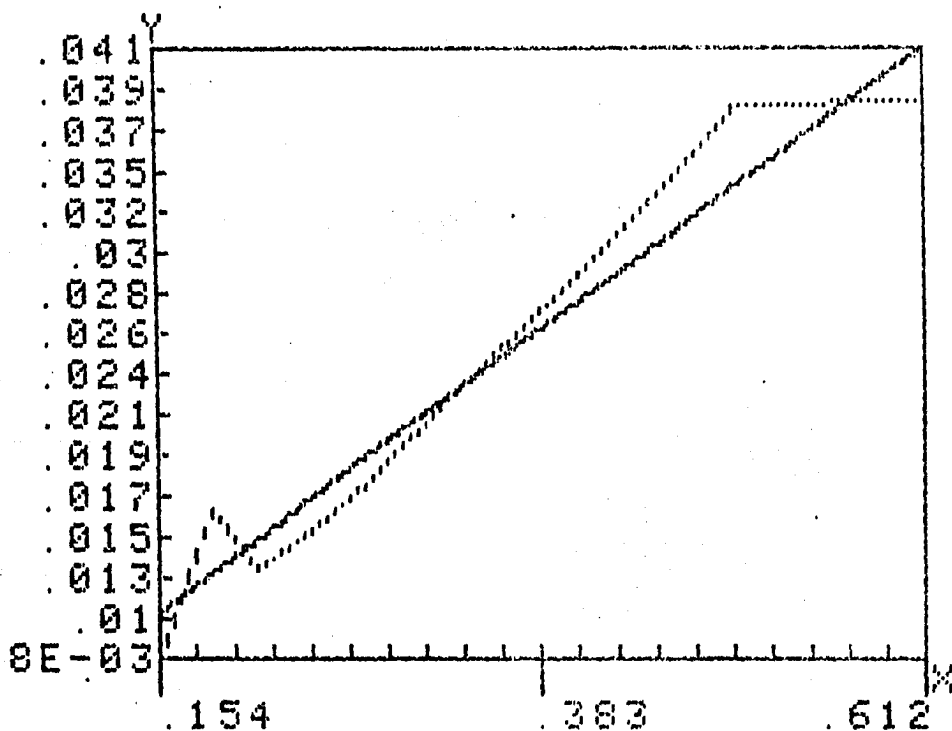
% DE ERROR EN AJUSTE :

(1-X)	VEL REAL	VEL CALC.	%DE ERROR
.612	.038	.041	7.722
.498	.033	.034	-11.039
.412	.029	.028	-4.717
.337	.023	.023	.101
.275	.017	.019	8.008
.243	.015	.016	12.354
.215	.013	.015	12.976
.136	.016	.013	-22.862
.154	8E-03	.01	27.25

SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS=5.47434877E-05

COEFICIENTE DE CORRELACION = .982140828

% DE ERROR MAXIMO = 27.25

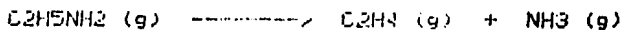


TAMAÑO ESCALA X=0.2239525  
 X = (1-X)

TAMAÑO ESCALA Y=2.20755055E-01

Y1 = VELREAL(....)  
 Y2 = VELCALC(....)

1.3.3.- LA DESCOMPOSICION DE ETILAMINA.



FUE ESTUDIADA A 500 GRADOS CENTIGRADOS.

EN BASE A LOS SIGUIENTES DATOS QUE FUERON OBTENIDOS DETERMINE :

A).- EL ORDEN DE REACCION.

B).- CUAL ES EL VALOR DE LA CONSTANTE DE VELOCIDAD ?

TIEMPO EN SEGUNDOS	PRESTION EN (MM Hg) !
10.0	155.0
60.0	160.0
130.0	179.0
200.0	189.0
1200.0	102.0
1500.0	105.0

SOLUCION :

UTILIZANDO EL PROGRAMA PROPUESTO, SE OBTIENE LO SIGUIENTE:

```
FEH
IPRINT CHR$(9):"650"
```

```
IFUN
AJUSTE DE POLINOMIOS-MINIMOS CUADRADOS
```

ESTE PROGRAMA AJUSTA UN POLINOMIO DE LA FORMA  $Y=F(X)$  O DE LA FORMA  $Y=F(X1, X2, X3, \dots, XN)$ .

ALIMENTE LOS DATOS POR JUEGOS. ALIMENTE Y, X1, X2, X3, ... XN (PRIMER JUEGO), (SEGUNDO JUEGO)... ETC. SI LA FUNCION ES MULTIVARIABLE. O, ALIMENTE POR PAR Y, X... SI DEPENDE DE UNA SOLA VARIABLE.  
ALIMENTE DATOS EN 1100 DATA.....

SEPARA CADA CANTIDAD, EN EL DATA, POR UNA COMA. SI YA ALIMENTO LOS DATOS. TECLEE:  
CONT

DE OTRO MODO CREE LA LINEA 1100 DATA...  
Y TECLEE: RUN

```
JCONT
SELECCIONE OPCION :
1.-MODELO:  $Y = A1 X1 + A2 X2 + \dots$ 
2.-MODELO:  $Y = A0 + A1 X1 + A2 X2 + \dots$ 
TECLEE NUMERO DE OPCION : 2
```

NUMERO DE VARIABLES INDEPENDIENTES ALIMENTADAS COMO DATOS=1

SE ADICIONAN OTRAS VARIABLES INDEPENDIENTES (SI O NO) Y EN  
A CONTINUACION TECLEARA NOMBRE DE VARIABLES CON 10 CARACTERES MAXIMO

NOMBRE VARIABLE DEPENDIENTE=?LN(X)

NOMBRES DE VARIABLES INDEPENDIENTES :

NOMBRE DE X1 : ?LN(1-X)  
SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

```
OPCIONES DE TRANSFORMACION :
1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMAN)
2.-  $X = LN(X)$ 
3.-  $X = EXP(X)$ 
4.-  $X = X^N$ 
5.-  $X = N^X$ 
6.-  $X = SEN(X)$ 
7.-  $X = COS(X)$ 
8.-  $X = TANG(X)$ 
9.-  $X = DIF.FIN.DIV.$  (SOLO VAR.DEPEND.)
10.-  $X = (X(1)+X(1))/2$  (PROM.ARITH.)
11.-  $X = K1 + K2 * X$  (K1, K2, CTES.)
12.-  $X = X * Y$ , O,  $X = X / Y$  (Y VARIABLE YA LEIDA)
```

OPCION VARIABLE DEPENDIENTE=?2  
SUS DATOS PUEDEN SER TRANSFORMADOS ANTES DE UTILIZARSE EN LA TECNICA REGRESIONAL

## OPCIONES DE TRANSFORMACION :

- 1.-  $X = X$  (NO SE TRANSFORMA)
- 2.-  $X = \text{LN}(X)$
- 3.-  $X = \text{EXP}(X)$
- 4.-  $X = X^2$
- 5.-  $X = \sqrt{X}$
- 6.-  $X = \text{SEN}(X)$
- 7.-  $X = \text{COS}(X)$
- 8.-  $X = \text{TANG}(X)$
- 9.-  $X = \text{DIF.FIN.DIV. (SOLO VAR. DEFEND.)}$
- 10.-  $X = (X(1)+X(2))/2$  (PROM.ARITM.)
- 11.-  $X = K1 + K2 * X$  (K1,K2.CTES.)
- 12.-  $X = X * Y$  (X=VARIABLE Y=LEIDA)

## OPCION VARIABLE INDEPENDIENTE 1-?

## AJUSTE POR MENOS-CUADRADOS

## POLINOMIO DE GRADO 1

$$\text{LN}(R) = -0.47200644 + .97237147 \text{LN}(1-X)$$

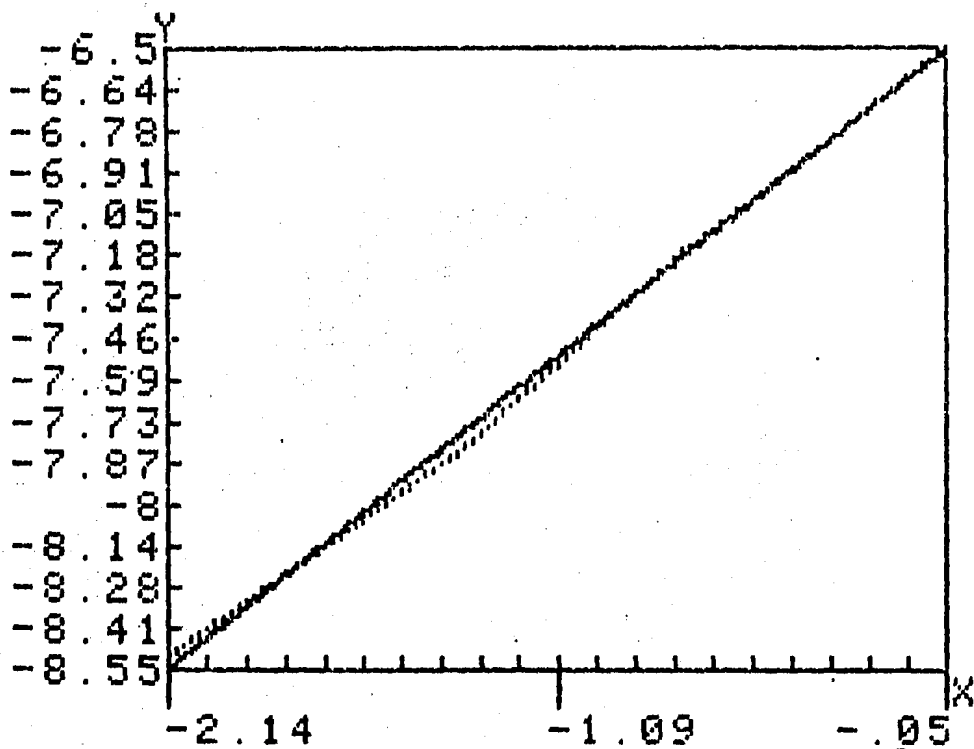
## % DE ERROR EN AJUSTE :

LN(1-X)	LN(R) REAL	LN(R) CALC.	% DE ERROR
-0.047	-6.902	-6.518	.231
-0.300	-6.706	-6.77	.032
-0.749	-7.195	-7.201	.009
-1.333	-7.824	-7.709	-.705
-2.135	-8.517	-8.549	.301

SUM. RESIDUAL DE CUADRADOS=4.3294329E-03

COEFICIENTE DE CORRELACION = .99183193

% DE ERROR MAXIMO = .705



TAMA&O ESCALA X=.104443096

TAMA&O ESCALA Y=.13e44e407

X = LN(1-X)

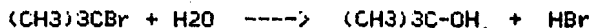
Y1 = LN(R)/REAL(...)

Y2 = LN(R)/CALC.(-)

1.3.4.- SE TIENEN DATOS A 25 GRADOS CENTIGRADOS PARA LA CONVERSION EN ALCOHOL TERBUTILICO DEL BROMURO DE TERBUTILO EN UNA SOLUCION QUE CONTIENE EL 90% DE ACETONA Y EL 10% DE AGUA. LA SIGUIENTE TABLA MUESTRA ESTOS DATOS :

TIEMPO EN HORAS	CONC (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CB <sub>r</sub> GMOL/L
0.0	10.1039
3.15	10.0896
4.10	10.0859
6.20	10.0776
8.20	10.0701
10.0	10.0639
13.5	10.0529
18.3	10.0353
26.0	10.027
30.8	10.0207

LA REACCION ES LA SIGUIENTE :



¿ CUÁL ES LA ECUACION DE RAPIDEZ, QUE ES CONSISTENTE CON ESTOS DATOS ?

SOLUCION :

UTILIZANDO EL PROGRAMA PROPUESTO, SE OBTIENE LO SIGUIENTE :

\*\*\*\*\*  
 \*  
 \*AJUSTE POLINOMIOS-MINIMOS CUADRADOS\*  
 \*  
 \*\*\*\*\*

VEL = -191.770508 + 1.9455343 CA+ 109.778711 CB

% DE ERROR EN AJUSTE :

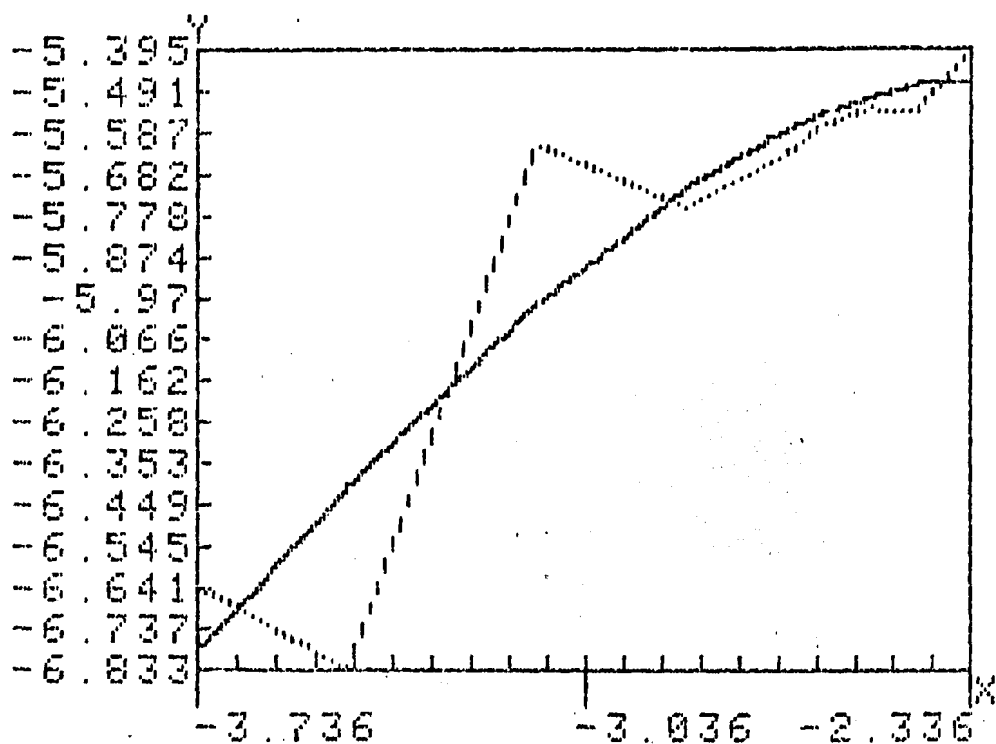
CA	VEL REAL	VEL CALC.	%DE ERROR
-2.380	-5.395	-5.473	1.448
-2.433	-5.548	-5.489	-1.058
-2.504	-5.533	-5.512	-.393
-2.600	-5.530	-5.557	-.511
-2.703	-5.671	-5.615	-.983
-2.84	-5.703	-5.718	-.753
-3.121	-5.606	-5.99	0.605
-3.409	-0.833	-0.419	-0.053
-3.730	-0.030	-0.799	2.400

SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS=.359480971

COEFICIENTE DE CORRELACION = .912535135

% DE ERROR MAXIMO = 0.805





TAMA&O ESCALA x=.0700173085  
 x = CA  
 Y1 = VELREAL(....)  
 Y2 = VELCALC.( - )

TAMA&O ESCALA y=.095854793

"HABLE AL CIELO Y NO ME OYO,  
YA QUE SUS PUERTAS ME CIERRA,  
DE MIS PASOS EN LA TIERRA  
RESPONDA EL CIELO, NO YO"

## MODELOS DE REACTORES QUIMICOS

### 2.- GENERALIDADES.

PARA CALCULAR LA CAPACIDAD REQUERIDA DE UN REACTOR EN EL CUAL SE LLEVE A CABO CIERTA REACCION, ASI COMO PARA CALCULAR LOS REQUERIMIENTOS DE INTERCAMBIO DE CALOR, ES NECESARIO DISPONER DEL MODELO MATEMATICO QUE REPRESENTA A DICHO REACTOR. TAL MODELO SERA FORMULADO POR LA APLICACION DE BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA LOS CUALES ESTAN REPRESENTADOS POR LA ECUACION GENERAL DE BALANCES :

$$\text{ENTRADA} + \text{GENERACION} = \text{SALIDA} + \text{ACUMULACION}$$

EL TERMINO ENTRADA ESTARA CONSTITUIDO POR LAS CORRIENTES DE ALIMENTACION AL REACTOR, ASI COMO EL INTERCAMBIO DE CALOR CON LOS ALREDEDORES PARA EL CASO DE BALANCE DE ENERGIA.

EL TERMINO SALIDA ESTARA CONSTITUIDO POR LAS CORRIENTES DE DESCARGA DEL REACTOR.

EL TERMINO GENERACION REPRESENTARA LAS MOLES TRANSFORMADAS, EL CALOR ABSORVIDO O LIBERADO POR LA REACCION AL TRANSFORMARSE CIERTO NUMERO DE MOLES DE REACTIVOS A PRODUCTOS.

EL TERMINO ACUMULACION SERA LA RETENCION O DISMINUCION DE MATERIA O ENERGIA DENTRO DEL REACTOR.

EN EL TERMINO GENERACION ESTARA INVOLUCRADA LA RAPIDEZ DE REACCION, OBJETO POR EL CUAL, ES NECESARIO CONOCER EL MODELO MATEMATICO QUE LO REPRESENTA, TAL Y COMO SE MENCIONA EN EL CAPITULO ANTERIOR.

#### 2.1.- CLASIFICACION DE REACTORES QUIMICOS.

EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR DEPENDERA DE LA FORMA DE OPERACION Y DE LA GEOMETRIA DEL REACTOR.

EL MODELO MATEMATICO QUE REPRESENTA A UN REACTOR QUIMICO, DEPENDERA DEL TIPO DE REACTOR.

CON EL OBJETO DE ANALIZAR LOS REACTORES QUIMICOS DE USO INDUSTRIAL, SE DA LA SIGUIENTE CLASIFICACION :

- 1.- REACTOR INTERMITENTE DE TANQUE AGITADO.
- 2.- REACTOR SEMI-INTERMITENTE DE TANQUE AGITADO.
- 3.- REACTOR CONTINUO DE TANQUE AGITADO.
- 4.- REACTOR TUBULAR CONTINUO.

LOS REACTORES QUIMICOS DE TANQUE AGITADO CONTINUOS, SEMI-INTERMITENTES O INTERMITENTES, ESTAN CONSTITUIDOS POR UN RECIPIENTE CILINDRICO DE FONDO TORISFERICO CON UN SISTEMA DE AGITACION EL CUAL TRATA DE APROXIMAR EL SISTEMA A UN SISTEMA DE MEZCLADO IDEAL, EN EL CUAL NO EXISTEN GRADIENTES INTERNOS DE CONCENTRACION Y TEMPERATURA.

EL REACTOR TUBULAR, CONSISTE EN UN TUBO O CONJUNTO DE TUBOS A TRAVES DEL CUAL (O LOS CUALES), FLUYE LA MEZCLA REACCIONANTE. ESTE TIPO DE REACTORES PRESENTAN UNA MAYOR CAPACIDAD INTERCAMBIO DE CALOR CON LOS ALREDEDORES, QUE LOS REACTORES DE TANQUE AGITADO.

## 2.2 MODELOS MATEMATICOS DE REACTORES QUIMICOS.

EN LA FORMULACION DE MODELOS MATEMATICOS DE REACTORES, EXISTEN DOS MODELOS FISICOS QUE REPRESENTAN EL COMPORTAMIENTO DE DICHOS REACTORES, TALES MODELOS SON :

### 1.- MODELOS DE PARAMETROS DISTRIBUIDOS :

SE CONSIDERA QUE EXISTEN GRADIENTES INTERNOS DE CONCENTRACION Y TEMPERATURA DENTRO DEL REACTOR. SE PUEDE PRESENTAR ESTE CASO POR DEFICIENCIAS DE MEZCLADO O BIEN, POR LAS CARACTERISTICAS GEOMETRICAS DEL REACTOR.

LO ANTERIOR IMPLICA QUE EL FUNCIONAMIENTO DEL REACTOR ESTA REPRESENTADO POR VALORES DIVERSOS DE RAPIDEZ DE REACCION, ESTO IMPIDE APLICAR BALANCES INTEGRALES DE MATERIA Y ENERGIA A TODO EL REACTOR. EL REACTOR REPRESENTATIVO DE ESTE MODELO, ES EL REACTOR TUBULAR.

2.- MODELOS DE PARAMETROS NO DISTRIBUIDOS :

SE CONSIDERA QUE NO EXISTEN GRADIENTES INTERNOS DE CONCENTRACION Y TEMPERATURA DENTRO DEL REACTOR. ESTO IMPLICA QUE EL MEZCLADO ES PERFECTO Y QUE TODO EL REACTOR, ESTA REPRESENTADO POR UNA SOLA RAPIDEZ DE REACCION, POR LO CUAL, PODRAN APLICARSE BALANCES INTEGRALES DE MATERIA Y ENERGIA.

LOS REACTORES REPRESENTATIVOS DE ESTE MODELO, SON LOS REACTORES DE TANQUE AGITADO. EN REALIDAD, ESTOS REACTORES SE DESVIARAN, DE ESTE MODELO (IDEAL), PERO AL DISEÑARLOS SE ACEPTA QUE FUNCIONAN CON UN MEZCLADO PERFECTO; POSTERIORMENTE SE REALIZA UN ANALISIS DE MEZCLADO CON EL CUAL SE CORRIGE EL MODELO (IDEAL) Y SE AJUSTA A LA REALIDAD.

2.3.- MODELOS MATEMATICOS DE REACTORES QUIMICOS.

AL APLICAR BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA A CADA REACTOR, DE ACUERDO CON LAS CONTRIBUCIONES DE ENTRADA(S), SALIDA(S), GENERACION Y ACUMULACION DE ACUERDO AL TIPO DE MODELO FISICO (PARAMETROS DISTRIBUIDOS O PARAMETROS NO DISTRIBUIDOS), SE FORMULARON LAS ECUACIONES CARACTERISTICAS DE CADA REACTOR.

2.3.1.- REACTOR INTERMITENTE DE TANQUE AGITADO.



Modelo de Parametro  
No Distribuido

\*\*\* ECUACION DE BALANCE DE MATERIA \*\*\*

GENERACION = ACUMULACION

GENERACION =  $-R \cdot V = f(k, \text{ORDEN DE REACCION Y CONCENTRACION})$ .

$$\text{ACUMULACION} = d(C*V)/dT$$

POR LO TANTO SUSTITUYENDO LO ANTERIOR SE OBTIENE :

$$-R*V = d(C*V)/dT$$

$$\text{SI } V = \text{CONSTANTE}$$

$$-R = dC/dT$$

PARA TIEMPO  $t = 0$  ;  $C = \text{CONCENTRACION} = C_0$  (INICIAL)

\*\*\* BALANCE DE ENERGIA \*\*\*

$$\text{GENERACION} = \text{ACUMULACION}$$

$$\text{GENERACION} = - R*V* \Delta H_r$$

$$\text{ACUMULACION} = d(\rho *V*E_1)/dT$$

SI LA MEZCLA REACCIONANTE ES LIQUIDA ENTONCES EL  $C_v$  DE LA MEZCLA ES APROXIMADAMENTE IGUAL AL  $C_p$  DE MEZCLA POR LO QUE  $\Delta E_1 = \Delta H$ .

POR LO TANTO :

$$-R*V* \Delta H_r = d(\rho_m*V*H')/dT$$

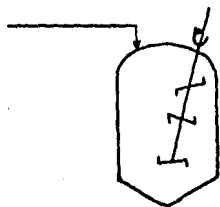
DONDE :

$H'$  ---> ENTALPIA UNITARIA (MOLAR O POR UNIDAD DE MASA)

$V$  ---> VOLUMEN (EN UNIDADES CONSISTENTES)

EN TIEMPO =  $t$  --->  $H' = H'_0$

2.3.2.- REACTOR SEMI-INTERMITENTE DE TANQUE AGITADO :



Modelo de Parametros  
No Distribuidos.

CASO 1).- ADICION DE REACTIVO :

\*\*\* ECUACION DE BALANCE DE MATERIA \*\*\*

ENTRADA + GENERACION = ACUMULACION

$$\text{ENTRADA} = Q_f \cdot C_f$$

$$\text{GENERACION} = -R \cdot V$$

$$\text{ACUMULACION} = d(C \cdot V) / dt$$

SUSTITUYENDO SE OBTIENE :

$$Q_f \cdot C_f - R \cdot V = d(C \cdot V) / dt$$

$$\text{EN TIEMPO} = 0 \rightarrow C = C_0$$

\*\*\* BALANCE DE ENERGIA \*\*\*

$$\text{ENTRADA} = Q_f \cdot H'f$$

$$\text{GENERACION} = -R \cdot \Delta H_r \cdot V$$

$$\text{ACUMULACION} = d(\rho_w \cdot V \cdot H') / dt$$

SUSTITUYENDO SE OBTIENE :

$$Q_f \cdot H'f - R \cdot \Delta H_r \cdot V = d(\rho_w \cdot V \cdot H') / dt$$

$$\text{EN TIEMPO} = 0 \rightarrow H' = H'_0$$

CASO 2).- DESCARGA DE PRODUCTOS.



Modelo de Parametros No Distribuidos.

\*\*\* BALANCE DE MATERIA \*\*\*

$$\text{GENERACION} = \text{SALIDA} + \text{ACUMULACION}$$

$$\text{GENERACION} = -R \cdot V$$

$$\text{SALIDA} = Q \cdot C$$

$$\text{ACUMULACION} = d(C \cdot V) / dt$$

SUSTITUYENDO OBTENEMOS :

$$-R \cdot V = d(C \cdot V) / dt + Q \cdot C$$

EN TIEMPO =  $\theta$   $\rightarrow$   $C = C_0$

\*\*\* BALANCE DE ENERGIA \*\*\*

$$\text{GENERACION} = -R \cdot \Delta H_r \cdot V$$

$$\text{SALIDA} = Q \cdot H_c$$

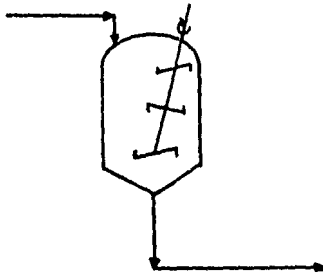
$$\text{ACUMULACION} = d(\rho \cdot V \cdot H_c) / dt$$

SUSTITUYENDO SE OBTIENE :

$$-R \cdot \Delta H_r \cdot V = Q \cdot H' + d(A_m \cdot V \cdot H')/dt$$

EN TIEMPO = 0  $\rightarrow H' = H'_0$

2.3.3.- REACTOR CONTINUO DE TANQUE AGITADO.



Modelo de Parámetros  
No Distribuidos.

\*\*\* ECUACION DE BALANCE DE MATERIA \*\*\*

ENTRADA + GENERACION = SALIDA

ENTRADA =  $Q \cdot C_0$

SALIDA =  $Q \cdot C$

GENERACION =  $R \cdot V$

SUSTITUYENDO SE OBTIENE :

$$Q \cdot C_0 - R \cdot V = Q \cdot C$$

$$Q \cdot (C_0 - C) = R \cdot V$$

$$C_0 - C = V \cdot R / Q$$

SI SE DEFINE EL TERMINO :  $V/Q = \theta$

DONDE  $\theta$  ES EL TIEMPO DE RESIDENCIA; TIEMPO QUE PERMENECE LA MEZCLA REACCIONANTE DENTRO DEL REACTOR. SE PUEDE EXPRESAR EL BALANCE DE MATERIA DE LA SIGUIENTE MANERA :



$$C_0 - C = \theta R$$

$$- \Delta C = \theta R$$

\*\*\* BALANCE DE ENERGIA \*\*\*

$$\text{ENTRADA} = Q * \rho_0 * C_{p0} * (T_0 - T_r) + q$$

$$\text{SALIDA} = Q * \rho * C_p * (T - T_r)$$

DONDE  $T_r$  = TEMPERATURA DE REFERENCIA.

$$\text{GENERACION} = -R * V * \Delta H_r$$

SUBSTITUYENDO :

$$Q * C_{p0} * (T_0 - T_r) + q - V * R * \Delta H_r \Big|_{T_r} = Q * \rho * C_p * (T - T_r)$$

DIVIDIENDO TODA LA ECUACION ENTRE  $\langle Q \rangle$  SE OBTIENE LA ECUACION EN FUNCION DEL TIEMPO DE RESIDENCIA :

$$\rho_0 * C_{p0} * (T_0 - T_r) + q/Q - \theta * R * \Delta H_r = \rho * C_p * (T - T_r)$$

SI EL TERMINO  $q/Q = q_v =$  FLUJO DE CALOR VOLUMETRICO.

Y SUBSTITUYENDO EN LA ECUACION ANTERIOR SE OBTIENE :

$$\rho_0 * C_{p0} * (T_0 - T_r) - \rho * C_p * (T - T_r) + q_v = \theta * R * \Delta H_r \Big|_{T_r}$$

SI LA DENSIDAD ( $\rho$ ) Y EL  $C_p$  SON CONSTANTES =>

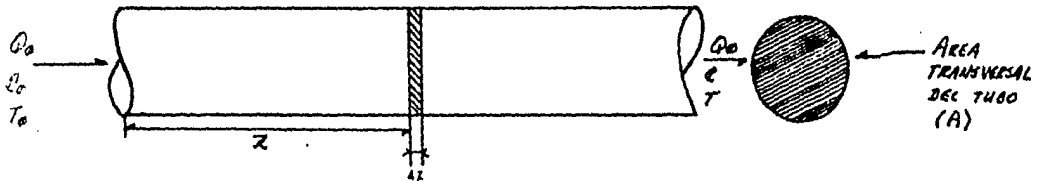
$$\rho_0 = \rho \quad \text{Y} \quad C_{p0} = C_p$$

LA ECUACION GENERAL DE BALANCE DE ENERGIA CUANDO LA DENSIDAD Y EL  $C_p$  SON CONSTANTES ES LA SIGUIENTE :

$$\rho * C_p * (T_0 - T) + q_v = \theta * R * \Delta H_r \Big|_{T_r}$$

$$T_0 - T = (\theta * R * \Delta H_r \Big|_{T_r} - q_v) / \rho * C_p$$

2.3.4. - REACTOR TUBULAR CONTINUO.



Modelo de Parametros Distribuidos

\*\*\* BALANCE DE MATERIA \*\*\*

$$\text{ENTRADA} = Q_0 C|_z$$

$$\text{GENERACION} = -R_A \Delta z$$

$$\text{SALIDA} = Q_0 C|_{z+\Delta z}$$

POR LO TANTO SUSTITUYENDO SE OBTIENE :

$$Q_0 C|_z - R_A \Delta z = Q_0 C|_{z+\Delta z}$$

SI LA CONCENTRACION Y LA TEMPERATURA NO VARIAN EN EL SEGMENTO DE VOLUMEN SELECCIONADO. IMPLICA QUE LA RAPIDEZ DE REACCION ES LA MISMA EN TODO EL SEGMENTO POR LO TANTO LA EXPRESION SERA :

$$-R_A \Delta z = Q_0 C|_{z+\Delta z} - Q_0 C|_z$$

DIVIDIENDO TODO ENTRE  $\Delta z$  Y TOMANDO EL LIMITE  $\Delta z \rightarrow 0$  LA EXPRESION SE TRANSFORMA EN :

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \left( -R_A = Q_0 C|_{z+\Delta z} - Q_0 C|_z / \Delta z \right)$$

ENTONCES

$$-R_A = dQ_0 C / dz$$

EN  $Z = 0 \rightarrow C = C_0$

2.4.- POSIBLES TECNICAS NUMERICAS.

EN FUNCION DE LOS DIFERENTES TIPOS DE ECUACIONES, SURGIDAS DE CADA TIPO DE REACTOR, SE ANALIZARON LAS POSIBLES TECNICAS NUMERICAS UTILIZABLES. EN LA SIGUIENTE TABLA SE PRESENTAN LAS CONCLUSIONES :

TIPO DE REACTOR	TIPOS DE ECUACIONES	POSIBLES TECNICAS NUMERICAS
TA INTERMITENTE	DIFERENCIALES	EULER MODIFICADO, EULER, RUNGEKUTTA
TA SEMIINTERMITENTE	ORDINARIAS	3ER Y 4TO ORDEN, METODOS PREDICTO- RES-CORRECTORES.
TA CONTINUO	ALGEBRAICAS LINEALES	ELIMINACION GAUSIA- NA, GAUSS-JORDAN, MAXIMO ELEMENTO PIVOTE
	ALGEBRAICAS NO LINEALES	NEWTON-RAPHSON, SUBSTITUCION DI- RECTA O BROYDEN.
REACTOR TUBULAR	DIFERENCIALES ORDINARIAS	EULER MODIFICADO, EULER, RUNGEKUTTA 3ER Y 4TO ORDEN METODOS PREDICTO- RES-CORRECTORES.

2.5.- TECNICAS NUMERICAS PROPUESTAS.

DESPUES DE ANALIZAR LAS DIFERENTES TECNICAS NUMERICAS POSIBLES, SE SELECCIONARON, POR SU FACILIDAD DE CALCULO, RAPIDEZ, ESTABILIDAD Y APROXIMACION A RESULTADOS LAS SIGUIENTES TECNICAS :

TIPO DE ECUACION	TECNICA PROPUESTA
SISTEMAS DE EC. LINEALES	GAUSS-JORDAN
SIST. DE EC. NO LINEALES	NEWTON-RAPHSON Y SUS TITUCION DIRECTA
DIFERENCIALES ORDINARIAS	RUNGE-KUTTA 4TO. ORDEN
COMO APOYO A EC. LINEALES Y NO LINEALES	SE PROPONEN METODOS GRA- FICOS

2.6.- ELABORACION DE PROGRAMAS.

A CONTINUACION SE PRESENTAN LOS PROGRAMAS DE LAS 4 TECNICAS PROPUESTAS; LOS PROGRAMAS FUERON UTILIZADOS EN LA RESOLUCION DE DIFERENTES PROBLEMAS ALGUNOS DE LOS CUALES SE PRESENTAN COMO EJEMPLOS EN LA SECCION DE APLICACION.

2.6.1.- LISTADO DEL PROGRAMA DE LA TECNICA DE GAUSS-JORDAN.

2.6.2.- LISTADO DEL PROGRAMA DE LA TECNICA DE NEWTON-RAPHSON, COMBINADO CON LA TECNICA DE SUSTITUCION DIRECTA.

2.6.3.- LISTADO DEL PROGRAMA DE LA TECNICA DE RUNGE-KUTTA DE 4TO. ORDEN PARA VARIAS ECUACIONES.

2.6.4.- LISTADO DEL PROGRAMA DE GRAFICACION.

2.7.- A P L I C A C I O N E S

```
4 IF IN < > 0 GOTO 30
5 DATA 1.488e,0,0.488e,-1,1,.488e,0,.488e,0,-1, 1.488e,.488e
8 HOME : PRINT " EN LINEA 5 EN UN DATA TIPEE"
9 PRINT "LOS COEFICIENTES DE CADA ECUACION": PRINT : PRINT
10 INPUT "NUMERO DE ECUACIONES =? ";N
20 DIM A(N,N + 1)
25 FOR I = 1 TO N
26 FOR J = 1 TO N + 1
28 READ A(I,J)
29 NEXT J,I
30 FOR I = 1 TO N
40 IF A(I,I) < > 0 GOTO 130
45 IF I = N GOTO 80
50 FOR J = I + 1 TO N
60 IF A(J,I) < > 0 GOTO 90
70 NEXT J
80 PRINT "MATRIZ SINGULAR": END
90 FOR K = I TO N + 1
100 Z = A(I,K):A(I,K) = A(J,K)
110 A(J,K) = Z
120 NEXT K
130 FOR J = N + 1 TO I STEP - 1
140 A(I,J) = A(I,J) / A(I,I)
150 NEXT J
160 FOR K = 1 TO N
170 IF K = I GOTO 210
180 FOR J = N + 1 TO I STEP - 1
190 A(K,J) = A(K,J) - A(K,I) * A(I,J)
200 NEXT J
210 NEXT K
220 NEXT I
221 DEF FN D(X) = INT (X * 100000 + 0.5) / 100000
225 HOME : PRINT "SOLUCION DEL SISTEMA :": PRINT : PRINT
230 FOR I = 1 TO N
240 PRINT "X( ";I; ")="; FN D(A(I,N + 1))
250 NEXT I
260 IF IN = 0 THEN END
270 IN = 2
280 PRINT CHR$( 4);"BLOAD CHAIN,4520"
290 CALL 520"MINIMO"
```

LOAD BALNOLI  
LIST

```

5 DIM T$(3),K%(3):T$(1) = "T1":T$(2) = "T2":T$(3) = "T3":D$ = C
HR$(4): PRINT D$"OPEN FUNCION"
10 HOME : INVERSE : PRINT "RESOLUCION DE UN SISTEMA DE N ECUACIO
NES": NORMAL : INVERSE : HTAB (9): PRINT "ALGEBRAICAS NO LINEALES
": NORMAL : PRINT : PRINT "SELECCIONE OPCION": PRINT "1.-NEWTON-
RAPHSON": PRINT "2.-SUSTITUCION DIRECTA-NEWTON RAPHSON"
20 PRINT : INPUT "NUMERO DE OPCION=":OP$: IF VAL (OP$) < 1 OR
VAL (OP$) > 2 GOTO 10
30 ON VAL (OP$) GOTO 100,1000
100 HOME : PRINT " *****NERTON-RAPHSON*****": PRINT
: PRINT "RESOLUCION DE UN SISTEMA DE N ECUACIONES": PRINT : INPUT
"NUMERO DE ECUACIONES A RESOLVER=":N: DIM B$(N,N),AA$(N): IF OP$
= "1" THEN DIM A$(N)
110 PRINT : PRINT "RESOLVERA ECUACION(ES) DE LA FORMA": FOR I =
1 TO N: PRINT "F";I;" = ":" 0 ":" : NEXT I: PRINT "DEPENDIENTE(3, 7
E X(1))": IF N > 1 THEN FOR I = 2 TO N: PRINT " , X(1):I:")": NE
AT I
120 GOSUB 1700: PRINT : PRINT : PRINT "TECLEE LA(S) FUNCION(ES)
RESPECTIVAS(S)": PRINT : FOR I = 1 TO N: PRINT "F";I;" = ":" : INPU
T "":A$(I): PRINT : NEXT I: IF OP$ = "1" THEN NN = N: GOSUB 1500
130 PRINT : PRINT "A CONTINUACION TECLEARA LAS DERIVADAS DE CADA
FUNCION CON RESPECTO A CADA VARIABLE DEPENDIENTE": FOR I = 1
TO N: PRINT : FOR J = 1 TO N: PRINT "DERIVADA DE:";A$(I): PRINT
"RESPECTO X(1):J:")":":": INPUT "":B$(I,J): NEXT J,I
140 PRINT D$"DELETE FUNCION": PRINT D$"OPEN FUNCION": PRINT D$"W
RITE FUNCION": FOR I = 1 TO N: PRINT 150 + I:"A(1):I:",":N + 1:")"
:"-(";A$(I):")": NEXT I: FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: PRINT 2
00 + I * 10 + J:"A(1):I:",":J:")":B$(I,J): NEXT J,I: IF OP$ = "2"
THEN RETURN
141 PRINT "148N=":N:" : DIMA(N,N+1),X(N),K%(3):K%(1) = "X(1)":K%(
2) = "X(2)":K%(3) = "X(3)":OP$ = STR$(OP$): PRINT "RUN148":
PRINT D$"CLOSEFUNCION": PRINT D$"EAEFCUNCION": END
149 HOME : PRINT "VALORES SUPUESTOS DE X S": FOR I = 1 TO N + 1
: PRINT : PRINT "X(1):I:")": INPUT "":X(I): NEXT I: GOSUB 1600
151 A(1,3) = ((824000 * ( EXP ( - 13700 / X(3))) * (.8 - X(1) -
X(2)) * (.2 - X(1) - X(2)) * T1 / .85) - X(1) + 2 * X(2) * X(1) -
((X(2) ^ 2) * X(1)))
152 A(2,3) = (40.8 * ( EXP ( - 3400 / X(3))) * (.8 - X(1) - X(2))
* (.2 - X(1) - X(2)) * T1 / .85) - X(1) + (2 * (X(2) ^ 2)) - (X(
2) ^ 3))
211 A(1,1) = (824000 * ( EXP ( - 13700 / X(3))) * T1 / .85) * ((.
8 - X(1) - X(2)) * (- 1) + (.2 - X(1) - X(2)) * (- 1)) - 1 + 2
* X(2) - (X(2) ^ 2)
212 A(1,2) = (824000 * ( EXP ( - 13700 / X(3))) * T1 / .85) * ((.
8 - X(1) - X(2)) * (- 1) + (.2 - X(1) - X(2)) * (- 1)) + 2 * X(
1) - 2 * X(2) * X(1)
221 A(2,1) = (40.8 * ( EXP ( - 3400 / X(3))) * T1 / .85) * ((.8 -
X(1) - X(2)) * (- 1) + (.2 - X(1) - X(2)) * (- 1)) - 1
222 A(2,2) = (40.8 * ( EXP ( - 3400 / X(3))) * T1 / .85) * ((.8 -
X(1) - X(2)) * (- 1) + (.2 - X(1) - X(2)) * (- 1)) + 4 * (X(2)
- (3 * (X(2) ^ 2))
500 FOR I = 1 TO N: FOR K = I TO N: IF A(K,I) = 0 THEN NEXT K:
PRINT "MATRIZ SINGULAR": END
510 IF K = I GOTO 530
520 FOR J = I TO N + 1:AA = A(I,J):A(I,J) = A(K,J):A(K,J) = AA:
PRINT AA: NEXT J
530 FOR J = N + 1 TO I STEP - 1:A(I,J) = A(I,J) / A(I,I): NEXT

```

```

540 FOR K = 1 TO N: IF K < 2 THEN FOR J = N + 1 TO I STEP -
1:A(K,J) = A(K,J) - A(K,I) * A(I,J): NEXT J
550 NEXT K: I: ER = 0: FOR I = 1 TO N: ER = ER + ABS (A(I,N + 1)):
NEXT I: IF ER > 0.0001 THEN FOR I = 1 TO N:A(I) = A(I) + A(I,N
+ 1): NEXT I: GOTO 151
555 IF OP$ = "2" GOTO 1002
550 IF IF$ = "" THEN PRINT : INPUT "UTILIZARA IMPRESORA(SI O NO
)": IP$: I1$ = "PR#0": IF IP$ = "SI" THEN I1$ = "PR#1"
500 HOME : PRINT CHR$(4); I1$: PRINT "SOLUCION DEL SISTEMA": F
OR I = 1 TO N + M: PRINT "X("; I; ") = "; A(I): NEXT I: IF K%(1) + K
%(2) + K%(3) = 0 THEN PRINT CHR$(4)"PR#0": END
501 IF K%(1) = 1 THEN PRINT "T1 = "; T1
502 IF K%(2) = 1 THEN PRINT "T2 = "; T2
503 IF K%(3) = 1 THEN PRINT "T3 = "; T3
504 PRINT CHR$(4)"PR#0": INPUT "DESEA RESOLVER PARA OTROS VALO
RES DE T1,T2 , T3 (SI O NO)?": A$: IF A$ = "NO" THEN END
505 ON VAL (OP$) GOTO 149,1050
1000 HOME : PRINT "COMBINACION DE TECNICAS SUBST.DIRECTA Y METOD
O N-RAPHSON.O SUBST.DIRECTA SOLA...": PRINT : INPUT "NUMERO DE ECU
ACIONES A RESOLVER=": NN: PRINT : INPUT "NO.DE ECUACIONES POR SUBS
T.DIRECTA=": M: IF M = 0 THEN OP$ = "1"
1005 IF N + M > NN GOTO 1000
1000 DIM A$(NN): IF M < NN THEN GOSUB 100: PRINT D$"PR#0"
1010 HOME : PRINT TAB(8); "METODO SUBSTITUCION DIRECTA": PRINT
: PRINT "RESOLUCION DE UN SISTEMA DE N ECUACIONES": PRINT : PRINT
"MODIFIQUE LAS ECUACIONES DESPEJANDO UNA INCOGNITA DIFERENTE DE
CADA ECUACION...": GOSUB 1700
1020 PRINT "A CONTINUACION TECLEE LAS FUNCIONES QUE SE DEFINEN A
L DESPEJAR CADA INCOGNITA": PRINT : FOR I = N + 1 TO NN: PRINT "
X("; I; ") = "; "F"; I: NEXT I: PRINT : FOR I = N + 1 TO NN: PRINT "F
"; I; " = "; INPUT "": A$(I): NEXT I: GOSUB 1500
1030 IF N = 0 THEN PRINT D$"DELETE FUNCION": PRINT D$"OPEN FUNC
ION"
1040 PRINT D$"WRITE FUNCION": FOR I = N + 1 TO NN: PRINT 1001 +
I; "X("; I; ") = "; A$(I): NEXT I: PRINT 1001: "IF N<>0 GOTO 151"
1041 PRINT "1045N=": N: "M=": M: "OP$=": STR$(2): "": "NN=": NN: "DIM A(N,
N+1),X(NN),X(NN),K%(3):K%(1)=": K%(1): "": K%(2)=": K%(2): "": K%(3)=": I:
K(3): PRINT "RUN1045": PRINT D$"CLOSE FUNCION": PRINT D$"EXEC FUNCIO
N": END
1045 N = 2: M = 1: OP$ = STR$(2): NN = 3: DIM A(N,N + 1),X(NN),X(
NN),K%(3):K%(1) = 1:K%(2) = 0:K%(3) = 0
1050 HOME : PRINT "VALORES DE X S SUPUESTAS": FOR I = 1 TO NN:
PRINT "X("; I; ") = "; INPUT X(I): NEXT I: GOSUB 1000
1001 IF N < 0 GOTO 151
1002 REM
1004 X(3) = -.85 * (- 45000 * X(1) - 79200 * X(2)) / 18.5 + 1
302
1200 ER = 0: FOR I = N + 1 TO NN: ER = ER + ABS (X(I) - X(I)): N
EXT I: IF ER > 0.0001 THEN FOR I = N + 1 TO NN:X(I) = X(I): NEA
T I: GOTO 1001
1210 GOTO 550
1500 FOR I = 1 TO NN: FOR J = 1 TO LEN (A$(I)) - 1: FOR K = 1 T
O 3: IF MID$(A$(I),J,2) = T$(K) THEN K%(K) = 1
1510 NEXT K,J,I: RETURN
1000 IF K%(1) = 1 THEN INPUT "T1 = ": T1
1010 IF K%(2) = 1 THEN INPUT "T2 = ": T2
1020 IF K%(3) = 1 THEN INPUT "T3 = ": T3
1030 RETURN
1700 PRINT : PRINT "AL ESTRUCTURAR SU(S) FUNCIONES), SI LO DESE

```



...PUEDE UTILIZAR LOS PARAMETROS T1, T2 Y T3. ESTO LE PERMITIRA RES  
...SUS ECUACIONES, PARA DISTINTOS VALORES DE TALES PARAMETR  
...": RETURN

### 2.6.3.- Técnica de Runge-Kutta 4to. orden.

PROGRAMA SUPER RUNGE-KUTTA MULTIEC. II  
 1018T

```

4 DA = CHR$(4): DIM AA$(2),A$(5),VA$(3),VV$(3),KX(3)
5 HOME : PRINT "=====RUNGE-KUTTA CUARTO ORDEN=====": PRINT
"SELECCIONE OPCION:": PRINT "1.- INTEGRACION": PRINT "2.- RESOLU
CION ECS.DIFERENCIALES": INPUT "NUMERO DE OPCION=?": T%.EC = 1:AA$
(1) = "FUNCION A INTEGRAR":AA$(2) = "ECS.A RESOLVER"
6 ON T% GOTO 50,10
10 HOME : PRINT "METODO DE RUNGE KUTTA CUARTO ORDEN PARA RESOLVE
R MAXIMO 5 ECUACIONES DIFERENCIA-LES DE PRIMER ORDEN, DE LA FORMA
": PRINT "DY1 / DX = F1": PRINT "DY2 / DX = F2": PRINT "DY3 / DX
= F3...ETC."
20 PRINT "SI LOS MODELOS F1, F2, F3...ETC. DEPENDEN EXPLICITAM
ENTE DE LAS VARIABLES DE- PENDIENTES, MANEJE DICHAS VARIABLES COM
O YY(1), YY(2), YY(3), ..ETC. LA VARIABLE INDEPENDIENTE MANEJELA C
OMO XA.
30 PRINT "DISPONE DE TRES VARIABLES AUXILIARES T1,T2,T3. LAS CUA
LES PUEDE UTILIZAR AL ES- TRUCTURAR SUS FUNCIONES F1,F2,ETC. POST
ERIORMENTE LAS DEFINIRA.": PRINT :VA$(1) = "T1":VA$(2) = "T2":VA$
(3) = "T3": PRINT : INPUT "NUMERO DE ECUACIONES A RESOLVER=":EC
40 HOME : VTAB (22): PRINT "XA= VARIABLE INDEPENDIENTE": IF T% =
2 THEN FOR I = 1 TO EC: PRINT "YY(1):1":= VARIABLE DEPENDIENTE
50 VTAB (1): HTAB (1): PRINT D$"OPEN FUNCION": PRINT "A CONTINU
ACION TECLEARA LA(S) FUN-": PRINT "CIONES": F1,"": IF EC > 1 THE
N FOR I = 2 TO EC: PRINT "F":1,"": NEXT I
70 PRINT "":AA$(T%): PRINT : FOR I = 1 TO EC: PRINT D$"FR#0": P
RINT "FUNCION F":1,"": INPUT "":A$(1): PRINT CHR$(13):D$"WRI
TE FUNCION": PRINT 104 + I:"DEFFN":I:"(XA)=":A$(1): NEXT I:
80 GOSUB 5010
95 PRINT D$"WRITE FUNCION": PRINT "104T%=":T%:"EC=":EC:"KX=":
KX:"KX(1)=":KX(1):"KX(2)=":KX(2):"KX(3)=":KX(3): PRINT D$"WRI
TE FUNCION": PRINT "RUN 105": PRINT D$"CLOSE FUNCION": PRINT D$"E
XEC FUNCION": END
105 PRINT CHR$(4)"DELETE FUNCION": DIM VA$(3),KX(3):VA$(1) = "
T1":VA$(2) = "T2":VA$(3) = "T3"
104 T% = 2:EC = 2:KX = 1:KX(1) = 2:KX(2) = 0:KX(3) = 0
105 DEF FN F1(XA) = EXP (35.2 - 44500 / (1.98 * T1)) * (1 - YY
(1))
106 DEF FN F2(XA) = - EXP (35.2 - 44500 / (1.98 * T1)) * 05 *
(1 - YY(1))
100 HOME : PRINT "INTERVALO VARIABLE INDEPENDIENTE:": PRINT : IN
PUT "VALOR INICIAL=":X0: INPUT "VALOR FINAL=":XF
110 IF A$ \ / "SI" THEN INPUT "NUMERO DE INCREMENTOS = ":N:I =
N: IF T% = 1 THEN I = 1
120 IF A$ \ / "SI" THEN DIM X(1),Y(1,EC),YY(EC),J(4,EC),H(4),T
(1,3)
130 PRINT : PRINT : FOR I = 1 TO EC: PRINT "VALOR INICIAL VARIAB
LE DEPENDIENTE ":I: INPUT "":Y(0,I): NEXT I:X(0) = X0
140 H = (XF - X0) / N
150 GOSUB 390: IF T% \ / 1 GOTO 220
210 HOME : PRINT "EL VALOR DE LA INTEGRAL ES=":Y(1,1): PRINT "IN
TERVALO DE INTEGRACION:": PRINT "X(INICIAL)=":X0" X(FINAL)=":XF: E
ND
220 HOME : IF VI$ = "" THEN INPUT "NOMBRE VARIABLE INDEPENDIENT
E:":VI$
230 IF VD$(1) = "" THEN FOR I = 1 TO EC: PRINT "NOMBRE VARIABLE
DEPENDIENTE ":I: INPUT "":VD$(1): NEXT I
251 INPUT "DESEA IMPRIMIR SUS RESULTADOS EN PAPEL (SI O NO ?)":A

```

```

31: IF A$ = "NO" THEN GOTO 240
322 PRINT : PRINT CHR$(4)"PR#1"
240 HOME : PRINT "SELECCION": PRINT : PRINT VI$: TAB( 12): FOR
I = 1 TO EC: PRINT VD$(I): TAB( 12 + 11 * I): NEAT I: PRINT
250 FOR I = 0 TO N: PRINT X(I): TAB( 12): FOR J = 1 TO EC: PRINT
Y(I,J): TAB( 12 + 11 * J): NEAT J: PRINT : NEAT I
260 PRINT : PRINT : PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER
TECLA": GET A$
270 A$ = "NO": IF M% / 0 THEN PRINT "DESEA IMPRIMIR VARIABLES A
UXILIARES (SI O NO)": INPUT "?":A$
280 IF A$ = "NO" GOTO 380
290 FOR I = 1 TO 3: IF K%(I) < > 0 AND T1$(I) = "" THEN PRINT
"NUMERO DE (VA$(I)): INPUT "":T1$(I)
320 NEAT I:J = 0: FOR I = 1 TO 3
330 IF K%(I) = 0 GOTO 350
340 J = J + 1:J1(I) = I
350 NEAT I
360 PRINT VI$: TAB( 12): FOR I = 1 TO J: PRINT T1$(J1(I)): TAB(
12 + I * 12): NEAT I: PRINT
370 FOR I = 0 TO N: PRINT X(I): TAB( 12): FOR JJ = 1 TO J: PRINT
Y(I,J1(JJ)): TAB( 12 + JJ * 12): NEAT JJ: PRINT : NEAT I
380 PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA": GET A$: HOME
: INPUT "RESUELVE CON OTRAS CONDICIONES(SI O NO?):":A$: IF A$ =
"SI" GOTO 150
381 INPUT "DESEA GRAFICAR (SI O NO ?)":A$: IF A$ = "NO" THEN EN
D
382 INPUT "UTILIZARA IMPRESORA (SI O NO ?)":A$
383 PRINT : PRINT D#"OPEN DATOS": PRINT CHR$(4)"WRITE DATOS":
PRINT N + 1:",";EC:":":A$: PRINT VI$: FOR J = 1 TO EC: PRINT VD$(
J): NEAT J
384 FOR I = 0 TO N: PRINT X(I): FOR J = 1 TO EC: PRINT Y(I,J): N
EAT J: PRINT CHR$(4)"CLOSE DATOS": PRINT CHR$(4)"PR#0": PRI
NT CHR$(4)"RUN PLOT/MINIMOS"
385 END
390 REM RUNGE KUTTA CUARTO ORDEN. RESOLUCION DE MAXIMO CINCO EC
UACIONES
400 H = (XF - X(0)) / N:H(1) = 0:H(2) = H / 2:H(3) = H / 2:H(4) =
H
410 FOR J = 1 TO EC:Y(J) = Y(0,J): NEAT J:XX = X(0): GOSUB 630:
T1(0,1) = T1:T1(0,2) = T2:T1(0,3) = T3
420 FOR II = 1 TO N:I = II: IF T% = 1 THEN I = 1
430 FOR J = 1 TO 4: GOSUB 510
440 NEAT J
450 FOR JJ = 1 TO EC:Y(I,JJ) = Y(I - 1,JJ) + (J1(I,JJ) + 2 * J(2,
JJ) + 2 * J(3,JJ) + J(4,JJ)) / 6 * H: NEAT JJ
460 X(I) = X(I - 1) + H
470 T1(I,1) = T1:T1(I,2) = T2:T1(I,3) = T3: ON T% GOTO 480,490
480 X(I - 1) = X(I):Y(I - 1,1) = Y(I,1)
490 NEAT II
500 RETURN
510 REM ALGORITMO RUNGE KUTTA CUARTO ORDEN
520 FOR JJ = 1 TO EC:Y(JJ) = Y(I - 1,JJ) + H(J) * J(J - 1,JJ):
NEAT JJ:XX = X(I - 1) + H(J)
530 GOSUB 630
540 FOR JJ = 1 TO EC
550 ON JJ GOTO 560,570,580,590,600
560 J(J,JJ) = FN F1(XX): GOTO 610
570 J(J,JJ) = FN F2(XX): GOTO 610
580 J(J,JJ) = FN F3(XX): GOTO 610
590 J(J,JJ) = FN F4(XX): GOTO 610

```

```

600 J(J,J) = FN F5(X)
610 NEXT JJ
620 RETURN
630 T1 = 613 - (65 * YY(1))
5000 RETURN
5010 PRINT D$"FR#0":KK% = 0: FOR I = 1 TO EC: FOR J = 1 TO LEN
(A$(1)) - 1: FOR K = 1 TO 3: IF VA$(K) = MID$(A$(1),J,2) THEN K
%K) = K%(K) + 1: IF K%(K) = 1 THEN KK% = KK% + 1:VV(KK%) = K
5020 NEXT K,J,I: IF KK% = 0 THEN RETURN
5030 HOME: PRINT "A CONTINUACION TECLEARA VARIABLES AUXILIARE
S. SI EN RESPUESTA DE LA FORMA FUNCIONAL SOLICITADA, UD. TECL
E A UN ASTRISCO(*), SE GENERARAN NUMEROS DE LINEAS PARA QUE TEC
LEE UN SEGMENTO DE PROGRAMA.": PRINT
5040 VTAB (21): HTAB (1): PRINT "T1,T2,T3 TECLAELAS COMO FUNCION
ES DE X,YY(1),YY(2),...ETC.O COMO CONSTANTES SEGUN EL CASO.": V
TAB (7): HTAB (1): FOR I = 1 TO KK%: PRINT D$"FR#0": PRINT VA$(VV
(1)):"=": INPUT "":A$: IF A$ = "*" GOTO 5060
5050 PRINT D$"WRITE FUNCION": PRINT 630 + (I - 1) * 30:VA$(VV(I)
):"=":A$: NEXT I: RETURN
5060 FOR J = 1 TO 30: PRINT D$"FR#0": PRINT 630 + (I - 1) * 30 +
J - 1: INPUT "":A$: IF RIGHT$(A$,1) = "*" THEN A$ = LEFT$(A
$, LEN (A$) - 1): PRINT D$"WRITE FUNCION": PRINT 630 + (I - 1) *
30 + J - 1:A$: NEXT J
5070 PRINT D$"WRITE FUNCION": PRINT 630 + (I - 1) * 30 + J - 1:A
$: RETURN

```

2.6.4.- Graficador.  
LOAD SUPER GRAFICADOR  
LIST

```
10 HOME : PRINT "GRAFICA UNA O MAS FUNCIONES (Y S. VS X)": PRINT
: PRINT "X A SU VEZ PUEDE SER UNA FUNCION.": PRINT : PRINT
20 PRINT "SELECCIONE OPCION :": PRINT "1.- ALIMENTARA DATOS PUNT
OS A GRAFICAR": PRINT "2.- GENERARA DATOS POR MOD.MATEMATICÓ": PR
INT : INPUT "NUMERO DE OPCION=?":OF: ON OF GOTO 30,200
30 PRINT : PRINT : INPUT "NO. DE FUNCIONES A GRAFICAR=?":NF
40 PRINT : PRINT : INPUT "NUMERO DE PUNTOS A GRAFICAR=?":N
45 HOME : PRINT "A CONTINUACION TECLEARA DATOS ORDENADOS.": PRIN
T "X": FOR J = 1 TO NF: PRINT ",Y":J: NEXT J: PRINT
50 DIM X(N),Y(NF,N),NY$(NF)
70 FOR I = 1 TO N: INPUT "X=":X(I): FOR J = 1 TO NF: PRINT "Y":J
: INPUT "=":Y(J,I): NEXT J: PRINT : NEXT I: GOTO 410
200 PRINT : PRINT : INPUT "NO. DE FUNCIONES A GRAFICAR=?":NF: HO
ME : PRINT "X SE GENERARA POR INCREMENTOS EN INTERVALO QUE SUMINI
STRARA COMO XINICIAL Y XFINAL.": PRINT : PRINT "FUNCIONES A GRAF
ICAR.": PRINT : FOR J = 1 TO NF: PRINT "FUNCION Y":J:"(X)": INPU
T " "=":A$(J): NEXT J
235 PRINT : PRINT "VALOR ABSCISA GRAFICA ES FUNCION DE LA XGENER
ADA EN INTERVALO (XINICIAL,XFINAL).": INPUT "FUNCION ABSCISA(X)="
:B$:B$ = "28$DEFFN(X)=" + B$
240 PRINT CHR$(4)"OPEN FUNCION": PRINT CHR$(4)"WRITE FUNCION
": PRINT B$:NF=":NF: FOR J = 1 TO NF: PRINT 267 + J:"Y":J:".I)
=":A$(J): NEXT J: PRINT "RUN285": PRINT CHR$(4)"CLOSEFUNCION"
270 PRINT CHR$(4)"EXEC FUNCION": END
285 PRINT CHR$(4)"DELETE FUNCION"
287 INPUT "NUMERO DE PUNTOS A GRAFICAR=":N: DIM X(N),Y(NF,N),NY$(
NF): INPUT "VALOR INICIAL DE X=":X0: INPUT "VALOR FINAL DE X=":X
:DX = (X - X0) / (N - 1):X = X0 - DX: FOR I = 1 TO N:X = X + DX
400 X(I) = FN X(X): NEXT I
410 INPUT "NOMBRE DE X=":NAX$: FOR J = 1 TO NF: PRINT "NOMBRE DE
Y":J: INPUT "=":NY$(J): NEXT J: INPUT "UTILIZARA IMPRESORA(SI O
NO)?":NNS$
420 PRINT CHR$(4)"OPEN DATOS": PRINT CHR$(4)"WRITE DATOS": P
RINT N:","NF:",":NNS$: PRINT NAX$: FOR J = 1 TO NF: PRINT NY$(J):
NEXT J
430 FOR I = 1 TO N: PRINT X(I): FOR J = 1 TO NF: PRINT Y(J,I): N
EXT J,I
440 PRINT CHR$(4)"CLOSE DATOS": PRINT CHR$(4)"PR#0": PRINT
CHR$(4)"RUN PLOT/MINIMOS"
```

```

10 REM GRAFICAO
20 TEXT : HOME : PRINT "TAMANO DE GRAFICA :": INPUT "NUMERO DE R
ENGLONES (C = 165,MULTIPLO DE 10)=?":NR
30 PRINT CHR$(4)"OPEN DATOS": PRINT CHR$(4)"READ DATOS": INF
UT N,NF,NN$: DIM X(N),Y(NF,N),NY$(NF): INPUT NA$: FOR J = 1 TO NF
40 PRINT CHR$(4)"OPEN DATOS": PRINT CHR$(4)"READ DATOS": INF
: INPUT NY$(J): NEXT J: DIM Y(20),X(20),O(38)
50 DATA 0,0,0,1,4,0,4,1,1,2,3,2,2,3,2,4,2,5,2,6,0,0,0,4,0,0,1,4,
1,1,2,3,2,2,3,1,4,3,4,0,5,4,5,0,0,4,0,1,0,2,0,3,0,0,1,0,2,0,3,0,4
,0,3,1,0,2,0,3,0,4, 1,4,2,4,3,4,4,3,3,4,2,3,1,2
60 FOR I = 1 TO 20: READ Y(I): NEXT I: FOR I = 1 TO 20: READ X
(I): NEXT I: FOR I = 1 TO 38: READ O(I): NEXT I
70 FOR I = 1 TO N: INPUT X(I): FOR J = 1 TO NF: INPUT Y(J,I): NE
AT J,I: PRINT CHR$(4)"CLOSE DATOS": PRINT CHR$(4)"PRHO":EX =
10:EX = 10
80 MY = Y(1,I): FOR J = 1 TO NF: FOR I = 1 TO N: IF MY > Y(J,I) T
HEN MY = Y(J,I)
90 NEXT I,J
100 MX = X(1): FOR I = 2 TO N: IF MX > X(I) THEN MX = X(I)
110 NEXT I
120 FOR J = 1 TO NF: FOR I = 1 TO N: Y(J,I) = Y(J,I) - MY: NEXT I
,J: FOR I = 1 TO N: X(I) = X(I) - MX: NEXT I: YN = Y(1,I): FOR J =
1 TO NF: FOR I = 1 TO N: IF YN < Y(J,I) THEN YN = Y(J,I)
130 NEXT I,J: XM = X(1): FOR I = 2 TO N: IF XM < X(I) THEN XM = X
(I)
145 NEXT I: YA = YN + MY: XA = XM + MX: IF MX < 0 AND XA > 0 THEN
Ox = 1
150 IF MY < 0 AND YA > 0 THEN Oy = 1
170 D = 3: IF YN / NR * EX < 0.01 GOTO 210
180 FOR I = 1 TO 4: IF YN / NR * EX < 0.01 * 10 ^ I GOTO 200
190 NEXT I: I = I - 1
200 D = 4 - I
210 L1 = LEN ( STR$ ( INT (MY))) : L2 = LEN ( STR$ ( INT (YA))) : L
3 = L1: IF L1 < L2 THEN L3 = L2
220 L3 = L3 + D: IF D < 0 THEN L3 = L3 + 1
230 L3 = (L3 - 1) * 3 + 7: IF D = 4 THEN L3 = L3 + 32
240 PRINT "NUMERO DE COLUMNAS (C = " ; 273 - L3 ; ",MULTIPLO DE 10)=
?": INPUT "":NC
250 DD = 3: IF XM / NC * EX < 0.01 GOTO 290
260 FOR I = 1 TO 4: IF XM / NC * EX < 0.01 * 10 ^ I GOTO 280
270 NEXT I: I = I - 1
280 DD = 4 - I
290 L1 = LEN ( STR$ ( INT (MX))) : L2 = LEN ( STR$ ( INT (XA))) : L
4 = L1: IF L1 < L2 THEN L4 = L2
300 L4 = L4 + DD: IF DD < 0 THEN L4 = L4 + 1
310 L4 = (L4 - 1) * 3 + 7: IF DD = 4 THEN L4 = L4 + 32
320 CC = 273 - NC: CR = (192 - NR) / 2 + 3: X0 = - MX / XM * NC: Y0
= - MY / YN * NR
330 DIM HC(NF): FOR I = 1 TO NF: HC(I) = 5: NEXT I: HC(NF) = 3: HG
R2 : HCOLOR = 3: IF Ox < 0 GOTO 350
340 HPLLOT X0 + CC,191 - CR TO X0 + CC,191 - NR - CR: FOR I = 1 T
O 38 STEP 2: HPLLOT X0 + CC - 2 + O(I),191 - NR - CR - 2 - O(I) +
1: NEXT I
350 IF Oy < 0 GOTO 370
360 HPLLOT CC,191 - CR - Y0 TO NC + CC,191 - Y0 - CR: FOR I = 1 T
O 38 STEP 2: HPLLOT CC + NC + 2 + O(I),191 - CR - Y0 + 3 - O(I) +
1: NEXT I

```

```

370 HFPLOT CC,191 - CR TO CC,191 - NR - CR
380 HFPLOT CC,191 - NR - CR TO NC + CC,191 - NR - CR: HFPLOT NC +
CC,191 - NR - CR TO NC + CC,191 - CR
400 FOR J = 1 TO NF: HCOLOR= HC(J): HFPLOT CC,191 - CR TO NC + CC
,191 - CR: HFPLOT X(J) / XM * NC + CC,191 - Y(J,1) / YM * NR - CR:
FOR I = 1 TO N: HFPLOT TO X(I) / XM * NC + CC,191 - Y(J,1) / YM
* NR - CR: NEXT I,J
420 FOR I = 1 TO 20 STEP 2: HFPLOT CC - 2 + YY(I),CR - 15 + YY(I
+ 1): NEXT I: FOR I = 1 TO 20 STEP 2: HFPLOT NC + CC + 2 + XX(I),1
91 - XX(I + 1) + 8 - CR: NEXT I
430 FOR I = 0 TO NC STEP EX: HFPLOT CC + 1,191 - CR TO CC + 1,191
- CR - 3: NEXT I: FOR I = 0 TO NR STEP EY: HFPLOT CC,191 - CR - 1
TO CC + 3,191 - CR - 1: NEXT I
450 PRINT : PRINT CHR$(4)"OPEN DATOSS": PRINT CHR$(4)"WRITE
DATOSS": PRINT NF;",";L3;",";L4;",";D;",";DD;",";YM;",";MY;",";EY
;",";NR;",";CR;",";XM;",";MX;",";EX;",";NC;",";CC;",";NN;",";NX;
: FOR J = 1 TO NF: PRINT NY$(J): NEXT J
460 PRINT CHR$(4)"CLOSE DATOSS": PRINT CHR$(4)"RUN ESCALA"

```

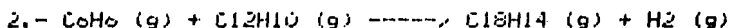
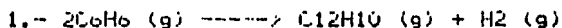
```

500 DIM C1(13),C2(13,37),CO$(13),CA(13),VH(13)
510 DATA 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,.,-,E,= FOR I = 0 TO 13: READ CO
520 DATA 38,20,30,30,28,34,32,22,34,32,2,10,30,18
530 DATA 1,0,2,0,3,0,0,0,1,0,2,0,3,0,4,0,3,4,1,4,2,4,3,4,4,4,5,1
,4,2,3,3,2,1,0,2,0,3,0
540 DATA 2,0,1,1,2,1,2,2,2,3,2,4,2,5,1,0,2,0,3,0
550 DATA 0,1,1,0,2,0,3,0,4,1,4,2,3,3,2,3,1,4,0,5,0,0,1,0,2,0,3,
0,4,0
560 DATA 0,0,1,0,2,0,3,0,4,0,4,1,3,2,2,3,3,3,4,4,4,5,3,0,2,0,1,
0,0,5
570 DATA 3,0,3,1,3,2,3,3,3,4,2,4,1,4,0,4,0,3,1,2,2,1,4,4,3,5,3,
0
580 DATA 0,0,1,0,2,0,3,0,4,0,0,1,0,2,1,2,2,2,3,2,4,3,4,4,4,5,3,
0,2,0,1,0,0,5
590 DATA 4,0,3,0,2,0,1,1,0,2,0,3,1,3,2,3,3,3,4,4,4,5,3,0,2,0,1,
0,0,5,0,4
600 DATA 0,0,1,0,2,0,3,0,4,0,4,1,3,2,2,3,1,4,1,5,1,0
610 DATA 1,0,2,0,3,0,0,1,4,1,0,2,4,2,1,3,2,3,3,3,0,4,4,4,0,3,4
,5,1,0,2,0,3,0
620 DATA 1,0,2,0,3,0,4,1,0,1,4,2,0,2,1,3,2,3,3,3,4,3,4,4,3,5,2,
0,1,0,0,0
630 DATA 2,0,0,3,1,3,2,3,3,3,4,3,0,0,1,0,2,0,3,0,4,0,0,1,0,2,0
,3,1,3,2,3,3,3,0,4,0,5,0,0,1,0,2,0,3,0,4,0
640 DATA 0,3,1,3,3,3,4,3,2,1,2,2,2,3,2,4,2,5
645 PRINT : PRINT CHR$(4)"OPEN DATOSS": PRINT CHR$(4)"READ O
ATDSS": INPUT NF,LS,L4,D,DD,YM,MY,EY,NR,CR,XM,MA,EA,NC,CC,NN$,NA$
: DIM NY$(NF),SY$(NF): FOR J = 1 TO NF: INPUT NY$(J): NEXT J: PRI
NT CHR$(4)"CLOSE DATOSS": PR# 0
650 DEF FN DD(X) = INT (X * 10 ^ DD + 0.5) / INT (10 ^ DD): =
EF FN D(X) = INT (X * 10 ^ D + 0.5) / INT (10 ^ D): FOR I = 0
TO 13: READ C1(I): FOR I = 0 TO 13: FOR J = 0 TO C1(I) -
1: READ C2(I,J): NEXT J, I
660 FOR II = 0 TO NR STEP EY: CL = 191 - CR - II - 3: Y = MY + YM
/ NR * II: FOR I = 1 TO NF: SY$(I) = "(...)": NEXT I: S:(NF) = "
- )"
670 A$ = STR$(FN D(Y)): LC = CC - (LEN(A$) - 1) * 8 - 7: GOSU
B 700: NEXT II
681 CL = 191 - CR + 11: Y = MA: A$ = STR$(FN DD(Y)): LC = CC: GOS
UB 700: Y = XM + MA: A$ = STR$(FN DD(Y)): LC = CC: GOS
UB 700: Y = MX + XM / 2: A$ = STR$(FN DD(Y)): LC
= CC + NC / 2 - 2: GOSUB 700
692 H$LOT CC,191 - CR TO CC,191 - CR + 9: H$LOT NC + CC,191 - CR
TO NC + CC,191 - CR + 9: H$LOT (CC + NC / 2),191 - CR TO (CC + N
C / 2),191 - CR + 9
693 GET B$: TEXT : HOME : IF NN$ = "NO" THEN NEW
694 A$ = " PR# 1: PRINT ""A$: TEXT : PRINT : HTAB 17: PRINT " TAM
A&O ESCALA X=": XM / NC * EA: " TAM A&O ESCALA Y=": YM / NR * EY:
HTAB 17: PRINT " X = " : NA$: FOR J = 1 TO NF: HTAB 17: PRINT "Y":
J: " : NY$(J): SY$(J): NEXT J: FR# 0: NEW : END
700 CA = 0: FOR J = 1 TO LEN(A$)
710 FOR K = 0 TO 13: IF MID$(A$,J,1) = CO$(K) GOTO 730
720 NEXT K: STOP
730 CA = CA + 1: CA(CA) = K: NEXT J
750 FOR I = 1 TO CA: FOR J = 0 TO C1(CA(I)) - 1 STEP 2: H$LOT C2
(CA(I),J) + LC,C2(CA(I),J + 1) + CL: NEXT J: LC = LC + 8: NEXT I:
RETURN

```



2.7.1.- HOUGEN Y WATSON REALIZARON UN ANALISIS DE KASSELS PARA LOS DATOS DE LA DESHIDROGENACION DEL BENCENO EN UN REACTOR TUBULAR, PARA LO CUAL CONSIDERARON QUE DICHA DESHIDROGENACION SE LLEVABA A CABO EN 2 REACCIONES.



LAS ECUACIONES DE RAPIDEZ SON LAS SIGUIENTES :

$$R_1 = 14.96 E_6 * (e^{-15200/T})(P_b^2 - P_d * P_h / K_1)$$

$$R_2 = 8.67 E_6 * (e^{-15200/T})(P_b * P_d - P_t * P_h / K_2)$$

$$R_1 = \text{LB MOL DE BENCENO QUE REACCIONA} / \text{HR FT}^3$$

$$R_2 = \text{LB MOL DE DIFENILO O TRIFENILO} / \text{HR FT}^3$$

DONDE :

$P_b$  = PRESION PARCIAL DE BENCENO EN ATM.

$P_d$  = PRESION PARCIAL DEL DIFENILO EN ATM.

$P_t$  = PRESION PARCIAL DEL TRIFENILO EN ATM.

$P_h$  = PRESION PARCIAL DEL HIDROGENO EN ATM.

$T$  = TEMPERATURA EN GRADOS FARENHEIT.

$K_1$  Y  $K_2$  SON CONSTANTES DE EQUILIBRIO PARA AMBAS REACCIONES EN TERMINOS DE PRESION PARCIAL.

LOS DATOS PARA OBTENER LAS ECUACIONES DE RAPIDEZ FUERON LOS SIGUIENTES: LA PRESION TOTAL FUE DE 1 ATM Y LAS TEMPERATURAS SON 1265 Y 1400 GRADOS FARENHEIT EN UN REACTOR TUBULAR DE DIAMETRO DE 0.5 IN. Y UNA LONGITUD DE 3 FT.

SE PROPONE DISEÑAR UN REACTOR TUBULAR EL CUAL OPERARA A 1400°F Y 1 ATM.

DETERMINE EL VOLUMEN REQUERIDO POR EL REACTOR. PARA PROCESAR 1000 LB/HR DE BENCENO (LA ALIMENTACION ES DE BENCENO PURO), EN FUNCION DE LA CONVERSION TOTAL.

SUPONGA QUE SOLO TIENE LUGAR LA 1ER. REACCION Y POSTERIORMENTE TOME EN CUENTA AMBAS REACCIONES, CONSIDERANDO UNA OPERACION ISO-

TERMINICA.

SUPONGA UNA ECUACION DEL TIPO :



K EN FUNCION DE LA PRESION SERA LA SIGUIENTE :

$$K = (P_C^{**}C) * (P_D^{**}D) / (P_A^{**}A) * (P_B^{**}B)$$

APLICANDO ESTOS METODOS Y UTILIZANDO LAS ECUACIONES DESCRITAS POR HODDEN Y WATSON ESTIMANDO K A 1400°F SE OBTUVIERON LOS SIGUIENTES DATOS :

$$K_1 = 0.312 \text{ Y } K_2 = 0.480$$

SOLUCION :

AL SUBSTITUIR LOS DATOS EN EL MODELO DEL REACTOR TUBULAR, SE OBTIENEN LAS SIGUIENTES ECUACIONES :

$$R_1 = 6.23 \left[ (1 - X_1 - X_2)^2 - \frac{(\frac{1}{2} X_1 - X_2)(\frac{1}{2} X_1 + X_2)}{0.312} \right]$$

$$R_2 = 3.61 \left[ (1 - X_1 - X_2)(\frac{1}{2} X_1 - X_2) - \frac{X_2(\frac{1}{2} X_1 + X_2)}{0.480} \right]$$

LAS CUALES SE RESOLVIERON CON LA TECNICA DE RUNGE-KUTTA DE 4TO. ORDEN.

PRINT CHR(10); "65N"

2.7.- Se Aplicara

IRUN

=====RUNGE-KUTTA CUARTO ORDEN=====

SELECCIONE OPCION:

1.- INTEGRACION

2.- RESOLUCION ECU.DIFERENCIALES

NUMERO DE OPCION=?

METODO DE RUNGE KUTTA CUARTO ORDEN PARA RESOLVER MAXIMO 5 ECUACIONES DIFERENCIALES DE PRIMER ORDEN, DE LA FORMA:

$dy_1 / dx = F_1$

$dy_2 / dx = F_2$

$dy_3 / dx = F_3, \dots ETC.$

SI LOS MODELOS  $F_1, F_2, F_3, \dots ETC.$  DEPENDEN EXPLICITAMENTE DE LAS VARIABLES DEPENDIENTES, MANEJE DICHAS VARIABLES COMO  $YY(1), YY(2), YY(3), \dots ETC.$  LA VARIABLE INDEPENDIENTE MANEJELA COMO  $XX.$

DISPONE DE TRES VARIABLES AUXILIARES  $T_1, T_2, T_3,$  LAS CUALES PUEDE UTILIZAR AL ESTRUCTURAR SUS FUNCIONES  $F_1, F_2, ETC.$  POSTERIORMENTE LAS DEFINIRA.

NUMERO DE ECUACIONES A RESOLVER=?

$XX =$  VARIABLE INDEPENDIENTE

$YY(1) =$  VARIABLE DEPENDIENTE ECUACION 1

$YY(2) =$  VARIABLE DEPENDIENTE ECUACION 2

$T_1, T_2, T_3 =$  VARIABLES AUXILIARES

INTERVALO VARIABLE INDEPENDIENTE:

VALOR INICIAL = 0

VALOR FINAL = 1

NUMERO DE INCREMENTOS = 20

VALOR INICIAL VARIABLE DEPENDIENTE 1 = 0

VALOR INICIAL VARIABLE DEPENDIENTE 2 = 0

BREAK IN 570

ICONT

NUMERO VARIABLE INDEPENDIENTE: V/F

NUMERO VARIABLE DEPENDIENTE 1: X1

NUMERO VARIABLE DEPENDIENTE 2: X2

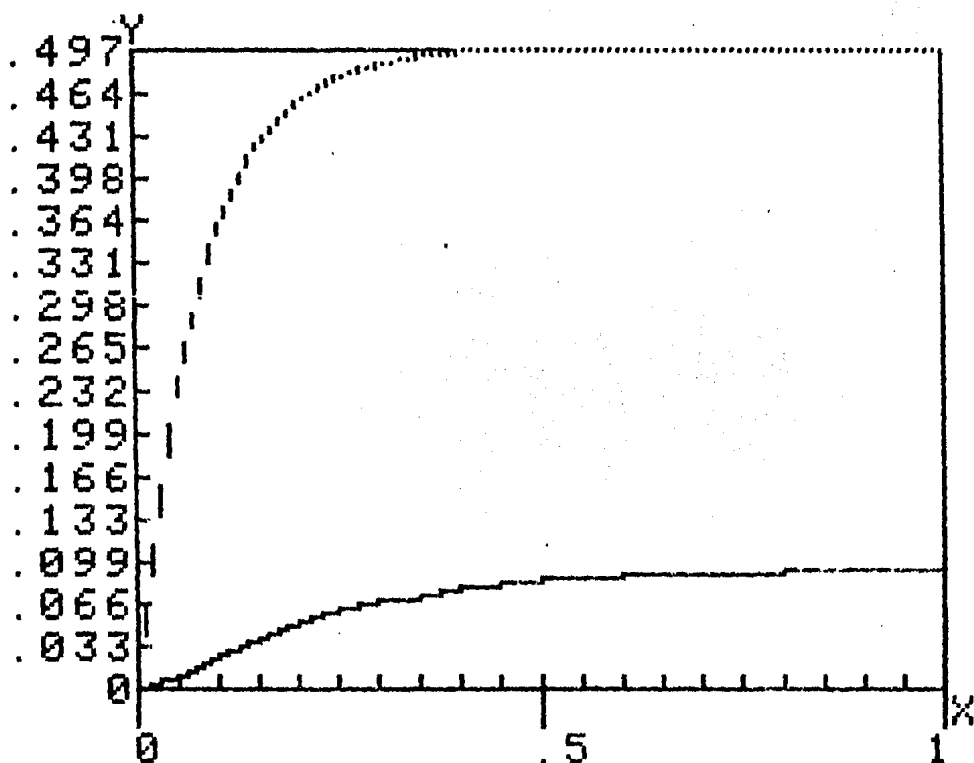
DESEA IMPRIMIR SUS RESULTADOS EN PAPEL (SI O NO ?)

SOLUCION:

V/F	X1	X2
0	0	0
.05	.231312803	8.97128934E-03
.1	.354951728	.0242475012
.15	.421343069	.0385921025
.2	.45714133	.0504303732
.25	.476427274	.0597838574
.3	.486733476	.067052565
.35	.492142254	.072664332
.4	.494887375	.0769858233
.45	.496197528	.0803106213
.5	.49674896	.0828678756
.55	.496912212	.0848347213

.6	.496001183	.0863475503
.65	.49678375	.0875112477
.7	.496653978	.0884064434
.75	.496525695	.0890951238
.800000001	.496410629	.0896249499
.850000001	.49631268	.0900325741
.900000001	.496231903	.0903461368
.950000001	.496166642	.0905874725
1	.496114643	.0907731127

PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA  
 PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA  
 RESUELVE CON OTRAS CONDICIONES (SI O NO) ? NO  
 DESEA GRAFICAR (SI O NO ?) SI  
 UTILIZARA IMPRESORA (SI O NO ?) SI



TAMAÑO ESCALA X=.05

TAMAÑO ESCALA Y=.0331274808

X = V/F

Y1 = X1( ... )

Y2 = X2( - )

2.7.2.- LA PRODUCCION DE ACEITE SECANTE POR LA DESCOMPOSICION DE ACEITE DE CASTOR ES REPRESENTADA POR LA SIGUIENTE ECUACION DE 1ER ORDEN :

ACEITE DE CASTOR ACETILADO (1)  $\rightarrow$  CH<sub>3</sub>COOH (g) + ACEITE SECANTE.

LA REACCION SE LLEVA A CABO DE ACUERDO A LA SIGUIENTE EXPRESION DE RAPIDEZ.

$$R = (k/60) * C$$

DONDE :

R = RAPIDEZ DE DESCOMPOSICION EN KG DE CH<sub>3</sub>COOH PRODUCIDO / M<sup>3</sup>\*SEG

C = CONCENTRACION DE CH<sub>3</sub>COOH EN KG/M<sup>3</sup> EQUIVALENTE A ACEITE DE CASTOR ACETILADO.

LOS DATOS OBTENIDOS EN UN RANGO DE TEMPERATURAS QUE OSCILA ENTRE 295 Y 340 °C INDICAN QUE LA ENERGIA DE ACTIVACION ES DE 44500 CAL/GMOL EN CONCORDANCIA CON LA EXPRESION MOSTRADA PARA EVALUAR LA CONSTANTE

$$\ln k = (-44500 / R_g * T) + 35.2$$

DONDE :

T = TEMPERATURA EN GRADOS KELVIN

SI A UN REACTOR INTERMITENTE SE ALIMENTAN 227 KG DE ACEITE DE CASTOR ACETILADO A 340 °C (DENSIDAD 0.90) Y LA OPERACION ES ADIABATICA, DIBUJE LAS CURVAS DE CONVERSION (FRACCION DE ACEITE ACETILADO QUE SE DESCOMPONE) CONTRA TIEMPO Y LA GRAFICA DE CONVERSION CONTRA TEMPERATURA.

EL CALOR DEL EFECTO ENDOTERMICO, ESTIMADO PARA ESTA REACCION ES

DE 62720 L/MOL DE CH<sub>3</sub>COOH VAPOR.

EL ACEITE CARGADO EN EL REACTOR CONTIENE 0.156 KG DE CH<sub>3</sub>COOH/KG DE ACEITE ACETILADO.

PARA UNA DESCOMPOSICION COMPLETA 1 KG DE ACEITE PRODUCE 0.156 KG DE CH<sub>3</sub>COOH. SUPONGA QUE EL ACIDO ACETICO (g) PRODUCIDO EN EL REACTOR ESTA A LA MISMA TEMPERATURA DE LA MEZCLA REACCIONANTE.

LAS ECUACIONES A RESOLVER SON LAS SIGUIENTES :

$$\frac{dT}{dX} = f(T, X) = \frac{60}{[\text{EXP}(35.2 - 44500/R_g T)] (1-X)}$$

$$T = T_0 - 65X$$

SE APLICARA LA TECNICA DE RUNGE-KUTTA DE 4TO. ORDEN.

```

FUN SUPER RUNGE-KUTTA MULTIEC. 11
=====RUNGE-KUTTA CUARTO ORDEN=====
SELECCIONE OPCION:
1.- INTEGRACION
...- RESOLUCION EDS.DIFERENCIALES
NUMERO DE OPCION=?2
METODO DE RUNGE KUTTA CUARTO ORDEN PARA RESOLVER MAXIMO 5 ECUACIONES
DIFERENCIALES DE PRIMER ORDEN, DE LA FORMA:
DY1 / DX = F1
DY2 / DX = F2
DY3 / DX = F3,...ETC.
SI LOS MODELOS F1, F2, F3,...ETC. DEPENDEN EXPLICITAMENTE DE LAS
VARIABLES DEPENDIENTES, MANEJE DICHAS VARIABLES COMO YY(1), YY
(2), YY(3), ..ETC. LA VARIABLE INDEPENDIENTE MANEJELA COMO XX.
DISPONE DE TRES VARIABLES AUXILIARES T1,T2,T3, LAS CUALES PUEDE U
TILIZAR AL ESTRUCTURAR SUS FUNCIONES F1,F2,ETC. POSTERIORMENTE
LAS DEFINIRA.

NUMERO DE ECUACIONES A RESOLVER=?2
XX= VARIABLE INDEPENDIENTE
YY(1)= VARIABLE DEPENDIENTE ECUACION 1
YY(2)= VARIABLE DEPENDIENTE ECUACION 2
T1,T2,T3 =VARIABLES AUXILIARES
A CONTINUACION TECLEARA LA(S) FUN-
CIONES) ; F1,F2, ETC(S).A RESOLVER

```

```

IFPRINT CHR$(9);"o5N"

```

```

ILIST 105,106

```

```

105 DEF FN F1(XX) = EXP (35.2 - 44500 / (1.98 * T1)) * (1 - YY
(1))
106 DEF FN F2(XX) = - EXP (35.2 - 44500 / (1.98 * T1)) * (1 -
YY(1)) * o5

```

```

ILISTo30

```

```

o30 T1 = o13 - (o5 * YY(1))

```

```

IRUN 104

```

```

INTERVALO VARIABLE INDEPENDIENTE:

```

```

VALOR INICIAL= 0

```

```

VALOR FINAL= 100

```

```

NUMERO DE INCREMENTOS = 100

```

```

VALOR INICIAL VARIABLE DEPENDIENTE 1= 0

```

```

VALOR INICIAL VARIABLE DEPENDIENTE 2= o13

```

```

NOMBRE VARIABLE INDEPENDIENTE:PASO #

```

```

NOMBRE VARIABLE DEPENDIENTE 1:CONCENTRACION

```

```

NOMBRE VARIABLE DEPENDIENTE 2: TEMPERATURA

```

```

DESEA IMPRIMIR SUS RESULTADOS EN PAPEL (SI O NO ?)SI

```

```

SOLUCION:

```

## SOLUTIONS:

PAGE #	CONC.	TEMPERATURA
0	0	613
1	.154297125	602.970687
2	.238759115	597.480658
3	.296570923	593.72289
4	.34025578	590.883375
5	.375210069	588.611346
6	.404247657	586.723903
7	.429018888	585.113773
8	.450573019	583.712754
9	.469617752	582.474848
10	.486652413	581.367594
11	.502042296	580.367251
12	.516662377	579.455946
13	.528924749	578.619892
14	.540796343	577.848238
15	.551810837	577.132296
16	.562676894	576.465062
17	.571684006	575.84051
18	.580706726	575.254063
19	.589267801	574.701493
20	.597240526	574.179366
21	.604850538	573.684715
22	.612077211	573.214931
23	.61895474	572.767942
24	.62551301	572.341654
25	.631778284	571.934412
26	.637773762	571.544705
27	.643520035	571.171198
28	.649035464	570.812695
29	.654336483	570.468129
30	.659437861	570.136539
31	.664352917	569.817061
32	.669093702	569.50891
33	.673671156	569.211375
34	.678095236	568.92381
35	.682375032	568.645623
36	.686518865	568.376274
37	.690534366	568.115267
38	.694428555	567.862144
39	.698207902	567.616487
40	.701878381	567.377906
41	.705445521	567.146042
42	.708914448	566.920561
43	.712289923	566.701155
44	.715576376	566.487536
45	.718777935	566.279435
46	.721898454	566.076601
47	.724941533	565.878801
48	.727910545	565.685815
49	.730808651	565.497438
50	.733638816	565.313478
51	.736403829	565.133752
52	.739106313	564.95809
53	.741748739	564.786333
54	.744333439	564.618327
55	.746862612	564.453931
56	.749338338	564.293009



57	.751702585	564.135433
58	.754137217	563.931031
59	.756403998	563.829641
60	.758744604	563.631601
61	.760980020	563.53020
62	.763173576	563.393713
63	.765324892	563.253883
64	.767435943	563.116004
65	.769508032	562.981979
66	.771542402	562.849744
67	.77354024	562.719885
68	.775502678	562.592326
69	.777430790	562.460999
70	.779325028	562.343335
71	.781188104	562.22277
72	.78301935	562.103743
73	.784820092	561.980074
74	.786591259	561.871508
75	.788333084	561.758311
76	.790048100	561.64087
77	.791735473	561.537195
78	.79339634	561.429238
79	.795031475	561.322954
80	.796641559	561.218299
81	.798227247	561.115229
82	.799789109	561.013704
83	.80132793	560.913085
84	.802844115	560.815133
85	.804338280	560.718012
86	.805810987	560.622280
87	.807262741	560.527922
88	.808694051	560.434887
89	.810105407	560.343148
90	.811497278	560.252677
91	.812870119	560.163442
92	.814224368	560.075410
93	.815560452	559.988571
94	.81687878	559.90288
95	.818179749	559.818310
96	.819463745	559.734857
97	.820731138	559.652470
98	.82198229	559.571152
99	.82321755	559.49080
100	.824437256	559.411579

PASO #

TEMPERATURA

TEMPERATURA/013

0	613	1
1	602.069274	.9822011
2	597.372085	.974505848
3	593.692008	.968502459
4	590.370803	.963900108
5	588.605091	.960204063
6	586.720365	.957129409
7	585.111585	.954505033
8	583.711311	.952220730
9	582.473847	.950202034
10	581.366872	.948396201
11	580.366714	.946764022
12	579.455535	.945278197
13	578.61957	.943914471
14	577.847983	.942655762

75	5e1.758309	.91e408334
76	5e1.64e8e7	.91e22e537
77	5e1.537193	.91e047e23
78	5e1.429237	.915e71511
79	5e1.323953	.915e078129
80	5e1.218298	.9155274e2
81	5e1.115276	.915e592e2
82	5e1.013703	.915193e42
83	5e0.913e84	.915030479
84	5e0.815131	.9148e9709
85	5e0.71801	.914711273
86	5e0.622385	.914555114
87	5e0.527921	.91440117e
88	5e0.43438e	.91424940e
89	5e0.343148	.914099751
90	5e0.252e7e	.9139521e3
91	5e0.1e3441	.91380e593
92	5e0.075415	.913e6e2994
93	559.98357	.913521321
94	559.902879	.913381531
95	559.81831e	.913243582
9e	559.73435e	.913107432
97	559.652475	.912973e43
98	559.57115	.91284e37e
99	559.490859	.912709394
100	559.411573	.912580e01

PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLARESUELVE CON OTRAS CONDICIONES  
(SI O NO)?NO

DESEA GRAFICAR(SI O NO)?SI

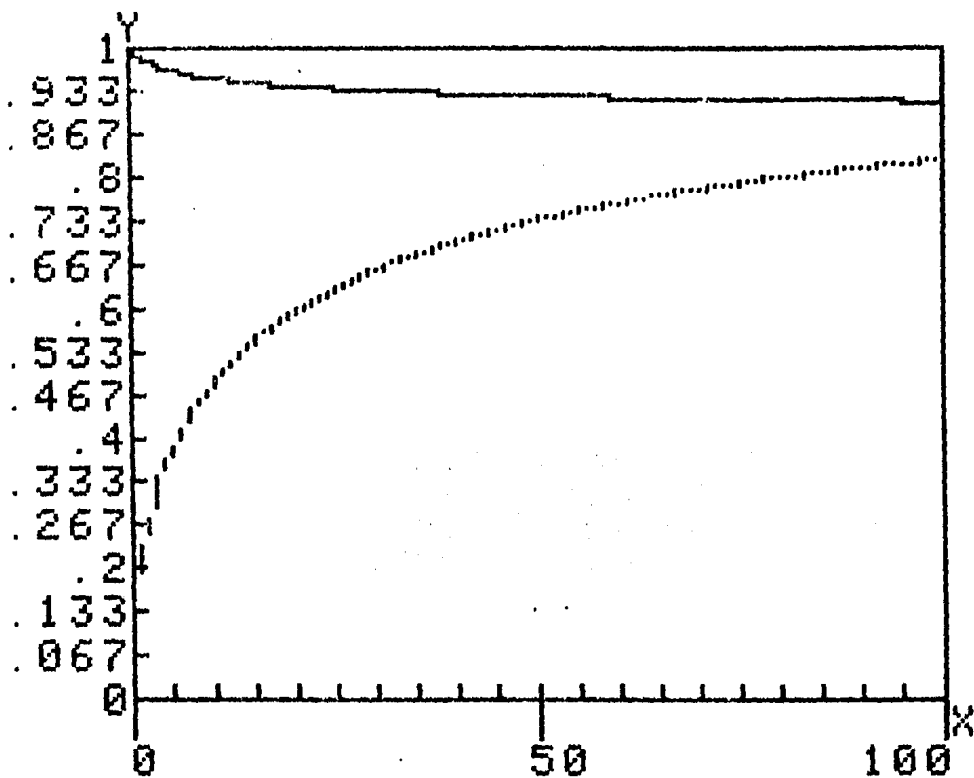
SI DESEA GRAFICAR YY(1),TECLEE UN 1

SI DESEA GRAFICAR YY(2),TECLEE UN 1

SI DESEA GRAFICAR T1 TECLÉE UN 1

SI DESEA GRAFICAR T2 TECLÉE UN 1

15	577.13209	.94148791
16	576.464833	.940399401
17	575.840099	.939380749
18	575.253945	.938424054
19	574.701393	.937522664
20	574.17928	.93667093
21	573.684641	.935864015
22	573.214918	.935097744
23	572.767886	.934368493
24	572.341605	.933673092
25	571.934363	.933008757
26	571.544667	.932373029
27	571.171163	.931763725
28	570.812664	.931178397
29	570.468101	.930616804
30	570.136515	.93007538
31	569.817038	.929554711
32	569.508389	.929052021
33	569.211356	.928566665
34	568.923793	.928097541
35	568.645607	.927643731
36	568.37626	.927204338
37	568.115253	.926778553
38	567.862132	.926365631
39	567.616475	.925964886
40	567.377895	.925575685
41	567.146031	.925197441
42	566.920552	.924829611
43	566.701147	.924471691
44	566.487528	.92412321
45	566.279427	.92378373
46	566.076594	.923452844
47	565.878794	.92313017
48	565.685808	.922815348
49	565.497432	.922508046
50	565.313472	.922207947
51	565.133746	.921914757
52	564.958085	.921628197
53	564.786327	.921348006
54	564.618322	.921073935
55	564.453926	.920805752
56	564.293005	.920543237
57	564.135428	.92028618
58	563.981077	.920034384
59	563.829837	.919787662
60	563.681598	.919545836
61	563.536256	.919308738
62	563.393715	.919076207
63	563.25388	.91884809
64	563.116661	.918624243
65	562.981976	.918404528
66	562.849741	.918188812
67	562.719882	.917976969
68	562.592324	.91776888
69	562.466996	.917564431
70	562.343832	.917363511
71	562.222768	.917166015
72	562.10374	.916971844
73	561.986692	.916780901
74	561.871567	.916593094



TAMAÑO ESCALA X=5      TAMAÑO ESCALA Y=.000000007  
 X = PASO #  
 Y1 = CONC.(....)  
 Y2 = ( - ) Temperatura/613

2.7.3.- ANHIDRIDO ACETICO ES HIDROLIZADO EN TRES REACTORES DE TANQUE AGITADO QUE OPERAN EN SERIE. SUPONGA QUE EL VOLUMEN EN CADA REACTOR ES DE 1800 CM<sup>3</sup> Y QUE LA TEMPERATURA ES CONSTANTE, T= 25 GRADOS CENTIGRADOS Y LA ALIMENTACION AL PRIMER REACTOR ES DE 582 CM<sup>3</sup>/MIN.

CALCULESE CUAL ES EL % DE HIDROLISIS EN LOS TRES REACTORES.

NOTA: LA RAPIDEZ R = 0.1580 C<sub>a</sub> (A 25 GRADOS CENTIGRADOS).

DONDE : C<sub>a</sub> ES LA CONCENTRACION DE ANHIDRIDO ACETICO EN GMOL/CM<sup>3</sup>.

SUPONGA QUE LAS DENSIDADES DE REACTIVOS Y PRODUCTOS SON IGUALES.

SOLUCION :

EL MODELO MATEMATICO DE LOS 3 TANQUES ESTA REPRESENTADO POR LAS SIGUIENTES ECUACIONES :

$$\begin{aligned} 1.4886 X_1 + 0 X_2 + 0 X_3 &= 0.4886 \\ - X_1 + 1.4886 X_2 + 0 X_3 &= 0.4886 \\ 0 X_1 + - X_2 + 1.4886 X_3 &= 0.4886 \end{aligned}$$

SE APLICARA LA TECNICA DE GAUSS-JORDAN.

JPRINT CHR\*(9); "e5N"

JRUN

EN LINEA 5 EN UN DATA TIPEE  
LOS COEFICIENTES DE CADA ECUACION

NUMERO DE ECUACIONES =? 3  
SOLUCION DEL SISTEMA :

$\lambda(1) = -1.82242$

$\lambda(2) = 4.72987$

$\lambda(3) = 3.505e2$

]

]

]

LISTE

5 DATA 1.488e, 0, 0.488e, -1, 1, .488e, 0, .488e, 0, -1, 1.488e, .488e

2.7.4.- LEYES Y OSMER ESTUDIARON LA FORMACION DEL ACETATO DE BUTILO EN UN REACTOR INTERMITENTE A 100 GRADOS CENTIGRADOS LA ALIMENTACION CONTIENE 4.97 MOLES DE BUTANOL/MOL DE CH<sub>3</sub>COOH UTILIZANDO COMO CATALIZADOR H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> AL 0.032% EN PESO, LA ECUACION DE RAPIDEZ DE REACCION QUE SE OBTUVO ES LA SIGUIENTE :

$$R = k \cdot C_a^{*2}$$

DONDE :

C<sub>a</sub> = CONCENTRACION DE CH<sub>3</sub>COOH EN GMOL/ML.

R = GMOL DE CH<sub>3</sub>COOH PRODUCIDO/ML.\*MINUTO

k = 17.4 CM<sup>3</sup>/GMOL \* MIN

DENSIDAD = 0.75 G/CM<sup>3</sup>

CALCULE EL TIEMPO REQUERIDO PARA OBTENER UNA CONVERSION DEL 50%, 60%, 75%, Y 95%

SOLUCION :

LA ECUACION REPRESENTATIVA DE ESTE REACTOR ES :

$$T = \frac{1}{k(C_{A0})} \int_0^{X1} \frac{dx}{(1-X)^2}$$

SE UTILIZARA LA TECNICA DE RUNGE-KUTTA DE 4TO. ORDEN.

JPRINT CHR\$(9); "65N"

LOAD SUPER RUNGE-KUTTA MULTIC. II

JRUN

=====RUNGE-KUTTA CUARTO ORDEN=====

SELECCIONE OPCION:

1.- INTEGRACION

2.- RESOLUCION ECU.DIFERENCIALES

NUMERO DE OPCION=22

METODO DE RUNGE-KUTTA CUARTO ORDEN PARA RESOLVER MAXIMO 5 ECUACIONES DIFERENCIALES DE PRIMER ORDEN, DE LA FORMA:

$dy_1 / dx = f_1$

$dy_2 / dx = f_2$

$dy_3 / dx = f_3, \dots$  ETC.

SI LOS MODELOS  $f_1, f_2, f_3, \dots$  ETC. DEPENDEN EXPLICITAMENTE DE LAS VARIABLES DE PENDIENTES, MANEJE DICHAS VARIABLES COMO  $yy(1), yy(2), yy(3), \dots$  ETC. LA VARIABLE INDEPENDIENTE MANEJELA COMO  $xx$ .

DISPONE DE TRES VARIABLES AUXILIARES  $t_1, t_2, t_3$ , LAS CUALES PUEDE UTILIZAR AL ESTRUCTURAR SUS FUNCIONES  $f_1, f_2, \dots$  POSTERIORMENTE LAS DEFINIRA.

NUMERO DE ECUACIONES A RESOLVER=1

$xx$ = VARIABLE INDEPENDIENTE

$yy(1)$ = VARIABLE DEPENDIENTE ECUACION 1

$t_1, t_2, t_3$  =VARIABLES AUXILIARES

A CONTINUACION TECLEARA LA(S) FUNCION(ES) :  $f_1, \dots$  A RESOLVER

JPRINT CHR\$(9); "65N"

JLIST105

105 DEF FN F1(X) = 1 / (17.4 \* .001753 \* (1 - X) ^ 2)

JRUN 104

INTERVALO VARIABLE INDEPENDIENTE:

VALOR INICIAL= 0

VALOR FINAL= .7

NUMERO DE INCREMENTOS = 7

VALOR INICIAL VARIABLE DEPENDIENTE 1= 0

NOMBRE VARIABLE INDEPENDIENTE:CONVERSION

NOMBRE VARIABLE DEPENDIENTE 1:TIEMPO(MINUTOS)

UTILIZARA IMPRESORA(SI O NO)?SI

PR#1

SOLUCION:

CONVERSION	TIEMPO(MINUTOS)
------------	-----------------

0	0
---	---

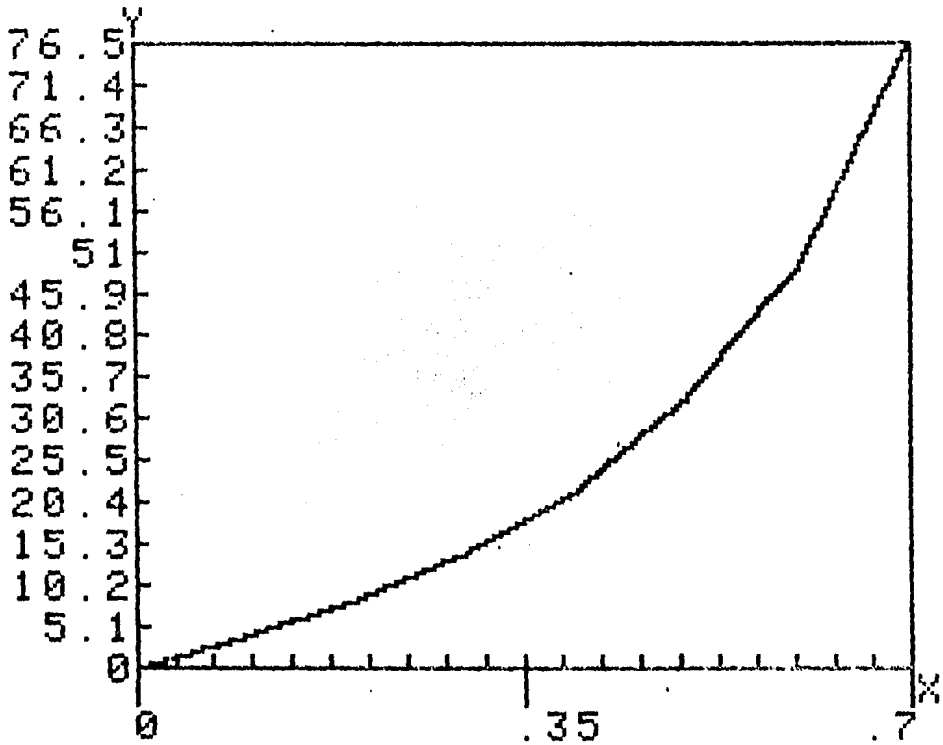
.1	3.64274318
----	------------

.2	8.19613528
----	------------



## INTRODUCCION:

CONVERSION	TIEMPO
0	0
.1	3.64274318
.2	8.19618528
.3	14.0506414
.4	21.8566629
.5	32.7853381
.6	49.1792848
.7	76.5074625



TAMAÑO ESCALA X=.035

TAMAÑO ESCALA Y=5.1004975

X = CONVERSION

Y1 = TIEMPO( - )

"EXPERIENCIA ES EL NOMBRE  
QUE LE DA TODO EL MUNDO  
A SUS ERRORES"

(OSCAR WILDE)

## M E Z C L A D O

ESTE CAPITULO ESTA BASADO EN LO PROPUESTO POR SMITH PARA ANALIZAR EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR Y CORREGIR LA CONVERSION DE REACTIVOS EN UN REACTOR.

LO ANTERIOR SUPONE QUE SE CUENTAN CON DATOS EXPERIMENTALES A NIVEL PLANTA PILOTO PARA ESTUDIAR EL GRADO DE MEZCLADO EN UN REACTOR, DE TAL MANERA QUE CONSIDERANDO EL COMPORTAMIENTO IDEAL, EN EL DISEÑO SE INTRODUZCA EL EFECTO DEL MEZCLADO PARA CALCULAR, EL GRADO DE CONVERSION Y ESTO SUPONE QUE MEDIANTE LA TEORIA DE LA SIMILITUD SE ESCALEN LOS RESULTADOS AL TAMAÑO DE UN REACTOR COMERCIAL

### 3.1.- ANALISIS DE MEZCLADO

EXISTEN BASICAMENTE 2 PROCEDIMIENTOS QUE SE UTILIZAN COMUNJENTE PARA EL ANALISIS DE MEZCLADO O GRADO DE DISPERSION DE UNA MEZCLA. AMBOS PROCEDIMIENTOS SE BASAN EN LA ALIMENTACION DE UN TRAZADOR (COMPONENTE QUIMICO INERTE) AL REACTOR QUIMICO Y A CONTINUACION SE MIDE LA RESPUESTA DEL REACTOR, TIEMPO CONTRA COMPOSICION DEL TRAZADOR EN LA CORRIENTE DE DESCARGA.

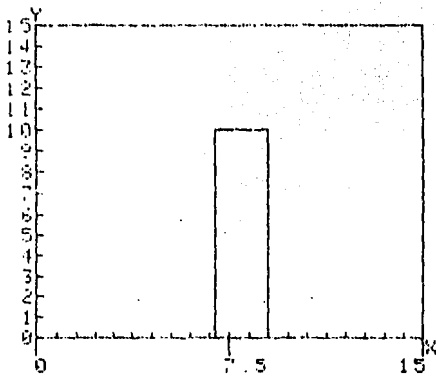
A) ALIMENTACION DE TRAZADOR EN FORMA DE FUNCION PULSO.

EN ESTE PROCEDIMIENTO SE ALIMENTA RAPIDAMENTE UNA CANTIDAD INICIAL DE TRAZADOR AL REACTOR, Y SE INICIA LA MEDICION DEL TRAZADOR CONFORME ESTE SE VA DESCARGANDO.

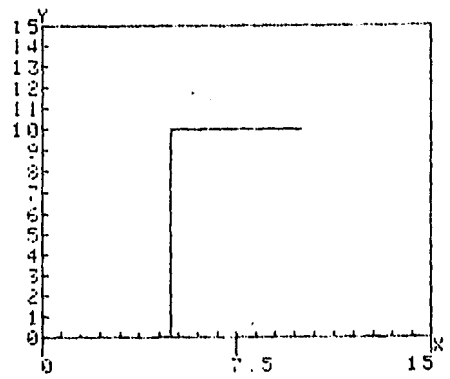
B) ALIMENTACION DE TRAZADOR EN FORMA DE FUNCION ESCALON.

A LA CORRIENTE DE ALIMENTACION DEL REACTOR SE LE ADICIONA UNA CORRIENTE LA CUAL ALIMENTA TRAZADOR DICHA CORRIENTE SE MANTIENE CONSTANTE DURANTE LOS EXPERIMENTOS.

LAS GRAFICAS REPRESENTATIVAS DE CADA TIPO DE ALIMENTACION SON LAS SIGUIENTES :

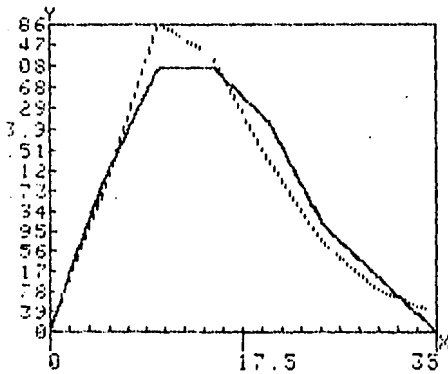


Función Pulso.

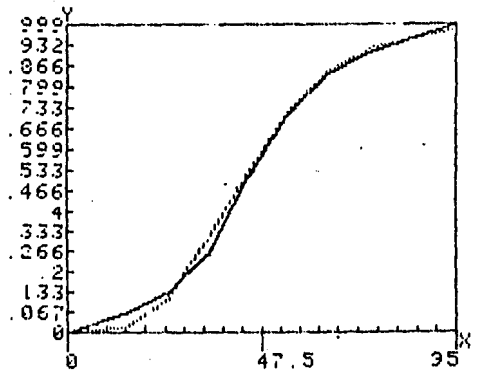


Función Escalón.

Las gráficas representativas de las respuestas de Reactor con Respecto al Tiempo son las siguientes (concentración de trazador descargado contra Tiempo).



Función Pulso



Función Escalón.

## 3.1.1.- TRATAMIENTO DE DATOS EXPERIMENTALES.

PARA ANALIZAR EL COMPORTAMIENTO REAL DE UN REACTOR MEDIANTE EL ANALISIS DE DATOS EXPERIMENTALES DE COMPOSICION DE TRAZADOR, CON RESPECTO AL TIEMPO EN LA CORRIENTE DE DESCARGA, SE HA DESARROLLADO UNA TECNICA QUE SE BASA EN LA DEFINICION DE LA FUNCION DISTRIBUCION TIEMPO DE RESIDENCIA.

DICHA FUNCION SE DEFINE COMO :  $J(t)$

PARA LA FUNCION ESCALON :

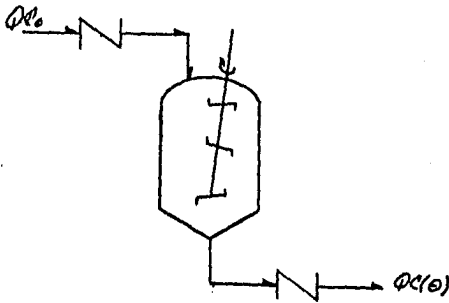
$$J(t) = \frac{\text{CANTIDAD DE TRAZADOR DESCARGADA EN EL INSTANTE (t)}}{\text{CANTIDAD DE TRAZADOR ALIMENTADA EN ESE INSTANTE}}$$

PARA LA FUNCION PULSO.

$$J(t) = \frac{\text{CANTIDAD DE TRAZADOR DESCARGADA HASTA EL INSTANTE (t)}}{\text{CANTIDAD DE TRAZADOR ALIMENTADA INICIALMENTE.}}$$

DONDE  $(t)$  --> ES EL TIEMPO DE RESIDENCIA CORRESPONDIENTE A CADA FRACCION  $J(t)$ .

3.1.1.1.- FUNCION DISTRIBUCION CONTRA TIEMPO DE RESIDENCIA PARA LA FUNCION ESCALON.

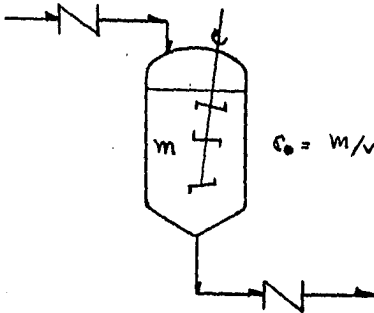


$$f(\theta) = \frac{dc(t)}{dc_0} = \frac{c(t)}{c_0}$$

DONDE:

$c(t)$  -- SE REFIERE A LA CONCENTRACION DE TRAZADOR.

3.1.1.2.- FUNCION DISTRIBUCION CONTRA TIEMPO DE RESIDENCIA PARA LA ALIMENTACION DE TRAZADOR EN FUNCION PULSO.



PARA  $c_0=0$ ; CANTIDAD DE TRAZADOR ALIMENTADA =  $m$

$$f(\theta) = \int_0^{\theta} q c(\theta) * d\theta / m = \frac{\int_0^{\theta} q c(\theta) d\theta}{\int_0^{\infty} q c(\theta) d\theta}$$

SI SE DEFINE

$$C_0 = \frac{M}{V_{(TOTAL REAL)}} \quad \text{y} \quad \bar{\theta} = \frac{V}{Q} = \text{TIEMPO DE RESIDENCIA PROMEDIO}$$

DEFINIENDO TAMBIEN UNA  $J <\theta>$  DONDE ESTA FUNCION ES LA DERIVADA DE  $J <\theta>$  CON RESPECTO AL TIEMPO SE OBTIENE :

$$f'(\theta) = \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} = \frac{q * c(\theta)}{m} = \frac{c(\theta) * q * V}{m * V} = \frac{c(\theta)}{C_0 \bar{\theta}}$$

### 3.2.- ANALISIS DE MEZCLADO EN REACTORES DE TANQUE AGITADO.

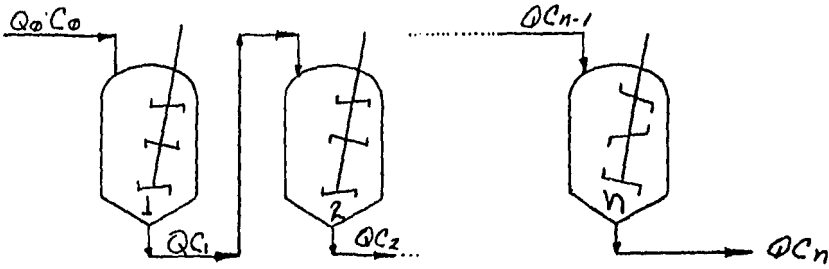
SI UN REACTOR DE TANQUE AGITADO NO ESTA PERFECTAMENTE MEZCLADO, EXISTEN ZONAS DE LIQUIDO DENTRO DEL RECIPIENTE LAS CUALES TIENEN DIFERENTES TIEMPOS DE RESIDENCIA, ENTONCES PARA APROXIMARSE AL COMPORTAMIENTO DE ESTE REACTOR, SE SUPONE QUE ESTE REACTOR REAL ESTA REPRESENTADO POR UN CONJUNTO DE  $\langle N \rangle$  REACTORES IDEALES, EN SERIE. LA SUMA DE LOS VOLUMENES DE LOS  $\langle N \rangle$  REACTORES IDEALES, DEBE SER IGUAL AL VOLUMEN DEL REACTOR REAL Y DICHO NUMERO DE REACTORES IDEALES SE DETERMINA POR COMPARAR LA FUNCION TIEMPO DE RESIDENCIA EXPERIMENTAL CONTRA LA FUNCION TIEMPO DE RESIDENCIA CALCULADA, A TRAVES DEL PARAMETRO ESTADISTICO SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS, PARA CADA CONJUNTO DE  $\langle N \rangle$  REACTORES SUPUESTOS.

#### 3.2.1.- FUNCION DISTRIBUCION TIEMPO DE RESIDENCIA PARA $\langle N \rangle$ REACTORES IDEALES.

- 1) FUNCION ESCALON.
- 2) FUNCION PULSO.

##### 3.2.1.1.- ANALISIS PARA LA FUNCION ESCALON.

SUPONGA UN CONJUNTO DE  $N$  REACTORES IDEALES EN SERIE :



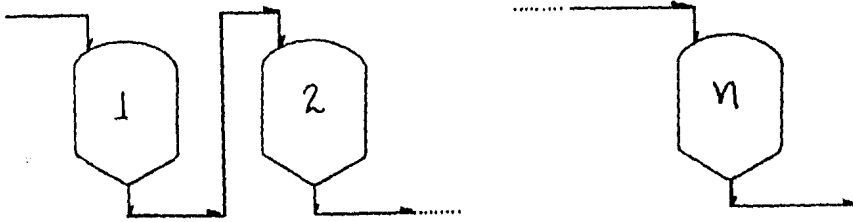
LA SOLUCION GENERAL DE ESTA FUNCION ES LA SIGUIENTE:

$$\frac{C_n}{C_0} = f_n(\theta) = 1 - \sum_{i=1}^n \left( \frac{\theta^{(i-1)} * e^{-n\theta/\bar{\theta}}}{(i-1)! * \bar{\theta}^{(i-1)}} \right)$$

DÓNDE:

- <θ> = TIEMPO AL CUAL SE REALIZA LA MEDICION.
- <θ̄> = TIEMPO DE RESIDENCIA PROMEDIO.
- <n> = NUMEROS DE REACTORES PROMEDIO IDEALES SUPUESTOS.
- <Cn> = CONC. DE TRAZADORAL TIEMPO T PARA N REACTOR.
- <C0> = CONC. INICIAL DE TRAZADOR.

3.2.1.2.-ANALISIS PARA LA FUNCION PULSO:



A TIEMPO=0 EXISTE UNA CANTIDAD M DE TRAZADOR DENTRO DEL REACTOR.

SUPONGA UN CONJUNTO N DE REACTORES IDEALES EN SERIE CUYA ECUACION GENERAL SERA LA SIGUIENTE:

$$C_0 = \frac{M}{V_{REAL\ TOTAL}}$$

$$\frac{C_n}{C_0} = f'(\theta) \bar{\theta} = \frac{n^n * \bar{\theta}^{(n-1)} * e^{-\frac{n\theta}{\bar{\theta}}}}{(n-1)! * \bar{\theta}^{(n-1)}}$$

$$f'(\theta) = \frac{C_n}{C_0 \bar{\theta}}$$

### 3.3.- ANALISIS DE DISPERSION DE REACTORES TUBULARES.

EXISTEN 2 TIPOS DE MODELOS BASICOS PARA EL ESTUDIO DEL GRADO DE DISPERSION EN UN REACTOR TUBULAR:

- 1) MODELO DE REACTOR TUBULAR A REGIMEN LAMINAR .
- 2) MODELO DE REACTOR TUBULAR CON DISPERSION AXIAL.

#### 3.3.1.- REACTOR TUBULAR A REGIMEN LAMINAR.



EN ESTE MODELO SE ACEPTA QUE HAY DISPERSION RADIAL PERO NO HAY DISPERSION AXIAL.

DE ESTA MANERA PARA EVALUAR  $J(\theta)$ , EN ESTE MODELO (REGIMEN LAMINAR) LA ECUACION GENERAL ES :

$$\frac{C_n / z + \Delta z}{C_0 / z} = f(\theta) = 1 - \frac{1}{4} \left( \frac{\theta}{\theta} \right)^{-2}$$

DONDE:

$J(\theta)$  = FUNCION TIEMPO DE RESIDENCIA.

$\langle \theta \rangle$  = TIEMPO O.T.

$\langle Q \rangle$  =  $V/Q$ .

3.3.2.- MODELO DE REACTOR TUBULAR CON DISPERSION AXIAL.

DEL BALANCE DE MATERIA CONSIDERANDO DIFUSION AXIAL SE OBTIENE LA SIGUIENTE ECUACION :

$$\pi r_0^2 \Delta z c = \left[ \left( -D_{AX} \frac{\partial c}{\partial z} + v c \right) \pi r_0^2 \right] \Delta \theta - \left[ \left( -D_{AX} \frac{\partial c}{\partial z} + v c \right) \pi r_0^2 \right] \Delta \theta$$

CANCELANDO EL TERMINO  $\pi r_0^2$  EN AMBOS TERMINOS DE LA ECUACION Y DIVIDIENDO LA EC ENTRE EL INCREMENTO DE Z Y EL INCREMENTO DE TIEMPO ASI COMO TOMANDO EL LIMITE  $\Delta z \rightarrow 0$  LA ECUACION SE TRANSFORMA A :

$$D_{AX} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial c}{\partial \theta}$$

LA SOLUCION A ESTA EC. DIFERENCIAL ES:

$$C' = \frac{C_0}{2} \left[ 1 - f_{err} \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{v_L}{D_{Ax}}} \frac{1 - \theta/\bar{\theta}}{\sqrt{\theta/\bar{\theta}}} \right) \right]$$

DONDE F(ERR)=FUNCION ERROR.

$$f_{err} = \frac{2}{\pi} * \int_0^y e^{-x^2} dx$$

$$f_{err} = 1 - (2 * e / C_0)$$

#### 3.4.- TECNICAS MATEMATICAS PROPUESTAS.

PARA EL CALCULO DEL TIEMPO DE RESIDENCIA MEDIO O PROMEDIO DEL REACTOR REAL, DADA LA DISPONIBILIDAD DE INFORMACION EXPERIMENTAL DE CONCENTRACION VS TIEMPO, SE PUEDE UTILIZAR LA REGLA DE SIMPSON. PARA RESOLVER LA INTEGRAL EN LOS 4 TIPOS REACTORES QUIMICOS HOMOGENEOS.

$$\bar{\theta} = \frac{\int_{C_0}^{C_n} \theta * dc}{C_n - C_0}$$

EN REACTORES DE TANQUE AGITADO CON ALIMENTACION DE TRAZADOR, PULSO, LA EVALUACION DE LA FUNCION DISTRIBUCION TIEMPO DE RESIDENCIA, IMPLICO RESOLVER LA INTEGRAL :

$$f(\theta) = \int_0^{\theta} d f'(\theta) d\theta$$

EN FORMA ACUMULATIVA, PARA CADA INTERVALO DE TIEMPO, ESTO INDIJO A SELECCIONAR LA REGLA DEL TRAPEZIO COMO LA TECNICA NUMERICA PARA SU SOLUCION.

PARA RESOLVER EL REACTOR DE DISPERSION SE APLICÓ LA TECNICA DE RUNGE-KUTTA DE 4TO. ORDEN, LA CUAL PERMITIÓ CALCULAR UN COEFICIENTE DE DISPERSION AXIAL PARA CADA JUEGO DE DATOS EXPERIMENTALES Y MEDIANTE EL TEOREMA DEL VALOR MEDIO INTEGRAL Y LA REGLA DEL TRAPEZIO SE OBTUVO UN COEFICIENTE DE DISPERSION AXIAL PROMEDIO, REPRESENTATIVO DE TODOS LOS DATOS.

CON EL VALOR PROMEDIO DEL COEFICIENTE DE DISPERSION SE RESOLVIÓ NUEVAMENTE LA ECUACION, QUE DEFINE A  $C_n/C_0$  PARA EL REACTOR DE DISPERSION, UTILIZANDO UN RUNGE-KUTTA DE 4TO. ORDEN.

3.5.- LISTADOS DE PROGRAMAS EN BASIC.

3.6.- APLICACIONES.

## 3.5.- Programas.

REAL FUNCION RTD (TIEMPO DE RESIDEN  
 CLIST

```

5 D# = CHR# (15) + CHR# (4); IF# = D# + "FR#1"; FI# = D# + "FR#0"
: HOME : PRINT "CALCULO DE LA FUNCION DISTRIBUCION TIEM-POS DE RE
SIDENCIA.MODELO DE REACTOR QUE REPRESENTA A LOS DATOS EXPERIMENTA
LES."
10 PRINT : PRINT : PRINT "SELECCIONE OPCION:" : PRINT : PRINT : P
RINT "1.- TECLAREA DATOS A ANALIZAR.": PRINT : PRINT "2.- LEERA D
ATOS DE DISCO(DRABADOS EN CO- RRIDA ANTERIOR).": PRINT : PRINT
: INPUT "TECLEE NUMERO DE OPCION:";O#: IF VAL (O#) < 1 OR VAL
(O#) > 2 GOTO 5
20 AA# = " " : ON VAL (O#) GOTO 30,17000
30 ONERR GOTO 18000
40 GOTO 10000
100 HOME : INVERSE : PRINT "SELECCIONE LA OPCION ":" NORMAL : PR
INT : PRINT "1.- RTA (ALIMENTACION PULSO)": PRINT : PRINT "2.- RT
A (ALIMENTACION ESCALON.": PRINT : PRINT "3.- REACTOR TUBULAR FLU
JO LAMINAR": PRINT : PRINT "4.-REACTOR TUBULAR CON DISPERSION (AI
AL)": PRINT : PRINT
110 PRINT D#;FI#: PRINT "OPCION SELECCIONADA = ": INPUT OP: ON
OP GOTO 1000,2000,3000,4000
1000 DIM JC(30,ND),SR(30),JT(ND);S = 0: FOR I = 1 TO ND:S = S +
(JE(I) + JE(I - 1)) / 2 * (T(I) - T(I - 1));JT(I) = S: NEXT I: FO
R I = 1 TO ND:JT(I) = JT(I) / S: NEXT I
1025 TM = 0: FOR I = 1 TO ND:TM = TM + (T(I) + T(I - 1)) / 2 * (J
T(I) - JT(I - 1)): NEXT I
1030 HOME : FOR M = 1 TO 30: VTAB (5): HTAB (1): PRINT "ANALIZAN
DO ";M;" REACTOR(ES) " :K = M - 1: GOSUB 10000;SR(M) = 0;CO = 0
* M / TM
1050 FOR I = 1 TO ND:JC(M,I) = (M * T(I) / TM) * (M - 1) / FAC *
( EXP ( - M * T(I) / TM)) * CO;SR(M) = SR(M) + (JC(M,I) - JE(I))
/ 2: NEXT I: IF M > 1 AND SR(M - 1) < SR(M) THEN GOTO 1055
1051 NEXT M
1055 HOME : INPUT " DESEA INPRIMIR SUS DATOS EN PAPEL
(SI O NO) ? ";A#:GL# = A#: IF A# = "NO" THEN IF# = FI#
1060 PRINT IF#: HOME : PRINT "": PRINT "EL REACTOR REAL SE COMPO
RTA COMO ";M - 1;" REAC-TORES IDEALES": PRINT "": PRINT "": PRINT
"LA SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS DE (J(CALC)-J(EXP)) ^ 2 ES IGUAL A
=";SR(M - 1): PRINT
1065 PRINT "LOS RESULTADOS PARA EL MODELO DE ";M - 1;" REAC-TORE
S IDEALES SON LOS SIGUIENTES : " : PRINT "": PRINT "": PRINT : PRI
NT PI#: INVERSE : PRINT "PARA CONTINUAR OPRIMA CUALQUIER TECLA " :
GET A#: NORMAL : PRINT IF#: HOME
1069 HOME : PRINT "LOS RESULTADOS SON LOS SIGUIENTES ":" : PRINT :
PRINT CHR# (7): PRINT " DATO ! TIEMPO ! CONC. CALC. ! CONC. EXP
": PRINT : FOR I = 1 TO ND: HTAB 2: PRINT I: HTAB 3: PRINT T(I)
: HTAB 17: PRINT JC(M - 1,I): HTAB 33: PRINT JE(I): NEXT I: PRI
N
070 PRINT " CO=";CO: PRINT " TM=";TM: PRINT
071 PRINT PI#: INVERSE : PRINT "PARA CONTINUAR OPRIMA CUALQUIER
TECLA": GET A#: NORMAL : PRINT IF#: HOME : PRINT : FOR I = 1 TO
: PRINT "SR(";I;") = ";SR(I): NEXT I
080 PRINT PI#: INPUT "DESEA GRAFICAR SUS RESULTADOS (SI O NO) ?
";A#: IF A# = "NO" THEN GOTO 2200
090 GOSUB 25000
100 ONERR GOTO 30000
101 DIM JC(30,ND),SR(30): GOSUB 5000:M = 1: GOSUB 5050: FOR I =
TO ND:JE(I) = JE(I) / CO: NEXT I
30 FOR I = 1 TO ND:JC(M,I) = 1 - ( EXP ( - T(I) / TM)): NEXT I

```

```

0040 HOME : VTAB 5: HTAB 1: PRINT "ANALIZANDO PARA ":M:" REACTOR
0041 " :SR(M) = 0: FOR I = 1 TO ND:SR(I) = SR(M) + (JC(M,I) - JE
0042 I) ^ 2: NEXT I
0045 IF M > 1 AND SR(M - 1) < SR(M) THEN GOTO 2055
0050 M = M + 1: FOR J = 1 TO ND:S = 0: FOR K = 1 TO M - 1: GOSUB
00600:S = S + (M * T(J) / TM) ^ K / FAC: NEXT K:JC(M,J) = 1 - EA
0061 ( - M * T(J) / TM) - EXP ( - M * T(J) / TM) * S: NEXT J: GOTO
0040
0055 HOME : INPUT " DESEA IMPRIMIR SUS DATOS EN PAPEL
0056 (SI O NO)?":A$:GL$ = A$: IF A$ = "NO" THEN IP$ = P1$
0060 PRINT IP$: HOME : PRINT "": PRINT "EL REACTOR(REAL) SE COMP
0061 ARTA COMO ":M - 1:" REACTORES IDEALES": PRINT "": PRINT ""
0065 PRINT "LA SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS DE(J(CALC)-J(EXP)) ^ 2
0066 ES IGUAL A ":SR(M - 1): PRINT : PRINT : PRINT "LOS RESULTADOS
0067 PARA EL MODELO DE ":M - 1:" REACTORES IDEALES SON LOS SIGUIENTES
0068 "": PRINT : PRINT
0070 PRINT : PRINT P1$: INVERSE : PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE
0071 CUALQUIER TECLA": GET A$: NORMAL : PRINT IP$: HOME
0075 HOME : PRINT "LOS RESULTADOS SON LOS SIGUIENTES ": PRINT :
0080 FOR W = 1 TO 3: PRINT CHR$ (7): NEXT W: PRINT "DATO(TIEMPO! CON
0081 C. CALC ! CONC. EXP ": PRINT : FOR I = 1 TO ND: HTAB 2: PRINT I:
0082 HTAB 3: PRINT T(I): HTAB 14: PRINT JC(M - 1,I): HTAB 23: PRINT
0083 JE(I): NEXT I: PRINT
0087 PRINT : PRINT "CO=":CO: PRINT "TIEMPO DE RESIDENCIA PROMEDI
0088 O=":TM: PRINT : PRINT : PRINT P1$: PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE
0089 CUALQUIER TECLA": GET A$: PRINT IP$: HOME
0095 FOR I = 1 TO M: PRINT "SR(":I:")=":SR(I): NEXT I: PRINT P1$
0096 : INVERSE : PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA": GET
0097 A$: NORMAL : HOME : INPUT "DESEA GRAFICAR SUS RESULTADOS (SI O NO
0098 )?":A$: IF A$ = "NO" THEN GOTO 2200
0099
0105 PRINT : PRINT "CO=":CO: PRINT "TM=":TM: PRINT : PRINT
0110 GOSUB 25000
0115 HOME : INVERSE : PRINT " GRACIAS ...FIN DE SESION ": PR
0116 INT : NORMAL : PRINT " HASTA LUEGO O HASTA TU PROXIMA TAREA ":
0117 END
0120 PRINT CHR$ (7): PRINT CHR$ (7): PRINT "": PRINT : DIM SR(
0121 I),JC(I,ND)
0125 CO = JE:ND: GOSUB 5000:SR(I) = 0: FOR I = 1 TO ND:JC(I,I) =
0126 1 - (((T(I) / TM) ^ - 2) / 4):SR(I) = SR(I) + (JC(I,I) - JE(I))
0127 ^ 2: NEXT I:M = 2
0130 HOME : INPUT " DESEA IMPRIMIR SUS DATOS EN PAPEL
0131 (SI O NO)?":A$:GL$ = A$: IF A$ = "NO" THEN IP$ = P1$
0135 PRINT IP$: PRINT "LA SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS ES IGUAL A "
0136 : PRINT : INVERSE : HTAB 10: PRINT SR(I): NORMAL : PRINT : PRINT
0137 : PRINT "LOS RESULTADOS PARA EL MODELO DE 1 REAC-TOR TUBULAR (A R
0138 EGIMEN LAMINAR) SON ": PRINT : PRINT
0140 PRINT : PRINT P1$: INVERSE : PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE
0141 CUALQUIER TECLA": GET A$: NORMAL : PRINT IP$: HOME
0145 PRINT "LOS RESULTADOS SON LOS SIGUIENTES": PRINT : PRINT "
0146 DATO(TIEMPO! CONC. CALC. ! CONC. EXP ": PRINT : FOR I = 1 TO ND:
0147 HTAB 2: PRINT I: HTAB 3: PRINT T(I): HTAB 14: PRINT JC(1,I): H
0148 TAB 23: PRINT JE(I): NEXT I: PRINT : PRINT "CO=":CO: PRINT "TIEMP
0149 O DE RESIDENCIA PROMEDIO=":TM
0155 PRINT : PRINT P1$: INVERSE : INPUT "DESEA GRAFICAR SUS RESU
0156 LTADOS (SI O NO)?":A$: NORMAL : IF A$ = "NO" THEN GOTO 2200
0160 GOSUB 25000
0165 PRINT CHR$ (7): CHR$ (7): CHR$ (7): I1$ = "...ITERACION NO
0166 .": DIM DM(30),SR(30): DIM DV(ND),JC(30,ND):CO = JE(ND):NN = 1: I
0167 F T(1) = 0 THEN NN = 2

```

```

4010 GOSUB 5000: FOR I = 1 TO ND:JE(I) = JE(I) / CO: NEXT I
4020 DEF FN F(X) = SQR (.31416) * EXP (X ^ 2)
4030 HOME : FOR I = NN TO ND:DJ = (.5 - JE(I)) / 5:JT = JE(I):X
= 0: GOSUB 11000
4040 DV(I) = (1 / (2 * X) * (1 - JT) / TM) / SQR (T(I) / TM) ^
2: NEXT I
4045 FOR ALFA = 0 TO 30:DV(I) = DV(NN) * (1 + ALFA * (NN - 1)):
HOME : PRINT TAB( 12):"ITERACION NUMERO":ALFA + 1
4050 DM(CAL) = 0: FOR I = 1 TO ND - 1:DM(CAL) = DM(CAL) + (DV(I) + D
V(I + 1)) / 2 * (JE(I + 1) - JE(I)): NEXT I:DM(CAL) = DM(CAL) / (JE
(NN) - JE(1))
4060 DEF FN F(X) = EXP (- 1 * X ^ 2): FOR I = NN TO ND:OF =
S * SQR (1 / DM(CAL)) * (1 - T(I) / TM) / SQR (T(I) / TM):DJ =
(JF) / 5:JT = 0:X = 0: GOSUB 11010:X = X * 2 / SQR (.31416):J(CAL
FA,I) = (1 - X) / 2: NEXT I:
4100 S = 0: FOR I = 1 TO ND:S = S + (J(CALFA,I) - JE(I)) ^ 2: NEA
T I
4150 M = ALFA:SR(CALFA) = S: IF ALFA > 0 THEN IF SR(CALFA - 1) < S
R(CALFA) GOTO 4200
4160 NEXT ALFA
4200 HOME : INVERSE : PRINT "LOS RESULTADOS OBTENIDOS PARA UN RE
ACTORTUBULAR CON DISPERSION AXIAL SON LOS SIGUIENTES :
": NORMAL : PRINT : PRINT :
4210 INPUT " DESEA IMPRIMIR SUS RESULTADOS EN PAPEL
(SI O NO)":A$:GL$ = A$: IF A$ = "NO" THEN IF$ = FI$
4230 PRINT IP$: PRINT " TIEMPO":: HTAB 13: PRINT "COEF. DE DISP
.": PRINT : FOR I = 1 TO ND: PRINT TAB( 3):T(I): TAB( 15):DV(I):
NEXT I: PRINT : PRINT "COEF. DE DISPERSION PROMEDIO =" : D
M(CAL - 1): PRINT
4231 PRINT FI$: INVERSE : PRINT "PARA CONTINUAR OPRIMA CUALQUIER
TECLA": GET A$: NORMAL : PRINT IP$
4240 HOME : PRINT : HTAB (3): PRINT "TIEMPO": TAB( 15):"JC":AL
- 1,1): TAB( 30):"JE(I)": FOR I = 1 TO ND: PRINT TAB( 3):T(I)
: TAB( 15):J(CAL - 1,I): TAB( 30):JE(I): NEXT I
1250 PRINT : PRINT "SUM. RES. DE CUAD.=":SR(CALFA - 1): PRINT "CO
":CO: PRINT "TIEMPO DE RESIDENCIA PROMEDIO=":TM: PRINT
1260 PRINT D$:PI$: INPUT "DESEA GRAFICAR(SI O NO)?":A$: IF A$ =
"NO" THEN END
1270 GOSUB 25000
3000 DEF FN F1(I) = (T(I + 1) - T(I)) / (JE(I + 1) - JE(I)): DE
FN F2(I) = (T(I + 2) - T(I + 1)) / (JE(I + 2) - JE(I + 1)) -
T(I + 1) - T(I)) / (JE(I + 1) - JE(I)) / (JE(I + 2) - JE(I))
001 DEF FN F(I) = (T(I) - JE(I) * FN F1(I) + JE(I) * JE(I + 1
* FN F2(I)) * (JE(I + 2) - JE(I)) + ( FN F1(I) - (JE(I) + JE(I
+ 1)) * FN F2(I)) * (JE(I + 2) ^ 2 - JE(I) ^ 2) / 2 + FN F2(I)
* (JE(I + 2) ^ 3 - JE(I) ^ 3) / 3
010 HOME : PRINT "CALCULANDO TIEMPO DE RESIDENCIA PROMEDIO":TM
0: FOR I = 1 TO ND - 2 STEP 2:TM = TM + FN F(I): NEXT I: IF I
ND THEN TM = TM / (JE(ND) - JE(1)): RETURN
020 TM = TM + (T(ND) + T(ND - 1)) / 2 * (JE(ND) - JE(ND - 1)):TM
= TM / (JE(ND) - JE(1)): RETURN
250 DEF FN F1(I) = (JE(I + 1) - JE(I)) / (T(I + 1) - T(I)): DE
FN F2(I) = (JE(I + 2) - JE(I + 1)) / (T(I + 2) - T(I + 1)) -
JE(I + 1) - JE(I)) / (T(I + 1) - T(I)) / (T(I + 2) - T(I))
051 DEF FN F(I) = (JE(I) - T(I) * FN F1(I) + T(I) * T(I + 1)
FN F2(I)) * (T(I + 2) - T(I)) + ( FN F1(I) - (T(I) + T(I + 1)
* FN F2(I)) * (T(I + 2) ^ 2 - T(I) ^ 2) / 2 + FN F2(I) * (T(I
+ 2) ^ 3 - T(I) ^ 3) / 3
060 PRINT "CALCULANDO CO":CO = 0: FOR I = 1 TO ND - 2 STEP 2:CO
= CO + FN F(I): NEXT I: IF I = ND THEN CO = (CO + TM * (JE(ND)

```

```

    JE(I)) / (TND) - T(I)): RETURN
1070 CO = CO + (JE(ND) + JE(ND - 1)) / 2 * (TND) - T(ND - 1)): CO
    = CO / (TND) - T(1) - TM): RETURN
1000 FAC = 1: FOR I = 1 TO 4: FAC = FAC * I: NEXT I: RETURN
1100 VTAB 1: HTAB 1: PRINT "CALCULANDO COEF. DISP. AXIAL TIEMPO "
    :I:" ": FOR J = 1 TO 5:K1 = FN F(X):K2 = FN F(X + .5 * DJ):K
    3 = FN F(X + 1 * DJ):K4 = FN F(X + DJ * K3):X = X + (
    K1 + 2 * K2 + 2 * K3 + K4) / 6 * DJ:JT = JT + DJ: NEXT J: RETURN
11010 VTAB (3): HTAB 1: PRINT "CALCULANDO FUNCION TIEMPO DE RESI
    STENCIA PARA TIEMPO ":IAA%: FOR J = 1 TO 5:K1 = FN F(JT):K2 = F
    N F(JT + .5 * DJ):K3 = FN F(JT + .5 * DJ):K4 = FN F(JT + DJ):X
    = X + (K1 + 2 * K2 + 2 * K3 + K4) / 6 * DJ:JT = JT + DJ: NEXT J:
    RETURN
12000 HOME :CV = 1:CH = 1: INPUT "NUMERO DE DATOS EXPERIMENTALES
    =":ND: VTAB 20: HTAB 1: PRINT A%A%:A%A%:A%A%: DIM JE(ND),T(ND): FOR
    I = 1 TO ND: VTAB 8: PRINT "TECLEE CONJUNTO DE DATOS ":I:CV = 10
    : VTAB CV: PRINT "CONC. TRAZADOR ( O J(TETA) ) =":AA%:CV = 12: VT
    AB CV: PRINT "TIEMPO = ":AA%
12001 CV = 10:CH = 31: VTAB (10): HTAB (31): INPUT "":JE(I): VTAB
    (20): HTAB (1): PRINT A%A%:A%A%:A%A%:CV = 12:CH = 9: VTAB (12): HTA
    B (9): INPUT "":T(I): VTAB (20): HTAB (1): PRINT A%A%:A%A%:A%A%: NEA
    T I
12002 PRINT : PRINT D*"OPEN DAT": PRINT D*"DELETE DAT": PRINT D*
    "OPEN DAT": PRINT D*"WRITE DAT": PRINT ND: FOR I = 1 TO ND: PRINT
    JE(I):",":T(I): NEXT I: PRINT D*"CLOSE DAT": GOTO 100
17000 PRINT : PRINT D*"OPEN DAT": PRINT D*"READ DAT": INPUT ND:
    DIM JE(ND),T(ND): FOR I = 1 TO ND: INPUT JE(I),T(I): NEXT I: GOTO
    100
18000 VTAB (20): HTAB (1): PRINT "ERROR EN SUS DATOS.TECLEE NUEV
    AMENTE.": FOR J = 1 TO 5: PRINT CHR$(7): NEXT J: VTAB (CV): H
    TAB (CH): IF ND < 100 THEN RESUME
18001 VTAB (20): HTAB (1): PRINT "ESTA EXAGERANDO CON SU NUMERO
    DE DATOS.": FOR J = 1 TO 3: PRINT CHR$(7): NEXT J: PRINT : PR
    INT "RECONSIDERE Y MODIFIQUE ESTE NUMERO.": PRINT "PARA CONTINUAR
    PRESIONE CUALQUIER TECLA.": GET A%: GOTO 12000
25000 PRINT D*"OPEN DATOS": PRINT D*"WRITE DATOS": PRINT ND:",":
    3:",":GL%: PRINT "TIEMPO": PRINT "CONC. (CALC)": PRINT "CONCENTRA
    CION (EXP)"
25001 FOR I = 1 TO ND: PRINT T(I): PRINT JE(I) - 1. I): PRINT JE(I
    ): NEXT I: PRINT D*"CLOSE DATOS": PRINT D*"RUN PLOT/MINIMOS"
30000 PRINT " SUS DATOS NO CORRESPONDEN A UNA FUNCION ESCALON ":
    PRINT : PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA": GET A%:
    RUN

```

3.6.1.- SE LLEVAN A CABO MEDICIONES DE RESPUESTA A UNA ENTRADA EN FUNCION ESCALONADA DE UN REACTOR DE TANQUE AGITADO.

LOS SIGUIENTES DATOS SE OBTUVIERON PARA UNA DETERMINADA VELOCIDAD VOLUMETRICA DE FLUJO.

TIEMPO EN SEGUNDOS	CONC DE TRAZ (G/CMB)
10.0	10.0
15.0	10.5
25.0	11.0
35.0	12.0
45.0	14.0
55.0	15.5
65.0	16.5
75.0	17.0
95.0	17.7

? CUAL ES EL NUMERO DE REACTORES DE TANQUE AGITADO (IDEALES) QUE ES EQUIVALENTE CON EL REACTOR REAL ?

SOLUCION :

UTILIZANDO EL PROGRAMA PROPUESTO, SE TIENE LO SIGUIENTE :



JPRINT CHR\$(9); "65N"

JRUN  
CALCULO DE LA FUNCION DISTRIBUCION TIEM-POS DE RESIDENCIA.MODELO  
DE REACTOR QUE REPRESENTA A LOS DATOS EXPERIMENTALES.

SELECCIONE OPCION:

- 1.- TECLAREA DATOS A ANALIZAR.
- 2.- LEERA DATOS DE DISCO (GRABADOS EN CORRIDA ANTERIOR).

TECLEE NUMERO DE OPCION:2

SELECCIONE LA OPCION :

- 1.- RTA (ALIMENTACION PULSO)
- 2.- RTA (ALIMENTACION ESCALON)
- 3.- REACTOR TUBULAR FLUJO LAMINAR
- 4.-REACTOR TUBULAR CON DISPERSION AXIAL

EL REACTOR (REAL) SE COMPORTA COMO 6 REACTORES IDEALES

LA SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS DE  $(J(CALC)-J(EXP)) ^ 2$  ES IGUAL A = 5.793654761

LOS RESULTADOS PARA EL MODELO DE 6 REACTORES IDEALES SON LOS SIGUIENTES :

LOS RESULTADOS SON LOS SIGUIENTES :

ATO|TIEMPO| CONC. CALC | CONC. EXP

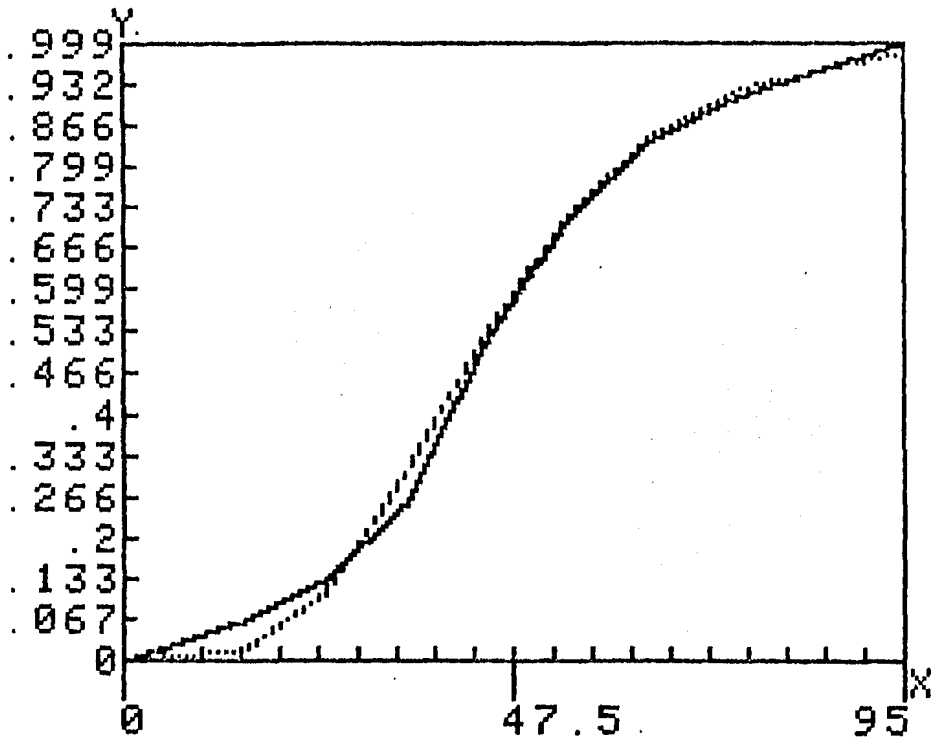
1	0	0	0
2	15	.0149038486	.0648625451
3	25	.111990656	.12972509
4	35	.307281091	.25945018
5	45	.531961296	.518900361
6	55	.719874799	.713487996
7	65	.847964561	.843213086
8	75	.923719657	.908075631

=7.70860902

ENFO DE RESIDENCIA PROMEDIO=46.0567924

Sumas Residuales de Cuadrados Para (1,2,3,4,5,6,7 Reactores).

- (1)=.24903e451
- (2)=.09024542e1
- (3)=.03757e1815
- (4)=.01e3589282
- (5)=7.98912036E-03
- (6)=5.793e5478E-03
- (7)=6.86159538E-03



TAMAÑO ESCALA X=4.75      TAMAÑO ESCALA Y=.0065922129  
 X = TIEMPO  
 Y1 = CONC. (CALC)(...)  
 Y2 = CONCENTRACION (EXP)( - )

3.6.2.- LA FUNCION RTD PARA UN REACTOR ES DETERMINADA A TRAVES DE IR MIDIENDO LAS CONCENTRACIONES DE TRAZADOR. CON UN SISTEMA ISOTERMICO Y CONSIDERANDO UNA DENSIDAD CONSTANTE DURANTE TODO EL SISTEMA SE OBTUVIERON LOS SIGUIENTES DATOS DE CONCENTRACION DE TRAZADOR. CONTRA TIEMPO PARA UNA ALIMENTACION DEL TRAZADOR EN FUNCION PULSO :

TIEMPO MINUTOS	CONC TRAZ G/CM3
0.0	0.0
5.0	3.0
10.0	5.0
15.0	5.0
20.0	4.0
25.0	2.0
30.0	1.0
35.0	0.0

A) REALICE UNA GRAFICA DE  $J(t)$  Y/O  $J'(t)$  CONTRA TIEMPO EN LA MISMA FIGURA.

B) ¿CUAL ES EL TIEMPO DE RESIDENCIA MEDIO PARA FLUJO DE ALIMENTACION USADO?

SOLUCION :

UTILIZANDO EL PROGRAMA PROPUESTO, SE OBTIENE LO SIGUIENTE :

PROMPT CHR(9): "65N"

IRON

CALCULO DE LA FUNCION DISTRIBUCION TIEMPOS DE RESIDENCIA. MODELO DE REACTOR QUE REPRESENTA A LOS DATOS EXPERIMENTALES.

SELECCIONE OPCION:

- 1.- TECLEARA DATOS A ANALIZAR.
- 2.- LEERA DATOS DE DISCO (GRABADOS EN CORRIDA ANTERIOR).

TECLEE NUMERO DE OPCION: 2

SELECCIONE LA OPCION :

- 1.- RTA (ALIMENTACION PULSO)
- 2.- RTA (ALIMENTACION ESCALON)
- 3.- REACTOR TUBULAR FLUJO LAMINAR
- 4.- REACTOR TUBULAR CON DISPERSION AXIAL

EL REACTOR REAL SE COMPORTA COMO 4 REACTORES IDEALES

LA SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS DE  $(J(CALC)-J(EXP))^2$  ES IGUAL A = 1.64445053

LOS RESULTADOS PARA EL MODELO DE 4 REACTORES IDEALES SON LOS SIGUIENTES :

LOS RESULTADOS SON LOS SIGUIENTES :

DATO | TIEMPO | CONC. CALC. | CONC. EXP

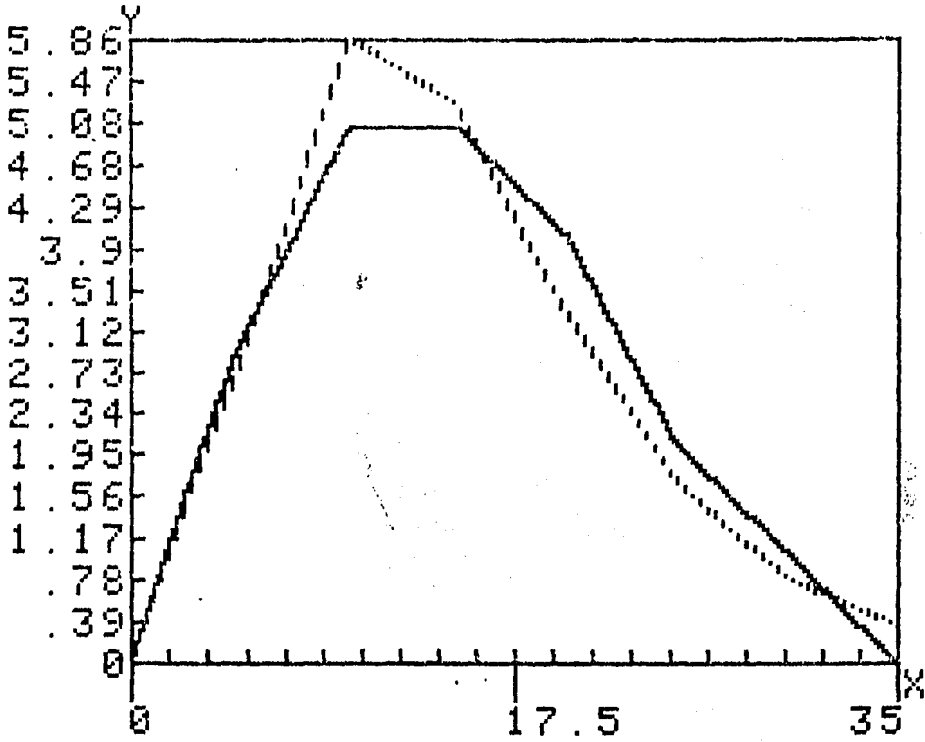
1	0	0	0
2	5	2.77699043	3
3	10	5.85605385	5
4	15	5.20978174	5
5	20	3.25519065	4
6	25	1.67539637	2
7	30	.763363847	1
8	35	.319530742	0

CO=33.3333334

TM=15

Sumas Residuales de Cuadrados Para (1,2,3,4,5 Reactores).

SR(1) = 62.564915  
 SR(2) = 7.33270383  
 SR(3) = 2.35531437  
 SR(4) = 1.64495053  
 SR(5) = 3.51643573



TAMAÑO ESCALA X=1.75      TAMAÑO ESCALA Y=.39040359  
 X = TIEMPO  
 Y1 = CONC. (CALC)(...)  
 Y2 = CONCENTRACION (EXP)(-)

3.6.4.- EN UN REACTOR TUBULAR CONTINUO SE REALIZARON MEDIDAS EXPERIMENTALES, PARA PODER MOSTRAR LA FUNCION RTD, LOS RESULTADOS SON LOS SIGUIENTES :

10/0	J(0)
10	10
10.5	10.10
10.70	10.22
10.875	10.40
11.0	10.57
11.5	10.84
12.0	10.94
12.5	10.98
13.0	10.99

RESUELVA DE ACUERDO CON EL MODELO DE REACTOR TUBULAR DE FLUJO LAMINAR.

SOLUCION :

UTILIZANDO EL PROGRAMA PROPUESTO, PARA UN MODELO DE REACTOR TUBULAR CON DISPERSION AXIAL, SE OBTIENE LO SIGUIENTE :

PROGRAMA: CIBERNETICO  
 TITULO: CIBERNETICO "CON"

IRON

CALCULO DE LA FUNCION DISTRIBUCION TIEMPOS DE RESIDENCIA. MODELO  
 DE REACTOR QUE REPRESENTA A LOS DATOS EXPERIMENTALES.

SELECCIONE OPCION:

- 1.- TECLAREA DATOS A ANALIZAR.
- 2.- LEERA DATOS DE DISCOS (GRABADOS EN CORRIENTA ANTERIOR).

TECLEE NUMERO DE OPCION: 2

SELECCIONE LA OPCION :

- 1.- RTA (CALIENTACION PULSO)
- 2.- RTA (CALIENTACION ESCALON)
- 3.- REACTOR TUBULAR FLUJO LAMINAR
- 4.- REACTOR TUBULAR CON DISPERSION AXIAL

A SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS ES IGUAL A

1.18728481

LOS RESULTADOS PARA EL MODELO DE 1 REACTOR TUBULAR (A REGIMEN LAMINAR) SON :

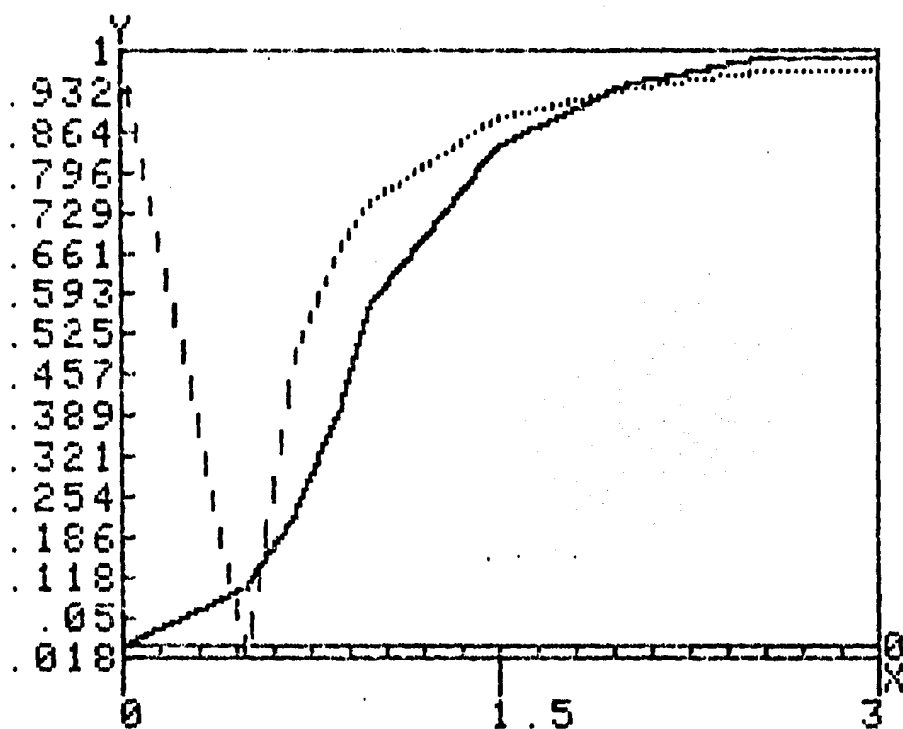
LOS RESULTADOS SON LOS SIGUIENTES:

TIEMPO! CONC. CALC. ! CONC. EXP

0	1	0
.5	.0177972800	.1
.7	.48071507	.22
.875	.007058029	.4
1	.745550078	.57
1.5	.830911412	.84
2	.93038707	.94
2.5	.959238109	.98
3	.97172855	.99

1.99

INFO DE RESIDENCIA PROMEDIO=1.0088594



TAMANO ESCALA X=.15

TAMANO ESCALA Y=.0678531526

X = TIEMPO

Y1 = CONC. (CALC) (---)

Y2 = CONCENTRACION (EXP) (-)



3.6.4.- EN UN REACTOR TUBULAR CONTINUO SE REALIZARON MEDIDAS EXPERIMENTALES, PARA PODER MOSTRAR LA FUNCION RTD, LOS RESULTADOS SON LOS SIGUIENTES :

0.70	10.0
1.0	10
10.5	10.10
10.70	10.22
10.875	10.40
11.0	10.57
11.5	10.84
12.0	10.94
12.5	10.98
13.0	10.99

DETERMINE CUAL ES EL MODELO DE DISPERSION, QUE PUEDE REPRESENTAR MEJOR LA FUNCION RTD PARA ESTE MODELO Y EVALUE UN COEFICIENTE ( $D1/\mu L$ ) APROPIADO PARA MINIMIZAR EL ERROR.

SOLUCION :

UTILIZANDO EL PROGRAMA PROPUESTO, PARA UN MODELO DE REACTOR TUBULAR CON DISPERSION AXIAL, SE OBTIENE LO SIGUIENTE :

JULIENI CHR4(9); "65N"

IRON

CALCULO DE LA FUNCION DISTRIBUCION TIEMPOS DE RESIDENCIA. MODELO DE REACTOR QUE REPRESENTA A LOS DATOS EXPERIMENTALES.

SELECCIONE OPCION:

- 1.- TECLEARA DATOS A ANALIZAR.
- 2.- LEERA DATOS DE DISCO (GRABADOS EN CORRIENTA ANTERIOR).

TECLEE NUMERO DE OPCION: 2

SELECCIONE LA OPCION :

- 1.- RTA (ALIMENTACION PULSO)
- 2.- RTA (ALIMENTACION ESCALON)
- 3.- REACTOR TUBULAR FLUJO LAMINAR
- 4.- REACTOR TUBULAR CON DISPERSION AXIAL

TIEMPO	COEF. DE DISP.
0	.473004325
.5	.157008108
.7	.115490213
.875	.17201388
1	1.00572138E-03
1.5	.0751297032
2	.0904828429
2.5	.0843780805
3	.0897619421

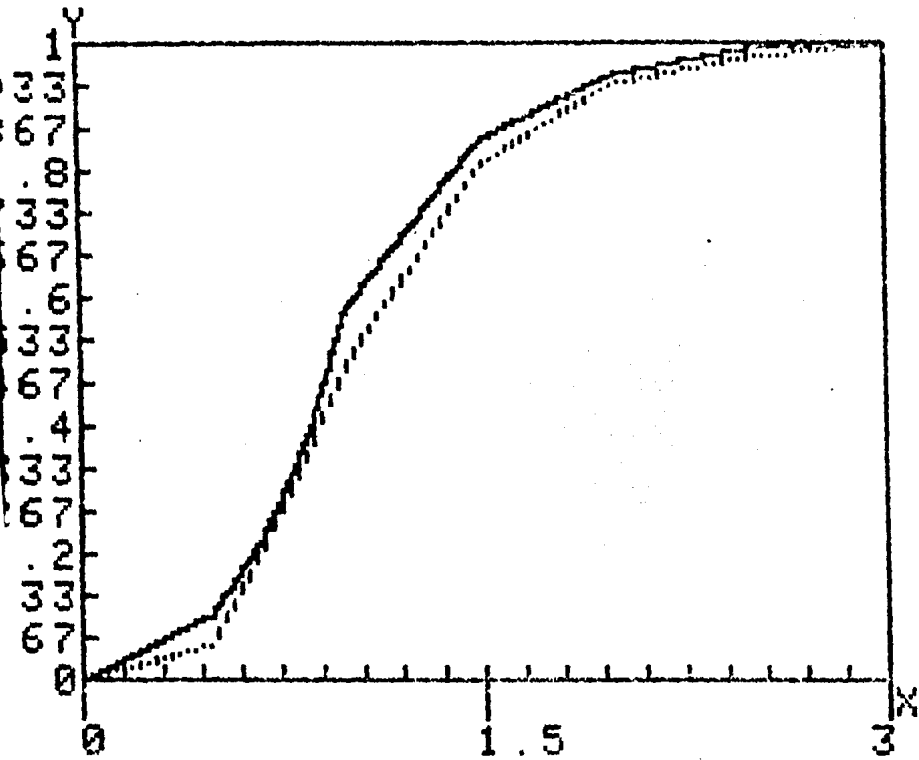
COEF. DE DISPERSION PROMEDIO = .104008700

TIEMPO	JC(1,1)	JE(1)
0	0	0
.5	.0580294702	.101010101
.7	.21083093	.222222222
.875	.377717927	.404040404
1	.49230741	.575757576
1.5	.808030804	.848484849
2	.930429894	.94949495
2.5	.979949305	.98989899
3	.992823552	1

SUM. RES. DE CUAD. = .0114787045

CO = .99

TIEMPO DE RESIDENCIA PROMEDIO = 1.0088594



MA80 ESCALA X=.15      TAMASO ESCALA Y=.000000007  
 = TIEMPO  
 = CONC. (CALC) (---)  
 = CONCENTRACION (EXP) (· · ·)

"LA ADVERSIDAD PODRA QUITARME EL  
TRIUNFO, PERO NO LA GLORIA"

Fragmento "A GLORIA"

(SALVADOR DIAZ MIRON)

## ESTABILIDAD DE REACTORES

### 4.1.- GENERALIDADES

EL ANALISIS DE ESTABILIDAD DE REACTORES SE APLICA PARA DETERMINAR SI LAS CONDICIONES A LAS QUE FUE DISEÑADO EL REACTOR, PARA REGIMEN ESTACIONARIO, PERMITIRAN SU FUNCIONAMIENTO SIN QUE SE ALTERE SU TEMPERATURA EN FORMA AFRECIABLE. ES DECIR, PARA QUE LAS CONDICIONES DE OPERACION ESTABLECIDAS EN EL DISEÑO DEL REACTOR SE MANTENGAN ESTABLES.

EN EL ANALISIS DE ESTABILIDAD DE REACTORES, EL CASO TIPICO DE APLICACION, ES EL DE UN REACTOR CONTINUO DE TANQUE AGITADO Y ES PRECISAMENTE, A ESTE REACTOR AL QUE NOS AVOCAREMOS EN ESTA SECCION.

### 4.2.- ANALISIS DE UN REACTOR CONTINUO DE TANQUE AGITADO.

UN REACTOR CONTINUO QUE OPERA A REGIMEN ESTACIONARIO DEBE DE CUMPLIR CON LAS 2 ECUACIONES DE BALANCE (MATERIA Y ENERGIA).

ECUACION GENERAL DE BALANCE DE MATERIA :

PARA UN REACTOR CONTINUO DE TANQUE AGITADO.

$$Q_0 C_{A0} - Q C_A = R_A V$$

SI  $Q = \text{CONSTANTE}$

$$C_{A0} - C_A = R_A \bar{\theta}$$

$$\text{SI } C_A = C_{A0}(1-X)$$

$$C_{A0} - C_{A0}(1-X) = R_A \bar{\theta}$$

$$X = \frac{R_A \bar{\theta}}{C_{A0}}$$

EL BALANCE DE MATERIA PUEDE CONSIDERARSE, COMO EL REQUERIMIENTO

DE ENERGIA (TEMPERATURA), PARA OBTENER CERTA CONVERSION.

\*\*\* BALANCE DE ENERGIA \*\*\*

$$q + Q_0 \bar{\rho}_0 H_0' - Y_A V \Delta H_{ro} = Q \rho H'$$

$$q + \bar{w}_0 H_0 - Y_A V \Delta H_{ro} = W H'$$

$$H' = \bar{c}_p (T - T_{referencia})$$

EL BALANCE DE ENERGIA PUEDE CONSIDERARSE COMO LA CAPACIDAD DEL SISTEMA PARA PROPORCIONAR, DICHA TEMPERATURA, A ESTA CONVERSION.

LA CONSIDERACION ANTERIOR PERMITE REALIZAR UN ANALISIS GRAFICO EL CUAL DETERMINA EN QUE PUNTOS DE OPERACION EL REACTOR OPERARA DE MANERA ESTABLE O BIEN EN QUE PUNTOS OPERARA DE MANERA INESTABLE.

ESTO ES SI DE LA ECUACION DE BALANCE DE MATERIA SE DESPEJA LA CONVERSION EN FUNCION DE LA TEMPERATURA SE TENDRA LO QUE SE DENOMINA CURVA DE REQUERIMIENTO.

EN CONSECUENCIA SI DE LA ECUACION DE BALANCE DE ENERGIA SE DESPEJA LA CONVERSION EN FUNCION DE LA TEMPERATURA SE TENDRA LA CURVA DE CAPACIDAD DE SUMINISTRO.

SI EN UN MISMO DIAGRAMA SE GRAFICAN AMBAS CONVERSIONES CONTRA LA TEMPERATURA SE OBTIENEN, 2 CURVAS, LA DE REQUERIMIENTO (BALANCE DE MATERIA) Y LA DE SUMINISTRO (BALANCE DE ENERGIA), COMPARANDO AMBAS CURVAS SE PUEDE CONCLUIR SI EL PUNTO ES ESTABLE O NO.

\*\*\* DEL BALANCE DE MATERIA \*\*\*

SE OBTIENE LA SIGUIENTE ECUACION :

$$\chi = \frac{K\bar{\theta}}{1+K\bar{\theta}}$$

\*\*\* DEL BALANCE DE ENERGIA \*\*\*

SE OBTIENE LA SIGUIENTE ECUACION:

$$\chi = \frac{\bar{\theta} A Q^{-AHrc/RT}}{1 + \bar{\theta} A Q^{-AHrc/RT}}$$

4.3.- TECNICA MATEMATICA PROPUESTA.

CONSTRUCCION GRAFICA. EN FORMA VISUAL SE DETERMINAN LOS PUNTOS DONDE SE CUMPLEN LOS REQUERIMIENTOS DE ACUERDO A LA CAPACIDAD DE SUMINISTRO.

4.4.- LISTADOS DE PROGRAMAS.

4.5.- APLICACIONES.

LOW ESTABILIDAD DE REACTORES  
LIST

```

10 REM ESTABILIDAD DE REACTORES:
20 D$ = CHR$(13) + CHR$(4): HOME : PRINT " ESTABILIDAD DE RE
ACTORES CONTINUOS DE TANGUE AGITADO"
25 PRINT : PRINT " PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA": GET
A$: PRINT : HOME
30 PRINT : PRINT : PRINT "DESPUES DE FORMULAR SUS ECUACIONES POR
BALANCES DE MATERIALES Y ENERGIA ,ALIMENTE LAS FUNCIONES RESULT
ANTES DE DESPEJARLA CONVERSION EN CADA CASO.": PRINT : PRINT "1.-
DESPEJE LA CONVERSION DEL BALANCE DE MATERIA.":
40 PRINT " . LA FUNCION RESULTANTE SE DENOMINARA X1.": PRINT "2.
- DESPEJE LA CONVERSION DEL BALANCE DE ENERGIA.. LA FUNCION RESUL
TANTE SE DENOMINARA X2."
50 PRINT "UTILICE COMO NOMENCLATURA AL ESTRUCTURAR SUS FUNCIONES
LAS SIGUIENTES LETRAS.": PRINT : PRINT "T : TEMPERATURA A LA CONVE
RSION X.": PRINT "TF: TEMPERATURA DE ALIMENTACION."
60 PRINT " TECLLEE CADA FUNCION DEFINIDA.": PRINT "X1=": IN
PUT "": X1$: PRINT "X2=": INPUT "": X2$: PRINT D$"OPEN FUNCION": F
RINT D$"DELETE FUNCION": PRINT D$"OPEN FUNCION": PRINT D$"WRITE F
UNCION": PRINT 70:"DEFN1(X1)=": X1$: PRINT 50:"DEFN2(X2)=": X2$
65 PRINT "DEL 10.65": PRINT "RUN 70": PRINT D$"CLOSE FUNCION": F
RINT D$"EAEQ FUNCION": END
70 HOME : PRINT "CALCULO DE CONVERSION CONTRA TEMPERATURA": D$ =
CHR$(13) + CHR$(4): GET A$: INPUT " TEMPERATURA DE ALIMENTACI
ON=": TF: DIM X(50),Y(3,50): PRINT : INPUT "TEMPERATURA FINAL DE G
RAFICADO=": TU: DT = (TU - TF) / 49
100 T = TF: FOR I = 1 TO 50: Y(1,I) = FN X1(T): Y(2,I) = FN X2(T)
: Y(3,I) = Y(1,I) - Y(2,I): X(I) = T: T = T + DT: NEXT I
110 PRINT CHR$(7): CHR$(7): CHR$(7): INPUT "UTILIZARA IMPRE
SORA (SI O NO)?": A$: GL$ = A$: IP$ = D$ + "PR#1": IF A$ = "NO" THEN
IP$ = D$ + "PR#0"
120 HOME : PRINT IP$: PRINT "RESULTADOS OBTENIDOS EN LOS CALCULO
S.": PRINT : PRINT "TEMPERATURA": TAB(14): "CONV. NASA": TAB(23
): "CONV. ENERG."
130 FOR I = 1 TO 50 STEP 3: PRINT X(I): TAB(14): Y(1,I): TAB(28
): Y(2,I): NEXT I: PRINT D$"PR#0": PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE
CUALQUIER TECLA": GET A$: HOME : PRINT IP$: PRINT "TEMPERATURA":
TAB(15): "X1-X2 (RESTA CONVERSIONES)"
140 FOR I = 1 TO 50 STEP 3: PRINT X(I): TAB(15): Y(3,I): NEXT I:
PRINT D$"PR#0": PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA":
GET A$
150 PRINT : PRINT "SE INICIA PROCESO DE GRAFICADO...": CHR$(7)
: CHR$(7)
15000 PRINT D$"OPEN DATOS": PRINT D$"WRITE DATOS": PRINT 50: ",":
": ",": GL$: PRINT "T-TF": PRINT "CONV. NASA": PRINT "CONV. ENERGIA
": PRINT "FUNCION X1-X2"
15010 FOR I = 1 TO 50: PRINT X(I) - TF: FOR J = 1 TO 3: PRINT Y(
.I): NEXT J: PRINT D$"CLOSE DATOS": PRINT D$"RUN PLOT-MINIMOS"

```

4.9.1.- EN UN REACTOR QUIMICO DE TANQUE AGITADO, SE LLEVA A CABO UNA REACCION HOMOGENEA DE 1ER. ORDEN (EN FASE LIQUIDA Y SUPONGA UN MEZCLADO IDEAL). LA CONCENTRACION DEL REACTIVO EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACION ES DE  $3.0 \text{ KMOL/M}^3$  Y EL FLUJO VOLUMETRICO ES DE  $60 \text{ EE}^{-3} \text{ M}^3/\text{SEG}$ . LA DENSIDAD Y EL CALOR ESPECIFICO DE REACCION PARA LA MEZCLA SON CONSTANTES Y SON  $1000 \text{ KG/M}^3$  Y  $4.19 \text{ KJ/KG} \cdot \text{K}$  (O  $1.0 \text{ CAL/g} \cdot \text{K}$ ) RESPECTIVAMENTE. EL VOLUMEN DEL REACTOR ES  $18 \text{ EE}^{-3} \text{ M}^3$ . EL REACTOR OPERA ADIABATICAMENTE Y NO HAY PRODUCTO EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACION. EL CALOR DE REACCION Y LA ECUACION DE RAPIDEZ SON LAS SIGUIENTES :

$$H_r = -2.09 \text{ EE}^8 \text{ J/K MOL} \quad (\text{O } -50000 \text{ CAL/g MOL})$$

$$R = 4.48 \text{ EE}^6 \cdot C \cdot \text{EXP}(-15000/R_g \cdot T) , \text{ K MOL} / \text{M}^3 \cdot \text{SEG}$$

DONDE C ES LA CONC DEL REACTIVO EN  $\text{K MOL} / \text{M}^3$  ; T ES LA TEMPERATURA EN GRADOS KELVIN Y  $R_g = 8.314 \text{ J/(G} \cdot \text{MOL} \cdot \text{K)}$ . LA ENERGIA DE ACTIVACION ES DE  $15000 \text{ J/g MOL}$ . SI LA CORRIENTE DE ALIMENTACION TIENE UNA TEMPERATURA DE  $298 \text{ K}$ , CUAL ES EL PUNTO EN EL QUE EL REACTOR OPERA ESTABLEMENTE. DETERMINE POR METODO GRAFICO CUAL ES LA CONVERSION Y TEMPERATURA EN ESTE PUNTO DE OPERACION.

SOLUCION :

UTILIZANDO EL PROGRAMA PROPUESTO, SE OBTIENE LO SIGUIENTE :



UN  
ESTABILIDAD DE REACTORES CONTINUOS DE  
UN

TANQUE AGITA

PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA

DESPUES DE FORMULAR SUS ECUACIONES POR BALANCES DE MATERIALES Y ENERGIA, VALIMENTE LAS FUNCIONES RESULTANTES DE DESPEJARLA CONVERSION EN CADA CASO.

1.- DESPEJE LA CONVERSION DEL BALANCE DEMATERIA., LA FUNCION RESULTANTE SE DENOMINARA X1.

2.- DESPEJE LA CONVERSION DEL BALANCE DE ENERGIA., LA FUNCION RESULTANTE SE DENOMINARA X2.

UTILICE COMO NOMENCLATURA AL ESTRUCTURARSUS FUNCIONES LAS SIGUIENTES LETRAS:

T :TEMPERATURA A LA CONVERSION X.

(F):TEMPERATURA DE ALIMENTACION.

TECLEE CADA FUNCION DEFINIDA :

X1=(1.047\*EXP(-15000/(1.03\*T)))/(1+1.34E9\*EXP(-15000/(1.98\*T)))

X2=(T-F)/150

]

]

]

]

CALCULO DE CONVERSION CONTRA TEMPERATURA  
TEMPERATURA DE ALIMENTACION=298

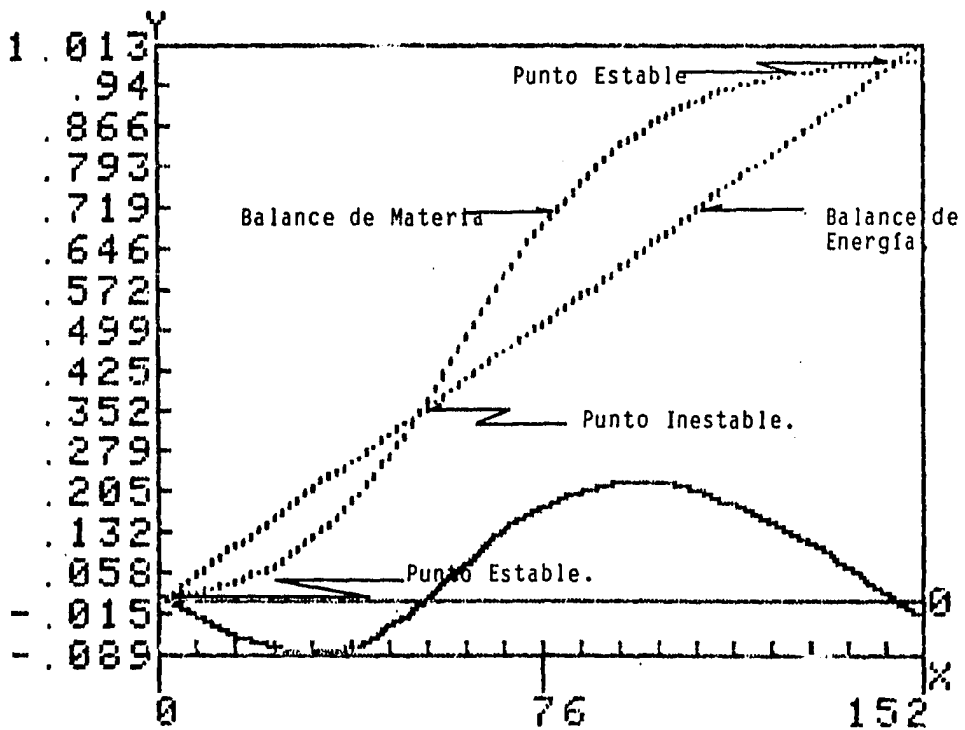
TEMPERATURA FINAL DE GRAFICADO=450

UTILIZARA IMPRESORA CSI O NO?SI

RESULTADOS OBTENIDOS EN LOS CALCULOS :

TEMPERATURA	CONV. MASA	CONV. ENERG.
298	.0120559252	0
307.306122	.0256752379	.0620408153
316.612245	.0515820419	.124081631
325.918367	.0972285261	.186122446
335.224489	.170353748	.248163261
344.530612	.274342918	.310204077
353.836734	.40266234	.372244892
363.142856	.538496119	.434285707
372.448978	.662743703	.496326523
381.755101	.763395638	.558367338
391.061223	.838028227	.620408154
400.367345	.890310711	.682448969
409.673468	.925790129	.744489784
418.97959	.949525191	.806530599
428.285712	.965356098	.868571415
437.591835	.975956472	.93061223
446.897957	.983111043	.992653046

TEMPERATURA	$\lambda_1 - \lambda_2$ (RESTA CONVERSIONES)
298	.0120359252
307.306122	-.0063635775
316.612245	-.0724975666
325.918367	-.08389392
335.224489	-.077809513
344.530612	-.0355611392
353.836734	.0304174481
363.142856	.104210412
372.448978	.16641718
381.755101	.2050283
391.061223	.217620074
400.367345	.207861742
409.673468	.181300345
418.97959	.142994591
428.285712	.0967846829
437.591835	.0453442417
446.897957	-9.54200304E-03



TAMAÑO ESCALA  $\lambda = 7.5999999$

TAMAÑO ESCALA  $\gamma = 0.03481316$

$\lambda = T - TF$

$Y_1 = \text{CONV. MASA}(\dots)$

$Y_2 = \text{CONV. ENERGIA}(\dots)$

$Y_3 = \text{FUNCION } \lambda_1 - \lambda_2(\dots)$

"EL DESEO DE CONOCIMIENTO,  
COMO LA SED DE REQUEZA,  
AUMENTA A MEDIDA QUE SE VA  
ADQUIRIENDO".

(LAURENCE STERNE).

### C O N C L U S I O N E S :

DESPUES DE HABER REALIZADO UN ANALISIS DE LAS DIFERENTES TECNICAS, MATEMATICAS, APLICADAS EN EL DISEÑO DE REACTORES QUIMICOS HOMOGENEOS, SE LLEGO A LA CONCLUSION DE QUE LAS TECNICAS MATEMATICAS NECESARIAS PARA EL CALCULO DE UN REACTOR HOMOGENEO SON LAS SIGUIENTES :

- 1).- MINIMOS CUADRADOS.
- 2).- RESOLUCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES.
- 3).- RESOLUCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS NO LINEALES.
- 4).- INTEGRACION.
- 5).- RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.
- 6).- TECNICAS DE CONSTRUCCION DE GRAFICAS.
- 7).- CALCULO DE LA SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS.

DESPUES DE HABER ANALIZADO DIVERSAS TECNICAS NUMERICAS, RESOLVIENDO PROBLEMAS, REPRESENTATIVOS DE CADA UNA DE LAS AREAS DE APLICACION, EN EL CALCULO DE REACTORES, POR SU FACILIDAD Y RAPIDEZ SE SELECCIONARON LOS SIGUIENTES ALGORITMOS DE CALCULO.

- 1).- ALGORITMO GENERALIZADO DE MINIMOS CUADRADOS.
- 2).- ALGORITMO DE GAUSS-JORDAN.
- 3).- ALGORITMO DE NEWTON-RAPSON PARA SISTEMAS DE ECUACIONES ALGEBRAICAS NO LINEALES.
- 4).- ALGORITMOS REGLA DEL TRAPECIO Y REGLA DE SIMPSON PARA INTEGRACION.
- 5).- ALGORITMO DE RUNGE-KUTTA DE 4TO. ORDEN PARA ECUACIONES DIFERENCIALES.

6).- ALGORITMO GENERALIZADO PARA GRAFICAR FUNCIONES.

7).- ALGORITMO ESTADISTICO SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS.

AL ELABORARSE LOS PROGRAMAS, SE ESTUDIO A FONDO LA CONFIABILIDAD DE LOS MISMOS, RESOLVIENDO SERIES DE PROBLEMAS, ALGUNOS DE LOS CUALES SE SELECCIONARON PARA PRESENTARLOS COMO APLICACIONES. CON ESTO SE DISPONE DE UN PAQUETE DE TECNICAS EN LAS QUE EL USUARIO PUEDE SUMINISTRAR, SUS MODELOS CORRESPONDIENTES Y OBTENER CON FACILIDAD LA SOLUCION A LOS DISTINTOS PROBLEMAS QUE SE PRESENTEN EN EL ANALISIS, DISEÑO Y/O SIMULACION DE LOS REACTORES QUIMICOS HOMOGENEOS.

LO ANTERIOR IMPLICA QUE LA PERSONA INTERESADA EN UTILIZAR LA PAQUETERIA DE TECNICAS MATEMATICAS AQUI DESCRITAS, DEBERA POSEER CONOCIMIENTOS DE FORMULACION DE MODELOS MATEMATICOS MEDIANTE LA APLICACION DE BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA.

CON EL OBJETO DE OBTENER RESULTADOS Y/O CONCLUSIONES, LOGICAS, EL USUARIO DEBERA ANALIZAR SU FENOMENO Y FORMULAR UN MODELO MATEMATICO CORRESPONDIENTE (SISTEMA REACTOR-REACCION QUIMICA), UNA VEZ HECHO ESTO APLICARA LAS TECNICAS MATEMATICAS NECESARIAS PARA OBTENER RESULTADOS, LOS CUALES DEBERA ANALIZAR, PARA PODER OBTENER CONCLUSIONES DEL MODELO ESTUDIADO, CABE MENCIONAR QUE LAS TECNICAS SON GENERALIZADAS Y ES RESPONSABILIDAD DEL USUARIO APLICARLAS CORRECTAMENTE. LO CUAL IMPLICA QUE SI SE FORMULO MAL EL MODELO, LOS RESULTADOS OBTENIDOS NO SERAN REPRESENTATIVOS DEL FENOMENO ESTUDIADO, ESTO OBTIENIAMENTE IMPLICARA A REALIZAR UN NUEVO ANALISIS DEL FENOMENO Y ESTO A SU VEZ A FORMULAR UN MODELO NUEVO, EL CUAL SE DEBERA APEGAR MAS A LA REALIDAD.

IRI ELLI EGGRAFPIA

CHEMICAL ENGINEERING KINETICS  
SMITH J.M.  
Mc GRAW-HILL BOOK CO. USA  
THIRD EDITION 1981.

INGENIERIA DE LAS REACCIONES  
QUIMICAS Y CATALITICAS  
CALBERRY JAMES J.  
EDITORIAL GEMINIS ARGENTINA  
EDICION CASTELLANA 1980.

NUMERICAL ANALYSIS  
BURDEN, FAIRES, REYNOLDS  
PRINCLE WEBER & SCHMIDT USA  
2ND EDITION 1981.

METODOS NUMERICOS  
LUTHE, OLIVERA, SCHUTZ  
ED. LIMUSA MEXICO  
1RA EDICION 1981.

APPLE II (GUIA DEL USUARIO)  
LON POOLE, Mc NIFF, COOK  
Mc GRAW-HILL BOOK CO. MEXICO  
1RA. EDICION 1981.