



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
CUAUTITLAN**

**ALGORITMO COMPUTACIONAL PARA EL DISEÑO DE
REACTORES EN ESTADO ESTACIONARIO CON FLUJO
IDEAL EN SISTEMAS REACCIONANTES HOMOGENEOS
SIMPLES Y NO ISOTERMICOS.**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A :

JOSE ANTONIO RODRIGUEZ ZUÑIGA

ASESOR: I.Q. GILBERTO ATILANO AMAYA VENTURA



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis 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.

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional

NOMBRE: José Antonio

Rodríguez Zúñiga

FECHA: 10/Nov./2005

FIRMA: José Antonio Rodríguez Zúñiga

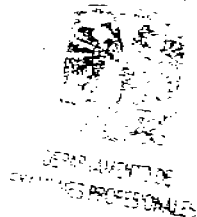
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN
UNIDAD DE LA ADMINISTRACIÓN ESCOLAR
DEPARTAMENTO DE EXÁMENES PROFESIONALES



ESTADOS UNIDOS MEXICANOS
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA
UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

ASUNTO: VOTOS APROBATORIOS

UNIVERSIDAD DE ESTUDIOS
SUPERIORES CUAUTITLAN



DR. JUAN ANTONIO MONTARAZ CRESPO
DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLAN
PRESENTE

ATN: Q. Ma. Del Carmen García Mijares
Jefe del Departamento de Exámenes
Profesionales de la FES Cuautitlán

Con base en el art. 28 del Reglamento General de Exámenes, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la TESIS:

Algoritmo Computacional Para El Diseño De Reactores En Estado Estacionario Con Flujo Ideal
En Sistemas Reaccionantes Homogéneos Simples y No Isotérmicos.

que presenta el pasante: José Antonio Rodríguez Zúñiga
con número de cuenta: 9114340-8 para obtener el título de :
Ingeniero Químico

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el EXAMEN PROFESIONAL correspondiente, otorgamos nuestro VOTO PROBATORIO.

ATENTAMENTE

"POR MI RAZA HABLARA MI ESPIRITU"

Cuautitlán Izcalli, Méx. a 23 de Agosto del 2005

PRESIDENTE MC. Ricardo Paramont Hernández García

VOCAL Ing. Antonio Trejo Lugo

SECRETARIO IQ. Gilberto Atilano Amaya Ventura

PRIMER SUPLENTE IQI. Celina Elena Urrutia Vargas

SEGUNDO SUPLENTE IQ. Ma. De Jesús Cruz Onofre

DEDICATORIAS.

† A la memoria de mi padre, Fidel Rodríguez Caballero.

A mi madre, María Elena Zúñiga Mancilla.

Por darme la oportunidad de existir e iniciarme en mis estudios.

Me ayudaste a construir los cimientos de mi vida, y nos has brindado tu casa cuando lo hemos necesitado, mi familia te lo agradecerá por siempre.

Te dedico este título con todo mi corazón.

Gracias por fijarte en mí, por permitirme mirarte y dejarme soñar contigo

Gracias por elegirme, para acompañarte y caminar juntos por la vida

Gracias por respirar, andar, mirar, hablar, entender, enojarte, despertar,

Llorar, compartir y sonreír junto a mí

GRACIAS POR TU COMPAÑÍA, ROSALBA DE MI AMOR

A mis pequeños grandes amores, Lenin Antonio y Jesús Ernesto. Espero que este título sea una forma de decirles que los quiero. Mientras Dios me de la oportunidad de seguir existiendo estaré con ustedes dándoles lo necesario para que sean hombres de bien, me siento muy orgulloso de ustedes. Durante mucho tiempo pasamos momentos muy difíciles, en más de una ocasión no teníamos ni para comer, mucho menos para el pasaje de la escuela, durante años la vida nos trato mal. El mérito de este título es el haberse logrado con las manos vacías, pero con el corazón lleno de ilusiones, anhelo que sea un ejemplo para ustedes.

A mis hermanos: Guadalupe, Alejandro, Martha, María Elena, Blanca Estela, María Eugenia, Ricardo y Fernando. Por que se, que se sienten tan orgullosos de mi, como yo de ellos.

AGRADECIMIENTOS.

A mi asesor M.C. Gilberto Atilano Amaya Ventura, por brindarme su tiempo y confianza durante la elaboración de este trabajo.

A los sinodales, los profesores Ricardo Paramont Hernández García, Antonio Trejo Lugo, Celina Elena Urrutia Vargas y María De Jesús Cruz Onofre. Agradezco su tiempo y paciencia en la revisión de esta tesis.

ÍNDICE

TEMA	PÁG.
OBJETIVOS	1
RESUMEN	2
INTRODUCCIÓN	4
CAPÍTULO I. METODOLOGÍA PARA LA SOLUCIÓN DE PROBLEMAS POR MEDIO DE COMPUTADORA	6
1.1.0 Computadora	7
1.1.1 Computadora	7
1.1.2 Hardware	7
1.1.3 Dispositivos de entrada	7
1.1.4 Dispositivos de salida	7
1.1.5 Unidad central de procesamiento (C.P.U.)	8
1.1.6 Memoria	8
1.1.7 Software	9
1.1.8 Programa	9
1.2.0 Lenguaje	10
1.2.1 Lenguaje	10
1.2.2 Comunicación	10
1.2.3 Lenguajes de programación	10
1.2.4 Clasificación de los lenguajes de programación	11
1.3.0 Algoritmo	12
1.3.1 Algoritmo	12
1.3.2 Lenguajes algorítmicos	12
1.3.3 Tipos de lenguajes algorítmicos	12
1.4.0 Diagramas de flujo	13
1.4.1 Diagramas de flujo	13
1.4.2 Aspectos básicos en el diseño de diagramas de flujo	13
1.5.0 Procedimiento para la solución de problemas	15
1.5.1 Análisis del problema	15

1.5.2	Diseño del algoritmo	15
1.5.3	Codificación	15
1.5.4	Prueba y depuración	16
1.5.5	Documentación	16
1.5.6	Mantenimiento	17
CAPÍTULO II. TEORÍA SOBRE REACTORES		18
2.1.0	Conceptos generales	19
2.1.1	Estado estacionario	19
2.1.2	Flujo ideal	19
2.1.3	Sistema homogéneo	19
2.1.4	Reactor	19
2.1.5	Reacción química	19
2.1.6	Reacciones simples	20
2.1.7	Reacciones elementales	20
2.2.0	Velocidad de reacción	21
2.3.0	Equilibrio	22
2.3.1	Dependencia de la temperatura según la termodinámica	22
2.3.2	De acuerdo a la cinética	23
2.4.0	Influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción	25
2.5.0	Reactor de mezcla completa en estado estacionario	26
2.6.0	Reactor de flujo en pistón en estado estacionario	28
2.7.0	Reactores de flujo en pistón en serie	30
2.8.0	Reactores de mezcla completa en serie	31
2.9.0	Arreglos combinados de reactores	32
2.10.0	Reactor con recirculación	33
2.11.0	Trazo de las curvas de velocidad de reacción	35
2.12.0	Tipos de operación	36
CAPÍTULO III. INTERPRETACIÓN DE ECUACIONES		38
3.1.0	Herramientas matemáticas	39
3.1.1	Método de Newton-Raphson	39
3.1.2	Derivación de funciones implícitas	40

3.1.3 Integración aproximada	41
3.2.0 Estequiometría de la reacción	42
3.3.0 Definición de ∇C_p y K_{eq}	43
3.4.0 Trazo de la curva de equilibrio	44
3.5.0 Trazo de la curva de máximos	47
3.6.0 Línea de operación isotérmica	50
3.6.1 Operación isotérmica en un reactor de mezcla completa	51
3.6.2 Operación isotérmica en un reactor de flujo en pistón	52
3.7.0 Línea de operación de ruta térmica óptima	53
3.8.0 Línea de operación adiabática	55
3.9.0 Recirculación	59
CAPÍTULO IV. ELABORACIÓN DEL PROGRAMA	63
4.1.0 Comandos de Quick Basic	64
4.1.1 Comandos de cálculos	64
4.1.2 Comandos de dispositivos	65
4.1.3 Comandos de errores	66
4.1.4 Comandos de flujos	66
4.1.5 Comandos de gráficos	67
4.1.6 Comandos de procedimientos	71
4.2.0 Ejemplos de la aplicación de los comandos de Quick Basic	72
4.2.1 Subrutina para el trazo del plano: temperatura vs. conversión	72
4.2.2 Diagrama de flujo para el cálculo y trazo de la curva de equilibrio	73
4.2.3 Subrutina para el cálculo y trazo de la curva de equilibrio	74
4.3.0 Diagrama general de flujo del programa REACTOR.BAS	76
4.4.0 Líneas de comandos	81
CAPÍTULO V. INSTRUCCIONES DE USO	106
DEL PROGRAMA REACTOR.BAS	
5.1.0 Manual REACTOR.BAS	107
5.1.1 Abrir el programa	107
5.1.2 Pulsar F5	107
5.1.3 Juego de datos en los que se basan los ejemplos descritos	109

5.1.4 Intervalo de temperaturas	111
5.1.5 Modificación de intervalos de temperaturas y conversiones	112
5.1.6 Trazo de las curvas de máximos de las isocinéticas	113
5.1.7 Selección de la escala del eje del inverso de la velocidad, en el gráfico: conversión vs. inverso de la velocidad de reacción.	114
5.1.8 Sistema de reactores	115
5.1.9 Modelos de reactores	115
5.1.10 Reactor de mezcla completa isotérmico	116
5.1.11 Reactor de mezcla completa adiabático	117
5.1.12 Reactor de flujo en pistón isotérmico	118
5.1.13 Reactor de flujo en pistón de ruta térmica óptima	119
5.1.14 Reactor de flujo en pistón adiabático	120
5.1.15 Características de los reactores diseñados	123
5.1.16 Repetir la ejecución del programa	124
5.1.17 Ejemplos	125
5.1.18 Comentarios finales	128
CONCLUSIONES	129
ANEXO	130
GLOSARIO	136
BIBLIOGRAFÍA	137

ÍNDICE DE TABLAS Y FIGURAS

	PÁG
CAPÍTULO I	
Tabla 1.4.2 Simbología para un diagrama de flujo	14
CAPÍTULO II	
Figura 2.3.1a Reacción reversible endotérmica	24
Figura 2.3.1b Reacción reversible exotérmica	24
Figura 2.5.0a Reactor de mezcla completa (CSTR).	26
Figura 2.5.0b Representación gráfica para la ecuación de diseño de un CSTR	27
Figura 2.6.0a Reactor de flujo en pistón (PFR).	28
Figura 2.6.0b Representación gráfica para la ecuación de diseño de un PFR	29
Figura 2.7.0a Reactores de flujo en pistón en serie.	30
Figura 2.7.0b Representación gráfica para un arreglo de reactores PFR en serie	30
Figura 2.8.0a Reactores de mezcla completa en serie.	31
Figura 2.8.0b Representación gráfica para un arreglo de reactores CSTR en serie	31
Figura 2.9.0a Reactores CSTR y PFR en arreglo combinado en serie.	32
Figura 2.9.0b Representación gráfica para un arreglo de reactores combinados en serie.	32
Figura 2.10.0a Reactor PFR con recirculación.	33
Figura 2.10.0b Representación para la ecuación de diseño de un PFR con recirculación.	34
Figura 2.11.0 Representación gráfica para la ecuación de velocidad en función de la temperatura y la conversión: $-r_A = f(T, X_A)$.	35
Figura 2.12.0 Curvas de operación de los procesos analizados en el programa	36
CAPÍTULO III	
Figura 3.1.1 Representación grafica del método de Newton	39
Figura 3.3.1a Área total seccionada.	41
Figura 3.3.1b Una sección del área total.	41

Tabla 3.2.0a Notación para la estequiometría de la reacción	42
Tabla 3.2.0b Concentraciones de productos y reactivos en función de X_A	43
Tabla 3.4.0 Notación en el programa para los términos contenidos en la ecuación 3.4.0c	45
Figura 3.4.0 Curva de equilibrio	46
Tabla 3.5.0 Notación en el programa para la ecuación 3.5.0a	49
Figura 3.5.0 Curva de máximos de las Isocinéticas (curva inferior).	49
Figura 3.6.0 Línea de operación isotérmica.	50
Tabla 3.6.0 Notación en el programa para operaciones isotérmicas	50
Figura 3.6.1 Cálculo gráfico de V / F_{A0} para un CSTR	51
Figura 3.6.2 Cálculo gráfico de V / F_{A0} para un PFR	52
Figura 3.7.0a Línea de operación de ruta térmica óptima	53
Tabla 3.7.0 Notación en el programa para la operación de ruta térmica óptima	53
Figura 3.7.0b Cálculo gráfico de V / F_{A0} para un PFR de ruta térmica óptima	54
Figura 3.8.0a Línea de operación adiabática para una reacción exotérmica	55
Tabla 3.8.0 Notación en el programa para la operación adiabática	55
Figura 3.8.0b Cálculo gráfico de V/F_{A0} para operación adiabática.	58
Figura 3.9.0a Reactor PFR con recirculación	59
Figura 3.9.0b línea de operación adiabática con recirculación.	59
Figura 3.9.0b Gráfico X_A Vs $-1/t_A$ para un PFR adiabático con recirculación.	61
Tabla 3.9.0 Notación en el programa para la operación adiabática con recirculación	62
CAPÍTULO V	
Tabla 5.1.3 Valores y Unidades de las Propiedades del Sistema Reaccionante	108
Figura 5.1.15a Reactor de Flujo en Pistón (PFR)	123
Figura 5.1.15b Reactor de Mezcla Completa (CSTR)	123
Figura 5.1.15c Reactor de Flujo en Pistón con Recirculación	123
Tabla 5.1.15 Propiedades de los sistemas analizados en el programa	124

*Toda nuestra ciencia,
Comparada con la realidad,
Es primitiva e infantil...
Y sin embargo es lo máspreciado
Que tenemos.*

OBJETIVOS

1. Codificar en un lenguaje de programación algoritmos para resolver ecuaciones que describen a un sistema reaccionante. Es decir la transformación de expresiones termodinámicas y cinéticas en instrucciones que la computadora pueda interpretar, para de esta manera lograr un programa que nos permita realizar un gran número de operaciones en lapsos mínimos de tiempo.
2. La elaboración de una herramienta didáctica sobre reactores que tenga una aplicación dentro de las asignaturas relacionadas con el tema.
3. Conformar una herramienta que dirija nuestra atención principalmente a las variaciones de las características básicas de los reactores de acuerdo a las propiedades de los reactivos que serán introducidos en ellos.
4. Lograr un software que nos permita analizar sistemas de reactores individuales o múltiples.
5. Ampliar el conocimiento de los estudiantes de Ingeniería Química, en el tema de reactores. Mediante la utilización interactiva del programa elaborado en este trabajo.
6. La implementación de una metodología que nos permita describir, analizar y resolver problemas relacionados con la Ingeniería Química, mediante el uso de la computadora.

RESUMEN

Una de las misiones de la ingeniería es el llevar a la práctica los conocimientos que la ciencia plantea, en la aplicación de estos conocimientos, la ingeniería ha requerido de herramientas que le permitan realizar esta aplicación de una forma rápida y precisa. Ciencias como la química, la termodinámica y la cinética, requieren entenderse a través de conceptos y expresiones matemáticas, los cálculos derivados de estas expresiones pueden ser obtenidos de manera manual, sin embargo puede resultar tardado y con riesgo de error, hacerlo cuando estos cálculos son numerosos y complicados. Resulta entonces necesaria una herramienta que nos permita economizar tiempo y concentrar nuestra atención en los conceptos que pretendemos entender. Este trabajo permitirá enfocar nuestra atención en la relación existente entre las variables: temperatura, conversión y velocidad de reacción, mediante la elaboración y la utilización de un programa.

La computadora será nuestra herramienta en la búsqueda de la solución a nuestro problema, esta por si sola no resuelve problemas, entonces se requiere de un método a través del cual la información pueda ser introducida y procesada en ella, para de esta manera obtener un resultado que represente la solución indagada. Pues bien así, este trabajo plantea una metodología para resolver el problema sobre la caracterización de reactores en estado estacionario homogéneos con flujo ideal en fase líquida.

En el primer capítulo se definen conceptos relacionados con la computadora, lenguaje de programación, algoritmo y diagramas de flujo. Posteriormente se propone un procedimiento general para la solución de problemas.

En el segundo capítulo se describen los conceptos relacionados con reactores químicos tales como: reacción química, velocidad de reacción, equilibrio y la influencia de la temperatura en estos. Es expuesto el concepto, la ecuación de diseño y el gráfico correspondiente a los reactores de mezcla completa (CSTR) y de flujo en pistón (PFR) y sus respectivos arreglos en serie, además se detallan las formas en las que han de operar estos reactores.

En el tercer capítulo se presentan conceptos matemáticos que serán de utilidad en el estudio de las ecuaciones que conforman este trabajo. Posteriormente se plantea la estequiometría de la reacción más compleja que permitirá el programa. A continuación se obtienen las ecuaciones que describen las trayectorias que ha de seguir la curva de equilibrio, la curva de máximos de las isocinéticas, la línea de operación isotérmica adiabática y de ruta térmica óptima. Finalmente es mencionada la expresión correspondiente a la recirculación. En este capítulo se asigna la notación que identificará a cada variable dentro del programa.

En el cuarto capítulo son presentados los comandos de Qbasic con su respectiva descripción y se ejemplifican a detalle la elaboración de 2 subrutinas. Es mostrado el diagrama general de flujo que dará la secuencia de instrucciones que seguirá el programa, en cada figura del diagrama esta escrito el número de instrucción que tiene dentro del programa, este diagrama es general y por lo tanto no describe con detalle las subrutinas. Por ultimo es expuesto el programa resultante.

En el quinto capítulo complementamos este trabajo con el manual que explica la utilización del software elaborado.

Por medio de los elementos contenidos en los cuatro primeros cuatro capítulos, es elaborado un programa sobre reactores, que nos proporciona resultados confiables (que pueden se corroborados cuando el usuario lo considere necesario). Una vez ejecutado el programa, resulta evidente su aportación como herramienta de aprendizaje en el tema de reactores, ya que nos permite entender de forma interactiva, las relaciones existentes entre las características de los reactores y las propiedades de las especies químicas que han de ser introducidas en ellos.

INTRODUCCIÓN

La computadora sirve al hombre como una valiosa herramienta para realizar y simplificar muchas de sus actividades. En sí es un dispositivo electrónico capaz de interpretar y ejecutar instrucciones que le permiten realizar en forma general funciones como lo son; las operaciones de entrada, al ser receptora de información ya sea de una máquina conectada a ella o de un usuario; operaciones de cálculo, lógica, almacenamiento y operaciones de salida, al proporcionar resultados de las operaciones mencionadas.

En la actualidad las computadoras tienen aplicaciones variadas y prácticas, porque sirve no solamente para Computar y calcular, sino para realizar múltiples funciones, como el ser un centro de comunicaciones (teléfono, videoteléfono, fax, correo electrónico), servir como equipo de entretenimiento (televisión, video, audio, video juegos, cine, fotografía).

La computadora no solamente es una máquina que puede realizar procesos para darnos resultados, sin que tengamos la noción exacta de las operaciones que realiza para llegar a esos resultados. Con la computadora además de lo anterior también podemos diseñar soluciones a la medida, de problemas específicos que se nos presenten. Más aún, si estos involucran operaciones matemáticas complejas y/o repetitivas, o requieren del manejo de un volumen muy grande de datos.

El diseño de soluciones a la medida de nuestros problemas, requiere como en otras disciplinas una metodología que nos enseñe de manera gradual, la forma de llegar a estas soluciones. A las soluciones creadas en la computadora se les conoce como programas y no son más que una serie de operaciones que realiza la computadora para llegar a un resultado, con un grupo de datos específicos. Lo anterior nos lleva al razonamiento de que un programa nos sirve para solucionar un problema específico. Una persona piensa y se comporta obedeciendo a un secuencial lógico. Análogamente un computador realiza tareas y maneja datos en memoria obedeciendo a una secuencia de pasos lógicos para lo cual ha sido programado.

La programación de computadoras es la ciencia que permite a una persona programar una computadora para que resuelva tareas de manera rápida. Un programa de computadora se puede definir como una secuencia de instrucciones que indica las acciones o tareas que han de ejecutarse para dar solución a un problema determinado. Programar computadoras es indispensable en cualquier área de la ingeniería, ya que diferentes problemas que se puedan presentar tarda tiempo resolverlos de manera manual. Por medio de la computadora tenemos la posibilidad de resolver problemas de manera rápida.

Cuando se desea elaborar algún programa, se debe de tener conocimiento amplio y suficiente del problema que se desea resolver con la computadora. Antes de pensar siquiera en diseñar el programa se debe ser capaz de resolver manualmente el problema planteado, solo entonces podrá plantearse el algoritmo.

El lenguaje de programación con el que se elaboró este programa es Qbasic, la principal ventaja que presenta respecto a los demás programas es la simplicidad con la que se puede aprender a programar en él, evitando así la necesidad de tener cursos previos de programación, este trabajo pretende caracterizar cierto tipo de reactores y no busca ser un curso de programación.

CAPÍTULO I

METODOLOGÍA PARA LA SOLUCIÓN DE PROBLEMAS POR MEDIO DE COMPUTADORA

1.1.0 COMPUTADORA

1.1.1 Computadora

Es un dispositivo electrónico utilizado para procesar información y obtener resultados. Los datos y la información se pueden introducir en la computadora como entrada y a continuación se procesan para producir una salida.

1.1.2 Hardware

Son los elementos físicos de la computadora que puedes tocar (teclado, monitor, bocinas, impresora, escáner, etc.), aunque algunos no son visibles porque están dentro del gabinete o chasis de la computadora (microprocesador, disco duro, memoria RAM, entre otros). Todos ellos, a su vez se clasifican por su función en: dispositivos de entrada, procesamiento, salida y almacenamiento.

1.1.3 Dispositivos de Entrada

Como su nombre lo indica, sirven para introducir datos (información) en la computadora para su proceso. Los datos se leen de los dispositivos de entrada y se almacenan en la memoria central o interna. Ejemplos: teclado, *scanners* (digitalizadores de rastreo), *mouse* (ratón), *trackball* (bola de ratón estacionario), *joystick* (palancas de juego), lápiz óptico.

1.1.4 Dispositivos de Salida

Regresan los datos procesados que sirven de información al usuario. Ejemplo: monitor, impresora.

1.1.5 Unidad Central de Procesamiento (C.P.U)

Es la parte más importante de la computadora, en ella se realizan todos los procesos de la información. La CPU está estructurada por un circuito integrado llamado microprocesador, el cual varía en las diferentes marcas de computadoras. La CPU se divide en dos unidades:

Unidad Aritmético Lógica

Es la parte del computador encargada de realizar las: operaciones aritméticas y lógicas, así como comparaciones entre datos.

Unidad de Control

Se le denomina también la parte inteligente del microprocesador, se encarga de distribuir cada uno de los procesos al área correspondiente para su transformación.

1.1.6 Memoria

Son los dispositivos mediante los cuales se almacenan datos. En las memorias se deposita y queda disponible gran cantidad de información, instrucciones que han de ser ejecutadas por los diferentes sistemas de la computadora.

a) Memoria Central o Interna

La memoria RAM (*Random Access Memory*): Recibe el nombre de memoria principal o memoria del usuario, en ella se almacena información solo mientras la computadora esta encendida. Cuando se apaga o arranca nuevamente la computadora, la información se pierde, por lo que se dice que la memoria RAM es una memoria volátil. Su acceso es aleatorio, esto indica que los datos no tienen un orden determinado, aunque se pueden pedir ó almacenar en forma indistinta.

La memoria ROM (*Read Only Memory*): Es una memoria estática que no puede cambiar, la computadora puede leer los datos almacenados en la memoria ROM, pero no se pueden introducir datos en ella, o cambiar los datos que ahí se encuentran; por lo que se dice que esta memoria es de solo lectura. Los datos de la memoria ROM están grabados en forma permanente y son introducidos por el fabricante de la computadora.

b) Memoria Auxiliar o Externa

Es donde se almacenan todos los programas o datos que el usuario desee. Los dispositivos de almacenamiento o memorias auxiliares (externas o secundarias) mas comúnmente utilizados son: discos magnéticos, discos compactos, discos duros, memorias Flash.

1.1.7 Software

Está conformado por los programas que requiere la computadora para poder hacer funcionar todos los elementos del hardware. Es el conjunto de instrucciones que se dan a la computadora para que pueda funcionar con un fin determinado. Sin el software, no tendrían sentido los demás elementos de la computadora. Son la razón de ser del hardware.

Para comprender mejor las definiciones de hardware y software, podríamos compararlas con una persona, en la que su cuerpo, sistemas y órganos son el hardware y los conocimientos y experiencias acumulados, representan el software.

1.1.8 Programa

Es el conjunto de instrucciones escritas en algún lenguaje de programación y que ejecutadas secuencialmente resuelven un problema específico.

1.2.0 LENGUAJE

1.2.1 Lenguaje

Es una serie de símbolos que sirven para transmitir uno o más mensajes (ideas) entre dos entidades diferentes. A la transmisión de mensajes se le conoce comúnmente como comunicación.

1.2.2 Comunicación

Es un proceso complejo que requiere una serie de reglas simples, pero indispensables para poderse llevar a cabo. Las dos principales son las siguientes:

- Los mensajes deben correr en un sentido a la vez.
- Debe forzosamente existir 4 elementos: Emisor, Receptor, Medio de Comunicación y Mensaje.

1.2.3 Lenguajes de Programación

Se puede definir un lenguaje de programación como un conjunto de reglas ó normas, símbolos y palabras especiales utilizadas para construir un programa y con él, darle solución a un problema determinado. El lenguaje de programación es el encargado de que la computadora realice paso a paso las tareas que el programador a diseñado en el algoritmo. Los lenguajes de programación tienen un conjunto de instrucciones que nos permiten realizar operaciones de entrada/salida, cálculo, manipulación de textos, lógica/comparación y almacenamiento/recuperación.

1.2.4 Clasificación de los Lenguajes de Programación

- **Lenguaje Máquina:** Son aquellos cuyas instrucciones son directamente entendibles por la computadora y no necesitan traducción posterior para que la CPU pueda comprender y ejecutar el programa.
- **Lenguaje de Bajo Nivel (Ensamblador):** En este lenguaje las instrucciones se escriben en códigos alfabéticos conocidos como mnemotécnicos para las operaciones y direcciones simbólicas. Por ejemplo, mnemotécnicos típicos de operaciones aritméticas son: en inglés: ADD, SUB, DIV, etc.; en español: SUM, RES, DIV, etc.
- **Lenguaje de Alto Nivel:** Los lenguajes de programación de alto nivel (Visual Basic, C++, SmallTalk, Java) son aquellos en los que las instrucciones o sentencias a la computadora son escritas con palabras similares a los lenguajes humanos (en general en inglés), lo que facilita la escritura y comprensión del programa.

1.3.0 ALGORITMO

1.3.1 Algoritmo

La palabra algoritmo se deriva de la traducción al latín de la palabra árabe al-juarismi, nombre de un matemático y astrónomo árabe que escribió un tratado sobre manipulación de números y ecuaciones en el siglo IX.

Un algoritmo es una serie de pasos organizados que describe el proceso que se debe seguir, para dar solución a un problema específico.

Tipos de algoritmos:

- Cualitativos: son aquellos en los que se describen los pasos utilizando palabras.
- Cuantitativos: son en los que se utilizan cálculos numéricos para definir los pasos del proceso.

1.3.2 Lenguajes Algorítmicos

Es una serie de símbolos y reglas que se utilizan para describir de manera explícita un proceso.

1.3.3 Tipos de Lenguajes Algorítmicos

- Gráficos: Es la representación gráfica de las operaciones que realiza un algoritmo (diagrama de flujo).
- No Gráficos: Representa en forma descriptiva las operaciones que debe realizar un algoritmo (pseudocódigo).

1.4.0 DIAGRAMAS DE FLUJO



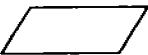

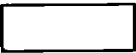

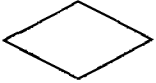
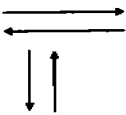
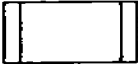
1.4.1 Diagrama de Flujo

Un diagrama de flujo es la representación gráfica de un algoritmo. También se puede decir que es la representación detallada en forma gráfica de cómo deben realizarse los pasos en la computadora para producir resultados. Esta representación gráfica se da cuando varios símbolos (que indican diferentes procesos en la computadora), se relacionan entre sí mediante líneas que indican el orden en que se deben ejecutar los procesos. Los símbolos utilizados han sido normalizados por el Instituto Norteamericano de Normalización (ANSI).

1.4.2 Aspectos Básicos en el Diseño de Diagramas de Flujo

1. Se deben usar solamente líneas de flujo horizontales y/o verticales.
2. Se debe evitar el cruce de líneas utilizando los conectores.
3. Se deben usar conectores sólo cuando sea necesario.
4. No deben quedar líneas de flujo sin conectar.
5. Se deben trazar los símbolos de manera que se puedan leer de arriba hacia abajo y de izquierda a derecha.
6. Todo texto escrito dentro de un símbolo deberá ser escrito claramente, evitando el uso de muchas palabras.

Tabla 1.4.2 Simbología para un diagrama de flujo

Símbolo	Descripción	Símbolo	Descripción
	Indica el inicio y el final de nuestro diagrama de flujo.		Conector fuera de página. Representa la continuidad del diagrama en otra página.
	Indica la entrada y salida de datos.		Conector dentro de página. Representa la continuidad del diagrama dentro de la misma pag.
	Símbolo de proceso y nos indica la asignación de un valor en la memoria y/o la ejecución de una operación aritmética.		Indica la salida de información en la pantalla o monitor.
	Símbolo de decisión indica la realización de una comparación de valores.		Líneas de flujo o dirección. Indican la secuencia en que se realizan las operaciones.
	Se utiliza para representar los subprogramas.		

1.5.0 PROCEDIMIENTO PARA LA SOLUCIÓN DE PROBLEMAS

1.5.1 Análisis del problema

Aquí es necesario definir:

1. Los datos de entrada.
2. Los métodos y fórmulas que se necesitan para procesar los datos.
3. La información que se desea producir (salida).

1.5.2 Diseño del algoritmo

Las características de un algoritmo son:

1. Debe tener un punto particular de inicio.
2. Debe ser definido, no debe permitir dobles interpretaciones.
3. Debe ser general, es decir, soportar la mayoría de las variantes que se puedan presentar en la definición del problema.

1.5.3 Codificación

La codificación es la operación de escribir la solución del problema (de acuerdo a la lógica del diagrama de flujo), en una serie de instrucciones detalladas, en un código reconocible por la computadora, la serie de instrucciones detalladas se le conoce como código fuente, el cual se escribe en un lenguaje de programación o lenguaje de alto nivel.

1.5.4 Prueba y depuración

Los errores humanos dentro de la programación de computadoras son muchos y aumentan considerablemente con la complejidad del problema. El proceso de identificar y eliminar errores, para dar paso a una solución sin errores se le llama depuración.

La depuración o prueba resulta una tarea tan creativa como el mismo desarrollo de la solución, por ello se debe considerar con el mismo interés y entusiasmo.

Resulta conveniente realizar una revisión a detalle para una completa depuración, ya que de este trabajo depende el éxito de nuestra solución.

1.5.5 Documentación

Es la guía o comunicación escrita en sus variadas formas, ya sea en enunciados, procedimientos, dibujos o diagramas. A menudo un programa escrito por una persona, es usado por otra. Por ello la documentación sirve para ayudar a comprender o usar un programa o para facilitar futuras modificaciones (mantenimiento). La documentación se divide en tres partes:

- Documentación Interna
- Documentación Externa
- Manual del Usuario

Documentación Interna: Son los comentarios o mensaje que se añaden al código fuente para hacer mas claro el entendimiento de un proceso.

Documentación Externa: Se define en un documento, con los siguientes puntos:

- Descripción del Problema
- Nombre del Autor
- Algoritmo (diagrama de flujo o pseudocódigo)
- Diccionario de Datos
- Código Fuente (programa)

Manual del Usuario: Describe paso a paso la manera como funciona el programa, con el fin de que el usuario obtenga el resultado deseado.

1.5.6 Mantenimiento

Se realiza después de terminado el programa, cuando se detecta que es necesario hacer algún cambio, ajuste o complementación al programa para que siga trabajando de manera correcta. Para poder realizar este trabajo se requiere que el programa este correctamente documentado.

CAPÍTULO II

TEORÍA SOBRE REACTORES

2.1.0 CONCEPTOS GENERALES

2.1.1 Estado Estacionario

Es el estado en el cual las propiedades del sistema permanecen constantes a través del tiempo.

2.1.2 Flujo Ideal

En él, la circulación del fluido presenta uniformidad, por lo que en este no existen zonas de estancamiento, adelantamientos o retrasos de cada molécula del fluido con respecto de las demás.

2.1.3 Sistema Homogéneo

Es el sistema formado por una sola fase.

2.1.4 Reactor

Es el equipo donde se realizan las reacciones químicas

2.1.5 Reacción Química

Es el proceso en el que una o más sustancias —los reactivos— se transforman en otras sustancias diferentes —los productos de la reacción. En una reacción química se conserva el número de átomos y la masa original, pero se redistribuye el material en nuevas estructuras.

2.1.6 Reacciones Simples

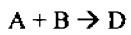
Cuando una reacción se lleva a cabo de tal forma que pueda ser representada por una sola ecuación estequiométrica y una sola ecuación cinética, afirmamos que es simple.



2.1.7 Reacciones Elementales

Es el tipo de reacción en las que la ecuación cinética corresponde a una ecuación estequiométrica.

Ecuación estequiométrica

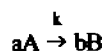


Ecuación cinética

$$-r_A = k[A][B]$$

2.2.0 VELOCIDAD DE REACCIÓN

Consideremos la siguiente reacción:



La velocidad con que transcurre queda expresada en función de la concentración y del coeficiente k . Aunque es posible sustituir la concentración por una magnitud proporcional a la misma, por ejemplo las presiones parciales.

$$-r_A = k [A]^a \quad \text{Expresa la velocidad con la que desaparece A}$$

$$r_A = k [B]^b \quad \text{Expresa la velocidad con la que aparece B}$$

El orden de reacción (n) es el exponente al que están elevadas las concentraciones, para la reacción anterior es de orden a con respecto de A y de orden b con respecto de B .

El coeficiente cinético k tiene las dimensiones \Rightarrow Concentración¹⁻ⁿ / tiempo

La concentración \Rightarrow mol / volumen

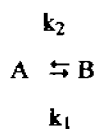
La velocidad $r_A \Rightarrow$ moles de producto que aparecen / volumen x tiempo

2.3.0 EQUILIBRIO

2.3.1 Dependencia de la Temperatura Según la Termodinámica.

La influencia de la temperatura sobre la constante de equilibrio en reacciones elementales reversibles, está dada por la ecuación de Van't Hoff.

$$\frac{d(\ln K_{eq})}{dT} = \frac{\Delta H_r}{RT^2}$$



$$\frac{k_1}{k_2} \frac{[B]}{[A]} = K_{eq}$$

$$\left[\frac{d \ln(k_1 - k_2)}{dT} \right] = \Delta H_r / RT^2$$

$$\left(\frac{d \ln k_1}{dT} \right) - \left(\frac{d \ln k_2}{dT} \right) = \Delta H_r / RT^2$$

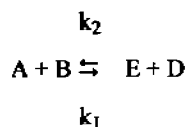
$$\left(\frac{d \ln k_1}{dT} \right) = E_1 / RT^2 \quad y$$

$$\left(\frac{d \ln k_2}{dT} \right) = E_2 / RT^2$$

Donde: $E_1 - E_2 = \Delta H_r$

2.3.2 De Acuerdo a la Cinética

Cinéticamente el sistema está en equilibrio si son iguales las velocidades directas e inversas de todas las reacciones elementales.



reacción directa $-r_A = k_1 [A][B]$

reacción inversa $r_A = k_2 [E][D]$

Al equilibrio: $k_1 [A][B] = k_2 [E][D]$

$$\frac{k_1 [E][D]}{k_2 [A][B]} = \text{Kequilibrio}$$

Por otro lado la ecuación de Van't Hoff nos dice que:

$$\frac{d(\ln \text{Keq.})}{dT} = \frac{\Delta H_r}{RT^2}$$

Valuando de T_2 a T_1

$$\ln (K_2 / K_1) = (-\Delta H_r / R) [(1 / T_2) - (1 / T_1)]$$

Donde los coeficientes 1, indican las condiciones de referencia y los coeficientes 2 son las condiciones a las cuales obtendremos un nuevo valor de X_A en el equilibrio, es decir: Si conocemos ΔH_r , K_1 y T_1 , lo que haremos será asignar un valor a T_2 y calcular K_2 y como $K_2 = [\text{productos}] / [\text{reactivos}]$ concluimos que $X_A \text{ eq} = f(T_2)$.

Curvas de equilibrio (temperatura vs conversión), para sistemas reversibles endotérmicos y exotérmicos.

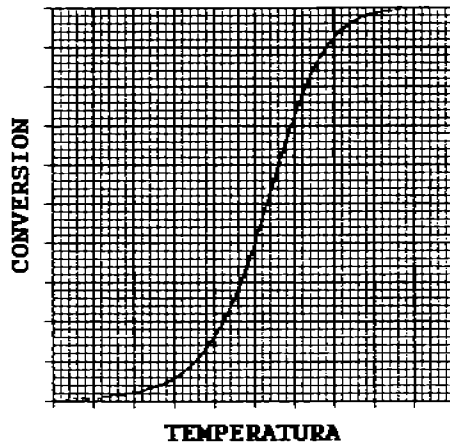


Figura 2.3.1a Reacción reversible endotérmica

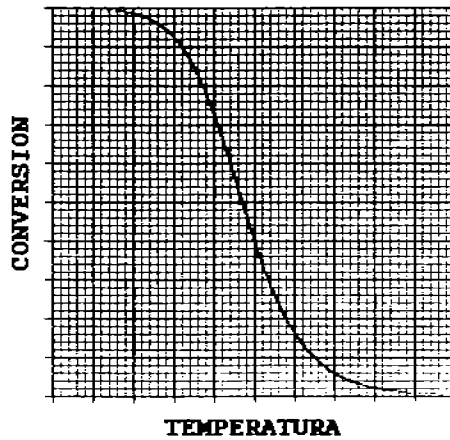


Figura 2.3.1b Reacción reversible exotérmica

2.4.0 INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA SOBRE LA VELOCIDAD DE REACCIÓN.

2.4.1 Ecuación de Arrhenius.

Para las reacciones elementales, la expresión de la velocidad puede escribirse como producto de un factor dependiente de la temperatura por otro dependiente de la composición.

$$r_i = f_1(\text{temperatura}) * f_2(\text{composición})$$

$$f_1(\text{temperatura}) = k = k_0 e^{-E/RT}$$

k = factor dependiente de la temperatura

k_0 = factor de frecuencia

E = energía de activación

R = cte. universal de los gases

T = temperatura

2.5.0 REACTOR DE FLUJO DE MEZCLA COMPLETA EN ESTADO ESTACIONARIO

Es el reactor en el que su contenido esta perfectamente agitado, y su composición en cada instante es la misma en todos los puntos del reactor. Por consiguiente, la corriente de salida de este reactor tiene la misma composición que la del fluido contenido en el mismo.

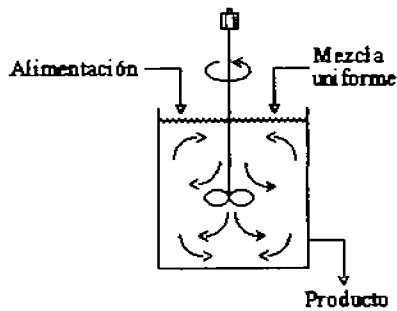


Figura 2.5.0a Reactor de mezcla completa (CSTR).

El balance será referido al componente A:

Entrada = salida + desaparición + acumulación

entrada (mol/tiempo): $F_{A0}(1-X_{A0})$

salida (mol/tiempo): $F_{A0}(1-X_A)$

desaparición (mol/tiempo): $-r_A V$

acumulación: 0

Sustituyendo en la ecuación de balance obtenemos:

$$F_{A0}(1-X_{A0}) = F_{A0}(1-X_A) - r_A V$$

$$F_{A0} - F_{A0} X_{A0} = F_{A0} - F_{A0} X_A - r_A V$$

$$-F_{A0} X_{A0} + F_{A0} X_A = -r_A V$$

$$[(X_{AF} - X_{A0}) / -r_A] = V / F_{A0}$$

Ecuación 2.5.0

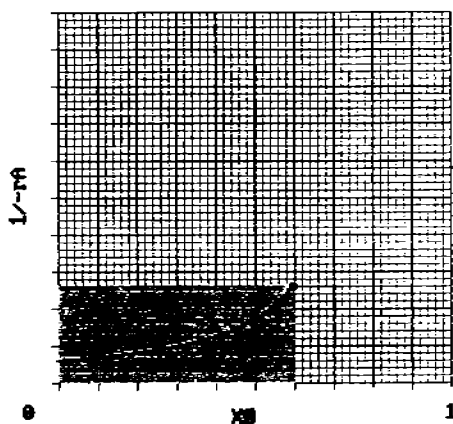


Figura 2.5.0b Representación gráfica para la ecuación de diseño de un CSTR

Las condiciones de operación para el CSTR están indicadas por el punto marcado dentro del gráfico anterior y el área del rectángulo formado por este punto representa el valor de V / F_{A0} .

2.6.0 REACTOR DE FLUJO EN PISTÓN EN ESTADO ESTACIONARIO.

En un reactor de flujo en pistón la composición del fluido varía con la coordenada de la posición en la dirección del flujo; en consecuencia, el balance de materia para un componente de la reacción ha de referirse a un elemento diferencial de volumen dV . Así para el reactante A:

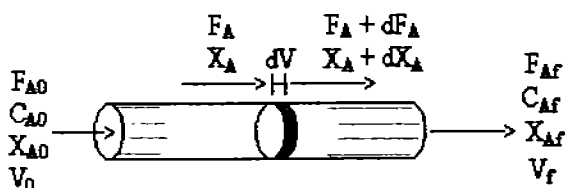


Figura 2.6.0a Reactor de flujo en pistón (PFR).

entrada = salida + desaparición + acumulación

Entrada (mol/tiempo): F_A

Salida (mol/tiempo): $F_A + dF_A$

Desaparición (mol/tiempo): $-r_A dV$

Acumulación: 0

Sustituyendo cada termino: $F_A = (F_A + dF_A) + (-r_A)dV$

$$-dF_A = (-r_A)dV$$

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

$$-d[F_{A0}(1-X_A)] = (-r_A)dV$$

$$-dF_{A0} + dF_{A0}X_A = (-r_A)dV$$

$$F_{A0}dX_A = (-r_A)dV$$

$$dX_A / (-r_A) = dV / F_{A0}$$

$$\int_0^V dV / F_{A0} = \int_{X_{A0}}^{X_{AF}} dX_A / -r_A$$

$$V / F_{A0} = \int_{X_{A0}}^{X_{AF}} dX_A / -r_A$$

El área marcada en el siguiente grafico representa el valor de V / F_{A0}

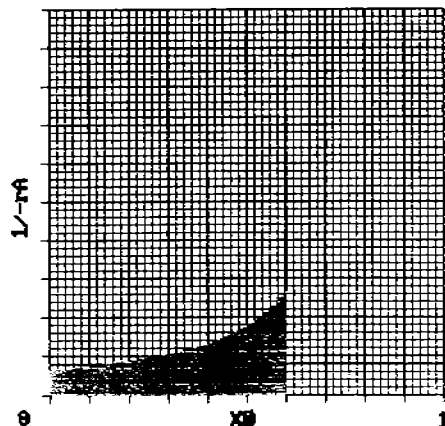


Figura 2.6.0b Representación gráfica para la ecuación de diseño de un PFR

2.7.0 REACTORES DE FLUJO EN PISTÓN EN SERIE

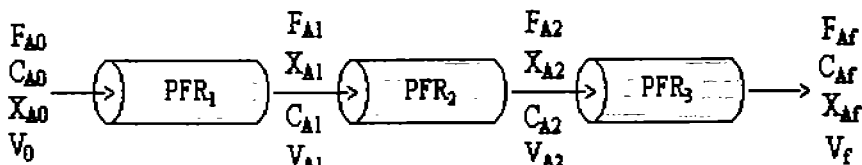


Figura 2.7.0a Reactores de flujo en pistón en serie.

$$V_T / F_{A0} = \int_{X_{A0}}^{X_{A1}} \frac{dX_A}{-r_A} + \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A} + \dots + \int_{X_{AN-1}}^{X_{AN}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

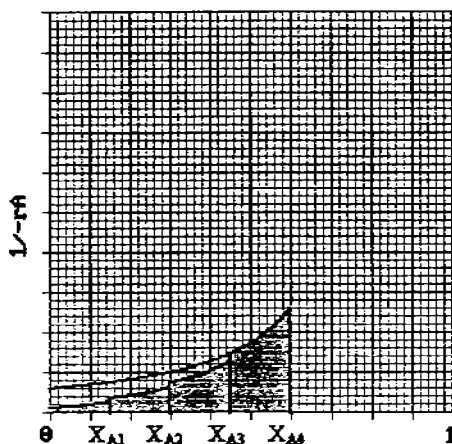


Figura 2.7.0b Representación gráfica para un arreglo de reactores PFR en serie

La línea que se encuentra por encima de las superficies, indica cual sería el área si se este proceso se lleva a cabo en un solo reactor, evidentemente una serie de reactores disminuirá el volumen total necesario para realizar este proceso.

2.8.0 REACTORES DE FLUJO EN MEZCLA COMPLETA EN SERIE.

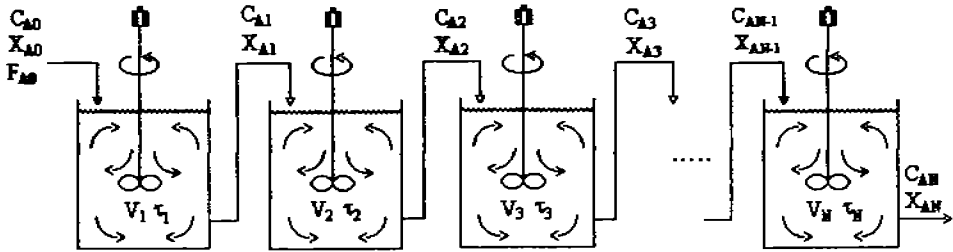


Figura 2.8.0a Reactores de mezcla completa en serie.

$$V_T / F_{A0} = [(X_{A1} - X_{A0}) / -r_{A1}] + [(X_{A2} - X_{A1}) / -r_{A2}] + \dots + [(X_{AN} - X_{AN-1}) / -r_{AN}]$$

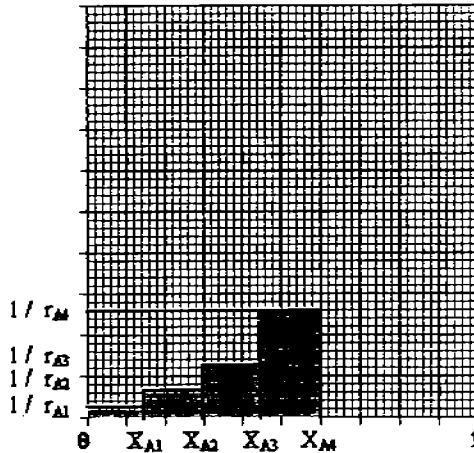


Figura 2.8.0 b Representación gráfica para un arreglo de reactores CSTR en serie

De igual manera que en el arreglo del punto 2.7.0, aquí también es notorio que para alcanzar una conversión determinada, se ocupa un menor volumen del sistema cuando se utilizan arreglos en serie, que cuando se utiliza un solo reactor.

2.9.0 ARREGLOS COMBINADOS DE REACTORES

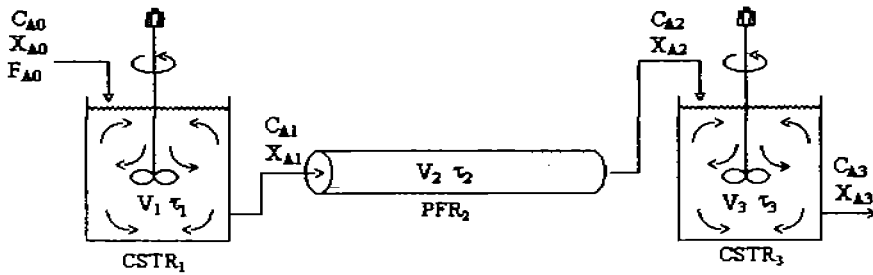


Figura 2.9.0a Reactores CSTR y PFR en arreglo combinado en serie.

$$\text{CSTR}_1 \quad V_1 / F_{A0} = X_{A1} - X_{A0} / -r_{A1}$$

$$\text{PFR}_2 \quad V_2 / F_{A0} = \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$$\text{CSTR}_3 \quad V_3 / F_{A0} = X_{A3} - X_{A2} / -r_{A3}$$

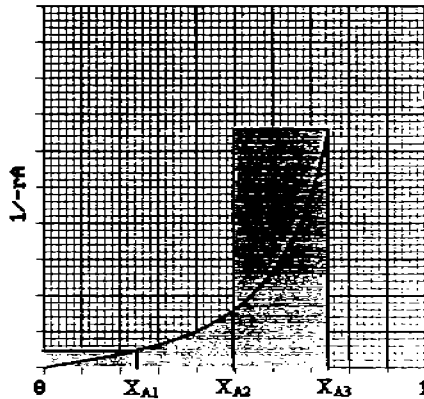


Figura 2.9.0b Representación gráfica para un arreglo de reactores combinados en serie.

2.10.0 REACTOR CON RECIRCULACIÓN

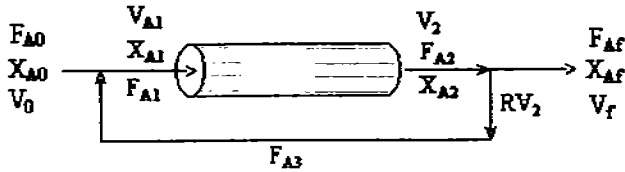


Figura 2.10.0a Reactor PFR con recirculación.

Donde $R = (\text{caudal que retorna a la entrada del reactor}) / (\text{caudal que sale del sistema})$

La ecuación de diseño para este reactor es la siguiente:

$$V / F_{A1} = \int_{X_{A1}}^{X_{Af}} dX_A / -r_A$$

Resulta claro que las variables que debemos de definir antes de utilizar esta ecuación son F_{A1} y X_{A1} . Del diagrama anterior podemos obtener la información que requerimos para la determinación de ambas.

$$F_{A1} = F_{A3} + F_{A0}$$

$$F_{A1} = R F_{A0} + F_{A0}$$

$$F_{A1} = (R+1)F_{A0}$$

$$\text{En tanto que } X_{A1} = (R / R+1) X_{Af}$$

Sustituyendo cada termino en la ecuación de diseño:

$$V / (R+1)F_{A0} = \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad \text{Ecuación 2.10.0}$$

$$(R / R+1) X_{Af}$$

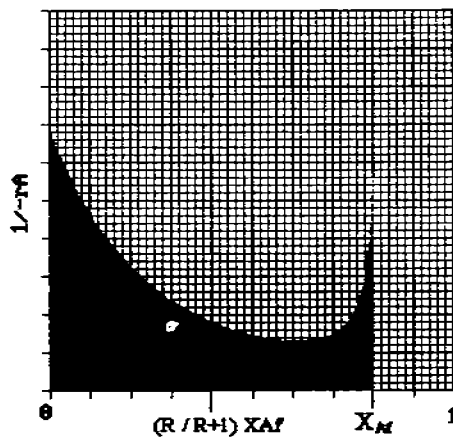


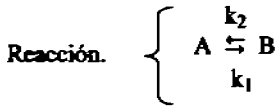
Figura 2.10.0b Representación para la ecuación de diseño de un PFR con recirculación

La recirculación produce una retromezcla entre la corriente del producto de salida y la corriente de reactivo de entrada. El tamaño de relación de recirculación nos lleva a dos aproximaciones:

$R \rightarrow 0$, flujo en pistón

$R \rightarrow \infty$, flujo en mezcla completa.

2.11.0 TRAZO DE LAS CURVAS DE VELOCIDAD DE REACCIÓN.



Definición de las concentraciones en función de la conversión. $\left\{ \begin{array}{l} [A] = C_{A0}(1-X_A) \\ [B] = X_A \end{array} \right.$

Ecuación de Arrhenius donde se precisa el valor del coeficiente k en función de la temperatura. $\left\{ \begin{array}{l} k_1 = k_{10} e^{-E_1/RT} \\ k_2 = k_{20} e^{-E_2/RT} \end{array} \right.$

Sustituyendo en la ecuación de velocidad:

$$-r_A = k_1[A] - k_2[B]$$

$$-r_A = k_{10} e^{-E_1/RT} (C_{A0}(1-X_A)) - k_{20} e^{-E_2/RT} (X_A)$$

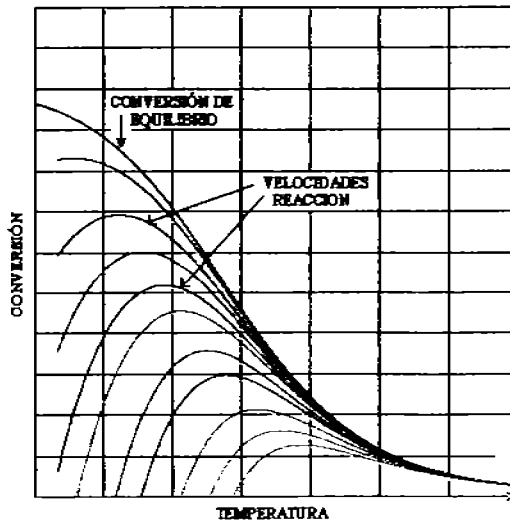


Figura 2.11.0 Representación grafica para la ecuación de velocidad en función de la temperatura y la conversión: $-r_A = f(T, X_A)$

2.12.0 TIPOS DE OPERACIÓN

2.12.1 Operación Sobre la Ruta Térmica Óptima

En las reacciones exotérmicas reversibles hay dos factores en oposición, cuando se eleva la temperatura aumenta la velocidad de la reacción directa, pero disminuye la conversión máxima. Por lo que la línea de operación para estos reactores está situada sobre los puntos de velocidad máxima como se muestra en el gráfico, a esta forma de la línea de operación se le denomina ruta térmica óptima. Como puede observarse el reactor que puede operar de esta manera será el PFR ya que en este es posible imponer un perfil de temperaturas a lo largo del mismo.

2.12.2 Operaciones Isotérmicas.

Para lograr que un reactor opere en condiciones isotérmicas es necesario remover o introducir calor al reactor, dependiendo de la naturaleza del sistema. Operar isotérmicamente puede ser necesario en los casos en los que exista el riesgo de que ocurran reacciones indeseadas o incluso la descomposición del producto de interés. De los tres tipos de operación analizados en este trabajo las isotérmicas son las que requieren de un reactor de mayor volumen.

2.12.3 Operaciones Adiabáticas.

Las operaciones adiabáticas se caracterizan por su aislamiento térmico con el exterior. En consecuencia el sistema que es sometido a una operación como esta, incrementará su temperatura (exotérmica) o la disminuirá (endotérmica) durante el transcurso de la reacción química. Una manera de controlar los cambios de temperatura en el sistema, es mediante la introducción de material inerte, en tanto sea mayor la cantidad de este con respecto al material reaccionante el sistema tendrá un comportamiento próximo al isotérmico.

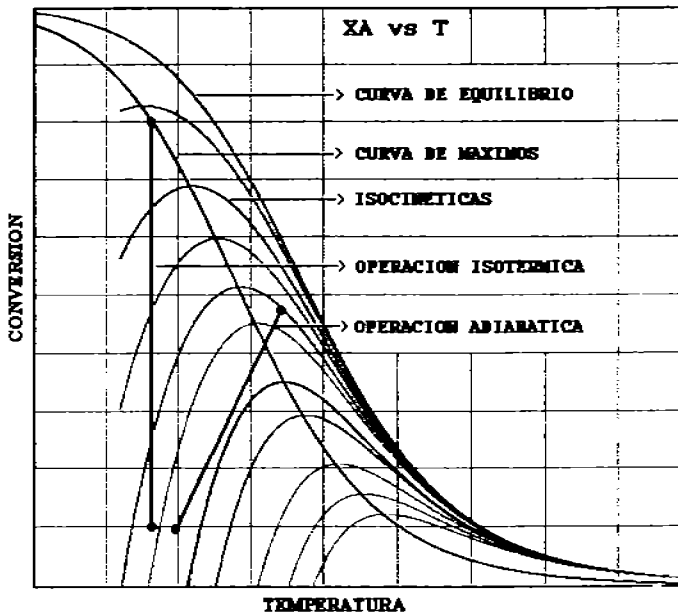


Figura 2.12.0 Curvas de operación de los procesos analizados en el programa

- La operación sobre la ruta térmica sigue la misma trayectoria que la curva de máximos.
- La operación isotérmica tiene una trayectoria perpendicular.
- En el caso de las líneas de operación adiabática se observa cierta inclinación, esta puede ser modificada al introducir inertes, con la intención de que las líneas de operación se aproximan a la perpendicular.
- Para el PFR la temperatura del fluido en el reactor se desplaza a lo largo de la línea de operación.
- Para el CSTR, el fluido alcanza inmediatamente el valor final que se lee sobre la línea.

CAPÍTULO III

INTERPRETACIÓN DE ECUACIONES

3.1.0 HERRAMIENTAS MATEMÁTICAS

3.1.1 Método De Newton-Raphson

Este método encuentra una raíz, siempre y cuando se conozca una estimación inicial para la raíz deseada. Utiliza las rectas tangentes que se evalúan analíticamente. Se hace una estimación inicial simple (X_1), que no esté muy lejos de una raíz, con ella se evalúa la función $f(X_1)$ y se efectúa un desplazamiento a lo largo de la tangente hacia su intersección con el eje X, y se toma esta como la siguiente aproximación. Esto continúa hasta que los valores X sucesivos están próximos o el valor de la función esta suficientemente cerca de cero.

$$\tan \theta = f(X_1) / (X_1 - X_2) = f'(X_1)$$

$$X_2 = X_1 - [f(X_1) / f'(X_1)] \quad \text{..... Fórmula de recurrencia} \quad \text{Ecuación 3.1.1}$$

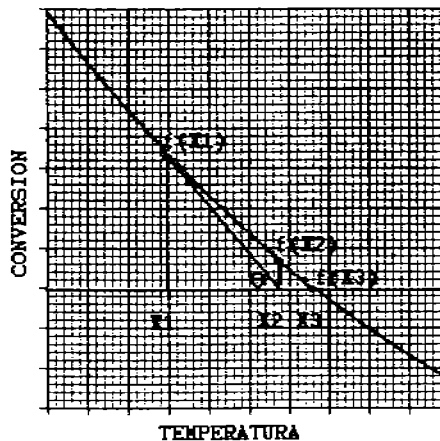


Figura 3.1.1 Representación gráfica del método de Newton

El método nos dará la solución buscada de acuerdo a la aproximación deseada. La variable independiente es la temperatura y su aproximación será de 0.001°K .

$$|X_2 - (X_1 - [f(X_1) / f'(X_1)])| < 0.001$$

3.1.2 Derivación de Funciones Implícitas

La ecuación: $f(x, y) = 0$, define a x o y , cualquiera de las dos, como una función implícita una de la otra. En el transcurso de este trabajo encontraremos ecuaciones donde es imposible despejar el término X_A por lo que tendremos ecuaciones donde las variables dependiente e independiente se encontrarán del mismo lado de la ecuación.

$$f(T, X_A) = 0$$

Para derivar implícitamente utilizaremos la siguiente ecuación:

$$f'(T, X_A) = \frac{d X_A}{d T} = - \frac{\partial f(T, X_A) / \partial T}{\partial f(T, X_A) / \partial X_A} \quad \text{Ecuación 3.1.2a}$$

Para los casos en los que esta derivada será igualada a cero, la ecuación quedará simplificada:

$$f'(T, X_A) = \frac{d X_A}{d T} = 0$$

$$- \frac{\partial f(T, X_A) / \partial T}{\partial f(T, X_A) / \partial X_A} = 0$$

$$- \partial f(T, X_A) / \partial T = 0 \quad \text{Ecuación 3.1.2b}$$

La ecuación 3.1.2b nos dice que derivaremos parcialmente la ecuación respecto de T manteniendo a X_A constante, de esta manera realizaremos las derivadas necesarias en los trazos de las curvas de equilibrio y de máximos de las isocinéticas.

3.1.3 Integración Aproximada

Cuando es complicado obtener analíticamente una integral es recomendable calcularla mediante algún método gráfico, que nos proporcionará un valor aproximado al exacto. Consideremos la integral de la función $r_A^{-1} = f(X_A)$, como una área, independientemente de su significado físico. Tomando como premisa que la integral representa un área, es posible calcularla gráficamente, esto se hará posible al seccionarla en trapecios:

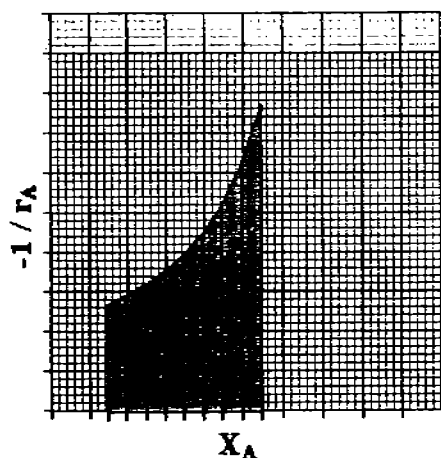


Figura 3.3.1a Área total seccionada.

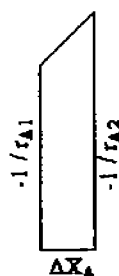


Figura 3.3.1b Una sección del área total.

$$\text{Área (trapecio)} = (B + b) h / 2$$

$$\text{Área} = (1/r_{A1} + 1/r_{A2}) \Delta X_A / 2$$

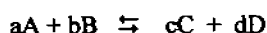
Ecuación 3.1.3a

$$\text{Área}_T = [(1/r_{A1} + 1/r_{A2}) + (1/r_{A2} + 1/r_{A3}) + \dots + (1/r_{AN-1} + 1/r_{AN})] \Delta X_A / 2 \quad \text{Ec. 3.1.3b}$$

Las integrales calculadas gráficamente mediante el programa, cuentan con secciones de $\Delta X_A = 0.001$, lo que asegura que el valor del área así obtenida es prácticamente el mismo que se obtendría si fuera calculada analíticamente.

3.2.0 ESTEQUIOMETRÍA DE LA REACCIÓN

La ecuación estequiométrica base con la que se desarrolló el programa es la siguiente:



Los coeficientes y concentraciones que resultan de esta ecuación así como su respectiva notación dentro del programa se enlistan en la tabla 3.2.0:

Tabla 3.2.0a Notación para la estequiometría de la reacción

DATO	NOTACIÓN
Coeficientes	
a	A
b	B
c	C
d	D
Concentraciones	
C_A	CA
C_B	CB
C_C	CC
C_D	CD

El reactivo limitante será identificado mediante el cálculo de la razón entre la concentración y su respectivo coeficiente:

$$C_{A0}/a \quad \text{y} \quad C_{B0}/b$$

El menor valor de las dos relaciones anteriores nos dará la identidad del reactivo limitante. *En el transcurso de este trabajo consideraremos a C_{A0} como el reactivo limitante.*

* El subíndice (0) representa los valores iniciales de concentración.

A continuación es presentada la tabla de variaciones molares donde son definidas las concentraciones de cada reactante y producto.

	aA	+	bB	⇌	cC	+	dD
Entrada	C_{A0}		C_{B0}		-		-
Salida	$C_{A0}(1-X_A)$		$C_{B0} - bC_{A0}X_A/a$		$cC_{A0}X_A/a$		$dC_{A0}X_A/a$

Tabla 3.2.0b Concentraciones de productos y reactivos en función de X_A

$C_{A0}(1-X_A)$	→	C_A
$C_{B0} - bC_{A0}X_A/a$	→	C_B
$cC_{A0}X_A/a$	→	C_C
$dC_{A0}X_A/a$	→	C_D

Dentro del programa la notación de las propiedades del reactivo limitante son, concentración (CAR) y coeficiente estequiométrico (L). Etiquetar estas propiedades nos permite trabajar sin importar cual de los reactivos es el limitante.

3.3.0 DEFINICIÓN DE ∇C_p y K_{eq}

$$\nabla C_p = C_p(\text{productos}) - C_p(\text{reactivos})$$

$$\nabla C_p = [cC_{pC} + dC_{pD}] - [aC_{pA} + bC_{pB}]$$

$$K_{eq} = [\text{PRODUCTOS}] / [\text{REACTIVOS}]$$

$$K_{eq} = [cC_{A0}X_A/a]^c [dC_{A0}X_A/a]^d / ([C_{A0}(1-X_A)]^a [C_{B0} - bC_{A0}X_A/a]^b)$$

3.4.0 TRAZO DE LA CURVA DE EQUILIBRIO

A partir de la ecuación de Van't Hoff, obtendremos la ecuación que describe el trazo de la curva de equilibrio dentro del plano T vs X_A .

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H_r}{RT^2} \quad \text{Ecuación 3.4.0a}$$

Resolviendo 3.4.0

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

$$\int_{K_0}^{K_1} R d \ln K = \int_{T_0}^{T_1} \frac{\Delta H_r}{T^2} dT$$

$$R \ln (K_1 / K_0) = -\Delta H_r [(1/T_1) - (1/T_0)] \quad \text{Ecuación 3.4.0b}$$

Donde T_0 es la temperatura de referencia en la que esta basada la constante de equilibrio K_0 , y T_1 es la temperatura a la que será calculada K_1 .

Por definición:

$$K_1 = [cC_{A0}X_A / a]^c [dC_{A0}X_A / a]^d / ([C_{A0}(1-X_A)]^a [C_{B0} - bC_{A0}X_A / a]^b)$$

Igualando a cero la ecuación 3.4.0b obtenemos:

$$-\Delta H_r [(1/T_1) - (1/T_0)] - R \ln (K_1 / K_0) = 0 \quad \text{Ecuación 3.4.0c}$$

Tabla 3.4.0 Notación en el programa para los términos contenidos en la ecuación 3.4.0c

DATO	NOTACIÓN
R	CGI
K ₀	KE
K ₁	K
T ₀	TH
T	TR
T ₁	TD
ΔH _r	DH

La aplicación del método de Newton al trazo de la curva de equilibrio queda de la siguiente forma:

$$T_1 = T_i - [f(T, X_A) / f'(T, X_A)]$$

$$f(T, X_A) = -\Delta H_r [(1/T_1) - (1/T_0)] - R \ln (K_1 / K_0)$$

$$f'(T, X_A) = -\Delta H_r / T_1^2$$

Las instrucciones sobre el trazo de la curva reequilibrio se encuentran entre las instrucciones 200 y 270 del programa. La secuencia se enumera a continuación.

1. Asignar un valor a X_A (en el programa elegimos 0.001)
2. Sustituirlo en las ecuaciones
3. Aplicar el método de Newton para encontrar la T que satisfaga la ecuación
4. Teniendo el par (T, X_A) marcar el punto respectivo dentro del gráfico
5. Dar un incremento de 0.001 a el valor de X_A
6. Regresar al punto numero 2 hasta que el valor de X_A sea 0.999

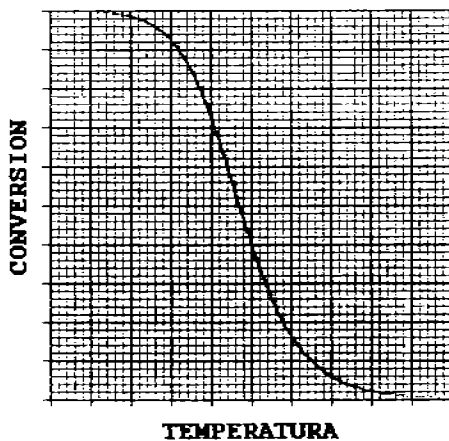
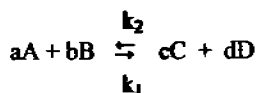


Figura 3.4.0 Curva de equilibrio

3.5.0 TRAZO DE LA CURVA DE MÁXIMOS



$$-r_A = k_1[A]^a[B]^b - k_2[C]^c[D]^d$$

De la ecuación de arrhenius tenemos que: $k = k_0 e^{-E/RT}$

$$k_1 = k_{10} e^{-E_1/RT}$$

$$k_2 = k_{20} e^{-E_2/RT}$$

Sustituyendo:

$$-r_A = k_{10} e^{-E_1/RT} C_A^a C_B^b - k_{20} e^{-E_2/RT} C_C^c C_D^d \quad \text{Ecuación 3.5.0a}$$

Para definir completamente la ecuación de velocidad es necesario sustituir en la ecuación 3.5.0a las concentraciones de los reactivos y productos participantes en la reacción química que están tabulados en la 3.2.0b. Omitimos esta sustitución por razones de espacio.

Tabla 3.5.0 Notación en el programa para la ecuación 3.5.0a

DATO	NOTACIÓN
k_{10}	K1
k_{20}	K2
E_1	EA1
E_2	EA2

Para cada valor de $-r_A = f(T, X_A)$ es posible trazar una curva. Sin embargo en el programa omitimos el trazo de cada curva y consideramos el trazo de una sola, esta es la que pasa justo en el punto máximo de cada una de las curvas de velocidad, la llamaremos curva de máximos. Cada uno de los puntos que conforman esta curva indica el valor de conversión máxima para cada velocidad de reacción. Para obtener dicha curva tendremos que obtener la derivada de la ecuación 3.5.0a e igualarla a cero, una vez obtenida aplicaremos en ella el método de Newton-Raphson.

$$f(T, X_A) = r_A + k_{10} e^{-E_1/RT} [C_A]^a [C_B]^b - k_{20} e^{-E_2/RT} [C_C]^c [C_D]^d$$

$$f'(T, X_A) = \frac{-E_1 k_{10} e^{-E_1/RT} [C_A]^a [C_B]^b}{RT^2} + \frac{E_2 k_{20} e^{-E_2/RT} [C_C]^c [C_D]^d}{RT^2}$$

Como los denominadores son iguales la expresión queda reducida a:

$$-E_1 k_{10} e^{-E_1/RT} [C_A]^a [C_B]^b + E_2 k_{20} e^{-E_2/RT} [C_C]^c [C_D]^d = 0 \quad \text{Ecuación 3.5.0b}$$

La ecuación 3.5.0b describe la trayectoria de la curva de máximos de las isocinéticas. Daremos solución a esta ecuación aplicando el método de Newton:

$$f(T, X_A) = -E_1 k_{10} e^{-E_1/RT} [C_A]^a [C_B]^b + E_2 k_{20} e^{-E_2/RT} [C_C]^c [C_D]^d$$

$$f'(T, X_A) = \frac{(E_1)^2 k_{10} e^{-E_1/RT} [C_A]^a [C_B]^b}{RT^2} - \frac{(E_2)^2 k_{20} e^{-E_2/RT} [C_C]^c [C_D]^d}{RT^2}$$

$$T = T_i - \{ f(T, X_A) / f'(T, X_A) \}$$

Las instrucciones sobre el trazo de la curva de equilibrio se encuentran entre las instrucciones 300 y 390 del programa. La secuencia se enumera a continuación.

1. Asignar un valor a X_A (en el programa elegimos 0.001)
2. Sustituirlo en las ecuaciones
3. Aplicar el método de Newton para encontrar la T que satisfaga la ecuación
4. Trazando el par (T, X_A) marcar el punto respectivo dentro del gráfico
5. Dar un incremento de 0.001 a el valor de X_A
6. Regresar al punto numero 2 hasta que el valor de X_A sea 0.995

La curva obtenida con este procedimiento es la que se encuentra por debajo de la curva de equilibrio.

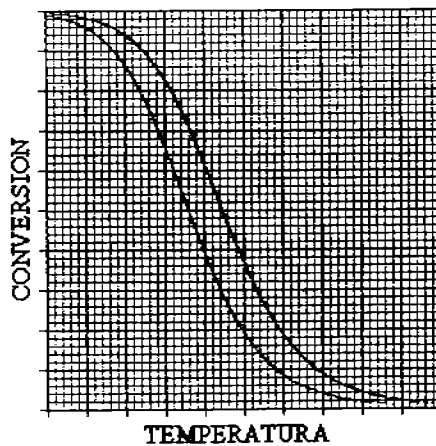


Figura 3.5.0 Curva de máximos de las Isocinéticas (curva inferior).

Tabla 3.5.0 Notación en el programa para la ecuación 3.5.0a

DATO	NOTACIÓN
k_{10}	K1
k_{20}	K2
E_{10}	EA1
E_{20}	EA2

3.6.0 LÍNEA DE OPERACIÓN ISOTÉRMICA

La línea de operación isotérmica es una recta vertical que une los puntos (T_0, X_{A0}) y (T_F, X_{AF}) , en este tipo de operación a conversiones distintas corresponde un mismo valor de temperatura. Los subíndices 0 y 1 representan las propiedades del sistema al inicio y final de la operación.

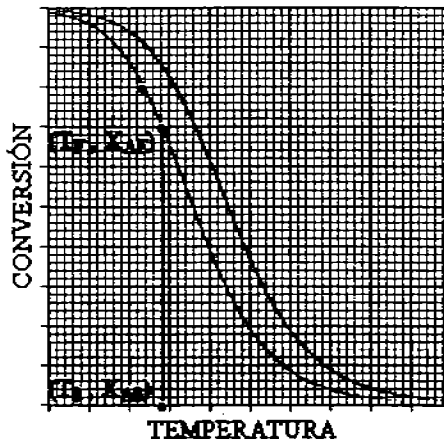


Figura 3.6.0 Línea de operación isotérmica.

El reactor CSTR no tiene propiamente una línea de operación si no más bien un punto de operación, que se encuentra situado al final de la línea de operación isotérmica. El reactor PFR presenta una línea de operación que describe el comportamiento del sistema durante el transcurso de la reacción. La notación utilizada en el programa se tabula a continuación:

Tabla 3.6.0 Notación en el programa para operaciones isotérmicas

DATO	NOTACIÓN
T_0	TA
T_F	TA
X_{A0}	XF
X_F	XM

3.6.1 Operación Isotérmica en un CSTR

En un CSTR solo se trata de evaluar a $-r_A$ (Ec. 3.5.0a) en el punto que se encuentra al final de la línea de operación (T_F, X_{AF}) marcado en la figura 3.6.0. Una vez calculada la velocidad se obtiene el valor de V / F_{A0} (Ec. 2.5.0).

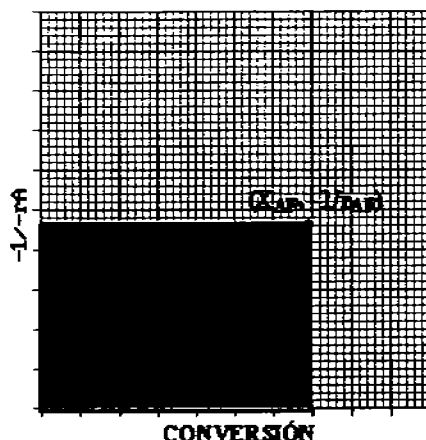


Figura 3.6.1 Cálculo gráfico de V / F_{A0} para un CSTR

$$V / F_{A0} = [(X_{AF} - X_{A0}) / -r_A] \quad \text{Ecuación 2.5.0}$$

$$-r_A = k_{10} e^{-E_1/RT} C_A^a C_C^c - k_{20} e^{-E_2/RT} C_B^b C_D^d \quad \text{Ecuación 3.5.0a}$$

$$V / F_{A0} = (X_{AF} - X_{A0}) / [k_{10} e^{-E_1/RT} C_A^a C_C^c - k_{20} e^{-E_2/RT} C_B^b C_D^d] \quad \text{Ecuación 3.6.1}$$

La ecuación 3.6.1 expresa el valor V / F_{A0} para un CSTR que opera de manera isotérmica. El valor de F_{A0} es un dato por lo que para calcular el volumen del reactor debe hacerse un sencillo despeje.

3.6.2 Operación Isotérmica en un PFR

En un PFR para cada uno de los puntos (X_A , T) obtendremos un valor de $-r_A$ por medio de la ecuación 3.5.0a, cada valor de la velocidad será acompañada por la X_A con la que fue calculada. De esta manera formaremos un punto en el plano X_A vs $1/r_A$ y su vez cada par de estos puntos formaran los trapecios descritos en el punto 3.1.3.

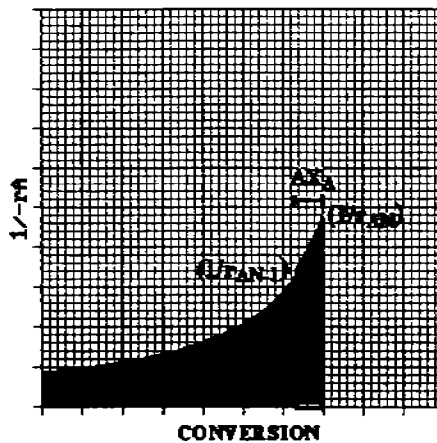


Figura 3.6.2 Cálculo gráfico de V / F_{A0} para un PFR

$$-r_A = k_{10} e^{-E_1/RT} C_A^a C_B^b - k_{20} e^{-E_2/RT} C_C^c C_D^d \quad \text{Ecuación 3.5.0a}$$

$$\text{Área} = (1/r_{A1} + 1/r_{A2}) \Delta X_A / 2 \quad \text{Ecuación 3.1.3a}$$

$$\text{Área}_T = [(1/r_{A1} + 1/r_{A2}) + (1/r_{A2} + 1/r_{A3}) + \dots + (1/r_{AN-1} + 1/r_{AN})] \Delta X_A / 2 \quad \text{Ec. 3.1.3b}$$

$$V/F_{A0} = [(1/r_{A1} + 1/r_{A2}) + (1/r_{A2} + 1/r_{A3}) + \dots + (1/r_{AN-1} + 1/r_{AN})] \Delta X_A / 2 \quad \text{Ecuación 3.6.2}$$

La ecuación 3.6.2 refiere el valor V / F_{A0} para un PFR que opera de manera isotérmica. Para la aplicación de esta ecuación se deberán calcular los valores de r_A para cada incremento de X_A . El valor de F_{A0} también aquí es un dato por lo que para calcular el volumen del reactor se debe hacer un despeje.

3.7.0 LÍNEA DE OPERACIÓN DE RUTA TÉRMICA ÓPTIMA

La curva de operación de ruta térmica óptima coincide con la curva de máximos de las isocinéticas. Esta operación solo es posible en reactores de flujo en pistón ya que en este es posible realizar procesos que describen un perfil de temperaturas. Los puntos (T, X_A) deben satisfacer la ecuación 3.5.0b. A continuación se ilustra dicha curva en el plano T vs X_A y su respectiva notación en el programa.

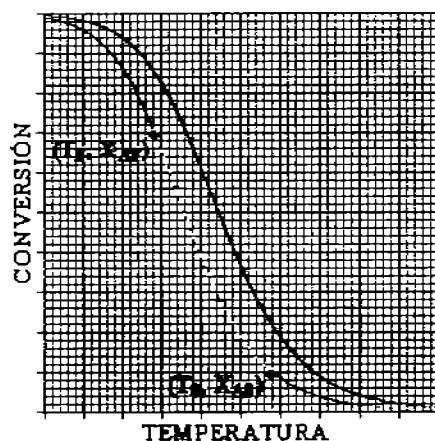


Figura 3.7.0a Línea de operación de ruta térmica óptima

Tabla 3.7.0 Notación en el programa para la operación de ruta térmica óptima

DATO	NOTACIÓN
T_0	TAI
T_F	TL
X_{A0}	XF
X_{AF}	XM

El procedimiento para la determinación de V / F_{A0} es análogo al utilizado en el PFR isotérmico, para cada uno de los puntos (X_A, T) obtendremos un valor de $-r_A$ por medio de la ecuación 3.5.0a. Cada valor de la velocidad será acompañada de su respectiva X_A , así construiremos la curva que define el área a calcular.

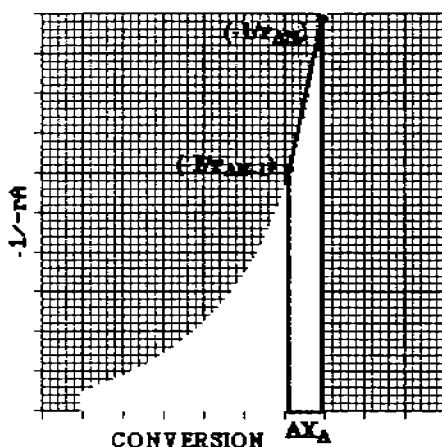


Figura 3.7.0b Cálculo gráfico de V / F_{A0} para un PFR de ruta térmica óptima

- Los puntos (T, X_A) deben satisfacer la ecuación 3.5.0b.

$$E_1 k_{10} e^{-E_1/RT} [C_A]^a [C_C]^c - E_2 k_{20} e^{-E_2/RT} [C_B]^b [C_D]^d = 0 \quad \text{Ecuación 3.5.0b}$$

- Una vez obtenidos los valores de T y X_A son sustituidos en 3.5.0a para obtener $-r_A$

$$-r_A = k_{10} e^{-E_1/RT} C_A^a C_C^c - k_{20} e^{-E_2/RT} C_B^b C_D^d \quad \text{Ecuación 3.5.0a}$$

- Con r_A calcularemos V / F_{A0} mediante 3.6.2

$$V/F_{A0} = [(1/r_{A1} + 1/r_{A2}) + (1/r_{A2} + 1/r_{A3}) + \dots + (1/r_{AN-1} + 1/r_{AN})] \Delta X_A / 2 \quad \text{Ecuación 3.6.2}$$

3.8.0 LÍNEA DE OPERACIÓN ADIABÁTICA

La línea de operación adiabática, es una línea inclinada que une los puntos (T_1, X_{A1}) y (T_2, X_{A2}) , en este tipo de operación la orientación de la inclinación depende de la naturaleza de la reacción, para una endotérmica será hacia la izquierda y para una exotérmica será hacia la derecha. La pendiente de esta línea dependerá del valor de la razón existente entre el calor absorbido por el sistema y el calor desprendido por la reacción, esta pendiente puede ser modificada mediante la introducción de material inerte.

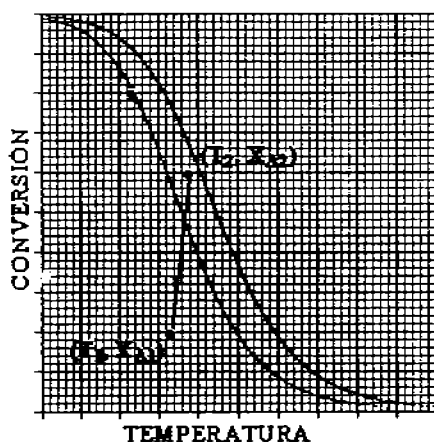
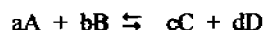


Figura 3.8.0a Línea de operación adiabática para una reacción exotérmica

A través del balance simultaneo de materia y energía definiremos la ecuación correspondiente a la línea de operación adiabática.

- Ecuación estequiométrica base.



- Balance de entalpía.

$$\text{Entrada} = \text{Acumulación} + \text{Desaparición por reacción} + \text{Salida}$$

$$\text{Entrada} = 0$$

$$\text{Acumulación} = 0$$

$$\text{Desaparecida por reacción: } \Delta H_r X_A C_{A0}$$

$$\text{Salida: } C_{pA} \Delta T [C_A] + C_{pB} \Delta T [C_B] + C_{pC} \Delta T [C_C] + C_{pD} \Delta T [C_D] + C_{pS} \Delta T [C_S]$$

Donde:

C_{pS} = Capacidad calorífica del disolvente (agua).

$[C_S]$ = Concentración del disolvente (agua).

El agua será el disolvente de los solutos A, B, C y D por lo que:

$$C_{pS} = 18 \text{ cal / mol } ^\circ\text{K}$$

Consideremos un litro de agua pura en la que agregaremos un soluto, lo anterior producirá cierta variación en el volumen de la solución, para saber cual es esta variación y obtener la concentración de esta solución, necesitamos conocer a detalle las propiedades del soluto y del disolvente. Para evitar hacer aún más complejo el balance de energía, supondremos que un gramo de soluto ocupará el mismo volumen que un gramo de disolvente.

$$\text{Gramos de agua en un litro de solución} = 1000\text{grs} - (\text{gramos de A}) - (\text{gramos de B})$$

$$[C_S] = \text{Gramos de agua en un litro de solución} / (18 \text{ gr/mol})$$

Sustituyendo en el balance:

$$0 = \Delta H_r X_A C_{A0} + C_{PA} \Delta T [C_A] + C_{PB} \Delta T [C_B] + C_{PC} \Delta T [C_C] + C_{PD} \Delta T [C_D] + C_{PS} \Delta T [C_S]$$

Ecuación 3.8.0a

Despejando ΔT de la ecuación 3.8.0a

$$\Delta T = (-\Delta H_r X_A C_{A0}) / (C_{PA} [C_A] + C_{PB} [C_B] + C_{PC} [C_C] + C_{PD} [C_D] + C_{PS} [C_S])$$

Ecuación 3.8.0b

$$\Delta T = T_{\text{salida}} - T_{\text{entrada}}$$

T_{salida} = temperatura a la que se elevará el sistema

T_{entrada} = temperatura del sistema a la entrada.

$$T_{\text{salida}} = [(-\Delta H_r X_A C_{A0}) / (C_{PA} [C_A] + C_{PB} [C_B] + C_{PC} [C_C] + C_{PD} [C_D] + C_{PS} [C_S])] + T_{\text{entrada}}$$

Ecuación 3.8.0c

Mediante la ecuación 3.8.0c trazaremos la línea de operación adiabática. La conversión de entrada y salida son datos. En tanto que la temperatura de entrada será dato cuando se trate de reactores PFR y la de salida cuando se trate de reactores CSTR.

Tabla 3.8.0 Notación en el programa para la operación adiabática

DATO	NOTACIÓN
T_0	TAI
T_F	TA
X_{A0}	XF
X_{AF}	XM

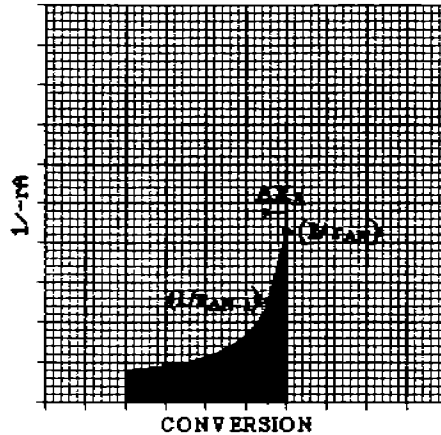


Figura 3.8.0b Cálculo gráfico de V/F_{A0} para operación adiabática.

El área resultante en el gráfico X_A Vs $-1/r_A$ se calcula de manera idéntica que para el caso de los PFR isotérmicos.

$$-r_A = k_{10} e^{-E_1/RT} C_A^a C_B^b - k_{20} e^{-E_2/RT} C_C^c C_D^d \quad \text{Ecuación 3.5.0a}$$

$$\text{Área} = (1/r_{A1} + 1/r_{A2}) \Delta X_A / 2 \quad \text{Ecuación 3.1.3a}$$

$$\text{Área}_T = [(1/r_{A1} + 1/r_{A2}) + (1/r_{A2} + 1/r_{A3}) + \dots + (1/r_{AN-1} + 1/r_{AN})] \Delta X_A / 2 \quad \text{Ec. 3.1.3b}$$

$$V/F_{A0} = [(1/r_{A1} + 1/r_{A2}) + (1/r_{A2} + 1/r_{A3}) + \dots + (1/r_{AN-1} + 1/r_{AN})] \Delta X_A / 2 \quad \text{Ecuación 3.6.2}$$

Con la ecuación 3.6.2 se determina el valor de V / F_{A0} para un PFR que opera de forma adiabática. Para la aplicación de esta ecuación se deben calcular los valores de r_A para cada incremento de X_A . El valor de F_{A0} también aquí es un dato por lo que para calcular el volumen del reactor se debe hacer un despeje.

3.9.0 RECIRCULACIÓN

En el capítulo anterior, tratamos la recirculación para obtener una ecuación idéntica a la 6.21 del Levenspiel. Esta ecuación tiene la limitación de que solo puede ser válida para el caso en el que la corriente de alimentación no contenga conversión alguna ($X_A = 0$), inhabilitándola así para realizar arreglos en serie.

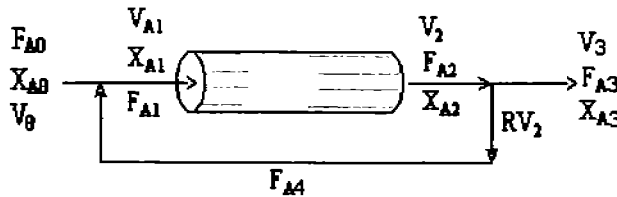


Figura 3.9.0a Reactor PFR con recirculación

Con la información de la figura 3.9.0a es posible ubicar la entrada, salida y punto de recirculación. Estos mismos puntos pueden ser localizados en el gráfico 3.9.0b.

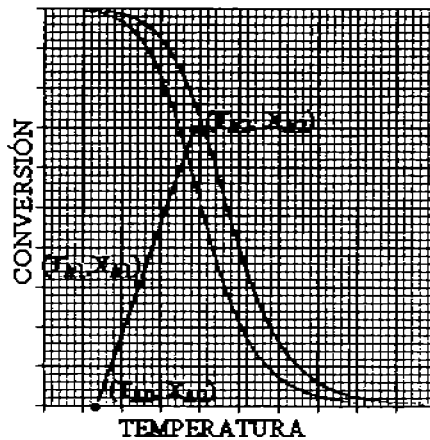


Figura 3.9.0b línea de operación adiabática con recirculación.

$$V / F_{A1} = \int \frac{X_{A3}}{dX_A / -r_A} \quad \text{Ecuación de diseño para un PFR}$$

Partiendo de la figura 3.9.0a debemos definir X_{A1} y F_{A1} en la ecuación de diseño:

$$R = F_{A4} / F_{A3} \quad \text{Fracción recirculada}$$

$$F_{A4} = R * F_{A0} \quad \text{Caudal que retorna a la entrada del reactor}$$

$$F_{A1} = F_{A0} + F_{A4} \quad \text{Caudal que entra al reactor}$$

$$F_{A1} = F_{A0} + (R * F_{A0})$$

$$F_{A1} = F_{A0} (1+R)$$

$$F_{A0} X_{A0} \quad \text{moles que entran al sistema}$$

$$F_{A4} X_{A2} \quad \text{moles que retornan al sistema}$$

$$F_{A1} \quad \text{moles que entran al reactor}$$

$$X_{A1} = (F_{A0} X_{A0} + F_{A4} X_{A2}) / F_{A1}$$

$$X_{A1} = (F_{A0} X_{A0} + R F_{A0} X_{A2}) / F_{A0} (1+R)$$

$$X_{A1} = F_{A0} (X_{A0} + R X_{A2}) / F_{A0} (1+R)$$

$$X_{A1} = (X_{A0} + R X_{A2}) / (1+R)$$

Sustituyendo F_{A1} y X_{A1} en la ecuación de diseño, obtenemos:

$$V / F_{A0} (1+R) = \int \frac{X_{A3}}{dX_A / -r_A} \quad \text{Ecuación 3.9.0}$$

$$(X_{A0} + R X_{A2}) / (1+R)$$

$$* X_{A2} = X_{A3}$$

La ecuación 3.9.0 define de manera analítica el valor de V/F en un PFR adiabático con recirculación. Omitiremos el cálculo analítico y realizaremos un cálculo gráfico como en los casos anteriores. Fraccionaremos en trapecios la superficie de color claro (derecha) formada bajo la curva, y aplicaremos exactamente el mismo procedimiento utilizado para la obtención de la integral gráfica de los PFR isotérmico, ruta térmica óptima y adiabático.

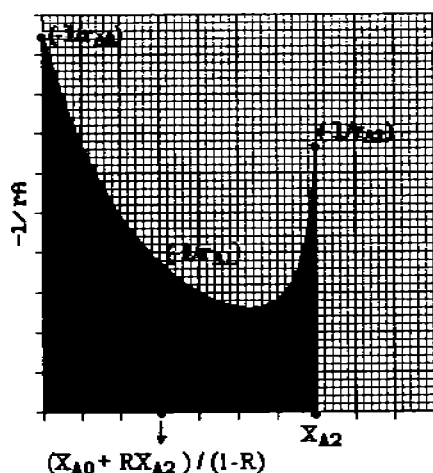


Figura 3.9.0b Gráfico X_A Vs $-1/r_A$ para un PFR adiabático con recirculación.

La figura 3.9.0b marca el área bajo la curva X_A vs $-1/r_A$ para el sistema completo, la superficie de color claro (derecha) representa el área obtenida al recircular y la oscura (izquierda) la eliminada. Es importante notar que al recircular se obtiene una área menor. Al mismo tiempo que el valor de F se incrementa, la proporción en que disminuye el área debe ser mayor a la proporción en la que aumenta F para que la recirculación tenga sentido.

Los CSTR no deben contener recirculación alguna ya que para un valor dado de R (fracción recirculada) el área bajo la curva disminuye en la misma proporción en la que aumenta el caudal molar. En otras palabras, el volumen de diseño del reactor no se modifica con el valor de R .

Los PFR que presentan una área bajo la curva ascendente, no contendrán tampoco recirculación debido a que ésta reduce el área bajo la curva en el principio de la misma, es decir la disminuye donde ésta es menor respecto de la zona de área siguiente, por lo que la proporción en que reduce el área es inferior a la proporción en la que aumenta el flujo molar, implicando esto un aumento en el volumen del reactor, situación totalmente indeseada.

De los cinco modelos de reactores que considera el programa, solo se tendrá la opción de recircular en los reactores de tipo PFR adiabático, con la recomendación de considerar esta opción sólo si la curva (X_A vs $-1/r_A$) presenta concavidad en su forma, como lo ilustra la figura 3.9.0b.

Tabla 3.9.0 Notación en el programa para la operación adiabática con recirculación

DATO	NOTACIÓN
T entrada	TAI
T salida	TA
X_A entrada	XF1
X_A salida	XM
Relación de recirculación R	PR

CAPÍTULO IV

ELABORACIÓN DEL PROGRAMA

4.1.0 COMANDOS DE QUICK BASIC

En este capítulo describiremos los comandos de Qbasic utilizados en la elaboración del programa. El adentrarse en el conocimiento de los comandos dependerá del interés que se tenga en realizar modificaciones al software presentado en este trabajo. También se ha ejemplificado su utilización en dos subrutinas: el trazo del plano T vs X_A , el cálculo y trazo de la curva de equilibrio en el que también es mostrado su respectivo diagrama de flujo.

4.1.1 Comandos de Cálculos.

ABS

Proporciona el valor absoluto de un número:

ABS (2.31-3.28) resultado 0.97

EXP

Devuelve e (base de logaritmo natural), elevado a una potencia determinada.

EXP (1) resultado 2.718281

LOG

Devuelve el logaritmo natural de un número.

LOG(2) resultado 0.693147

CINT

Redondea un número a entero.

CINT (273.15) resultado 273

FIX

Elimina la porción del número que se encuentra después del punto.

FIX (273.58) resultado 273

4.1.2 Comandos de Dispositivos.

LOCATE

Ubica el cursor en las coordenadas que le son indicadas, para el inicio de la escritura

LOCATE fila, columnas 30 filas x 80 columnas

PRINT

Escribe datos en la pantalla o en un archivo. Cuando solo se trate de algún mensaje se deberá encerrar entre comillas. Se omitirán las comillas cuando se desee imprimir alguna variable.

LOCATE 10,1: PRINT "algoritmo"

Esta sentencia imprimirá la palabra "algoritmo" en la fila 10 e iniciando en la columna 1 de la pantalla.

INPUT

Lee información desde el teclado o desde un archivo, almacenándola en una variable.

INPUT "mensaje "; variable

LOCATE 12,1: INPUT "suma = "; a

Esta sentencia imprimirá mensaje "suma =" y seguido de este, el valor de la variable *a*, en la fila 12 y columna 1 de la pantalla.

CLS

Borra los gráficos y texto de la pantalla.

4.1.3 Comandos de Errores.

ON ERROR

Activa el identificador de errores, y cuando ocurra un error de ejecución, envía el programa a una rutina de identificador de errores o a que reanude su ejecución.

GOTO línea

Se bifurca a la primera línea de la rutina de manejo de errores, especificado por una etiqueta o número de línea. Para desactivar el manejo de errores, especifiquemos: GOTO 0.

RESUME NEXT

Reanuda la ejecución a partir de la instrucción que sigue a la que causó el error de ejecución.

4.1.4 Comandos de Flujos.

IF THEN ELSE

Ejecuta instrucciones según las condiciones especificadas.

IF condición THEN instrucción 1 ELSE instrucción 2

Si la condición se cumple se ejecutara la instrucción 1 o de lo contrario se ejecutara la 2.

GOTO

Manda a una línea de instrucción especificada.

FOR NEXT

Repite una secuencia de instrucciones el número de veces especificado.

FOR contador = inicio TO final STEP incremento

Bloque de instrucciones

NEXT contador

SELECT CASE

Ejecuta uno de los bloques según el valor de una expresión.

SELECT CASE expresión a aprobar

CASE expresión1

[Bloque de instrucciones]

CASE expresión2

[Bloque de instrucciones]

CASE expresión3

[Bloque de instrucciones]

CASE expresión "n"

[Bloque de instrucciones]

END SELECT

4.1.5 Comandos de Gráficos.

SCREEN

Este comando permite seleccionar uno de los modos de despliegue gráfico disponible (0 al 13). De los modos disponibles, el modo 12 presenta la mayor resolución, razón determinante para su elección.

SCREEN f2

Gráficos 640 x 480 píxeles

Texto 80 x 30 caracteres

Caracteres 8 x 16 píxeles

Colores 16

COLOR

Establece el color de los caracteres en la pantalla, dando 16 colores posibles.

COLOR (0 - 15)

No	Color
0	Negro
1	Azul rey
2	Verde bandera
3	Azul agua
4	Rojo
5	Morado
6	Café claro
7	Gris claro
8	Gris oscuro
9	Azul rey claro
10	Verde claro
11	Azul agua claro
12	Naranja
13	Lila
14	Amarillo
15	Blanco

LINE

Permite trazar líneas rectas y rectángulos, estos últimos con la opción de ser solo un contorno o coloreados internamente. Cuando no sea especificada la coordenada inicial Qbasic tomará la ubicación del cursor, como dicha coordenada.

Línea recta	LINE (X1,Y1)-(X2,Y2),color, , estilo
Rectángulo (contorno)	LINE (X1,Y1)-(X2, Y2), color, B, estilo
Rectángulo (sólido)	LINE (X1,Y1)-(X2,Y2), color, BF

El estilo da el punteado a la línea trazada.

DRAW

Esta instrucción permite trazar figuras mediante líneas: horizontales, verticales y diagonales. El inicio de el trazo será la coordenada del cursor.

Movimientos de " n " puntos

- Un arriba
- Dn abajo
- Ln izquierda
- Rn derecha
- En diagonal arriba derecha
- Fn diagonal abajo derecha
- Gn diagonal abajo izquierda
- Hn diagonal abajo derecha

Prefijos:

B mover pero sin trazar ningún punto.

N regresar a la posición original cuando el movimiento haya terminado.

C colorea el trazo indicado.

PSET

Traza un punto específico en la pantalla.

PSET (X, Y), color (X, Y) son las coordenadas en la pantalla

CIRCLE

Traza un círculo en la pantalla.

CIRCLE (X, Y), radio, color

PAINT

Rellena un área con el color especificado.

PAINT (X , Y), color relleno, color bordes,

El color bordes marca la zona donde dejara de iluminar el color relleno.

GET

Captura una imagen encerrada en un rectángulo hipotético.

GET (X1, Y1)-(X2, Y2), L%

(X1, Y1)



PUT

Transfiere una imagen almacenada en un arreglo, a la pantalla.

PUT (X, Y), L%

(X, Y)



4.1.6 Comandos de Procedimientos.

DECLARE

Declara una función o un subprograma.

SUB

Es un subprograma que nos permite la elaboración de programas dentro del mismo programa con la intención de darle una estructura más definida al programa principal.

SUB nombre (variables que serán enviadas y recibidas del subprograma al programa principal).

ENDSUB final del subprograma.

CALL

Llamado al subprograma, una vez terminada la ejecución del mismo retorna el control al programa principal en la instrucción siguiente a la instrucción CALL.

CALL nombre (variables que serán enviadas y recibidas del subprograma al programa principal)

DIM

Declara una matriz o especifica el tipo de datos para una variable.

DIM L%(1400)

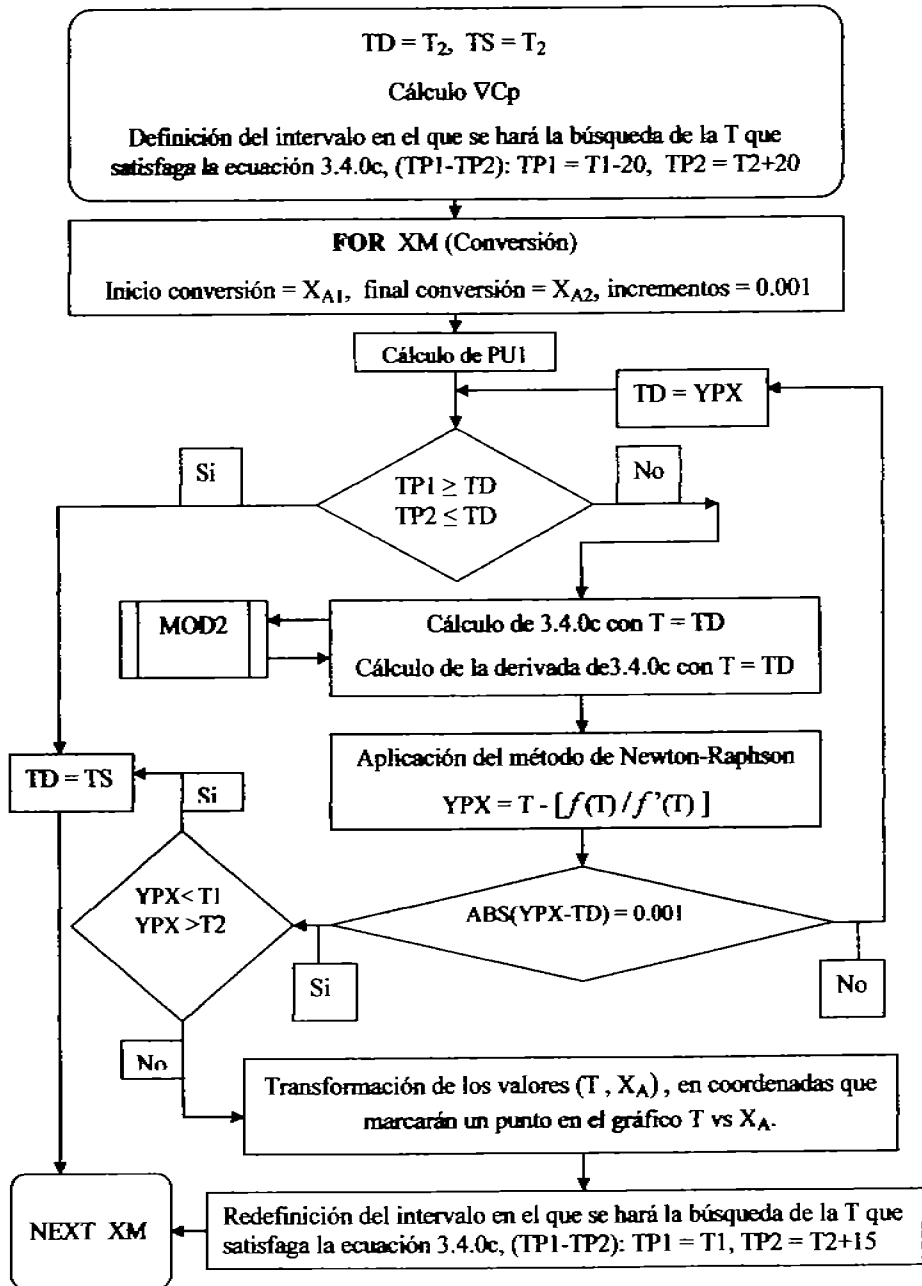
Reserva espacio para una imagen en un arreglo numérico (L%).

4.2.0 EJEMPLOS DE LA APLICACIÓN DE LOS COMANDOS DE QUICK BASIC

4.2.1 Subrutina para el Trazo del Plano T Vs X_A.

Instrucción en el programa.	Descripción
GRAFICO T Vs XA LOCATE 1, 15: PRINT "T(°K) vs XA"	Etiquetado del gráfico.
150 LINE (45, 16)-(295, 266), 15, BF	Marcado de un rectángulo blanco de 250x250 pixeles
FOR GR = 45 TO 295 STEP 5 LINE (GR, 16)-(GR, 266), 7 NEXT GR	Trazado de 50 líneas verticales de color gris espaciadas 5 pixeles.
FOR GR = 45 TO 295 STEP 25 LINE (GR, 16)-(GR, 270), 12 NEXT GR	Trazado de 10 líneas verticales de color naranja espaciadas 25 pixeles.
FOR GR = 16 TO 266 STEP 5 LINE (45, GR)-(295, GR), 7 NEXT GR	Trazado de 50 líneas horizontales de color gris espaciadas 5 pixeles
FOR GR = 16 TO 266 STEP 25 LINE (40, GR)-(295, GR), 12 NEXT GR	Trazado de 10 líneas horizontales de color naranja espaciadas 25 pixeles.
ESCALAS PARA EL GRAFICO T Vs XA	
IT = T1 DT = 0 FOR ES = 5 TO 40 STEP 3 IT = IT + DT DT = (T2 - T1) / 5 LOCATE 18, ES: PRINT " "; CINT(IT) NEXT ES	T ₁ y T ₂ marcan el intervalo de temperaturas elegido por el usuario del programa. Al dividir el intervalo en 5 segmentos logramos obtener un total de seis valores horizontales. El comando CINT nos permite redondear los valores de temperatura para evitar que los números se encimen en la pantalla
V = XA1 DX = (XA2 - XA1) / 5 FOR ES = 17 TO 1 STEP -3 LOCATE ES, 1: PRINT " "; (FIX(V * 100)) / 100 V = V + DX NEXT ES	X _{A1} y X _{A2} marcan el intervalo de conversión donde se visualizara el gráfico. El intervalo quedará dividido en 5 segmentos y seis valores que serán marcados en la pantalla. El comando FIX elimina la porción que se encuentra después del punto, la ecuación (FIX(V * 100)) / 100 permite que los valores de conversión tengan una precisión de centésimas.

4.2.2 Diagrama de Flujo para el Cálculo y Trazo de la Curva de Equilibrio.



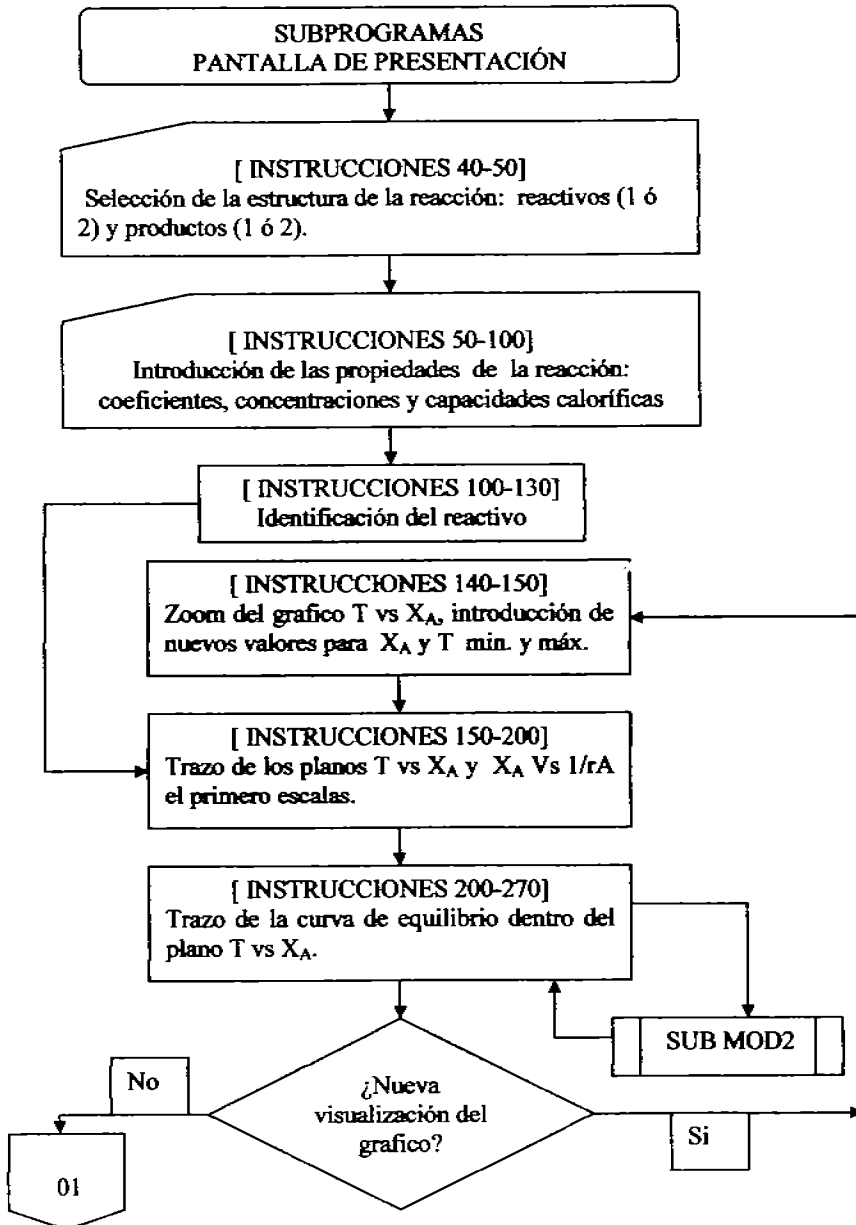
4.2.3 Subrutina para el Trazo de la Curva de Equilibrio.

Instrucción en el programa	Descripción
<p>TD = T2 TS = TD TP1 = TD - 20 TP2 = TD + 20</p>	<p>Asignamos a TD y TS el valor de T2. TP1 y TP2 definirán un intervalo de temperaturas donde se rastreará el valor de la conversión que satisfaga la ecuación 3.4.0c.</p>
<p>FOR XM = XA1 TO XA2 STEP .001</p>	<p>Daremos valores a la conversión (X_A) iniciando con $X_A = X_{A1}$ con incrementos de 0.001.</p>
<p>IF XM < .001 THEN 270 ELSE IF XM > .999 THEN 140 ELSE</p>	<p>En la instrucción 270 indicamos incrementar el valor en 0.001. En la instrucción 140 es ofrecida la posibilidad de trazar nuevamente el intervalo de visualización del gráfico.</p>
<p>PU1 = CAR * XM / L CALL MOD2(PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB)</p>	<p>PU1 es la cantidad de material que reacciona del reactivo limitante. MOD2 es un subprograma en el que calculamos las concentraciones de todos los reactivos involucrados.</p>
<p>240 IF TP1 >= TD OR TP2 <= TD THEN 260 ELSE</p>	<p>Indicamos que si el valor de T salió del intervalo comprendido entre TP1 y TP2, se omitirá el valor obtenido y e iniciaremos nuevamente la búsqueda de la solución en un valor de X_A incrementado 0.001.</p>

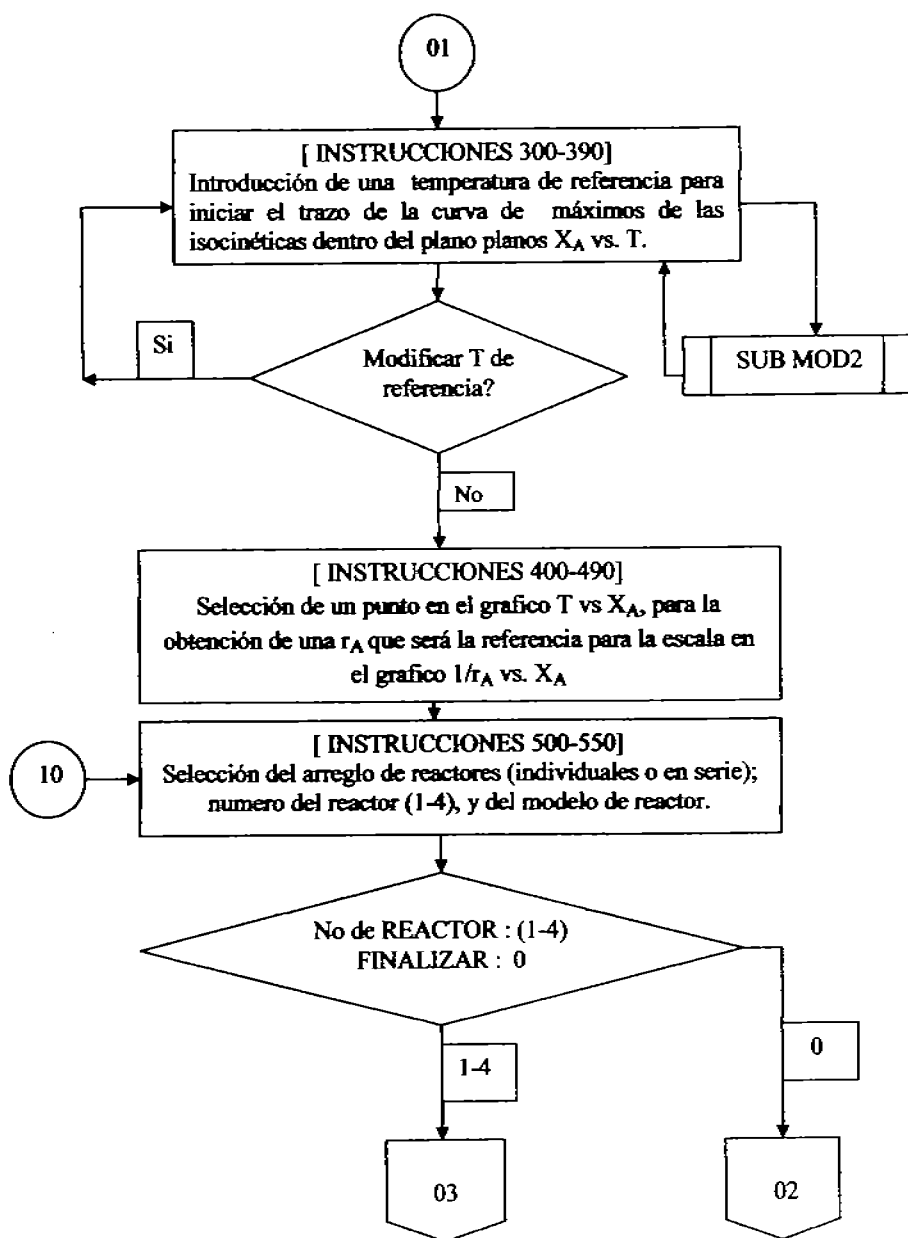
Instrucción en el programa	Descripción
$K = ((D2 \wedge D) * (B2 \wedge B)) / ((A2 \wedge A) * (C2 \wedge C))$ $S3 = (\text{LOG}(K / KE)) * CGI$ $S4 = DH * ((1 / TD) - (1 / TR))$ $S10 = -S4 - S3$ $S11 = DH / (TD \wedge 2)$	<p>En este segmento es desglosada la ecuación 3.4.0c, S10 representa dicha ecuación.</p> <p>S11 es la derivada de la ecuación 3.4.0c.</p>
$YXP = TD - (S10 / S11)$ $TIO = \text{ABS}(YXP - TD)$ $\text{IF } TIO \leq .001 \text{ THEN } 250 \text{ ELSE}$ $TD = YXP: \text{GOTO } 240$	<p>Aplicación del método de Newton a la ecuación 3.4.0c para encontrar el valor de T con una precisión de milésimas.</p>
$250 \text{ IF } YXP > T2 \text{ OR } YXP < T1 \text{ THEN } 260 \text{ ELSE}$	<p>Si el valor obtenido de T queda fuera del intervalo de visualización del gráfico entonces se procede a un nuevo cálculo de T con una X_A incrementada 0.001.</p>
$TG = (TD - T1) / (T2 - T1)$ $TDG = (TG * 250) + 45$ $XG = 250 / (XA2 - XA1)$ $XAG = 266 - ((XM - XA1) * XG)$ $\text{PSET } (TDG, XAG), 9$	<p>Una vez obtenido el valor de T para una determinada X_A procedemos a transformar sus valores en coordenadas congruentes con el plano T Vs X_A (ejemplificado en la tabla 4.1.0a).</p>
$TP1 = T1 : TP2 = T2 + 15$ $\text{GOTO } 270$ $260 \text{ TD} = \text{TS}$ $270 \text{ NEXT } XM$	<p>Una vez que hayamos encontrado el primer valor de T, ampliaremos el intervalo TP1-TP2.</p>

4.3.0 DIAGRAMA GENERAL DE FLUJO DEL PROGRAMA REACTORES.BAS

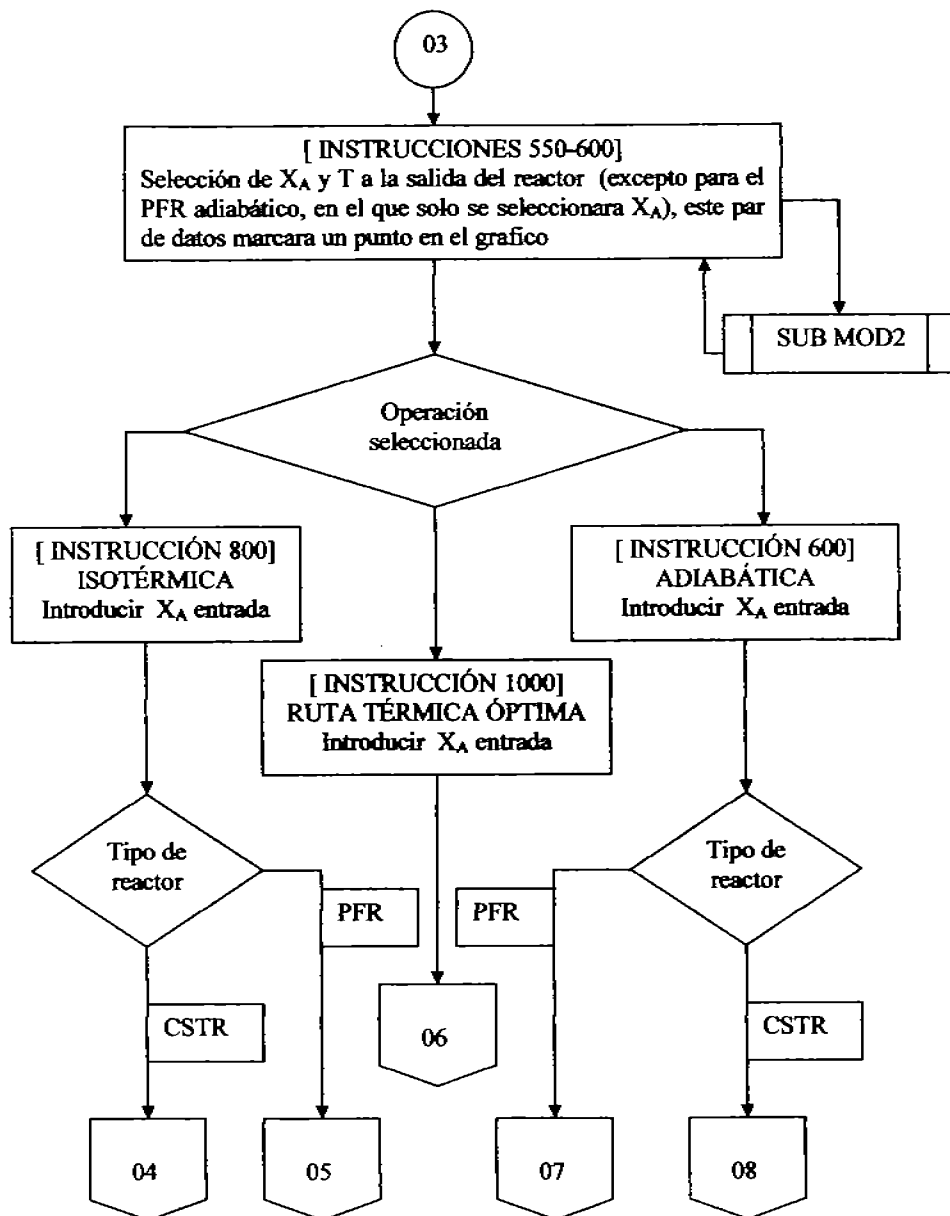
4.3.0a Diagrama General de Flujo del Programa REACTORES.BAS.



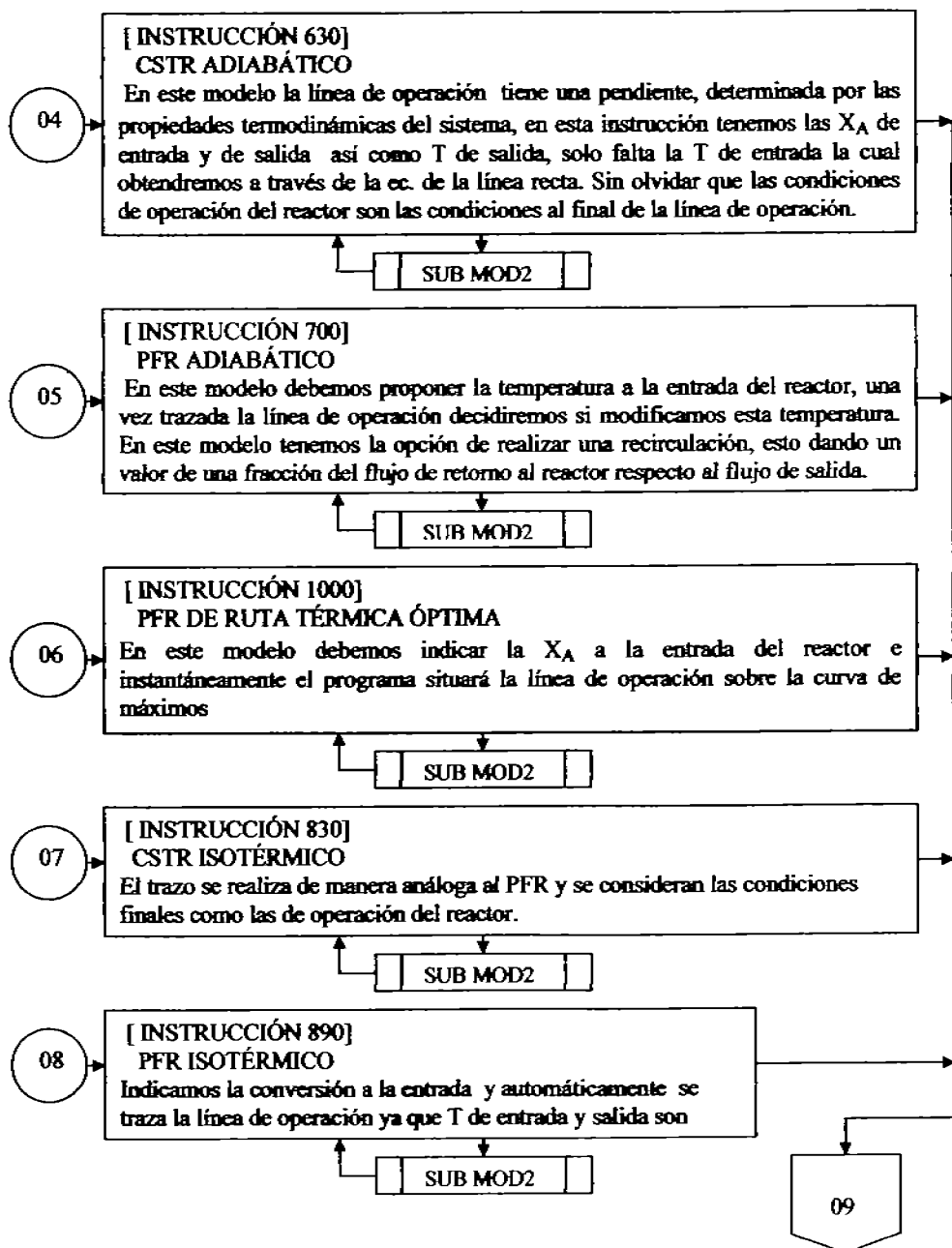
4.3.0b Diagrama General de Flujo del Programa REACTORES.BAS.



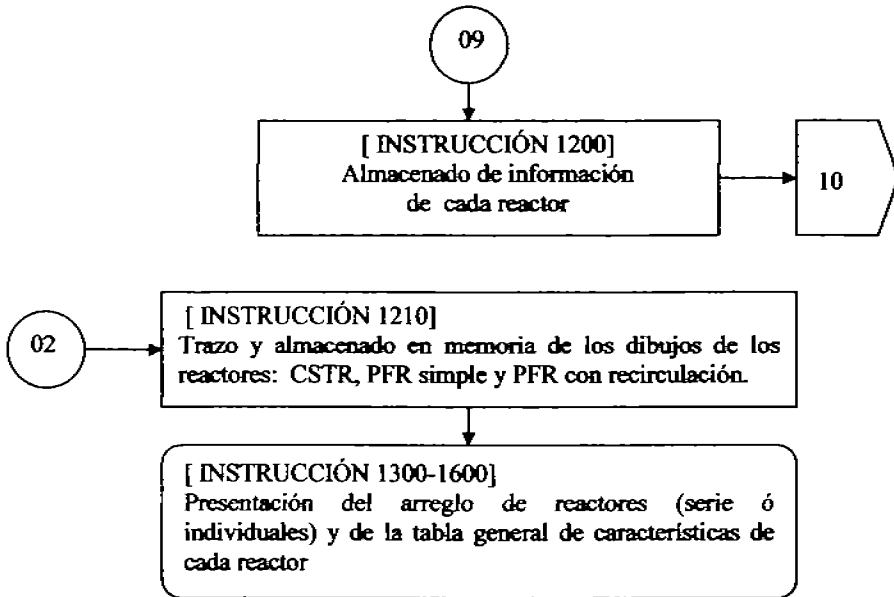
4.3.0c Diagrama General de Flujo del Programa REACTORES.BAS.



4.3.0d Diagrama General de Flujo del Programa REACTORES.BAS.



4.3.0e Diagrama General de Flujo del Programa REACTORES.BAS.



	<p>[SUB MOD2] Asignación de valores para los coeficientes del reactivo B y el producto D. En caso que no aparezcan en la reacción se da el valor de 1, para evitar que la constante de equilibrio se indetermina</p>	
--	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

	<p>[SUB MOD3] Pantalla de presentación, para salir de ella y entrar al programa se tendrá que oprimir la tecla de espacios.</p>	
--	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

4.4.0 LÍNEAS DE COMANDOS

DECLARE SUB MOD2 (PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)

DECLARE SUB MOD3 (J, K, L)

SCREEN 12

Toda la información, incluyendo el manual de uso, de este programa lo encontraras en la tesis:

'Algoritmo Computacional Para el Diseño de Reactores en Estado Estacionario

'con Flujo Ideal en Sistemas Reaccionantes Homogéneos Simples y no Isotérmicos.

'elaborada en el 2005 en la FES-Cuautitlán por:

T.Q. Rodríguez Zúñiga José, Antonio

PARA SALIR DE LA PANTALLA DE INICIO PRESIONA LA TECLA DE ESPACIOS

CALL MOD3(J, K, L)

40 CLS TABLA DE INGRESO DE PROPIEDADES DE LA REACCIÓN

COLOR 15

LINE (1, 1)-(639, 1), 15

DRAW "D40 NL639 D60 L639 U100 D70 R239 U30 D60 R400 D130 L201 NU130"

DRAW "L152 NU130 L143 NU130 L143 NU130 R639"

LOCATE 2, 21: PRINT "PROPIEDADES DEL SISTEMA REACCIONANTE";

LOCATE 4, 2: INPUT "NUM. DE REACTIVOS (1 ~ 2)"; NDR

LOCATE 6, 2: INPUT "NUM. DE PRODUCTOS (1 ~ 2)"; NDP

R = (NDR * 10) + NDP

LOCATE 8, 3: PRINT "COEFICIENTES"

LOCATE 8, 21: PRINT "CONCENTRACIÓN"

LOCATE 9, 21: PRINT " (mol/litro)"

LOCATE 8, 38: PRINT "PESO MOLECULAR"

LOCATE 9, 38: PRINT " (grs/mol)"

LOCATE 8, 57: PRINT "CAPACIDAD CALORÍFICA"

LOCATE 9, 57: PRINT " (cal/mol°K)"

IF R = 11 THEN 50 ELSE

IF R = 21 THEN 60 ELSE

IF R = 12 THEN 70 ELSE

IF R = 22 THEN 80 ELSE

50

LOCATE 5, 44: PRINT "aA ⇌ cC";

CPB = 0: CPD = 0: CB = 0: CD = 0: B = 0: D = 0

LOCATE 11, 3: INPUT "a= "; A

LOCATE 5, 42: PRINT A

LOCATE 12, 3: INPUT "c= "; C

LOCATE 5, 53: PRINT C

LOCATE 11, 21: INPUT "[A]= "; CA

LOCATE 12, 21: INPUT "[C]= "; CC

LOCATE 11, 38: INPUT "PMA= "; PMA

LOCATE 11, 57: INPUT "CPA= "; CPA

LOCATE 12, 57: INPUT "CPC= "; CPC
GOTO 110

60

LOCATE 5, 44: PRINT "aA + bB ⇔ cC ";
CPD = 0: CD = 0: D = 0
LOCATE 11, 3: INPUT "a= "; A
LOCATE 5, 42: PRINT A
LOCATE 12, 3: INPUT "b= "; B
LOCATE 5, 48: PRINT B
LOCATE 13, 3: INPUT "c= "; C
LOCATE 5, 59: PRINT C
LOCATE 11, 21: INPUT "[A]= "; CA
LOCATE 12, 21: INPUT "[B]= "; CB
LOCATE 13, 21: INPUT "[C]= "; CC
LOCATE 11, 38: INPUT "PMA= "; PMA
LOCATE 12, 38: INPUT "PMB= "; PMB
LOCATE 11, 57: INPUT "CPA= "; CPA
LOCATE 12, 57: INPUT "CPB= "; CPB
LOCATE 13, 57: INPUT "CPC= "; CPC
GOTO 100

70

LOCATE 5, 44: PRINT "aA ⇔ cC + dD ";
CPB = 0: CB = 0: B = 0:
LOCATE 11, 3: INPUT "a= "; A
LOCATE 5, 42: PRINT A
LOCATE 12, 3: INPUT "c= "; C
LOCATE 5, 53: PRINT C
LOCATE 13, 3: INPUT "d= "; D
LOCATE 5, 59: PRINT D
LOCATE 11, 21: INPUT "[A]= "; CA
LOCATE 12, 21: INPUT "[C]= "; CC
LOCATE 13, 21: INPUT "[D]= "; CD
LOCATE 11, 38: INPUT "PMA= "; PMA
LOCATE 11, 57: INPUT "CPA= "; CPA
LOCATE 12, 57: INPUT "CPC= "; CPC
LOCATE 13, 57: INPUT "CPD= "; CPD
GOTO 110

80

LOCATE 5, 44: PRINT "aA + bB ⇔ cC + dD ";
LOCATE 11, 3: INPUT "a= "; A
LOCATE 5, 42: PRINT A
LOCATE 12, 3: INPUT "b= "; B
LOCATE 5, 48: PRINT B
LOCATE 13, 3: INPUT "c= "; C
LOCATE 5, 59: PRINT C
LOCATE 14, 3: INPUT "d= "; D
LOCATE 5, 65: PRINT D

```
LOCATE 11, 21: INPUT "[A]= "; CA
LOCATE 12, 21: INPUT "[B]= "; CB
LOCATE 13, 21: INPUT "[C]= "; CC
LOCATE 14, 21: INPUT "[D]= "; CD
LOCATE 11, 38: INPUT "PMA= "; PMA
LOCATE 12, 38: INPUT "PMB= "; PMB
LOCATE 11, 57: INPUT "CPA= "; CPA
LOCATE 12, 57: INPUT "CPB= "; CPB
LOCATE 13, 57: INPUT "CPC= "; CPC
LOCATE 14, 57: INPUT "CPD= "; CPD
100
```

IDENTIFICACIÓN DEL REACTIVO LIMITANTE:

CAA = CA / A

CBB = CB / B

IF CAA = CBB OR CAA < CBB THEN 110 ELSE 120

110

CAR = CA: L = A:

GOTO 130

120 CAR = CB: L = B:

130

COLOR 12

LOCATE 21, 11: INPUT "DESEA MODIFICAR LAS PROPIEDADES QUE
SELECCIONO (S/N)"; SN\$

IF SN\$ = "S" OR SN\$ = "s" THEN 40 ELSE

COLOR 0

LOCATE 21, 11: PRINT "DESEA MODIFICAR LAS PROPIEDADES QUE
SELECCIONO (S/N) ? S";

COLOR 15

DRAW "D160 L300 NU160 L339 U32 NR639 U32 NR639 U32 NR639 U32 NR639 U32"
DRAW "D187 R639 NU29 D30 L319 NU30 L320 U30"

TH = 298

DH = -18000

CGI = 1.987

K1 = 3.09799E+07

K2 = 1.570379E+18

EA1 = 11625

EA2 = 29625

KE = 300

TR = 298

F = 1500

XA1 = 0

XA2 = 1

'PROPIEDADES CINÉTICAS Y TERMODINÁMICAS DE LA REACCIÓN

```
LOCATE 16, 2: PRINT "TEMP. REF. DE LA ENTALPIA (°K) = "; TH
LOCATE 18, 2: PRINT "ENTALPIA DE REACCIÓN (cal/mol) = "; DH
LOCATE 20, 2: PRINT "TEMP. REF. DE LA Keq (°K) = "; TR
LOCATE 22, 2: PRINT "CONSTANTE DE EQUILIBRIO (s/u) = "; KE
LOCATE 24, 2: PRINT "CONSTANTE UNIVERSAL (cal/mol°K) = "; CGI
LOCATE 16, 45: PRINT "—> K1 (1/min) = "; K1
LOCATE 18, 45: PRINT "EA1 (cal/mol) = "; EA1
LOCATE 20, 45: PRINT "<— K2 (1/min) = "; K2
LOCATE 22, 45: PRINT "EA2 (cal/mol) = "; EA2
LOCATE 24, 45: PRINT "FLUJO (mol/min) = "; F
```

135

```
LOCATE 26, 28: PRINT "INTERVALO DE TEMPERATURAS ";
LOCATE 28, 2: INPUT "TEMPERATURA MÍNIMA (°K) = "; T1
LOCATE 28, 45: INPUT "TEMPERATURA MÁXIMA (°K) = "; T2
```

COLOR 12

```
LOCATE 26, 18: INPUT "ES CORRECTO EL INTERVALO DE TEMPERATURAS
(S/N) "; SN$
```

COLOR 0

```
LOCATE 26, 18: PRINT "ES CORRECTO EL INTERVALO DE TEMPERATURAS
(S/N) ? S";
```

```
LOCATE 28, 25: PRINT "88888888"
```

```
LOCATE 28, 66: PRINT "88888888"
```

COLOR 15

```
IF SN$ = "S" OR SN$ = "s" THEN ELSE 135
```

137

```
R1 = 0: R2 = 0: R3 = 0: R4 = 0
```

CLS

' ZOOM DEL GRAFICO XA Vs T

GOTO 150

140

```
LINE (0, 300)-(320, 450), 0, BF
```

```
LOCATE 20, 1: PRINT "ANALIZAR LA CURVA EN OTRO"
```

```
LOCATE 21, 1: INPUT "INTERVALO (S/N)"; B$
```

```
IF B$ = "S" OR B$ = "s" THEN ELSE 300
```

DT = 0

```
LOCATE 22, 1: INPUT "TEMP. MIN."; T1
```

```
LOCATE 23, 1: INPUT "TEMP. MAX."; T2
```

```
LOCATE 24, 1: INPUT "CONV. MIN."; XA1
```

```
LOCATE 25, 1: INPUT "CONV. MAX."; XA2
```

' GRAFICO XA Vs T

```
150 LOCATE 1, 15: PRINT "T(°K) Vs XØ"
```

```
LINE (45, 16)-(295, 266), 15, BF
```

```
FOR GR = 45 TO 295 STEP 5
```

```
LINE (GR, 16)-(GR, 266), 7
```

```

NEXT GR
FOR GR = 45 TO 295 STEP 25
LINE (GR, 16)-(GR, 270), 12
NEXT GR
FOR GR = 16 TO 266 STEP 5
LINE (45, GR)-(295, GR), 7
NEXT GR
FOR GR = 16 TO 266 STEP 25
LINE (40, GR)-(295, GR), 12
NEXT GR
'ESCALAS PARA EL GRAFICO XA Vs T
IT = T1
DT = 0
FOR ES = 5 TO 40 STEP 6
IT = IT + DT
DT = (T2 - T1) / 5
LOCATE 18, ES: PRINT ""; CINT(IT)
NEXT ES
V = XA1
DX = (XA2 - XA1) / 5
FOR ES = 17 TO 1 STEP -3
LOCATE ES, 1: PRINT ""; (FIX(V * 100)) / 100
V = V + DX
NEXT ES

```

```

'GRAFICO XØ Vs 1/-rA
LOCATE 1, 60: PRINT "XØ Vs 1/-rA "
LINE (389, 16)-(639, 266), 15, BF
FOR GR = 389 TO 639 STEP 5
LINE (GR, 16)-(GR, 266), 7
NEXT GR
FOR GR = 389 TO 639 STEP 25
LINE (GR, 16)-(GR, 271), 12
NEXT GR
FOR GR = 16 TO 266 STEP 5
LINE (389, GR)-(639, GR), 7
NEXT GR
FOR GR = 16 TO 266 STEP 25
LINE (384, GR)-(639, GR), 12
NEXT GR
'ESCALAS PARA EL GRAFICO
X = 0: XI = 0
FOR ES = 48 TO 80 STEP 6
X = X + XI
XI = 2
LOCATE 18, ES: PRINT ""; X
NEXT ES

```

TRAZO DE LA CURVA DE EQUILIBRIO XA Vs T

200

TD = T2

TS = TD

TP = TD

TP1 = TD - 20

TP2 = TD + 20

FOR XM = XA1 TO XA2 STEP .001

IF XM > (XA2 - .001) THEN 140 ELSE

IF XM < (XA1 + .001) THEN 270 ELSE

PU1 = CAR * XM / L

CALL MOD2(PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)

240

IF TP1 >= TD OR TP2 <= TD THEN 260 ELSE

K = ((D2 ^ D) * (C2 ^ C)) / ((A2 ^ A) * (B2 ^ B))

S3 = (LOG(K / KE)) * CGI

S4 = DH * ((1 / TD) - (1 / TR))

S10 = -S4 - S3

S11 = DH / (TD ^ 2)

YXP = TD - (S10 / S11)

TIO = ABS(YXP - TD)

IF TIO <= .001 THEN 250 ELSE

TD = YXP: GOTO 240

250 IF YXP > T2 OR YXP < T1 THEN 260 ELSE

TG = (TD - T1) / (T2 - T1)

TDG = (TG * 250) + 45

XG = 250 / (XA2 - XA1)

XAG = 266 - ((XM - XA1) * XG)

PSET (TDG, XAG), 9

TP1 = T1

TP2 = T2 + 15

GOTO 270

260 TD = TS

270 NEXT XM

300 TRAZO DE LA CURVA DE MÁXIMOS

305 LINE (0, 300)-(320, 450), 0, BF

GOTO 320

310 LINE (0, 300)-(450, 450), 0, BF

COLOR 4

LOCATE 20, 1: PRINT "SELECCIONASTE UNA T INCORRECTA"

COLOR 15

320 LOCATE 21, 1: INPUT "TEMP. DE TRAZO DE LA CURVA DE MAX"; TX

TL = TX

```

TP = TX
TX1 = TX - 20
TX2 = TX + 20
FOR XM = XA1 TO XA2 STEP .001
IF XM > .995 THEN 392 ELSE
IF XM < .01 THEN 390 ELSE
PU1 = CAR * XM / L
CALL MOD2(PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)
360 IF TX1 >= TL OR TL >= TX2 THEN 380 ELSE
IF TL <= 0 THEN 310 ELSE
K11 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TL))) * EA1)
K22 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TL))) * EA2)
CT1 = (A2 ^ A) * (B2 ^ B)
CT2 = (C2 ^ C) * (D2 ^ D)
DEP1 = (K11 * EA1 * CT1) / (CG1 * (TL ^ 2))
DEP2 = (K22 * EA2 * CT2) / (CG1 * (TL ^ 2))
FG = DEP1 - DEP2
IF FG = 0 THEN 390 ELSE
W1 = (K11 * CT1) - (K22 * CT2)
TJ = TL - (W1 / FG)
GY = ABS(TJ - TL)
IF GY <= .001 THEN 370 ELSE
TL = TJ: GOTO 360
370 TLG = (TL - T1) / (T2 - T1)
TMG = (TLG * 250) + 45
IF TMG > 295 THEN 390 ELSE
XAG = 250 / (XA2 - XA1)
XMG = 266 - ((XM - XA1) * XAG)
IF XMG > 266 THEN 390 ELSE
PSET (TMG, XMG), 3
TX1 = T1
TX2 = T2 + 15
GOTO 390
380 TL = TP
390 NEXT XM
392 LINE (0, 300)-(450, 450), 0, BF
LOCATE 20, 1: INPUT "EL TRAZO DE LA CURVA DE MAX. ES CORRECTO (S/N)";
G$
IF G$ = "N" OR G$ = "n" THEN 310 ELSE

```

395 ESCALA DEL GRAFICO XØ Vs I/-rA

LINE (0, 300)-(450, 450), 0, BF

GOTO 420

410 LINE (0, 300)-(450, 450), 0, BF

COLOR 4

LOCATE 20, 1: PRINT "ERROR: INTRODUCISTE DATOS INCORRECTOS"

COLOR 15

```

GOTO 420
415 LINE (0, 300)-(450, 450), 0, BF
COLOR 4
LOCATE 20, 1: PRINT "ERROR: T ALEJADA DE LA CURVA DE MÁXIMOS"
COLOR 15
420
LOCATE 21, 1: PRINT "PARÁMETROS PARA LAS ESCALA DEL GRAFICO Xf Vs
1/-rA"
LOCATE 23, 1: INPUT "Xf MAX. "; XM
LOCATE 24, 1: INPUT "T APROXIMADA"; TL
IF XM <= 0 OR XM >= 1 OR TL < T1 OR TL > T2 THEN 410 ELSE
PU1 = CAR * XM / L
CALL MOD2(PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)
460 CT1 = (A2 ^ A) * (B2 ^ B)
CT2 = (C2 ^ C) * (D2 ^ D)
470 K11 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TL)))) * EA1
K22 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TL)))) * EA2
DEP1 = (K11 * EA1 * CT1) / (CGI * (TL ^ 2))
DEP2 = (K22 * EA2 * CT2) / (CGI * (TL ^ 2))

FG = DEP1 - DEP2
W1 = (K11 * CT1) - (K22 * CT2)
TJ = TL - (W1 / FG)
IF TJ < T1 OR TJ > T2 THEN 415 ELSE
GY = ABS(TJ - TL)
IF GY <= .001 THEN 475 ELSE
TL = TJ: GOTO 470
475 TLG = (TL - T1) / (T2 - T1)
TMG = (TLG * 250) + 45
XAG = 250 / (XA2 - XA1)
XMG = 266 - ((XM - XA1) * XAG)
TA = TL
XAMAX = XM
CIRCLE (TMG, XMG), 2, 0
PAINT (TMG, XMG), 0, 0
KR1 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TA)))) * CT1
KR2 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TA)))) * CT2
SDE = KR1 - KR2
IF SDE <= 0 THEN 415 ELSE
RAMAX = 1 / (KR1 - KR2)
ERA = RAMAX / 10
XP = 0: XIP = 0
FOR ES = 17 TO 1 STEP -3
XP = XP + XIP
XIP = 2 * ERA
IF XP >= 100 THEN 480 ELSE
LOCATE ES, 41: PRINT " "; (FIX(XP * 1000)) / 1000

```

```
GOTO 490
480 LOCATE ES, 41: PRINT "": (FIX(XP * 100)) / 100
490 NEXT ES
```

SISTEMAS DE REACTORES

```
500 LINE (0, 300)-(450, 450), 0, BF
LOCATE 20, 1: PRINT "REACTORES EN SERIE (1) "
LOCATE 21, 1: INPUT "REACTORES INDIVIDUALES (2)"; SISTEMA
510 LINE (0, 300)-(640, 450), 0, BF
LOCATE 20, 1: INPUT "NUM. DE REACTOR"; REACTOR
IF REACTOR = 0 THEN 1210 ELSE
COLOR 3
LOCATE 22, 1: PRINT "CSTR ISOTERMICO (1)"
LOCATE 23, 1: PRINT "CSTR ADIABATICO (2)"
LOCATE 24, 1: PRINT "PFR ISOTERMICO (3)"
LOCATE 25, 1: PRINT "PFR ADIABATICO (4)"
LOCATE 26, 1: PRINT "PFR RUTA T. O. (5)"
LOCATE 21, 1: INPUT "SELECCIONA UN MODELO DE REACTOR"; NMR
SELECT CASE NMR
CASE 1
A$ = "CSTR ISOTERMICO"
CASE 2
A$ = "CSTR ADIABATICO"
CASE 3
A$ = "PFR ISOTERMICO"
CASE 4
A$ = "PFR ADIABATICO"
CASE 5
A$ = "PFR RUTA T.O."
END SELECT
COLOR 15
```

TABLA DE PROPIEDADES EN EL REACTOR A DESCRIBIR

```
LINE (0, 300)-(640, 450), 0, BF
LOCATE 22, 59: PRINT "ENTRADA SALIDA"
LOCATE 24, 43: PRINT "CONVERSION"
LOCATE 26, 43: PRINT "TEM. (°K)"
LOCATE 28, 43: PRINT "VOL.(LITROS)"
LINE (445, 320)-(445, 450), 15
LINE (540, 320)-(540, 422), 15
LINE (330, 300)-(639, 450), 15, B
LINE (330, 320)-(639, 320), 15
LINE (330, 360)-(640, 360), 15
LINE (330, 392)-(640, 392), 15
LINE (330, 422)-(640, 422), 15
LOCATE 20, 53: PRINT A$
```

```

515 CL = 5
IF NMR = 3 THEN ELSE 520
LINE (0, 300)-(320, 600), 0, BF
LOCATE 21, 1: PRINT "(T,X0) DE SALIDA Y ENTRADA AL REACTOR"
LOCATE 23, 1: INPUT "T DE OPERACION"; TA
LOCATE 24, 1: INPUT "X0 DE SALIDA"; XM
LOCATE 24, 70: PRINT ""; XM
LOCATE 26, 70: PRINT ""; TA
GOTO 800

```

MARCADO DE UN PUNTO EN EL GRÁFICO

```

GOTO 560
550 LINE (0, 300)-(320, 450), 0, BF
COLOR 4
LOCATE 20, 1: PRINT "ERROR: T ALEJADA DE LA CURVA DE MAX."
COLOR 15
GOTO 560
555 LINE (0, 300)-(320, 450), 0, BF
COLOR 4
LOCATE 20, 1: PRINT "ERROR: INTRODUCISTE DATOS INCORRECTOS"
COLOR 15
560 LINE (0, 300)-(320, 600), 0, BF
LOCATE 21, 1: PRINT "(T,X0) DE SALIDA Y ENTRADA AL REACTOR"
LOCATE 22, 1: INPUT "X0 DE SALIDA"; XM
LOCATE 24, 70: PRINT ""; XM
IF NMR = 4 THEN 600 ELSE
LOCATE 23, 1: INPUT "T APROXIMADA"; TL
IF XM <= 0 OR XM >= 1 OR TL < T1 OR TL > T2 THEN 555 ELSE
PU1 = CAR * XM / L
CALL MOD2(PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)
570 K11 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TL))) * EA1)
K22 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TL))) * EA2)
CT1 = (A2 ^ A) * (B2 ^ B)
CT2 = (C2 ^ C) * (D2 ^ D)
DEP1 = (K11 * EA1 * CT1) / (CGI * (TL ^ 2))
DEP2 = (K22 * EA2 * CT2) / (CGI * (TL ^ 2))
FG = DEP1 - DEP2
W1 = (K11 * CT1) - (K22 * CT2)

KR1 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TA))) * CT1)
KR2 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TA))) * CT2)
SDE = KR1 - KR2
IF SDE = 0 THEN 550 ELSE
TJ = TL - (W1 / FG)
IF TJ < T1 OR TJ > T2 THEN 550 ELSE
GY = ABS(TJ - TL)

```

```

IF GY <= .001 THEN 580 ELSE
TL = TJ: GOTO 570
580 LOCATE 26, 70: PRINT ""; TL
TLG = (TL - T1) / (T2 - T1)
TMG = (TLG * 250) + 45
XAG = 250 / (XA2 - XA1)
XMG = 266 - ((XM - XA1) * XAG)
TA = TL
CIRCLE (TMG, XMG), 2, 0
PAINT (TMG, XMG), 0, 0
IF NMR = 1 THEN 800 ELSE
IF NMR = 2 THEN 600 ELSE
IF NMR = 5 THEN 1000

```

600 TRAZO DE UNA LÍNEA DE OPERACIÓN ADIABÁTICA

```

XAA1 = 0
AREATOT = 0
AREA = 0
CS = 10

PUI = CAR / L
CALL MOD2(PUI, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)
CPDS = 18
GDS = 1000 - (CA * PMA) - (CB * PMB)
CDS = GDS / 18
CEPR = (-DH) * CAR
CAPR = (CPA * A2) + (CPB * BB2) + (CPC * C2) + (CPD * DD2) + (CPDS * CDS)
M = CAPR / CEPR
IF NMR = 4 THEN 700 ELSE

```

'CSTR ADIABATICO

```

IF REACTOR = 1 OR SISTEMA = 2 THEN 607 ELSE 610
605 COLOR 4
LOCATE 24, 1: PRINT "Xf DE ENTRADA INCORRECTA"
COLOR 15
607 LOCATE 25, 1: INPUT "Xf DE ENTRADA"; XF
IF XF >= XM OR XF < 0 THEN 605 ELSE
LOCATE 24, 57: PRINT ""; XF
GOTO 620
610 XF = XMS
LOCATE 24, 57: PRINT ""; XF
620 FOR XAA = XM TO XF STEP -.001
TA1 = TA - ((XM - XAA) / M)
TLG = (TA1 - T1) / (T2 - T1)
TMG = (TLG * 250) + 45
XAG = 250 / (XA2 - XA1)
XMG = 266 - ((XAA - XA1) * XAG)

```

```

PSET (TMG, XMG), 1
NEXT XAA
PU1 = CAR * XM / L
CALL MOD2(PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)
680 CT1 = (A2 ^ A) * (B2 ^ B)
CT2 = (C2 ^ C) * (D2 ^ D)
KR1 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TL)))) * CT1
KR2 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TL)))) * CT2
RA = 1 / (KR1 - KR2)
RGA = 266 - ((250 / RAMAX) * RA)
XGA1 = 389 + (XF * 250)
XGA2 = 389 + (XM * 250)
LINE (XGA1, RGA)-(XGA2, 266), 1, BF
AREATOT = RA * (XM - XF) * F
CIRCLE (TMG, XMG), 2, 0
PAINT (TMG + 1, XMG), 0, 0
LOCATE 26, 57: PRINT ""; TA1
LOCATE 28, 57: PRINT ""; AREATOT
XMS = XM
PR = 0
LOCATE 28, 1: INPUT "PRESIONE UNA TECLA PARA CONTINUAR"; ZZZ
GOTO 1200

```

700 'PFR ADIABÁTICO

```

R$ = "N"
GOTO 704
702 LINE (0, 300)-(320, 450), 0, BF
COLOR 4
LOCATE 24, 1: PRINT "ERROR: T DEMASIADA ALTA"
COLOR 15
704 IF REACTOR = 1 OR SISTEMA = 2 THEN ELSE 705
LOCATE 23, 1: INPUT "XØ DE ENTRADA"; XF
LOCATE 24, 57: PRINT ""; XF
GOTO 708
705 XF = XMS
LOCATE 24, 57: PRINT ""; XF
LOCATE 23, 1: PRINT "XØ DE ENTRADA"; XF
708 LOCATE 25, 1: INPUT "T DE ENTRADA"; TA1
LOCATE 26, 57: PRINT ""; TA1
GVTAI = TA1
PR = 0
XFA = XF
GOTO 720
710 'RECIRCULACIÓN
R$ = "Y"
XAA1 = 0
AREATOT = 0

```

```

AREA = 0
LOCATE 22, 1: INPUT "COLOR (0-15)"; CS
LOCATE 23, 1: INPUT "CAUDAL Q RETORNA/CAUDAL Q SALE ="; PR
XF1 = (XF + (PR * XM)) / (1 + PR)
TA1 = TA - ((XM - XF1) / M)
FR = F * PR
XRC = (CINT(1000 * XF1)) / 1000
TRC = TA1
FRC = F + FR
LOCATE 24, 57: PRINT " "; XRC
LOCATE 26, 57: PRINT ""; TA1
XFA = XF1
720 RAA = 0
AREATOT = 0
TELG = (TA1 - T1) / (T2 - T1)
TEG = (TELG * 250) + 45
XEG = 250 / (XA2 - XA1)
XEG = 266 - (XFA * XEG)
FOR XAA = XFA TO XM STEP .001
TA = TA1 - ((XFA - XAA) / M)
TLG = (TA - T1) / (T2 - T1)
TMG = (TLG * 250) + 45
XAG = 250 / (XA2 - XA1)
XMG = 266 - ((XAA - XA1) * XAG)
PSET (TMG, XMG), CS
PU1 = CAR * XAA / L
CALL MOD2(PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)
700 CT1 = (A2 ^ A) * (B2 ^ B)
CT2 = (C2 ^ C) * (D2 ^ D)
KR1 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TA)))) * CT1
KR2 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TA)))) * CT2
SRA = KR1 - KR2
RA = 1 / (KR1 - KR2)
IF SRA <= 0 OR RA > RAMAX THEN 702 ELSE
IF RAA = 0 THEN 790 ELSE
AREA = ((RAA + RA) * (.001)) / 2
AREATOT = AREA + AREATOT
790 RGA = 266 - ((250 / RAMAX) * RA)
XGA = 389 + (XAA * 250)
LINE (XGA, RGA)-(XGA, 266), CS
RAA = RA
XAA1 = XAA
NEXT XAA
CIRCLE (TMG, XMG), 2, 0
PAINT (TMG + 1, XMG), 0, 0
CIRCLE (TEG, XEG), 2, 0
PAINT (TEG + 1, XEG), 0, 0

```

```

LOCATE 26, 70: PRINT ""; TA
AREATOT = (F * (1 + PR)) * AREATOT
LOCATE 28, 57: PRINT ""; AREATOT
XMS = XM
IF PR > 0 THEN 795 ELSE
LINE (0, 300)-(320, 450), 0, BF
LOCATE 21, 1: INPUT "CAMBIAR T DE ENTRADA (S/N) "; CS
IF CS = "S" OR CS = "s" THEN ELSE 795
LOCATE 22, 1: INPUT "T DE ENTRADA"; TSR
LOCATE 26, 57: PRINT ""; TSR
LOCATE 23, 1: INPUT "COLOR (0-15)"; CS
TA1 = TSR
GVTA1 = TA1
GOTO 720
795 LINE (0, 300)-(320, 450), 0, BF
LOCATE 21, 1: INPUT "SE REQUIERE RECIRCULACION (S/N) "; RCS
IF RCS = "S" OR RCS = "s" THEN 710 ELSE
XF = XF2
TA1 = GVTA1
LOCATE 28, 1: INPUT "PRESIONE UNA TECLA PARA CONTINUAR"; ZZZ
GOTO 1200

```

800 TRAZO DE UNA LÍNEA DE OPERACIÓN ISOTÉRMICA

IF REACTOR = 1 OR SISTEMA = 2 THEN ELSE 810

GOTO 807

805 COLOR 4

LOCATE 24, 1: PRINT "XA DE ENTRADA INCORRECTA"

COLOR 15

807 LOCATE 25, 1: INPUT "Xf DE ENTRADA"; XF

IF XF < 0 OR XF >= XM THEN 805 ELSE

LOCATE 24, 57: PRINT ""; XF

GOTO 820

810 XF = XMS

LOCATE 24, 57: PRINT ""; XF

820 IF NMR = 3 THEN 890 ELSE

'CSTR ISOTERMICO

LOCATE 26, 57: PRINT ""; TA

FOR XAA = XM TO XF STEP -.001

TLG = (TA - T1) / (T2 - T1)

TMG = (TLG * 250) + 45

XAG = 250 / (XA2 - XA1)

XMG = 266 - ((XAA - XA1) * XAG)

PSET (TMG, XMG), 4

NEXT XAA

PU1 = CAR * XM / L

CALL MOD2(PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)

```

880 CT1 = (A2 ^ A) * (B2 ^ B)
CT2 = (C2 ^ C) * (D2 ^ D)
KR1 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TL)))) * CT1)
KR2 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TL)))) * CT2)
RA = 1 / (KR1 - KR2)
RGA = 266 - ((250 / RAMAX) * RA)
XGA1 = 389 + (XF * 250)
XGA2 = 389 + (XM * 250)
LINE (XGA1, RGA)-(XGA2, 266), 4, BF
AREATOT = RA * (XM - XF) * F
GOTO 960

```

890 PFR ISOTERMICO

```

AREATOT = 0
RAA = 0
XAA1 = 0
FOR XAA = XM TO XF STEP -.001
TLG = (TA - T1) / (T2 - T1)
TMG = (TLG * 250) + 45
XAG = 250 / (XA2 - XA1)
XMG = 266 - ((XAA - XA1) * XAG)
PSET (TMG, XMG), 5
PU1 = CAR * XAA / L
CALL MOD2(PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)
CT1 = (A2 ^ A) * (B2 ^ B)
CT2 = (C2 ^ C) * (D2 ^ D)
KR1 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TA)))) * CT1)
KR2 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TA)))) * CT2)
AREA = ((RAA + RA) * (.001)) / 2
AREATOT = AREA + AREATOT
RA = 1 / (KR1 - KR2)
RGA = 266 - ((250 / RAMAX) * RA)
XGA = 389 + (XAA * 250)
LINE (XGA, RGA)-(XGA, 266), 5
RAA = RA
XAA1 = XAA
NEXT XAA
AREATOT = AREATOT * F
960 CIRCLE (TMG, XMG), 2, 0
PAINT (TMG + 1, XMG), 0, 0
TA1 = TA
LOCATE 26, 57: PRINT " "; TA1
LOCATE 28, 57: PRINT " "; AREATOT
XMS = XM
LOCATE 26, 1: INPUT "CAMBIAR LA T DE OPERACION (S/N) "; RC$
IF RC$ = "S" OR RC$ = "s" THEN ELSE 970

```

```

LINE (0, 300)-(320, 450), 0, BF
LOCATE 22, 1: INPUT "COLOR: LÍNEA DE OPERACIÓN (1-15)"; CL
LOCATE 23, 1: INPUT "TEMP. DE OPERACIÓN"; TA
LOCATE 26, 70: PRINT ""; TA
GOTO 890
970 LOCATE 28, 1: INPUT "PRESIONE UNA TECLA PARA CONTINUAR"; ZZZ
GOTO 1200

```

```

1000 'OPERACIÓN SOBRE LA CURVA DE MÁXIMOS
XAA1 = 0
AREATOT = 0
AREA = 0
LOCATE 20, 43: PRINT "OPERACIÓN SOBRE LA CURVA DE MÁXIMOS"
IF REACTOR = 1 OR SISTEMA = 2 THEN 1010 ELSE
XF = XMS
LOCATE 24, 57: PRINT ""; XF
GOTO 1020
1005 COLOR 4
LOCATE 24, 1: PRINT "XØ DE ENTRADA INCORRECTA"
COLOR 15
1010 LOCATE 25, 1: INPUT "XØ DE ENTRADA"; XF
IF XF < 0 OR XF >= XM THEN 1005 ELSE
1020 FOR XAA = XM TO XF STEP -.001
PUI = CAR * XAA / L
CALL MOD2(PUI, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)
1080 K11 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TL)))) * EA1
K22 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TL)))) * EA2
CT1 = (A2 ^ A) * (B2 ^ B)
CT2 = (C2 ^ C) * (D2 ^ D)
DEP1 = (K11 * EA1 * CT1) / (CGI * (TL ^ 2))
DEP2 = (K22 * EA2 * CT2) / (CGI * (TL ^ 2))
FG = DEP1 - DEP2
W1 = (K11 * CT1) - (K22 * CT2)
TJ = TL - (W1 / FG)
GY = ABS(TJ - TL)
IF GY <= .001 THEN 1090 ELSE
TL = TJ: GOTO 1080
1090 TLG = (TL - T1) / (T2 - T1)
TA1 = TL
TMG = (TLG * 250) + 45
XAG = 250 / (XA2 - XA1)
XMG = 266 - ((XAA - XA1) * XAG)
IF XMG > 266 OR TMG > 295 THEN 1110 ELSE
PSET (TMG, XMG), 14
KR1 = (K1 * (EXP(-EA1 / (1.99 * TL)))) * CT1
KR2 = (K2 * (EXP(-EA2 / (1.99 * TL)))) * CT2
RA = 1 / (KR1 - KR2)

```

```

IF XAA1 = 0 THEN 1100 ELSE
AREA = ((RAA + RA) * (XAA1 - XAA)) / 2
AREATOT = AREA + AREATOT
1100 RGA = 266 - ((250 / RAMAX) * RA)
XGA = 389 + (XAA * 250)
LINE (XGA, RGA)-(XGA, 266), 14
RAA = RA
XAA1 = XAA
NEXT XAA
CIRCLE (TMG, XMG), 2, 0
PAINT (TMG + 1, XMG), 0, 0
1110 TA1 = TL
AREATOT = F * AREATOT
LOCATE 26, 57: PRINT ""; TA1
LOCATE 28, 57: PRINT ""; AREATOT
LOCATE 24, 57: PRINT ""; (FIX(XAA * 100)) / 100
XMS = XM
LOCATE 28, 1: INPUT "PRESIONE UNA TECLA PARA CONTINUAR"; ZZZ

```

```

1200 'ALMACENADO DE TODAS LAS PROPIEDADES DE CADA REACTOR
SELECT CASE REACTOR
CASE 1
XFR1 = XF: XMR1 = XM: TA1R1 = TA1: TAR1 = TA: AREATOT1 = AREATOT: R1 =
NMR: L1$ = A$: R1$ = R$: FR1 = FR: TRC1 = TRC: XRC1 = XRC: FRC1 = FRC
CASE 2
XFR2 = XF: XMR2 = XM: TA1R2 = TA1: TAR2 = TA: AREATOT2 = AREATOT: R2 =
NMR: L2$ = A$: R2$ = R$: FR2 = FR: TRC2 = TRC: XRC2 = XRC: FRC2 = FRC
CASE 3
XFR3 = XF: XMR3 = XM: TA1R3 = TA1: TAR3 = TA: AREATOT3 = AREATOT: R3 =
NMR: L3$ = A$: R3$ = R$: FR3 = FR: TRC3 = TRC: XRC3 = XRC: FRC3 = FRC
CASE 4
XFR4 = XF: XMR4 = XM: TA1R4 = TA1: TAR4 = TA: AREATOT4 = AREATOT: R4 =
NMR: L4$ = A$: R4$ = R$: FR4 = FR: TRC4 = TRC: XRC4 = XRC: FRC4 = FRC
END SELECT
GOTO 510
1210 CLS

```

```

CSTR 110 X 80
DIM K%(3450)
LINE (50, 50)-(82, 100), 15, B
LINE (51, 65)-(81, 99), 5, BF
LINE (65, 90)-(66, 20), 7, BF
LINE (60, 30)-(71, 20), 7, B
CIRCLE (65, 40), 10, 15, 2.3, .6, .5
DRAW "BD6 BE7 U5 G3 F3"
CIRCLE (60, 90), 6, 7, ., .5

```



```
CIRCLE (72, 90), 6, 7, ., . 5
LINE (10, 60)-(45, 60), 15
DRAW " U3 F3 G3 U3"
LINE (82, 90)-(95, 90), 15
DRAW "U30 R21 U3 F3 G3 U3"
GET (10, 20)-(120, 100), K%
CLS
```

```
PFR 110 X 80
DIM J%(2550)
LINE (20, 180)-(40, 180), 15
DRAW "U3 F3 G3 U3"
CIRCLE (50, 180), 12, 15, 1.6, 4.6, 2
LINE (50, 165)-(53, 195), 15, B
LINE (53, 168)-(100, 192), 15, B
LINE (100, 165)-(103, 195), 15, B
CIRCLE (103, 180), 12, 15, 4.8, 1.5, 2
LINE (110, 180)-(126, 180), 15
DRAW "U3 F3 G3 U3"
GET (20, 140)-(130, 220), J%
LINE (20, 140)-(130, 220), 4, B
CLS
```

```
PFR RECIRCULACION 110 X 80
DIM L%(2900)
LINE (17, 152)-(20, 152), 15
DRAW "D30 R20 U3 F3 G3 U3"
LINE (36, 180)-(36, 135), 15, , &HAAAA
LINE (36, 135)-(42, 135), 15, , &HAAAA
DRAW "U3 F3 G3 U3"
CIRCLE (50, 180), 12, 15, 1.6, 4.6, 2
LINE (50, 165)-(53, 195), 15, B
LINE (53, 168)-(100, 192), 15, B
LINE (100, 165)-(103, 195), 15, B
CIRCLE (103, 180), 12, 15, 4.8, 1.5, 2
LINE (110, 180)-(120, 180), 15
DRAW " U28 R3 U3 F3 G3 U3 BL3 D28 L6 D25 L85 U19 L3 E3 F3 L3"
LOCATE 8, 7: PRINT "T=";
LOCATE 9, 7: PRINT "X=";
LOCATE 10, 7: PRINT "F=";
LINE (17, 112)-(127, 206), 8, B
GET (17, 112)-(127, 206), L%
DIM E%(1400)
LOCATE 17, 1: PRINT "T=";
LOCATE 18, 1: PRINT "X=";
LOCATE 19, 1: PRINT "F=";
```

GET (0, 225)-(70, 300), E%
CLS

'SISTEMA DE REACTORES INDIVIDUALES

1300 IF SISTEMA = 1 THEN 1400 ELSE

'REACTOR 1

IF R1 = 4 AND R1\$ = "Y" THEN ELSE 1305

LOCATE 7, 15: PRINT "FR="; FR1

LOCATE 1, 2: PRINT "ENTRADA"

LOCATE 1, 26: PRINT "SALIDA"

PUT (80, 0), L%

LOCATE 1, 17: PRINT CINT(TRC1)

LOCATE 2, 17: PRINT XRC1

LOCATE 3, 17: PRINT FRC1

GOTO 1320

1305 IF R1 = 1 OR R1 = 2 THEN 1310 ELSE

PUT (80, 0), J%

GOTO 1320

1310 PUT (80, 0), K%

1320 PUT (5, 0), E%

PUT (200, 0), E%

LOCATE 3, 5: PRINT CINT(TAIR1)

LOCATE 4, 5: PRINT XFR1

LOCATE 5, 5: PRINT F

LOCATE 3, 29: PRINT CINT(TAR1)

LOCATE 4, 29: PRINT XMR1

LOCATE 5, 29: PRINT F

'REACTOR 2

IF R2 = 0 THEN 1600 ELSE

IF R2 = 4 AND R2\$ = "Y" THEN ELSE 1325

LOCATE 7, 55: PRINT "FR="; FR2

LOCATE 1, 41: PRINT "ENTRADA"

LOCATE 1, 65: PRINT "SALIDA"

PUT (400, 0), L%

LOCATE 1, 57: PRINT CINT(TRC2)

LOCATE 2, 57: PRINT XRC2

LOCATE 3, 57: PRINT FRC2

GOTO 1340

1325 IF R2 = 1 OR R2 = 2 THEN 1330 ELSE

PUT (400, 0), J%

GOTO 1340

1330 PUT (400, 0), K%

1340 PUT (325, 0), E%

PUT (520, 0), E%

LOCATE 3, 69: PRINT CINT(TAR2)

LOCATE 4, 69: PRINT XMR2

LOCATE 5, 69: PRINT F

```

LOCATE 3, 45: PRINT CINT(TA1R2)
LOCATE 4, 45: PRINT XFR2
LOCATE 5, 45: PRINT F
'REACTOR 3
IF R3 = 0 THEN 1600 ELSE
IF R3 = 4 AND R3$ = "Y" THEN ELSE 1345
LOCATE 15, 15: PRINT "FR="; FR3
PUT (80, 128), L%
LOCATE 9, 17: PRINT CINT(TRC3)
LOCATE 10, 17: PRINT XRC3
LOCATE 11, 17: PRINT FRC3
GOTO 1360
1345 IF R3 = 1 OR R3 = 2 THEN 1350 ELSE
PUT (80, 128), J%
GOTO 1360
1350 PUT (80, 128), K%
1360 PUT (5, 128), E%
PUT (200, 128), E%
LOCATE 11, 5: PRINT CINT(TA1R3)
LOCATE 12, 5: PRINT XFR3
LOCATE 13, 5: PRINT F
LOCATE 11, 29: PRINT CINT(TAR3)
LOCATE 12, 29: PRINT XMR3
LOCATE 13, 29: PRINT F
'REACTOR 4
IF R4 = 0 THEN 1600 ELSE
IF R4 = 4 AND R4$ = "Y" THEN ELSE 1365
LOCATE 15, 55: PRINT "FR="; FR4
PUT (400, 128), L%
LOCATE 9, 57: PRINT CINT(TRC4)
LOCATE 10, 57: PRINT XRC4
LOCATE 11, 57: PRINT FRC4
GOTO 1380
1365 IF R4 = 1 OR R4 = 2 THEN 1370 ELSE
PUT (400, 128), J%
GOTO 1380
1370 PUT (400, 128), K%
1380
PUT (325, 128), E%
PUT (520, 128), E%
LOCATE 11, 69: PRINT CINT(TAR4)
LOCATE 12, 69: PRINT XMR4
LOCATE 13, 69: PRINT F
LOCATE 11, 45: PRINT CINT(TA1R4)
LOCATE 12, 45: PRINT XFR4
LOCATE 13, 45: PRINT F
GOTO 1600

```

```

1400 'SISTEMA DE REACTORES EN SERIE
LOCATE 9, 2: PRINT "ENTRADA"
LOCATE 11, 2: PRINT "T = "; CINT(TA1R1)
LOCATE 12, 2: PRINT "XØ = "; XFR1
LOCATE 13, 2: PRINT "F = "; F
'REACTOR 1
IF R1 = 4 AND R1$ = "Y" THEN ELSE 1405
LOCATE 16, 16: PRINT "FR="; FR1
PUT (85, 145), L%
LOCATE 10, 18: PRINT CINT(TRC1)
LOCATE 11, 18: PRINT XRC1
LOCATE 12, 18: PRINT FRC1
GOTO 1420
1405 IF R1 < 3 THEN 1410 ELSE
PUT (85, 145), J%
GOTO 1420
1410 PUT (85, 145), K%
1420 'REACTOR 2
IF R2 > 0 THEN 1430 ELSE
LOCATE 9, 27: PRINT "SALIDA"
LOCATE 11, 27: PRINT "T = "; CINT(TAR1)
LOCATE 12, 27: PRINT "XØ = "; XMR1
LOCATE 13, 27: PRINT "F = "; F
GOTO 1600
1430
IF R2 = 4 AND R2$ = "Y" THEN ELSE 1435
LOCATE 16, 29: PRINT "FR="; FR2
PUT (195, 145), L%
LOCATE 10, 32: PRINT CINT(TRC2)
LOCATE 11, 32: PRINT XRC2
LOCATE 12, 32: PRINT FRC2
GOTO 1450
1435 IF R2 = 1 OR R2 = 2 THEN 1440 ELSE
PUT (195, 145), J%
GOTO 1450
1440 PUT (195, 145), K%
1450 'REACTOR 3
IF R3 > 0 THEN 1460 ELSE
LOCATE 9, 41: PRINT "SALIDA"
LOCATE 11, 41: PRINT "T = "; CINT(TAR2)
LOCATE 12, 41: PRINT "XØ = "; XMR2
LOCATE 13, 41: PRINT "F = "; F
GOTO 1600

```

```

1460
IF R3 = 4 AND R3$ = "Y" THEN ELSE 1465
LOCATE 16, 43: PRINT "FR="; FR3
PUT (305, 145), L%
LOCATE 10, 45: PRINT CINT(TRC3)
LOCATE 11, 45: PRINT XRC3
LOCATE 12, 45: PRINT FRC3
GOTO 1480
1465 IF R3 = 1 OR R3 = 2 THEN 1470 ELSE
PUT (305, 145), J%
GOTO 1480
1470 PUT (305, 145), K%
LOCATE 20, 49: PRINT L3$
1480 REACTOR 4
IF R4 > 0 THEN 1490 ELSE
LOCATE 9, 54: PRINT "SALIDA"
LOCATE 11, 54: PRINT "T = "; CINT(TAR3)
LOCATE 12, 54: PRINT "XØ = "; XMR3
LOCATE 13, 54: PRINT "F = "; F
GOTO 1600
1490 IF R4 = 4 AND R4$ = "Y" THEN ELSE 1495
LOCATE 16, 57: PRINT "FR="; FR4
PUT (415, 145), L%
LOCATE 10, 59: PRINT CINT(TRC4)
LOCATE 11, 59: PRINT XRC4
LOCATE 12, 59: PRINT FRC4
GOTO 1510
1495 IF R4 = 1 OR R4 = 2 THEN 1500 ELSE
PUT (415, 145), J%
GOTO 1510
1500 PUT (415, 145), K%
1510
LOCATE 9, 68: PRINT "SALIDA"
LOCATE 11, 68: PRINT "T = "; CINT(TAR4)
LOCATE 12, 68: PRINT "XØ = "; XMR4
LOCATE 13, 68: PRINT "F = "; F

1600 ' DATOS FINALES DE REACTORES
LOCATE 23, 17: PRINT ""; XFR1
LOCATE 23, 25: PRINT ""; XMR1
LOCATE 25, 17: PRINT ""; CINT(TA1R1)
LOCATE 25, 25: PRINT ""; CINT(TAR1)
LOCATE 27, 17: PRINT ""; AREATOT1
LOCATE 20, 16: PRINT L1$
IF R2 = 0 THEN 1700 ELSE
LOCATE 23, 32: PRINT ""; XFR2
LOCATE 23, 40: PRINT ""; XMR2

```

```

LOCATE 25, 32: PRINT ""; CINT(TA1R2)
LOCATE 25, 40: PRINT ""; CINT(TAR2)
LOCATE 27, 32: PRINT ""; AREATOT2
LOCATE 20, 32: PRINT L2$
IF R3 = 0 THEN 1700 ELSE
LOCATE 23, 48: PRINT ""; XFR3
LOCATE 23, 56: PRINT ""; XMR3
LOCATE 25, 48: PRINT ""; CINT(TA1R3)
LOCATE 25, 56: PRINT ""; CINT(TAR3)
LOCATE 27, 48: PRINT ""; AREATOT3
LOCATE 20, 48: PRINT L3$
IF R4 = 0 THEN 1700 ELSE
LOCATE 23, 64: PRINT ""; XFR4
LOCATE 23, 72: PRINT ""; XMR4
LOCATE 25, 64: PRINT ""; CINT(TA1R4)
LOCATE 25, 72: PRINT ""; CINT(TAR4)
LOCATE 27, 64: PRINT ""; AREATOT4
LOCATE 20, 64: PRINT L4$

```

1700 TABLA DE PROPIEDADES DEL SISTEMA DE REACTORES

```

FOR i = 17 TO 68 STEP 16
LOCATE 21, i: PRINT "IN   OUT"
NEXT i
LOCATE 23, 2: PRINT "CONVERSION"
LOCATE 25, 2: PRINT "TEMP. (°K)"
LOCATE 27, 2: PRINT "VOL.(LITROS)"
LINE (0, 300)-(620, 450), 15, B
LINE (110, 318)-(620, 318), 15
LINE (0, 340)-(620, 340), 15
LINE (0, 375)-(620, 375), 15
LINE (0, 410)-(620, 410), 15
FOR i = 182 TO 600 STEP 125
LINE (i, 318)-(i, 410), 15
LINE (110, 300)-(110, 450), 15
NEXT i
FOR i = 245 TO 620 STEP 125
LINE (i, 300)-(i, 450), 15
NEXT i
COLOR 12
LOCATE 30, 1: INPUT "EJECUTAR NUEVAMENTE EL PROGRAMA CON TODA
LA INFORMACIÓN BASE (S/N)"; RPTS$
COLOR 15
IF RPTS$ = "S" OR RPTS$ = "s" THEN 137 ELSE
END

```

SUB MOD2 (PU1, A, B, C, D, A2, B2, C2, D2, CA, CB, CC, CD)

A2 = CA - (A * PU1):

B1 = CB - (B * PU1):

C2 = C * PU1

D1 = D * PU1

IF D1 = 0 THEN ELSE 2210

D2 = 1

DD2 = 0

GOTO 2220

2210 D2 = D1

DD2 = D1

2220 IF B1 = 0 THEN ELSE 2230

B2 = 1

BB2 = 0

GOTO 2240

2230 B2 = B1

BB2 = B2

2240

END SUB

SUB MOD3 (J, K, L)

PSET (220, 50), 15

DRAW "U40 R10 D30 R20 U30 R10 D40 L40 BR50"

DRAW "U40 R13 F30 U30 R10 D40 L13 H30 D30 L10 BR63"

DRAW "U40 R40 D40 L10 U10 L20 D10 L10 R10 BU20 R20 U10 L20 D10 BR40"

DRAW "U20 R10 F20 E20 R10 D40 L10 U25 G20 H20 D25 L10 U20"

PSET (75, 150), 15

DRAW "U10 R10 U20 L10 U10 R30 D10 L10 D20 R10 D10 L30 BR40"

DRAW "U40 R13 F30 U30 R10 D40 L13 H30 D30 L10 BR63"

DRAW "U40 R35 D10 L25 D20 R15 U5 L5 U10 R15 D25 L35 BR45 R10 U10 L10 D10 BR30"

DRAW "U40 R30 D40 F5 L10 H5 L20 R10 BU10 U20 R10 D20 L10 BD10 BR30"

DRAW "U40 R10 D30 R10 U30 R10 D40 L30 BR40"

DRAW "U10 R10 U20 L10 U10 R30 D10 L10 D20 R10 D10 L30 BR40"

DRAW "U40 R10 F20 E20 R10 D40 L10 U25 G20 H20 D25 L10 BR70"

DRAW "U10 R10 U20 L10 U10 R30 D10 L10 D20 R10 D10 L30 BR40"

DRAW "U40 R30 D10 L20 D20 R20 D10 L30 BR40"

DRAW "U40 R40 D40 L10 U10 L20 D10 L10 R10 BU20 R20 U10 L20 D10 BR40"

PSET (450, 50), 15

DRAW "U50 R30 D10 L20 D10 R20 D10 L20 D20 L10 BR40"

DRAW "U50 R30 D10 L20 D10 R20 D10 L20 D10 R20 D10 L30 BR40"

DRAW "R30 U30 L20 U10 R20 U10 L30 D30 R20 D10 L20 D10 BR40"

DRAW "U50 R30 D10 L20 D30 R20 D10 L30"

LOCATE 22, 21: PRINT "FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN"

COLOR 9

LOCATE 24, 10: PRINT "CARACTERIZACIÓN DE REACTORES HOMOGÉNEOS EN ESTADO ESTACIONARIO"

```

LOCATE 25, 25: PRINT "CON FLUJO IDEAL EN FASE LÍQUIDA"
COLOR 15
LOCATE 28, 21: PRINT "ELABORO: IQ RODRÍGUEZ ZÚÑIGA JOSÉ ANTONIO"
CIRCLE (320, 220), 40, , , , 2
DRAW "BD80"
CIRCLE STEP(0, 0), 40, , 3, , 2
DRAW "BR40 U80 BL80 D80"
CIRCLE (320, 250), 40, 15, , , 2
PAINT (320, 260), 9, 15
PAINT (320, 250), 9, 15
PSET STEP(0, 0), 7
DRAW "U50 R1 D50 L2 U50 R7 U10 L12 D10 R6 "
FOR E = 0 TO 1000
FOR T = 0 TO 15
CIRCLE (318, 306 - (3 * T)), T / 10, 15
FOR G = 0 TO 4
CIRCLE (322, 305 - (5 * G)), G / 3, 15
FOR U = 0 TO 10
CIRCLE (316, 305 - (2 * U)), 0, 15
LINE (325 - U, 191)-(325 - U, 199), 15
FOR H = 0 TO 1000 STEP .5
NEXT H
LINE (325 - U, 191)-(325 - U, 199), 8
CIRCLE (316, 305 - (2 * U)), 0, 9
NEXT U
CIRCLE (322, 305 - (5 * G)), G / 3, 9
NEXT G
CIRCLE (318, 306 - (3 * T)), T / 10, 9
IF INKEY$ = CHR$(32) THEN 2 ELSE
NEXT T
NEXT E
2 CLS
LOCATE 10, 2: PRINT " Este programa fue presentado en el 2005 en la FES Cuautitlán
como complemento de la tesis titulada: "
COLOR 9
LOCATE 13, 2: PRINT "Algoritmo Computacional Para el Diseño de Reactores en Estado
Estacionario con Flujo Ideal en Sistemas Reaccionantes Homogéneos Simples y no
Isotérmicos"
COLOR 15
LOCATE 19, 2: PRINT "ELABORADA POR: I.Q. RODRÍGUEZ ZÚÑIGA JOSÉ
ANTONIO"
LOCATE 28, 2: INPUT "Presiona ENTER para ingresar al programa"; q
END SUB

```


CAPÍTULO V

INSTRUCCIONES DE USO DEL PROGRAMA REACTOR.BAS

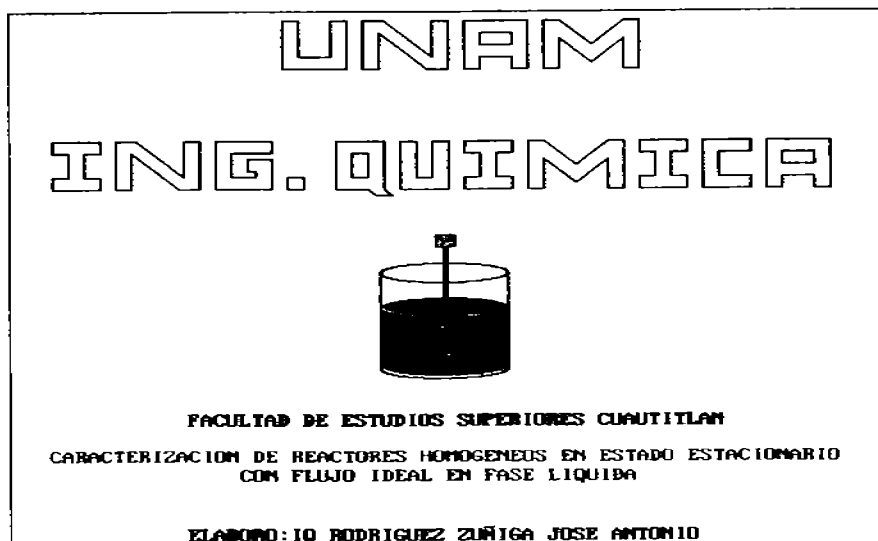
5.1.0 MANUAL REACTOR.BAS

El siguiente manual describe paso a paso el manejo del programa REACTOR.BAS, que constituirá una herramienta de apoyo didáctico en el diseño de reactores individuales o en serie, abarcando cinco modelos de reactores, con una capacidad de hasta cuatro reactores en serie. En lo que respecta a los reactivos es posible manejar 1 o 2 de igual manera que de productos, las propiedades cinéticas y termodinámicas del sistema reaccionante están incluidas en el programa, con opción a modificarse.

5.1.1 Abrir el Programa.

El programa se ejecuta en Qbasic y requiere de 31Kb de memoria en disco duro. El ejecutable de Qbasic ocupa 190KB de memoria y es posible encontrarlo en los discos de instalación de cualquier versión de Windows.

5.1.2 Pulsar F5



Para salir de la pantalla de inicio deberás oprimir la tecla de espacios.

La siguiente pantalla proporciona la referencia sobre este programa.

<p>Este programa fue presentado en el 2005 en la FES Cuautitlan como complemento de la tesis titulada:</p> <p>Algoritmo Computacional Para el Diseño de Reactores en Estado Estacionario con Flujo Ideal en Sistemas Reaccionantes Homogeneos Simples y no Isotérmicos</p> <p>ELABORADA POR: I.Q. RODRIGUEZ ZUÑIGA JOSE ANTONIO</p> <p>Presiona ENTER para ingresar al programa?</p>

Posterior a las pantallas de presentación, el programa proporcionara la tabla de las propiedades del sistema reaccionante que podrán ser seleccionadas por el usuario.

PROPIEDADES DEL SISTEMA REACCIONANTE			
NUM. DE REACTIVOS (1 ó 2)?		$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$	
NUM. DE PRODUCTOS (1 ó 2)?			
COEFICIENTES	CONCENTRACION (mol/litro)	PESO MOLECULAR (grs/mol)	CAPACIDAD CALORIFICA (cal/mol°K)
a= ?	[A]= ?	PMa= ?	CPa= ?
b= ?	[B]= ?	PMb= ?	CPb= ?
c= ?	[C]= ?		CPc= ?
d= ?	[D]= ?		CPd= ?

Primeramente se deberá elegir el número de reactivos y productos, posteriormente se introducirán los valores de los coeficientes estequiométricos, concentraciones, pesos moleculares y capacidades caloríficas.

A continuación el programa da la opción de modificar estos datos:
¿DESEA MODIFICAR LAS PROPIEDADES QUE SELECCIONO (S/N)?

5.1.3 Juego de Datos en los que se Basan los Ejemplos con los que se Ilustrará el Manual.

$$\Delta G^{\circ}_{298} = 3375 \text{ cal/mol}$$

$$K_{298} = e^{(\Delta G^{\circ}/RT)} = 300$$

$$\Delta H_{298} = -18000$$

De la ecuación 3.4.0b

$$\ln K_T/K_{298} = (-\Delta H_r/R)(1/T - 1/298)$$

$$K_T = 300 e^{(-\Delta H_r/R)(1/T - 1/298)}$$

$$K_T = e^{(18000/RT) - 24.649}$$

Reacción reversible de primer orden en un reactor discontinuo

$$A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} B \quad \left\{ \begin{array}{l} X_A = 58.1\% \text{ en 1 minuto a } 338^\circ\text{K} \\ X_A = 60\% \text{ en 10 minutos a } 298^\circ\text{K} \end{array} \right.$$

$$-\ln(1 - X_A/X_{Ac}) = k_1 t / X_{Ac} \quad \text{Ecuación 3-54 Levenspiel}$$

$$k_1 = [-\ln(1 - X_A/X_{Ac}) (X_{Ac})] / t$$

$$k_{1338} = 0.9415$$

$$k_{1298} = 0.0922$$

$$k_{1298} / k_{1338} = k_{10} e^{-E_1/R(298)} / k_{10} e^{-E_1/R(338)}$$

$$E_1 = 11625 \text{ cal/mol}$$

$$\Delta H_r = E_2 - E_1$$

$$E_2 = 29625 \text{ cal/mol}$$

$$k_{1298} = k_{10} e^{-E_1/R(298)}$$

$$k_{10} = 3.09799 \times 10^7$$

$$k_1 = 3.09799 \times 10^7 e^{-11625/RT}$$

$$K = k_1 / k_2$$

$$k_2 = [3.09799 \times 10^7 e^{-11625/RT}] / [e^{18000/RT - 24.649}]$$

$$k_2 = 1.570379 \times 10^{18} e^{-29625/RT}$$

Solo fueron necesarios ΔG°_{298} , ΔH°_{298} y las dos experiencias en el reactor discontinuo, para establecer las propiedades del sistema reaccionante. Cambiar el valor de una de estas propiedades implica la modificación del valor de alguna otra, debido a la interrelación existente entre ellas.

Tabla 5.1.3 Valores y Unidades de las propiedades del sistema reaccionante.

PROPIEDADES DEL SISTEMA REACCIONANTE			
NUM. DE REACTIVOS (1 6 2)? 1		2 A \longleftrightarrow 3 C	
NUM. DE PRODUCTOS (1 6 2)? 1			
COEFICIENTES	CONCENTRACION (mol/litro)	PESO MOLECULAR (grs/mol)	CAPACIDAD CALORIFICA (cal/mol $^{\circ}$ K)
a= ? 2 c= ? 3	I(A)= ? 4 I(C)= ? 6	P(A)= ? 24	C(A)= ? 9 C(C)= ? 13
TEMP. REF. DE LA ENTALPIA ($^{\circ}$ K) = 298		\longrightarrow K1 (l/min) = 3.89799E+67	
ENTALPIA DE REACCION (cal/mol) = -18000		EA1 (cal/mol) = 11625	
TEMP. REF. DE LA Req ($^{\circ}$ K) = 298		\longleftarrow K2 (l/min) = 1.578379E+18	
CONSTANTE DE EQUILIBRIO (s/a) = 300		EA2 (cal/mol) = 29625	
CONSTANTE UNIVERSAL (cal/mol $^{\circ}$ K) = 1.987		FLUJO (mol/min) = 1500	
INTERVALO DE TEMPERATURAS			
TEMPERATURA MINIMA ($^{\circ}$ K) = ?		TEMPERATURA MAXIMA ($^{\circ}$ K) = ?	

Los datos termodinámicos y cinéticos contenidos en la tabla anterior, no podrán ser modificados mientras se ejecuta el programa. Si se desea modificar estos valores, deberá hacerse desde el interior del programa, en la línea 130 de comandos.

5.1.4 Intervalo de Temperaturas.

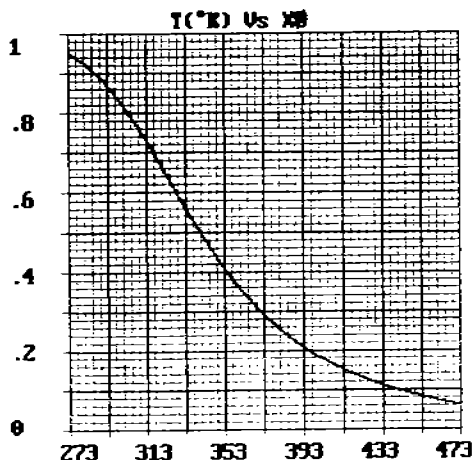
Deberán seleccionarse las temperaturas mínima y máxima que marcaran el intervalo en el que se visualizara el gráfico T Vs X_A . Seleccionaremos el intervalo comprendido entre los valores de temperatura de 273 °K y 473 °K.

INTERVALO DE TEMPERATURAS	
TEMPERATURA MINIMA = ? 273	TEMPERATURA MAXIMA = ? 473

El programa permite corroborar el intervalo de temperaturas, en caso de error será posible hacer las correcciones necesarias.

¿ES CORRECTO EL INTERVALO DE TEMPERATURAS (S/N) ?	
TEMPERATURA MINIMA = ? 273	TEMPERATURA MAXIMA = ? 473

Con los datos introducidos anteriormente el programa trazará la curva de equilibrio en el plano T Vs X_A .

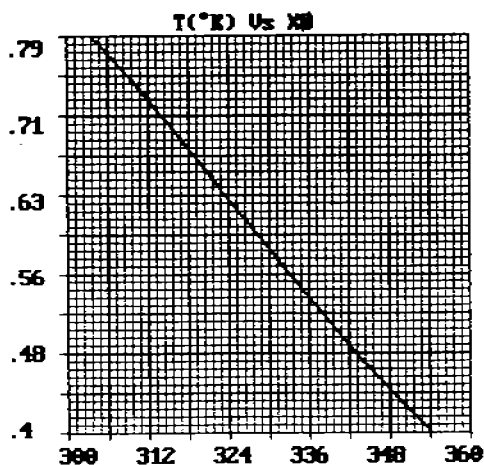


5.1.5 Modificación de Intervalos de T y X_A .

Posterior al trazo de la curva el programa sugiere un cambio en el intervalo de visualización del gráfico, es decisión del usuario el modificarlo. Si se desea visualizar la gráfica en otro intervalo deberán seleccionarse T y X_A mínima y máxima. En este ejemplo seleccionamos los valores de:

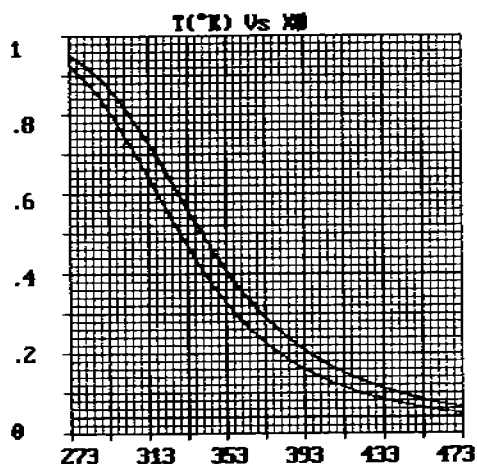
```
ANALIZAR LA CURVA EN OTRO
INTERVALO (S/N)? s
TEMP. MIN.? 300
TEMP. MAX.? 360
CONV. MIN.? .4
CONV. MAX.? .8
```

La selección del nuevo intervalo debe ser en base al gráfico del punto 5.1.4 y no al azar, las coordenadas elegidas deben contener el segmento de curva que se desea visualizar.



5.1.6 Trazo de la Curva de Máximos de las Isocinéticas.

En este momento seleccionaremos la temperatura donde iniciara el trazo de la curva, nótese que el valor de temperatura seleccionada (473 °K) se encuentra en donde la curva de equilibrio esta más próxima al eje de la temperatura.



EL TRAZO DE LA CURVA DE MAX. ES CORRECTO (S/N)?

Si la temperatura seleccionada no produce el trazo de la curva, entonces debemos seleccionar otra temperatura, recordando que el método de Newton puede no llegar a la solución si la estimación inicial esta muy lejos del valor de la temperatura correcta.

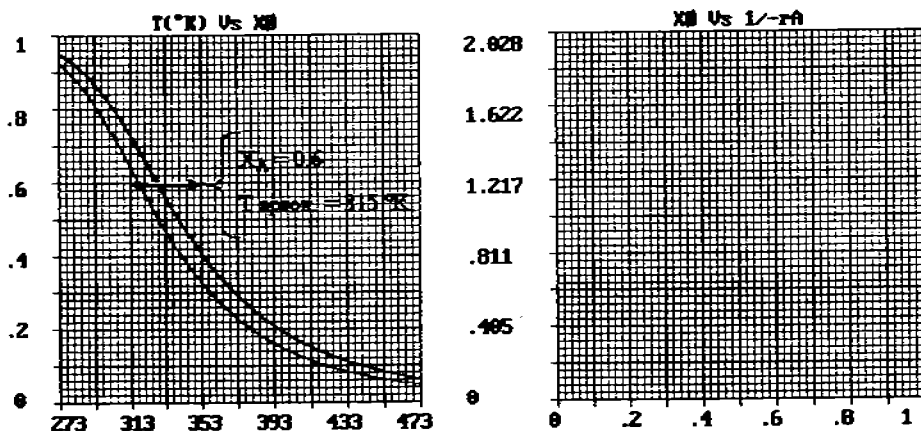
Lo que el programa hará en este momento es buscar la temperatura que satisfaga la ecuación 3.5.0b para la X_A mínima seleccionada, una vez encontrada se dará un incremento a X_A y se buscará su respectiva temperatura la que deberá cumplir con la misma condición.

5.1.7 Selección de la Escala del Eje $-1/r_A$ en el Gráfico X_A vs $-1/r_A$.

Aquí seleccionaremos una conversión mayor a la que se desea se obtenga del último reactor del sistema a diseñar. Hemos seleccionado $X_A=0.6$ y una T aprox. de 315°K .

PARAMETROS PARA LAS ESCALA DEL GRAFICO X_A vs $1/-r_A$

X_A MAX. ? .6
 T APROXIMADA? 315



La T aproximada se obtiene del gráfico que esta a la izquierda, en la intersección con el valor de X_A . A continuación el programa encontrará la temperatura correspondiente con una aproximación de milésimas, con estos valores (T y X_A) se calculará $-1/r_A$, a partir de la cual se obtendrán las escalas en el gráfico del lado derecho.

5.1.8 Sistema de Reactores.

A continuación aparecerá en la pantalla el siguiente mensaje:

REACTORES EN SERIE (1)
REACTORES INDIVIDUALES (2)?

La selección de cualquiera de las dos formas de ordenar los reactores se hará escribiendo el número 1 o el número 2 de acuerdo al interés del usuario:

- Opción 1: en ella se le solicitará al usuario introduzca los valores de T y X_A de entrada solo en el primer reactor, en todos los demás reactores solo se pedirán los datos de salida ya que el programa tomará como datos de entrada los valores de salida del reactor que lo anteceda.
- Opción 2: en esta se le solicitará al usuario introduzca los valores de T y X_A de entrada y de salida de cada reactor.

En seguida aparecerá el siguiente cuestionamiento: **NUM. DE REACTOR?**

El número de reactor, indicará el orden en el cual estarán los reactores, teniendo un número máximo de 4. Será posible sobrescribir un reactor en sistemas individuales, es decir si acabamos de diseñar el tercer reactor podemos elegir nuevamente el reactor 1, 2 ó 3, quedando en memoria solo los datos del último reactor.

5.1.9 Modelos de Reactores

Una vez elegido el número de reactor, se procederá a seleccionar un modelo de reactor teniendo las siguientes cinco opciones:

NUM. DE REACTOR? 1
SELECCIONA UN MODELO DE REACTOR?
CSTR ISOTERMICO (1)
CSTR ADIABATICO (2)
PFR ISOTERMICO (3)
PFR ADIABATICO (4)
PFR RUTA T. O. (5)

5.1.10 CSTR Isotérmico:

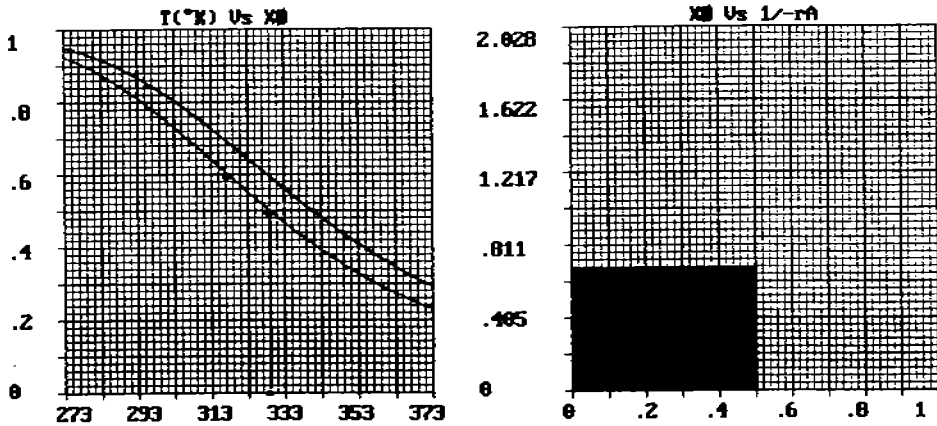
La secuencia de datos a introducir es la siguiente:

(T, X_B) DE SALIDA Y ENTRADA AL REACTOR

X_B DE SALIDA? .5

T APROXIMADA? 330

X_B DE ENTRADA? 0



Conforme sean introducidos los datos requeridos por el programa, aparecerá una tabla en la parte inferior derecha. En ella el programa escribirá las conversiones (datos) y las temperaturas correctas (calculadas a partir de la temperatura de referencia que el programa solicita como temperatura aproximada), además de proporcionar el volumen del reactor (calculado al multiplicar el área del gráfico X_A vs -1/r_A por el flujo molar).

CSTR ISOTERMICO		
	ENTRADA	SALIDA
CONVERSION	0	.5
TEMP. (°K)	328.9899	328.9899
VOL. (LITROS)	512.7149	

5.1.11 CSTR Adiabático:

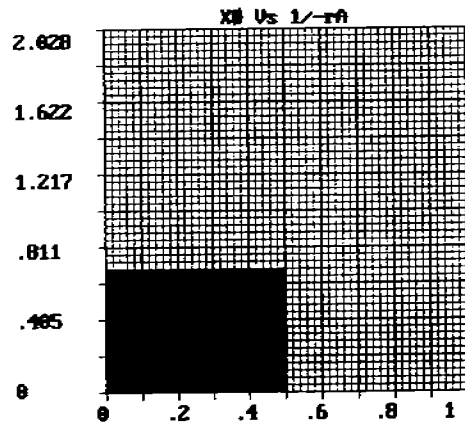
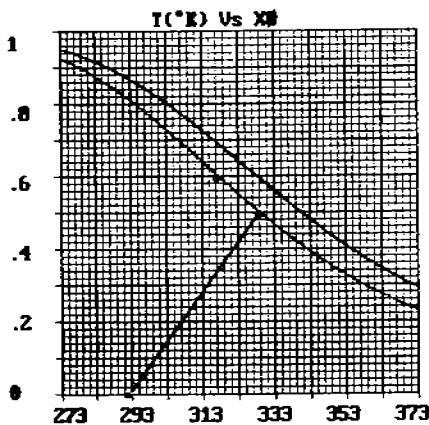
Esta es la secuencia de datos a introducir:

(T,X_B) DE SALIDA Y ENTRADA AL REACTOR

X_B DE SALIDA? .5

T APROXIMADA? 330

X_B DE ENTRADA? 0



En la tabla el programa escribirá las conversiones (datos) y la temperatura de salida correcta (calculada a partir de la temperatura de referencia que el programa solicita como temperatura aproximada), la temperatura de entrada es calculada mediante las propiedades termodinámicas del sistema. El volumen del reactor es calculado al multiplicar el área del gráfico X_A vs $-1/r_A$ por el flujo molar.

CSTR ADIABATICO		
	ENTRADA	SALIDA
CONVERSION	0	.5
TEMP. (°K)	292.3382	328.9899
VOL. (LITROS)	512.7149	

5.1.12 PFR Isotérmico.

Esta es la secuencia de datos a introducir:

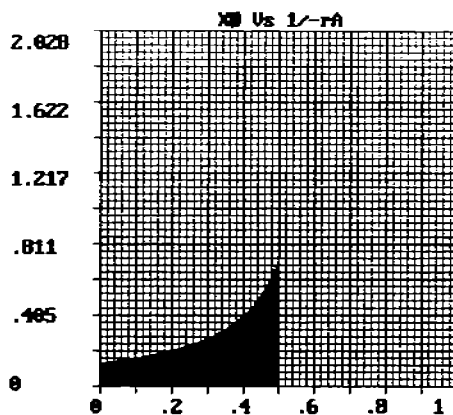
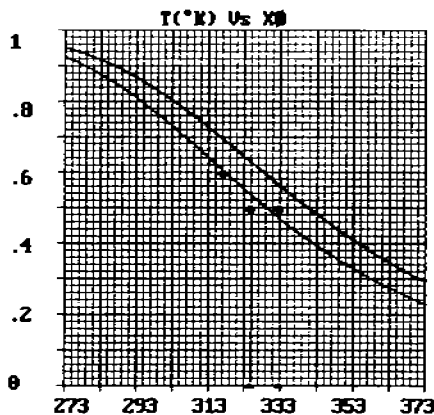
(T,XB) DE SALIDA Y ENTRADA AL REACTOR

T DE OPERACION? 325

XB DE SALIDA? .5

XB DE ENTRADA? 0

CAMBIAR LA T DE OPERACION (S/N) ? s



COLOR: LINEA DE OPERACION (1-15)? 13

TEMP. DE OPERACION? 333

CAMBIAR LA T DE OPERACION (S/N) ?

PFR ISOTERMICO		
	ENTRADA	SALIDA
CONVERSION	0	.5
TEMP. (°K)	333	333
VOL. (LITROS)	156.8255	

En la tabla el programa escribirá las conversiones (datos) y la temperatura de operación, que será igual tanto para la de entrada como para la de salida por tratarse de un proceso isotérmico. El volumen del reactor es calculado al multiplicar el área del gráfico X_A vs $-1/r_A$ por el flujo molar. En este modelo tendremos la opción de modificar la temperatura de operación.

5.1.13 PFR de Ruta Térmica Óptima.

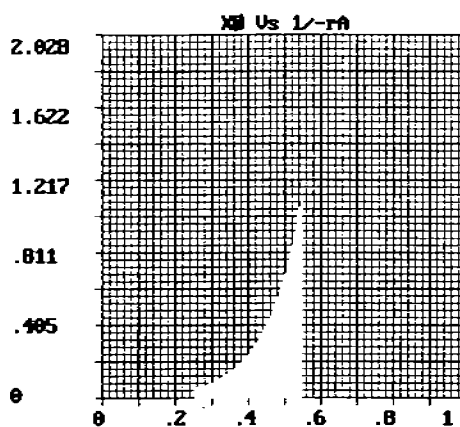
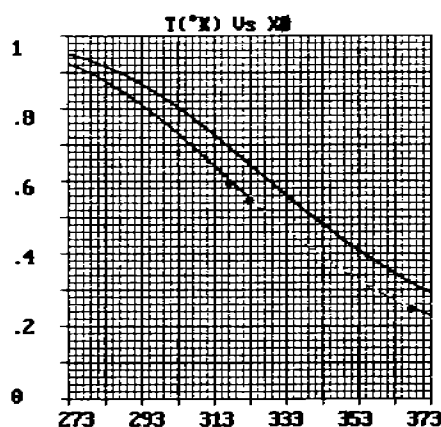
En el caso del PFR de ruta térmica óptima, la línea de operación corresponde a la curva que describe los puntos máximos de las isocinéticas.

(T, X_B) DE SALIDA Y ENTRADA AL REACTOR

X_B DE SALIDA? .55

T APROXIMADA? 323

X_B DE ENTRADA? .25



En la tabla aparecen las conversiones (datos) y las temperaturas de salida y de entrada son calculadas de manera análoga, ambas se obtienen de la ecuación que describe los puntos máximos de las isocinéticas. El volumen del reactor es calculado al multiplicar el área del gráfico X_A vs $-1/r_A$ por el flujo molar.

OPERACION SOBRE LA CURVA DE MAXIMOS		
	ENTRADA	SALIDA
CONVERSION	.24	.55
TEMP. (°K)	367.637	323.1516
VOL. (LITROS)	158.8489	

5.1.14 PFR Adiabático.

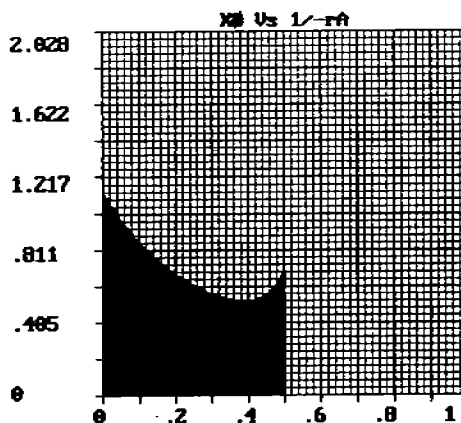
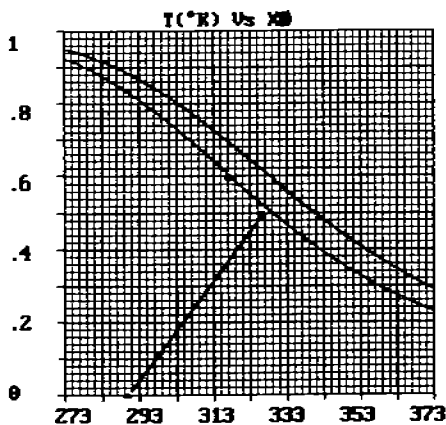
Los PFR adiabáticos presentan el caso más interesante de los cinco modelos aquí expuestos, en ellos será necesario buscar la temperatura de entrada que produzca un volumen mínimo, además de que es en estos, donde la recirculación tiene efectos favorables sobre el volumen, durante el diseño del reactor.

(T, X_B) DE SALIDA Y ENTRADA AL REACTOR

X_B DE SALIDA? .5

X_B DE ENTRADA? 0

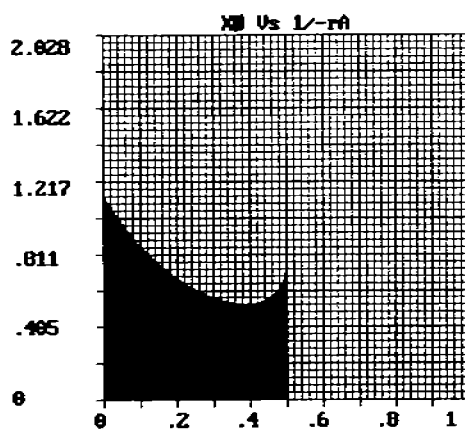
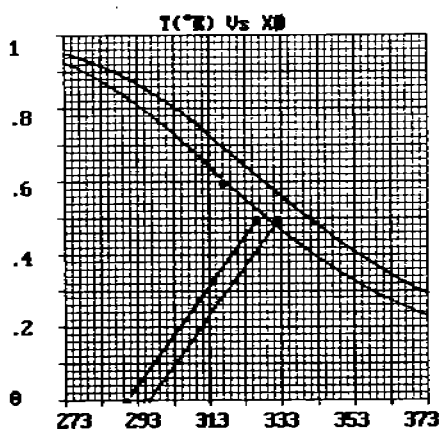
T DE ENTRADA? 290



PFR ADIABATICO		
	ENTRADA	SALIDA
CONVERSION	0	.5
TEMP. (°K)	290	326.6597
VOL. (LITROS)	518.0246	

A continuación el programa permite recorrer la línea de operación, esto es modificando la temperatura de entrada al reactor. La intención de esto es reducir al máximo el volumen del reactor, debemos considerar que bajo ninguna circunstancia la línea de operación debe tocar a la curva de equilibrio.

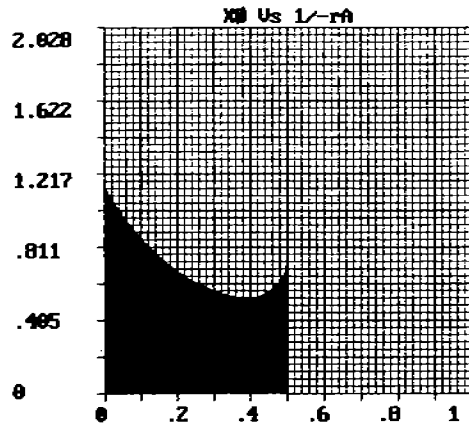
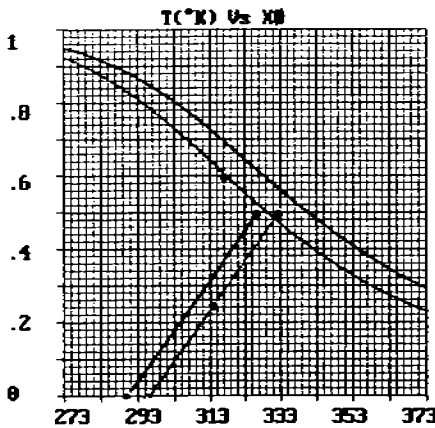
CAMBIA T DE ENTRADA (S/N) ? s
 T DE ENTRADA? 296
 COLOR (0-15)? 3



PFR ADIABATICO		
	ENTRADA	SALIDA
CONVERSION	0	.5
TEMP. (°K)	296	332.6597
VOL. (LITROS)	370.3075	

El programa nuevamente cuestiona el cambio de temperatura de entrada, en esta ocasión responderemos negativamente para así pasar a la siguiente opción. Ahora el cuestionamiento se refiere a la recirculación, la intención al recircular también es disminuir el volumen de diseño del reactor.

SE REQUIERE RECIRCULACION (S/N) ? s
 COLOR (0-15)? 9
 CAUDAL Q RETORNA/CAUDAL Q SALE =? 1



PFR ADIABATICO		
	ENTRADA	SALIDA
CONVERSION	.25	.5
TEMP. (°K)	314.3295	332.6592
VOL. (LITROS)	322.4361	

Al modificar la temperatura de entrada en el primer reactor disminuimos en un 28.51% su volumen, posteriormente la recirculación produce una disminución del 12.93% sobre el volumen que ya había sido disminuido. La disminución neta es del 37.75% en el tercer reactor respecto al primero.

5.1.15 Características de los Reactores Diseñados.

Al final de la ejecución del programa, se ilustrarán los reactores de forma individual o en serie, de acuerdo a la elección previa del sistema. Cada reactor o el sistema en serie tendrán asentadas las propiedades de entrada y salida. Las propiedades que caracterizan a estos sistemas son T, X y F (temperatura, conversión y flujo molar respectivamente). En el caso de los sistemas con recirculación estas propiedades estarán escritas a la entrada del sistema y a la entrada al reactor.

Figura 5.1.15a Reactor de Flujo en Pistón (PFR)

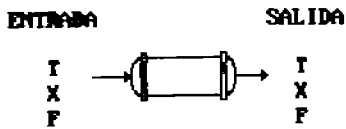


Figura 5.1.15b Reactor de Mezcla Completa (CSTR)

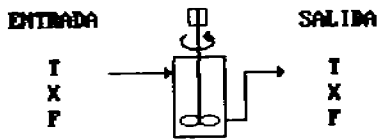
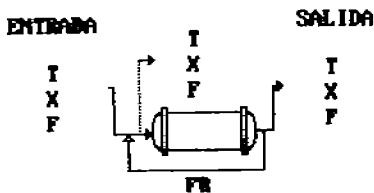


Figura 5.1.15c Reactor de Flujo en Pistón con Recirculación



Finalmente es expuesta dentro de la misma pantalla la tabla donde son listadas las propiedades de los reactores analizados durante la ejecución del programa. Sin olvidar que en los sistemas individuales el número de reactores que se pueden analizar es infinito con el inconveniente de que el programa solo guardará en memoria el último trabajado en cada una de las cuatro opciones (1-4).

Tabla 5.1.15 Propiedades de los sistemas analizados en el programa

	MOD. DE REACTOR		MOD. DE REACTOR		MOD. DE REACTOR		MOD. DE REACTOR	
	IN	OUT	IN	OUT	IN	OUT	IN	OUT
CONVERSION								
TEMP. (°K)								
VOL. (LITROS)								

5.1.16 Repetir la Ejecución del Programa.

Si se desea ejecutar nuevamente el programa conservando las propiedades del sistema reaccionante. Se deberá responder afirmativamente el siguiente cuestionamiento:

EJECUTAR NUEVAMENTE EL PROGRAMA CON TODA LA INFORMACION BASE (S/N)?

El programa iniciará su ejecución a partir de la elección de los rangos de visualización (punto 5.1.5). Si se desea cambiar algún dato anterior a este punto, entonces se deberá iniciar el programa desde el principio.

5.1.17 Ejemplos.

Complementaremos este manual, ejecutando en el programa los ejemplos 8-4 y 8-5 propuestos por Levenspiel, en el libro: INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS.

PROPIEDADES DEL SISTEMA REACCIONANTE			
NUM. DE REACTIVOS (1 6 2) ? 1		1 A \longleftrightarrow 1 C	
NUM. DE PRODUCTOS (1 6 2) ? 1			
COEFICIENTES a = ? 1 c = ? 1	CONCENTRACION (mol/litro) [A] = ? 4 [C] = ? 0	PESO MOLECULAR (grs/mol) PMA = ? 18	CAPACIDAD CALORIFICA (cal/mol $^{\circ}$ K) CPA = ? 18 CPC = ? 18
TEMP. REF. DE LA ENTALPIA ($^{\circ}$ K) = 298		\longrightarrow K1 (L/min) = $3E+07$	
ENTALPIA DE REACCION (cal/mol) = -18000		EA1 (cal/mol) = 11600	
TEMP. REF. DE LA K _{eq} ($^{\circ}$ K) = 298		\longleftarrow K2 (L/min) = $1.5E+18$	
CONSTANTE DE EQUILIBRIO (g/m) = 300		EA2 (cal/mol) = 29600	
CONSTANTE UNIVERSAL (cal/mol $^{\circ}$ K) = 1.987		FLUJO (mol/min) = 1000	
INTERVALO DE TEMPERATURAS			
TEMPERATURA MINIMA ($^{\circ}$ K) = ? 273		TEMPERATURA MAXIMA ($^{\circ}$ K) = ? 373	

8-4 diseño de un reactor de mezcla completa.

Consideremos una disolución acuosa concentrada de A con las siguientes propiedades:

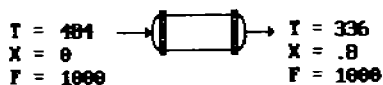
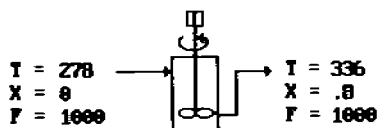
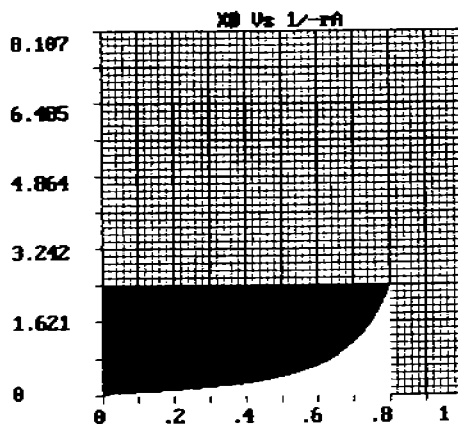
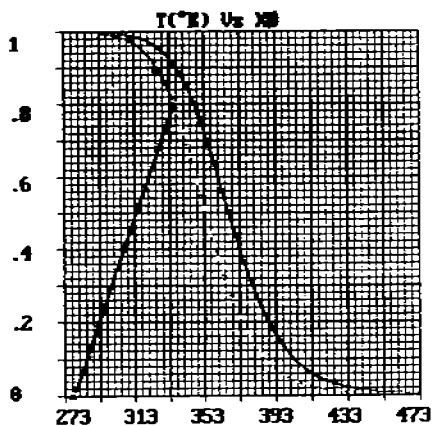
$$C_A = 4 \text{ mol/litro}$$

$$F_{A0} = 1000 \text{ mol/min}$$

$$C_p = 18 \text{ cal/mol}^{\circ}\text{K}$$

$$X_A = 0.8$$

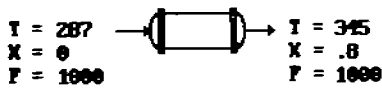
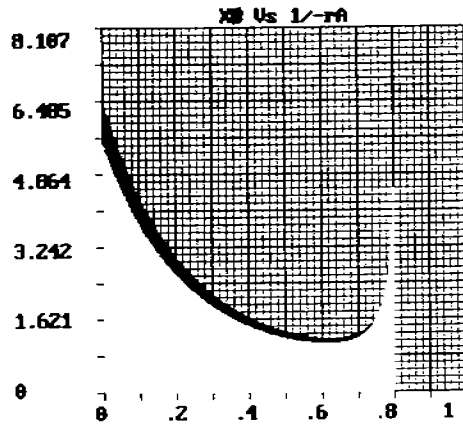
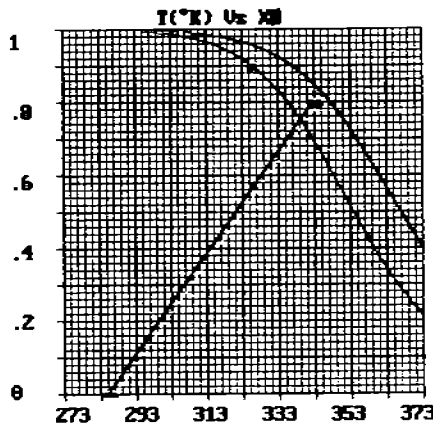
- Calcúlese el tamaño de reactor necesario.
- Compárese el tamaño de este reactor con el tamaño mínimo que se obtendría si se utilizase la progresión de temperatura óptima.



	CSTR ADIABATICO		PFR CON T.O.		IN	OUT	IN	OUT
	IN	OUT	IN	OUT				
CONVERSION	0	.8	0	.8				
TEMP. (°K)	278	336	484	336				
VOL. (LITROS)	1922.94		376.8321					

8-5 Diseño de un reactor de flujo en pistón.

Calcúlese el tamaño del reactor adiabático de flujo en pistón para que reaccione la alimentación del ejemplo 8-4 hasta la conversión del 80%.



	PTE ADIABÁTICO							
	IN	OUT	IN	OUT	IN	OUT	IN	OUT
CONVERSION	0	.8						
TEMP. (°K)	287	345						
VOL. (LITROS)	1783.333							

5.1.18 Comentarios Finales.

- Este programa esta dirigido a estudiantes de Ingeniería Química.
- Se deberán introducir datos congruentes con la información que él programa solicita.
- Todos los puntos, líneas y áreas con los que se trabajará durante la ejecución del programa deberán estar contenidos en los rangos de visualización de los gráficos. Si no están contenidos no podrás observar sus respectivos trazos además de que el programa marcará error o no dará resultado alguno.
- Si se piensa en hacer modificaciones sobre las propiedades cinéticas y termodinámicas preestablecidas en el programa, se tendrá que considerar que estas propiedades no pueden ser modificadas arbitrariamente, es indispensable tener conocimientos sobre estas áreas de lo contrario las modificaciones producirán errores en la ejecución del programa.
- Considerando que este programa esta elaborado con 26 comandos de un total de 232 existe la posibilidad de ser mejorado en sus líneas de comandos, inclusive puede ser reducido en lo que se refiere a la cantidad de instrucciones, sin afectar su funcionamiento. Al utilizar este programa puede ser necesario hacer pequeñas modificaciones, no por errores en el programa si no más bien optimizar este.
- Pensar que la metodología y las herramientas empleadas en la elaboración de este trabajo son obsoletas, sería consecuencia de no haber entendido lo que este trabajo pretende. Durante nuestra formación como ingenieros utilizamos papel milimétrico, calculadora, lapicero, escuadra y la mejor de las punterías para trazar gráficos y hacer cálculos. Esta es la forma en la aprendimos en nuestra facultad. Utilizar este programa nos coloca en un ambiente similar, con grandes ventajas en lo que respecta a tiempo y precisión. Considerar que las herramientas con las que se elaboró este trabajo, son obsoletas es aseverar que la manera en la que nuestra universidad forma ingenieros también lo es.

CONCLUSIONES

- Se consigue la codificación de expresiones matemáticas, que describen a un sistema reaccionante, en un lenguaje de programación. Dando así solución a un problema específico en Ingeniería Química, en nuestro caso en el diseño de reactores en estado estacionario con flujo ideal en sistemas reaccionantes homogéneos simples en fase líquida.
- Se produce la posibilidad de implementar la metodología aquí empleada en la solución de problemas de otras áreas de la Ingeniería Química tales como: operaciones unitarias, flujo de fluidos, transferencia de calor y de masa y demás áreas en las que se requieran cálculos numerosos y complejos.
- El programa permite fijar nuestra atención principalmente en las relaciones existentes entre las propiedades de los reactivos y las características del reactor o sistema de reactores resultantes de acuerdo a la conversión deseada. Esto se consigue considerando las ecuaciones que dan origen a estas relaciones, ya que la esencia de este trabajo es la aplicación de estas ecuaciones.
- Este programa constituye un complemento didáctico dentro de la ingeniería de reacciones químicas, permitiendo el manejo de un gran número de reacciones así como de cinco modelos de reactores que su vez pueden ser analizados de manera individual o múltiple.

ANEXO

En este trabajo he considerado las propiedades de los sistemas reaccionantes en función de la temperatura, sin embargo esto fue de una manera simplificada ya que se maneja la entalpía como si esta no dependiese a su vez de la temperatura. La razón por la que se trabajó con esta suposición es el hecho de que la interpretación de las ecuaciones es mucho más compleja de lo que se expuso en el tercer capítulo. En este anexo consideraremos a la entalpía como una función de la temperatura, lo que modificará las curvas de equilibrio, de máximos de las isocinéticas y de la línea de operación adiabática.

CURVA DE EQUILIBRIO.

$$\Delta H_r = \Delta H_{r_0} + \int_{T_0}^T \nabla C_p dT \quad \text{Ecuación A1}$$

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H_r}{RT^2} \quad \text{Ecuación A2}$$

Resolviendo A1

$$\Delta H_r = \Delta H_{r_0} + \int_{T_0}^T \nabla C_p dT = \Delta H_{r_0} + \nabla C_p (T - T_0)$$

Resolviendo A2

Sustituyendo ΔH_r (obtenida de A1) en A2 tenemos:

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H_{r0} + \nabla C_p (T-T_0)}{RT^2}$$

$$R d \ln K = \frac{\Delta H_{r0} + \nabla C_p (T-T_0)}{T^2} dT$$

$$\int_K^{K_1} R d \ln K = \int_T^{T_1} \frac{\Delta H_{r0}}{T^2} dT + \int_T^{T_1} \frac{\nabla C_p T}{T^2} dT - \int_T^{T_1} \frac{\nabla C_p T_0}{T^2} dT$$

$$R \ln (K_1 / K) = -\Delta H_{r0} [(1/T_1) - (1/T)] + \nabla C_p \ln(T_1/T) + \nabla C_p T_0 [(1/T_1) - (1/T)]$$

$$(\nabla C_p T_0 - \Delta H_{r0}) [(1/T_1) - (1/T)] + \nabla C_p \ln(T_1/T) - R \ln (K_1 / K) = 0$$

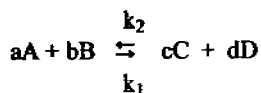
La aplicación del método de Newton al trazo de la curva de equilibrio queda de la siguiente forma:

$$T_1 = T_i - [f(T, X_A) / f'(T, X_A)]$$

$$f(T, X_A) = (\nabla C_p T_0 - \Delta H_{r0}) [(1/T_1) - (1/T)] + \nabla C_p \ln(T_1/T) - R \ln (K_{eq} / K)$$

$$f'(T, X_A) = [(\nabla C_p T_0 - \Delta H_{r0}) / T_1^2] - \nabla C_p / T_1$$

CURVA DE MÁXIMOS



$$-r_A = k_1[A]^a[B]^b - k_2[C]^c[D]^d$$

A partir de la ecuación de Van't Of obtendremos k_1 y k_2 :

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

$$K = K_c = k_1 / k_2 = [C]^c [D]^d / [A]^a [B]^b$$

$$[d \ln(k_1 / k_2) / dT] = \Delta H_r / RT^2$$

$$(d \ln k_1 / dT) - (d \ln k_2 / dT) = \Delta H_r / RT^2$$

$$\Delta H_r = E_1 - E_2$$

$$d \ln k_1 / dT = E_1 / RT^2 \quad y$$

$$d \ln k_2 / dT = E_2 / RT^2$$

$$\Delta H_r = \Delta H_{r0} + \nabla C_p (T - T_R)$$

* T_R = temperatura de referencia para la entalpía.

$$\Delta H_{r0} = E_{10} - E_{20}$$

$$\nabla C_p = [cC_{pC} + dC_{pD}] - [aC_{pA} + bC_{pB}] = C_{pP} - C_{pR}$$

Lo anterior implica que las energías de activación son una función de la temperatura:

$$E_1 = E_{10} + [aC_{pA} + bC_{pB}] (T - T_R)$$

$$E_2 = E_{20} + [cC_{pC} + dC_{pD}] (T - T_R)$$

Para obtener k_1 :

$$d \ln k_1 = (E_1 / RT^2) dT$$

$$d \ln k_1 = ([E_{10} + C_{PR} (T-T_R)] / RT^2) dT$$

$$\int_{k_{10}}^{k_1} d \ln k_1 = \int_{T_0}^T \frac{E_{10}}{RT^2} dT + \int_{T_0}^T \frac{C_{PR} T}{RT^2} dT - \int_{T_0}^T \frac{C_{PR} T_R}{RT^2} dT$$

Donde T_0 es la temperatura de referencia en la que están basadas las energías de activación.

$$\ln (k_1 / k_{10}) = -E_{10} [(1/T) - (1/T_0)] / R + C_{PR} \ln(T/T_0) / R + C_{PR} T_R [(1/T) - (1/T_0)] / R$$

$$\ln (k_1 / k_{10}) = C_{PR} \ln(T/T_0) / R + [(C_{PR} T_R - E_{10}) / R] [(1/T) - (1/T_0)]$$

$$k_1 = k_{10} e^{C_{PR} \ln(T/T_0) / R + [(C_{PR} T_R - E_{10}) / R] [(1/T) - (1/T_0)]}$$

Análogamente obtenemos k_2 :

$$k_2 = k_{20} e^{C_{PP} \ln(T/T_0) / R + [(C_{PP} T_R - E_{20}) / R] [(1/T) - (1/T_0)]}$$

Sustituyendo k_1 y k_2 en la ecuación de la velocidad de reacción:

$$-r_A = k_{10} e^{C_{PR} \ln(T/T_0) / R + [(C_{PR} T_R - E_{10}) / R] [(1/T) - (1/T_0)]} [C_{A0} (1-X_A)]^a [C_{B0} - bC_{A0} X_A / a]^b$$

$$-k_{20} e^{C_{PP} \ln(T/T_0) / R + [(C_{PP} T_R - E_{20}) / R] [(1/T) - (1/T_0)]} [cC_{A0} X_A / a]^c [dC_{A0} X_A / a]^d$$

ECUACIÓN A3

La ecuación A3 describe el comportamiento de cada una de las isocinéticas, en el plano T, X_A . En el tercer capítulo definimos a la velocidad de reacción por medio de la ecuación 3.5.0a en esta se omitió la dependencia de las energías de activación con la temperatura.

Para cada valor de $-r_A = f(T, X_A)$ es posible trazar una curva. Sin embargo en el programa omitimos el trazo de cada curva y consideramos el trazo de una sola, esta es la que pasa justo en el punto máximo de cada una de las curvas de velocidad, la llamaremos curva de máximos. A través de esta curva podemos ubicar las propiedades del sistema reaccionante donde la conversión de la reacción se hace máxima. Para obtener dicha curva tendremos que obtener la derivada de la ecuación A3 e igualarla a cero.

$$f'(T, X_A) =$$

$$(((C_{PR}T_R - E_{10})/RT^2) - (C_{PR}/RT))k_{10}e^{(C_{PR} \ln(T/T_0)/R) + ((C_{PR}T_R - E_{10})/R)((1/T) - (1/T_0))} [A]^a [B]^b$$

$$- (((C_{PP}T_R - E_{20})/RT^2) - (C_{PP}/RT))k_{20}e^{(C_{PP} \ln(T/T_0)/R) + ((C_{PP}T_R - E_{20})/R)((1/T) - (1/T_0))} [C]^c [D]^d$$

ECUACIÓN A4

La ecuación A4 describe la trayectoria de la curva de máximos de las isocinéticas. Daremos solución a esta ecuación aplicando el método de Newton :

$$f(T, X_A) =$$

$$(((C_{PR}T_R - E_{10})/RT^2) - (C_{PR}/RT))k_{10}e^{(C_{PR} \ln(T/T_0)/R) + ((C_{PR}T_R - E_{10})/R)((1/T) - (1/T_0))} [A]^a [B]^b$$

$$- (((C_{PP}T_R - E_{20})/RT^2) - (C_{PP}/RT))k_{20}e^{(C_{PP} \ln(T/T_0)/R) + ((C_{PP}T_R - E_{20})/R)((1/T) - (1/T_0))} [C]^c [D]^d$$

$$f'(T, X_A) =$$

$$(((C_{PR}T_R - E_{10})/RT^2) - (C_{PR}/RT))^2 k_{10}e^{(C_{PR} \ln(T/T_0)/R) + ((C_{PR}T_R - E_{10})/R)((1/T) - (1/T_0))} [A]^a [B]^b$$

$$+ (k_{10}e^{(C_{PR} \ln(T/T_0)/R) + ((C_{PR}T_R - E_{10})/R)((1/T) - (1/T_0))} [A]^a [B]^b) ((2(C_{PR}T_R - E_{10})/RT^3) - (C_{PR}/RT^2))$$

$$- (((C_{PP}T_R - E_{10})/RT^2) - (C_{PP}/RT))^2 k_{20}e^{(C_{PP} \ln(T/T_0)/R) + ((C_{PP}T_R - E_{20})/R)((1/T) - (1/T_0))} [C]^c [D]^d$$

$$- (k_{20}e^{(C_{PP} \ln(T/T_0)/R) + ((C_{PP}T_R - E_{20})/R)((1/T) - (1/T_0))} [C]^c [D]^d) ((2(C_{PP}T_R - E_{20})/RT^3) - (C_{PP}/RT^2))$$

$$T = T_i - [f(T, X_A) / f'(T, X_A)]$$

LÍNEA DE OPERACIÓN ADIABÁTICA.

Retomando la Ecuación 3.8.0a

$$0 = \Delta H_r X_A C_{A0} + C_{pA} \Delta T [C_A] + C_{pB} \Delta T [C_B] + C_{pC} \Delta T [C_C] + C_{pD} \Delta T [C_D] + C_{pS} \Delta T [C_S]$$

$$\Delta H_r = \Delta H_{r0} + \nabla C_p \Delta T$$

$$\nabla C_p = [cC_{pC} + dC_{pD}] - [aC_{pA} + bC_{pB}] = C_{pP} - C_{pR}$$

Sustituyendo ΔH_r :

$$0 = \Delta H_{r0} X_A C_{A0} + \nabla C_p \Delta T X_A C_{A0} + C_{pA} \Delta T [C_A] + C_{pB} \Delta T [C_B] \\ + C_{pC} \Delta T [C_C] + C_{pD} \Delta T [C_D] + C_{pS} \Delta T [C_S]$$

Despejando ΔT :

$$\Delta T = (-\Delta H_{r0} X_A C_{A0}) / (\nabla C_p X_A C_{A0} + C_{pA} [C_A] + C_{pB} [C_B] + C_{pC} [C_C] + C_{pD} [C_D] + C_{pS} [C_S])$$

$$\Delta T = T_{\text{salida}} - T_{\text{entrada}}$$

T_{salida} = temperatura a la que se elevará el sistema

T_{entrada} = temperatura del sistema a la entrada.

$$T_{\text{sal}} = (-\Delta H_{r0} X_A C_{A0}) / (\nabla C_p X_A C_{A0} + C_{pA} [C_A] + C_{pB} [C_B] + C_{pC} [C_C] + C_{pD} [C_D] + C_{pS} [C_S]) + T_{\text{ent}}$$

GLOSARIO

A	Reactivo A
B	Reactivo B
C	Producto C
D	Producto D
a	Coefficiente estequiométrico de A
b	Coefficiente estequiométrico de B
c	Coefficiente estequiométrico de C
d	Coefficiente estequiométrico de D
[A], C_A	Concentración del reactivo A, mol/litro
[B], C_B	Concentración del reactivo B, mol/litro
[C], C_C	Concentración del producto C, mol/litro
[D], C_D	Concentración del producto D, mol/litro
T	Temperatura, °K
X_A	Conversión
R	Constante universal del gas ideal, 1.987 cal/mol°K
ΔH_r	Entalpía de reacción, cal/mol
E_1 y E_2	Energías de activación, cal/mol
K_{eq}	Constante de equilibrio a la temperatura T
K	Constante de equilibrio a la temperatura de referencia T_0
r_A	Velocidad de reacción, mol/(litros·min)
k_1, k_2	Coefficientes cinéticos, (mol/litro) ¹⁻ⁿ /min
k_{10}, k_{20}	Factores de frecuencia, 1/min
F_A	Flujo molar, mol/min
V	Volumen del reactor, litros
CSTR	Reactor de mezcla completa
PFER	Reactor de flujo en pistón
C_p	Capacidad calorífica, cal/mol°K
M	Pendiente de la línea de operación adiabática

BIBLIOGRAFÍA

LEVENSPIEL

Ingeniería De Las Reacciones Químicas
Ed. Reverte, 2ª Edición, España 1978

SMITH

Ingeniería De La Cinética Química
Ed. McGraw-Hill, 2ª Edición, México 1977

LEVESPIEL

El Omnilibro De Las Reacciones Químicas
Ed. Reverte, 1ª Edición, España 1977

SCOTT and FOGLER

Elementos De Ingeniería De Las Reacciones Químicas
Ed. Prentice may, 1ª Edición, México 1999

BLANCO

Diseño De Reactores Químicos,
Ed. Trillas, 1ª Edición, México 1978

ARIS

Análisis De Reactores
Ed. alambra, 1ª Edición, España 1973

SCHEID, Francis

Métodos Numéricos
Ed. McGraw-Hill, 1988

NAKAMURA, Shoichiro

Métodos Numéricos Aplicados Con Software
Ed. Prentice-Hall, 1ª Edición, 1992

GOTTFRIEL

Programación En Basic
Ed. McGraw-Hill, 2ª Edición, México 1984

STERN

Diagramas De Flujo
Ed. Limusa, 1ª Edición México 1985