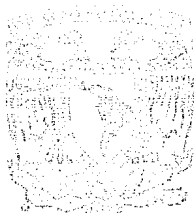


43
200

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA



SISTEMA DIMENSIONADOR DE REACTORES TUBULARES HOMOGENEOS CON FLUJO PISTON

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A
LUIS ALBERTO GRAF NORIEGA

MEXICO, D. F.

1991

FALLA DE ORIGEN



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.

CONTENIDO

	Pág
INTRODUCCION	2
I. GENERALIDADES SOBRE REACTORES TUBULARES	
1.1 Descripción	5
1.2 Formas de operación	6
1.3 Tipos de modelos	11
II. FORMULACION DEL MODELO GENERAL DE UN REACTOR TUBULAR CON FLUJO PISTON	
2.1 Balances de conservación de masa y energía	14
2.2 Análisis de la estructura del modelo	22
III. ANALISIS DE TECNICAS NUMERICAS APLICABLES EN LA SOLUCION DE UN REACTOR TUBULAR CON FLUJO PISTON	
3.1 Introducción	25
3.2 Métodos de Euler	27
3.3 Métodos de Runge-Kutta	29
3.4 Sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias	30
IV. DISEÑO Y CREACION DE UN SISTEMA COMPUTACIONAL PARA DIMENSIONAMIENTO DE REACTORES TUBULARES CON FLUJO PISTON	
4.1 Diseño	35
4.2 Diagrama de bloques	39

4.3 Estructura del sistema	44
V. APLICACION DEL SISTEMA	
5.1 Reacción de mezcla de gases ideales	52
5.2 Deshidrogenación del benceno en fase vapor	58
5.3 Diseño de una planta piloto para producción de cloruro de alilo	68
VI. CONCLUSIONES	82
VII. BIBLIOGRAFIA	84

INTRODUCCION

INTRODUCCION

Los reactores químicos pueden tener una gran variedad de tamaños, formas y condiciones de operación. Uno de los más comunes es el pequeño matraz o vaso que se usa en el laboratorio químico para las reacciones en fase líquida. El otro extremo, en cuanto al tamaño, lo constituyen los grandes recipientes cilindricos empleados en la industria del petróleo, por ejemplo, en el cracking de hidrocarburos.

En el vaso de laboratorio se agrega una carga de reactivos que se lleva hasta la temperatura de reacción, se mantienen estas condiciones por un determinado lapso de tiempo, y después se extrae el producto de la reacción. Este reactor por lotes o intermitente se caracteriza por la variación en el grado de reacción y en las propiedades de la mezcla reaccionante con el transcurso del tiempo. El reactor para el cracking de hidrocarburos opera en forma continua con flujos estables tanto de entrada de reactivos como de salida de productos. Esta clase de reactores corresponde al tipo de *flujo continuo*, en el cual el grado de reacción puede variar con respecto a la posición en el reactor, pero no con respecto al tiempo. Esta diferencia en el método de operación es una de las bases para la clasificación de los reactores.


Las dos clasificaciones, por lote o continuo, y de *tanque* o *tubo*, no están necesariamente interrelacionadas. De esta forma, el reactor de vaso de laboratorio se describe como un sistema intermitente, pero puede transformarse en un aparato de flujo continuo. Además, un reactor tubular también puede operarse por lotes recirculando la mezcla reaccionante a altas velocidades a través del tubo por medio de un circuito cerrado.

Esta tesis consiste en la elaboración de un sistema computacional para PC's compatibles programado en lenguaje DBASE, dicho sistema tiene la finalidad de dimensionar el comportamiento de reactores tubulares industriales para reacciones químicas homogéneas.

Este sistema permitirá al usuario determinar las características que regirán el comportamiento del reactor, como por ejemplo la relación espacio-velocidad, longitud, temperatura, conversión, etc., y ofrecerá al usuario la posibilidad de visualizar gráficos que relacionen ese tipo de parámetros.

Funcionando en forma de menús, el programa está diseñado para representar mediante un modelo matemático, un problema real. Estos modelos matemáticos son desarrollados utilizando conceptos de la materia de Ingeniería Química VII, es decir, por medio de balances de materia y energía a partir de los cuales se obtienen ecuaciones diferenciales.

La solución de cada una de estas ecuaciones es de naturaleza numérica y está dada por diversos métodos, por ejemplo el método de Runge-Kutta de 4° orden.



I. GENERALIDADES SOBRE REACTORES TUBULARES

I. GENERALIDADES SOBRE REACTORES TUBULARES

1. DESCRIPCION.

Los reactores de flujo tubular se emplean como unidades de laboratorio, con el propósito de obtener una ecuación de velocidad, y para los procesos de producción, a escala comercial. De hecho, es un método común y deseable desarrollar una ecuación de velocidad utilizando los datos obtenidos en un reactor de laboratorio de la misma forma que la unidad comercial propuesta.

Los reactores tubulares o continuos pueden construirse en varias formas, por ejemplo, las unidades convencionales para *cracking térmico* en la industria petrolera de los tipo no catalíticos en los que el calor es transferido por convección y radiación a la pared del tubo para aumentar la temperatura del fluido al nivel de la reacción. Por otra parte, los reactores continuos pueden ser tanques o marmitas, parecidos a los reactores de tanque agitado o intermitentes, con aditamentos para añadir reactantes y extraer los productos en una forma continua. El tipo de tanque no es recomendable para reacciones tales como el cracking térmico, donde deben suministrarse grandes cantidades de energía calorífica, ya que se cuenta con una superficie muy reducida por unidad de volumen del reactor. En estos reactores, por lo general es posible obtener un mezclado prácticamente completo con agitación mecánica. Bajo estas condiciones, la composición, la temperatura, y la presión son uniformes en todo el recipiente. En el tipo tubular, donde la longitud es generalmente dependiente del diámetro del tubo, la velocidad forzada en la dirección del flujo es suficiente para retardar

el mezclado en dirección axial; esto es, es posible aproximarse a un funcionamiento de tipo flujo tapón.

2. FORMAS DE OPERACION.

Ciertos productos obtenidos en cantidades más bien pequeñas (productos farmacéuticos, colorantes y otros) se fabrican discontinuamente. En una fábrica de este tipo de productos, uno puede sorprenderse por la presencia de centenares de autoclaves, cada uno de ellos utilizado para producir una tonelada de un producto un día y una tonelada de otro producto completamente diferente al día siguiente. Un sistema así ofrece una gran flexibilidad, especialmente cuando la citada fábrica tiene una gama de cientos e incluso miles de productos, cada uno producido en una escala más bien pequeña.

Otra ventaja de la operación discontinua es que el costo de capital es a menudo menor que para el correspondiente proceso continuo. Por esta razón este sistema es adecuado para nuevos procesos que en una etapa de desarrollo más avanzada funcionarán en forma continua. Las razones por las que los procesos continuos se adoptan, finalmente, en la mayoría de las industrias químicas de gran escala son principalmente:

- a) Disminución del costo de trabajo (es decir, menor mano de obra), a causa de la eliminación de ciertas operaciones, tales como el repetido llenado y vaciado de recipientes discontinuos.
- b) Facilidad de control automático. También esto reduce costos de trabajo, aunque generalmente requiere un considerable gasto de capital.

c) Mayor constancia en las condiciones de la reacción y, por tanto, mayor constancia en la calidad del producto.

La correcta elección entre operación continua y discontinua depende mucho de la magnitud de los costos de trabajo en relación a los costos de capital, sin embargo, el aspecto cinético es determinante. La cinética de las reacciones se estudia generalmente en el laboratorio en operaciones por lotes, pero la aplicación de los resultados al diseño de operación de un proceso continuo no implica nuevos principios de cinética puesto que los cambios moleculares son los mismos. La diferencia estriba en la existencia de un estado de flujo en el proceso continuo, y esto puede ocasionar cambios importantes de carácter microscópico. En particular, no todas las moléculas que fluyen a través del sistema tendrán necesariamente igual tiempo de residencia, ni tendrán la misma historia en cuanto a los cambios de concentración o temperatura. Estos factores pueden causar diferencias apreciables de rendimiento o velocidad media de reacción, en comparación con un proceso discontinuo. Este es especialmente el caso cuando la reacción se complica por la existencia de reacciones secundarias. Aquí el rendimiento del producto deseado puede diferir considerablemente entre la operación continua y discontinua, y también entre los dos tipos principales de procesos continuos. El rendimiento de la reacción no es necesariamente más bajo para el proceso continuo (en algunos casos puede ser más elevado). Sin embargo, en ejemplos donde es más bajo, este factor puede contrapesar las ventajas normales de la operación continua de modo que favorezca al sistema discontinuo.

Pueden existir muchas combinaciones de tamaño y condiciones de operación para un tipo específico de reactor que satisfaga las condiciones de diseño. Primero es necesario establecer el método de

cálculo para el funcionamiento del reactor para después aplicar una técnica de optimización que determine el diseño más provechoso. El problema de control del reactor consiste en determinar la forma en que se deben variar las condiciones de operación; la primera decisión radica en cuales son las condiciones de operación que deberán usarse como puntos de control, después de esto se establece una política o estrategia para reducir las fluctuaciones.

El procedimiento de control resultante puede ser manual. Por otra parte, puede ser un método semicomputarizado, en el cual se utiliza la computadora para obtener rápidamente el valor de la función que determina el comportamiento, pero los cambios indicados con respecto a las condiciones de operación se llevan a cabo manualmente. El diseño óptimo requiere un trabajo numérico repetitivo; por tanto, la computación mecánica simplifica notablemente la tarea de optimización.

Calor de reacción. Debido al calor generado o absorbido por una reacción química existen razones distintas por las cuales la velocidad de reacción no continúa necesariamente aumentando al elevarse la temperatura, una es el agotamiento de los reactivos y otra la posibilidad de pasar a un control por difusión. El agotamiento de reactivos puede comprenderse considerando la reacción



que es exotérmica y cuya constante de velocidad tiene el normal coeficiente positivo de temperatura. Si la reacción se realiza en condiciones adiabáticas (es decir, no existe intercambio de calor con los alrededores), la temperatura se elevará y la constante de temperatura aumentará. Sin embargo, la velocidad de reacción es igual a un producto, de la constante de velocidad por una función de las concentraciones; debido al agotamiento de los reactivos esta función

tenderá a disminuir y compensará así el aumento de la constante de velocidad.

La situación varía según se trate de un sistema isotérmico o no isotérmico. En los reactores tubulares el comportamiento de la temperatura, para una reacción exotérmica, tiende a elevarse continuamente a lo largo del reactor, y lo hace a no ser que exista una refrigeración externa muy eficaz. No obstante, pueden presentarse también en estos reactores fenómenos de estados alternativos. La condición esencial de todos los tipos de reactores es la existencia de algún mecanismo por el que el calor generado en una etapa en el proceso de reacción puede retroceder a una etapa anterior, creando así la posibilidad de un paso entre niveles estables superiores e inferiores. El mecanismo de la retroalimentación puede originarse por cualquiera de las circunstancias siguientes:

- a) Hay conducción de calor en cantidad significativa, en dirección inversa al flujo de los reaccionantes.
- b) Hay *transmisión* de calor, por medio de un cambiador de calor entre el fluido caliente que sale del reactor y el fluido frío que entra.

Si ninguno de estos mecanismos es efectivo, la reacción puede tender a pararse, es decir, el sistema en reacción vuelve a un estado estacionario más bajo, en que la velocidad de la reacción es despreciable y la temperatura es solo ligeramente mayor que la del gas frío de entrada. Además, esta clase de extinción puede ocurrir aún cuando se emplee un cambiador de calor; por ejemplo, cuando un ensuciamiento progresivo de la superficie del cambiador de calor hace que la temperatura de entrada del gas en el reactor descienda por debajo de un nivel crítico.

2.1 Operación isotérmica.

En un reactor que opera en forma isotérmica, la temperatura de la mezcla reaccionante a lo largo del reactor permanece constante como consecuencia de un libre intercambio de calor con los alrededores.

El diseño de reactores isotérmicos requiere exclusivamente la resolución de ecuaciones para balances de conservación de la masa, exceptuando los casos en que es difícil mantener una temperatura uniforme. Para reacciones múltiples, la selectividad es tan importante como la conversión. Uno de los métodos de resolución consiste en formular un balance de masa con respecto al reactor para cada reacción. La selección de la especie sobre la cual se basa el balance de masa es arbitraria, pero generalmente se selecciona un reactante o un producto limitante. Una vez que se establece el grado de verificación para una especie, las cantidades de las otras especies quedan fijadas por la estequiometría de la reacción.

2.2 Operación no isotérmica.

En la operación de reactores de flujo tubular es muy común encontrar temperaturas no uniformes. La temperatura puede variarse deliberadamente (por intercambio de calor con los alrededores) para lograr velocidades de reacción máximas. Sin embargo, es más frecuente que las variaciones de temperatura se originen debido a que el calor de reacción inherente es importante y el intercambio de calor con los alrededores está limitado. Cuando el intercambio de calor es insignificante, se produce una operación adiabática o no isotérmica. Los grandes reactores comerciales tienen mayor tendencia a aproximarse a la operación no isotérmica que a las condiciones isotérmicas, excepto

en unos pocos casos, tales como los procesos de isomerización, donde el calor de reacción es insignificante. El diseño de reactores no isotérmicos suele requerir la resolución simultánea de un balance de energía con el balance o los balances de conservación de la masa. Cuando solo se verifica una reacción, los resultados deseados son la conversión y la temperatura en función del volumen del reactor. Cuando se trata de reacciones múltiples, la selectividad es tan importante como la conversión.

El intercambio de calor con los alrededores, más que cambiar por completo los efectos de la temperatura en los reactores adiabáticos, los modifica. Por consiguiente, los resultados para condiciones no isotérmicas proporcionan un enfoque muy útil de los efectos de la temperatura.

3. TIPOS DE MODELOS.

En contraste con el comportamiento de los reactivos en un reactor de tanque agitado, en un reactor tubular los reactivos fluyen con un bajo grado de mezclado. En el caso ideal, cada elemento de la mezcla reaccionante tiene un tiempo de reacción precisamente igual al tiempo de residencia del reactor. El reactor tubular es, por tanto, una forma conveniente de convertir un reactor por lotes en un reactor continuo, correspondiendo el flujo a través del reactor al paso del tiempo en el reactor por lotes. Naturalmente existen otras aplicaciones además de esta, pero la analogía es muy importante y el caso ideal resulta muy útil en el diseño preliminar. De tal manera, en un reactor de tanque agitado los reactivos son mezclados de la mejor forma posible mientras

que en el reactor tubular no se pretende inducir mezcla, por ello podemos decir que el reactor tubular es básicamente una especie de conducto a través del cual los reactivos fluyen y no se tiene la intención de rebasar el grado natural de mezclado.

Aún así, existe una gran variedad en tipos de reactor tubular. En algunos los reactivos fluyen a través de un tubo muy largo, en otros fluyen a altas velocidades a través de un tubo mucho más corto dentro de un horno a altas temperaturas. Un reactor empacado con partículas catalíticas puede variar en tamaño desde un convertidor de amoniaco de 50 pies de largo hasta un reactor diferencial para investigación de escasos centímetros de longitud.

3.1. Reactor ideal (flujo tapón).

El reactor ideal de flujo tubular es aquel en el que no hay mezclado en la dirección perpendicular a la del flujo (esto es, en la dirección radial). La figura 1.1 representa este tipo de reactor. Las concentraciones varían a lo largo de la coordenada de longitud, z , no a lo largo de la coordenada radial, r . Excepto cuando es posible una operación isotérmica, la temperatura varía también con z .

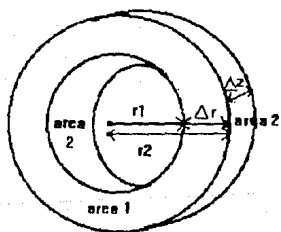
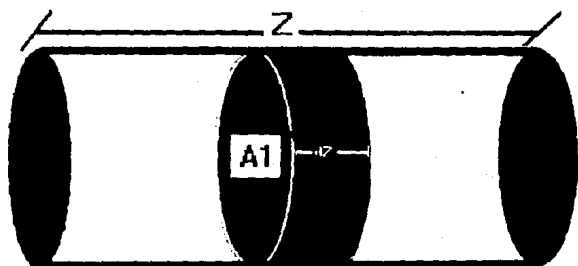


FIGURA I.1

Z = longitud total del reactor

A1 = area transversal = πr^2

r2 = radio total del reactor

Pueden existir desviaciones con respecto al comportamiento ideal en el flujo tubular. Dos tipos de desviaciones son el mezclado parcial en dirección longitudinal y el mezclado incompleto en dirección radial.


3.2. Reactor con mezclado axial y radial.

Se han desarrollado ecuaciones simples de conservación de masa para la versión ideal del reactor de flujo tubular. Cuando no se satisfacen los criterios de mezclado de esta forma ideal, las expresiones matemáticas para las ecuaciones de conservación resultan más difíciles.

Cuando se considera la variación de propiedades, ya sea en sentido axial o radial al tubo, se presentan ciertas complicaciones tales como la difusión y la conductividad de la mezcla reaccionante. En estos casos es necesario incluir en los balances de conservación de masa las constantes de difusividad, y por otra parte, las constantes de conductividad térmica en los balances de conservación de energía.

Generalmente los experimentos realizados al respecto, en los cuales se obtienen datos de estas constantes, no son muy abundantes en la literatura, por lo que la resolución numérica de estas ecuaciones de conservación de masa y de energía se complica.

En el caso isotérmico, las desviaciones con respecto al comportamiento del flujo tapón, tienen su origen en las variaciones de velocidad axial en la dirección radial y en la dispersión axial. La variación axial de velocidad conduce a una distribución del tiempo de residencia y lo mismo sucede con la dispersión axial. Sin embargo, en los reactores no isotérmicos, las desviaciones son potencialmente altas y es necesario tomar en cuenta las variaciones, especialmente las radiales.



II. FORMULACION DEL MODELO GENERAL DE UN REACTOR TUBULAR CON FLUJO PISTON

II. FORMULACION DEL MODELO GENERAL DE UN REACTOR TUBULAR CON FLUJO PISTON.

1. BALANCES DE CONSERVACION DE MASA Y ENERGIA.

1.1. Balance de materia.

El curso de una reacción puede detectarse analizando con régimen continuo la masa de una cierta especie molecular (reactivo o producto). En un sistema de una sola reacción, uno de los reactantes suele ser el factor limitativo desde el punto de vista de su costo. Considérese, por ejemplo, el caso de la oxidación de SO_2 con aire, en donde el bióxido de azufre es el reactivo limitante. Claro está que se puede hacer un balance para cada componente y para la masa total, pero esto no es necesario, pues la composición de la mezcla reaccionante puede expresarse en términos de una variable, la conversión o el grado de verificación de la reacción. Esto se hace usando la composición de los reactivos originales y la estequiometría de la reacción. Para sistemas de reacciones múltiples se pueden necesitar los balances de masas de otros componentes.

La conversión x es la fracción de un reactivo que se ha transformado en productos. Cuando solamente se verifica una reacción, esta definición es clara y precisa. Cuando un reactivo puede causar reacciones simultáneas o sucesivas con formación de diversos productos, tanto la conversión total de un reactivo como las conversiones a productos específicos, resultan factores de gran importancia.

El principio de conservación para cualquier reactor exige que la masa de la especie i en un elemento de reactor de volumen ΔV obedezca al siguiente enunciado:

Ecuación II.1

$$\left| \begin{array}{l} \text{velocidad de alimentación} \\ \text{de } i \text{ al elemento de volu-} \\ \text{men.} \end{array} \right| - \left| \begin{array}{l} \text{velocidad de salida de } i \\ \text{del elemento de volumen.} \end{array} \right|$$

$$+ \left| \begin{array}{l} \text{velocidad de producción} \\ \text{de } i \text{ en el elemento de} \\ \text{volumen.} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{l} \text{velocidad de acumulación} \\ \text{de } i \text{ en el elemento de} \\ \text{volumen.} \end{array} \right|$$

Cuando hablamos de un reactor tubular con flujo pistón, la forma de operación que rige al sistema es la de un reactor continuo, lo que asume que el término de la ecuación (II.1) correspondiente a la velocidad de acumulación de la especie i en el elemento de volumen es nulo.

Una de las características claves del enunciado de la ecuación (II.1) es el tamaño del elemento de volumen y su relación con el término de velocidad de producción. El elemento debe ser lo suficientemente pequeño para que la concentración y la temperatura sean uniformes en toda su extensión. De otra forma la velocidad de reacción r que aparece en la velocidad de producción no será constante en todo el elemento de volumen, reduciéndose así la aplicación de la ecuación (II.1). Claro está que esta restricción siempre puede satisfacerse seleccionando un elemento de volumen tridimensional diferencial. Al hacer esto, se obtiene la ecuación de continuidad de la especie. Entonces esta ecuación mas general puede integrarse con respecto al volumen del reactor, con lo que se obtiene un balance macroscópico de masas. Por otra parte, la ecuación (II.1) puede aplicarse directamente al reactor tubular flujo pistón, haciendo uso de la ventaja de poder seleccionar elementos finitos de volumen para el

reactor, es decir, haciendo que la distancia que define este elemento de volumen tienda a cero o sea un diferencial.

En el reactor tubular con flujo pistón, las concentraciones varían a lo largo de la coordenada de longitud, z , pero no a lo largo de la coordenada radial, r . La temperatura también varía con z excepto cuando es posible una operación isotérmica. Se puede deducir que la velocidad de reacción varía con la longitud del reactor. Por consiguiente el elemento de volumen en el balance de masa, ecuación (II.1), debe ser de longitud diferencial, pero puede prolongarse a lo largo de la totalidad del diámetro del reactor. En general, los reactores de flujo tubular se operan en forma continua, por lo que las propiedades en cualquier posición son constantes con respecto al tiempo. La ecuación (II.1) aplicada al elemento de volumen ΔV para este tipo de operación continua se transforma en:

$$QC_i|_v - QC_i|_{v + \Delta v} + r_i \Delta V = 0 \dots\dots\dots(II.2)$$

en donde aplicando la definición de la derivada tomando el límite como $\Delta V \rightarrow 0$, se obtiene

$$\frac{d(QC_i)}{dV} = r_i \dots\dots\dots(II.3)$$

o en términos de la longitud z del reactor

$$\frac{d(QC_i)}{dz} = r_i A \dots\dots\dots(II.3)$$

en donde A es el área de flujo del tubo descrita en la figura I.1 y que se relaciona con el volumen del tubo por medio de $V = A \times z$ que en

términos diferenciales es aplicable a las ecuaciones (II.3).

La velocidad volumétrica de flujo Q , así como C_A , pueden variar en forma significativa con la longitud del reactor, debido a cambios de temperatura y de número total de moles en una reacción de fase gaseosa. Por estas razones suele preferirse expresar la ecuación (II.3) en términos de conversión en lugar de concentración. Esto se basa en la ventaja de la constancia de la velocidad de alimentación del reactante, F_A . La relación entre la concentración y la conversión se expresa con la ecuación .

$$x_A = \frac{(n_A)_0 - (n_A)}{(n_A)_0} \dots\dots\dots(II.4)$$

donde la conversión x_A se expresa en función de n_A , las moles de reactivo. Las moles de reactivo iniciales menos las moles de reactivo presente, son las moles que han reaccionado. En términos de concentración y de velocidad volumétrica de flujo, la velocidad de alimentación del reactante es $F_A = Q \times C_A$ y de acuerdo a las ecuaciones (II.3) y si la especie i es el reactante A , se puede obtener la ecuación diferencial en función de F_A

$$\frac{dF_A}{dV} = r_A \dots\dots\dots(II.5)$$

o en todo caso en función de la conversión u otros parámetros como puede ser θ , el tiempo de residencia.

1.2 Balance de energía.

Para la ecuación de conservación de masa se formuló el enunciado de la ecuación (II.1). Se puede escribir un enunciado verbal similar

para la conservación de la energía en los reactores:

Ecuación (11.6)

$$\left| \begin{array}{l} \text{Energía en las corrien-} \\ \text{tes de entrada al ele-} \\ \text{mento de volumen.} \end{array} \right| - \left| \begin{array}{l} \text{Energía en las corrien-} \\ \text{tes que salen del ele-} \\ \text{mento de volumen.} \end{array} \right|$$

$$+ \left| \begin{array}{l} \text{Energía transferida de} \\ \text{los alrededores al} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right| + \left| \begin{array}{l} \text{Transformación de} \\ \text{energía en el ele-} \\ \text{mento de volumen} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{l} \text{Acumulación de ener-} \\ \text{gía en el elemento} \\ \text{de volumen} \end{array} \right|$$

Este es un enunciado de la primera ley de la termodinámica, escrito de tal manera que sea aplicable a las condiciones de operación continua o discontinua. En el caso de una operación continua, que es el caso del flujo pistón, el término de acumulación de energía en el elemento de volumen es nulo.

En los reactores tubulares de flujo continuo, la energía de las corrientes incluye las contribuciones de la energía cinética y la energía potencial además de la entalpía. Sin embargo, casi siempre sucede que, al verificarse las reacciones, estas contribuciones son poco importantes. Entonces para la operación del reactor tubular con flujo pistón la ecuación (11.6) se convierte en:

$$H' \Big|_v - H' \Big|_{v+\Delta v} + \Delta v + qv + r\Delta v \Delta H_r^\circ = 0 \quad \dots\dots\dots(11.7)$$

donde H' es la entalpía y qv el calor transferido por unidad de volumen y se refieren a las velocidades de transferencia de energía y los subíndices v y $v+\Delta v$ indican los límites del elemento diferencial de volumen. El término $r\Delta v \Delta H_r^\circ$, se refiere a la transformación de energía en el elemento de volumen según la velocidad de reacción r y el calor de reacción ΔH_r° que determina si la transformación es para generar

calor o para absorber calor dependiendo si la reacción es *endotérmica* o *exotérmica*. Una vez más, aplicando la definición de la derivada y tomando el límite como $\Delta V \rightarrow 0$, se obtiene

$$\frac{dH'}{dV} = qv + r\Delta H_r^{\circ} \dots\dots\dots(II.8)$$

donde las diferenciales se refieren a la variación en un elemento de volumen. Es decir, dH' es la variación de flujo de energía entre las corrientes que salen y entran con respecto al elemento de volumen, y qv es la velocidad de transferencia de energía por unidad de volumen.¹ La diferencia de entalpía se debe nuevamente al cambio de temperatura dT y a la variación de composición asociada con la reacción. Por otra parte, para que la ecuación de energía sea útil, es necesario que el cambio de entalpía dH se exprese en términos de la temperatura. Esto consiste básicamente en un procedimiento termodinámico. Supóngase que la velocidad total de flujo molar en el reactor sea F_t y la capacidad calorífica molar (que se supone constante) de la mezcla reaccionante sea c_p , entonces el cambio de entalpía puede expresarse como:

$$dH' = F_t c_p dT \dots\dots\dots(II.9)$$

Por otra parte si la velocidad de transferencia de calor puede expresarse en términos de un coeficiente total h_o por unidad de volumen y la temperatura del medio circundante, T_s ,

¹ Para reactores no ideales (en los que no se justifica la suposición de flujo pistón) las contribuciones de la dispersión axial a la energía que entra y sale del reactor pueden ser importantes.

$$q_v = h_{ov} (T_n - T) \dots\dots\dots(II.10)$$

Sustituyendo las ecuaciones (II.9) y (II.10) en la (II.8) se obtiene:

$$\frac{dT}{dV} = \frac{h_{ov} (T_n - T) + r\Delta H_r^0}{F_c c_p} \dots\dots\dots(II.11)$$

2. ANALISIS DE LA ESTRUCTURA DEL MODELO

Después de plantear y representar físicamente el fenómeno del las reacciones químicas dentro de un reactor tubular en este caso de tipo ideal (con flujo pistón), podemos observar que a través de los balances de conservación de masa y energía a lo largo del reactor, se obtienen dos ecuaciones respectivamente. Estas dos ecuaciones son la (II.3) y la (II.8):

$$\frac{d(C_i)}{dV} = r_i \qquad \frac{dH^0}{dV} = q_v + r\Delta H_r^0$$

que se pueden expresar de diferentes maneras según convenga o se disponga de datos.

En estas dos ecuaciones existen los elementos siguientes:

1. Una variable independiente en forma diferencial, dV , el volumen del reactor.
2. Una variable dependiente también en forma diferencial que se encuentra en forma implícita en los términos dC_i y dH^0 . Tal como aparecen pueden ser la concentración de reactivos C_i y la entalpía


de los reactivos H^+ .

3. Una función que representa por medio de una expresión algebraica el fenómeno físico directamente. Esta función es el miembro ubicado al lado derecho de ambas ecuaciones, el término r_i y el término $qv + r\Delta H_r^\circ$. Estas expresiones son funciones de la variable dependiente o también, como puede suceder, son funciones de una, dos, tres o hasta más variables dependientes. Esta segunda consideración forma los sistemas de ecuaciones. En este caso podemos decir que

$$r_i = f(C_i) \quad \text{y} \quad qv + r\Delta H_r^\circ = f(T), f(C_i, T)$$

A partir de estos elementos y de la consideración de que las variables se encuentran expresadas en forma diferencial podemos ver que las ecuaciones corresponden a ecuaciones diferenciales ordinarias. Así también, al expresar estas variables en forma diferencial, los límites de integración para encontrar la solución de la ecuación en forma numérica, son valores que se deben conocer; este tipo de problemas se conocen como de *valor inicial*.

Como los problemas que se obtienen de la observación de fenómenos físicos generalmente son una aproximación a la situación real, es interesante saber si al introducir cambios pequeños en el enunciado del problema éstos ocasionan correspondientemente cambios pequeños en la solución. Esto también es importante ya que existe la posibilidad de cometer errores de redondeo cuando se usan métodos numéricos.



**III. ANALISIS DE TECNICAS NUMERICAS APLICABLES
EN LA SOLUCION DE UN REACTOR TUBULAR CON
FLUJO PISTON**

III. ANALISIS DE TECNICAS NUMERICAS APLICABLES EN LA SOLUCION DE UN REACTOR TUBULAR FLUJO PISTON.

1. INTRODUCCION

El comportamiento de muchos procesos físicos, particularmente los dependientes del tiempo, puede representarse por medio de ecuaciones diferenciales ordinarias. Los métodos de solución de estas ecuaciones son por tanto de gran importancia para científicos e ingenieros. Aunque se conoce la solución analítica de muchas ecuaciones diferenciales importantes, un número todavía mayor de ellas no pueden ser resueltas analíticamente. Afortunadamente puede en general encontrarse la solución numérica de estas últimas.

Ecuaciones diferenciales ordinarias de orden N. Sea la ecuación diferencial ordinaria de orden n siguiente

$$F \left\{ x, y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2y}{dx^2}, \frac{d^3y}{dx^3}, \dots, \frac{d^ny}{dx^n} \right\} = 0$$

Toda ecuación de este tipo se denomina de orden n por que la derivada de mayor orden que aparece en ella es de orden n , y ordinaria porque solamente aparecen *derivadas totales* (no aparecen derivadas parciales, o, lo que es lo mismo, solamente hay una variable independiente, x). Toda función $y(x)$ que satisfaga esta ecuación, siendo al menos n veces diferenciable, es una solución de la ecuación.

Solución de las ecuaciones diferenciales ordinarias de primer

orden. Una ecuación de primer orden es, por definición, de la forma

$$F \left\{ x, y, \frac{dy}{dx} \right\} = 0$$

o, lo que es lo mismo,

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \dots\dots\dots(III.1)$$

Para este tipo de ecuaciones se desea calcular una solución $y(x)$ que satisfaga simultáneamente la ecuación (III.1) y una condición inicial determinada. Para obtener una solución única de la ecuación (en general existirán muchas funciones $y(x)$ que satisfagan la ecuación (III.1)) es necesaria información adicional, es decir, valores de $y(x)$ y/o su derivada en algunos puntos definidos por sus valores de x . Si se especifican todas las condiciones para el mismo valor de x (por ejemplo, x_0), el problema se denomina problema de *valores iniciales*.

En general es imposible obtener la solución analítica de $y(x)$. Por el contrario, se divide el intervalo $[a, b]$ de la variable independiente x en que se desea la solución en subintervalos o *pasos*. La longitud del subintervalo o *paso*, viene dada por

$$h = \frac{b - a}{n}$$

y por tanto

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

2. METODOS DE EULER

2.1. Método de Euler simple.

El método de Euler es el método más sencillo y se usa en la práctica solo en determinadas ocasiones, sus limitaciones en la exactitud de la solución no lo hacen aconsejable en gran parte de los problemas de diseño de reactores tubulares.

Sean a y b los valores inicial y final de la variable independiente x , n los subintervalos de integración o pasos y h el incremento definido por

$$h = \frac{b - a}{n}$$

Siendo i el subíndice para designar el valor de las variables para cada paso o subintervalo, es decir, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, el algoritmo para la integración entre x_i y x_{i+1} , es decir, el cálculo de la(s) variable(s) dependiente(s) y_i tiene la forma

$$y_{i+1} = y_i + hf_i \quad \dots\dots\dots(III.2)$$

donde

$$f_i = f(x_i, y_i)$$

y f_i es la función derivada o función diferencial resultado de un modelo matemático, del tipo de la ecuación (III.1); evaluada en los valores x_i y y_i , donde a su vez, x_i fué evaluada como

$$x_{i+1} = x_i + h$$

En el primer subintervalo, donde $y_0 = y(x_0)$, el valor de y_i utilizado por la ecuación (III.2) esta establecido por las *condiciones iniciales* siendo que se trata de un problema de valores iniciales.

2.2. Método de Euler modificado.

El método de Euler modificado sigue casi el mismo algoritmo que el de Euler simple, siendo la diferencia que el primero hace una ligera corrección en los valores de y_i calculados *prediciendo* primero con el algoritmo de Euler simple. La siguiente secuencia es el algoritmo de este método:

- 1) Predecir y_{i+1} utilizando Euler simple.
- 2) Calcular f_{i+1} a partir de x_{i+1}, y_{i+1} .
- 3) Corregir y_{i+1} .

El paso (3) esta dado por la siguiente ecuación

$$y_{i+1} = y_i + \frac{f_i + f_{i+1}}{2} h \dots\dots\dots(III.3)$$

El método de Euler modificado es un método *predicor-corrector*, que toma el promedio de las derivadas entre los subintervalos i e $i+1$ para todo el rango de integración.

3. METODOS DE RUNGE-KUTTA

La solución de una ecuación diferencial por lo que es llamado desarrollo directo de series de Taylor, del cual es derivado el algoritmo de Euler general, exige una serie determinada y específica en cada problema para su solución. Por ello no es posible obtener un algoritmo sencillo, análogo al método de Euler, a partir del desarrollo de Taylor.

Afortunadamente es posible deducir algoritmos de paso sencillo que incluyen solo cálculos de derivadas de primer orden, pero que a su vez producen resultados equivalentes en exactitud a las fórmulas de Taylor de orden superior. Estos algoritmos son los llamados Métodos de Runge-Kutta. Las aproximaciones de segundo, tercer y cuarto orden requieren el cálculo de $f(x,y)$ en dos, tres y cuatro puntos respectivamente, de x en el intervalo $x_i \leq x \leq x_{i+1}$.

Todos los métodos de Runge-Kutta tienen algoritmos de la forma

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(x_i, y_i, h)$$

En esta expresión, ϕ , es llamada función *incremento*, es sencillamente una aproximación de $f(x,y)$ en el intervalo $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ elegida convenientemente.

El método de Runge-Kutta de 4º orden es el algoritmo más común en la solución de modelos matemáticos para reactores tubulares. La fórmula de cuarto orden es de la forma

$$y_{i+1} = y_i + h(ak_1 + bk_2 + ck_3 + dk_4)$$

donde k_1, k_2, k_3 y k_4 son valores aproximados de la derivada calculados en el intervalo $x_i \leq x \leq x_{i+1}$. El algoritmo para este método quedaria como sigue

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(x_i, y_i) \\
 k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} \cdot k_1\right) \\
 k_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} \cdot k_2\right) \\
 k_4 &= f(x_i + h, y_i + h \cdot k_3)
 \end{aligned}
 \quad \dots\dots\dots(III.4)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

4. SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS

En el capítulo II se hizo un análisis de la estructura del modelo matemático generado por las ecuaciones de conservación de masa y energía. Se estudió que para un problema real en dimensionamiento de reactores tubulares, se pueden presentar varios casos dependiendo del tipo de reactor tubular (para fines de esta tesis, con *flujo piston*) y de la forma de operación planteada.

En general los requerimientos matemáticos para este tipo de problemas, quedan representados por ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden. Ahora bien, se pueden presentar varias ecuaciones diferenciales de este tipo, en cuyo caso el problema se transforma en la resolución de un sistema de estas ecuaciones, que no se complica en mucho a lo que el algoritmo de Runge-Kutta ofrece solución para una

sola ecuación.

Considérese a continuación la solución del siguiente sistema de n ecuaciones diferenciales de primer orden simultáneas, cuyas variables dependientes son y_1, y_2, \dots, y_n :

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dx} &= f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n), \\ \frac{dy_2}{dx} &= f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n), \\ &\vdots \\ \frac{dy_n}{dx} &= f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n), \dots\dots\dots(III.5)\end{aligned}$$

y cuyas condiciones iniciales, dadas en un mismo punto (x_0) son

$$\begin{aligned}y_1(x_0) &= (y_1)_0 \\ y_2(x_0) &= (y_2)_0 \\ &\vdots \\ y_n(x_0) &= (y_n)_0\end{aligned}$$

La solución de este sistema no ofrece más dificultades que la de una ecuación de primer orden. El algoritmo de solución se aplica paralelamente a cada una de las n ecuaciones en cada paso. De tal manera que se requerirán, para el algoritmo de Runge-Kutta de 4° orden, el cálculo paralelo de las cuatro constantes para cada una de las n ecuaciones del sistema y la misma fórmula de cálculo para cada una de las y_{i+1} .

En esta tesis, el sistema computacional desarrollado, soporta la

solución simultánea hasta de tres ecuaciones diferenciales ordinarias, permitiendo al usuario seleccionar el número de variables dependientes desde una hasta tres.

El algoritmo de solución para un sistema de tres ecuaciones, sería la aplicación simultánea de las ecuaciones (III.4) para una sola ecuación calculando las cuatro constantes para cada ecuación diferencial del sistema, es decir, cuatro por tres ecuaciones, doce constantes. Estas cuatro ternas de constantes serán función de las tres variables dependientes y_1, y_2 y y_3 . Así, primero se calcularían las primeras tres constantes de subíndice uno, k_1, l_1 y m_1 , después las de subíndice dos y así sucesivamente hasta las de subíndice cuatro obteniendo entonces doce constantes (para este caso de tres ecuaciones simultáneas) y calculando después las tres variables dependientes $y_{1,i}, y_{2,i}$ y $y_{3,i}$ en igual forma que en las ecuaciones (III.4).

A continuación se describe el algoritmo para este caso

$$k_1 = f_1(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, y_{3,i}),$$

$$l_1 = f_2(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, y_{3,i}),$$

$$m_1 = f_3(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, y_{3,i}),$$

$$k_2 = f_1\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2} \cdot k_1, y_{2,i} + \frac{h}{2} \cdot l_1, y_{3,i} + \frac{h}{2} \cdot m_1\right)$$

$$l_2 = f_2\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2} \cdot k_1, y_{2,i} + \frac{h}{2} \cdot l_1, y_{3,i} + \frac{h}{2} \cdot m_1\right)$$

$$m_2 = f_3\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2} \cdot k_1, y_{2,i} + \frac{h}{2} \cdot l_1, y_{3,i} + \frac{h}{2} \cdot m_1\right)$$

$$k_3 = f_1\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2} \cdot k_2, y_{2,i} + \frac{h}{2} \cdot l_2, y_{3,i} + \frac{h}{2} \cdot m_2\right)$$

$$l_3 = f_2\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2} \cdot k_2, y_{2,i} + \frac{h}{2} \cdot l_2, y_{3,i} + \frac{h}{2} \cdot m_2\right)$$

$$m_3 = f_3\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2} \cdot k_2, y_{2,i} + \frac{h}{2} \cdot l_2, y_{3,i} + \frac{h}{2} \cdot m_2\right)$$

$$k_4 = f_1(x_i + h, y_{1,i} + h \cdot k_3, y_{2,i} + h \cdot l_3, y_{3,i} + h \cdot m_3)$$

$$l_4 = f_2(x_i + h, y_{1,i} + h \cdot k_3, y_{2,i} + h \cdot l_3, y_{3,i} + h \cdot m_3)$$

$$m_4 = f_3(x_i + h, y_{1,i} + h \cdot k_3, y_{2,i} + h \cdot l_3, y_{3,i} + h \cdot m_3)$$

$$y_{1,i+1} = y_{1,i} + \frac{h}{\delta}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$y_{2,i+1} = y_{2,i} + \frac{h}{\delta}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \dots \dots \dots (III.6)$$

$$y_{3,i+1} = y_{3,i} + \frac{h}{\delta}(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)$$

En estos cálculos, las funciones f_1, f_2, f_3 , son las ecuaciones diferenciales ordinarias mencionadas anteriormente que se representan por las ecuaciones (III.5).

De manera análoga, el algoritmo para un sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias que se resuelven simultáneamente, se formula como el caso arriba descrito. Es evidente que el cálculo se simplifica ya que solo existen dos variables dependientes y por tanto solo cuatro pares de constantes a calcular, $k_1, l_1; k_2, l_2$; etc, hasta los subíndices cuatro. En general, el número de constantes calculadas dependerá del número de ecuaciones diferenciales que tenga el sistema.

**IV. DISEÑO Y CREACION DE UN SISTEMA COMPUTACIONAL
PARA DIMENSIONAMIENTO DE REACTORES TUBULARES
CON FLUJO PISTON**

IV. DISEÑO Y CREACION DE UN SISTEMA COMPUTACIONAL PARA DIMENSIONAMIENTO DE REACTORES TUBULARES CON FLUJO PISTON.

1. DISEÑO

OBJETIVO. En esta tesis se diseño y creó un sistema computacional con el fin de poder auxiliar al usuario en la solución de problemas de reactores tubulares. Este sistema esta diseñado con el propósito de ser una herramienta versátil para el cálculo ingenieril en este tipo de problemas, ya que funciona en forma de menús que representan ciertos módulos independientes o ciertas actividades que pueden realizarse una o más veces consecutivamente sin afectar el resto del sistema.

Uno de los problemas mas frecuentes en el diseño de reactores tubulares, ya sea de tipo ideal o no ideal, es el que se presenta en el momento en que se requieren cálculos numéricos simples pero de muy largo desarrollo, que se derivan como ya se ha mencionado de ecuaciones diferenciales y a su vez de modelos matemáticos como los balances de conservación de masa y energia. Para enfrentar estos cálculos numéricos de largo desarrollo y a veces de carácter *repetitivo*, es muy conveniente disponer de rutinas de cálculo programadas para utilizarse con una computadora, además es muy importante también la organización de los datos, es decir, poder acceder o guardar información de tipo numérica para así poder disponer de esta cuando se necesite.

Siendo así, los objetivos de este trabajo son presentar al usuario un sistema en que los datos iniciales y los datos resultantes de los cálculos puedan ser modificados una y otra vez observando diferentes

posibilidades de diseño.

DEFINICION DE FUNCION. Dentro del diseño de este sistema computacional una de las partes más importantes es la de poder definir la ecuación diferencial a utilizar. Esto es simplemente el poder escribir directamente la ecuación algebraica que representa el problema del reactor tubular, y en todo caso corregir la misma.

Esta capacidad del sistema de poder definir la función le da gran versatilidad. Se dispone de una línea de 70 caracteres para escribir esta ecuación de tal manera que pueda ser procesada por la computadora, esto quiere decir que se tendrá que escribir en código de programación como se haría en lenguaje BASIC, PASCAL o en cualquier otro lenguaje de programación.

Al tener la posibilidad de definir la función diferencial y corregirla se tienen varias ventajas, ya que las variables a observar pueden ser explícitas o implícitas en varias partes del programa. Es decir, para obtener la función diferencial se parte de el balance de conservación de masa, por ejemplo, o de energía; a partir de una ecuación base de este tipo como las mostradas en el capítulo II inciso 2.1, se pueden expresar las variables de concentración en función de la conversión, o bien las variables de flujo o alimentación molar en función del *espacio-velocidad* o el *tiempo de residencia*, la presión parcial, etc., dependiendo esto de lo que se requiera o de los datos disponibles. En ciertas ocasiones, para diseñar un reactor, se desea saber la longitud del tubo que debe de construirse para alcanzar cierta conversión de reactantes a productos, por tanto, las ecuaciones deben expresarse en función de la conversión.

Ahora bien, las variables dependientes de una ecuación diferencial son aquellas que queremos conocer, y que a través de la solución numérica, quedarán establecidos sus valores dentro de un rango seleccionado. Sin embargo, existen parámetros que también forman parte de la ecuación *base* que a través de su simplificación podrán quedar implícitos o explícitos en la ecuación final a resolver. Esto significa que existen parámetros como temperaturas, presiones totales, diámetros internos de tubo, densidades molares, flujos de alimentación, concentraciones iniciales, etc., etc., que están involucrados directamente en el diseño, interpretación, desarrollo y resolución del problema de reactor tubular. Estos parámetros muchas veces son absorbidos por simplificaciones algebraicas de las ecuaciones que en ocasiones resultan ser demasiado largas y que son más fáciles de manejar en su forma más simplificada. No obstante, podemos dejar en forma explícita cualquiera de estos parámetros y observar los resultados obtenidos para diferentes valores de estos, por ejemplo, un caso muy común, el diámetro interno del tubo.

En resumen, la *definición de función* ofrece la ventaja de poder expresar la función en una forma u otra y ser corregida antes o después de efectuar los cálculos en el proceso de diseño. Como siempre, cabe observar las limitaciones que presenta el sistema ante esta situación, y que básicamente son dos:

- a) La captura y edición de la ecuación diferencial debe realizarse en código de programación (como se mencionó en párrafo anterior) y debe ser una línea con longitud máxima de 70 caracteres, permitiéndose corregir libremente los caracteres con movimientos del cursor.

b) La *compilación exitosa* de esta función dependerá de la correcta introducción de la ecuación en cuanto a sintaxis se refiere (paréntesis correctamente colocados y cerrados) además de la utilización exclusiva de funciones definidas en la pantalla "Funciones disponibles (F2)" o bien de todas aquellas que puedan ser reconocidas por el compilador de Turbo Pascal V. 4.0 ³.

Es importante señalar, como se describe en los siguientes incisos, que para el correcto funcionamiento del sistema, el usuario deberá cerciorarse de una *compilación exitosa* por medio de una pantalla que sigue inmediatamente a la compilación y que contiene el mensaje desplegado por el compilador Turbo Pascal V. 4.0 ⁴.

ASPECTOS DE PROGRAMACION. La programación de este sistema fue realizada en lenguaje DBASE (compilador CLIPPER) y en lenguaje Pascal (compilador Turbo Pascal 4.0). Esta combinación de herramientas resulta ser especialmente útil pues cada compilador cubre diferentes necesidades de mejor manera que el otro. A continuación se mencionan las necesidades que se logran cubrir mejor con cada uno de estos compiladores:

Pascal. - 1) Mayor rapidez en los cálculos numéricos

2) Requerimientos de memoria relativamente menores.

Dbase. - 1) Mayor facilidad de programación en forma de menus, los cuales permiten una mejor organización del trabajo y de la utilización del sistema.

2) Capacidad de edición y captura de datos muy desarrollada así como de manejo de datos y archivos de datos.

Esta combinación de lenguajes presenta ciertos obstáculos. El sistema está estructurado en base a un programa principal o menú principal que controla la ejecución de otros menús o sub-programas que realizan diferentes actividades. Cuando se requiere hacer las operaciones correspondientes de un determinado problema, es decir, los cálculos numéricos, el sistema ejecuta un sub-programa externo interactuando con el Sistema Operativo, esto quiere decir que el programa principal, o el archivo ejecutable que inició el control de las actividades, transfiere este control a otro archivo ejecutable del Sistema Operativo que efectúa los cálculos rápidamente. Esto también ocurre por ejemplo cuando se ejecuta la opción de compilación.

El problema que se presenta en esta interacción con el Sistema Operativo es que la memoria de acceso aleatorio (RAM) deberá ser relativamente mayor cada vez dependiendo de qué tanta memoria se requiera por el programa externo. Así mismo, los requerimientos de memoria RAM del sistema debieron ser correctamente administrados en su programación de tal manera que se permita la interacción con el Sistema Operativo de manera eficiente y rápida. Como se mencionará más adelante, el requerimiento mínimo de memoria RAM para este sistema es de 512 K.

2 DIAGRAMA DE BLOQUES

El presente diagrama de bloques o diagrama de flujo, presenta las diferentes actividades que realiza el sistema elaborado mostrando una secuencia consecutiva y representando el sentido en el que fluyen o

pueden fluir estas actividades.

A continuación, se da una breve explicación de cada uno de los bloques representados en el diagrama:

1) DATOS. Esta parte del programa presenta dos opciones:

1) DEFINICION DE FUNCION. Presenta también dos opciones:

1) EDITAR FUNCION. Esta opción se utiliza para definir el número de variables dependientes que representan el problema a resolver y para capturar y corregir la(s) ecuación(es) diferencial(es).

2) COMPILAR FUNCION. Compila la(s) ecuación(es) diferencial(es) definidas mostrando el resultado de la compilación inmediatamente después. El usuario debe cerciorarse de que no existió ningún error de compilación pues de lo contrario no podrá continuar con las siguientes actividades.

2) CONDICIONES INICIALES. Esta opción permite al usuario establecer los valores iniciales para las variables dependientes y el intervalo de cálculo o rango de la variable independiente, así como el número de pasos (el número de pasos máximo permisible es de 99). La especificación de valores iniciales que no concuerden con los rangos permisibles por las ecuaciones diferenciales definidas, resultarán en errores de cálculo (*Runtime error*, *Division by zero*, etc.) y el proceso de cálculo será abandonado. También, como se puede observar en otros tipos de métodos de cálculo numérico, el número de pasos definido puede ser de mayor importancia, especialmente cuando el rango de cálculo (el valor máximo de la variable independiente con respecto al valor mínimo), es demasiado amplio.

2) OPERACIONES. En esta parte del programa se realizan los cálculos numéricos una vez que se han definido y compilado las ecuaciones diferenciales. Primeramente, antes de realizar los cálculos, se muestra en la pantalla el número de variables seleccionado y los valores iniciales definidos, permitiendo al usuario regresar al menú de datos para corregir estos valores si es necesario. En seguida, el sistema realiza los cálculos desplegando el número de pasos efectuados y escribe los resultados a disco.

3) RESULTADOS. Este bloque del programa presenta dos opciones:

1) CONSULTA POR PANTALLA. Se visualizan los resultados en el monitor. Primeramente se definen los nombres de las variables y las unidades en que están representadas, por ejemplo; Nombre: *Temperatura*, Unidades: °F. Posteriormente se despliegan los resultados de las últimas operaciones realizadas.

2) REPORTE IMPRESO. Se imprimen los resultados en papel. Primeramente se definen los nombres de las variables y las unidades en que están representadas, y el título del reporte. Estando lista la impresora, se imprimen en papel de tamaño 11 x 9 pulgadas, los resultados de las últimas operaciones realizadas en forma similar a la consulta.

4) GRAFICACION. Existen dos opciones:

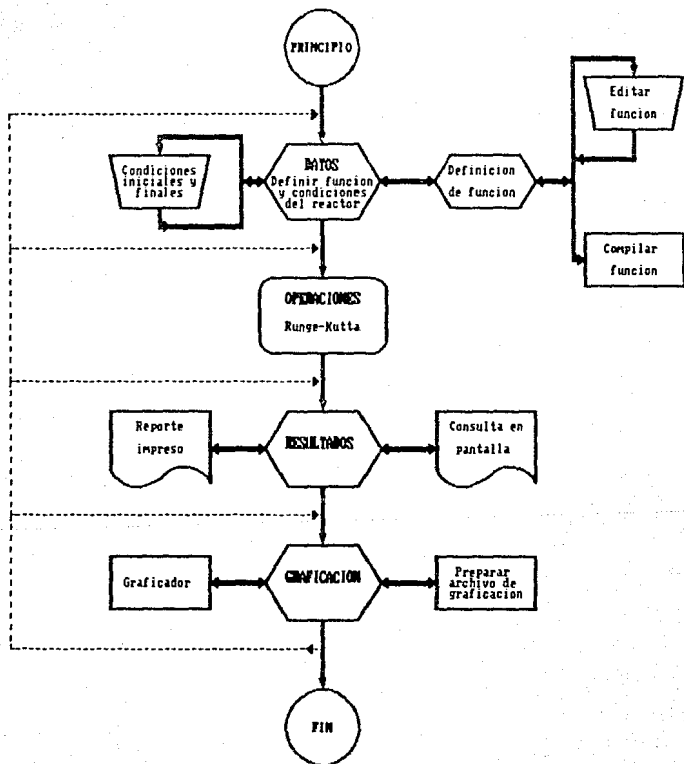
1) PREPARAR ARCHIVO. Construye el archivo *DATGEAF.GFF* que contiene el número de variables dependientes, los nombres de las variables y los valores calculados por el método de Runge-Kutta 4° orden.

Este archivo será utilizado por el graficador.

- 2) GRAFICADOR. Activa el graficador GRAFO⁴. Es necesario realizar como primera actividad al utilizar el graficador, la opción "2. LEE DE DISCO DATOS A GRAFICAR" tecleando como nombre de archivo *DATOSRAF.SPF*. Esta opción utilizará los datos grabados en la última operación de *Preparar archivo*.

Versión 1.0 (1988). Elaborado por Carlos Moreno Padilla, Laboratorio de Computación, Facultad de Químicas, U.N.A.M.

DIAGRAMA DE BLOQUES DEL SISTEMA



3. ESTRUCTURA DEL SISTEMA

En este inciso se pretende dar una esquematización de como esta organizado el sistema que se elaboró en esta tesis. Ahora, a diferencia del inciso anterior, se presentará un *Diagrama de estructura del sistema* en el cual se puede apreciar un organigrama con los nombres de los programas fuente poniéndose de relieve la dependencia de los programas entre si, la transferencia de control por medio de menus, y se dará también una breve explicación del contenido de cada uno de estos programas.

DMEPRINC.- Programa de Menu Principal

Este programa contiene el código de inicialización de variables globales primeramente, así como el del subprograma para inicializar la fecha para la sesión de trabajo, dato que es de mayor importancia para la correcta aplicación del compilador. El señalar la fecha correcta, evitará errores posteriores. Así mismo, este programa muestra el menu principal cuyas opciones pueden ser seleccionadas con las flechas y <enter> o bien con el número correspondiente.

DMEDATOS.- Programa de Menu de Datos

El programa ejecuta un menu de opciones para definir función o definir condiciones.

DMEDEFUN.- Programa de Menu de Definición de Función

Ejecuta un menu de opciones para editar función o compilarla.

DEDITFUN.- Programa de Edición de Función

Este programa contiene el código para definir el número de variables dependientes seleccionándolo a través de un menu y también se define una variable de control de tipo lógica

para determinar si al iniciar una sesión ya se ha elegido primeramente el número de variables que represente el problema. Este programa también escribe a disco el archivo que contiene el código a compilar con las nuevas funciones definidas (FUNCUNIT.PAS).

DCOMPILA.- Programa de Compilación de Función

Este programa compila las funciones definidas interactuando con el Sistema Operativo para ejecutar el archivo externo TPC.EXE (Compilador Turbo Pascal V.4.0.). La línea de comando de esta orden es

RUN TPC CALCU??? /M > SALIDA.TPC

donde CALCU??? es el nombre del programa a compilar y reescribir en disco (los signos de interrogación representan los 3 posibles nombres cuyas últimas 3 letras pueden ser UND, DDS o TRE), la opción /M significa que el compilador revisará y compilará automáticamente los subprogramas que utilice CALCU??? dependiendo de que la fecha del archivo-código FUNCUNIT.PAS (fecha de creación registrada por el Sistema Operativo) sea anterior a la fecha que se capturó al iniciar la sesión de trabajo², y el resto de la línea ...> SALIDA.TPC significa que el texto resultante de la compilación (que contiene los mensajes correspondientes) se escribe al archivo SALIDA.TPC para su uso posterior.

² En caso de que la fecha de creación última del archivo FUNCUNIT.TPU sea posterior a la fecha de creación última del archivo CALCU???. EXE, el mensaje de error al compilar será "Identifier Expected".

Después de la compilación, se muestra una pantalla con el contenido de el archivo SALIDA.TFC.

DCONDICI.- Programa de Condiciones Iniciales

Se capturan las condiciones definidas y se escriben a disco traduciendo después el archivo a código ASCII para su posterior utilización.

DMEOPERA.- Programa de Operaciones

Contiene los "llamados" a las rutinas de cálculo numérico, es decir, al Runge-Kutta 4º orden que se encuentra en archivo ejecutable con el nombre CALCU???.EXE. Así mismo, actualiza el archivo DATORESU.DBF que contiene los resultados del cálculo.

DMERESUL.- Programa de Menu de Resultados

Ejecuta un menu de opciones para consulta o reporte.

DRESCONS.- Programa de Resultados, Consulta

En este programa se muestran los resultados actuales del archivo DATORESU.DBF.

DRESREPO.- Programa de Resultados, Reporte

En este programa se imprimen en papel forma continua de tamaño 11 x 9 pulgadas los resultados actuales del archivo DATORESU.DBF.

DMEGRAFI.- Programa de Menu de Graficación

Ejecuta menu para preparar archivo o graficar.

DGRAPREP.- Programa de Graficación, Preparar archivo

Prepara el archivo DATOGRAF.GRF que contiene los datos necesarios para ser utilizado por el graficador.

DGRAGRAF.- Programa de Graficación, Graficador, activar

Activa el graficador interactuando con el Sistema Operativo.

Los siguientes párrafos serán de utilidad para el usuario, están destinados a hacer hincapié en algunos aspectos importantes sobre la utilización y operación del sistema en cuanto a que derivan de la estructura del mismo.

A) Uso del graficador.

El graficador que auxilia al sistema fue elaborado en el Laboratorio de Computación de la Facultad de Química de la U.N.A.M. por el M. en C. Caritino Moreno Padilla, profesor docente de la Facultad y Asesor de la presente Tesis. Detalles acerca del programa o un completo instructivo de operación del graficador se pueden encontrar en el laboratorio. En cuanto a la relación que existe con este sistema, como ya se especificó anteriormente, es importante señalar que el presente sistema requerirá de la ejecución externa via Sistema Operativo de el archivo ejecutable GRAFO.EXE o de algun conjunto de ordenes de un archivo por lotes, es decir, de extensión *.BAT.

También es indispensable para la correcta interpretación de los datos a graficar, que se lean estos datos del archivo preparado para este objetivo, *DATOGRAF.GRF*. Para lograr esto, solo se necesita (como primera actividad al iniciar la sesión de graficado) seleccionar la opción 2 del menu principal del graficador, la opción "LEE DE DISCO DATOS A GRAFICAR" en la cual se solicitará el nombre del archivo que contiene estos datos. El usuario debe teclear normalmente DATOGRAF. Una vez hecho lo anterior, el graficador habrá dado lectura a los datos que se desean graficar y el usuario podrá "REVISAR LOS DATOS A GRAFICAR" o pasar directamente a "GRAFICACION", en donde podrá visualizar, editar, escribir a disco, leer de disco o imprimir los gráficos creados.

B) Restricciones de operación.

A pesar de la flexibilidad de operación que pueda ofrecer el sistema por medio de sus menús, el usuario debe observar cierta forma de operación *normal* con lo cual evitará problemas de tipo operativo. Esta "operación normal" puede ser establecida por las siguientes actividades

- 1.- Definición ó edición de función.
- 2.- Compilación (hasta leer el mensaje de una compilación exitosa)
- 3.- Definición de condiciones iniciales
- 4.- Operaciones
- 5.- Resultados
- 6.- Graficación

siendo prioritaria la actividad de definir la(s) función(es) al inicio de una sesión de trabajo del sistema, de otro modo los menús posteriores al "1. DEFINICION DE FUNCION" no podrán ser utilizados. Después de la definición y/o edición de función, se podrá operar libremente y en cualquier dirección.

C) Interacción con Sistema Operativo, Memoria mínima requerida.

La interacción con el S.O. es un importante aspecto en el diseño y operación del sistema, ya que permite la utilización de diferentes programas y por lo mismo la programación en diferentes lenguajes. Para que el control del sistema pueda *salir* temporalmente al Sistema Operativo, el conjunto de órdenes y los programas necesarios para éste

deben estar presentes en la memoria RAM de la computadora. Por esto, cuando el sistema busca interactuar al exterior, la lectura de esta información del S.O. es requerida. El usuario debe tener presente esto al utilizar el sistema en una máquina donde el S.O. no reside en el disco fijo, pues de lo contrario no se encontrará la información y se visualizará el mensaje "Error, diskette sin DOS", a lo cual el usuario debe insertar un disco de *5.25* o que contenga el Sistema Operativo DOS. Esta situación hace más lenta la operación conjunta del sistema pues en varias ocasiones se requiere de esta interacción. Se recomienda la utilización del sistema en una máquina con el Sistema Operativo DOS instalado en el disco fijo. Para configurar la máquina para que haga la búsqueda del Sistema Operativo en el lugar indicado, ver la orden del DOS "SET COMSPEC=" donde se puede direccionar la búsqueda a la unidad y trayectoria deseada.

La utilización de la memoria RAM por este sistema se controla a través la orden "SET CLIPPER=" que también es una orden del DOS. Esta utilización de memoria está debidamente configurada desde que se ejecuta el sistema (SISDIRTH.EXE), con la orden

SET CLIPPER=V002;R170.

El sistema elaborado en esta Tesis está diseñado para operar con un mínimo de 512 K de memoria RAM.

V. APLICACION DEL SISTEMA

V. APLICACION DEL SISTEMA

1. REACCION DE MEZCLA DE GASES IDEALES

Enunciado del problema

Una mezcla de gases ideales se introduce a un reactor tubular con un flujo de alimentación de 20 lbmol/hr. La temperatura de entrada de la mezcla es 1500 °R y la presión permanece constante prácticamente e igual a 5 atma. El reactor esta hecho de tubo de 4 pulg. de diámetro interno (ID). La reacción es $A + B \longrightarrow D$.

Se dispone de los siguientes datos:

T, °R	1400	1450	1500	1550	1600
$(10^6)k, ft^3/(lbmol)(hr)$	0.078	0.152	0.300	0.585	1.12

Composición de alimentación, en % mol: A, 40; B, 40; inerte, 20.

Calor específico, Btu/(lbmol)(°F): reactivos 6; productos 10; inerte 5.

$$\Delta H_r = 23,000 \text{ Btu/lbmol A a } 500 \text{ °R}$$

A estas condiciones, encontrar:

- Volumen del reactor contra lbmol de A convertidas¹.
- El volumen del reactor contra la velocidad de transferencia de calor requerida para mantener una temperatura constante de 1500°R.
- La conversión contra el volumen del reactor, para una temperatura inicial de 1500°R, un coeficiente de transferencia de calor igual a 5 Btu/(hr)(ft²)(°F) y T_m constante a 1400°R.

¹ El inciso (a) y el (c) no se resuelven en esta aplicación. El inciso (b) se resuelve para ejemplificar el caso de una sola variable dependiente.

Solución

Tomando como base 1 lbmol total de alimentación, la ecuación de velocidad está dada por²

$$r = k \left(\frac{n_a}{V} \right)^2 = k \left[\frac{n_{a0} - x}{\frac{RT}{\pi} (n_{t0} + \theta x)} \right]^2$$

(b) Para mantener condiciones isotérmicas, sustitúyase $T = 1500$ en el balance de energía y se obtiene³

$$\text{Btu}/(\text{hr})(\text{ft}^2) = 10,920 \left(\frac{0.4 - x}{1 - x} \right)^2 \quad (G)$$

$$V_r = W \int \frac{dx}{r} = 3.2 \int_0^x \left(\frac{1 - x}{0.4 - x} \right)^2 dx \quad (H)$$

Para varios valores supuestos de x , los valores de la velocidad de transferencia de calor y V_r , se pueden calcular de las ecuaciones (G) y (H), los resultados se muestran en la Tabla 5-5⁴.

Aplicación al sistema

En este ejemplo de una sola variable dependiente, el problema es resuelto en el texto del libro como una integración directa de las

² Véase el desarrollo completo de las ecuaciones en el texto original de Stanley M. Walas, "Reaction Kinetics for Chemical Engineers", Ed. Mc. Gray Hill Book Company, Inc.

³ Idem.

⁴ Idem.

ecuaciones (G) y (H), sin embargo para fines de aplicación a este sistema podemos expresar la ecuación (H) de la siguiente forma

$$dV_r = W \left(\frac{1}{r} \right) dx$$

o bien
$$\frac{dV_r}{dx} = \frac{W}{r} \quad (I)$$

donde r es una función de x , es decir, $r = f(x)$ y W es una constante. Como el planteamiento de la resolución que se da a las ecuaciones diferenciales en el presente sistema contempla las expresiones en función de la variable dependiente, la ecuación (I) puede ser invertida para obtener $\frac{dx}{dV_r}$ y definir la conversión x como variable dependiente y el volumen del reactor V_r como variable independiente, obteniéndose la siguiente ecuación

$$\frac{dx}{dV_r} = \frac{r}{W} = \frac{1}{3.2} \left(\frac{0.4 - x}{1 - x} \right)^2 \quad (J)$$

Los valores inicial y final para la variable independiente pueden ser tomados de la Tabla 5-5 como $V_r(0) = 0$ y $V_r(\text{final}) = 15.0$, y para la variable dependiente el valor inicial como $x(0) = 0$.

Finalmente la ecuación (J) se aplica directamente al sistema con la expresión en código de programación

$$\frac{dY1}{dX} = (1/3.2) * \text{SQR}((0.4 - Y1)/(1 - Y1))$$

donde X es la variable independiente V_r y $Y1$ es la variable dependiente x . Las condiciones iniciales son

$$X(i) = 0$$

$$X(f) = 15$$

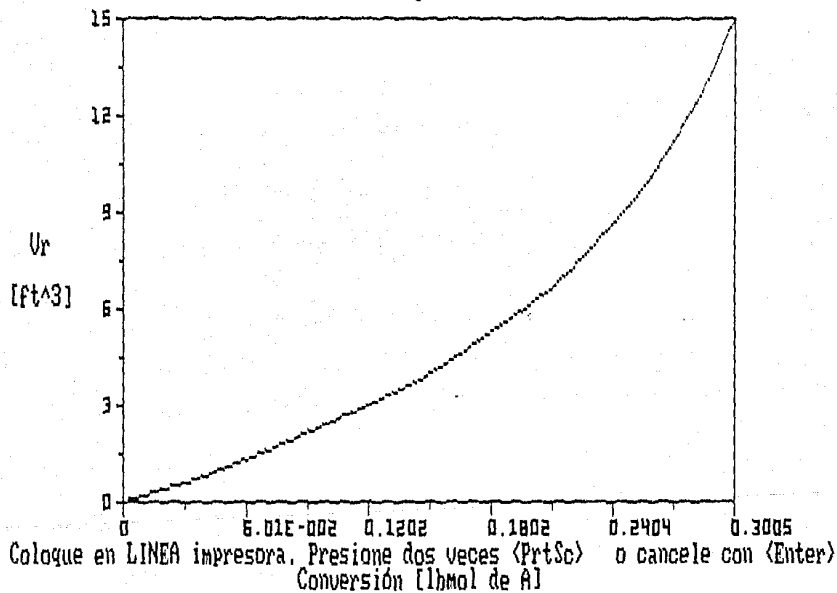
$$Y1(i) = Y1(0) = 0$$

Los resultados mostrados en la Tabla 5-5 para el inciso (b) del texto del libro corresponden a los que arroja el sistema que a continuación se incluyen.

REPORTE DE RESULTADOS
Ejemplo 1. Reacción de mezcla de gases

INTERVALO DE CALCULO	Volumen reactor (pies cúbicos)	Conversion (lbmol A)
1	0.0000	0.0000
2	0.5000	0.0241
3	1.0000	0.0464
4	1.5000	0.0671
5	2.0000	0.0862
6	2.5000	0.1040
7	3.0000	0.1204
8	3.5000	0.1356
9	4.0000	0.1497
10	4.5000	0.1627
11	5.0000	0.1748
12	5.5000	0.1860
13	6.0000	0.1964
14	6.5000	0.2061
15	7.0000	0.2151
16	7.5000	0.2234
17	8.0000	0.2312
18	8.5000	0.2385
19	9.0000	0.2453
20	9.5000	0.2517
21	10.0000	0.2576
22	10.5000	0.2632
23	11.0000	0.2684
24	11.5000	0.2733
25	12.0000	0.2779
26	12.5000	0.2822
27	13.0000	0.2863
28	13.5000	0.2902
29	14.0000	0.2938
30	14.5000	0.2972
31	15.0000	0.3005

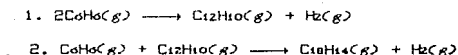
Volumen de reactor contra conversión
Ejemplo 5.1



2. DESHIDROGENACION DEL BENCENO EN FASE VAPOR

Enunciado del problema

En un análisis de los datos de Kassel para la deshidrogenación en fase vapor del benceno en un reactor continuo homogéneo, Hougen y Watson reportaron las reacciones



y las siguientes ecuaciones de velocidad:

$$r_1 = 14.96 \times 10^6 e^{-15,200/T} \left(P_B^2 - \frac{P_D P_H}{K_1} \right) \quad \text{moles lb de benceno que reaccionó/(h)(pie}^3)$$

$$r_2 = 8.67 \times 10^6 e^{-15,200/T} \left(P_B P_D - \frac{P_T P_H}{K_2} \right) \quad \text{moles lb de trifenilo o difenilo que reaccionó/(h)(pie}^3)$$

donde P_B = presión parcial del benceno, atm

P_D = presión parcial del difenilo, atm

P_T = presión parcial del trifenilo, atm

P_H = presión parcial del hidrógeno, atm

T = temperatura, K

K_1, K_2 = constantes de equilibrio para las dos reacciones en términos de presiones parciales.

Los datos sobre los que están basadas las ecuaciones de velocidad se obtuvieron a una presión total de 1 atm y a temperaturas de 1265 y 1400

°F, en un tubo de 0.5 plg y 3 pies de largo.

Se propone diseñar un reactor tubular que opere a una presión de 1 atm y a 1400 °F. a) Determine la conversión total de benceno a di y trifenilo como función de la velocidad espacial. b) Determine el volumen requerido del reactor para procesar 10,000 lb/h de benceno (la alimentación es benceno puro) en función de la conversión total. c) ¿Cuál es la velocidad espacial a la cual la concentración de difenilo es máxima?. Suponga que el reactor operará isotérmicamente y que no hay otras reacciones importantes.

Solución.

Puesto que el reactor es isotérmico, las constantes de equilibrio K_1 y K_2 tendrán valores fijos. Estos pueden estimarse a 1400 °F mediante las ecuaciones desarrolladas por Hougen y Watson, empleando los métodos descritos en la Sec. 1-4.⁵ Los resultados son

$$K_1 = 0.312 \quad \text{y} \quad K_2 = 0.480$$

Ya que estos valores no son grandes, las reacciones inversas pueden ser importantes. A 1400 °F (1033 K) las dos velocidades, en términos de la velocidad de desaparición de benceno, son

$$r_1 = (14.96 \times 10^6) e^{-14.7} \left(P_B^2 - \frac{P_D P_H}{0.312} \right) = 6.23 \left(P_B^2 - \frac{P_D P_H}{0.312} \right) \quad (A)$$

$$r_1 = (8.67 \times 10^6) e^{-14.7} \left(P_{BPD} - \frac{P_T P_H}{0.480} \right) = 3.61 \left(P_{BPD} - \frac{P_T P_H}{0.480} \right) \quad (B)$$

⁵ Ver el enunciado original en el texto J. M. Smith, "Ingeniería de la Cinética Química", Ed. C.E.C.S.A.

Para cada reacción se puede escribir una ecuación del tipo de la Ec. (3.18).⁶ Si los balances de masas se basan en el benceno, las dos ecuaciones son:⁷

$$\frac{V}{F} = \int \frac{dx_1}{r_1} \quad (C)$$

$$\frac{V}{F} = \int \frac{dx_2}{r_2} \quad (D)$$

donde la conversión x_1 es el número de moles libra de benceno que desaparecen mediante la reacción 1, por mol libra de alimentación, y la conversión x_2 es el número de moles libra de benceno que desaparecen mediante la reacción 2, por mol libra de alimentación.

Si tomamos como base 1.0 mol de benceno que entra al reactor, las moles de cada componente con conversiones de x_1 y x_2 son:

$$H_2 = \frac{1}{2}x_1 + x_2$$

$$C_{12}H_{10} = \frac{1}{2}x_1 - x_2$$

$$C_6H_6 = 1 - x_1 - x_2$$

$$C_{18}H_{14} = x_2$$

$$\text{Moles totales} = 1.0$$

Puesto que el número de moles totales es igual a 1.0, independientemente de los valores de x_1 y x_2 , las fracciones molares

⁶ Idem

⁷ Puesto que la alimentación es benceno puro, no se necesita el subíndice de F; $F_{C_6H_6} = F =$ velocidad molar de alimentación total.

también están dadas por estas cantidades. Si se supone que los componentes se comportan como gases ideales, las presiones parciales son

$$P_H = 1.0 \left(\frac{1}{2}x_1 + x_2 \right) = \frac{1}{2}x_1 + x_2$$

$$P_U = \frac{1}{2}x_1 - x_2$$

$$P_M = 1 - x_1 - x_2$$

$$P_T = x_2$$

Con estas relaciones es posible expresar las ecuaciones de velocidad (A) y (B) en términos de x_1 y x_2 como

$$r_1 = 6.23 \left[(1 - x_1 - x_2)^2 - \frac{(\frac{1}{2}x_1 - x_2)(\frac{1}{2}x_1 + x_2)}{0.312} \right] \quad (E)$$

$$r_2 = 3.61 \left[(1 - x_1 - x_2)(\frac{1}{2}x_1 - x_2) - \frac{x_2(\frac{1}{2}x_1 + x_2)}{0.480} \right] \quad (F)$$

En principio, las ecuaciones (E) y (F) pueden introducirse en las ecuaciones de diseño (C) y (D) para calcular las conversiones de salida x_1 y x_2 para diversos valores de V/F .

Al sustituir las ecuaciones de velocidad (E) y (F) en las formas diferenciales de los balances de masa correspondientes, Ecs. (C) y (D), se obtiene

$$\frac{dx_1}{d(V/F)} = r_1(x_1, x_2) = 6.23 \left[(1 - x_1 - x_2)^2 - \frac{(\frac{1}{2}x_1 - x_2)(\frac{1}{2}x_1 + x_2)}{0.312} \right] \quad (K)$$

$$\frac{dx_2}{d(V/F)} = r_2(x_1, x_2) = 3.61 \left[(1 - x_1 - x_2)(\frac{1}{2}x_1 - x_2) - \frac{x_2(\frac{1}{2}x_1 + x_2)}{0.480} \right] \quad (L)$$

Estas dos ecuaciones no pueden integrarse independientemente, pues r_1 y r_2 son funciones tanto de x_1 como de x_2 . Por tanto, es adecuado proceder a una resolución numérica. Puesto que existen dos variables dependientes (x_1 y x_2), las ecuaciones de trabajo son diferentes a las usadas en la solución simplificada⁸.

Las ecuaciones de trabajo para el procedimiento de Runge-Kutta para dos variables independientes [x_1 y x_2 en las Ecs. (K) y (L)] son:⁹

Al repetir estos cálculos para incrementos sucesivos se obtienen los resultados desde cero hasta la conversión de equilibrio que se muestran en la Tabla 4-9 y en la Fig. 4-10. Las velocidades espaciales, (V/Q) se calculan a partir de la Ec. (3-23) y se basan en una velocidad de flujo evaluada a 60°F y 1 atm.

Aplicación al Sistema.

Como vemos en este ejemplo de "Deshidrogenación del benceno en fase vapor", el primer paso para tratar el problema es la representación matemática del fenómeno. Se utiliza estequiometría, variables como las presiones parciales, la conversión, etc, y un poco de algebra para llegar a obtener las ecuaciones diferenciales ordinarias [(K) y (L)] las cuales se deben resolver simultáneamente como se describió en el capítulo III inciso 3.3.

Una vez que se dispone de estas dos ecuaciones y se han definido

⁸ Ver el texto original en el libro de J.M. Smith, "Ingeniería de la Cinética Química", citado anteriormente.

⁹ Las ecuaciones que se describen en el texto original son similares a las del capítulo III de esta Tesis para el caso de dos variables independientes, inciso 3.3., "Solución de sistemas de ecuaciones".

las condiciones iniciales requeridas, el sistema puede ser utilizado para resolverlas, obtener los resultados y observar el comportamiento de las variables por medio de gráficos. Los siguientes pasos describen como se aplica el sistema a este problema en forma normal y más simple.

- 1) Seleccionar del menu principal *Datos/Definición de Función/Editar función*. En esta forma se pueden introducir las ecuaciones diferenciales en una linea de 70 caracteres y se puede corregir fácilmente. Se dispone de una recuadro de ayuda donde se visualizan las funciones matemáticas que se pueden ocupar y que serán reconocidas por el compilador. Las ecuaciones en este ejemplo deberán ser introducidas de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \dots &= 6.23 * (\text{SQR}(1-Y1-Y2) - ((0.5*Y1-Y2)*(0.5*Y1+Y2)/0.312)) \quad \text{y} \\ \dots &= 3.61 * ((1-Y1-Y2)*(0.5*Y1-Y2) - (Y2*(0.5*Y1+Y2)/0.480)) \end{aligned}$$

- 2) Seleccionar del menu *Definición de Función*, la opción *Compilar Función*. El proceso de compilación crea un nuevo código que contiene las nuevas funciones a utilizar por el sistema.
- 3) Seleccionar del menu *Captura de Datos* la opción *Condiciones Iniciales*, por medio de la cual se podrán definir las condiciones iniciles para las variables dependientes e igualmente para la variable independiente.
- 4) Seleccionar del menu principal *Operaciones*. Se efectuan las operaciones correspondientes y se escriben los resultados a disco.
- 5) Seleccionar del menu principal *Resultados*. A su vez, se tiene otro menu para elegir resultados en pantalla o impresos. De esta manera se pueden consultar los resultados y si se desea hacer algun

cambio en las ecuaciones o condiciones definidas, se puede regresar al menú correspondiente.

- 6) Seleccionar del menú principal *Graficación/Preparar archivo*. Esta operación traduce los archivos de datos para ser utilizados por el graficador.
- 7) Seleccionar del menú *Graficación*, la opción *Graficador*, con la cual se activa el Graficador en donde se puede construir y consultar la gráfica correspondiente, y si se desea, imprimirla.

A continuación se muestran Tablas de Resultados y Gráficas generadas por el sistema para la resolución de este problema.

Como se puede observar, los resultados son iguales a los obtenidos en el texto original del problema en la *Tabla 4-9* y en la *Figura 4-10*.¹⁰

¹⁰ Ver texto original J. M. Smith, "Ingeniería de la Química Química", Ed. C.E.C.S.A., pág 205.

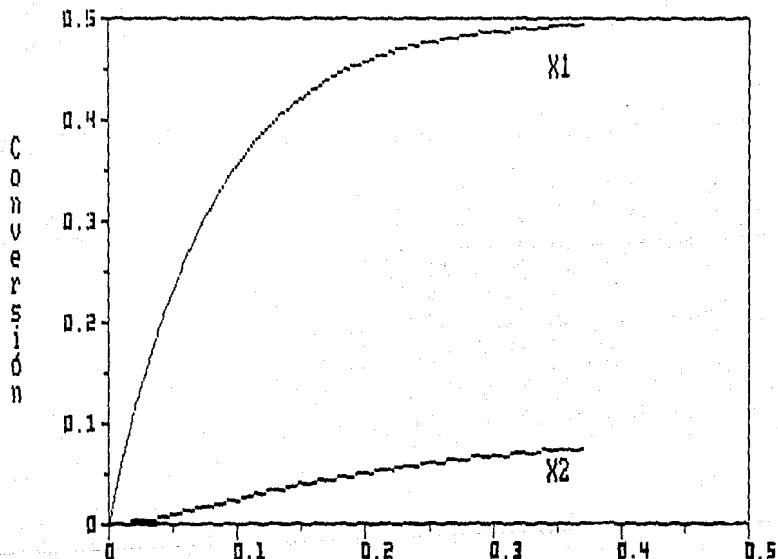
REPORTE DE RESULTADOS
Ejemplo 2. Deshidrogenación de benceno

INTERVALO DE CALCULO	V/F [ft ³ (h)/lbmol]	Conversión 1 [lbmol]	Conversión 2 [lbmol]
1	0.0000	0.0000	0.0000
2	0.0050	0.0302	0.0001
3	0.0100	0.0586	0.0005
4	0.0150	0.0852	0.0011
5	0.0200	0.1102	0.0019
6	0.0250	0.1338	0.0028
7	0.0300	0.1558	0.0038
8	0.0350	0.1766	0.0050
9	0.0400	0.1960	0.0063
10	0.0450	0.2143	0.0076
11	0.0500	0.2315	0.0090
12	0.0550	0.2476	0.0104
13	0.0600	0.2628	0.0119
14	0.0650	0.2770	0.0134
15	0.0700	0.2904	0.0150
16	0.0750	0.3029	0.0165
17	0.0800	0.3147	0.0181
18	0.0850	0.3258	0.0196
19	0.0900	0.3362	0.0212
20	0.0950	0.3460	0.0227
21	0.1000	0.3552	0.0243
22	0.1050	0.3638	0.0258
23	0.1100	0.3719	0.0273
24	0.1150	0.3795	0.0288
25	0.1200	0.3867	0.0303
26	0.1250	0.3934	0.0317
27	0.1300	0.3998	0.0332
28	0.1350	0.4057	0.0346
29	0.1400	0.4113	0.0359
30	0.1450	0.4166	0.0373
31	0.1500	0.4215	0.0386
32	0.1550	0.4262	0.0399
33	0.1600	0.4305	0.0412
34	0.1650	0.4346	0.0424
35	0.1700	0.4385	0.0437
36	0.1750	0.4421	0.0449
37	0.1800	0.4456	0.0460
38	0.1850	0.4488	0.0472
39	0.1900	0.4518	0.0483
40	0.1950	0.4546	0.0494
41	0.2000	0.4573	0.0505
42	0.2050	0.4598	0.0515
43	0.2100	0.4621	0.0525
44	0.2150	0.4644	0.0535
45	0.2200	0.4664	0.0545
46	0.2250	0.4684	0.0554

REPORTE DE RESULTADOS
Ejemplo 2. Deshidrogenación de benceno

INTERVALO DE CALCULO	V/F [ft ³ (h)/lbmol]	Conversión 1 [lbmol]	Conversión 2 [lbmol]
47	0.2300	0.4702	0.0563
48	0.2350	0.4719	0.0572
49	0.2400	0.4736	0.0581
50	0.2450	0.4751	0.0590
51	0.2500	0.4765	0.0598
52	0.2550	0.4779	0.0606
53	0.2600	0.4791	0.0614
54	0.2650	0.4803	0.0622
55	0.2700	0.4814	0.0629
56	0.2750	0.4825	0.0637
57	0.2800	0.4834	0.0644
58	0.2850	0.4844	0.0651
59	0.2900	0.4852	0.0658
60	0.2950	0.4860	0.0664
61	0.3000	0.4868	0.0671
62	0.3050	0.4875	0.0677
63	0.3100	0.4882	0.0683
64	0.3150	0.4888	0.0689
65	0.3200	0.4894	0.0695
66	0.3250	0.4899	0.0701
67	0.3300	0.4904	0.0706
68	0.3350	0.4909	0.0711
69	0.3400	0.4914	0.0717
70	0.3450	0.4918	0.0722
71	0.3500	0.4922	0.0727
72	0.3550	0.4926	0.0732
73	0.3600	0.4929	0.0736
74	0.3650	0.4932	0.0741
75	0.3700	0.4935	0.0745
76	0.3750	0.4938	0.0750
77	0.3800	0.4940	0.0754
78	0.3850	0.4943	0.0758
79	0.3900	0.4945	0.0762
80	0.3950	0.4947	0.0766
81	0.4000	0.4949	0.0770

Deshidrogenación del benceno
Ejemplo 5.2



Coloque en LINEA impresora. Presione dos veces <PrtSc> o cancele con <Enter>
U/F, [ft^3(h)/lbmol]

3. DISEÑO DE UNA PLANTA PILOTO PARA PRODUCCIÓN DE CLORURO DE ALILO.

*Enunciado del problema*¹¹

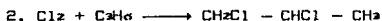
Se planea diseñar una planta piloto para la producción de cloruro de alilo. Los reactantes constan de 4 moles de propileno/mol de cloro y entran al reactor a 392 °F. La unidad será un tubo vertical de 2 plg. de DI. Si la velocidad de la alimentación combinada es 0.85 mol lb/h, determine la conversión a cloruro de alilo en función de la longitud del tubo. Se puede suponer que la presión es constante e igual a 29.4 lb/plg² abs.

Los reactantes se precalentarán a 392 °F por separado y se mezclarán a la entrada del reactor. A esta temperatura baja, los problemas de explosiones durante el mezclado no son serios. El reactor estará enchaquetado con etilenglicol a ebullición, para que la temperatura en el interior de la pared sea constante e igual a 392 °F. El coeficiente de transferencia de calor en el interior es 5.0 Btu/(h)(pie²)(°F).

Datos Adicionales y Notas. El desarrollo básico del proceso para el cloruro de alilo ha sido reportado por Groll y Hearne; Fairbairn, Cheney y Cherniavsky. Se encontró que las tres reacciones principales son la formación del cloruro de alilo.



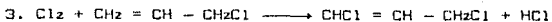
La reacción de adición paralela que produce 1,2 dicloropropano,



y la cloración consecutiva del cloruro de alilo para dar

¹¹ Véase el enunciado original en J.M. Smith, "Ingeniería de la Cinética Química", Ed. C.E.C.S.A., pág. 274.

1,3-dicloro-1-propeno



Para simplificar el tratamiento cinético del problema, se considerarán únicamente las dos primeras reacciones. En la Tabla 5-3¹² se muestran los calores de reacción. Se puede suponer que las capacidades caloríficas molares C_p son constantes e iguales a los valores de la Tabla 5-4¹³.

No se ha publicado información sobre la velocidad de la reacción, aun cuando se sabe que la segunda reacción tiene lugar a temperaturas tan bajas como 212 °F mientras que la reacción 1 tiene una velocidad insignificante a menos de 392 °F. A medida que la temperatura aumenta a más de 392 °F la velocidad de la reacción de la ecuación 1 aumenta rápidamente, hasta que a 732 °F es varias veces más veloz que la de la reacción 2. A partir de esta información general y de algunos datos publicados sobre el efecto del tiempo de residencia y la temperatura sobre la conversión, se han propuesto las siguientes ecuaciones de velocidad,

$$r_1 = 206\,000 e^{-27,200/RgT} p_{\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}} p_{\text{Cl}_2}, (T, \text{ } ^\circ\text{R})$$

$$r_2 = 11.7 e^{-6,800/RgT} p_{\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}} p_{\text{Cl}_2}, (T, \text{ } ^\circ\text{R})$$

donde r_1 y r_2 están en moles libras de Cl_2 convertido por hora pie cúbico, T está en grados Rankine y la presión parcial p en atmósferas.

¹² Idem

¹³ Idem

Solución

Puesto que habrá transferencia de calor de los gases de la reacción a la chaqueta de glicol, la temperatura en el reactor dependerá de la longitud z , y los cálculos de diseño deberán efectuarse mediante una integración escalonada de las ecuaciones de velocidad y de energía. Se puede escribir un balance de masa para cada reacción. En este problema es conveniente definir la conversión como moles de cloro reaccionado por mol libras de alimentación total. Si esta conversión es x_1 para la reacción 1 y x_2 para la reacción 2, las ecuaciones de balance de masa, Ec. (3-17)¹⁴ son:

$$r_1 dV = F_t dx_1 \quad (A)$$

$$r_2 dV = F_t dx_2 \quad (B)$$

donde F_t es la velocidad molar total de alimentación.

El balance de energía apropiado corresponde a la Ec. (5-15)¹⁵.

$$h_0 (T_s - T) dA_h = (r_1 \Delta H_{R1} + r_2 \Delta H_{R2}) dV + F_t C_p dT$$

Si z es la longitud del reactor y d su diámetro,

$$dV = \frac{\pi d^2}{4} dz, \quad dA_h = \pi d dz$$

14 Idem. Pág. 144. Análoga a la ecuación (11.20) de esta Tesis.

15 Idem. Análoga a la ecuación (11.20) de esta Tesis.

Usando estas relaciones en la expresión anterior se obtiene

$$(F_1 C_p) dT = n d h_0(T_2 - T) dz - (r_1 \Delta H_{R1} + r_2 \Delta H_{R2}) \left[\frac{n d^2}{4} \right]$$

o bien,

$$\frac{dT}{dz} = \frac{n d h_0(T_2 - T) dz - (r_1 \Delta H_{R1} + r_2 \Delta H_{R2}) \left[\frac{n d^2}{4} \right]}{(F_1 C_p)} \quad (C)$$

Las ecs. (A) a (C) y las expresiones para las velocidades r_1 y r_2 pueden resolverse numéricamente para obtener x_1 y x_2 y T en función de la longitud del reactor z . Para lograr esto, primero se expresan las ecs. (A) y (B) en términos de x :

$$\frac{dx_1}{dz} = \frac{n d^2}{4 F_1} r_1 \quad (D)$$

$$\frac{dx_2}{dz} = \frac{n d^2}{4 F_1} r_2 \quad (E)$$

Además, es necesario reescribir las ecuaciones de r_1 y r_2 en términos de x_1 y x_2 y T . Si entran al reactor 4 moles de propileno por mol de cloro, las moles de cada componente en una posición axial donde las conversiones corresponden a x_1 y x_2 son:

$$\text{Cloro}^{10} = 1 - 5x_1 - 5x_2$$

$$\text{Propileno} = 4 - 5x_1 - 5x_2$$

$$\text{Cloruro de alilo} = 5x_1$$

$$\text{Dicloropropano} = 5x_2$$

$$\text{Cloruro de hidrógeno} = 5x_1$$

$$\text{Moles totales} = 5[1 - x_2]$$

Suponiendo que todos los componentes se comportan como gases ideales a $p = 29.4$ psia, las presiones parciales de cloro y propileno (en atmósferas) están dadas por

$$P_{\text{C}_3\text{H}_6} = \frac{29.4}{14.7} \left[\frac{4 - 5x_1 - 5x_2}{5[1 - x_2]} \right] = 2 \frac{0.8 - x_1 - x_2}{1 - x_2}$$

$$P_{\text{Cl}_2} = \frac{29.4}{14.7} \left[\frac{1 - 5x_1 - 5x_2}{5[1 - x_2]} \right] = 2 \frac{0.2 - x_1 - x_2}{1 - x_2}$$

Estas expresiones pueden sustituirse en las ecuaciones de velocidad establecidas para relacionar las velocidades con las temperaturas. Los resultados son

$$r_1 = 824\,000 e^{-12,700/T} \frac{[0.8 - x_1 - x_2][0.2 - x_1 - x_2]}{[1 - x_2]^2} \quad (\text{F})$$

$$r_2 = 46.8 e^{-2,460/T} \frac{[0.8 - x_1 - x_2][0.2 - x_1 - x_2]}{[1 - x_2]^2} \quad (\text{G})$$

10 El coeficiente 5 aparece en estas ecuaciones debido a que X_1 es la conversión basada sobre una mol de alimentación total. Nótese que el valor máximo para la suma de x_1 y x_2 es 0.2, ya que esto corresponde a la conversión completa de cloro, ya sea a dicloropropano o a cloruro de alilo.

Sustituyendo r_1 y r_2 por las ecs. (F) y (G), permite expresar las ecs. (C), (D) y (E) en términos de tres variables dependientes, T , x_1 y x_2 , la variable independiente es z .

Se dan los valores de d , h_0 , T_0 , ΔH_{R1} y ΔH_{R2} . Los calores de reacción no varían en forma significativa con la temperatura. Suponiendo gases ideales, el término $(F_i C_p)$ de la Ec. (C) está dado por

$$(F_i C_p) = \sum F_i C_{pi}$$

En un punto en el que las conversiones sean x_1 y x_2 ,

$$(F_i C_p) = F_i [0.2 - x_1 - x_2] C_{p, Cl_2} + [0.8 - x_1 - x_2] C_{p, C_3H_6}$$

└─── cloro ───┘
└─── propileno ───┘

Por ejemplo, a la entrada del reactor, $x_1 = x_2 = 0$, por lo que

$$(F_i C_p) = 0.85(0.2)(8.6) + 0.85(0.8)(25.3) = 18.5 \text{ Btu/(h)(}^\circ\text{F)}$$

Estos resultados establecen los valores numéricos de todos los coeficientes en las ecs. (C), (D) y (E).

El procedimiento numérico es algo diferente al usado en los Ejs. 4-7, 4-15 y 5-1, pues es necesario resolver tres ecuaciones diferenciales en serie que contienen tres variables dependientes. Usaremos primero el método de Euler modificado¹⁷ y después se presentan los resultados más precisos con el método de Runge-Kutta de cuarto

¹⁷ En la aplicación al sistema de esta Tesis solo se resuelve con método de Runge-Kutta.

orden.

Aplicación al sistema

La aplicación de este problema es el caso de tres variables dependientes, donde las ecuaciones que se van a capturar son la (C), (D) y (E) sustituyendo en ellas tres las ecuaciones (F) y (G). De tal manera que se obtiene un sistema de tres ecuaciones

$$\begin{array}{ll} \frac{dx_1}{dz} = f(x_1, x_2, T) & \text{o bien} \quad \frac{dY_1}{dX} = f(Y_1, Y_2, Y_3) \\ \frac{dx_2}{dz} = f(x_1, x_2, T) & \text{o bien} \quad \frac{dY_2}{dX} = f(Y_1, Y_2, Y_3) \\ \frac{dT}{dz} = f(x_1, x_2, T) & \text{o bien} \quad \frac{dY_3}{dX} = f(Y_1, Y_2, Y_3) \end{array}$$

El desarrollo algebraico para la ecuación de temperatura, $\frac{dT}{dz}$, resulta en una expresión sumamente larga pues hay que sustituir todavía las ecuaciones de velocidad (F) y (G), expresión que excedería los 70 caracteres de la línea disponible.

El sistema originalmente está diseñado para ecuaciones simples relativamente que no excedan esta capacidad, sin embargo para ecuaciones mas largas se puede seguir un procedimiento alternativo que el sistema no realiza automáticamente sino que el usuario debe elaborarlo. Con fines de resolver este ejemplo y cualquier otro similar que pudiera presentarse al usuario, a continuación se ejemplifica cómo se puede completar esta solución.

El problema en estos casos es que la ecuación resulta ser muy larga y en ocasiones puede llegar a causar confusión y en consecuencia errores en la compilación. Es aconsejable simplificar la ecuación

dividiendo los cálculos en varias partes y luego expresar estas partes en la ecuación final, ecuación que no debe sobrepasar 70 caracteres.

Por ejemplo, si se desea calcular $SUMA = (8+5) - (9*2)$ se puede dividir en dos partes $A = 8+5$ y $B = 9*2$ y expresarse $SUMA = A - B$. Este proceso además de simplificar la ecuación, permite al usuario más claridad y menos posibilidad de error. En el problema anterior las ecuaciones podrían ser simplificadas de la manera siguiente y en código de programación:

$$\begin{aligned} \frac{dY1}{dX} &= 0.0257 * 824000 * \text{EXP}(-13700/Y3) * A(Y1,Y2) / 0.0218 \\ \frac{dY2}{dX} &= 0.0257 * 46.B * \text{EXP}(-3460/Y3) * A(Y1,Y2) / 0.0218 \\ \frac{dY3}{dX} &= (2.618*(852-Y3) - A(Y1,Y2) * (D(Y3) + E(Y3))) / \\ &\quad (7.31 * C(Y1,Y2) + 21.5 * B(Y1,Y2)) \end{aligned}$$

Como se puede observar, en estas simplificaciones se introdujeron las funciones A, B, C, D y E . Para que en el momento de la compilación, las funciones mencionadas sean reconocidas, el usuario debe editar y compilar en forma independiente y fuera del sistema, es decir, desde el Sistema Operativo, la unidad de funciones con el nombre de UNIDAD02.PAS y agregar el código de estas funciones¹⁰. Una vez editadas estas funciones se puede emplear el Archivo TPC.EXE para su compilación ("TPC UNIDAD02").

Las funciones que se agregaron para este ejemplo son las siguientes. Se expresan en código de programación y solo la parte

¹⁰ Este procedimiento requiere que el usuario tenga conocimientos sobre la programación de Unidades en lenguaje Pascal y su compilación.

correspondiente a la sección *IMPLEMENTATION* de la UNIDAD02¹⁰.

```
FUNCTION A;  
  BEGIN  
    A:= 0.0218*(0.8-V1-V2)*(0.2-V1-V2)/SQR(1-V2);  
  END;  
FUNCTION B;  
  BEGIN  
    B:= 0.8-V1-V2;  
  END;  
FUNCTION C;  
  BEGIN  
    C:= 0.2-V1-V2;  
  END;  
FUNCTION D;  
  BEGIN  
    D:= -48000*824000*EXP(-13700/V1)  
  END;  
FUNCTION E;  
  BEGIN  
    E:= -79200*46.8*EXP(-3460/V1)  
  END;
```

De esta manera se puede lograr introducir ecuaciones muy largas simplificadas y expresadas a partir de otras funciones.

Utilizando los valores iniciales del ejemplo

$$\begin{array}{lll} z_1 = 0 & z_1 = 20 \text{ pies} & \text{y} \\ x_1(0) = 0 & x_2(0) = 0 & \text{y } T(0) = 852 \text{ }^\circ\text{R} \end{array}$$

el sistema elaborado arroja resultados prácticamente iguales a los reportados en el texto original Tabla 5-5²⁰ para una operación no adiabática. A continuación se incluyen el reporte de resultados y las gráficas generadas por el sistema.

¹⁰ Para mayor detalle, revisar el archivo UNIDAD02.PAS directamente. Desde el Sistema Operativo se puede hacer tecleando TYPE UNIDAD02.PAS.

²⁰ Ver texto original de J.M. Smith, "Ingeniería de la Cinética Química", Ed. C.E.C.S.A., pág. 283.

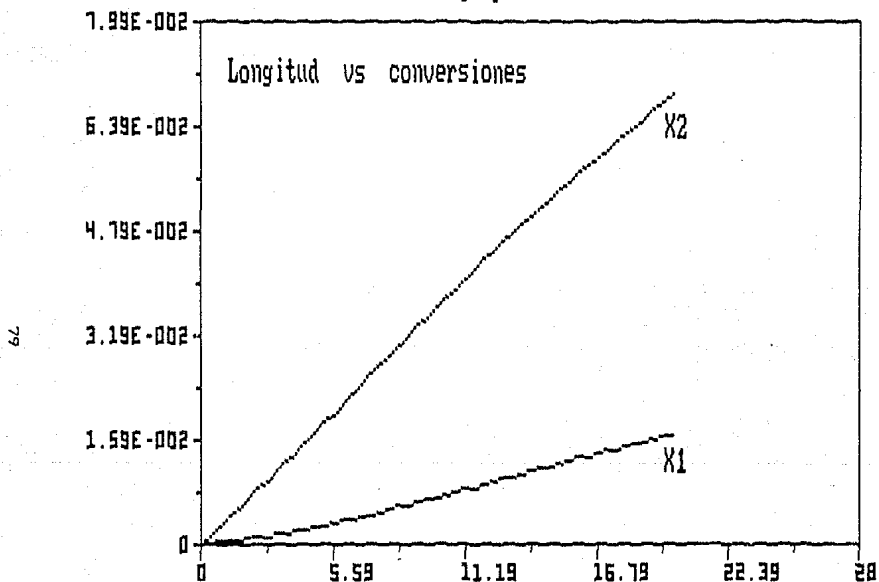
REPORTE DE RESULTADOS
Ejemplo 3. Producción cloruro de alilo

INTERVALO DE CALCULO	Longitud [pies]	Conversión 1 [lbmol]	Conversión 2 [lbmol]	Temperatura [°R]
1	0.0000	0.0000	0.0000	852.0000
2	0.2857	0.0001	0.0010	855.3702
3	0.5714	0.0002	0.0019	858.6505
4	0.8571	0.0003	0.0029	861.8425
5	1.1429	0.0005	0.0039	864.9477
6	1.4286	0.0006	0.0049	867.9670
7	1.7143	0.0007	0.0059	870.9023
8	2.0000	0.0009	0.0069	873.7547
9	2.2857	0.0010	0.0079	876.5254
10	2.5714	0.0012	0.0089	879.2155
11	2.8571	0.0013	0.0099	881.8262
12	3.1429	0.0015	0.0110	884.3586
13	3.4286	0.0017	0.0120	886.8130
14	3.7143	0.0018	0.0131	889.1928
15	4.0000	0.0020	0.0141	891.4966
16	4.2857	0.0022	0.0152	893.7263
17	4.5714	0.0024	0.0162	895.8828
18	4.8571	0.0026	0.0173	897.9670
19	5.1429	0.0028	0.0183	899.9799
20	5.4286	0.0031	0.0194	901.9225
21	5.7143	0.0033	0.0205	903.7956
22	6.0000	0.0035	0.0215	905.6002
23	6.2857	0.0037	0.0226	907.3371
24	6.5714	0.0040	0.0237	909.0074
25	6.8571	0.0042	0.0247	910.6118
26	7.1429	0.0045	0.0258	912.1514
27	7.4286	0.0047	0.0269	913.6270
28	7.7143	0.0050	0.0279	915.0395
29	8.0000	0.0052	0.0290	916.3899
30	8.2857	0.0055	0.0300	917.6791
31	8.5714	0.0058	0.0311	918.9081
32	8.8571	0.0060	0.0322	920.0777
33	9.1429	0.0063	0.0332	921.1889
34	9.4286	0.0066	0.0343	922.2428
35	9.7143	0.0069	0.0353	923.2402
36	10.0000	0.0071	0.0363	924.1822
37	10.2857	0.0074	0.0374	925.0697
38	10.5714	0.0077	0.0384	925.9039
39	10.8571	0.0080	0.0394	926.6856
40	11.1429	0.0083	0.0404	927.4159
41	11.4286	0.0086	0.0415	928.0959
42	11.7143	0.0089	0.0425	928.7266
43	12.0000	0.0091	0.0435	929.3090
44	12.2857	0.0094	0.0445	929.8443
45	12.5714	0.0097	0.0455	930.3335
46	12.8571	0.0100	0.0464	930.7777

REPORTE DE RESULTADOS
Ejemplo 3. Producción cloruro de alilo

INTERVALO DE CALCULO	Longitud [pies]	Conversion 1 [lbmol]	Conversion 2 [lbmol]	Temperatura [°R]
47	13.1429	0.0103	0.0474	931.1779
48	13.4286	0.0106	0.0484	931.5353
49	13.7143	0.0109	0.0494	931.8510
50	14.0000	0.0112	0.0503	932.1260
51	14.2857	0.0114	0.0513	932.3616
52	14.5714	0.0117	0.0522	932.5586
53	14.8571	0.0120	0.0531	932.7184
54	15.1429	0.0123	0.0541	932.8419
55	15.4286	0.0126	0.0550	932.9303
56	15.7143	0.0128	0.0559	932.9847
57	16.0000	0.0131	0.0568	933.0062
58	16.2857	0.0134	0.0577	932.9958
59	16.5714	0.0136	0.0586	932.9547
60	16.8571	0.0139	0.0595	932.8838
61	17.1429	0.0142	0.0603	932.7844
62	17.4286	0.0144	0.0612	932.6574
63	17.7143	0.0147	0.0620	932.5038
64	18.0000	0.0149	0.0629	932.3248
65	18.2857	0.0152	0.0637	932.1213
66	18.5714	0.0154	0.0646	931.8944
67	18.8571	0.0157	0.0654	931.6450
68	19.1429	0.0159	0.0662	931.3741
69	19.4286	0.0162	0.0670	931.0827
70	19.7143	0.0164	0.0678	930.7717
71	20.0000	0.0166	0.0686	930.4420

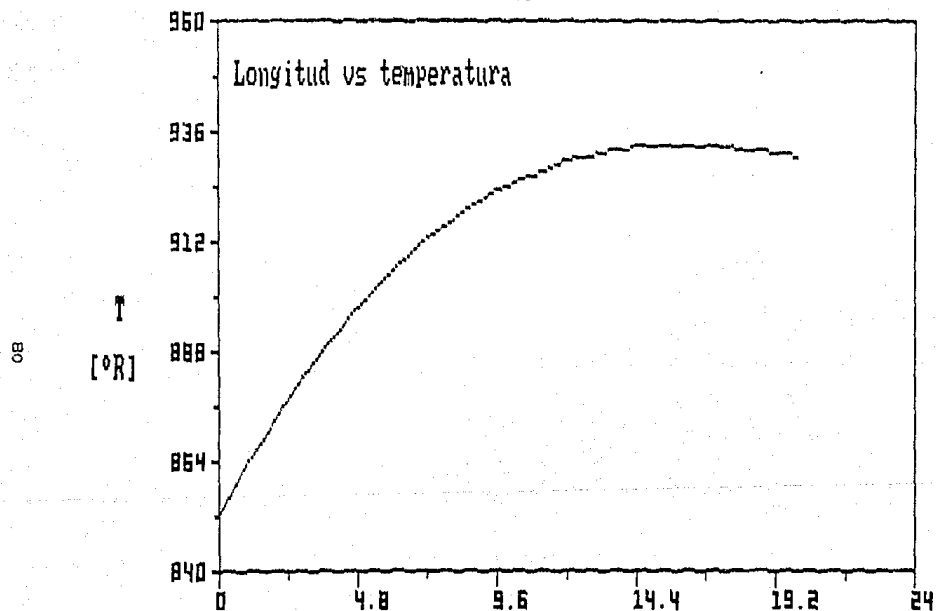
Producción de cloruro de alilo planta piloto
Ejemplo 5.3



Coloque en LINEA impresora. Presione dos veces <PrtSc> o cancele con <Enter>
Longitud del reactor, pies

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

Producción de cloruro de alilo planta piloto
Ejemplo 5.3



Coloque en LINEA impresora. Presione dos veces <PrtSc> o cancele con <Enter>
Longitud del reactor, pies



VI. CONCLUSIONES

VI. CONCLUSIONES

a) El sistema elaborado es de gran utilidad como apoyo al aprendizaje pues tiene la capacidad de combinar el análisis de problemas típicos en diseño de reactores con la rapidez requerida para efectuar los extensos cálculos numéricos.

b) La opción de *definición de función* proporciona al sistema un gran rango de aplicaciones a los problemas de reactores tubulares y en general a los problemas que involucren sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias. Esta capacidad solamente se ve limitada por el manejo de las expresiones algebraicas que definen las ecuaciones o funciones diferenciales. En algunas ocasiones una o más de estas ecuaciones diferenciales que forman el sistema pueden ser de naturaleza algebraica complicada y resultar demasiado extensas en su forma de código de programación, por lo que su captura se ve limitada a una línea de 70 caracteres máximo. En este sentido, el sistema se ha diseñado inicialmente contemplando ecuaciones de naturaleza algebraica simple o bien simplificada, permitiendo al usuario extenderla o reducirla según convenga.

Para vencer esta limitación, el sistema se ha desarrollado de una manera independiente entre sus partes permitiendo así, por ejemplo, la compilación externa de alguna biblioteca de funciones adicionales que puedan ayudar al ahorro de espacio en el código de programación.

c) Por otra parte este sistema es susceptible a modificaciones que puedan ampliar o complementar los objetivos de este trabajo, logrando así un mayor rango de aplicación en lo que se refiere al apoyo computacional del aprendizaje en la Ingeniería Química.



VII. BIBLIOGRAFIA

VII. BIBLIOGRAFIA

1. J. M. SMITH

INGENIERIA DE LA CINETICA QUIMICA

COMPANIA EDITORIAL CONTINENTAL, S.A. DE C.V.

MEXICO 1989, 4° EDICION

2. B. CARNAHAN, H. A. LUTHER, J. D. WILKES

CALCULO NUMERICO

EDITORIAL RUEDA

MADRID 1979

3. STANLEY M. WALAS

REACTION KINETICS FOR CHEMICAL ENGINEERS

Mc GRAW-HILL BOOK COMPANY, INC.

NEW YORK 1959

4. R. I. BURDEN, J. D. FAIRES

ANALISIS NUMERICO

GRUPO EDITORIAL IBEROAMERICA

MEXICO 1985

5. A. S. FOUST, L. A. WENZEL, C. W. CLUMP, L. MAUS, L. B. ANDERSEN

PRINCIPIOS DE OPERACIONES UNITARIAS

COMPANIA EDITORIAL CONTINENTAL, S. A. DE C. V.

MEXICO 1989, 2° REIMPRESION

6. JOSEPH-DAVIS CARRABIS

DBASE III PLUS, MANUAL DE REFERENCIA

OSBORNE/ Mc GRAW-HILL

MADRID 1988

7. MANUAL ORIGINAL

TURBO PASCAL, VERSION 4.0

COPYRIGHT (c) 1987

BORLAND INTERNATIONAL

8. MANUAL ORIGINAL

THE CLIPPER COMPILER VERSION SUMMER 1987

COPYRIGHT (c)

NANTUCKET CORP 1985- 1987