

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE QUIMICA

COMPARACION DE MODELOS PARA LA SIMU-
LACION DE UN REACTOR CATALITICO, NO
ISOTERMICO NO ADIABATICO DE LECHO
EMPACADO

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A

RAUL FERNANDO MACIAS HERNANDEZ



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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 esta 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.

CLAS Tesis 1977
ADG M-246
FECHA _____
PROC _____

CONTRACION DE MODELOS PARA LA SIMULACION DE UN REACTOR CATALITICO. NO ISOTERMICO NO ADAPTADO DEL TIPO EMPACADO



QUIMICA

PRESIDENTE

M. Toral

MA. TERESA TORAL P.

VOCAL

Enrico Martinez

ENRICO MARTINEZ S. M.

SECRETARIO

JORGE RAMIREZ SOLIS

1^{er} SUPLENTE

Caripeno

CARIPENO NORLINO PADILLA

2do. SUPLENTE

JOSE HERCE VIZIL

Sitio donde se desarrollo el tema :
CENTRO DE SERVICIO DE CONTROL Y SEGUROS

SUSTENTANTE

RAUL F. MACIAS HERNANDEZ

ASESOR

JORGE F. RAMIREZ SOLIS

SUPERVISOR P.

Caripeno

CARIPENO NORLINO PADILLA

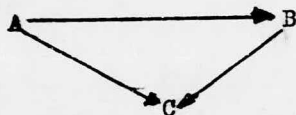
PREFACIO

A todo y a todos :

Lo que con vuestra interesada provocaron , de acuerdo a vuestro interés mi mejoramiento personal de indole diversa y como resultante de todo esto este trabajo .

Cuando cualquiera de vosotros lo leáis , coneced acerca de este trabajo perfectible , como el ser que lo creó , no como vosotros que sois grandes de espíritu y casi perfectos. Os escribo no hay palabras para expresar mi agradecimiento.

además por ser similar al de otras reacciones (oxidaciones) de hidrocarburos como son las oxidaciones de o-xileno a anhídrido ftálico ; naftaleno a anhídrido ftálico ; etileno a óxido de etileno . El esquema de reacción general para este tipo de reacciones se puede esquematizar de la siguiente forma .



Donde B es el producto deseado (normalmente es el potencialmente comerciable).

Para nuestro caso:

A es benceno

B es anhídrido maleico

C son óxidos de carbono y agua.

INDICE

INTRODUCCION

	pag.
INTRODUCCION	i
INDICE	iv
NOMENCLATURA	1
CAPITULO I . GENERALIDADES	3
I . 1 Modelos Pseudohomogeneos	3
I . 2 Modelos Heterógenos	15
I . 3 Modelos de Celdas	20
CAPITULO II . ESTABLECIMIENTO DEL DIAGRAMA DE FLUJO DE LOS MODELOS UNIDIMENSIONALES	27
I . 1 Modelo Pseudohomogeneo Unidimensional	28
I . 2 Modelo Heterógeno Unidimensional	32
CAPITULO III . RESULTADOS	36
III . 1 Predicción del comportamiento	37
III . 2 Análisis de sensibilidad	43
III . 3 Análisis con cambio de concentración	46
III . 4 Análisis con cambios de temperatura del baño y con cambio en la temperatura inicial de ali- mentación	48
III . 5 Análisis de sensibilidad con cambio de gasto y de diámetro .	51
CAPITULO IV . CONCLUSIONES	57
EXO I	
Graficas y listados de los programas	A.1
BIBLIOGRAFIA	B.1

El avance material desorbitado que ha presentado la industria química durante los últimos cincuenta años , se debe en buena medida al descubrimiento , desarrollo y uso de los catalizadores sólidos .Debido a esto ha sido posible ahorrar gran cantidad de esfuerzos y recursos gracias a la reducción de los tiempos de contacto , en la obtención de muchos productos .

De los procesos que utilizan catalizadores , una parte harto sustancial se llevan a cabo en reactores de lecho empacado(ó son factibles de obtenerse de esa forma).

En el diseño de un reactor de lecho empacado , los parámetros principales para determinarlo son: Los parámetros de operación , los parámetros de transporte y los parámetros cinéticos. Los parámetros de operación están normalmente bien definidos, ó pueden ser determinados experimentalmente con suficiente precisión . Los parámetros de transporte y cinéticos no son tan fáciles de determinarse , debido sobre todo a la interacción que existe entre ellos . Como las mediciones a nivel laboratorio son generalmente isotérmicas y en la planta industrial , se encuentran muy pocos reactores de lecho empacado que operen de esta forma(isotermicos) y los parámetros de transporte y cinéticos hacen variar el comportamiento del reactor en forma por demás complicada, que hace difícil de prever el comportamiento del reactor; Por lo que se nos hace indispensable en la necesidad de simular a priori el comportamiento del reactor . Como además dentro del reactor se tienen temperaturas máximas (puntos calientes) que van a determinar la selectividad , actividad y estabilidad del catalizador , necesitamos un modelo que prediga en la mejor forma posible los datos experimentales

para poder optimizar el futuro comportamiento del reactor.

Por todo lo anterior , en los ultimos veinte años se han desarrollado modelos matemáticos para la simulación ó rediseño a nuevas condiciones de reactores ya existentes , teniendo como resultado la aparición de diferentes modelos matemáticos , con disímulo grado de complejidad y concepción . Los primeros en aparecer (principios de los 60's), que por no ser muy complicada su resolución , podí an resolverse sin la ayuda de calculadoras; En los ultimos años de los sesentas se han desarrollado modelos más complejos cuya solución requiere el uso de computadoras . La sofisticación del simulador ; Dependera del número de pasos elementales que se desee incluir en el modelo y del grado de exactitud y de la sensibilidad del modelo .

Este trabajo presenta una revisión de los modelos más importantes existentes y hace una comparación entre los modelos unidimensionales desarrollados , y los usa para la simulación del comportamiento de los reactores catalíticos de lecho empacado .Dentro de estos se analiza el modelo unidimensional pseudohomogeneo , que no hace distinción entre las condiciones del sólido y del fluido , así como el modelo unidimensional heterogeneo que si hace distinción entre el sólido y el fluido.

El sistema a modelar es una reacción heterogénea altamente exotérmica , como es la oxidación de benceno para producir anhídrido maleico . Esta reacción ha sido ampliamente estudiada por J.F.Ramírez(1) y se cuenta además con datos experimentales de cinética de reacción , perfiles de temperaturas en reactores piloto de una y dos pulgadas de diámetro .

El esquema reaccionante que se simula es interesante

NOMENCLATURA

av	area superficial por unidad de volúmen ($\frac{m^2}{m^3}$)
C	concentración del componente de referencia ($\frac{mol}{m^3}$)
Us	concentración en la superficie ($\frac{mol}{m^3}$)
Dez, Der	difusividad efectiva en dirección axial y radial (m^2 fluido/m hr)
Ds	difusividad efectiva dentro de la partícula (m^2 fluido/ m^3 hr)
dp	diametro de la partícula (m)
RADIO	radio del tubo (m)
jH	$=k_g (Sc^{0.33}/3)/us$
jD	$=hf (Pr^{0.33}/3)/(Cp G)$
Sc	número de schmidt = $\mu / (\rho s D_A)$
Re	" " Reynolds = $dp G / \mu$
Sh	" " Sherwood = $k_g dp / D_A$
T	temperatura del fluido (grados celsius ó kelvin)
Ts	" " sólido " " "
To	" " a la ent. " " "
Tw	" " del baño " " "
U	coeficiente global de transferencia de calor ($\frac{cal}{m^2 hr ^\circ C}$)
us	velocidad superficial (m^3 fluido/ m^2 hr)
z	coordenada axial
r	" radial
E	fracción vacia del lecho ($\frac{m^3}{m^3}$)
Dez, Der	conductividad térmica efectiva en dirección axial y radial.
Ds	conductividad térmica del sólido ($\frac{cal}{m hr ^\circ C}$)

μ	viscosidad dinámica (g/m hr)
f	densidad del fluido (g/m ³ fluido)
ρ	" " catalizador " (en forma másica)
s	" " " "
r	coordenada interna de la partícula (m _s)
η	factor de efectividad
R	velocidad de reacción (mol/gcat hr)
α_w	coeficiente de pared.
St	número de Stanton
Pr	" " Prandtl
Nu	" " Nusselt
Bi	" " Biot

CAPITULO
I
GENERALIDADES

En esta sección se mostrarán a grosso modo los diversos modelos desarrollados actualmente para simular reactores catalíticos empacados (de lecho).

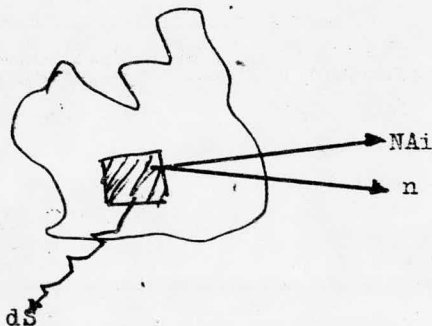
Se comenzará con los modelos pseudohomogeneos que consideran en el reactor al fluido y al sólido como un solo "ente", luego los heterogeneos que hacen diferencia entre la fase fluida y la sólida y, por último los modelos de celdas que para su simulación dividen al reactor en pequeñísimos tanques agitados.

I . 1

MODELOS PSEUDOHOMOGENEOS

Comenzando con deducir las ecuaciones de material y calor, para después llegar a las ecuaciones a utilizar y sus condiciones a la frontera de estas ecuaciones diferenciales.

Si tenemos en un reactor un elemento de volumen " V_i " y en una diferencial de superficie " dS " existe un vector normal a esta " n " el flux de la especie " A_i " será igual a " N_{Ai} ".



Sabemos que en un balance de la especie A_i :

Rapidez de acumulación
de la especie A_i en el
elemento de volumen V_i

||

rapidez neta con que la
especie A_i entra al elemento
de volumen a través del
area que encierra a dicho
elemento de volumen.

+

Rapidez de generación de
la especie A_i dentro del
elemento de volumen.

(A)

Escribiendolo en la notación del Bird (2) tenemos:

$$\begin{array}{l} \text{Rapidez con que } A_i \text{ sale} \\ \text{del elemento de volumen} \end{array} = \iint (\bar{N}A_i) \cdot \bar{n} \, dS \quad (1)$$

Haciendo uso del teorema de la divergencia que nos dice:

$$\iint_S \bar{v} \cdot \bar{n} \, dS = \iiint_V \text{div}(\bar{v}) \, dV \quad (2)$$

Escribiendo la divergencia en forma más explicita :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\bar{v}) &= \nabla \cdot v = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot (v_x, v_y, v_z) \\ &= \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

Haciendo uso de la ecuación (2) :

$$\iint_S \bar{N}A_i \cdot n \, dS = \iiint_V \operatorname{div}(\bar{N}A_i) \, dV \quad (4)$$

Sustituyendo la triple integral por una sumatoria sobre todos los elementos (tipos con que se manifiesta la propiedad) tenemos :

$$\iiint_V \operatorname{div}(\bar{N}A_i) \, dV = \sum_{j=1}^l \operatorname{div}(\bar{N}A_i/j) \cdot V \quad (5)$$

Donde las "j"s son las diferentes formas como se dijo anteriormente con que se transmite la propiedad, esta propiedad en este caso es la materia.

Sustituyendo esto en la ecuación (A) tenemos :

$$\text{Como rapidez de acumulación} = \frac{\partial (V C_i)}{\partial t}$$

$$\text{Como rapidez neta con que la especie } A_i \text{ entra en el volumen "V"} = \sum_{j=1}^l \operatorname{div}(\bar{N}A_i/j) \cdot V$$

Como rapidez de generación = $\sum d_i R V$

Donde d_i son los coeficientes estequiométricos de la especie "i" y R es la velocidad de reacción.

Entonces de esta forma tendremos finalmente la ecuación (B), y al dividir todos los términos por el volumen "V" tenemos finalmente:

$$\frac{1}{V} \frac{\partial (V C_i)}{\partial t} = - \sum_{j=1}^8 \text{div}(N_{ij}/j) + d_i R \quad (B)$$

Las coordenadas naturales tanto en tanques como en reactores de tipo tubular como es nuestro caso, son las coordenadas cilíndricas; por lo que serán las coordenadas a usar:

Usando la fórmula para la divergencia que viene en el Bird (2) para la divergencia en coordenadas cilíndricas en el apéndice.

$$\text{div}(V) = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (r V_r) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \quad (C)$$

Obteniendo los términos de transferencia de propiedad en cada uno de los ejes :

Tenemos en el eje z:

Un término debido al flujo y otro a la difusión (debido a la tendencia a contradifundirse por diferencia de alguna propiedad, ya sea masa, energía ó momentúm). Por lo que los términos del eje z serán :

$$N_{Ai/z} = u C_i - D_{iz} \frac{\partial C_i}{\partial z}$$

alrededor del radio solo existirá el término de tipo difusivo de la siguiente forma:

$$N_{Ai/r} = -D_{ir} \frac{\partial C_i}{\partial r}$$

Este término es de tipo negativo porque obliga a que en lugar de salir libremente por el eje z la concentración de propiedad ésta tienda a difundirse radialmente y el perfil radial en lugar de ser plano como se supone en un flujo tapon ideal tenga alguna concavidad o convexidad radialmente .

Y si consideramos:

$$N_{Ai/\theta} = 0$$

o sea que angularmente no hay desviaciones de la idealidad, que angularmente sus propiedades no varían.

Sustituyendo todo esto en la ecuación (C) y efectuando las derivaciones indicadas para poderla separar de una forma más explícita, tenemos:

BdeM

$$\frac{1}{V} \frac{\partial (V C_i)}{\partial t} = - \frac{\partial (u C_i)}{\partial z} + \text{Dif} \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \text{Dir} \frac{\partial C_i}{\partial r}$$

acumulación *convección* *convección axial* *convección radial*

$$+ \text{Dir} \frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \text{Dif}^R \approx \text{generación}$$

convección axial y radial de la especie i

$$\text{Dif} \left[\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_i}{\partial r} \right]$$

(D)

CASOS PARTICULARES DE LA ECUACION (D).

1) Si tenemos flujo piston ideal los únicos terminos seran:

$$\frac{1}{V} \frac{\partial (V C_i)}{\partial t} = - \frac{\partial (u C_i)}{\partial z} + \text{Dif}^R \quad (5)$$

ya que no existira el termino de segundo orden parcial, no existira contradifusión axial y como el perfil radial es plano, tendremos en lugar de derivadas parciales porque solo existiran terminos en el eje z, tendremos derivadas totales. (si ademas estamos en el edo. estacionario).

2) flujo piston con dispersión axial.

$$\frac{1}{V} \frac{\partial (V C_i)}{\partial t} = - \frac{\partial (u C_i)}{\partial z} + R + D_{iz} \frac{\partial^2 (C_i)}{\partial z^2} \quad (6)$$

ya que no existirán terminos radiales , entonces el perfil radial será plano, y si tenemos en estado estacionario el reactor entonces tendremos en lugar de derivadas parciales , tendremos derivadas totales.

3) Modelo Bidimensional Pseudohomogeneo.

En el modelo bidimensional pseudohomogeneo se usaran todos los terminos de la ecuación (D) y el término de la izquierda (el de la acumulación) sera igual a cero para el caso en que se este en regimén estacionario, en los demás casos no sera cero (por ejemplo al arranque de un reactor).

Procediendo a efectuar el balance energético de la misma forma. Efectuando un desarrollo similar al del balance de masa. Que tenemos si $C_i = \text{Masa/Volúmen}$, necesitamos encontrar su similar que debe tener unidades de energía/volumen para poder ser sustituible en la ecuación (D) y esto sera $h \rho = \text{energía/volúmen} = C_p \rho (T - T_0)$ donde el termino análogo a D sera D (difusividad térmica). Sustituyendo en la ecuación (D) tendremos si le agregamos el termino de transferencia de energía :

$$\frac{1}{V} \frac{\partial (\rho V C_p (T - T_0))}{\partial t} = - r \frac{\partial (C_p \rho (T - T_0))}{\partial r} +$$

$$\frac{1}{r} \alpha_r \frac{\partial}{\partial r} (\rho C_p (T - T_0)) + \alpha_z \frac{\partial^2}{\partial z^2} (\rho C_p (T - T_0)) +$$

$$+ R(-DH) + Q - \frac{\partial}{\partial z} (u \rho C_p (T - T_0))$$

ya que $T_0 \neq$ constante

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} (\rho v C_p T) = \alpha_r \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\rho C_p T) + \frac{\alpha_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho C_p T)$$

$$+ \alpha_z \frac{\partial^2}{\partial z^2} (\rho C_p T) - \frac{\partial}{\partial z} (u \rho C_p T) +$$

$$+ R(-DH) + Q$$

Si a u , ρ y C_p lo consideramos constante en el intervalo de integración entonces tenemos:

Bde c.

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} (v T) &= \alpha_r \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\alpha_r}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \alpha_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \\ &- u \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{R(-DH)}{C_p \rho} + Q(C_p \rho) \end{aligned} \right\} (E)$$

CASOS PARTICULARES DE LAS ECUACIONES (D) Y (E)

1) La ecuación que tendremos para el modelo unidimensional sin dispersión axial será:

Para el balance de masa la ecuación (5)

y para el de energía de la ecuación (E) eliminando los mismos terminos de la ecuación (5) (ya que se tendran las mismas causas para eliminarlos) tendremos :

$$\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} (V T) = - \frac{\partial}{\partial z} (u T) + \frac{R(-DH)}{C_p} + Q/(C_p \rho) \quad (7)$$

En el caso de regimen estacionario nos queda:

$$\boxed{\frac{d}{dz} (uCi) = \alpha_i R} \quad \text{Bde M} \quad (5')$$

$$\frac{d(uT)}{dz} = \frac{R(-DH)}{C_p \rho} + Q/(C_p \rho) \quad (7')$$

Si además tenemos un reactor adiabatico , la ecuación

(5') nos queda igual y la única que cambia es la ecuación (7') por la ecuación (7'');

$$d(u T) / dz = R(-DH) / (C_p \rho) \quad (7'')$$

2) modelo unidimensional pseudohomogeneo con dispersión axial, en regimen estacionario seran las ecuaciones las siguientes :

$$\frac{d(u C_i)}{dz} = D_{iz} \frac{d C_i}{dz} + \alpha_i R \quad (6')$$

$$\frac{d(u T)}{dz} = \alpha z \frac{d T}{dz} + \frac{R(-DH)}{C_p \rho} + Q / (C_p \rho) \quad (8)$$

Donde Q es la transmisión de calor entre los alrededores y el sistema y:

$$Q = 2U(T - T_w) / \text{RADIO}$$

Donde U es el coeficiente global de transferencia de calor.

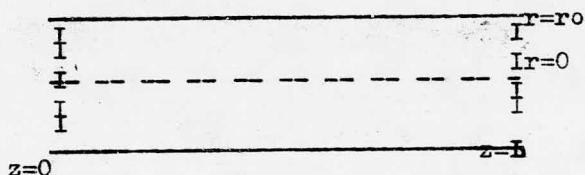
3) modelo bidimensional pseudohomogeneo

Para el caso del modelo bidimensional pseudohomogeneo se usaran las ecuaciones (D) y (E) y si no está en estado estacionario se utilizará el término de la izquierda (término de acumulación), en dado caso que se esté

en estado estacionario no se usará el término de la izquierda ya que este término de acumulación será igual a cero.

CONDICIONES A LA FRONTERA

Las condiciones a la frontera a utilizarse son las siguientes:



1) condiciones iniciales

para $t \leq 0$

$C=C_0$ para $z \neq 0$

$T=T_0$ para $0 \leq r \leq r_0$

2) condiciones en la frontera

para $t > 0$

$$\frac{\partial C}{\partial r} = 0 = \frac{\partial T}{\partial r} \quad \text{a } r = 0$$

$$k \frac{\partial T}{\partial r} = U_d A (T_w - T_s) \quad \text{y} \quad \frac{\partial C}{\partial r} = 0 \quad \text{a } r = r_0$$

para $z=0$ utilizaremos las condiciones de Dancköbler que nos dicen:

$$u_{C/z=0} - D_{12} \frac{\partial C}{\partial z} /_{z=0} = u_{C/z=0} - D_{12} \frac{\partial C}{\partial z} /_{z=0}$$

$$u_{T/z=0} - k_z \frac{\partial T}{\partial z} /_{z=0} = u_{T/z=0} - k_z \frac{\partial T}{\partial z} /_{z=0}$$

$$T/z=0 = T/z=0$$

$$C/z=0 = C/z=0$$

para $z=1$

$$\frac{\partial C}{\partial z} = 0 = \frac{\partial T}{\partial z}$$

La correlación que se usará para calcular el coeficiente global de transferencia de calor será la siguiente de Wasch y Froment (3).

$$U = U_0 + .5924(\text{numero de REYNOLDS}) / (\text{DIAMETRO DE PARTÍCULA}).$$

Donde U_0 es función del radio y es el coeficiente global estando estático el fluido. U está en $\text{cal/hr m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$.

MODELOS HETEROGENEOS

I.2.a) MODELO UNIDIMENSIONAL HETEROGENEO

Aquí consideramos ecuaciones que además de describir cambios térmicos y de concentración en la superficie de la partícula, los describan dentro de ella misma. }

En el régimen estacionario si la reacción se lleva a cabo en el área de las partículas tendremos:

Para el fluido.

$$\frac{d(\text{us } C)}{dz} = \text{kg av } (C - C_s)$$

BdeH (9)

$$\frac{d(\text{us } T)}{dz} = (hf \text{ av}(T_s - T) - 2H(T - T_w)/\text{RADIO}) / (\rho_f C_p) \quad (10)$$

BdeC.

donde el subíndice s significa a las condiciones de la superficie y tendremos para el sólido.

$$\frac{D_s}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dC_s}{d\xi} \right) + R(C_s, T_s) = 0 \quad (11)$$

DH = difusividad térmica

$$\frac{L_s}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dT_s}{d\xi} \right) - \rho_s (-DH) R(C_s, T_s) = 0 \quad (12)$$

Teniendo las siguientes condiciones a la frontera :

a z=0 C = C₀ y T = T₀

a =0 $\frac{dC_s}{d\xi} = \frac{dT_s}{d\xi} = 0$

además :

$$a \xi = b$$

$$kg (C_s - C) = - D_s \frac{dC_s}{d\xi}$$

$$hf (T_s - T) = - \cancel{D_s} \frac{dT_s}{d\xi}$$

Los valores de D_s pueden encontrarse la forma de calcularse en el libro " Difusión " en Catalísis " de Satterfield y Sherwood. Las ecuaciones (11) y (12) forman un par de ecuaciones diferenciales no lineales de segundo orden que pueden integrarse a cada nodo de la malla computacional usada en la integración de las ecuaciones (9) y (10) .

Si usamos las condiciones a la frontera y como factor de efectividad las ecuaciones (11) y (12) son reducidas a las siguientes ecuaciones algebraicas.

$$kg av (C - C_s) = \eta f^{bR} (C_s, T_s) \quad B.M \quad (11')$$

$$hf av (T_s - T) = \eta f^b (- DH) R (C_s, T_s) \quad (12') \quad B.C$$

$$\text{con} \quad \eta = f(C_s, T_s)$$

El factor de efectividad depende de las condiciones locales, las cuales se pueden introducir a un modulo (modulo de Thiele) que lo define para cada tipo de reacción.

Como en el caso a modelar no existe superficie interna ya que son pastillas poco porosas $\epsilon = 1$.

Los coeficientes k_g y h_f serán obtenidos de las correlaciones de De Acetis y Thados (4) y son las siguientes las utilizadas

$$k_g = 3.8 \left(G_s / \rho_f \left(\text{REYNOLDS}^{0.625} \right) \left(\text{SCHMIDT}^{2/3} \right) \right)$$

$$h_f = 3. \left(C_p G / \left(\text{REYNOLDS}^{0.625} \right) \left(\text{PRANDTL}^{2/3} \right) \right)$$

fueron obtenidas por linealización logarítmica de valores de j_h y j_d es Re .

El coeficiente global de transferencia de calor es calculado con una correlación de Wash y Bromont (3) y se linealiza el valor de U_o de acuerdo a la gráfica del apéndice I.

I.2.b) MODELO BIDIMENSIONAL HETEROGENEO

Procediendo de una manera semejante al unidimensional tenemos para el edo. estacionario.

Para la fase fluida.

B de M

$$\frac{\partial}{\partial z} (\text{us } C_i) = \text{Der} \left(\frac{\partial C}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) - k_g a_v (C - C_s)$$

(13)

$$a \quad r = R t$$

$$\forall z \quad \frac{\partial G}{\partial r} = 0$$

$$\alpha_w^f (T_w - T) = \text{ker}^f \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)$$

$$\alpha_w^s (T_w - T_s) = \text{ker}^s \left(\frac{\partial T_s}{\partial r} \right)$$

Los conceptos de ker^f y ker^s son introducidos por Singher y Wilhem, los cuales son difícilmente calculables (separables).

MODELOS DE CELDAS

Se toma como "lecho empacado" un recipiente cilíndrico empacado al azar con esferas uniformes.

La relación entre diámetro de cilindro a diámetro de esfera es mayor de 10.

El balance de masa se hace para un solo componente que llamemos el componente trazador".

Estos criterios se toman para Reynolds mayores de 100 de acuerdo a Jungers y colaboradores donde:

$$RE = \frac{u \rho \epsilon \, d_p}{\mu_f}$$

Otras suposiciones son:

- 1) La densidad molar y la capacidad calorífica del campo externo son constantes.
- 2) El nivel molecular de los flujos es despreciable comparado con el turbulento.
- 3) Las difusividades turbulentas de masa y calor son iguales (el mecanismo de transporte es el mismo). La conductividad térmica del empaque es despreciable.
- 4) El lecho es simétrico axialmente.

Bajo estas suposiciones el modelo diferencial de balance de masa para el elemento trazador es:

$$\frac{1}{P_{ex}} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{1}{P_{er}} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) - \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (17)$$

Las condiciones a la frontera e iniciales son:

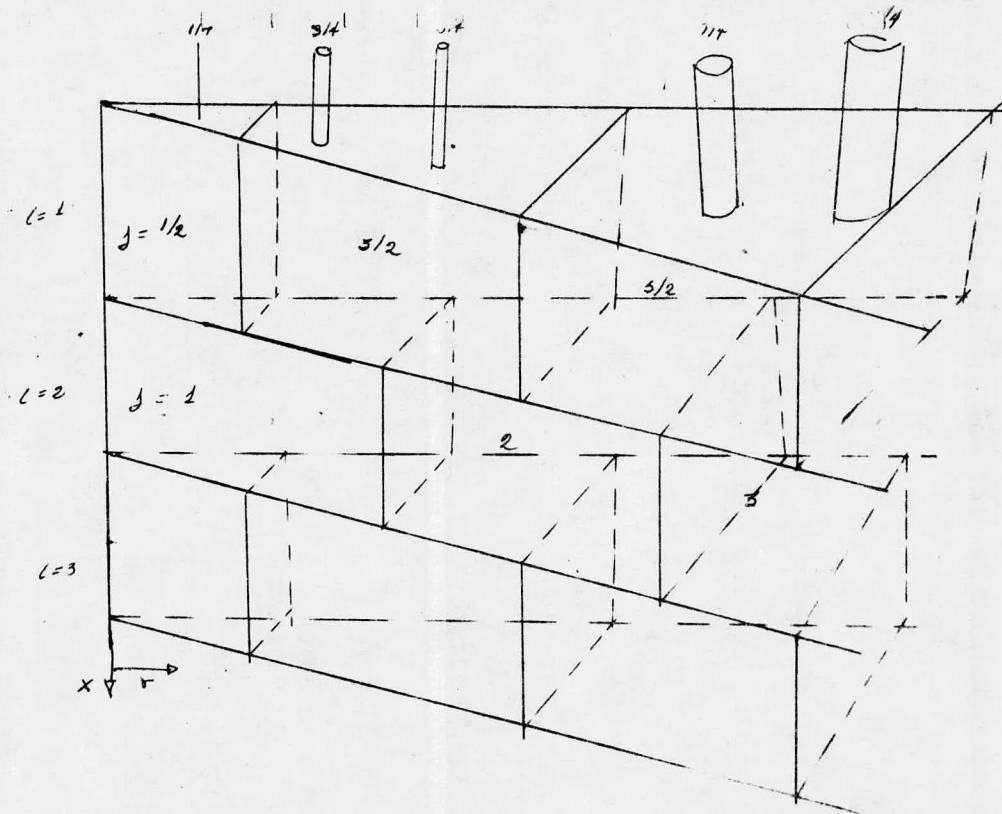


FIGURA 1 REPRESENTACION ESQUEMATICA DEL ARREGLO DE ETAPAS Y LA CONFIGURACION DEL PATRON DE FLUJO EN EL MODELO DE CELDAS.

Las condiciones a la frontera e iniciales son:

$$C(x, r, 0) = f(x, r) \quad (18)$$

$$C(0, r, t) - \frac{1}{Pex} \frac{\partial C(0, r, tt)}{\partial x} = q(r, t) \quad (19)$$

$$\frac{\partial C(N, r, t)}{\partial x} = 0 \quad (20)$$

$$\frac{\partial C(x, 0, t)}{\partial r} = 0 \quad (21)$$

Para un sistema químicamente reactivo los balances para el componente k ésimo en las i , j ésimas etapas son:

$$\phi_k - C_k + Rr(C_1, C_2, \dots, C_k; T) = \frac{\partial C_k}{\partial t} \quad (22)$$

$$Y \phi - T + RT(C_1, C_2, \dots; C_k; T) = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (23)$$

Y las C.C. pueden escribirse:

$$\left(\frac{\partial C_k(s)}{\partial \rho} \right)_{i,j} = \left\{ \text{Sch} (C_k - C_k(s)) \right\}_{i,j} \quad (24)$$

$$\left(\frac{\partial T(s)}{\partial \rho} \right)_{i,j} = \left\{ \text{Nu} (T - T(s)) \right\}_{i,j} \quad (25)$$

$T(s)$ y $C_k(s)$ son los valores en la superficie del elemento esférico.

Los balances externos pueden ser escritos así :

$$\phi_k - C_k + ST (C_k(s) - C_k) = \frac{dC_k}{dt} \quad (26)$$

$$\phi - T + ST(T(s) - T) = \frac{dT}{dt} \quad (27)$$

Si el estado es estacionario T puede ser resuelta, así :

$$T = \frac{\phi + ST T(s)}{1 + ST} \quad (28)$$

Y así la (25) nos queda :

$$\left(\frac{\partial T(s)}{\partial \rho} \right)_{i,j} = \left[\text{Nu} \left(\frac{\psi - T(s)}{1 - ST} \right) \right]_{i,j} \quad (29)$$

De la misma forma (24) nos da :

$$\left(\frac{\partial C_k(s)}{\partial \rho} \right)_{i,j} = \left[\text{Sch} \left(\frac{\phi_k - C_k(s)}{1 + ST_k} \right) \right]_{i,j} \quad (30)$$

El lado derecho de (22) puede reemplazarse por una aproximación de diferencias finitas de orden arbitrario .

Suponiendo que conocemos t a $t = 1 \Delta t$ y como lo desconocemos a $t = (1+1) \Delta t$, (22) nos da en su forma diferenciada :

$$T(l+1) = U (ST; Tl - m; \Psi l - m + 1; T(s)l - m; T(s)l+1) \quad (31)$$

Con $m = 0, 1, 2, \dots$ $T(s)l+1$ es desconocida

Donde solo condiciones a la frontera nos quedaran:

$$\frac{\partial \bar{T}(s)}{\partial p} = V(Nu; Te + 1; Tl - m; T(s)l - m + 1) \quad (32)$$

Donde el lado izquierdo se extiende hecho a un promedio sobre el paso $(l + 1)$.

Sustituyendo (31) y (32) tenemos:

$$\frac{\partial \bar{T}(s)}{\partial p} = W(ST; Nu; \Psi l - m + 1; Tl - m; T(s)l - m + 1) \quad (33)$$

la cual contiene solo valores conocidos.

LIMITACIONES DE TIPO ESTEQUIOMETRICO

Las suposiciones de densidades molar y másica constantes son suficientes para satisfacer las relaciones estequiométricas de la corriente de alimentación y a las condiciones externas en el estado estacionario. Asimismo la acumulación de tipo no estequiometrico son posibles bajo condiciones de transiente. De cualquier forma las relaciones universales no son requeridas para el modelo de etapas finitas.

Para cada reacción independiente que ocurre podría estar localmente limitados los reactantes en la corriente de alimentación combinada en una etapa dada. Si la acumulación no estequiométrica en la etapa se ignora como una primera aproximación, se sigue que para una reacción simple:

$$\phi_k - C_k = \left(\frac{v_k}{v_E} \right) (\phi_E - C_E) \quad (34)$$

Donde v_E es el coeficiente estequiométrico del reactante limitante. Todas las demás concentraciones pueden limitarse del término enlazante en el balance de material para el componente por uso de las relaciones lineales (34) es decir:

$$R_E(C_1, C_2, \dots, C_E, \dots, C_k; T) = R_E(C_E; 1, \dots, k; T) \quad (35)$$

Así el balance de materia puede resolverse simultáneamente con el de calor.

Las $C_k (k \neq E)$ sigue la (34).

Por razonamientos similares todas las concentraciones pueden eliminarse desde propiedades escogidas de los términos de enlace en los casos más generales de reacciones independientes.

Esta última podría no considerarse, así las complicaciones algebraicas introducidas no están balanceadas por algún incremento en la generalidad del análisis. Una reacción homogénea de primer orden, irreversible es suficiente para estos propósitos. Los términos de concentración pueden ser escritos en forma explícita como.

$$R_k = -C_k \left(k_e - \frac{E}{T} \right) \quad \text{y} \quad R_E = C_E \left(k_e - \frac{E}{T} \right) \quad (36)$$

SOLUCION NUMERICA PARA UN SISTEMA TIPICO REACTIVO

Las ecuaciones de balance pueden resolverse por la siguiente relación de parámetros y tomando los siguientes:

$$\phi_{i-1,j} - C_{i,j} (1 + k \exp(-E/T_{i,j})) = \frac{dC_{i,j}}{dt} \quad (37)$$

$$1 \leq i \leq N; 0 < j \leq M$$

$$y \quad \psi_{i-1,j} - T_{i,j} h_{i,j} k \exp(-E/T_{i,j}) = \beta \frac{dT_{i,j}}{dt} \quad (38)$$

$$1 \leq i \leq N; 0 < j \leq M$$

Para $j=M$ (38) puede incluir el efecto de la transferencia de calor a la pared. Si el coeficiente de transferencia de calor de pared "STW" es considerado constante:

$$\left(\frac{\psi_{i-1,M} + STW T_{w,i}}{1 + STW} \right) - T_{i,j} + \left(\frac{h}{1+STW} \right) C_{i,M} k \exp(-E/T_{i,j}) = \left(\frac{\beta}{1+STW} \right) \frac{dT_{i,M}}{dt} \quad (39)$$

La cual es de la misma forma que la (38).

Las condiciones de entrada e iniciales que completan la especificación del sistema son:

$$\phi_{0,j} = \phi_0(t), \quad \psi_{0,j} = \psi_0(t), \quad T_{w,i} = T_{w,i}(t)$$

$$C_{i,j}(0) = C(i,j); \quad T_{i,j}(0) = T(i,j)$$

Las ecuaciones (37) y (38) representan la formulación del modelo de etapas finitas de un sistema, el cual ha sido despojado de un número de factores de complicación, llamadas variables de densidad molar y másica y difusión interna y transporte interfílmico (entre la película) a la superficie. Como constituyendo en etapas de velocidad y las expresiones complejas cinéticas homogéneas asociadas con orden múltiple (mayor al orden uno) de reacciones y valores de propiedades, los cuales varían con la temperatura y la concentración.

De otra forma las ecuaciones serían suficientemente generales para llevar a cabo la mayor parte de los efectos físicos de un sistema reactivo; los cuales son: Mezclado turbulento, radical y axial, enlaces entre los balances térmicos y másicos por una expresión realística de velocidad, y la transferencia de calor a través de las fronteras (límites).

CAPITULO

II

ESTABLECIMIENTO DEL DIAGRAMA DE FLUJO DE LOS
MODELOS UNIDIMENSIONALES

II . 1

MODELO PSEUDOHOMOGENEO UNIDIMENSIONAL

Para este modelo se usarán las ecuaciones desarrolladas en la primera parte del capítulo anterior (ecuaciones (I.5') y (I.7')) y al considerar u como constante para un pequeño incremento, tendremos arreglandolas de la siguiente forma:

Utilizando las ecuaciones (1) y (2) del capítulo anterior tenemos:

despejando dC de la ecuación (I.1)

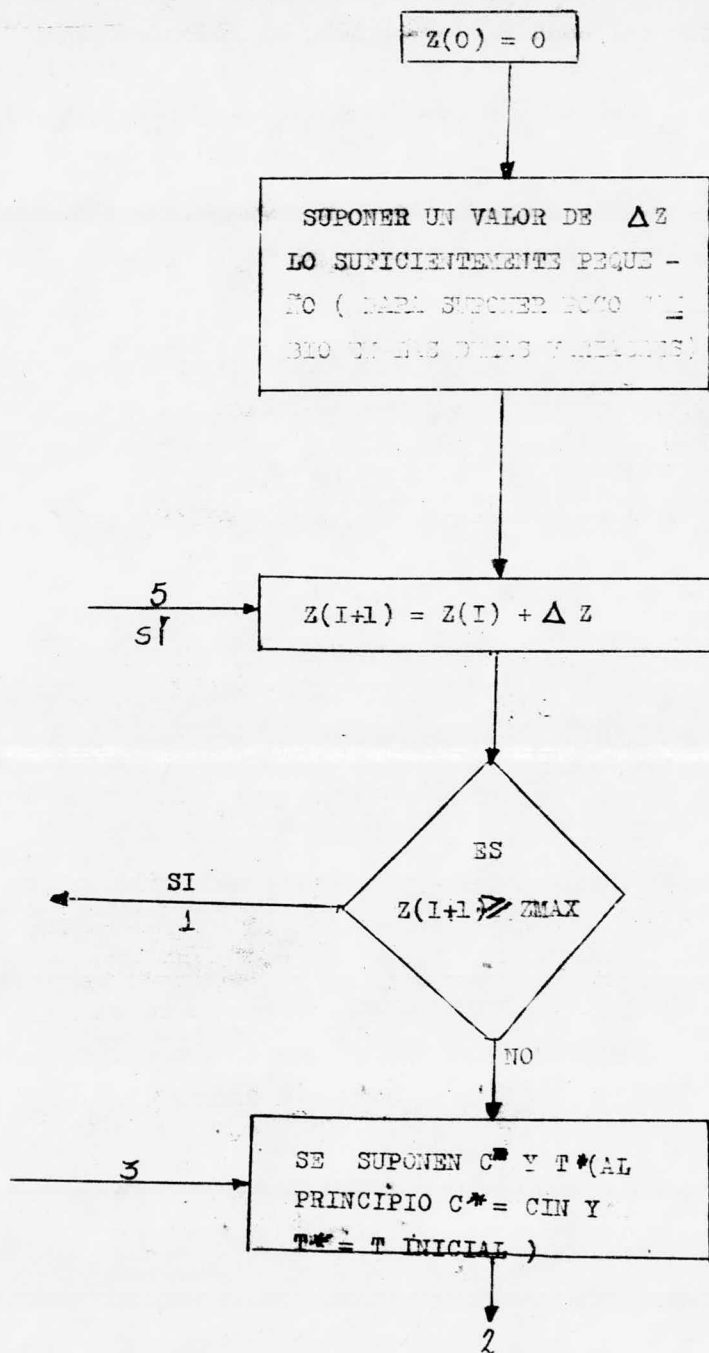
$$dC = \left(\rho_B \int_f \frac{W}{G} dz \right) \quad (1)$$

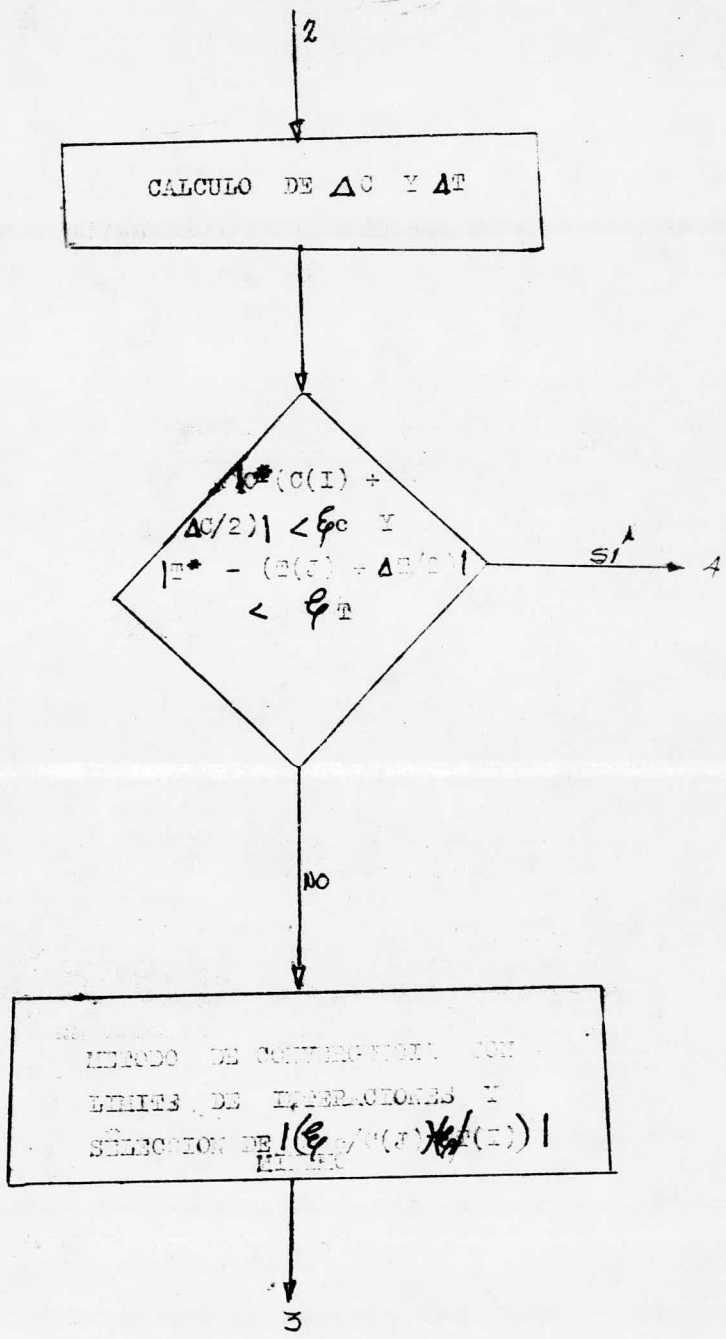
de (I.2) despejando dT

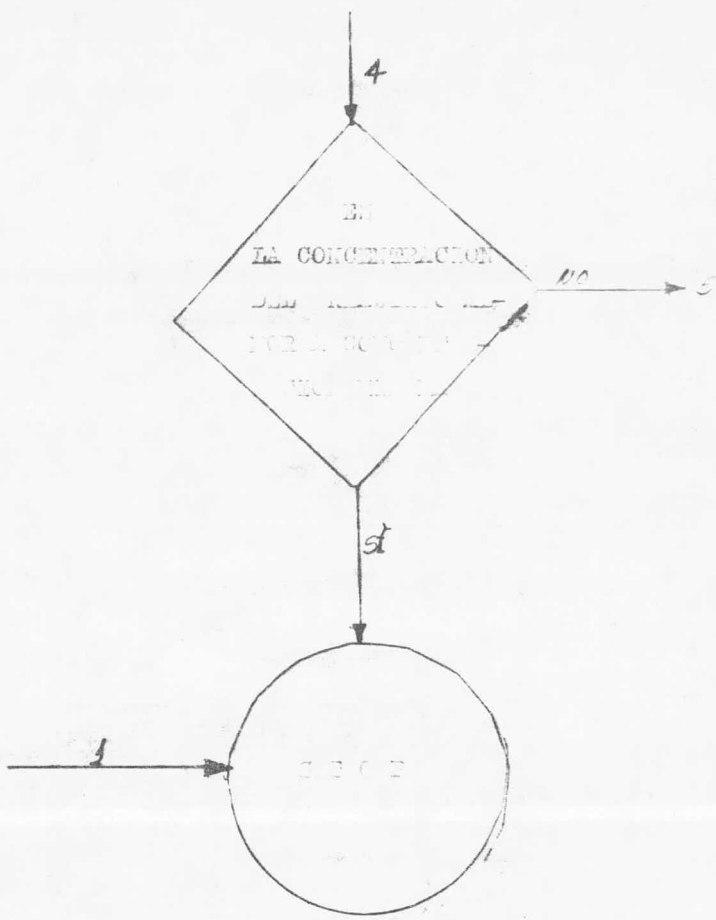
$$dT = \left((-DH) \rho_B R - 2U (T - T_w) / \text{RADIO} \right) / (GCp) dz \quad (1')$$

Con estas ecuaciones y pequeños incrementos resolveremos el modelo según el planteamiento siguiente:

DIAGRAMA DE FLUJO DEL
 MODELO PSEUDOHOMOGENEO UNIDIMENSIONAL







II . 2

MODELO

UNIDIMENSIONAL

HETEROGENEO

De las ecuaciones desarrolladas en la segunda parte del capítulo anterior tendremos para cada fase a us constante para pequeños incrementos y procediendo a un arreglo o rearreglando para que su diagrama de flujo sea más explícito :

Utilizando las ecuaciones (7) a (12) del capítulo anterior y ademas sus condiciones a la frontera tendremos :

despejando dC de (I.7)

$$dC = -(k_g a_v \rho_f (C - C_s)/G)dz \quad (2)$$

despejando dT de la ecuación (I.8)

$$dT = ((h_f a_v (T_s - T) - 2U (T - T_w)/RADIO)/G C_p)dz \quad (3)$$

despejando C_s de (I.11)

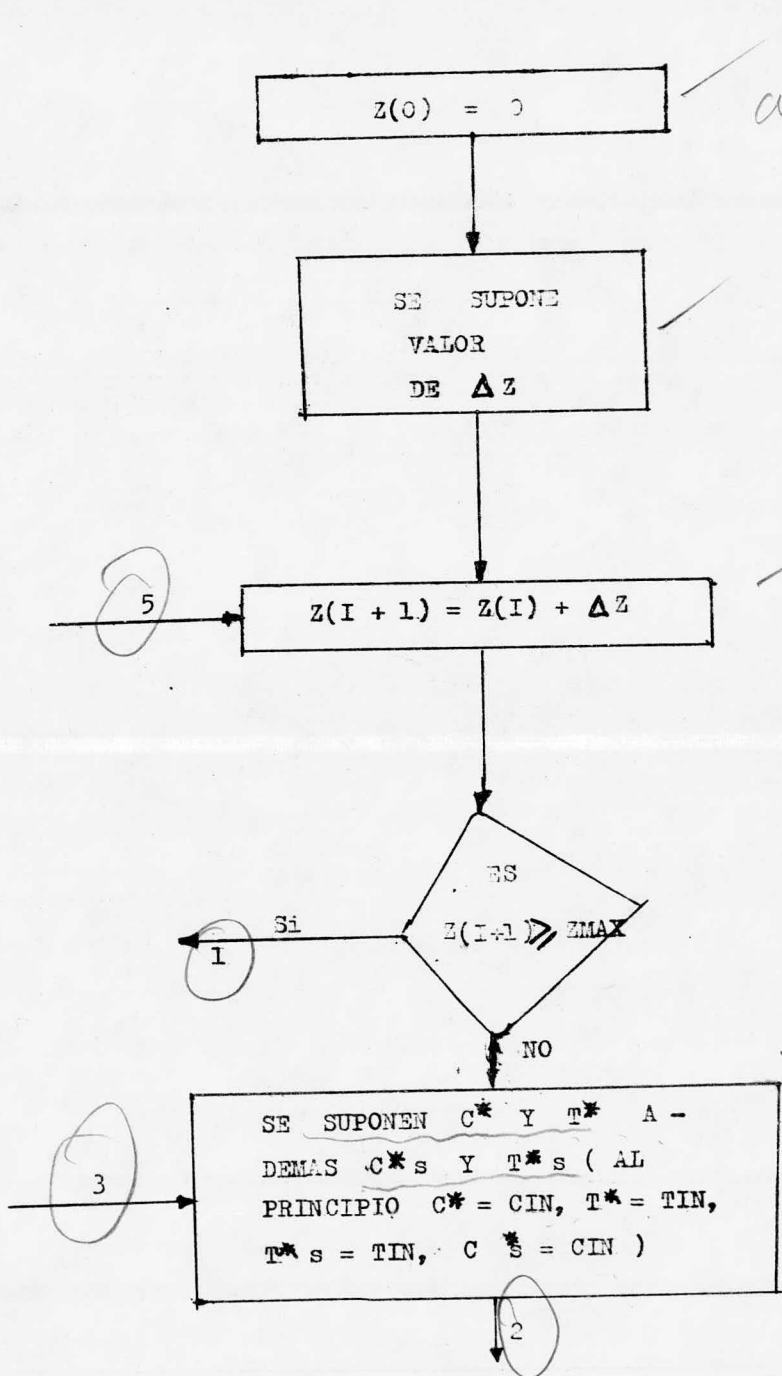
$$C_s = C - (\int_B R/k_g a_v)R(C_s, T_s) \quad (4)$$

y por ultimo despejando T_s de (I.12)

$$T_s = T + \int_B (-DH)R(C_s, T_s)/(h_f a_v) \quad (5)$$

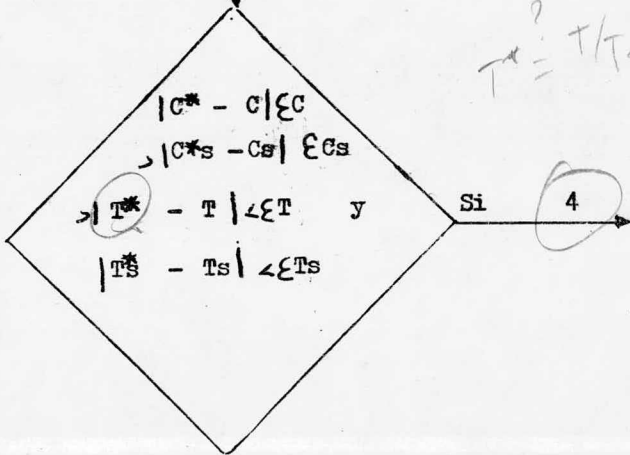
Son las ecuaciones (2) a (5) las que se utilizarán para resolver por incrementos pequeños el modelo , utilizando el siguiente diagrama de flujo:

DIAGRAMA DE FLUJO DEL
MODELO HETEROGENEO UNIDIMENSIONAL .



2

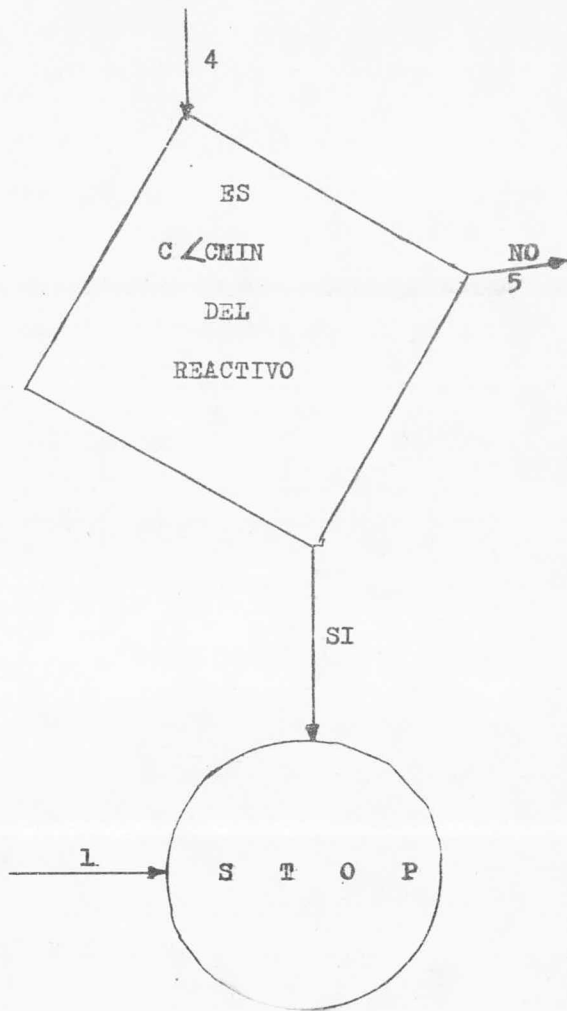
CALCULE DE $\Delta T \rightarrow T \Delta C \rightarrow C$;
 C_s y T_s y COM Tinterfase
 $= (T_s + T)/2$ LOS COEFICIENTES



No

METODO DE CONVERGENCIA Y SU -
 POSICION DE NUEVOS VALORES

3



CAPITULO III
RESULTADOS

La notación a utilizarse en las gráficas de este capítulo es la siguiente:

s = superficie (modelo unidimensional heterógeno)

f = fluido (" " ")

p = modelo unidimensional pseudohomogeneo.

Un número antes de las letras significa dentro de la hoja de graficas el número del caso.

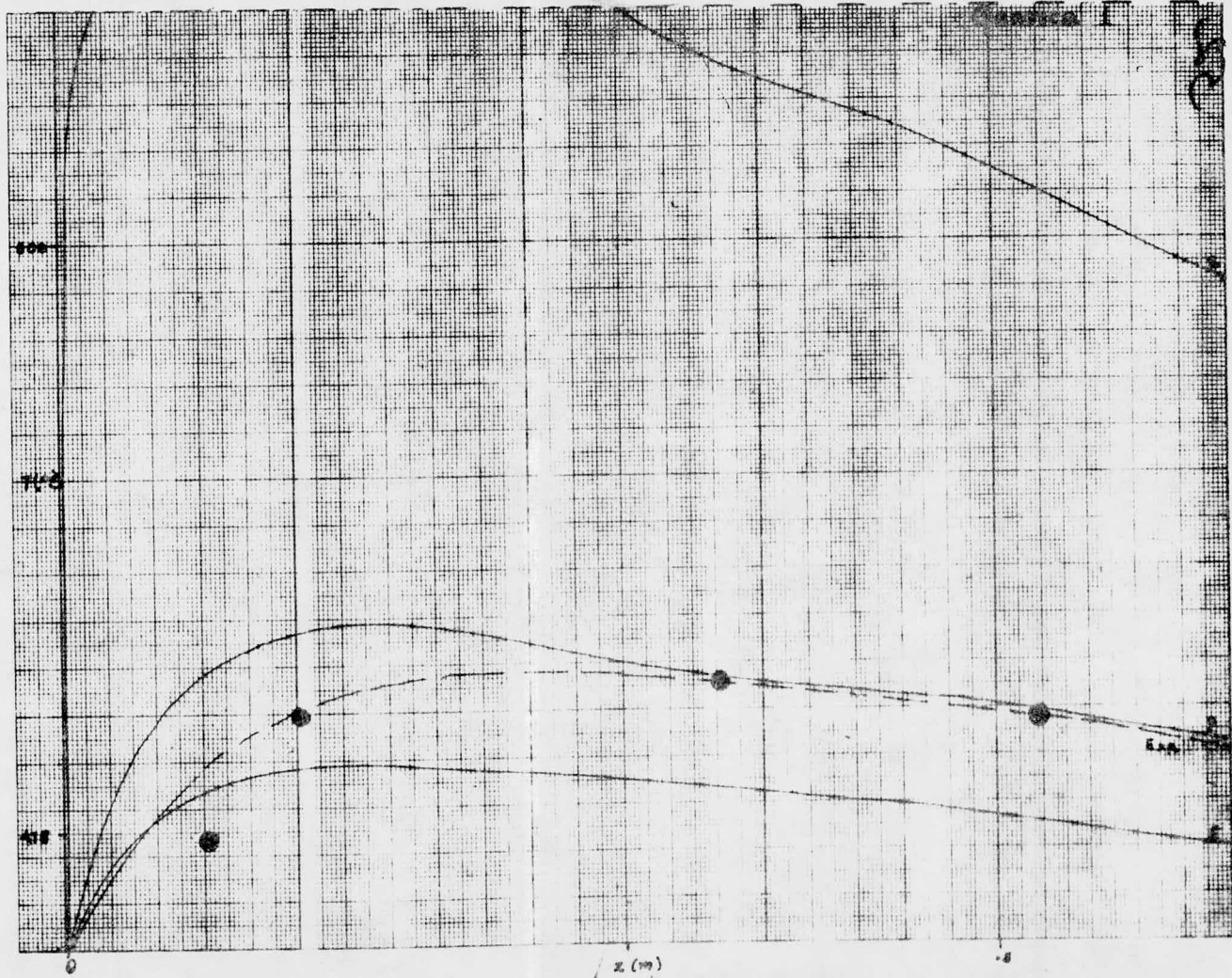
v.g.

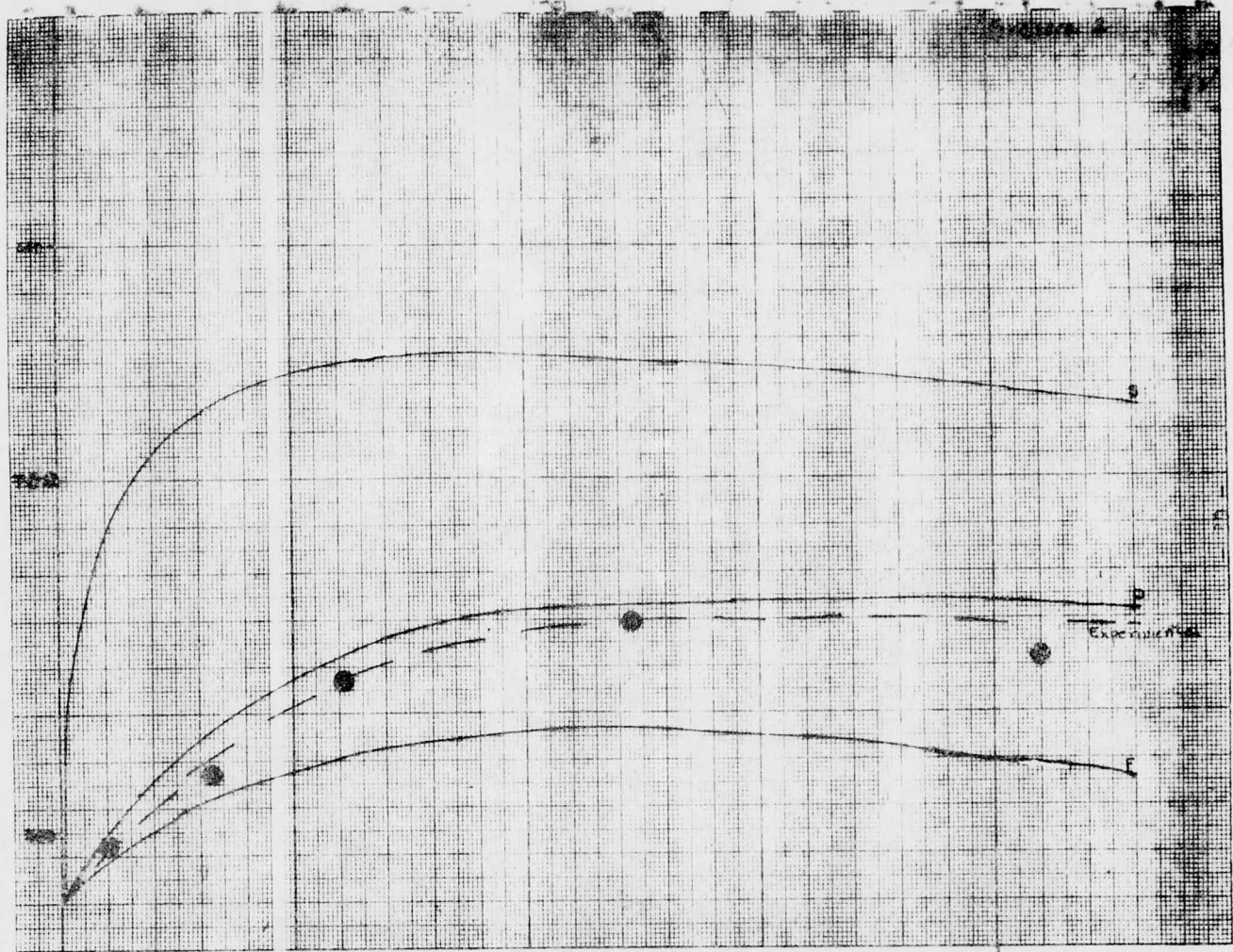
ls = significa la curva para el modelo en la fase sólida unidimensional heterogeneo , caso 1.

III.1 PREDICCIÓN DEL COMPORTAMIENTO

TABLA III.1

GRÁFICA	DIÁMETRO (cm)	Revoluciones	CONCENTRACION DE BENCENO (ATM)			CONCENTRACION ANHIDRIDO MALÉICO (ATM)			GRADOS CELSIUS				DISTANCIA PUNTO CALIENTE (cm)	
			INICIAL	FINAL EXPERIM.	0.5 m PSEUDO	FINAL EXP.	0.5 m PSEUDO	TEMPERATURA		PUNTO CALIENTE		EXP.	PSEUDO	
								INICIAL	BAÑO	EXP.	PSEUDO			
1	1	36.4	.0098	.00415	.00406	.003824	.0039	470	470	481.8	484.5	.18	.22	
2	1	89.3	.009	.0028	.0058	.002198	.00215	494	500	508	509	.3	.3	
3	2	71.6	.00475	.00735	.0081	.001625	.0011	401.5	414	—	—	—	—	
4	2	21.4	.0102	.00215	.00205	.00486	.00413	412.5	415	497.5	498.2	.3	.32	
5	2	42.5	.0115	.00585	.0062	.003723	.0023	407	420	—	—	—	—	
6	1	37.2	.0135	.00783	.00993	.008246	.0056	470	470	506	511	.15	.16	



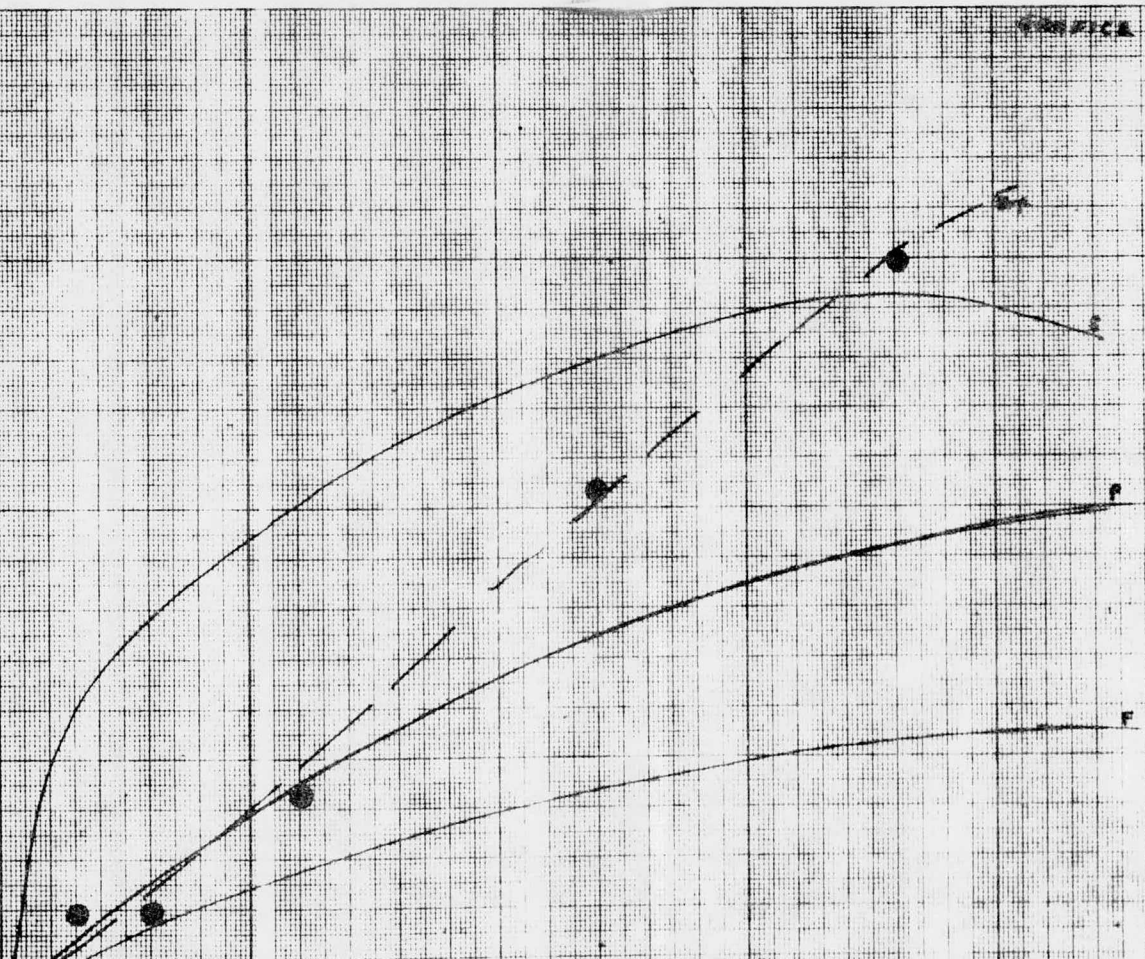


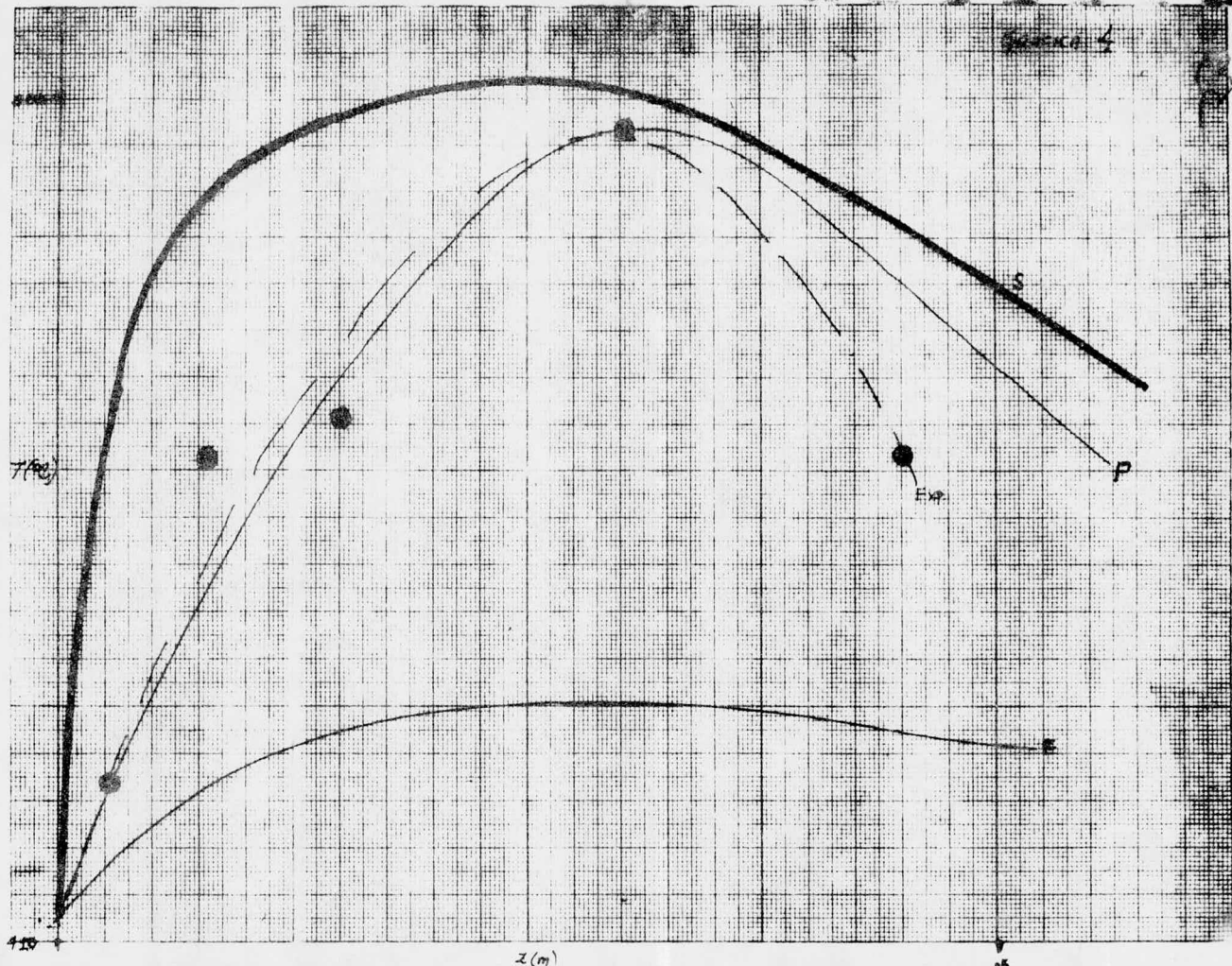
200

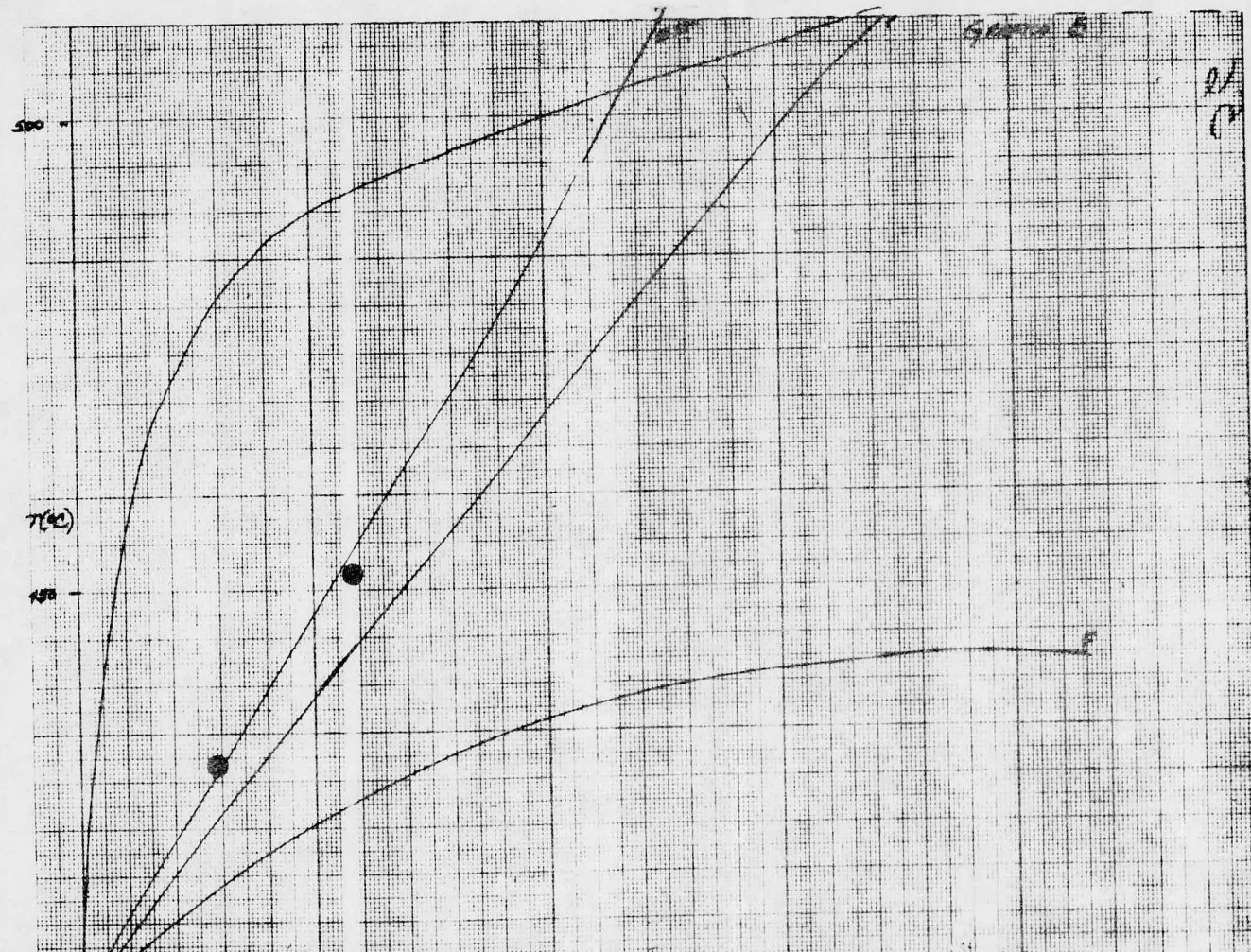
FIGURE 5

17
18

$r(\omega)$







III.2 ANALISIS DE SENSIBILIDAD

GRAFICAS 6 y 7

TABLA III.2.

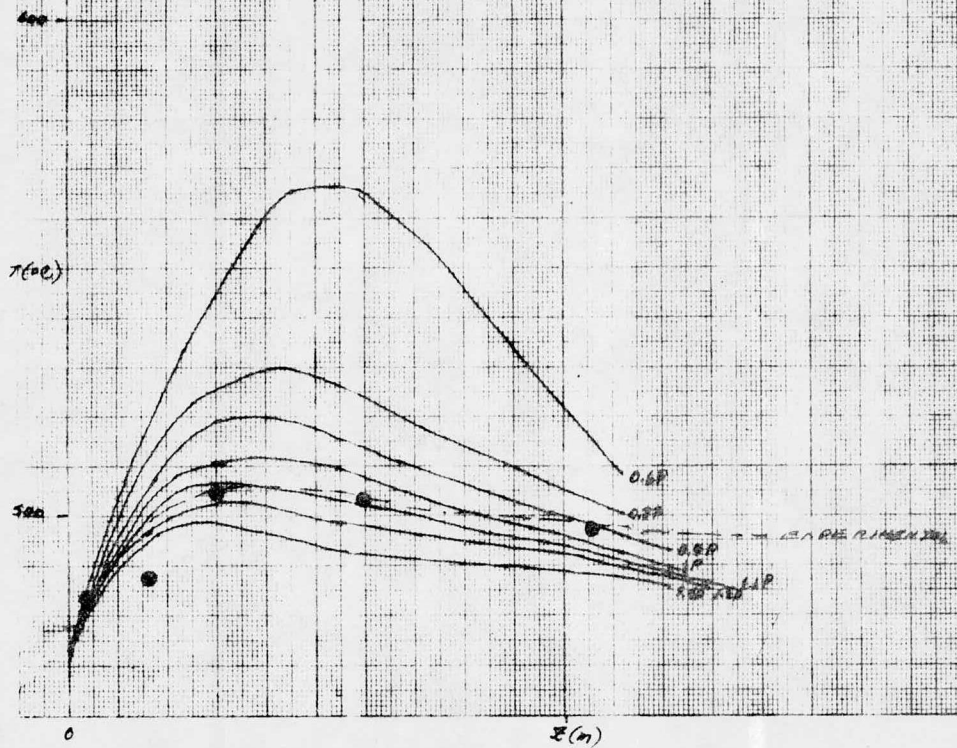
VALOR DE FC δ	GRADOS CEBOS		DISTANCIA (M)		OBSERVACIONES
	PUNTO CALIENTE		P-L	RATO CALIENTE	
SEA PARA- TRO DE SENSIBILIDAD	PSEUDO. δ EXP.	HETEROGERO SOLIDO	PSEUDO. δ EXP.	HETEROGERO SOLIDO	
EXPERIMENTAL	506.	—	.15	—	
3.0	511	563	.16	.11	
3.4	447	534	.15	.1	SE NOTA QUE NO HAY MUCHA SENSIBILIDAD AL AUMENTO
1.2	502	547	.15	.11	DE LOS COEFICIENTES PERO SI EXISTE EN FORMA MUY
1.1	506.5	552	.15	.11	PRONUNCIADA A LA DISMINUCION DE LOS COEFICIENTES EN LOS
0.9	519	575	.18	.115	MODELOS
0.8	523.5	589.5	.21	.12	
0.6	556	636	.265	.15	

TEMPERATURA INICIAL = 470 °C
CONCENTRACION INICIAL = 0.0185 ATN.

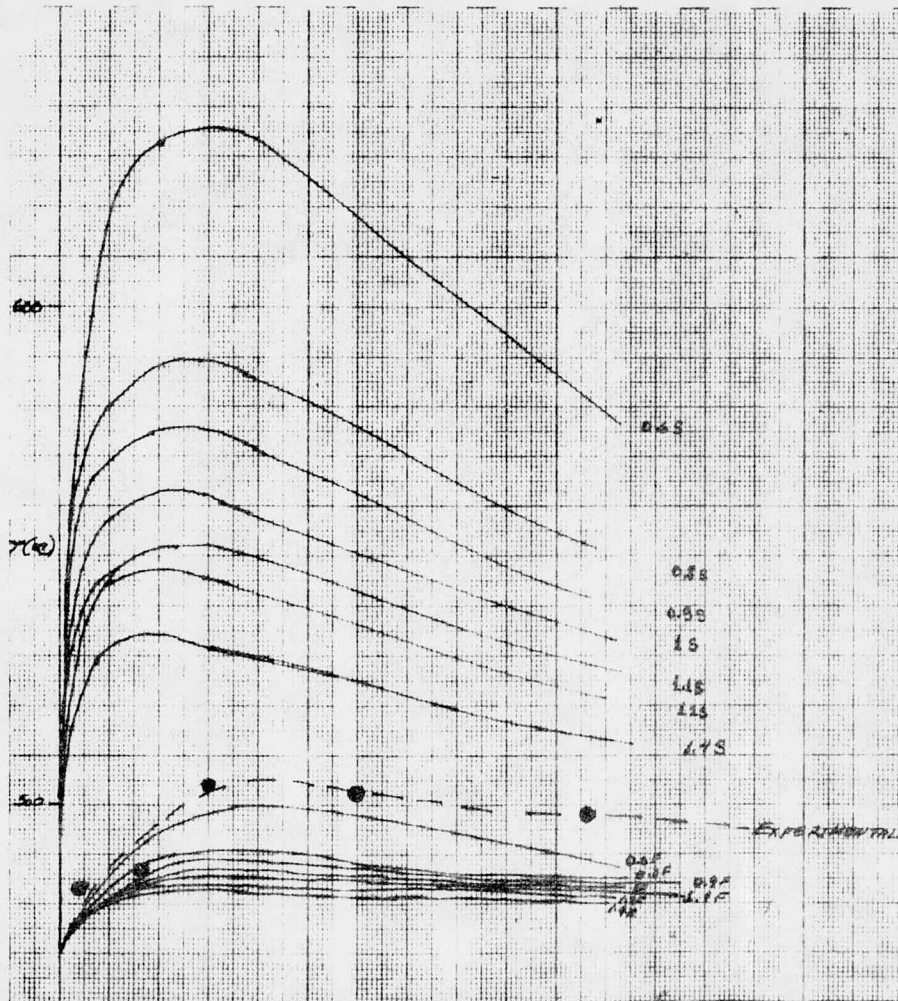
TEMPERATURA DEL BANO = 470 °C
REYNOLDS = 37.16

DIAMETRO = 0.0254 m

17



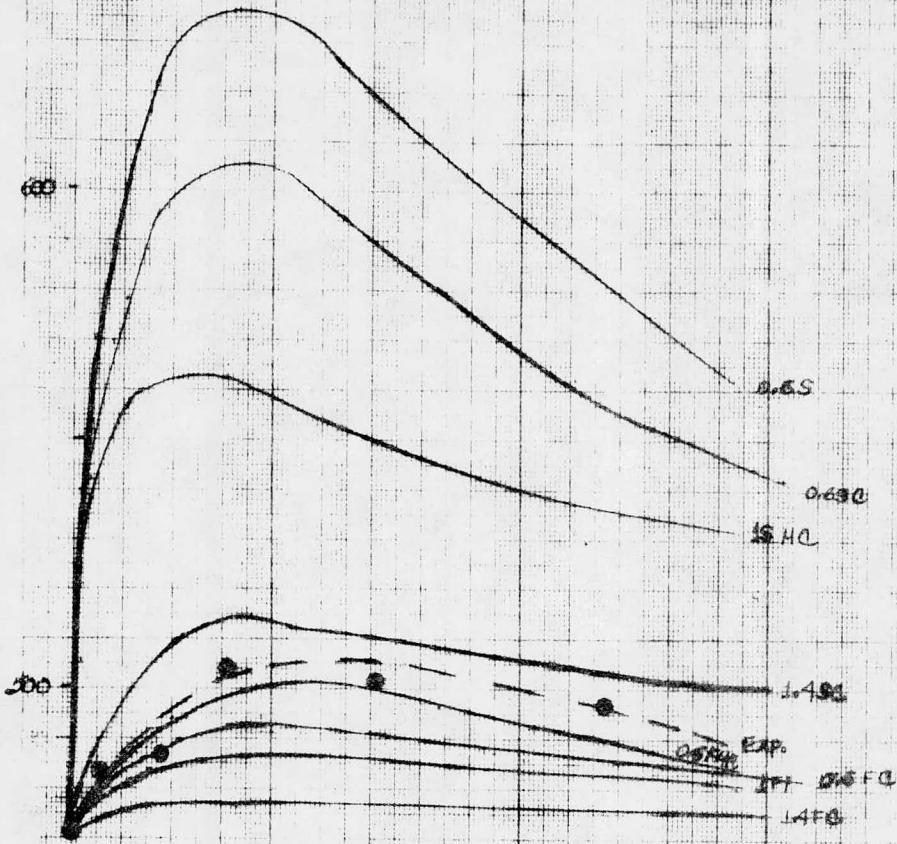
A
B



III, 2.A ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD (MODELO UNIDIMENSIONAL HETEROGENEO, GRÁFICAS 7Y 7A), VARIANDO COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA Y CALOR.

VALOR DE	COEFICIENTES QUE SE VARIARON	PUNTO CALIENTE HED. UNID. HETEROGENEO GRANDES CELULAS			DIFERENCIA ABSOLUTA - EXP / 00	OBSERVACIONES
		FLUIDO	SÓLIDO	PEDIA		
FC	VARIARON					
Exptm.	—	—	—	506	—	
1	MASA Y CALOR	487	563	525	19	LA MAYOR APROXIMACION OCURRE PARA VALORES
0.6	MASA Y CALOR	500	636	568	62	DE FC ALTOS, NOTANDOSE SU BAJA SENSIBILIDAD AL
0.6	CALOR	493	606	549.5	43.5	AUMENTO DE FC Y SU GRAN SENSIBILIDAD A SU
1.4	MASA Y CALOR	482.5	534	508.25	2.25	DISHINCCION. ADEMÁS SE NOTA QUE SI DEJAMOS EL COEF.
1.4	CALOR	479.9	524.5	506.8	0.2	DE T. DE MASA CONSTANTE Y LOS DE CALOR VARIAMOS A LA VEZ SE TIENE UN GRAN ACUERDO ENTRE EXP. Y CALCULADOS POR ESTE MODELO.

✓



DOFACIÓ

- S = SORBE
- F = FLUIDO
- M = MASA (COEF DE T.)
- (= CALOR (v. r. r.)

III.5 ANALISIS CON CAMBIO DE CONCENTRACION

TABLA III.3

NUMERO DE CURVA	CONCENTRACION	PUNTO CALIENTE (GRADOS CELSIUS)		DISTANCIA (M) AL PUNTO CALIENTE		OBSERVACIONES
		PSEUDO	HETEROG. SÓLIDO	PSEUDO.	HETEROG. SÓLIDO	
GRAFICA 8	INICIAL (ATH)					
1	0.0185	512	563	.175	.1	
2	0.014	498	511	.175	.1	EL PUNTO CALIENTE NO SE DESPLAZA PERO 8°
3	0.01	488	516.5	.175	.1	DISMINUYE LA TEMPERATURA EN EL REACTOR DE UNO FORMA CONTRA LO SE.
4	0.006	480	497	.175	.1	
5	0.002	473	479	.175	.1	

Reynolds = 37.16

DIAMETRO = .0254m

TEMP. INICIAL = 470 °C

TEMPERATURA DEL BAÑO = 470 °C

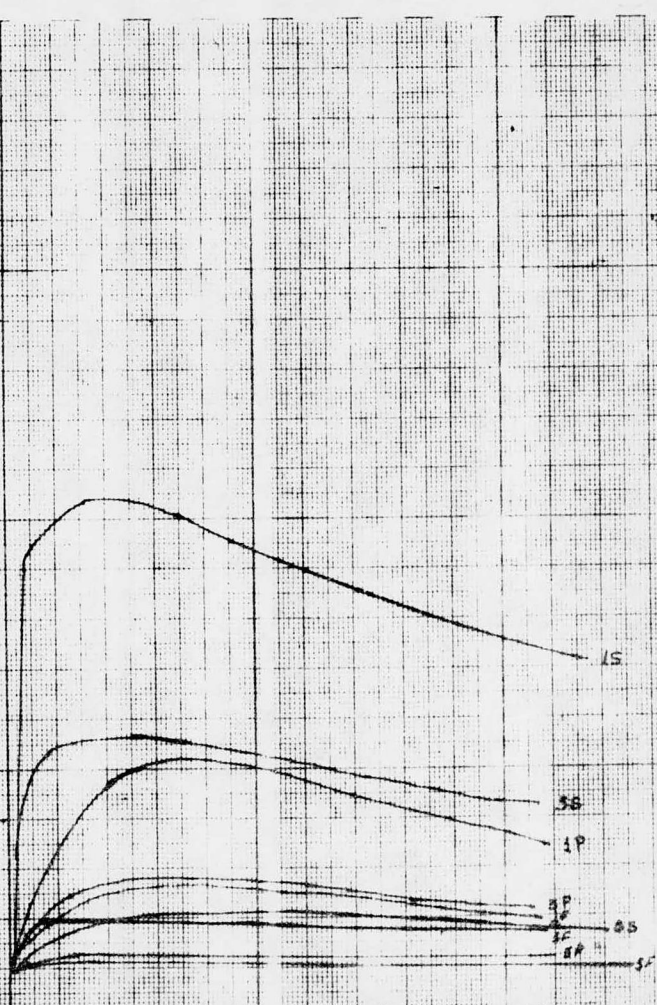
GRAFICA 8

8

600

$\gamma(\%)$

500



III.4 ANALISIS CON CAMBIOS DE TEMPERATURA DEL BAÑO
Y CON CAMBIO EN LA TEMPERATURA INICIAL DE ALIMENTACION

GRÁFICA 9 MODELO UNIDIMENSIONAL PSEUDO HOMOGENEO
GRÁFICA 10 Y HETEROGENEO

TABLA III. A

CASOS DE ANÁLISIS	TEMP. INICIAL (°C)	TEMP. BAÑO (°C)	PUNTO CALIENTE (GRAMOS CALIDOS)		DISTANCIA AL PUNTO CALIENTE (CM)		TEMPERATURA A 0.5 M (GRAMOS CALIDOS)		OBSERVACIONES
			PSEUDO	HETEROG.	PSEUDO	HETEROG.	PSEUDO	HETEROG.	
1	500	400	526	554	.2	.075	538	522	SE NOTA QUE CON EL CAMBIO DE
2	500	450	523	540	.25	.15	538	522	TEMPERATURA INICIAL A TEMPERATURA DE
3	500	400	522	538	.3	.23	538	522	BAÑO CONSTANTE SE DESPLAZA EL
4	400	500	500	527	.0	.022	474	461	PUNTO CALIENTE CON LA BAJA DE LA
5	450	450	461	481	.2	.075	474	461	TEMPERATURA INICIAL, Y SE NOTA CLARAMENTE
6	450	400	461	474	.3	.26	474	461	QUE EL PUNTO CALIENTE PUEDE SER
7	400	500	500	507	.0	.025	409	403	CELESTACION PARA EVITAR QUE SE DISMINUYA
8	400	450	400	455	.0	.025	409	403	LA REACCION Y OBTENIENDO EL PRODUCTO
9	400	400	403	409	.3	.25	409	403	NO DESEABLE CON LA BAJA DE LA

(CONCENTRACION) INICIAL = 0.0195at

DIAMETRO = 1"

GRAFICA 9

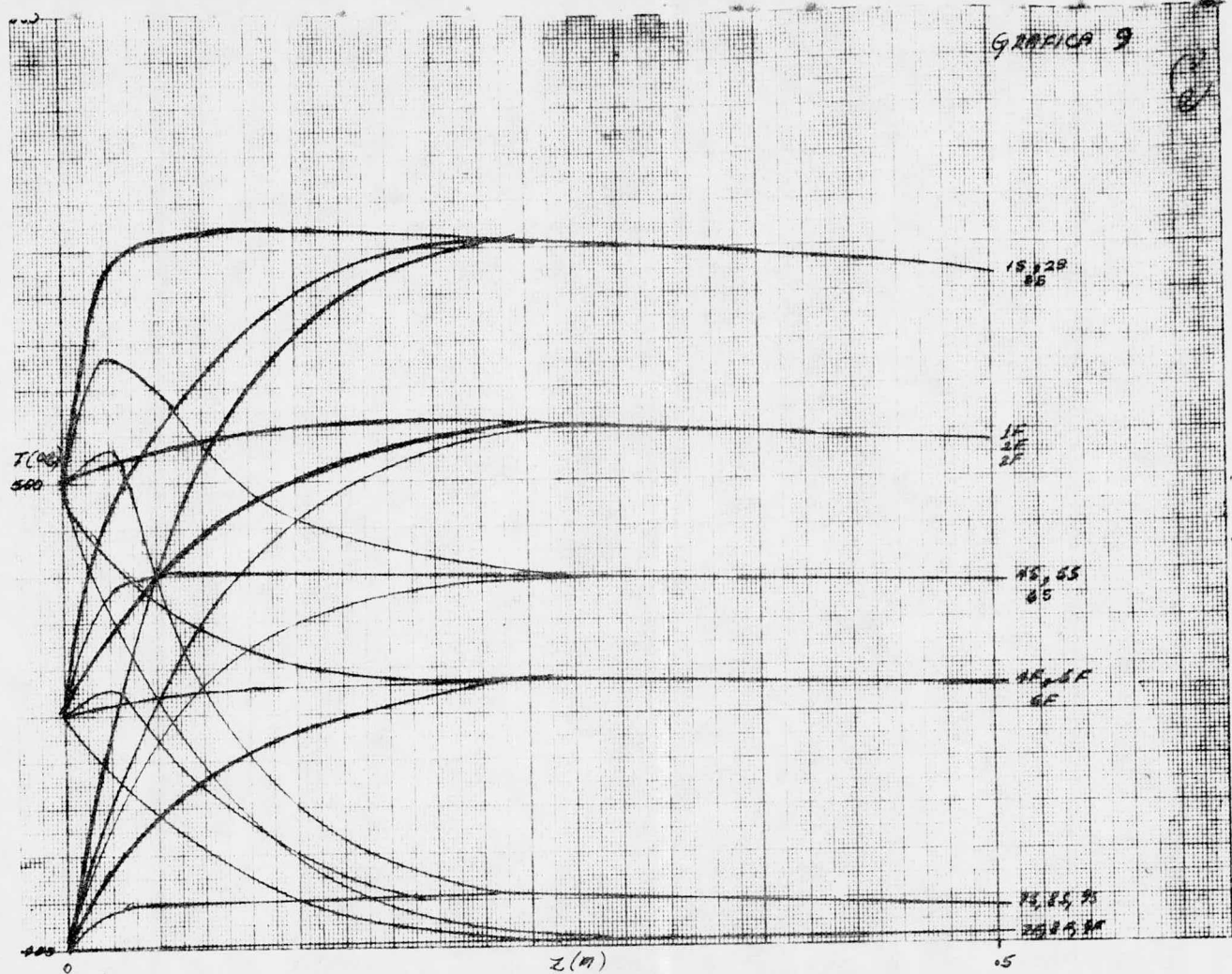


GRAFICO 10

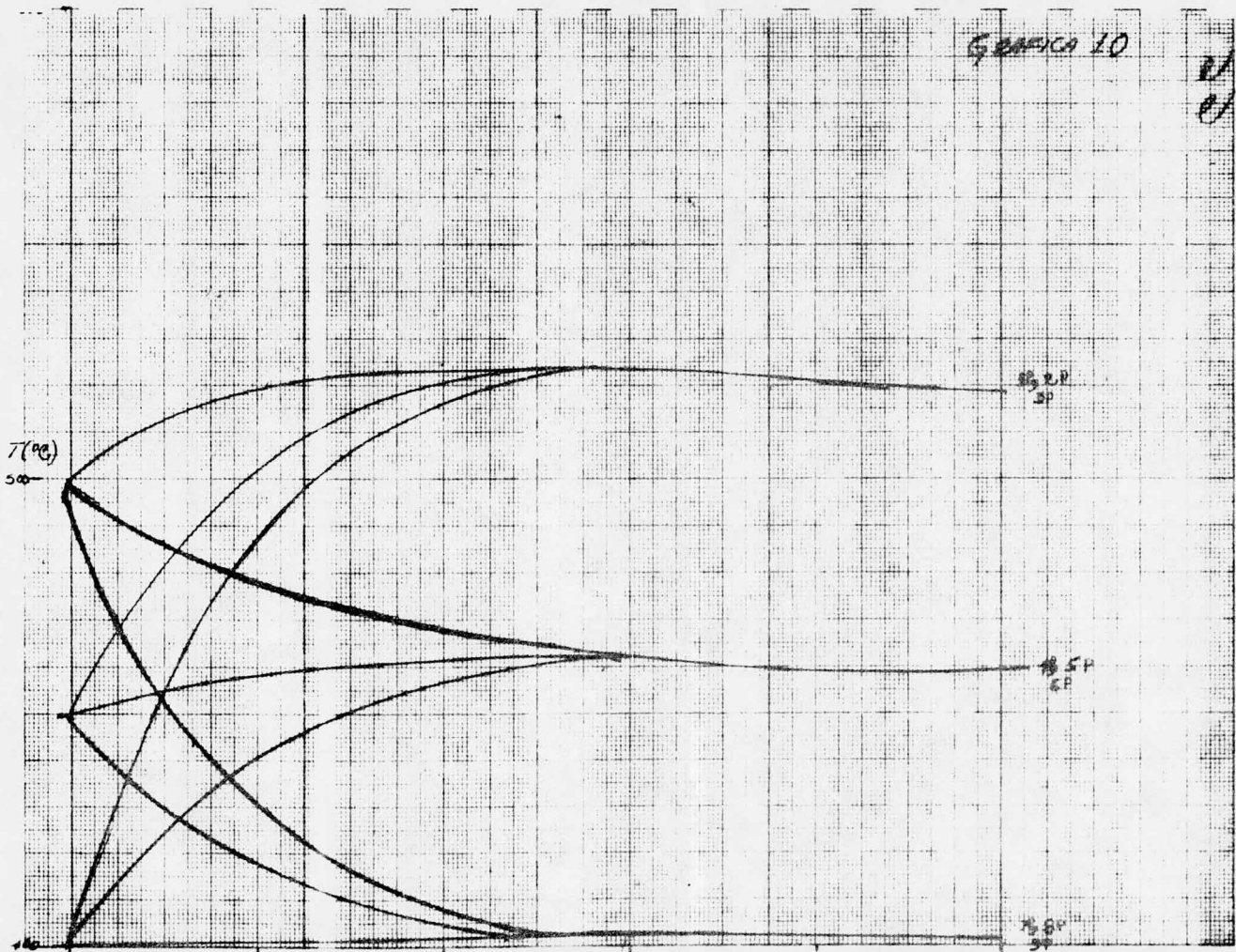
1/1
0/1

$T(°C)$
500

80,2 P
3P

80,5 P
6P

76,8 P
5P



III.5 ANALISIS DE SENSIBILIDAD CON CAMBIO DE GASTO Y DE DIÁMETRO

TEMP. JUNCH = 470°C

TEMP. BAÑO = 470°C

BANC. INICIAL = 0.0165at

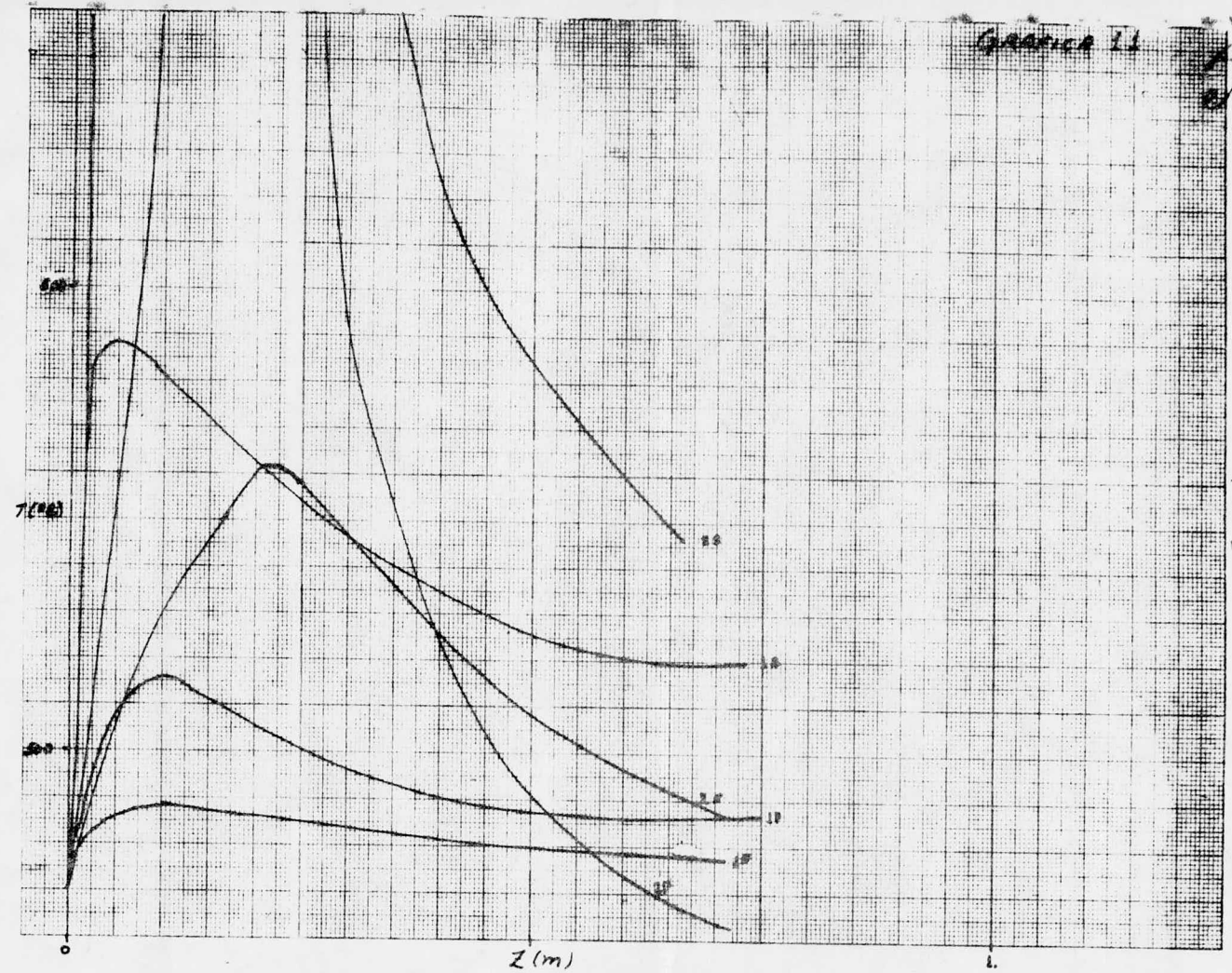
TABLA III.5

				MODELO PSEUDO-ENTR. UNIDIN. A 0.570.			PUNTO CALIENTE DISTANCIA AL PUNTO CALIENTE (GRADOS CALIENTE) (71)				OBSERVACIONES	
GRAFICA	COILINA	DIAMETRO (L2)	REVISOS	SELECCION	Nº DE CALIENTE (at)	TEMP. JUNCH (°C)	GASTO Y UNIDIN' X10 ⁻⁶	PSUDO	HET. SUP.	PSUDO		HET. SUP.
11	1	1	19.1	.5928	.76	487	1.064	514.6	680	10.25	1.05	CON EL CAMBIO DE DIAMETRO EL PUNTO CALIENTE SE DESPLAZA Y AUMENTA SI AUMENTA EL DIAMETRO.
11	2	2	19.1	.3065	.56	490	1.064	**	**	1.12	1.15	CON EL AUMENTO DEL GASTO SE DESPLAZA EL PUNTO CALIENTE Y DISMINUYE ESTE. PARA UN PUNTO CALIENTE BAJO SE TENDRA CON UN DIAMETRO MENOR Y CON UN GASTO ALTO.
12	1	1	36.7	.655	.56	496	2.064	511.7	680.5	1.16	1.15	LA SELECCION AUMENTA AL PUNTO CALIENTE MENOR.
12	2	2	36.7	.4096	.768	647	2.064	**	**	1.26	1.3	
13	1	1	63	.6822	.3764	502	3.564	507	547	1.26	1.15	
13	2	2	63	.701	.217	690	3.564	501.2	**	1.42	1.45	
14	1	1	113	.699	.21	580	6.264	503	532.3	1.35	1.25	
14	2	2	113	.691	.36	626	6.264	?	?	?	?	
15	1	1	179	.705	.202	496	10.264	?	?	?	?	
15	2	2	179	.688	.27	545	10.264	?	?	?	?	

** = SE DESPLAZA (TEMPERATURA ARRIBA DE 650°C)

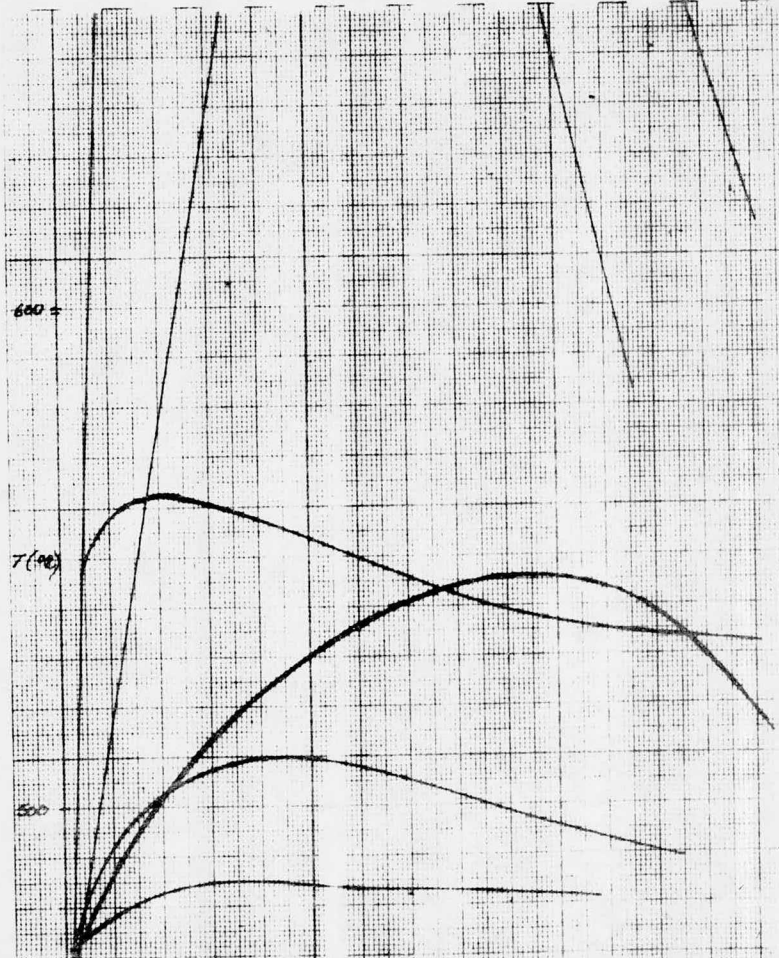
? = A UNA DISTANCIA MAYOR DE 0.570.

Gráfica 11



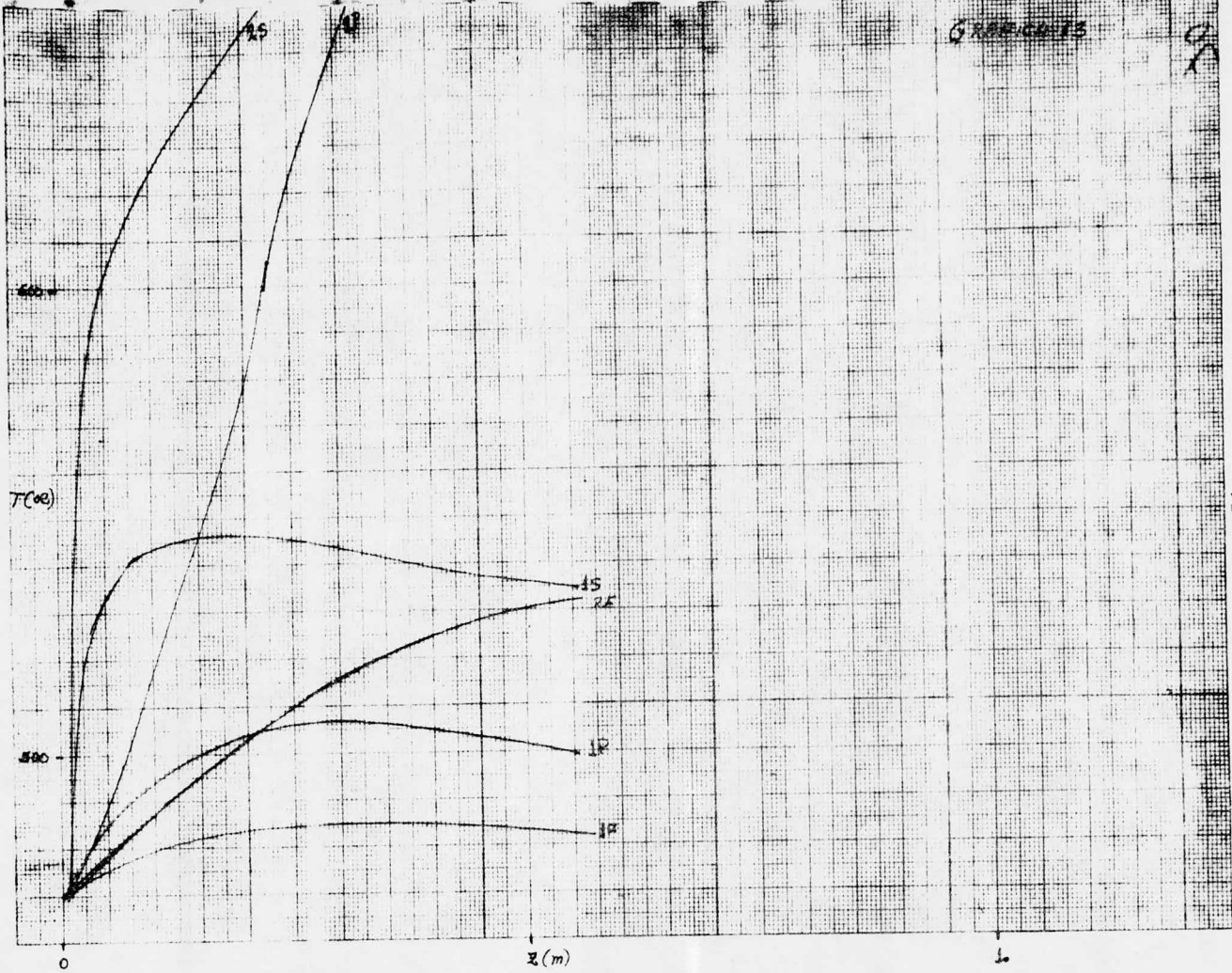
GRAPH 12

A
C

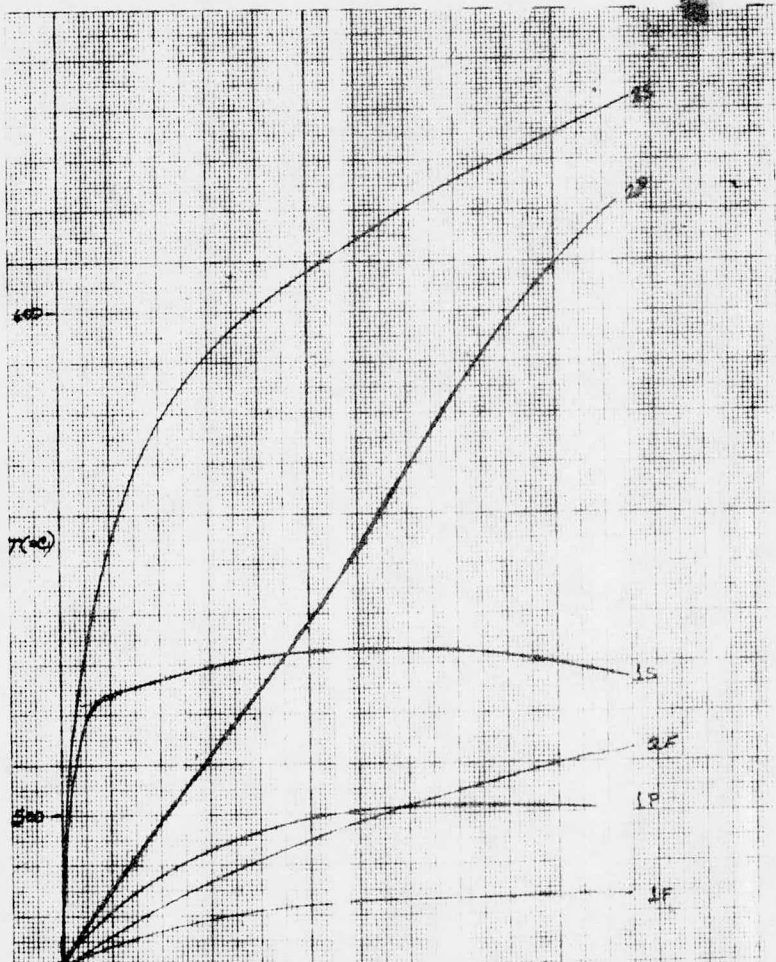


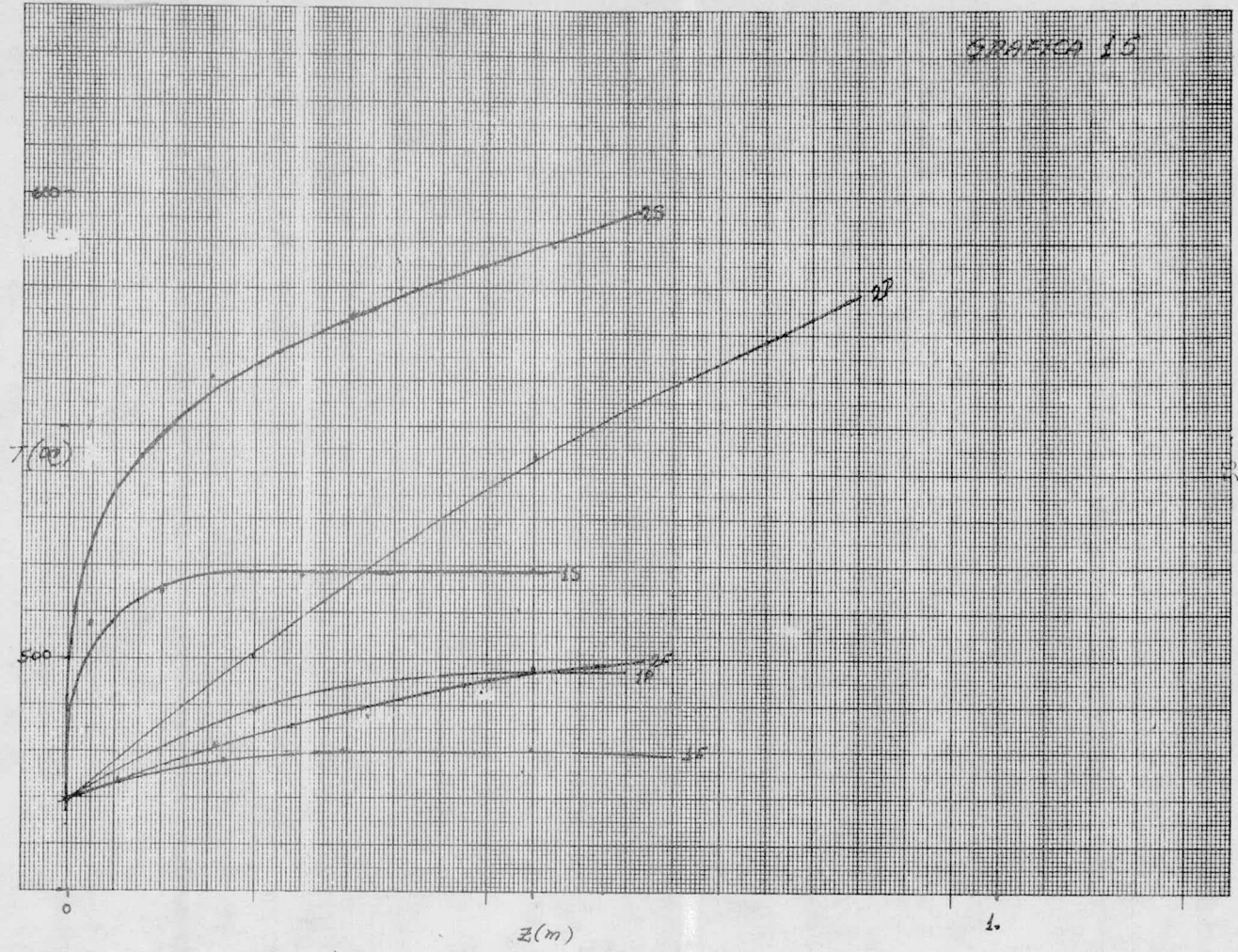
GRAPHS

97



GRAFICA 14





CAPITULO
IV
CONCLUSIONES

Analizando los casos estudiados , cuyos resultados están en el capítulo III. encontrando :

En la sección III.1(predicción del comportamiento) Se nota que en los casos que existen datos experimentales , (ya que los datos de punto caliente no existen datos para todos los casos y la concentración final de reactivos y productos se tienen los datos para el reactor de 2" a .5m y para el de 1" a .82m(datos experimentales(1))).

Para el modelo pseudohomogeneo unidimensional predice el punto caliente y la distancia al punto caliente con un promedio de 2°C ($\pm .4\%$ con respecto a la temperatura experimental en $^{\circ}\text{K}$) y 1.5cm ($\pm 3\%$ con respecto a la distancia final del reactor experimental(piloto)) respectivamente.

Para el modelo heterogeneo unidimensional en el promedio lineal entre los valores en el fluido y en el sólido (ya que suponiendo que es un promedio entre el sólido y el fluido los valores tomados por el termopar) tenemos , que la temperatura promedio(desviación de)del punto caliente y la de la distancia al punto caliente es de 20°C ($\pm 4\%$) y 4cm ($\pm 8\%$) respectivamente.

Con respecto a la predicción de concentraciones tenemos :

Para el modelo pseudohomogeneo unidimensional una diferencia de 1.2% entre los datos experimentales y los calculados en promedio.(finales).

Para el modelo heterogeneo unidimensional en la fase fluida es de 10% entre los datos experimentales y los calculados para la distancia final del reactor.

Con respecto a la selectividad teórica y la experimental para ninguno de los modelos hay más de 4 % de diferencia para los datos al final del reactor.

Para los resultados de la sección III.2 (Análisis de sensibilidad), resumidos en la tabla III.2 encontramos:

Que cuando se varían los coeficientes de transferencia de calor y masa, multiplicados por un factor FC, calculados por las correlaciones de Wasch y Fromment(3) y las de De Acetis y Thodos(18), se encontró:

Que para una disminución de los coeficientes, hay una variación bastante considerable, en cambio para un aumento del mismo orden los valores del punto caliente no son afectados de una forma equivalente (casi no se nota), por lo que la variación conjunta con respecto a los datos experimentales no expresa ninguna mejoría.

Para los datos de la tabla III.2.A y las gráficas 7 y 7.A se observa que el promedio lineal de temperaturas en el modelo unidimensional heterogéneo puede predecir con buena exactitud el punto caliente, cuando se varían los coeficientes de transferencia de calor aumentándolos y teniendo el de transferencia de masa constante.

Se vuelve a notar que su variación (de los coeficientes de transferencia) es muy importante si son menores, pero para un aumento no corresponde a un aumento proporcional al que ocurre cuando son menores en el mismo porcentaje. Por lo que se concluye de esta sección que las ecuaciones de transferencia de calor y masa están muy cerca del punto óptimo, por las razones ya expuestas.

En la sección III.3 (variación de concentración)

Se nota que el punto caliente no se desplaza, y el punto caliente disminuye conforme disminuye la concentración, de todo esto se nota que una variable de control de gran importancia para impedir la sinterización del catalizador y su desactivación que ocurre entre 600-650 de acuerdo a la evidencia experimental(1).

De acuerdo a la sección III.4 (variación de temperatura del baño y de la temperatura inicial de alimentación,

Se nota claramente que a temperatura de baño constante el punto caliente se desplaza ligeramente hacia la derecha (en forma positiva), cuando baja la temperatura inicial de alimentación, y se nota con toda claridad que a temperatura inicial constante, al bajar la temperatura del baño baja en forma brusca la temperatura del punto caliente.

Por todo lo anterior se nota que con la temperatura del baño se puede controlar de una forma bastante buena el disparo del punto caliente.

De las graficas de la sección III.5 y de la tabla III.5 se observa que un aumento en el diametro provoca (de 1 a 2") un aumento y un desplazamiento positivo en la temperatura y localización del punto caliente.

Con el aumento del gasto se desplaza en forma positiva y disminuye el punto caliente, y se nota además en forma clara el achatamiento del perfil térmico, por lo que se tendrán una longitud grande de lecho con una temperatura alta pero sin desperarse a altos gastos por lo que se nota con suficiente claridad, que una forma de control del reactor será la disminución del diametro (para que aumente el coeficiente global de transferencia de calor) y el aumento del gasto. La selectividad para las condie

ciones de la sección III.5 aumenta según disminuye el punto caliente , como podíamos esperar como conclusión de la tabla III.5 y de las graficas de la sección III.5.

ANEXO

I

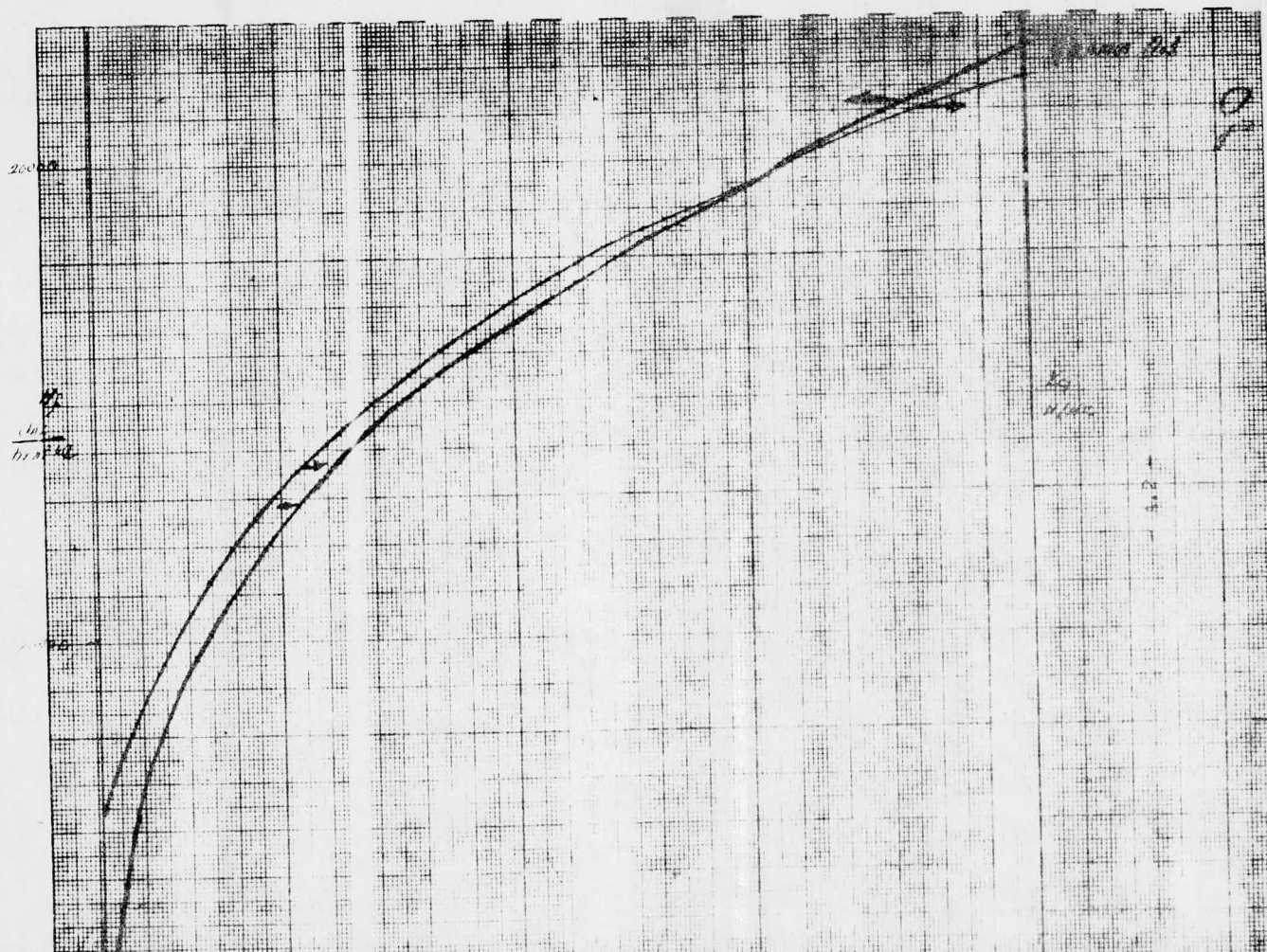
Explicación de las gráficas A.1 a A.3.

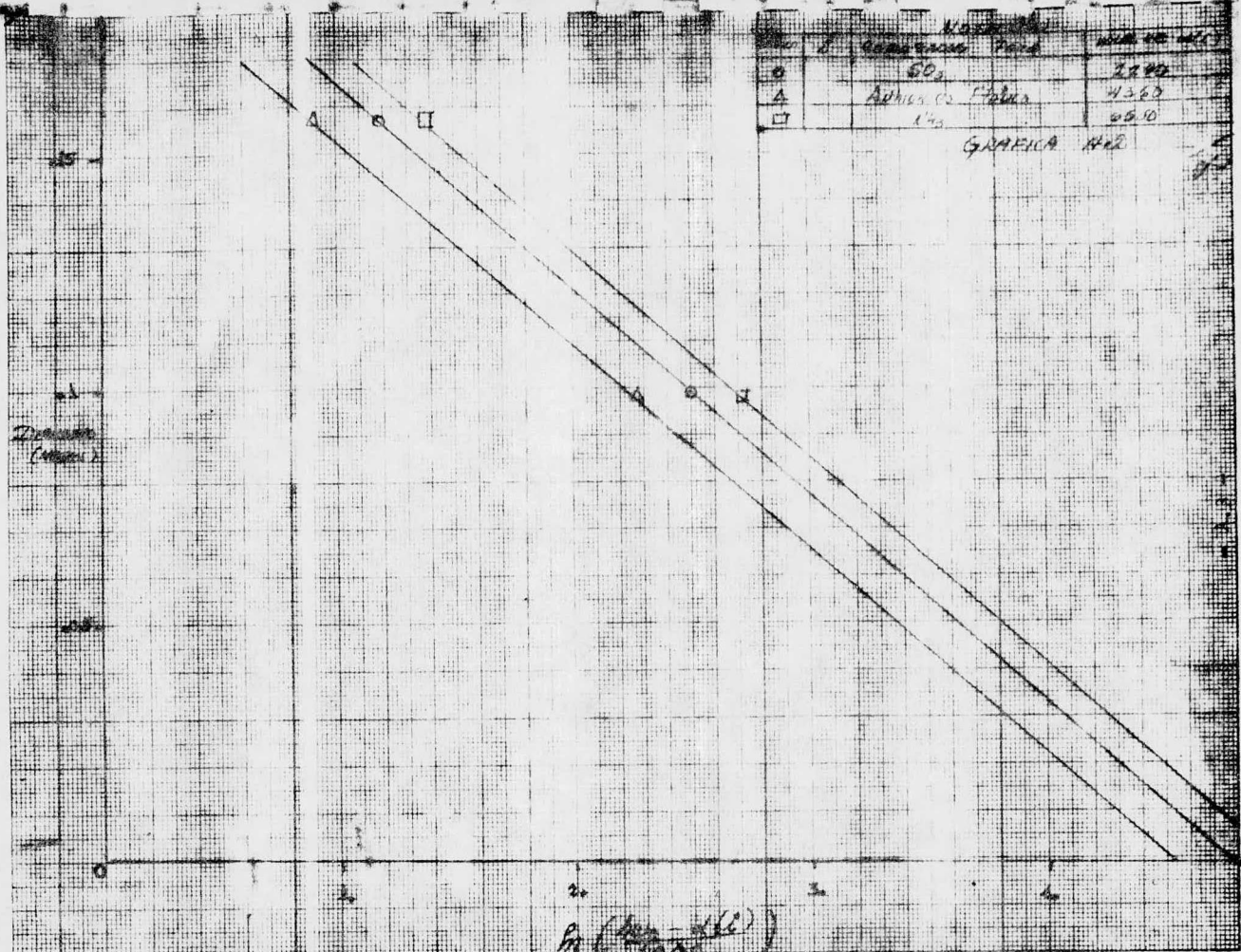
La gráfica A.1 son los valores que toman h_f y K_g para variaciones del número de Reynolds calculados a partir de las ecuaciones de De Aestis y Emdos(12).

La gráfica A.2 son los valores del logaritmo neperiano de $(h_w - \alpha_w)/1000$. Donde α_w es una constante para cada sistema (todo esto fue con el fin de linealizar los datos que se tienen, de forma que obtengamos 3 líneas rectas con la misma pendiente).

La gráfica A.3 son los datos experimentales (representados por puntos) y el coeficiente global de transferencia de calor calculado por ecuaciones de De Wasch y Fromment (3).

La gráfica A.4 nos presenta como los datos para la conductividad térmica del gas vs temperatura, pueden ser representados por una línea recta (los datos fueron obtenidos del Manual del I.Q.(17)).



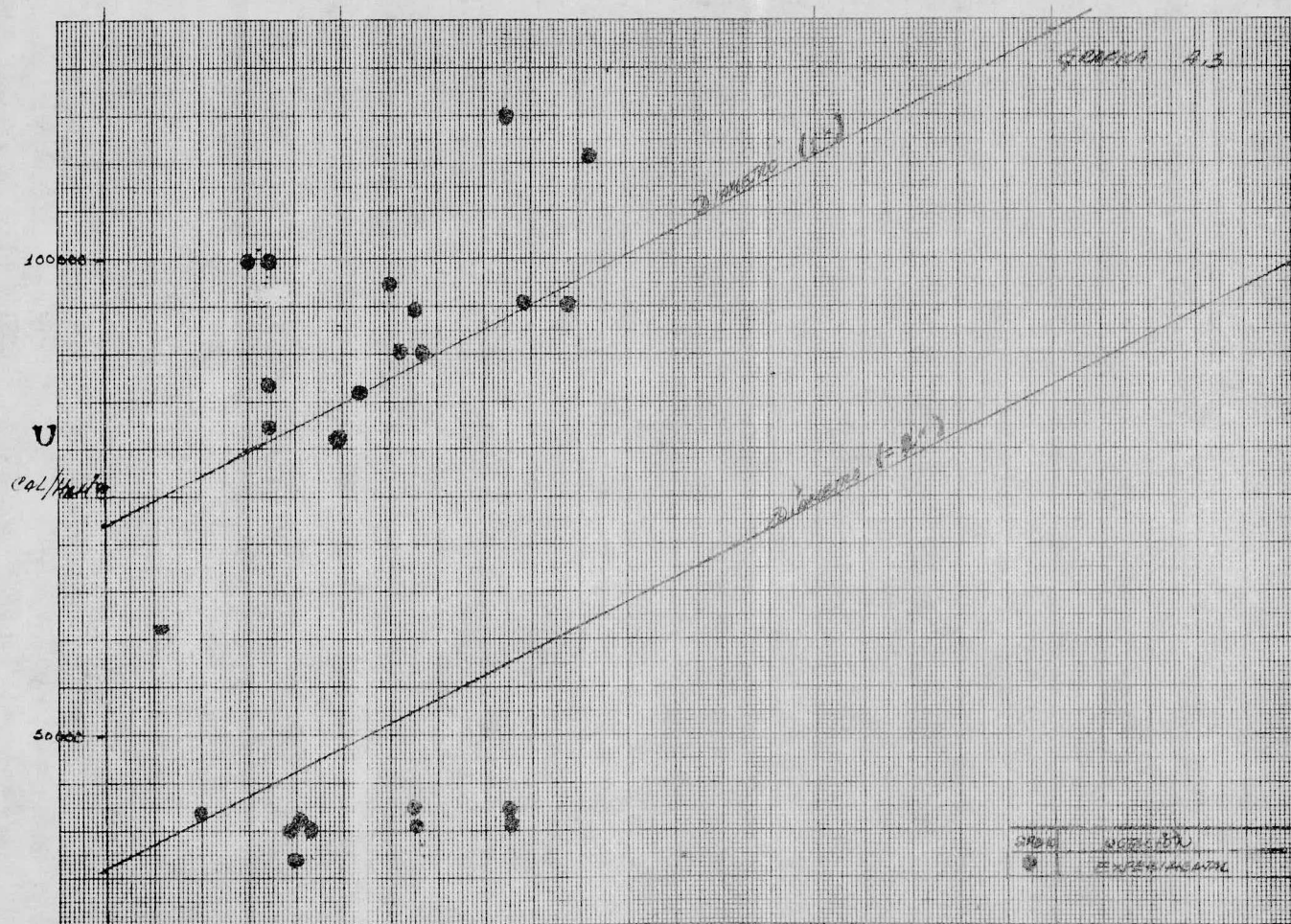


Symbol	Component	Value
○	SO ₂	22.00
△	Admissão de Fósforo	43.63
□	C ₁₄₃	25.10

GRAFICA N.º 2

Densidade
(g/cm³)

Pa (kg/cm²)



TITULO: (COMPLETA)
 NOME: BORGES MARCELO SILVA FERREIRA
 F. de Matr. 2002.11.00117

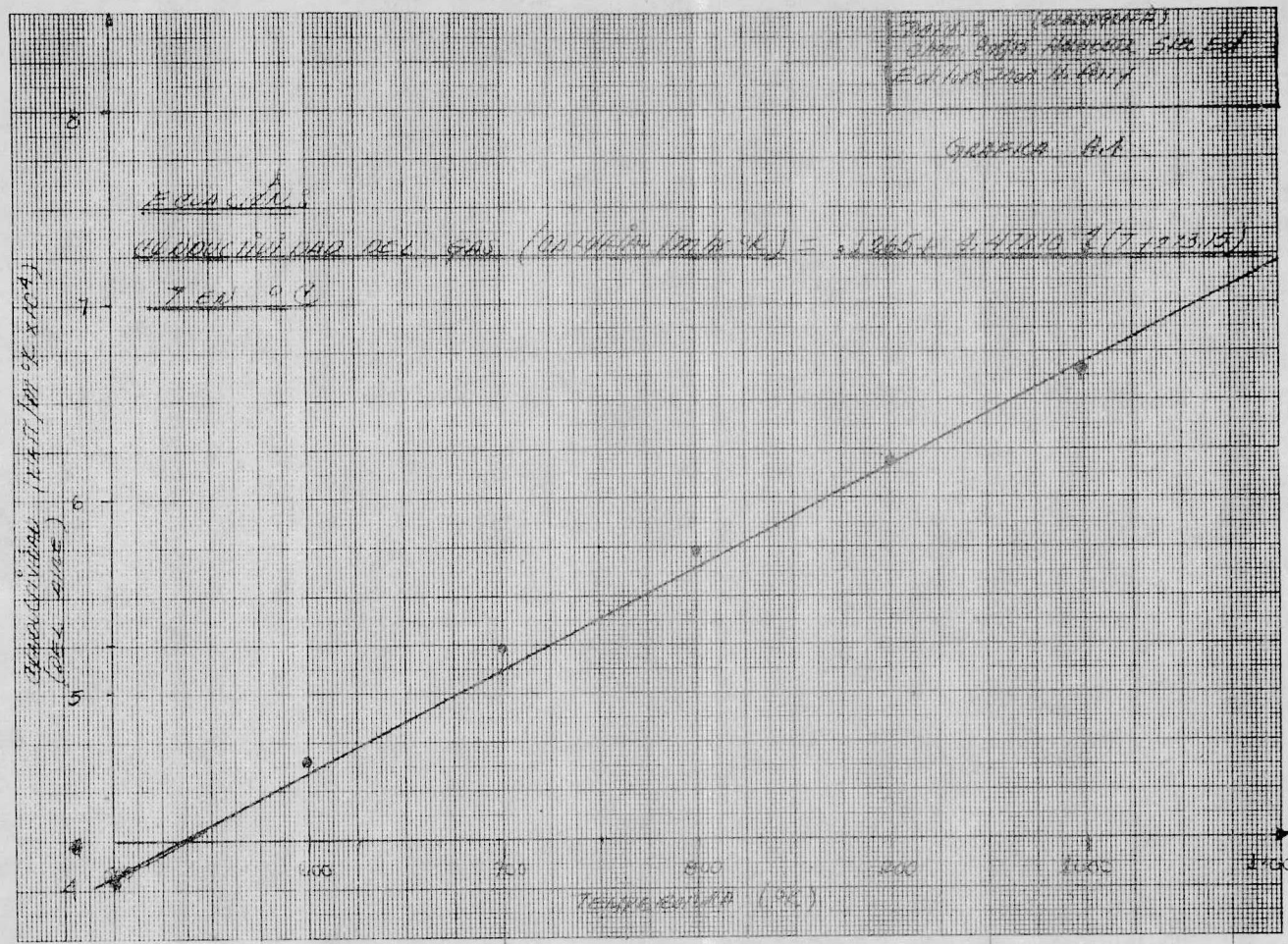
GRÁFICA N.º

EXERCÍCIOS

EQUAÇÃO DO GRÁFICO (CONVERSÃO PARA °K) = $0,0065 + 4,47 \times 10^{-5} (T + 273,15)$

7.º DE 0.º

CONDUCTIVIDADE (WATT/METRO x °K)



L I S T A D O S

MODELO UNIDIMENSIONAL PSEUDOHOMOGENEO

VARIABLE	USO Y UNIDADES
SELE	Calculo de selectividad(adimensional).
TT	Temperatura calculos internos($^{\circ}\text{C}$)
ZZ	Distancia " " (m)
Y	Concentracion para uso del graficador (atm)
ONVC	Conversion para uso del graficador .(adimensional).
ELES	Selectividad para uso del graf. (adimensional)
TX	Temperatura para el graf. ($^{\circ}\text{C}$)
ZX	Distancia para el graf. (m).
XH	Cantidad inicial en atm en lo general de las sustancias que no varían su concentración en todas las corridas.
MI	Peso molecular de las diversas sustancias teniendo como maximo 13, pero puede ser variado.
FC	Variable de aumento ó disminuci3n de los coeficientes de transferencia.

En todos los enunciados de lectura de datos estan en formato libre(se separan los valores por una coma) con excepci3n del enunciado que lee el letrado que especifica el catalizador utilizado (variable LERE) que tiene un formato de 60A1.

Del enunciado numerado con 9000 a 9900 es el cálculo de la presión total y del peso molecular medio, PT y M respectivamente.

el primer valor en la llamada de la subrutina MILES en 9700 es el límite de convergencia, estando este en ° C. De la 10100 a la 10800 es el cálculo de cada una de las sustancias del sistema(X) en atm. con los coeficientes de variación X1, X2, X3.

De la 11300 a la 11600 es el cálculo de las variables ZP y TP para que el programa lo grafique más adelante, correspondiendo estos valores a un pequeño intervalo inicial (para los primeros n valores grafica n/5 valores).

El formato 15 debe cambiarse para el caso(17300-17900).

Desde la 24100 - 25000 deben variarse las ecuaciones según el caso. (subrutina ANTARS)

Para la subrutina GUMP deben variarse los formatos 5530-5534(5600-5604), para que este escrito lo deseado en las graficas, correspondiendo estos al eje vertical., para el eje horizontal deben variarse de la 58800-60500. escribiendo los letreros del caso.

FILE 1=DATOS,UNIT=DISK,RECORD=14,BLOCKING=30 0000630
 FILE 6=SAL,UNIT=PRINTER 0000040
 FILE 7=SAL,UNIT=REMOTE 0000050

DIMENSION SELE(5,500),TT(5,500),ZZ(5,500),CONV(500),SELEC(500),X(2 00000600
 10,500),Z(500),T(500),ZI(1000),TI(1000) 00000700
 DIMENSION LEXTRA(100) 00000800
 DIMENSION Y(140,20),ONVC(140,20),ELES(140,20),TX(140,20),ZX(140,20 00000900
),CELES(140,20),XH(10,10),MI(13),CC(10,10) 00001000
 DIMENSION TP(140,20),ZP(140,20),CON(140,20) 00001100
 REAL M,NT 00001200
 READ(5,/)FC 00001300

C NOTACION DE LAS VARIABLES UTILIZADAS (A INTRODUCIR YA SEA EN EL READ 00001400
 O COMO DATA) 00001500
 C PRIMER DATA VALORES DE LAS CONSTANTES PREEXPONENCIALES (A1,A2,A3), (E1, 00001600
 E2,E3)= ENERGIA DE ACTIVACION EN CAL/MOL;(H1,I,H3) = ENTALPIA DE CADA 00001700
 C REACCION EN CAL/(MOL CONVERTIDA); 00001800
 C DATA H1,H2,H3,-328672,-186303,-514975./ 00001900
 C SEGURO DATA MI Y PESOS MOLECULARES EN EL SIGUIENTE ORDEN:1) BENCENO,2 00002000
 C) ANHIDRIDO MALEICO,3) MONOXIDO DE CARBONO,4) DIOXIDO DE CARBONO,5) AGUA 00002100
 C ,6) NITROGENO,8) OXIGENO 00002200
 C DATA (MI(I),I=1,7)/78,98,28,44,18,28,32/ 00002300
 C TERCER DATA VALORES INICIALES (GENERALES POSIBLES), DIAMETRO DE PARTIC 00002400
 C ULA EN METROS(OP);PTIN = PRESION TOTAL INICIAL EN ATMOSFERAS 00002500
 C DATA (XH(1,I),I=2,7),DP,PTIN/6,0,0,0,0,0,7,78,21,00238,1./ 00002600
 C NOMENCLATURA DEL PROGRAMA Y LA PRIMERA SUBROTINA 00002700
 C VIS = VISCOSIDAD EN GRAMOS/(HORA*METRO) 00002800
 C GS = MASA VELOCIDAD EN GRAMOS/(HORA*METRO CUADRADO) 00002900
 C DP = DIAMETRO DE LAS PARTICULAS EN METROS 00003000
 C U = COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR GLOBAL EN CAL/(HR*METRO CUA 00003100
 C CUADRADO * GRADO CELSIUS) 00003200
 C RADIO = RADIO EN METROS (DEL TUBO O REACTOR) 00003300
 C ROB = DENSIDAD DEL LECHO CATALITICO EN GRAMOS DE CATALIZADOR/(METROS3 00003400
 C RUB = DENSIDAD DEL FLUIDO EN GRAMOS MOL/(METRO CUBICO) 00003500
 C PT = PRESION TOTAL EN ATMOSFERAS 00003600
 C X1,X2,X3 = CAMBIO DE PRESION PARCIAL EN REAC (1,2,3) EN ATMOSFERAS 00003700
 C DA = CAMBIO ENTALPICO EN LA REACCION (DEBIDO A) EN CAL/MOL 00003800
 C REACCION 1 DE BENCENO A ANHIDRIDO MALEICO 00003900
 C REACCION 2 DE ANHIDRIDO MALEICO A OXIDOS DE CARBONO. 00004000
 C REACCION 3 DE BENCENO A OXIDOS DE CARBONO 00004100
 READ(1,/) DZ,JN,ZH,INOP,TRAZA 00004200
 REAL 9875 00004300
 READ(1,/)RJA,POROS,IP 00004400
 C POROS= POROSIDAD 00004500
 C RJA= DENSIDAD DEL CATALIZADOR DE FORMA COMPACTA GRAMOS/(METRO CUBICO) 00004600
 C IP=PG*(1-POROS) 00004700
 C ZI = DISTANCIA MAXIMA CALCULADA EN METROS 00004800
 C UA = CONSTANTE UNIVERSAL DEL ESTADO GASEOSO = 1.0878 CALORIAS/(MOL*G.K) 00004900
 C DZ = INCREMENTO DE LA DISTANCIA EN METROS 00005000
 C JN = NUMERO DE INTERACCIONES EXTERNAS DE MASA DA QUE 140 SEA MAYOR QUE : 00005100
 C ZI/(DZ*JN) Y ADEMÁS CUENTEN COMO MAXIMO 10 - 00005200
 C DATA SELECC(1,/) 00005300
 C TM = TEMPERATURA DE PART. EN GRADOS CELSIUS. 00005400

```

C RE = NUMBER OF REYNOLDS
25 CONTINUE
I20=1
READ(1,/) A1,A2,A3,E1,E2,E3
READ(1,/) A4,A5,E4,E5,T2
READ(1,542)(LETRA(I),I=1,60)
WRITE(6,542)(LETRA(I),I=1,60)
WRITE(6,52) A1,A2,A3,C1,E2,E3,A4,A5,E4,E5,T2
DO 35 I=2,5
35 X(I,1)=XH(I,1)
CONTINUE
WRITE(6,17)
READ(1,/) GS,X(1,1),U,TW,X(8,1),XMAS,RADIO
SELECP=1.
X(7,1)=XH(7,1)+3*XMAS/4.
X(6,1)=XH(6,1)+XMAS/4.
M=0.
DO 36 I=1,7
36 M=M+X(I,1)*MI(I)/PTIH
DISPER=0.
DIS=0.
WRITE(6,11) RADIO,DP,PORUS,X(8,1),TW
WRITE(6,8)
WRITE(6,15)
WRITE(6,22)
T(1)=X(8,1)
IF(MO.EQ.0) GO TO 39
10 DO 1 I=1,8
1 X(I+10,1)=X(I,L+1)
ZI(1)=Z(L+1)
L=L+1
2 G=GS/H
PT=0.
M=0.
DO 5 I=11,17
5 PI=X(I,J)+DT
N=N+X(I,J)*MI(I-10)
M=M/PT
XI1=X(11,J)
XI2=X(12,J)
XI3=X(18,J)
CALL ANTARS(.00001,25,S1,02,S3,DT,XI1,XI2,XI3,GS
1 X1,X2,X3,PT,N,A1,A2,A3,E1,E2,E3,H1,H2,H3,G,C1,U,CP
1 ,ROB,TN,D2,PTIH,R,RADIO,RE,DE,A4,A5,E4,E5,T2,EC
)
ZI(J+1)=ZI(J)+DZ
X(18,J+1)=S3
X(11,J+1)=X(11,J)-(X1+X3)
X(12,J+1)=X(12,J)+X1-X2
X(13,J+1)=X(13,J)+X1+2*X2+3*X3
X(14,J+1)=X(14,J)+X1+2*X2+3*X3
X(15,J+1)=X(15,J)+2*X1+X2+3*X3
X(16,J+1)=X(16,J)-4*X1-2*X2-6*X3
X(17,J+1)=X(17,J)
1J=10-#
IF(L.GT.(S0)) GO TO 310
IF(IU.LE.0) GO TO 311
GO TO 310
511 LE=LE+1
TP(LE,1)=X(18,I+1)
0000551
0000560
0000570
0000580
0000590
0000600
0000610
0000620
0000630
0000640
0000650
0000660
0000670
0000680
0000690
0000700
0000710
0000720
0000730
0000740
0000750
0000760
0000770
0000780
0000790
0000800
0000810
0000820
0000830
0000840
0000850
0000860
0000870
0000880
0000890
0000900
0000910
0000920
0000930
0000940
0000950
0000960
0000970
0000980
0000990
0010000
0010010
0010020
0010030
0010040
0010050
0010060
0010070
0010080
0010090
0010100
0010110
0010120
0010130
0010140

```

```

310 ZP(LE,1)=ZI(J+1)
      J=5
      CONTINUE
      IF((X1+X3).EQ.0.) X1=-X3+.000001
      SELECT=(X1-X2)/(X1+X3)
      SELEM=SELEM+SLELCT
      MAS=MAS+1
      SLELCT=SELEM/MAS
      DISPER=DISPLR+DT**2
      DISPAR=SQRT(DISPER)/MAS
      DIS=DIS+DT
      IF(J.EQ.JM) GO TO 4
      IF(SI.LT.J.) GO TO 4
      GO TO 2
4     DO 13 I=1,8
13    X(I,L+1)=X(I+10,J+1)
      Z(L+1)=ZI(J+1)
      SELLC(L+1)=SELECT
      SELLC(1,L+1)=X(2,L+1)/X(1,1)
      SELLC(2,L+1)=1.-SELLC(1,L+1)
      T(L+1)=X(18,J+1)
      TT(1,L+1)=X(18,L+1)
      ZZ(1,L+1)=ZI(J+1)
      CONV(L+1)=1.-X(1,L+1)/X(1,1)
      IF((X(1,1)-X(1,L+1)).EQ.0) GO TO 495
      SELECP=(X(2,L+1)-X(2,1))/X(1,1)-X(1,L+1)
      GO TO 39
495  SELECR=1.
39   JC=JC+1
130  CONTINUE
      MO=MO+1
      DO 38 I=1,8
38   ZX(MO,1)=Z(L+1)
      TX(MO,1)=X(8,L+1)
      Y(MO,1)=X(I,L+1)
      ELES(MO,1)=SELECP
      CONV(MO,1)=CONV(L+1)
      WRITE(6,3) TX(MO,1),ZX(MO,1),Y(MO,1),Y(MO,2),Y(MO,3),SELECT
151  ICON(MO,1),SELECP
      JC=0
      CONTINUE
      IF(Z(L+1).GE.Z1) GO TO 6
      IF(SI.LT.D.) GO TO 6
      J=0
      GO TO 10
3     FORMAT(IH,13("-"),2(,"1",2(13X,"1"),4(,"1",14X,2(13X,"1")))
9     FORMAT(1,2(12,0,"1"),1,7(13(,"1"),1))
14    FORMAT(" RADIU = ",F10.8," METROS  DIAMETRO DE PARTICULAS = ",F10
1.8," METROS  PAROSIDAD = ",F10.8/" TEMPERATURA INICIAL = ",F10.5
2.," GRADOS CELSIUS  TEMPERATURA DEL BANDO = ",F10.5," GRADOS CELSIU
38"/)
12   FORMAT(" VALORES DE LOS COEFICIENTES PREEXPONENCIALES PARA TE
16  IMPERATURAS SUPERIORES A T2 "/3(" VALORES DE PREEXPONENCIALES = "
21E12.5 /), " CALORIAS DE ACTIVACION EN CAL/MOL (T>T2) "/3(" F
3.," ERGIA DE ACTIVACION = ",1PE12.5/), " VALORES PARA TEMPERATURA
48 T1E12.5 A T2 /2(" VALOR PREEXPONENCIAL = ",1PE12.5/), 2(" CIE
6.," RIAS DE ACTIVACION = ",1PE12.5/), " TEMPERATURA 2 = ",F12.5,"
14  GRADOS CELSIUS /)
      FORMAT( " NUMERO DE REYNOLDS = ",F12.5," COEFICIENTE GLOBAL DE T
      TRANSFERENCIA DE CALOR = ",E12.5," CALORIAS/(MOL*ME*M**2) "/"

```

```

0001150
0001150
0001170
0001180
0001190
0001200
0001210
0001220
0001230
0001240
0001250
0001260
0001270
0001280
0001290
0001300
0001310
0001320
0001330
0001340
0001350
0001360
0001370
0001380
0001390
0001400
0001410
0001420
0001430
0001440
0001450
0001460
0001470
0001480
0001490
0001500
0001510
0001520
0001530
0001540
0001550
0001560
0001570
0001580
0001590
0001600
0001610
0001620
0001630
0001640
0001650
0001660
0001670
0001680
0001690
0001700
0001710
0001720
0001730
0001740

```

```

2" MASA VELOCIDAD = ",E12.5," MOLES/(MP*N**2)
15 1 FORMAT( ' TEMPERATURA I DISTANCIA I PRESIONES PARCIALES
1 (ATM) I TASA DE TRANSFORMACION I SELECTIVIDAD : % I C
1 PADOS C I METROS I BENCENO I ANUMAECTICO I DIOXIDO DE CI
17 3 ANH.MALEICO I GLOBAL I MEDIA I )
1 FORMAT(IX,113(" *")/," *",111X," *"/," *",35X," MODELO UNIDIMENSIONAL
22 1 PSEUDOHOMOGENEO " ,35X," *"/," *",111X," *"/IX,113(" *")/)
80 1 FORMAT(IX,113(" -")/," ( / , I , 8(13X,1" ) )
542 6 FORMAT(IGAL)
CONTINUE
WRITE(6,80)
IN=L+1
IF(MAS.EQ.0) MAS=1
DAS=DIS/MAS
WRITE(6,14)RE,U,G
WRITE(6,7) " ERROR DISPERSIVO MEDIO = ",DISPARI," GRADOS CELSIUS"
WRITE(6,7) " ERROR SUMATORIO TOTAL = ",DIS," GRADOS CELSIUS ", "FN = "
1 MAS, " PASOS DE INTEGRACION EXTERNA , CON ERROR SUMATORIO MEDIO = "
2 " ,DAS," GRADOS CELSIUS"
CALL GCMP(TP,ZP,1,LE,5)
CALL GCMP(Y,ZX,5,NO,4)
CALL GCMP(IX,ZX,1,NO,5)
CALL GCMP(ELES,CON,1,NO,7)
SI=0
SELECT=0
NO=0
MAS=0.
L=0
SELEN=0
M26=H26+1
LE=0
IF((M26.GT.4) GO TO 27
GO TO 29
GO TO 35
CONTINUE
STOP
END
0001750
0001760
0001770
0001780
0001790
0001800
0001810
0001820
0001830
0001840
0001850
0001860
0001870
0001880
0001890
0001900
0001910
0001920
0001930
0001940
0001950
0001960
0001970
0001980
0001990
0002000
0002010
0002020
0002030
0002040
0002050
0002060
0002070
0002080
0002090
0002100
0002110
0002120

```

```

SUBROUTINE ANTARS(E,IM,S1,G2,G3,DS,XI1,XI2,XI3,GS
1  ,X1,X2,X3,PI,M,A1,A2,A3,L1,E2,E3,M1,H2,H3,G,GI,U,CP
1  ,B,TW,UZ,PT,IN,R,RADIO,RE,DP,A4,A5,E4,E5,T2,FC
REAL D,PI
DIMENSION DT(240),X(5,200),XI(100,100),EI(200)
DATA UA,UB,UC,UD,UE,UF,VISA,VISR/5.58,1207
C VISCOSIDAD CALCULADA POR METODO DEL MAQUIL CRANE
VIS=VISA-(X(3,1)+273.15)**1.5)/(X(3,1)+273.15+VISR)
RE=DP*GS/VIS
C U CALCULADA POR METODO DE WASHCI Y FROMMENT
IF(RADIO.EQ..0254) UO=1000.*EXP(3.46)+4360
IF(RADIO.EQ..0127) UG=1000*EXP(4.26)+4360
U=UO+.5924*RE/DP
U=U*FC
C DENSIDAD DEL FLUIDO CALCULADA POR LA FORMULA DE GASES IDEALES
POF=PI7*(R.2958-D*(X(3,1)+273.15))
C CALCULO DEL CP TOMANDOLO COMO EL DEL AIRE(CP GLOBAL)
DATA CPA,CPB, CPC,CPD/6.713,4.697E-4,1.147E-6,-4.696E-10/
CPT=X(3,1)+273.15
CP=CPA+CPB*CPT+CPC*CPT**2+CPD*CPT**3
A=RUB*PT*DZ/G
W=A
XBENCE=XI1
XAMMAL=X12
X(3,1)=X13
C I
8 CONTINUE
L=0
X2=A2*EXP(-E2/(R*(X(3,1)+273.15)))**W*(XAMMAL+XI2 )/2
IF(X(3,1).LT.T2) GO TO 14
X1=A1*EXP(-E1/(R*(X(3,1)+273.15)))**A*(XBENCE+X11 )/2
X3=A3*EXP(-E3/(R*(X(3,1)+273.15)))**A*(XBENCE+X11 )/2
GO TO 7
14 X1=A4*EXP(-E4/(R*(X(3,1)+273.15)))**A*(XBENCE+X11)/2.
7 X3=A5*EXP(-E5/(R*(X(3,1)+273.15)))**A*(XBENCE+X11)/2.
XBENCE=X11-X1-X3
XAMMAL=X12+X1-X2
IF(XBENCE.LT.0.)GO TO 9
IF(XAMMAL.LT.0.)GO TO 12
9 GO TO 12
CONTINUE
X1=X11*A1/(A1+A3)
X3=X11*A3/(A1+A3)
L=L+1
IF(L.GT.10) GO TO 2
12 XP=X1+X12
XAMMAL=X12-X2+X1
L=L+1
2 CONTINUE
X(2,1)=X12+X1-X2
X(1,1)=X11-X1-X3
11 DH=(H1+X1+H2-X2+H3+X3)/PT
DT(I)=-DH/CP*(I2-X(3,1))+2*U.DZ/(S+RAD(G-CP))
IF(XPS(XI3+DT(I)-X(3,1)).GT.E) GO TO 13
X(3,1+1)=(X(3,1)+DT(I)+X(3,1))/2.
IF(1.LP.IN) GO TO 15
15 IMAX=I

```

```

0002130
0002140
0002150
0002160
0002170
0002180
0002190
0002200
0002210
0002220
0002230
0002240
0002250
0002260
0002270
0002280
0002290
0002300
0002310
0002320
0002330
0002340
0002350
0002360
0002370
0002380
0002390
0002400
0002410
0002420
0002430
0002440
0002450
0002460
0002470
0002480
0002490
0002500
0002510
0002520
0002530
0002540
0002550
0002560
0002570
0002580
0002590
0002600
0002610
0002620
0002630
0002640
0002650
0002660
0002670
0002680
0002690
0002700
0002710

```



```

SUBROUTINE COMP(Z633,Z63,NF,NP,IK) 0002870
DIMENSION NPUNTO(40) 0002880
DIMENSION XG(140,20),Y6(140,20),Y(140),X(140) 0002890
DIMENSION A(140,140),COLUM(140),RENGLO(140),K2(140, 0002900
1140) 0002910
DIMENSION XX(140),YY(140),X1(140),Y1(140) 0002920
COMMON MASTER(50,10) 0002930
COMMON TODOS 0002940
EQUIVALENCE (RENG,REN) 0002950
REAL MAXX1,MAXY1 0002960
REAL MAXX,MAXY,SUP,RENG,COL,SU 0002970
INTEGER RENG1,COL1 0002980
RENG=25. 0002990
COL=50 0003000
NPUNTO(1)=NP 0003010
PASO=1 0003020
DIMENSION Z63(140,20),Z635(140,20) 0003030
DO 666 K=1,NP 0003040
DO 666 I=1,NP 0003050
XG(K,I)=Z63(K,I) 0003060
YG(K,I)=Z635(K,I) 0003070
6666 X VARIABLE INDEPENDIENTE 0003080
Y VARIABLE DEPENDIENTE 0003090
SUBROUTINE FUNCIO GENERA LOS PUNTOS EN LA GRAFICA O LOS 0003100
SI PASO ES IGUAL A UNO X, Y Y, YA FUERON ALIMENTADOS, NO SE RE 0003110
QUIERE EL USO DE FUNCIO 0003120
RENG MITAD DEL LARGO DE LA GRAFICA(RENGLONES) 0003130
COL MITAD DEL ANCHO DE LA GRAFICA(COLUMNAS) 0003140
L11 PRIMER RENGLON EN LA CUADRICULACION 0003150
L12 DISTANCIAMIENTO DE LOS RENGLONES Y COLUMNAS 0003160
L11 PRIMERA COLUMNA EN LA CUADRICULACION 0003170
D011 GENERA LOS EJES 0003180
BLANK ESPACIOS EN BLANCOS 0003190
NF ASTLP ES UN PUNTO EN LA GRAFICA A 0003200
NP NUMERO DE FUNCIONES A GRAFICAR 0003210
LETRER(I,INDICE) LETRER PARA PRODUCIR LOS CARACTERES QUE REPRESENTA 0003220
A CADA CURVA; LETRER(I,NF+1) USADO PARA LETRERO DEL EJE Y; 0003230
LETRER(I,NF+2) LETRERO EJE X 0003240
INDICE =1 0003250
L12=10. 0003260
RENG1=2.*RENG 0003270
COL1=2.*COL 0003280
DO 200 I=1,NF 0003290
IF(PASO.EQ.1) GO TO 1600 0003300
CALL FUNCIO(X,Y, NPUNTO(IND),INDICE) 0003310
CONTINUE 0003320
IF(IND.EQ.1) GO TO 252 0003330
IF(PASO.NE.1) NP=NPUNTO(1) 0003340
200 I=1,NP 0003350
X1(K)=X.(K,I) 0003360
Y1(K)=Y.(K,I) 0003370
DO 200 I=1,NP 0003380
IF(PASO.NE.1) YG(I,140)=X(I) 0003390
IF(PASO.NE.1) YG(I,140)=Y(I) 0003400
DO 201 IND=1,NF 0003410
IF(PASO.NE.1) P=PUNTO(IND) 0003420
DO 201 I=1,NP 0003430
0003440

```


201	IF(XG(I,IND).LT.0.) GO TO 202	0003450
	COL=COL1	0003460
	MEDI01=2	0003470
202	DO 203 I=1,NF	0003480
	IF(PASO.ME.1) NP=.PUNTO(IND)	0003490
	DO 203 J=1,NP	0003500
203	IF(YG(I,IND).LT.0.) GO TO 204	0003510
	RENG=REING1	0003520
	MEDI02=2	0003530
204	CONTINUE	0003540
	K135=1	0003550
	K145=1	0003560
	DO 250 K=1,NF	0003570
	VMINX=ABS(XG(1,K))	0003580
	KMINX=1	0003590
	DO 250 I=1,NP	0003600
	IF(ABS(XG(I,K)).GE.VMINX) GO TO 250	0003610
	VMINX=ABS(XG(I,K))	0003620
	KMINX=I	0003630
250	CONTINUE	0003640
	VMINY=ABS(YG(1,K))	0003650
	KMINY=1	0003660
	DO 251 I=1,NP	0003670
	IF(ABS(YG(I,K)).GE.VMINY) GO TO 251	0003680
	VMINY=ABS(YG(I,K))	0003690
	KMINY=I	0003700
251	CONTINUE	0003710
	IF(K.EQ.1) GO TO 6001	0003720
	GO TO 6002	0003730
6001	VMINX1=VMINX ; KMINX1=KMINX	0003740
	VMINY1=VMINY ; KMINY1=KMINY	0003750
	GO TO 6000	0003760
6002	IF(VMINX.GE.VMINX1) GO TO 6003	0003770
	VMINX1=VMINX ; KMINX1=KMINX	0003780
	K135=I	0003790
6003	IF(VMINY.GE.VMINY1) GO TO 6000	0003800
	VMINY1=VMINY ; KMINY1=KMINY	0003810
	K145=I	0003820
6000	CONTINUE	0003830
	KMINY=KMINY1 ; KMINX=KMINX1	0003840
	VMINX=XG(KMINX,K135)	0003850
	VMINY=YG(KMINY,K145)	0003860
	DO 253 J=1,NF	0003870
	DO 172 I=1,NP	0003880
	XG(I,J)=XG(I,J)-VMINX	0003890
	YG(I,J)=YG(I,J)-VMINY	0003900
253	CONTINUE	0003910
172	IF(PASO.ME.1) NP=.PUNTO(INDICE)	0003920
	GCT=IH+	0003930
	DDT=IH+	0003940
	IF(INDICE.EQ.1) ASTER=1N+	0003950
	IF(INDICE.EQ.2) ASTER=1N-	0003960
	IF(INDICE.EQ.3) ASTER=1N+	0003970
	IF(INDICE.EQ.4) ASTER=1N-	0003980
	IF(INDICE.EQ.5) ASTER=1N-	0003990
	IF(INDICE.EQ.6) ASTER=1H>	0004000
	IF(INDICE.EQ.7) ASTER=1H1	0004010
	IF(INDICE.EQ.8) ASTER=1H-	0004020
	IF(INDICE.EQ.9) ASTER=1H?	0004030
	IF(INDICE.EQ.10) ASTER=143	0004040

```

IO=IK
IF (IK.EQ.10) I#=#
IF (IK.EQ.15) I#=#
IF (IK.EQ.12) I#=#
FORMAT(99A1)
BLANK=11.
DO 205 I=1, NP
X(I)=XG(I, INDI)
Y(I)=YG(I, INDI)
IF (INDI.NE.1) GO TO 91
RENG1=RENG1+1.
COL1=COL1+1.
DO 2 I=1, RENGL
DO 2 J=1, COL1
A(I, J)=CLANK
CONTINUE
DO 167 I=1, RENGL
A(I, 1)=OUT1
DO 168 J=1, COL1
A(I, J)=OUT1
IF (L12.EQ.0) GO TO 91
L111=RENG1/L12
L11=RENG1-L111*L12+L12
L1=COL1/L12
L11=COL1-L11*L12+L12
DO 190 J=1, COL1
DO 190 I=L11, RENGL, L12
A(I, J)=IN
DO 191 I=1, RENGL
DO 191 J=L11, COL1, L12
A(I, J)=IN
DO 189 K=1, NP
MAXX=0. MAXY=0.
DO 3 I=1, NP
IF (ABS(YG(I, K)).LE.MAXY) GO TO 3
MAXY=ABS(YG(I, K))
CONTINUE
DO 5 I=1, NP
IF (ABS(XG(I, K)).LE.MAXX) GO TO 5
MAXX=ABS(XG(I, K))
CONTINUE
IF (K.EQ.1) MAXY1=MAXY
IF (K.EQ.1) MAXX1=MAXX
IF (K.EQ.1) GO TO 180
IF (MAXX.GT.MAXX1) MAXX1=MAXX
IF (MAXY.GT.MAXY1) MAXY1=MAXY
MAXX=MAXX1
MAXY=MAXY1
GO 6 I=1, NP
Y(I)=(Y(I)/MAXY+1.)
X(I)=(X(I)/MAXX+1.)
CONTINUE
DO 7 I=1, NP
IC=COL-X(I)+1.5
IF (RENG1.EQ.2) IC=IC-0.15
IF (RENG1.EQ.1) IC=IC+1.5
IF (COL1.EQ.2) IC=IC-2.0
COLUMN(I)=IC
RENGLO(I)=IN
CONTINUE

```

```

0004050
0004060
0004070
0004080
0004090
0004100
0004110
0004120
0004130
0004140
0004150
0004160
0004170
0004180
0004190
0004200
0004210
0004220
0004230
0004240
0004250
0004260
0004270
0004280
0004290
0004300
0004310
0004320
0004330
0004340
0004350
0004360
0004370
0004380
0004390
0004400
0004410
0004420
0004430
0004440
0004450
0004460
0004470
0004480
0004490
0004500
0004510
0004520
0004530
0004540
0004550
0004560
0004570
0004580
0004590
0004600
0004610
0004620
0004630
0004640

```

	K=1	0004650
103	DO 100 I=1, NP	0004660
	IF (I.LE.K) GO TO 100	0004670
	IF (COLUMN(K).EQ.COLUMN(I)) GO TO 101	0004680
	GO TO 100	0004690
101	IF (X(I).NE.0..AND.ABS(X(K)-X(I)).LE.0.005*X(I)) GO TO 100	0004700
	IF (X(K).NE.0..AND.ABS(X(K)-X(I)).LE.0.005*X(K)) GO TO 100	0004710
	IF (TODOS.EQ.2HSI) GO TO 100	0004720
	DO 901 IINK=1,K	0004730
901	IF (ABS(COLUMN(IINK)-COLUMN(K)).GE.1) GO TO 100	0004740
	ERROR1=(COL*X(I)+1.5-COLUMN(I))**2	0004750
	ERROR2=(COL*X(K)-COL*X(K)-1.5)**2	0004760
	IF (ERROR1.LT.ERROR2) GO TO 102	0004770
	COLUMN(K)=0.	0004780
	GO TO 100	0004790
102	COLUMN(I)=0.	0004800
100	CONTINUE	0004810
	IF (K.EQ.NP) GO TO 104	0004820
	K=K+1	0004830
	GO TO 103	0004840
104	K=1	0004850
109	DO 105 I=1, NP	0004860
	IF (I.LE.K) GO TO 105	0004870
	IF (RENGLO(K).EQ.RENGLO(I)) GO TO 106	0004880
	GO TO 105	0004890
106	IF (Y(K).NE.0..AND.ABS(Y(K)-Y(I)).LE.0.005*Y(K)) GO TO 105	0004900
	IF (Y(I).NE.0..AND.ABS(Y(K)-Y(I)).LE.0.005*Y(I)) GO TO 105	0004910
	IF (TODOS.EQ.2HSI) GO TO 105	0004920
	DO 902 IINK=1,K	0004930
902	IF (ABS(RENGLO(K)-RENGLO(IINK)).GE.1) GO TO 105	0004940
	ERROR1=(REN*Y(K)+1.5-RENGLO(K))**2	0004950
	ERROR2=(REN*Y(I)+1.5-RENGLO(I))**2	0004960
	IF (ERROR1.LT.ERROR2) GO TO 107	0004970
	RENGLO(K)=0.	0004980
	GO TO 105	0004990
107	RENGLO(I)=0.	0005000
105	CONTINUE	0005010
	IF (K.EQ.NP) GO TO 108	0005020
	K=K+1	0005030
	GO TO 109	0005040
108	DO 110 I=1, NP	0005050
	IC=COLUMN(I)	0005060
	IR=RENGLO(I)	0005070
	IF (COLUMN(I).NE.0.) GO TO 111	0005080
	GO TO 110	0005090
111	IF (RENGLO(I).NE.0.) A(IN, IC)=ASTER	0005100
110	CONTINUE	0005110
	IF (IINK.LT.1) GO TO 502	0005120
	KREN=0.; IINKP=101.	0005130
	DO 20 I=1, NP	0005140
	IF (RENGLO(I).EQ.0) GO TO 20	0005150
	KREN=RENGLO(I)	0005160
	Y(I(KREN))=Y(I)	0005170
	IF (KREN.GT.KREN) N/PEN=KBE	0005180
	IF (KREN.LT.IINKP) Q/MPY=KRE	0005190
20	CONTINUE	0005200
	VNES=0.	0005210
	DO 500 I=1, NP	0005220
	IF (COLUMN(I).EQ.0..OR.RENGLO(I).EQ.0.) GO TO 500	0005230
	IF (COLUMN(I).LE.VNES) GO TO 500	0005240

	VMS=COLUM(I)	0005250C
	KMES=I	0005260C
500	CONTINUE	0005270C
	VMINES=101.	0005280C
	DO 503 I=1,NP	0005290C
	IF(COLUM(I).EQ.0..OR.RENGLO(I).EQ.0.) GO TO 503	0005300C
	IF(COLUM(I).GE.VMINES) GO TO 503	0005310C
	VMINES=COLUM(I)	0005320C
	KMINES=I	0005330C
503	CONTINUE	0005340C
	RANG01=XX(KMES)-XX(KMINES)	0005350C
	RANG02=VMS-VMINES	0005360C
	ESCALA=RANG01/RANG02	0005370C
502	IF(INDICE.EQ.NF) GO TO 171	0005380C
	INDICE=INDICE+1	0005390C
	GO TO 172	0005400C
171	COL=COL1	0005410C
	RENG=RENG1	0005420C
	K25=COLUM(KMINES)	0005430C
	DO 210 I=1,COL	0005440C
	IF((K25-K).LE.0.) GO TO 211	0005450C
	ES=K	0005460C
210	XI(K25-K)=XX(KMINES)-ES*ESCALA	0005470C
211	DO 212 K=1,COL	0005480C
	ES=K	0005490C
	IF((K25+K).GT.COL) GO TO 213	0005500C
212	XI(K25+K)=XX(KMINES)+ES*ESCALA	0005510C
213	CONTINUE	0005520C
	XI(K25)=XX(KMINES)	0005530C
	PRINT 26	0005540C
26	FORMAT(IH1,IH+)	0005550C
	IF(IK.LE.4) PRINT 5530	0005560C
	IF(IK.EQ.5) PRINT 5533	0005570C
	IF(IK.EQ.6) PRINT 5531	0005580C
	IF(IK.EQ.7) PRINT 5534	0005590C
5530	FORMAT("PRESIONES PARCIALES (ATMOSFERAS)")	0005600C
5531	FORMAT("TASA DE TRANSFORMACION")	0005610C
5532	FORMAT("DISTANCIA")	0005620C
5533	FORMAT("TEMPERATURA (GRADOS CELSIUS)")	0005630C
5534	FORMAT("SELECTIVIDAD")	0005640C
	IF(MNKR.LT.RENG1) GO TO 13000	0005650C
	IF(MNKR.GT.1) GO TO 13000	0005660C
13000	UNIDAD=MKREN-MNKR	0005670C
	TESCA=(YI(KRC I)-YI(MI/NP))	0005680C
	TESCA=TESCA/UNIDAD	0005690C
	IF(MNKR.GE.RENG1) GO TO 13002	0005700C
	IF(MNKR.LT.RENG1) II=MNKR+1	0005710C
	DO 13001 I=II,RENG	0005720C
13001	YI(I)=TESCA+YI(I-1)	0005730C
13002	IF(MNKR.GT.1) II=MNKR	0005740C
	IF(MNKR.LO.1) GO TO 13004	0005750C
	DO 13003 I=1,II	0005760C
	YI(I)=MNKR-I	0005770C
13003	YI(I)=YI(MNKR)-TESCA*YI(I)	0005780C
13004	CONTINUE	0005790C
	DO 158 I=1,RENG	0005800C
	IF(YI(RENG-I+1).F.0.) GO TO 300	0005810C
	PRINT 158, YI(RENG-I+1), (A(RENG-I+1,J),J=1,COL)	0005820C
	GO TO 158	0005830C
300	PRINT 168, (A(RENG-I+1, J),J=1,COL)	0005840C

162	FORMAT(15X,115A1)	0005850
158	CONTINUE	0005860
159	FORMAT(610,5,115A1)	0005870
	PRINT 100,(X1(1),I=1,COL,10)	0005880
	IF(IK.LL.8) PRINT /,"	0005890
	TEMPERATURA (GRADOS CELSIUS)"	0005900
	IF(IK.GT.8 AND IK.LT.6) PRINT /,"	0005910
	DISTANCIA (METROS)"	0005920
	IF(IK.EQ.6) PRINT /,"	0005930
	CONVERSION GLOBAL	0005940
	IF(IK.EQ.7) PRINT /,"	0005950
	CONVERSION"	0005960
	IF(CI.EQ.10) GO TO 5538	0005970
	IF(IK.EQ.1 OR IK.EQ.3) PRINT 5536	0005980
	IF(IK.EQ.2 OR IK.EQ.4) PRINT 5536	0005990
	IF(IK.EQ.6) PRINT 5540	0006000
5538	WRITE(6,5539)	0006010
5539	FORMAT("NOTACION"/" BENZENO (* Y &)" /" ANHIDRIDO MALEICO (0006020
	2 Y .)" /" VAPOR DE AGUA (2 Y 3)	0006030
5536	FORMAT(40X,"NOTACION"/" BENZENO (*)" /" ANHIDRIDO MALEICO (R)" /"MO	0006040
	1+ Y X)" /" DIOXIDO DE CARBONO (- Y >)" /" MONOXIDO DE CARBONO (0006050
	INOXIDO DE CARBONO (?)" /" DIOXIDO DE CARBONO (*)" /" VAPOR DE AGUA (0006060
	2-)"	0006070
5540	FORMAT (" ",45X,"NOTACION"/" A ANHIDRIDO MALEICO (*)" /" A OXIDOS D	0006080
	E CARBONO (S)"	0006090
160	FORMAT (6X,11F10.3)	
	PRINT 20	
	RETURN	
	END	

MODELO HETEROGÉNEO UNIDIMENSIONAL

VARIABLE	USO Y UNIDADES
(NO DEFINIDA EN EL LISTADO O EN EL MODELO ANTERIOR)	
XC	Variable de concentración interna (atm)
GS	gasto másico g/ar m ²
G	gasto molar mol/hr m ²
PTIN	presión total inicial (atm)

Hasta la 5700 se tiene el mismo manejo que el modelo anterior , a partir de ahí X3, X4 y X5 son en la fase fluida el equivalente a X1, X2, X3 del modelo anterior , para la fase sólida tenemos X3S, X4S y X5S con los equivalentes en el mismo orden , las concentraciones serán de XC(1 a XC(n-2 , donde XC(n-1 y XC(n) serán la temperatura y para todas las XC las n^os son en fase fluida y las p^os del sólido.

El formato 32 se debe adecuar para cada caso (13200-13700).

En la subrutina CONVER en las ecuaciones para DX , DY y DT deben de adecuarse para el caso.

Para la subrutina INPROP las ecuaciones para RPS y RPY deben adecuarse para el caso. Para la sub. COE/ VAR deben variarse las expresiones que calculan la velocidad de reacción . Y para la S.ETA escribirá la ec. de efectividad para el caso. Por último para la sub. GOMP las mismas consideraciones del modelo anterior.

06700/47700 F O L T P A S M A P I L A T I O N M A R K 2.8.000

FILE 6=SAL,UNIT=PRINTED 0000020
 FILE 1=DATUS,UNIT=DISK,RECCPL=14,RECCPLNG=30 0000030
 FILE 7=SAL,UNIT=RENDTF 0000040

```

REAL KG,M,MI 0000050
DIMENSION TP(140,20),ZP(140,20) 0000060
DIMENSION X(140,20),T(140,20),Z(140,20),COBV(140,20),XH(10,5),XC(2 0000070
10,1500),ZC(5000),SELEC(140,20),TTAN(140,20),PI(10) 0000080
DIMENSION LETRA(100) 0000090
COMMON /A,A2,A3,E1,E2,E3,H1,H2,H3,G,G5,U,RE,H,L,F,SIG1,SIG2,OM1,OM 0000100
12,M,MI,CG,PR,AV,POF,CO,IMAX,RGB,POROS,POA,GZ,WP,OT,RADIO,TH,CP,OH 0000110
2,E,A4,A5,E4,E5,T2,K10,FC 0000120
DATA OM1,OM2,SIG1,SIG2/76,440,3,617,5,27/ 0000130
DATA(MI(1),I=1,7)/78,98,28,44,18,28,32/ 0000140
READ(5,/)FC 0000150

READ(1,/)DZ,JM,ZH,IMAX,E 0000160
READ(1,/)ROA,POROS,DP 0000170
  READ(1,/)A1,A2,A3,C1,L2,E3 0000180
  RGB=POA*(1.-POROS) 0000190
  READ(1,/)A4,A5,E4,E5,T2 0000200
  READ(1,10)(LETRA(L1),LET=1,60) 0000210
  WRITE(6,10)(LETRA(LET),LET=1,60) 0000220
16 FORMAT(60A1) 0000230
  DATA H1,H2,H3,SELEC(1,1),C,TTAN(1,1)/-328672,-106303,-514975,1.,1. 0000240
19875,0./ 0000250
1 DATA(XH(I),I,1)=2,7),PTIH/0.,0.,0.,0.,78,21,1. 0000260
1 READ(1,/)GS,X(1,1),U,TH,X(1,15),XMAS,RADIO 0000280
  J=0 0000290
  L=0 0000300
  LS=0 0000310
  JMP=500 0000320
  AV=3/RADIO 0000330
  CO=PTIH*X(1,1)/(8.205E-5*(X(1,15)+273.15)) 0000340
  XIO=X(1,1) 0000350
  WRITE(6,30) 0000360
  WRITE(6,31)RADIO,POROS,DP,TH,X(1,15) 0000370
  WRITE(6,32) 0000380
  XC(1,1)=X(1,1) 0000390
  DO 2 I=1,4 0000400
2 XC((2*I)+1,1)=XH(I+1,1) 0000410
  XC(13,1)=XH(7,1)+3.*XMAS/4. 0000420
  XC(11,1)=XH(6,1)+XMAS/4. 0000430
  XC(15,1)=X(1,15) 0000440
  DO 3 I=1,8 0000450
3 XC(2*I,1)=XC((2*I)-1,1) 0000460
  IF(L.LC.0) GO TO 6 0000470
4 A=J 0000480
  PI=0. 0000490
  J=J+1 0000500
  GO 5 I=1,7 0000510
5 H=H+XC((1+2)-1,J)*L(1) 0000520
  PI=XC((1+2)-1,J)+PI 0000530
  PI=PI*PI
  
```

	N=1/DT	0000540
	G=C/D	0000550
	ZC(J+1)=XC(J)+DZ	0000560
	CALL CORR(XC, X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8, X9, X10, X11, X12, X13, X14, X15, X16, X17, X18, X19, X20, X21, X22, X23, X24, X25, X26, X27, X28, X29, X30, X31, X32, X33, X34, X35, X36, X37, X38, X39, X40, X41, X42, X43, X44, X45, X46, X47, X48, X49, X50, X51, X52, X53, X54, X55, X56, X57, X58, X59, X60, X61, X62, X63, X64, X65, X66, X67, X68, X69, X70, X71, X72, X73, X74, X75, X76, X77, X78, X79, X80, X81, X82, X83, X84, X85, X86, X87, X88, X89, X90, X91, X92, X93, X94, X95, X96, X97, X98, X99, X100)	0000570
	X1=X4	0000580
	X2=X5	0000590
	X18=X48	0000600
	X3=X3	0000610
	X38=X38	0000620
	X29=X58	0000630
	XC(1, J+1)=XC(1, J)-(X1+X3)	0000640
	XC(2, J+1)=XC(2, J)-(X18+X38)	0000650
	XC(3, J+1)=XC(3, J)+X1-X2	0000660
	XC(4, J+1)=XC(4, J)+X18-X28	0000670
	XC(5, J+1)=XC(5, J)+X1+2*X3+3*X3	0000680
	XC(6, J+1)=XC(6, J)+X18+2*X38+3*X38	0000690
	XC(7, J+1)=XC(7, J)+X1+2*X3+3*X3	0000700
	XC(8, J+1)=XC(8, J)+X18+2*X38+3*X38	0000710
	XC(9, J+1)=XC(9, J)+X1+2*X3+3*X3	0000720
	XC(10, J+1)=XC(10, J)+X18+2*X38+3*X38	0000730
	XC(11, J+1)=XC(11, J)-4*X1-2*X2-6*X3	0000740
	XC(12, J+1)=XC(12, J)-4*X18-2*X28-6*X38	0000750
	XC(13, J+1)=XC(13, J)	0000760
	XC(14, J+1)=XC(14, J)	0000770
	XC(15, J+1)=0	0000780
	XC(16, J+1)=0	0000790
	IF(LS, EQ, 100) GO TO 17	0000800
	JMP=JMP+150	0000810
167	IF(JMP, LE, 300) GO TO 107	0000820
	JMP=0	0000830
	LS=LS+1	0000840
	ZP(LS, 1)=ZC(J+1)	0000850
	ZP(LS, 2)=ZC(J+1)	0000860
	TP(LS, 1)=XC(15, J+1)	0000870
	TP(LS, 2)=XC(16, J+1)	0000880
17	CONTINUE	0000890
	DO 15 L=1, 10	0000900
	IF(XC(L, J+1), LT, 0.) XC(L, J+1)=0.	0000910
15	CONTINUE	0000920
	DESP=DESP+DT	0000930
	DISP=DISP+AUS(DI)	0000940
	IF(S1, LT, 6) GO TO 6	0000950
	IF(ZC(J+1), GE, ZH) GO TO 6	0000960
	IF(J, GE, (J1)) GO TO 6	0000970
	GO TO 4	0000980
6	L=L+1	0000990
	DO 47 I=1, 10	0001000
47	X(L, I)=XC(I, J+1)	0001010
	IF((X1+X3), EQ, 0.) X3=X3+4001	0001020
	ITAN(L, I)=(X1-X2)/(X1+X3)	0001030
	COSY(L, I)=1.-X(L, I)/(X(1, I))	0001040
48	Z(L, I)=ZC(J+1)	0001050
	DO 5 I=1, 7	0001060
	T(L, (I+1)-1)=X(L, I)	0001070
8	T(L, I+2)=X(L, I)	0001080
10	IF(X(1, I), LE, X(L, I)) GO TO 103	0001090
	PAS=PAS+1	0001100
	SEL1=(X(L, 3))/(X(1, 1)-X(L, 1))	0001110
	SEL1C(L, I)=SEL1	0001120
	GO TO 12	0001130


```

123      SLM=7
12      SELEC(L,1)=SELM
1 (L,1),COMV(L,1),SELM
10 14 I=1,10
2(L,1)=Z(L,1)
14 XC(1,1)=X(L,1)
J=0
ZC(1)=Z(L,1)
IF(G1,LT,5) GO TO 13
IF(Z(L,1).GE.L24) GO TO 13
GO TO 4
30 FORMAT(1X,111(" ") / " *",109X,"**"/38X,"MODELO" | "D" IDIMENSIONAL HE
ITEROGENO",35X,"**"/ " *",109X,"**"/1X,111(" ") |
31 FORMAT(" RADIO = ",F10.7," METROS" POSICION = ",F10.7," DIAMETRO
10 DL PARTICULA = ",F10.7," METROS" / " TEMPERATURA DEL BALO = ",F10
24," GRADOS CELSIUS" TEMPERATURA INICIAL = ",F10.7," GRADOS CELSIO
32 FORMAT(1X,111(" ") / 1X,"I",10X,"I",21X,"I",21X,"I",21X,"I",21X,"I",1
10X,"I" / 4 I DISTANCIAS I TEMPERATURA I BENEFICIO I
2 ANHUEFIDO MALLICO I TASA DE CONVERSION I SELECT I"/ I",10(10
5X,"I") / 4 I METROS
4 I FLUIDO ISUPERFICIE I FLUIDO ISUPERFICIE I FLUIDO ISUPERFICI
33 SEIA MALLICO I GLOBAL I MEDIA I"/1X,111(" ")
34 FORMAT(1X,111(" ")
* /
1 DEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR = ",E12.5," CAL/(HR*(M
2**2)*(GRADO CELSIUS) / " NUMERO DE PEYNGLES = ",E12.5," SCHMIDT =
3 " E12.5," PRANDTL = ",E12.5,"
4 ERUPION DISPERSIVO MEDIO = ",E13.5," FORMAS QUANTORIO MEDIO = ",
50 SE13.5," NUMERO DE ITERACIONES EXTERNAS = ",1(10)
30 FORMAT(" I",10(10.4,"I") / " I",10(10(" ")
CONTINUE
WRITE(6,33)
DAS=DISP/(MAS*JM)
DIS=DESP/(MAS*JM)
NES=MAS*JM
WRITE(6,34)G,U,RC,SC,DR,DAS,DIS,NES
DATA MAS,DISP,DESP,SELEM,L,3/0,0,0,0,0,0/
CALL GCOMP(T,Z,2,L,11)
CALL GCOMP(SELEC,COMV,1,L,12)
CALL GCOMP(X,Z,10,L,10)
CALL GCOMP(IP,20,2,L0,13)
L=1
Z(L,1)=0.
ZP(L,1)=0.
SELEC(L,1)=0.
JM=300
ZC(1)=0.
GO TO 1
STOP
END
0001140
0001150
0001160
0001170
0001180
0001190
0001200
0001210
0001220
0001230
0001240
0001250
0001260
0001270
0001280
0001290
0001300
0001310
0001320
0001330
0001340
0001350
0001360
0001370
0001380
0001390
0001400
0001410
0001420
0001430
0001440
0001450
0001460
0001470
0001480
0001490
0001500
0001510
0001520
0001530
0001540
0001550
0001560
0001570
0001580
0001590
0001600
0001610
0001620
0001630
0001640
0001650
0001660

```

```

SUBROUTINE CONVER(X,N,J,XSV,YCV,TGV,XI,YI,FEI,X1,X2,X3,X1S,X2S, 0001670
1 X3S 0001680
COMMON /1/ A2,A3,B1,B2,B3,B11,B22,B33,B1B2,B2B3,B1B3,SIG1,SIG2,UM1,DM 0001690
2,M,MI,MC,PC,AV,RF,CF,TA,TA,TA,RCW,RCW,RCW,RCW,CP,PT,RADIG,TW,CP,DH 0001700
3,E,A4,A5,A6,A7,A8,A9,A10,FC 0001710
REAL M,MI,MC 0001720
DIMENSION X(2),Y(2),T1(1000),T2(1000),TX(1000),DT(1000) 0001730
DIMENSION Y1(1000),Y2(1000),Y3(1000),X1S(1000) 0001740
DIMENSION DT(1000) 0001750
DIMENSION H1(100),H2(100),H3(100),H4(100),H5(100),H6(100) 0001760
IN=0 0001770
IMAX=5 0001780
XX=X(1,J) 0001790
YY=X(3,J) 0001800
TT=X(15,J) 0001810
I=1 0001820
XI(1)=XX 0001830
YI(1)=YY 0001840
TI(1)=TT 0001850
X1S(1)=X(2,J) 0001860
Y1S(1)=X(4,J) 0001870
T1S(1)=X(16,J) 0001880
Q=X1S(1) 0001890
P=Y1S(1) 0001900
Q=TI(1) 0001910
CALL IMPROB(Q,P,Q,XI,YI,TI,XAS,YAS,TAS,CEB,X1S,X2S,X3S,I,IK) 0001920
EE=LE-CC3 0001930
Q1(I+1)=X1S 0001940
Q2(I+1)=X2S 0001950
Q3(I+1)=X3S 0001960
XV=XI(I) 0001970
TV=TI(I) 0001980
YV=YI(I) 0001990
X1S(I+1)=XAS 0002000
Y1S(I+1)=YAS 0002010
T1S(I+1)=TAS 0002020
DX(I)=P*AV*RF*QZ*(XAS-XI(I))/G3 0002030
DY(I)=KQ*AV*RF*QZ*(YAS-YI(I))/G3 0002040
BF=(2.*M*TI/RADIG+MF*AV*TAS)/(G*CP) 0002050
AF=(MF*AV+2.*U/RADIG)/(G*CP) 0002060
ACT=KG*AV*RF*QZ/G3 0002070
DT(I)=(AF-BF*TI(I))*I/Z 0002080
CALL CUEVAR(X1,X2,X3,XV,YV,TV) 0002090
H1(I+1)=X1 0002100
H2(I+1)=X2 0002110
H3(I+1)=X3 0002120
ACE=G3/(PDF*AV*RG*B2) 0002130
BF=(2.*M*TI/RADIG+MF*AV*TAS)/(G*CP) 0002140
AF=(MF*AV+2.*U/RADIG)/(G*CP) 0002150
X1=X1*ACE 0002160
X2=X2*ACE 0002170
X3=X3*ACE 0002180
DX(I)=DX(I)*ACE 0002190
DY(I)=DY(I)*ACE 0002200
CX=XAS-DX(I) 0002210
CY=YAS-DY(I) 0002220
CT=TI+DT(I) 0002230
IF(CT.GT.1000) WRITE(7,/)CT,TAS,H,DT(I) 0002240
IF(CT.GT.1500) WRITE(6,/)CT,TAS,H,DT(I) 0002250

```

	IF(CX.LL.0.) CX=0.	0002260
	IF(CY.LL.0.) CY=0.	0002270
	I=I+1	0002280
	IF(A=I) IMAX) GO TO 5	0002290
	IF(ABS(TI-T(I)+DT(I)).LE.E.AND.(CT.GT.0.)) GO TO 3	0002300
	IF(I.LT.3) GO TO 2	0002310
	I=I+1	0002320
	TI(I)=(CT+TT+DT(I-1)+TI(I-1))/3.	0002330
	XI(I)=(CX+XX+DX(I-1)+XI(I-1))/3.	0002340
	YI(I)=(CY+YY+DY(I-1)+YI(I-1))/3.	0002350
	IF(XI(I).LT.0.) XI(I)=0.	0002360
	IF(TI(I).LE.0.) TI(I)=(TT*2./3.)	0002370
2	GO TO 1	0002380
	I=I+1	0002390
	TI(I)=CT	0002400
	XI(I)=CX	0002410
	YI(I)=CY	0002420
	IF(XI(I).LT.0.) XI(I)=0.	0002430
	GO TO 1	0002440
	IF(ABS(CX-XI(I)+DX(I)).LE..000001.AND.XI(I).GE.0.) GO TO 4	0002450
	IF(I.LT.2) GO TO 25	0002460
	I=I+1	0002470
	TI(I)=CT	0002480
	XI(I)=CX	0002490
	YI(I)=CY	0002500
	IF(TI(I).LE.0.) TI(I)=TI(I-1)/2.+TT/2.+DT(I-1)	0002510
	IF(XI(I).LT.0.) XI(I)=0.	0002520
	CONTINUE	0002530
3	GO TO 1	0002540
25	IF(ABS(CX-XI(I)+DX(I)).LE..000001.AND.XI(I).GE.0.) GO TO 4	0002550
	I=I+1	0002560
	TI(I)=(CT+TT+DT(I-1)+TI(I-1))/3.	0002570
	XI(I)=(CX+XX+DX(I-1)+XI(I-1))/3.	0002580
	IF(XI(I).LT.0.) XI(I)=0.	0002590
	IF(TI(I).LE.0.) TI(I)=(TT*2./3.)	0002600
	GO TO 1	0002610
5	DO 15 I=2,IMAX	0002620
	ET=(TI+DT(I-1)-TI(I))/(2.*TI)	0002630
	EE2=ABS(ET)	0002640
	IF(I.GT.2) GO TO 9	0002650
10	EE1=EE2	0002660
	IT=I	0002670
9	IF(ABS(EE2).LT.ABS(EE1) .AND.(TI(I).GT.0.)) GO TO 10	0002680
15	CONTINUE	0002690
	GO TO 11	0002700
4	IT=I	0002710
	IF(I.LT.2) GO TO 11	0002720
	ET=(TI+DT(IT-1)-TI(IT))/(2.*TI)	0002730
	EE4=ABS(ET)	0002740
11	EE1=ABS(EE4+EE0/I)/2.	0002750
	X1=W1(TI)	0002760
	X2=W2(TI)	0002770
	X3=W3(TI)	0002780
	X1S=W1(T)	0002790
	X2S=W2(T)	0002800
	X3S=W3(T)	0002810
	X4=X1(TI)	0002820
	Y4=Y1(TI)	0002830
	TV=TI(TI)	0002840
	XSV=XIS(TI)	0002850

YSV=YSIS(IT)
TSV=TLS(IT)
RETURN
END

0002860
0002870
0002880
0002890

	SUBROUTINE INTRPOD(P,P,C,Y3,T1,X08,YSS,TSS,EE3,X1,X2,X3,J,I)	000271
	DIMENSION Y3(1000),YS1(1000),T1(10)	000272
	DIMENSION C(1000),T1(1000),XS(1000),TS(1000),TS1(1000)	000273
	DIMENSION FR(100)	000274
	PEAL,KG,M1,M2	000275
	COMMON A1,A2,A3,E1,E2,E3,M1,M2,M3,G,GS,U,RE,XG,WF,SIG1,SIG2,OM1,0	000276
	A2,M1,M2,SC,PR,AV,ROF,CO,INAX,ROB,POROS,ROA,DZ,DF,PT,RADIO,TW,CP,DH	000277
	Z,E,A4,A5,E4,E5,T2,X10,FC	000278
	I1=0	000279
	X=C(J)	000280
	Y=Y3(J)	000281
	T=T1(J)	000282
	CALL COLVAP(X1,X2,X3,X,Y,T)	000283
	CALL ETA(EFEC,X,T)	000284
	I=1	000285
	XS1(I)=X	000286
	YS1(I)=Y	000287
	TS1(I)=T	000288
	X1=X3(+)	000289
	Y1=Y3(+)	000290
	T1=TS1(+)	000291
	Q=(X3+Y1)/2.	000292
	P=(Y3+Q)/2.	000293
	Q=(T3+Q)/2.	000294
	IF(O.LT.0.)O=0.	000295
	IF(P.LT.0.)P=0.	000296
	RPS=-(X1+X3)*O*EFEC/(KG*AV*GO*DZ)	000297
	DHS=-OM*G*EFEC/(2*IF*AV*PT*DZ)	000298
	RPY=(X1-X2)*G*EFEC/(KG*AV*CO*DZ)	000299
	IF(DHS.LT.0.)DHS=0	000300
	IF(DHS.LE.0.)RPS=0	000301
	IF(DHS.LE.0.)RPY=0	000302
	IF((RPS+X).LT.0.)RPS=-X	000303
	TS(I)=T+DHS	000304
	IF(TS(I).LE.0.)TS(I)=T/2.	000305
	YS(I)=Y+RPY	000306
	XS(I)=X+RPS	000307
	ER(I)=ABS(Q-TS(I))	000308
	IF((X1-X2).EQ.0.)X1=X1+.00001	000309
	IF((X3+X1).EQ.0.)X3=X3+.00001	000310
	IF(XS(I).LE.0.)YS(I)=Y+X*X1/(X3+X1)-RPY*X2/(X1-X2)	000311
	IF(YS(I).LT.0.)YS(I)=0.	000312
	XS1(I+1)=XS(I)	000313
	YS1(I+1)=YS(I)	000314
	TS1(I+1)=TS(I)	000315
	IF(ER(I).LT.0.6)GO TO 6	000316
	IF(ER(I).LT.2.0)GO TO 33	000317
	I=I+1	000318
	GO TO 1	000319
33	DO 35 IL=1,I	000320
	IF(IL.GT.1)GO TO 351	000321
34	IT=YL	000322
	EE1=EF(IL)	000323
35	IF(EE(L).LT.EL1)GO TO 34	000324
	GO TO 67	000325
	GO TO 67	000326
	GO TO 67	000327
	GO TO 67	000328
	GO TO 67	000329
	GO TO 67	000330
	GO TO 67	000331
	GO TO 67	000332
	GO TO 67	000333
	GO TO 67	000334
	GO TO 67	000335
	GO TO 67	000336
	GO TO 67	000337
	GO TO 67	000338
	GO TO 67	000339
	GO TO 67	000340
	GO TO 67	000341
	GO TO 67	000342
	GO TO 67	000343
	GO TO 67	000344
	GO TO 67	000345
	GO TO 67	000346
	GO TO 67	000347
	GO TO 67	000348
	GO TO 67	000349
	GO TO 67	000350
	GO TO 67	000351
	GO TO 67	000352
	GO TO 67	000353
	GO TO 67	000354
	GO TO 67	000355
	GO TO 67	000356
	GO TO 67	000357
	GO TO 67	000358
	GO TO 67	000359
	GO TO 67	000360
	GO TO 67	000361
	GO TO 67	000362
	GO TO 67	000363
	GO TO 67	000364
	GO TO 67	000365
	GO TO 67	000366
	GO TO 67	000367
	GO TO 67	000368
	GO TO 67	000369
	GO TO 67	000370
	GO TO 67	000371
	GO TO 67	000372
	GO TO 67	000373
	GO TO 67	000374
	GO TO 67	000375
	GO TO 67	000376
	GO TO 67	000377
	GO TO 67	000378
	GO TO 67	000379
	GO TO 67	000380
	GO TO 67	000381
	GO TO 67	000382
	GO TO 67	000383
	GO TO 67	000384
	GO TO 67	000385
	GO TO 67	000386
	GO TO 67	000387
	GO TO 67	000388
	GO TO 67	000389
	GO TO 67	000390
	GO TO 67	000391
	GO TO 67	000392
	GO TO 67	000393
	GO TO 67	000394
	GO TO 67	000395
	GO TO 67	000396
	GO TO 67	000397
	GO TO 67	000398
	GO TO 67	000399
	GO TO 67	000400

```

SUBROUTINE COEVAR(R1,R2,R3,X1,X2,T)
PEAL JH,JD,H,MI,KG
DIMENSION MI(10)
COMMON A1,A2,A3,E1,L2,E3,H1,H2,H3,G,G3,U,PE,PF,IF,SIG1,SIG2,OM1,OM
12,M,MI,SC,PE,AV,POF,CO,IMAX,ROU,PROS,POA,DZ,DP,PT,RADIC,TH,CP,DH
2,E4,A5,E4,E5,I2,X1U,FC
UNIDADES UTILIZADAS EN LAS VARIABLES Y NOMENCLATURA EN LA SUBROUTINA
CP CAL/(GRAMO*GRADO CELSIUS)
VIS=VISCOSIDAD EN GRAM0/(HORA*METRO)
DAB = DIFUSIVIDAD DE TIPO BASICA L2/ (METROS CUA DRADOS*HORA)
RUF=DENSIDAD DE LA PARTE FLUIDA EN GRAMOS/(METROS CUBICOS)
CONDG = CONDUCTIVIDAD DE LA FASE FLUIDA EN CALORIAS/(METRO*HORA*(GRAD
OS CELSIUS))
GS = MASA VELOCIDAD MOLAR EN GMOL/(HORA*METRO CUA DRADO)
G = MASA VELOCIDAD EN GRAMOS/(HORA*METRO CUADRADO)
U = COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN CALORIAS/(HORA*MET
ROS CUADRADOS)*(GRADOS CELSIUS)
HF = COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA
KG = COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA
R1,R2,R3=FRACCIONES CONVERTIDAS (MASA CONVERTIDA/MASA TOTAL)/HORA
X1=PRESION PARCIAL DE BENCENO(ATM)/X2=PRESION PARCIAL DE ANH.MAL. (ATM)
DH = VARIACION DE LA ENTALPIA DEBIDO A LA REACCION EN CALORIAS/(GRAMO
* GRADOS CELSIUS)
DATA CUNDA,CONDB/
1-4,VIS,VISB/5.58,120/CPA,CPB,CP,CPD/6.713,4.697E-4,1.147E-6,-4
1.694E-12/
IF (T.LT.0.) RETURN
IF (RADIO.EQ..0127) UU=1000.*EXP(4.26)+4300
IF (RADIO.EQ..0254) UU=1000.*EXP(3.46)+4360
SIGMA=((SIG1*SIG2)/E1)**2
OMEGA=.4-1.059*(SQRT(OM1*OM2)/(T+273.15))**.672)
IF (X1.LT.0.) X1=0.
IF (X2.LT.0.) X2=0.
CALCULO DE PROPIEDADES
DAB=.36*.001858*(T+273.15)**1.5*SQRT(1./M+1./MI(1))/(PT*SIGMA*ONE
IGA)
VIS=VISB*(T+273.15)**1.5/(T+273.15+VISB)
CONDG=CUNDA+CONDB*(T+273.15)
CP=CPA+CPB*(T+273.15)+CPC*(T+273.15)**2+CPD*(T+273.15)**3
RUF=PT*M/(8.285E-5*(T+273.15))
G=GS/M
R2=A2*EXP(-E2/(1.98*(T+273.15)))*X2*ROU*X1/Z/G
IF (T.LT.T2) GO TO 1
R1=A1*EXP(-E1/(1.98*(T+273.15)))*ROU*X1/Z/G
R3=A3*EXP(-E3/(1.98*(T+273.15)))*ROU*X1/Z/G
GO TO 2
R1=A4*EXP(-E4/(1.98*(T+273.15)))*ROU*X1/Z/G
R3=A5*EXP(-E5/(1.98*(T+273.15)))*ROU*X1/Z/G
CONTINDE
CALCULO DE NUMEROS ADIMENSIONALES
RE=LP*GS/VIS
SC=VIS/(RUF*DAB)
IF (SC.LT..001) SC=.1
PP=ROU*(CP*VIS/(CONDG*U))
IF (PP.LT..001) PP=.1
JH=3.6/(RE**.625)
JD=5.7/(RE**.625)
PP=X1*X2
CALCULO DE COEFICIENTES DE USO (U,H,K)

```

11 TSS=TG(17)
XSS=XG(17)
YSS=YG(17)
EE=EL1
RETURN
END

0003290
0003300
0003310
0003320
0003330
0003340

```

IF=CP*G*JH/(P**+.000007)
K=JD*G/(RPF*(JC**+.000007))
U=HU+.5024*RE/OD
DH=(HI*(R1+UC*R2+HD*(R3)
      FE=1
IF(T.GT.650) FE=T/650
U=U*FC
HF=HF*FC
KG=KG*FC
RETURN
END

```

```

00031400
00041500
00041600
00041700
00041800
00041900
00042000
00042100
00042200
00042300
00042400

```



```

SUBROUTINE ETACLFEC,X,T
EFEC=1
C COMO EL CATALIZADOR ES MATERIAL DE TIPO NO POROSO NO SE CALCULA COEFI
C CIENTE DE EFECTIVIDAD YA QUE ESTE SERA = 1.
RETURN
END
) 00042500
00042600
00042700
00042800
00042900
00043000

```

```

SUBROUTINE GOMP(ZG33,ZG3,NF,NP,IK)
DIMENSION NPUNTO(30)
DIMENSION XG(140,20),YG(140,20),Y(140),X(140)
DIMENSION W(140,140),COLUM(140),RENGLO(140),K2(140,
140)
DIMENSION XX(140),YY(140),X1(140),Y1(140)
COMMON MASTER(50,10)
COMMON T0003
EQUIVALENCE (RENG,REN)
REAL MAXX1,MAXY1
REAL MAXX,MAXY,SUP,RENG,COL,SU
INTEGER RENGL,COL1
RENG=25.
COL=50.
IO=IK
NPUNTO(1)=NP
PASO=1.
DIMENSION ZG3(140,20),ZG33(140,20)
DO 0006 I=1,NF
DO 0006 K=1,NP
XG(K,I)=ZG3(K,I)
YG(K,I)=ZG33(K,I)
6666 X VARIABLE INDEPENDIENTE
Y VARIABLE DEPENDIENTE
SUBROUTINE FUNCIO GENERA LOS PUNTOS EN LA GRAFICA O LOS LEE
SI PASO ES IGUAL A UNO X, Y Y, YA FUERON ALINEADOS Y NO SE RE
QUIERE EL USO DE FUNCIO
RENG MITAD DEL LARGO DE LA GRAFICA(RENGLONES)
COL MITAD DEL ANCHO DE LA GRAFICA(COLUMNIA)
L11 PRIMER RENGLON EN LA CUADRICULACION
L12 DISTANCIAMIENTO DE LOS RENGLONES Y COLUMNAS
L11 PRIMERA COLUMNA EN LA CUADRICULACION
DOT1 GENERA LOS EJES
BLANK ESPACIOS EN BLANCOS
NF ASTER ES UN PUNTO EN LA GRAFICA
NP NUMERO DE PUNTOS A GRAFICAR
LETRA(I,INDICE) LETRERO PARA PRODUCIR LOS CARACTERES QUE REPRESENTA
A CADA CURVA;LETRA(I,NF+1) USADO PARA LETRERO DEL EJE Y;
LETRA(I,NF+2) LETRERO EJE X)
INDICE =1
L12=10.
RENG=5.*RENG
COL=2.*COL
DO 200 I=1,NF
IF(PASO.EQ.1) GO TO 1000
CALL FUNCIO(X,Y, NPUNTO(IND),INDICE)
CONTINUE
IF(IND.EQ.1) GO TO 252
IF(PASO.EQ.1) NP=NPUNTO(1)
DO 1 I=1,NP
X(K)=XG(K,I)
Y(K)=YG(K,I)
IF(PASO.EQ.1) XG(1,IND)=X(I)
IF(PASO.EQ.1) YG(1,IND)=Y(I)
DO 201 I=1,NF
IF(PASO.EQ.1) NP=NPUNTO(IND)
DO 201 I=1,NP

```

```

0004310
0004320
0004330
0004340
0004350
0004360
0004370
0004380
0004390
0004400
0004410
0004420
0004430
0004440
0004450
0004460
0004470
0004480
0004490
0004500
0004510
0004520
0004530
0004540
0004550
0004560
0004570
0004580
0004590
0004600
0004610
0004620
0004630
0004640
0004650
0004660
0004670
0004680
0004690
0004700
0004710
0004720
0004730
0004740
0004750
0004760
0004770
0004780
0004790
0004800
0004810
0004820
0004830
0004840
0004850
0004860
0004870
0004880
0004890

```

201	IF(XG(I,IND).LT.0.) GO TO 202	0004901
	COL=COL+1	0004902
	MEDIO1=2	0004903
202	DO 201 I=1,NF	0004904
	IF(PASG.NE.1) NP=NPURTO(IND)	0004905
	DO 203 I=1,NP	0004906
203	IF(YG(I,IND).LT.0.) GO TO 204	0004907
	RENG=RENG+1	0004908
	MEDIO2=2	0004909
204	CONTINUE	0004910
	K135=1	0005000
	K145=1	0005010
	DO 6000 K=1,NF	0005020
	VMIHX=ABS(XG(1,K))	0005030
	KMIHX=1	0005040
	DO 250 I=1,NP	0005050
	IF(ABS(XG(I,K)).GE.VMIHX) GO TO 250	0005060
	VMIHX=ABS(XG(I,K))	0005070
	KMIHX=I	0005080
250	CONTINUE	0005090
	VMIHY=ABS(YG(1,K))	0005100
	KMIHY=1	0005110
	DO 251 I=1,NP	0005120
	IF(ABS(YG(I,K)).GE.VMIHY) GO TO 251	0005130
	VMIHY=ABS(YG(I,K))	0005140
	KMIHY=I	0005150
251	CONTINUE	0005160
	IF(K.EG.1) GO TO 6001	0005170
	GO TO 6002	0005180
6001	VMIHX1=VMIHX ; KMIHX1=KMIHX	0005190
	VMIHY1=VMIHY ; KMIHY1=KMIHY	0005200
	GO TO 6003	0005210
6002	IF(VMIHX.GE.VMIHX1) GO TO 6003	0005220
	VMIHX1=VMIHX ; KMIHX1=KMIHX	0005230
	K135=K	0005240
6003	IF(VMIHY.GE.VMIHY1) GO TO 6003	0005250
	VMIHY1=VMIHY ; KMIHY1=KMIHY	0005260
	K145=K	0005270
6000	CONTINUE	0005280
	KMIHY=KMIHY1 ; KMIHX=KMIHX1	0005290
	VMIHX=XG(KMIHX,K135)	0005300
	VMIHY=YG(KMIHY,K145)	0005310
	DO 253 J=1,NF	0005320
	DO 253 I=1,NP	0005330
	XG(I,J)=XG(I,J)-VMIHX	0005340
	YG(I,J)=YG(I,J)-VMIHY	0005350
253	CONTINUE	0005360
172	IF(PASG.NE.1) NP=NPURTO(INDICE)	0005370
	DOT1=IN+	0005380
	DOT1=IN+	0005390
	IF(INDICE.EQ.1) ASTCR=1H*	0005400
	IF(INDICE.EQ.2) ASTCR=1H*	0005410
	IF(INDICE.EQ.3) ASTCR=1H*	0005420
	IF(INDICE.EQ.4) ASTCR=1H*	0005430
	IF(INDICE.EQ.5) ASTCR=1H*	0005440
	IF(INDICE.EQ.6) ASTCR=1H*	0005450
	IF(INDICE.EQ.7) ASTCR=1H*	0005460
	IF(INDICE.EQ.8) ASTCR=1H*	0005470
	IF(INDICE.EQ.9) ASTCR=1H*	0005480
	IF(INDICE.EQ.10) ASTCR=1H*	0005490

	IF (IK.EQ.10)IK=4	0005500
	IF (IF.EQ.13.OR.IK.EQ.11)IK=5	0005510
	IF (IK.EQ.12) IK=7	0005520
5252	FORMAT (99A1)	0005530
	BLANK=10	0005540
	DO 205 I=1,NP	0005550
	X(I)=X(I,I,INDICL)	0005560
205	Y(I)=Y(I,I,INDICL)	0005570
	IF (INDICL.EQ.1) GO TO 91	0005580
	RENG1=RENG1+1.	0005590
	COL1=COL1+1	0005600
	DO 2 I=1,RENG1	0005610
13	DO 2 J=1,COL1	0005620
11	A(I,J)=BLANK	0005630
2	CONTINUE	0005640
	DO 167 I=1,RENG1	0005650
167	A(I,1)=30T1	0005660
	DO 168 J=1,COL1	0005670
168	A(I,J)=30T1	0005680
	IF (L12.EQ.2) GO TO 91	0005690
	L111=RENG1/L12	0005700
	L11=RENG1-L111*L12+L12	0005710
	L11=COL1/L12	0005720
	L11=COL1-L11*L12+L12	0005730
	DO 199 J=1,COL1	0005740
	DO 190 J=L11,RENG1,L12	0005750
190	A(I,J)=1H-	0005760
	DO 191 I=1,RENG1	0005770
	DO 191 J=L11,COL1,L12	0005780
191	A(I,J)=1H1	0005790
	DO 180 K=1,NP	0005800
	MAXX=0.; MAXY=0.	0005810
	DO 3 I=1,NP	0005820
	IF (ABS(YG(I,K)).LE.MAXY) GO TO 3	0005830
	MAXY=ABS(YG(I,K))	0005840
3	CONTINUE	0005850
	DO 5 I=1,NP	0005860
	IF (ABS(XG(I,K)).LE.MAXX) GO TO 5	0005870
	MAXX=ABS(XG(I,K))	0005880
5	CONTINUE	0005890
	IF (K.EQ.1) MAXY1=MAXY	0005900
	IF (K.EQ.1) MAXX1=MAXX	0005910
	IF (K.EQ.1) GO TO 189	0005920
	IF (MAXY.GT.MAXY1) MAXY1=MAXY	0005930
189	IF (MAXX.GT.MAXX1) MAXX1=MAXX	0005940
	MAXY=MAXY1	0005950
	MAXX=MAXX1	0005960
91	DO 6 I=1,NP	0005970
	IF (MAXY.EQ.0) MAXY=1	0005980
	Y(I)=(Y(I)/MAXY+1.)	0005990
	IF (MAXX.EQ.0) MAXX=1	0006000
	X(I)=(X(I)/MAXX+1.)	0006010
6	CONTINUE	0006020
	DO 7 I=1,NP	0006030
	IC=COL1-X(I)+1.	0006040
	IF (IC.EQ.1) IC=IC-COL1	0006050
	IP=RENG1-Y(I)+1.	0006060
	IF (IP.EQ.1) IP=IP-RENG1	0006070
	COLUMN(I)=IC	0006080
	RENGLO(I)=IP	0006090

7	CONTINUE	00061000
	K=1	00061100
103	DO 100 I=1,NP	00061200
	IF(I.LE.K) GO TO 100	00061300
	IF(COLM(K).EQ.COLM(I)) GO TO 101	00061400
	GO TO 100	00061500
101	IF(X(I).NE.0..AND.ABS(X(K)-X(I)).LE.0.005*X(I)) GO TO 100	00061600
	IF(X(K).NE.0..AND.ABS(X(K)-X(I)).LE.0.005*X(K)) GO TO 100	00061700
	IF(TODOS.EQ.ZMSI) GO TO 100	00061800
	DO 901 INK=I,K	00061900
901	IF(ABS(COLM(INK)-COLM(K)).GE.1) GO TO 100	00062000
	ERR01=(COL*X(I)+1.5-COLM(I))**2	00062100
	ERR02=(COLM(K)-COL*X(K)-1.5)**2	00062200
	IF(ERR01.LT.ERR02) GO TO 102	00062300
	COLM(K)=0.	00062400
	GO TO 100	00062500
102	COLM(I)=0.	00062600
100	CONTINUE	00062700
	IF(K.EQ.NP) GO TO 104	00062800
	K=K+1	00062900
	GO TO 103	00063000
104	K=1	00063100
109	DO 105 I=1,NP	00063200
	IF(I.LE.K) GO TO 105	00063300
	IF(RENGL0(K).EQ.RENGL0(I)) GO TO 106	00063400
	GO TO 105	00063500
106	IF(Y(K).NE.0..AND.ABS(Y(K)-Y(I)).LE.0.005 *X(K)) GO TO 105	00063600
	IF(Y(I).NE.0..AND.ABS(Y(K)-Y(I)).LE.0.005*X(I)) GO TO 105	00063700
	IF(TODOS.EQ.ZMSI) GO TO 105	00063800
	DO 902 INK=I,K	00063900
902	IF(ABS(RENGL0(K)-RENGL0(INK)).GE.1) GO TO 105	00064000
	ERR01=(REN*Y(K)+1.5-RENGL0(K))**2	00064100
	ERR02=(REN*Y(I)+1.5-RENGL0(I))**2	00064200
	IF(ERR01.LT.ERR02) GO TO 107	00064300
	RENGL0(K)=0.	00064400
	GO TO 105	00064500
107	RENGL0(I)=0.	00064600
105	CONTINUE	00064700
	IF(K.EQ.NP) GO TO 108	00064800
	K=K+1	00064900
	GO TO 109	00065000
108	DO 110 I=1,NP	00065100
	IC=COLM(I)	00065200
	IF=RENGL0(I)	00065300
	IF(COLM(I).NE.0.) GO TO 111	00065400
	GO TO 110	00065500
111	IF(RENGL0(I).NE.0.) A(IR,IC)=ASTER	00065600
110	CONTINUE	00065700
	IF (INDICE.NE.1) GO TO 502	00065800
	MKREN=0.; MINKR=101.	00065900
	DO 20 I=1,NP	00066000
	IF(RENGL0(I).EQ.0) GO TO 20	00066100
	KREN=RENGL0(I)	00066200
	YI(RENGL0)=YY(I)	00066300
	IF(KREN.LT.MKREN) MKREN=KREN	00066400
	IF(MINKR.LT.MINKR) MINKR=KREN	00066500
20	CONTINUE	00066600
	YI=0.	00066700
	DO 20 I=1,NP	00066800
	IF(COLM(I).EQ.0..OR.RENGL0(I).EQ.0.) GO TO 500	00066900

	IF(COLUMN(1).LE.VMES) GO TO 500	0006700
	VMES=COLUMN(1)	0006710
500	KMES=1	0006720
	CONTINUE	0006730
	VMINES=101.	0006740
	DO 503 I=1,NP	0006750
	IF(COLUMN(1).EQ.0. OR.RENGLO(I).EQ.0.) GO TO 503	0006760
	IF(COLUMN(1).GE.VMINES) GO TO 503	0006770
	VMINES=COLUMN(1)	0006780
	KMINES=1	0006790
503	CONTINUE	0006800
	RANGO1=XX(KMES)-XX(KMINES)	0006810
	RANGO2=VMES-VMINES	0006820
	ESCALA=RANGO1/RANGO2	0006830
502	IF(INDICE.EQ.NP) GO TO 171	0006840
	INDICE=INDICE+1	0006850
	GO TO 172	0006860
171	COL=COL+1	0006870
	RENG=RENG+1	0006880
	K25=COLUMN(KMINES)	0006890
	DO 210 K=1,COL	0006900
	IF((K25-K).LE.0.) GO TO 211	0006910
	ES=K	0006920
210	XI(K25-K)=XX(KMINES)-ES*ESCALA	0006930
211	DO 212 K=1,COL	0006940
	ES=K	0006950
	IF((K25+K).GT.COL) GO TO 213	0006960
212	XI(K25+K)=XX(KMINES)+ES*ESCALA	0006970
213	CONTINUE	0006980
	XI(K25)=XX(KMINES)	0006990
	PRINT 20	0007000
26	FORMAT(1H1,1H+)	0007010
	IF(IK.LE.4.AND.IK.GT.0) PRINT 5530	0007020
	IF(IK.EQ.5) PRINT 5533	0007030
	IF(IK.EQ.6) PRINT 5531	0007040
	IF(IK.EQ.7) PRINT 5534	0007050
5530	FORMAT(" PRESIONES PARCIALES (ATMOSFERAS)")	0007060
5531	FORMAT(" TASA DE TRANSFORMACION")	0007070
5532	FORMAT(" DISTANCIA")	0007080
5533	FORMAT(" TEMPERATURA (GRADOS CELSIUS)")	0007090
5534	FORMAT(" SELECTIVIDAD")	0007100
	IF(MINER.LT.RENG1) GO TO 13000	0007110
	IF(MINER.GT.1) GO TO 13000	0007120
13000	UNIDAD=MINER-1/MKP	0007130
	IF(UNIDAD.EQ.0.) UNIDAD=.00000001	0007140
	TESCA=YI(MINER)-YI(MINER-1)	0007150
	TESCA=TESCA/UNIDAD	0007160
	IF(MINER.GE.RENG1) GO TO 13002	0007170
	IF(MINER.LT.RENG1) III=MINER+1	0007180
	DO 13001 I=III,RENG1	0007190
13001	YI(I)=TESCA+YI(I-1)	0007200
13002	IF(MINER.GT.1) III=MINER	0007210
	IF(MINER.EQ.1) GO TO 13004	0007220
	DO 13003 I=1,II	0007230
	YI(I)=MINER-I	0007240
13003	YI(I)=YI(MINER)-TESCA+YI(I)	0007250
13004	CONTINUE	0007260
	DO 150 I=1,NP	0007270
	IF(YI(PERG-I+1).EQ.0.) GO TO 303	0007280
	PRINT 150, YI(PERG-I+1), C((PERG-I+1),J), J=1,COL	0007290

	GO TO 158		0007300
300	PRINT 102,(A(NEIG-I+1,J),J=1,C)		0007310
158	FORMAT(10X,115A1)		0007320
159	CONTINUE		0007330
	FORMAT(C15.5,115A1)		0007340
	PRINT 10,(X1(I),I=1,COL,10)		0007350
	IF(IK.LI.2.AND.IK.GT.0) PRINT /,"	TEMPERATURA (GRADOS CEL	0007360
	ISIUS"		0007370
	IF(IK.GT.2.AND.IK.LI.6) PRINT /,"	DISTANCIA(METROS)"	0007380
	IF(IK.EQ.5)PRINT /,"	CONVERSION GLOBAL	0007390
	IF(IK.EQ.7) PRINT /,"	CONVERSION	0007400
	IF(IK.EQ.10) GO TO 5538		0007410
	IF(IK.EQ.1)OR.IK.EQ.3) PRINT 5536		0007420
	IF(IK.EQ.2.OR.IK.EQ.4) PRINT 5530		0007430
	IF(IK.EQ.0) PRINT 5540		0007440
	PRINT 20		0007450
	RETURN		0007460
5538	WRITE(5,5539)		0007470
5539	FORMAT("NOTACION"/" BENCENO (* Y &)" /" ANHIDRIDO MALEICO (0007480
	1+ Y X)" /" DIOXIDO DE CARBONO (= Y >)" /" MONOXIDO DE CARBONO (0007490
	2+ Y <)" /" VAPOR DE AGUA (? Y \$)" /" "		0007500
5530	FORMAT(40X,"NOTACION"/" BENCENO (*)" /" ANHIDRIDO MALEICO (&)" /" MO		0007510
	NOXIDO DE CARBONO (+)" /" DIOXIDO DE CARBONO (X)" /" VAPOR DE AGUA (0007520
	2-)" /" "		0007530
5540	FORMAT (" ",45X,"NOTACION"/" A ANHIDRIDO MALEICO (*)" /" A OXIDOS D		0007540
	1E CARBONO (&)" /" "		0007550
160	FORMAT (0X,11F10.3)		0007560
	PRINT 20		0007570
	RETURN		0007580
	END		0007590

BIBLIOGRAFIA

- 1) Jorge Fernando Ramirez Solis
The catalytic oxidation of benzene to maleic
anhydride
Thesis presented for the degree of Ph.D. of
Univ. of Edinburgh (1974)
- 2) R. Byron Bird , Warren E. Stewart y Edwin A.
Lighthfoot
Transport Phenomena
Wiley International Edition
- 3) A.P.de Vaschy y G.F.Fronment
Heat transfer in packed beds
Chem. Eng. Sci. 27, 567 - 578 (1972)
- 4) Vladimir Hlavacek
Aspects in design of packed catalytic reactors
I. E. Chem 62(7), 6 - 25 (1970)
60)
- 5) G.F.Fronment
Analysis and design of fixed bed catalytic
reactors
- 6) H.A.Deans y Leon Lepidus
A computational model for predicting and corre-
lating the behavior of fixed-bed reactors (parte
I y II)
A.I.Ch.E. Journal, 6(4), 656-669 (1960)

- 7) Jungers , I.C.y col.
Cinetique Chimique Apliquee
Technique Paris , 1956
- 8) A.P.de Wasch y I.P.Froment
A two dimensional heterogeneous model for fixed
bed catalytic reactors
Chem.Eng. Sci. 26,629-634(1971) *
- 9) N.G.Karant y R.G.Hughes
Matemathical modeling of heteogeneous catalytic
reactors
Cat.Rev. Sci. Eng. 2(2),169-208(1974) *
- 10) J.M.Smith
Chemical Engineering Kinetics
Mc Graw Hill.Segunda Edición(1970)
- 11) Rutherford Aris
Elementary Chemical Reactor Analysis
Prentice Hall (1969)
- 12) O.Levenspiel
Chemical Reaction Engineering
J.Wiley & sons .New York segunda edición(1972)
- 13) D.Kunii y J.M.Smith
A.I.Che Journal 7(1),29-34(1961) *

- 14) D. Mc Cracken y W.S. Dorn
 Numerical Methods and Fortran Programming
 Wiley (1964)
- 15) B. Carnahan , A. Luther y O. Wilkes
 Applied numerical methods
 New York . Wiley (1969)
- 16) D. Mc Cracken
 Fortran IV
 John Wiley & Sons (primera edición en español)
- 17) Jhon H. Perry Editor
 Handbook of Chemical Engineering
 Jhon Wiley & Sons. cuarta edición.
- 18) J. De Acetis y G. Thodos
 I. & E. Eng. 32, 106 - - 9 (1 60)
 66
- 19) G. F. Froment
 Design of fixed-bed catalytic reactors based on
 effective transport models
 Chem. Eng. Sci. 5, 849-859 (1962) ✕
- 20) J. H. Quintin y J. Anderson Sterrow
 Heat transfer to air flowing through packed tubes
 Chem. Eng. Sci. 2(6), 1-10 (1956)

- 21) N.G.Karanth y R.Hughes
Simulation of an adiabatic packed bed reactor
Chem. Eng. Sci. 29, 197-205 (1974) ✕
- 22) C. Mc Greavy y D.L.Creswell
Development of models in the design of fixed
bed catalytic reactors
Chem. Eng. Sci. 24, 59-71 (1969) ✕
- 23) James J. Carberry y Martin M. Wendel
A computer model of the fixed bed catalytic
reactor
A.I.Ch.E. Journal 9(1), 129-133 (1963) ✕
- 24) J.J. Carberry
Yield in Chemical Reactor Engineering ✕
I. & E. Ch. 52(10), 40-53 (1966)
- 25) G.F. Froment
Fixed bed catalytic reactors (current design
status) ✕
I. & E. Ch. 59(2), 18-27 (1967)