

# ANÁLISIS DE LA DISPERSIÓN AXIAL DE MASA Y CALOR EN REACTORES DE LECHO FIJO

Rangel Jara Hermes Augusto, I.Q. M.Sc. I.Q.  
Profesor Titular, U.N.

## I. INTRODUCCIÓN

Este trabajo presenta, desarrolla e implementa un análisis conceptual y numérico de los fenómenos de dispersión axial de masa y calor en reactores de lecho fijo. Aunque se dispone de algunos criterios que permiten un análisis preliminar de la importancia o no de tales dispersiones en reactores de lecho fijo (3), (6), (7), (8), (10), la presente aplicación pretende disponer de una alternativa numérica que permita en una forma rápida y precisa la solución de las ecuaciones diferenciales del respectivo modelo matemático. Este análisis de la dispersión de masa y calor permite estudiar su influencia en los reactores de lecho fijo, tanto en la conversión de la reacción como en la sensibilidad térmica del reactor.

Inicialmente, se analiza la dispersión axial de masa en un reactor isotérmico de lecho fijo, en términos de soluciones exactas, aproximadas y numéricas del problema. Después, se presenta el modelo del reactor con la dispersión axial de masa-calor y la propuesta numérica de solución. El problema matemático de valores de frontera de las ecuaciones diferenciales del modelo se soluciona mediante el método de Newton (5).

## RESUMEN

*Dentro del espíritu investigativo a nivel teórico del estudio de los reactores químicos, el presente trabajo desarrolla e implementa un análisis conceptual y numérico de los fenómenos de dispersión axial de calor y masa en reactores de lecho fijo. Se pretende disponer de una alternativa numérica que permita en una forma rápida y precisa la solución de las ecuaciones diferenciales junto con las respectivas condiciones de frontera del modelo matemático. Para la simulación del reactor de lecho fijo se empleó un modelo unidimensional pseudohomógeno con parámetros aglomerados.*

## 2. MODELO MATEMÁTICO

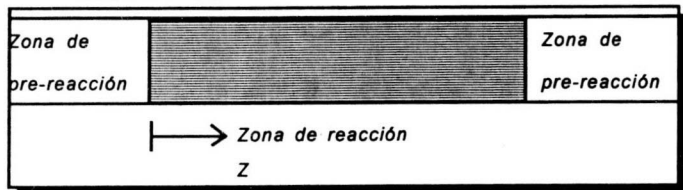


Figura 1. Diferentes zonas en un reactor de lecho fijo con dispersión axial

El modelo de dispersión axial aglomera los efectos combinados de componentes de fluctuación de velocidad, perfiles no planos y difusión molecular en un solo parámetro, que es el coeficiente de dispersión axial o difusión axial. El flujo pistón con mezclado axial es un modelo plausible para representar esta situación (11).

En la Figura 1, al efectuar un balance diferencial del componente A, para un modelo pseudohomogéneo con flujo unidimensional estable, isotérmico y con cinética de primer orden, se origina

$$1) \quad \frac{d^2C}{dZ^2} - Pe_m \frac{dC}{dZ} - APe_m C = 0$$

con:

$$2) \quad Pe_m = N^\circ \text{ de Peclet para masa} = vL/D$$

$$Z = z/L$$

$$C = Ca/Ca_0$$

$$A = k_v(1 - f_b)t$$

donde:

- 3) Ca = Concentración del componente A  
 Ca<sub>0</sub> = Concentración inicial de A  
 D = Coeficiente de dispersión axial  
 f<sub>B</sub> = Fracción vacía  
 k<sub>v</sub> = Constante de la velocidad de reacción  
 L = Longitud del reactor  
 t = Tiempo medio de residencia  
 v = Velocidad promedio del fluido  
 z = Posición en el reactor  
 C, Z = Variables adimensionales

Esta es una ecuación diferencial de segundo orden cuya solución, (9), es:

$$C = c_1 \exp(m_1 Z) + c_2 \exp(m_2 Z)$$

$$m_1 = \frac{Pe_m}{2} (1 + \sqrt{a})$$

$$4) \quad m_2 = \frac{Pe_m}{2} (1 - \sqrt{a})$$

$$a = \left(1 + \frac{4A}{Pe}\right)$$

Las condiciones de frontera, para determinar las constantes c<sub>1</sub> y c<sub>2</sub>, son:

- Para  $z \leq 0$  no se presenta reacción química y la ecuación diferencial es

$$5) \quad \frac{d^2C}{dZ^2} - Pe_m \frac{dC}{dZ} = 0$$

Integrando la ecuación 5, para  $Z = 0$  resulta

$$6) \quad \frac{dC}{dZ} = Pe_m(C - 1)$$

- Para la segunda condición de frontera en  $Z = 1$ , Danckwerts (6) sugiere que la primera derivada de la concentración no puede ser positiva ni negativa, entonces

$$7) \quad \frac{dC}{dZ} = 0$$

Al reemplazar estas condiciones de frontera en la ecuación 4, se obtiene:

$$8) \quad C_1 = \frac{-2(1 - \sqrt{a}) \exp\left(\frac{-Pe_m \sqrt{a}}{2}\right)}{(1 + \sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right) - (1 - \sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right)}$$

$$C_2 = \frac{2(1 + \sqrt{a}) \exp\left(\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right)}{(1 + \sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right) - (1 - \sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{-Pe_m \sqrt{a}}{2}\right)}$$

Finalmente, la ecuación del perfil de concentración es:

9)

$$C = \frac{-2(1-\sqrt{a}) \exp\left(\frac{-Pe_m \sqrt{a}}{2}\right) \exp\left[\frac{Pe_m}{2}(1+\sqrt{a})\right] Z + 2(1+\sqrt{a}) \exp\left(\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right) \exp\left[\frac{Pe_m}{2}(1-\sqrt{a})\right] Z}{(1+\sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right) - (1-\sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{-Pe_m \sqrt{a}}{2}\right)}$$

Para  $Z = 1$  resulta:

10)

$$C = \frac{4\sqrt{a} \exp\left(\frac{Pe_m}{2}\right)}{(1+\sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right) - (1-\sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{-Pe_m \sqrt{a}}{2}\right)}$$

y para  $Z = 0$

11)

$$C = \frac{-2(1-\sqrt{a}) \exp\left(-\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right) + 2(1+\sqrt{a}) \exp\left(\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right)}{(1+\sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{Pe_m \sqrt{a}}{2}\right) - (1-\sqrt{a})^2 \exp\left(\frac{-Pe_m \sqrt{a}}{2}\right)}$$

Burghardt y Zaleski (2) utilizaron un método de perturbación para conseguir una solución aproximada de la ecuación diferencial 1, sometida a las condiciones de frontera de las ecuaciones 6 y 7. Presentan soluciones para números de Peclet elevados y bajos, con cinéticas del tipo exponencial para la reacción química. Para números de Peclet elevados, cinética de primer orden y  $Z = 1$

12)

$$C = \exp(-kt) \left[ 1 + \epsilon R_1^2 + \frac{\epsilon^2}{2} R_1^3 (R_1 - 4) \right]$$

$$\epsilon = 1 / Pe_m$$

$$R_1 = kt$$

y para una cinética de orden diferente de uno, resulta:

13)

$$C = \rho_n^{1/1-n} \left[ 1 - \epsilon \frac{nR_n}{1-n} \frac{1n\rho_n}{\rho_n} + \frac{\epsilon^2}{2} \frac{nR_n^2}{\rho_n^2} \times \left( \left( \frac{n}{1-n} 1n(\rho_n) + 1 \right)^2 - \rho_n - 2nR_n \right) \right]$$

donde:

14)

$$R_n = kt Ca_0^{n-1}$$

$$\rho_n^{1/1-n} = [1 - (1-n)R_n]^{1/1-n}$$

Para la situación de números de Peclet bajos, y cinética de primer orden, la concentración a la salida ( $Z = 1$ ) es:

15)

$$C = \frac{1}{1+R_1} - \frac{Pe_m}{6} \left[ \frac{R_1}{1+R_1} \right]^2 + \frac{Pe_m^2}{360} \frac{7R_1^4 + 12R_1^3 + 15R_1^2}{(1+R_1)^3}$$

**Se pretende disponer de una alternativa numérica que permita en una forma rápida y precisa la solución de las ecuaciones diferenciales junto con las respectivas condiciones de frontera del modelo matemático.**

## La técnica numérica propuesta para solucionar el sistema acoplado de las dos ecuaciones diferenciales de segundo orden consiste en convertir las dos ecuaciones diferenciales de segundo orden en cuatro ecuaciones diferenciales de primer orden.

La ecuación diferencial de energía con dispersión axial de calor es:

$$16) \quad \frac{1}{Pe_h} \frac{d^2 T}{dZ^2} - \frac{dT}{dZ} - \frac{2Ut}{\rho C_p R} (T - T_w) + \frac{(-\Delta H_{IA}) R_{VA} t}{\rho C_p} = 0$$

con:

$$Pe_h = \text{No de Peclet para calor} = \nu L / E$$

$$17) \quad E = K_e / \rho C_p$$

donde:

18)

- $C_p$  = Calor específico de la mezcla
- $K_e$  = Conductividad efectiva axial
- $R$  = Radio del reactor de lecho fijo
- $R_{VA}$  = Velocidad de reacción de A
- $T$  = Temperatura de la mezcla
- $T_w$  = Temperatura de pared del reactor
- $U$  = Coeficiente total de transferencia de calor
- $\rho$  = Densidad de la mezcla
- $\Delta H_{IA}$  = Calor de reacción

Para el caso de una cinética de primer orden y del tipo Arrhenius resulta:

19)

$$\frac{1}{Pe_h} \frac{d^2 T}{dZ^2} - \frac{dT}{dZ} - \frac{2Ut}{\rho C_p R} (T - T_w) + \frac{(-\Delta H_{IA}) C_{A0} t}{\rho C_p} k_0 \exp\left(-\frac{E_A}{R_g T}\right) C = 0$$

donde:

$$E_A = \text{Energía de activación}$$

$$k_0 = \text{Factor de frecuencia}$$

$$20) \quad R_g = \text{Constante universal de los gases}$$

Las condiciones de frontera para la ecuación 16 son:

$$\text{En } Z=0 \quad -\frac{1}{Pe_h} \frac{dT}{dZ} = (T_0 - T)$$

$$21) \quad \text{En } Z=1 \quad \frac{dT}{dZ} = 0$$

$$T_0 = \text{Temperatura inicial de la mezcla}$$

### 3. TÉCNICA NUMÉRICA

La técnica numérica propuesta para solucionar el sistema acoplado de las dos ecuaciones diferenciales de segundo orden consiste en convertir las dos ecuaciones diferenciales de segundo orden en cuatro ecuaciones diferenciales de primer orden; así, el problema numérico puede resolverse solucionando el sistema de cuatro ecuaciones diferenciales de primer orden con dos valores de frontera, empleando un método de Newton. Para un análisis numérico sencillo, es mejor comenzar el proceso de integración en  $Z = 1$ , donde se conocen los valores de las derivadas de la concentración y de la temperatura, y suponer los valores de la concentración y de la temperatura. En  $Z = 0$  se utilizarán dos funciones que son las condiciones de frontera respectivas que se deben cumplir, tanto para masa como para calor. Mediante un método de Newton se obtendrán valores mejorados de la concentración y de la temperatura, para ser utilizados en  $Z = 1$ , hasta que el sistema haga convergencia.

Para una cinética de primer orden el desarrollo es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 y_1 &= C \\
 y_2 &= dC/dZ \\
 y_3 &= T \\
 y_4 &= dT/dZ
 \end{aligned}$$

El sistema de ecuaciones diferenciales resultante es:

$$\begin{aligned}
 dy_1/dZ &= y_2 \\
 dy_2/dZ &= Pe_m y_2 + A_4 (\exp(-A_5/y_3)) Pe_m y_1 \\
 dy_3/dZ &= y_4 \\
 dy_4/dZ &= (1/A_1) y_4 + (Pe_h A_2)(y_3 - Tw) - (A_3 A_4 Pe_h) (\exp(-A_5/y_3)) y_1
 \end{aligned}$$

Donde:

$$\begin{aligned}
 A_1 &= (E/vL) = 1/Pe_h \\
 A_2 &= (2Ut/\rho c_p R) \\
 A_3 &= (-\Delta Hr Ca_o / \rho c_p) \\
 A_4 &= (k_o t) \\
 A_5 &= (E/R_g)
 \end{aligned}$$

Las funciones en  $Z = 0$  después del proceso de integración, empleando el método de Euler y para los valores de  $y_1$  y  $y_3$  supuestos en  $Z = 1$ , son:

$$\begin{aligned}
 F(y_1, y_3) &= y_2 - Pe_m (y_1 - 1) \\
 G(y_1, y_3) &= (1/Pe_h) y_4 + (To - y_3)
 \end{aligned}$$

Los nuevos valores mejorados para  $y_1$  y  $y_3$ , en  $Z = 1$ , serán

$$\begin{aligned}
 22) \quad y_{1nuevo} &= y_{1viejo} - \frac{F \frac{\partial G}{\partial y_3} - G \frac{\partial F}{\partial y_3}}{\frac{\partial F}{\partial y_1} \frac{\partial G}{\partial y_3} - \frac{\partial F}{\partial y_3} \frac{\partial G}{\partial y_1}} \bigg|_{Z=0} \\
 y_{3nuevo} &= y_{3viejo} - \frac{-F \frac{\partial G}{\partial y_1} + G \frac{\partial F}{\partial y_1}}{\frac{\partial F}{\partial y_1} \frac{\partial G}{\partial y_3} - \frac{\partial F}{\partial y_3} \frac{\partial G}{\partial y_1}} \bigg|_{Z=0}
 \end{aligned}$$

Los valores de las derivadas parciales fueron obtenidos numéricamente y de esta forma se efectúa el cálculo hasta satisfacer determinada precisión.

## RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Con una versión simplificada del programa DISPE2.BAS, para una cinética de primer orden, considerando solamente la dispersión axial de masa y para un valor constante de  $A = k_v t (1 - f_p) = 2$ , se originaron los resultados que se presentan en la Figura 2; en ella se muestra la influencia del fenómeno de la dispersión axial de masa sobre las concentraciones a la entrada y a la salida del reactor, para diferentes números de Peclet. Para Peclet elevado se observa que el reactor se comporta como el denominado reactor ideal en flujo pistón con efectos de dispersión nulos y se obtienen las mayores conversiones. Para Peclet muy bajo se ve que el reactor se comporta como un reactor ideal continuo de mezcla perfecta y puede verse que la composición no es función de la posición y dando el mismo resultado que si se calculara para un reactor perfectamente mezclado. Para  $A=2$  la concentración de salida es 0.333, calculada de (10), que coincide exactamente con la obtenida mediante la solución numérica, para números de Peclet muy bajos.

Los resultados presentados en la Figura 2 fueron obtenidos directamente mediante el programa desarrollado y concuerdan satisfactoriamente con los obtenidos mediante las soluciones analítica y aproximadas de Burghardt y Zaleski (2).

En las Figuras 3 y 4 se presentan los resultados de los perfiles de concentración para valores especificados de la temperatura de entrada de la mezcla y la temperatura de pared, para  $1/Pe_m = 0.045$  y  $1/Pe_h = .06$  y los valores de:

$$\begin{aligned}
 A_1 &= 0.06 = 1/Pe_h \\
 A_2 &= 10.0 \\
 A_3 &= 200.0 \\
 A_4 &= 2e11 \\
 A_5 &= 10000 \\
 1/Pe_m &= 0.045,
 \end{aligned}$$

que implican la presencia simultánea de las dispersiones de masa y calor. Estos mismos valores son utilizados por Nauman Bruce (11), para diferentes valores de  $Tw$  y  $To$ , y servirán para validar el cálculo numérico presentado en este trabajo y, adicionalmente, permitirá comparar la eficiencia de la estrategia numérica con la presentada allí. En ambos casos se muestra el perfil de concentración para una situación de flujo pistón,  $Pe_m \rightarrow \infty$ . Puede observarse que para mayores valores de  $To$  y  $Tw$ , se presentan mayores diferencias en las concentraciones de entrada y salida del reactor, cuando aparece el fenómeno de la dispersión axial. Para una misma situación de  $To$  y  $Tw$ ,

Figura 2. Efecto de la dispersión axial de masa sobre la concentración. Caso isotérmico y  $A = 2$ .

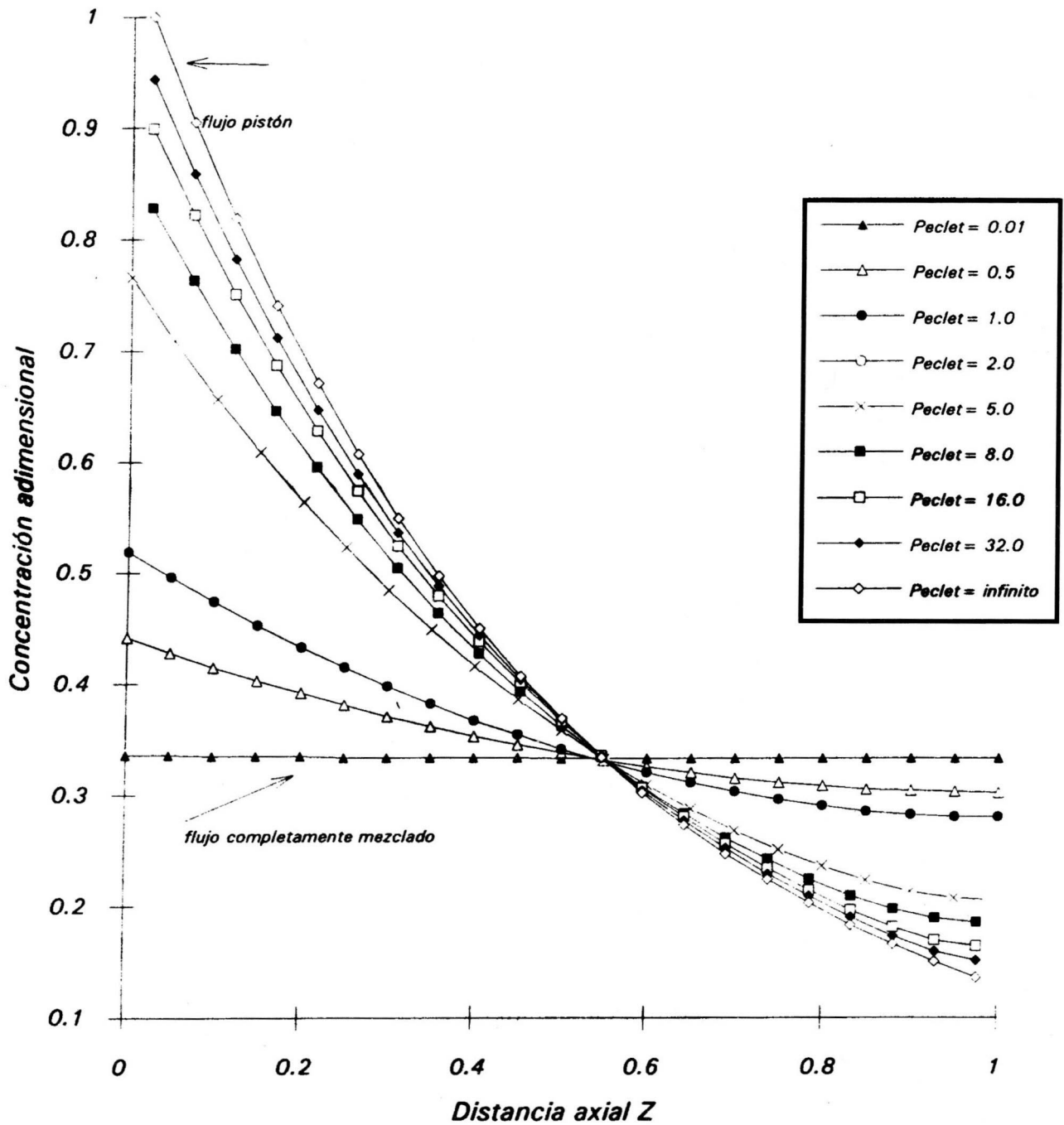


Figura 3. Influencia de la dispersión axial en el perfil de concentración.  $T_o=373$ ,  $T_w=373$  K.

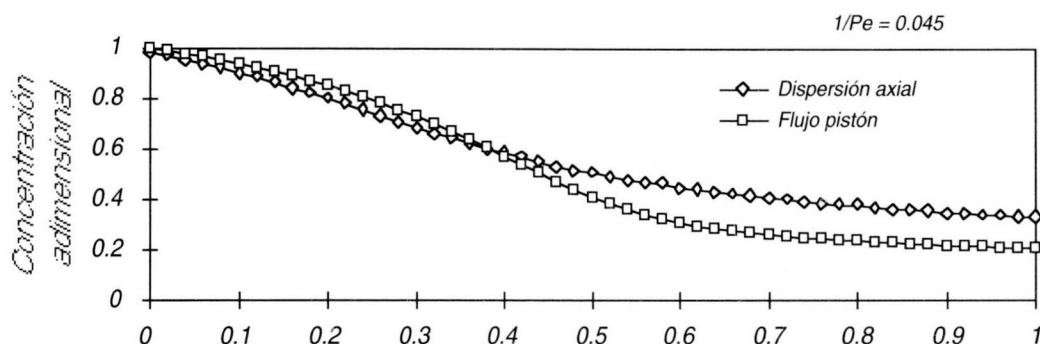
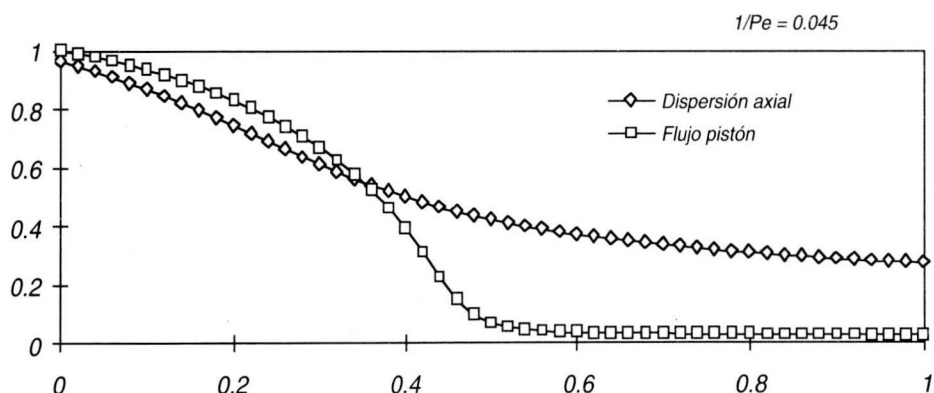


Figura 4. Influencia de la dispersión axial en el perfil de concentración.  $T_o=374$ ,  $T_w=374$  K.



se observa cómo el perfil de concentración disminuye a la entrada del reactor y presenta un aumento a la salida del reactor, en comparación con el flujo pistón, lo cual actúa negativamente en la eficiencia del reactor, manifestada en términos de la conversión (2).

Lo observado debe examinarse simultáneamente con los perfiles respectivos de temperatura en el reactor. En la Figuras 5 y 6 se presentan los perfiles de temperatura para  $T_o=373$  K y  $T_w=373$  K,  $T_o=374$  K y  $T_w=374$  K, para los mismos valores de las constantes anotadas anteriormente. Así mismo, se presenta el respectivo perfil si no se consideran los fenómenos de dispersión (flujo pistón). Puede observarse en general que el perfil de temperatura aumenta en los extremos

del reactor y disminuye en la parte central (perfil más plano), con respecto a la situación de flujo pistón, que no tiene en cuenta la dispersión de masa y calor.

Es interesante ver la gran diferencia entre los perfiles de temperatura, cuando se tiene o no en cuenta el fenómeno de la dispersión, para los valores con que se ha trabajado la simulación del reactor. (Véanse las Figuras 5 y 6). Con cambios muy leves en las temperaturas  $T_o$  y  $T_w$  se presentan perfiles marcadamente diferentes y mayores diferencias entre tener en cuenta o no la dispersión. Esto es debido a las condiciones de operación que se trabajan, que corresponden a una zona altamente sensible del sistema reaccionante. El mejor indicativo de la alta sensibilidad del sistema es la Figura 7, que

Figura 5. Influencia de la dispersión axial en el perfil de temperatura.  
 $T_o=373$ ,  $T_w=373$  K.

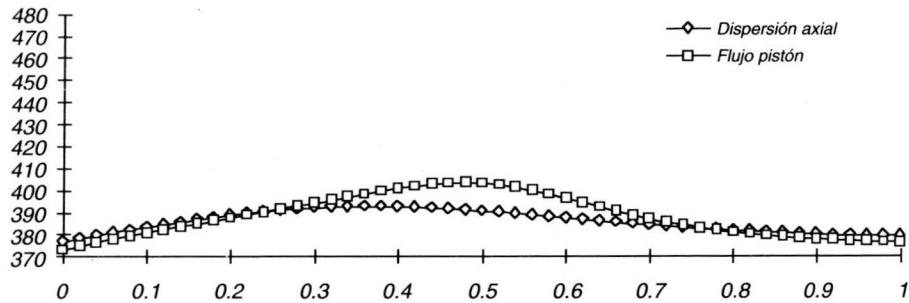
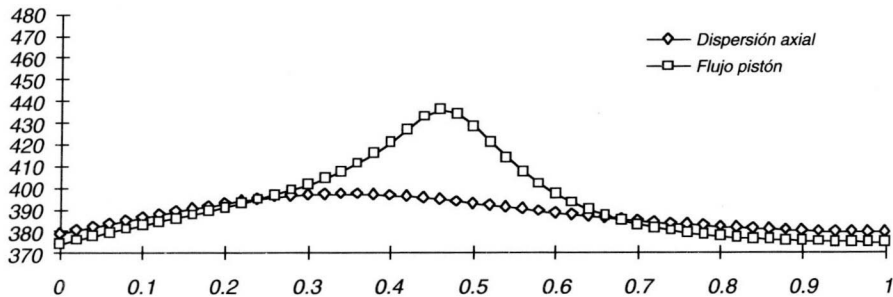


Figura 6. Influencia de la dispersión axial en el perfil de temperatura.  
 $T_o=374$ ,  $T_w=374$  K.



muestra para  $T_o=375$  y  $T_w=375$  K una situación que algunos autores (1) denominan de "escape en el reactor".

Algunos cálculos se efectuaron con los mismos valores utilizados por Nauman Bruce (11) para tener una base de comparación y así poder validar la propuesta numérica de la presente aplicación. Allí se utiliza un cálculo numérico en diferencias finitas, resultante de formular explícitamente el sistema de ecuaciones diferenciales, y mediante una estrategia no muy sistematizada se logra solucionar el problema. Los resultados concuerdan satisfactoriamente con los obtenidos por Nauman Bruce (11), en su libro *Chemical Reactor Design*.

Es importante anotar que la simulación del reactor con presencia de fenómenos de dispersión axial detecta la

presencia de soluciones múltiples. La explicación de estas soluciones múltiples tiene que buscarse en la fase transitoria o inestable del reactor y específicamente en las condiciones iniciales de la puesta en marcha del reactor. Dependiendo del valor de estas condiciones iniciales la fase estable se encontrará en una u otra de las soluciones. Generalmente, los estados correspondientes a los perfiles de temperatura más bajos son los que en la práctica se presentan (6), si la puesta en marcha del reactor se hace en la forma más adecuada. En las Figuras 8 y 9 se presentan los perfiles múltiples de temperatura y concentración para las mismas condiciones en la fase estable. Aunque los perfiles de temperatura y concentración son diferentes, ambos satisfacen las condiciones de frontera requeridas en el modelo matemático.



Con la aplicación numérica desarrollada e implementada en este trabajo se dispone de una herramienta más ágil, precisa, numéricamente estable y de carácter más general. El programa permite solucionar las circunstancias en las que no se presenten dispersiones de masa y/o calor, pues corresponden a situaciones simplificadas del problema, y además puede extenderse a cualquier tipo de cinética, efectuando leves modificaciones.

En conclusión se dispone de un desarrollo numérico y programado que permite el análisis conceptual de los fenómenos de dispersión axial de masa y calor en reactores de lecho fijo y, adicionalmente, facilita la simulación del proceso para poder determinar las condiciones de operación más adecuadas.

## 6. PROGRAMA

Para el análisis de la dispersión axial de masa y calor en reactores de lecho fijo fueron desarrolladas e implementadas dos estrategias de programación que permiten la simulación del reactor con base en el respectivo modelo matemático. La primera estrategia fue elaborada en un lenguaje de programación (Quick Basic 4.5) y utiliza un método modificado de Newton que actúa sobre el sistema de ecuaciones diferenciales en la búsqueda de la solución de los valores de frontera que se deben satisfacer en el modelo del reactor. La segunda alternativa fue implementada en la hoja electrónica Excel versión 5, que trabaja bajo Windows y por lo tanto aprovecha todo el ambiente gráfico de este sistema.

Figura 7. Influencia de la dispersión axial en el perfil de temperatura.  
 $T_o=375$ ,  $T_w=375$  K.

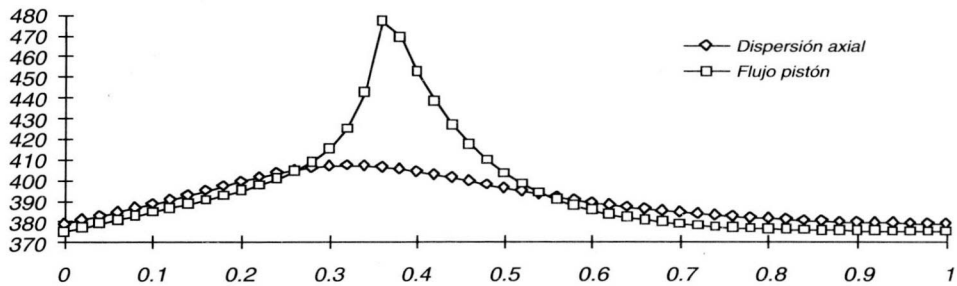
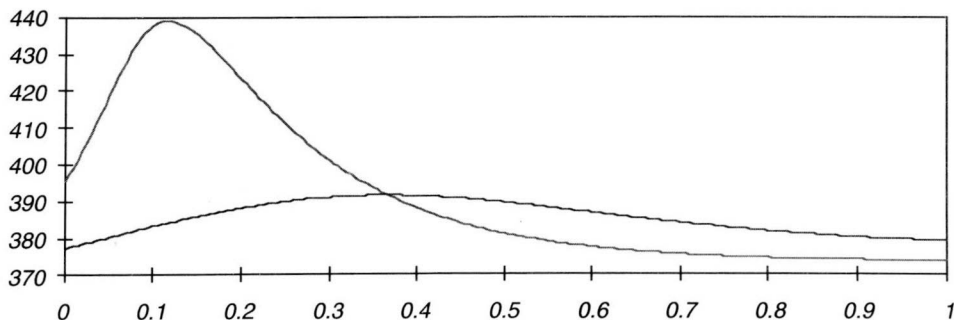


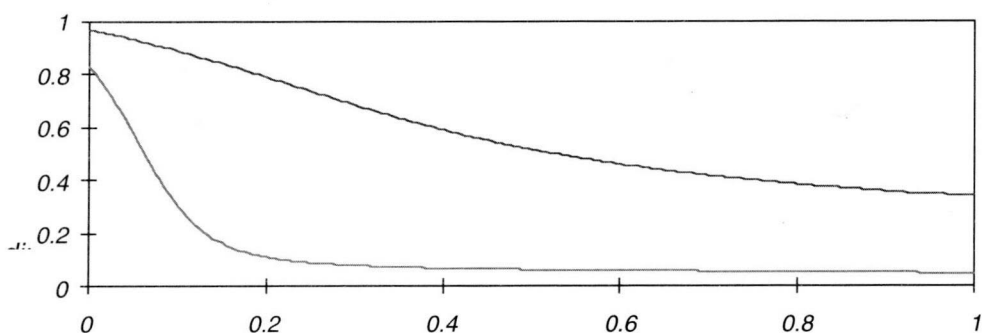
Figura 8. Perfil múltiple de temperatura por la dispersión axial.  
 $T_o=373$  K,  $T_w=373$  y  $Pe=0.045$ .



Adicionalmente, en el cálculo con la hoja electrónica se emplea una herramienta, denominada SOLVER, que mediante una programación lógica resuelve el problema de valores de frontera. Las funciones que se deben satisfacer, como condiciones en las fronteras del reactor, fueron planteadas en una forma similar en ambas estrategias de cálculo, lo cual permite comparar las herramientas de cálculo y así poder sacar conclusiones sobre las ventajas y bondades de cada una de las mismas. Se anexa el listado del programa y un esquema de

forma como se elaboró en la hoja electrónica. El programa final desarrollado en Excel es completamente interactivo y tiene una programación orientada por objetos, encadenada con utilidades gráficas que permiten la presentación de los perfiles de concentración y temperatura. Los resultados de la simulación son presentados en forma tabular o gráfica y pueden ser guardados en disco o presentados por medio de la impresora.

Figura 9. Perfil múltiple de concentración por efecto de la dispersión axial.  $T_o=373\text{ K}$ ,  $T_w=373\text{ K}$  y  $Pe=0.045$ .



### 6.1 VERSIÓN QUICK BASIC. DISPE2.BAS

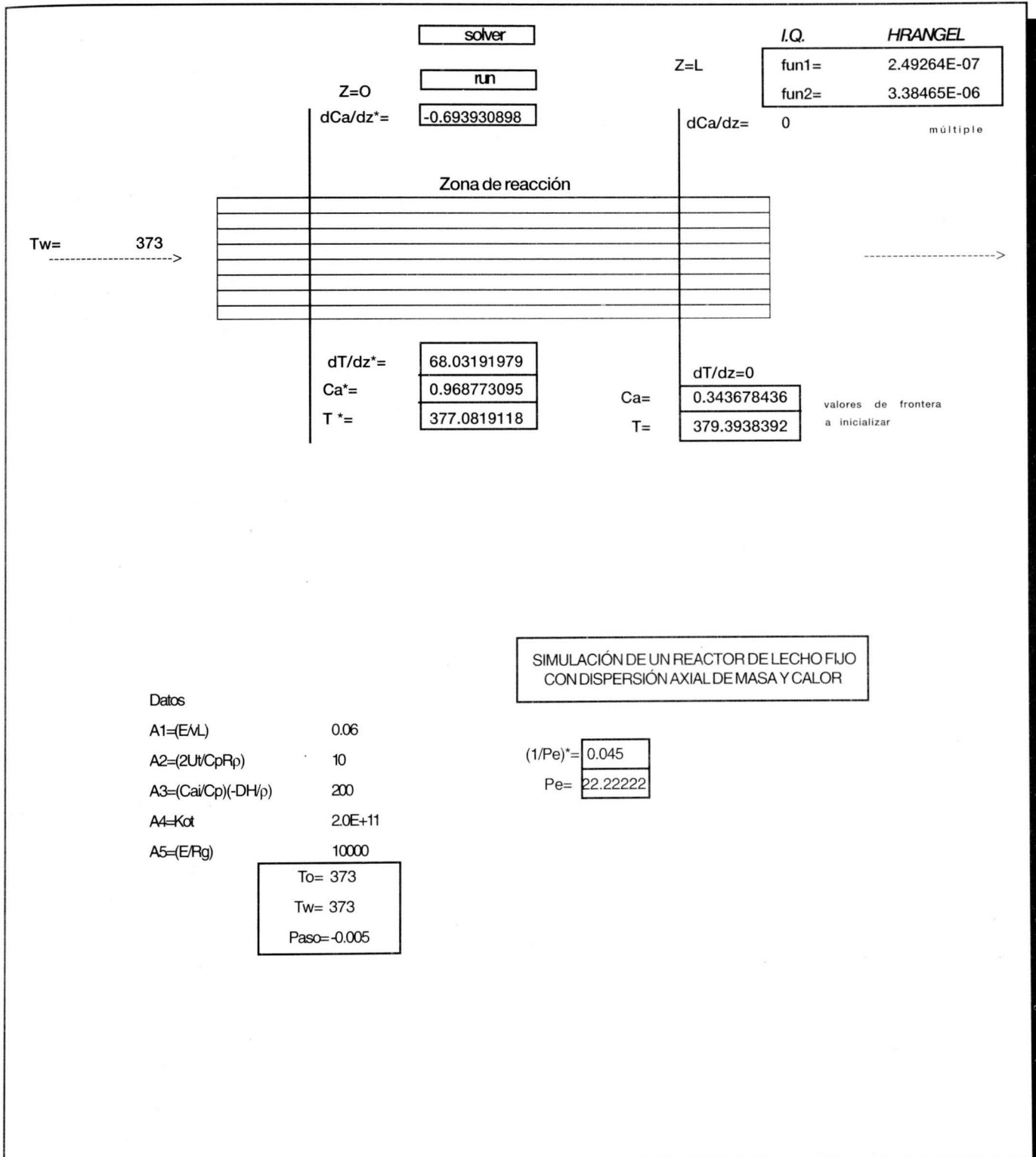
Para la solución de los dos valores de frontera presentes en el modelo matemático del reactor fue implementada una variante del Método de Newton. Dicha técnica actúa sobre las funciones descritas en el numeral 3 (Técnicas numéricas) y el programa genera numéricamente los valores requeridos de las funciones y de las derivadas parciales, evitando así la necesidad de obtener el sistema de ecuaciones variacionales requerido en el método convencional de Newton. Lo anterior, le imprime a la técnica numérica una mayor superioridad en cuanto a generalidad y velocidad de ejecución. Es importante anotar que debido a la alta sensibilidad del problema para solucionar, el cálculo es relativamente difícil (7). La zona de inicialización, para que la técnica numérica converja, es en algunas oportunidades bastante estrecha, lo cual implica un proceso inicial de sondeo para el logro de una solución exitosa. Adicionalmente, el problema presenta soluciones múltiples, lo cual fue motivo de análisis en el presente trabajo.

### 6.2 VERSIÓN EXCEL 5.0. DISPE2.XLS

En esta versión del programa elaborado en Excel 5.0 fueron instaladas en la hoja electrónica las ecuaciones diferenciales del modelo matemático con presencia del fenómeno de dispersión axial (cuatro ecuaciones diferenciales de primer orden), y las dos funciones que se deben satisfacer como condiciones de frontera, en  $Z=0$ . Adicionalmente, se instalaron las ecuaciones diferenciales para cuando no se presenta el fenómeno de la dispersión axial (modelo de flujo pistón) y los respectivos valores iniciales de este modelo. En la hoja de cálculo base -DISPE2- se programó una técnica de integración numérica de Euler y con la ayuda de una poderosa herramienta -SOLVER- de Excel fue programada una macro run, que permite por medio de una estrategia numérica, abordar la solución del problema de valores de frontera.

En la Figura 10 se presenta el esquema correspondiente al programa APLICA2.XLS, específicamente la hoja base de cálculo DISPE2.

Figura 10. Esquema versión Excel 5.0 Dispe2.XLS



	z	Tw	Ca	T	dCa	dT	dCa-Pe(Ca-1)	A1dT+(To-T)
C.INICIALES	1	373	0.343678436	379.3938392	0	0	14.58492219	-6.3938392
	0.995	373	0.343678436	379.3938392	-0.027282092	-1.235885072	14.55764009	-6.4679923
	0.99	373	0.343814846	379.4000186	-0.051532842	-2.368779722	14.530358	-6.5421454
	0.985	373	0.344072511	379.4118625	-0.073111611	-3.409033808	14.50305336	-6.6164046
	0.98	373	0.344438069	379.4289077	-0.092335695	-4.366026752	14.47570577	-6.6908693
	0.975	373	0.344899747	379.4507378	-0.109485258	-5.248251229	14.44829668	-6.7656329
	0.97	373	0.345447173	379.4769791	-0.1248077	-6.06339104	14.42080921	-6.8407825
	0.965	373	0.346071212	379.507296	-0.138521495	-6.818393248	14.3932279	-6.9163996
	0.96	373	0.346763819	379.541388	-0.150819588	-7.519534744	14.36553853	-6.9925600
	0.955	373	0.347517917	379.5789857	-0.161872389	-8.172483486	14.337728	-7.0693346
	0.95	373	0.348327279	379.6198481	-0.171830411	-8.78235468	14.30978416	-7.1467893
	0.945	373	0.349186431	379.6637599	-0.180826607	-9.353762201	14.28169569	-7.2249856
	0.94	373	0.350090564	379.7105287	-0.188978425	-9.890865561	14.25345203	-7.3039806
	0.935	373	0.351035457	379.759983	-0.19638963	-10.39741273	14.22504323	-7.3838277
	0.93	373	0.352017405	379.8119701	-0.203151904	-10.87677909	14.19645988	-7.4645768
	0.925	373	0.353033164	379.866354	-0.209346268	-11.33200292	14.16769309	-7.5462741
	0.92	373	0.354079896	379.923014	-0.215044327	-11.76581749	14.13873434	-7.6289630
	0.915	373	0.355155117	379.9818431	-0.220309384	-12.18068027	14.10957547	-7.7126838
	0.91	373	0.356256664	380.0427465	-0.225197409	-12.57879934	14.08020863	-7.7974744
	0.905	373	0.357382651	380.1056405	-0.229757902	-12.96215724	14.0506262	-7.8833699
	0.9	373	0.358531441	380.1704513	-0.234034658	-13.33253268	14.02082079	-7.9704032
	0.895	373	0.359701614	380.2371139	-0.238066436	-13.69151994	13.99078516	-8.0586051
	0.89	373	0.360891946	380.3055715	-0.241887554	-14.04054659	13.96051222	-8.1480043
	0.885	373	0.362101384	380.3757743	-0.245528412	-14.38088931	13.92999497	-8.2386276
	0.88	373	0.363329026	380.4476787	-0.249015958	-14.71368822	13.89922649	-8.3304999
	0.875	373	0.364574106	380.5212471	-0.252374096	-15.0399598	13.86819992	-8.4236447
	0.87	373	0.365835976	380.5964469	-0.255624045	-15.36060844	13.83690841	-8.5180834
	0.865	373	0.367114096	380.67325	-0.258784662	-15.6764369	13.80534512	-8.6138362
	0.86	373	0.36840802	380.7516322	-0.26187272	-15.98815566	13.77350322	-8.7109215

### 6.3 LISTADO QUICK BASIC. DISPE2.BAS

SCREEN 12

REM ESTE PROGRAMA SIMULA UN REACTOR DE LECHO FIJO UNIDIMENSIONAL  
 REM CON FENÓMENOS SIMULTÁNEOS DE DISPERSIÓN AXIAL DE MASA Y CALOR.  
 REM EL SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES SE SOLUCIONA MEDIANTE  
 REM UN MÉTODO MODIFICADO DE NEWTON QUE ACTÚA SOBRE FUNCIONES  
 REM CREADAS EN LA ENTRADA DEL REACTOR Z=0 Y QUE PERMITEN GENERAR  
 REM NUEVOS VALORES PARA LA CONCENTRACIÓN Y TEMPERATURA EN Z=1 Y  
 REM ASÍ INTEGRAR MEDIANTE UN MÉTODO DE EULER HASTA SATISFACER  
 REM CIERTO GRADO DE PRECISIÓN.

```

PRINT "-----"
PRINT "
PRINT "
PRINT " ANÁLISIS DE LA DISPERSIÓN AXIAL DE MASA Y CALOR "
PRINT " EN REACTORES DE LECHO FIJO "
PRINT "
PRINT "-----"
REM dispersión axial de calor y masa con datos del NAUMAN BRUCE
REM para caso3 y escala manual mínimo=360 y máximo=420
DIM y(5), dery(5), yg(4, 1000), ygg(4, 1000), a(1000, 4)

PRINT " CASO A CONSIDERAR"
INICIAR:
PRINT " 1. NO CONSIDERA DISPERSIÓN AXIAL"
PRINT " 2. SÍ CONSIDERA DISPERSIÓN AXIAL"
PRINT " 3. CASO COMPARATIVO (perfiles de temperatura)"
PRINT " ENTRAR LA SELECCIÓN (1-3)"
INPUT rq
IF rq < 1 OR rq > 3 THEN GOTO INICIAR
ON rq GOTO NODISPER, sidisper, NODISPER

REM"---- CASO CON DISPERSIÓN AXIAL----"

sidisper:

PRINT "CÁLCULO CON DISPERSIÓN AXIAL"
PRINT
PRINT "a1=.06"
PRINT "a2=10"
PRINT "a3=200"
PRINT "a4=2*10^11"
PRINT "a5=10000"
PRINT "1/pe = .045"
PRINT "tw=373 ti=373"

PRINT "A1 = E/VL"
INPUT a1
PRINT "A2 = 2Ut/dCpR"
INPUT a2
PRINT "A3 = (-dHCao/dCp)"
INPUT a3
PRINT "A4 =Kot"
INPUT a4
PRINT "A5 =E/Rg"
INPUT a5
PRINT "1/Pe (masa)"
INPUT pe
pe = 1 / pe
PRINT "tw"
INPUT tw
PRINT "ti"
INPUT ti
CLS
PRINT "NÚMERO DE DIVISIONES"
INPUT m%
zz = 1
dz = -zz / m%

REM valores iniciales de concentración y temperatura

yy0 = .38
tt0 = 380
iter = 1
a(0, 0) = 0

```

```

volver:
y(2) = 0
y(4) = 0
y(3) = tt0
yy1 = yy0 * .99999
y(1) = yy0
GOSUB integra
fun0 = y(2) - pe * (y(1) - 1)
gun0 = a1 * y(4) + (ti - y(3))
y(1) = yy1
y(2) = 0
y(4) = 0
y(3) = tt0
GOSUB integra
fun1 = y(2) - pe * (y(1) - 1)
gun1 = a1 * y(4) + (ti - y(3))
derfuny1 = (fun1 - fun0) / (yy1 - yy0)
derguny1 = (gun1 - gun0) / (yy1 - yy0)
REM terminan las dos primeras derivadas

y(1) = yy0
y(2) = 0
yy3 = tt0 * .99999
y(4) = 0
y(3) = tt0
GOSUB integra
fun0 = y(2) - pe * (y(1) - 1)
f0 = fun0
gun0 = a1 * y(4) + (ti - y(3))
g0 = gun0
y(1) = yy0
y(2) = 0
y(4) = 0
y(3) = yy3

GOSUB integra
fun1 = y(2) - pe * (y(1) - 1)
gun1 = a1 * y(4) + (ti - y(3))
derfuny3 = (fun1 - fun0) / (yy3 - tt0)
derguny3 = (gun1 - gun0) / (yy3 - tt0)

REM cálculo de nuevos valores
y1new = yy0 - (((f0 * derguny3) - (g0 * derfuny3)) / (derfuny1 * derguny3 - derfuny3 * derguny1))
y3new = tt0 - (((g0 * derfuny1) - (f0 * derguny1)) / (derfuny1 * derguny3 - derfuny3 * derguny1))
aaa1 = y1new - yy0
aaa2 = y3new - tt0
PRINT
PRINT "ITERACIÓN="; iter;
PRINT "error Ca="; aaa1;
PRINT "error T="; aaa2;
IF ABS(aaa1) <= .001 THEN
IF ABS(aaa2) <= .01 THEN
PRINT
PRINT : PRINT "LA CONCENTRACIÓN DE SALIDA ES="; y1new
PRINT "LA TEMPERATURA DE SALIDA ES="; y3new
GOTO irr2
END IF
END IF

yy0 = y1new
tt0 = y3new
ygg(1, 0) = y1new
ygg(3, 0) = y3new
a(0, 1) = y1new
a(0, 3) = y3new

```

```
iter = iter + 1
GOTO volver
```

```
integra:
FOR i% = 1 TO m%
GOSUB derivadas
FOR j% = 1 TO 4
y(j%) = y(j%) + dery(j%) * dz
ygg(j%, i%) = y(j%)
NEXT j%
NEXT i%
RETURN
```

```
derivadas:
dery(1) = y(2)
dery(2) = pe * y(2) + a4 * (EXP(-a5 / y(3))) * pe * y(1)
dery(3) = y(4)
dery(4) = (1 / a1) * y(4) + (a2 / a1) * (y(3) - tw) - (a3 / a1) * a4 * (EXP(-a5 / y(3))) * y(1)
RETURN
```

```
irr2:
```

```
IF rq = 3 THEN
FOR i% = 0 TO m%
a(i%, 0) = i% / m%
a(i%, 3) = ygg(3, m% - i%)
NEXT i%
n1 = 3
GOTO gráfica
END IF
```

```
FOR i% = 0 TO m%
a(i%, 0) = i% / m%
a(i%, 1) = ygg(1, m% - i%)
a(i%, 3) = ygg(3, m% - i%)
NEXT i%
PRINT
PRINT " PRESENTACIÓN DE RESULTADOS"
PRINT " 1. TABLA DE RESULTADOS"
PRINT " 2. PRESENTACIÓN GRÁFICA"
PRINT " ENTRAR LA SELECCIÓN (1-2)"
INPUT pre
IF pre < 1 OR pre > 2 THEN GOTO ir1
n1 = 3
nn = 2
ON pre GOTO tabla1, gráfica
```

```
tabla1:
PRINT " TABLA DE RESULTADOS"
PRINT : PRINT " LONG CONCENTRACIÓN TEMPERATURA"
FOR i% = 0 TO m% STEP 50
PRINT USING "###.###"; i% / m%; SPC(4); ygg(1, m% - i%); SPC(11); ygg(3, m% - i%)
NEXT i%
END
```

```
REM "---CASO SIN DISPERSIÓN AXIAL----
```

```
NODISPER:
PRINT : PRINT " CÁLCULO SIN DISPERSIÓN AXIAL"
PRINT
PRINT "a2=10"
PRINT "a3=200"
PRINT "a4=2*10^11"
PRINT "a5=10000"
PRINT "tw=373 ti=373"
```

```

PRINT " A2 = 2Ut/dCpR"
INPUT a2
PRINT " A3=(-dHCao/dCp)"
INPUT a3
PRINT " A4 = Kot"
INPUT a4
PRINT "A5 = E/Rg"
INPUT a5
PRINT "tw"
INPUT tw
PRINT "ti"
INPUT ti
CLS
INPUT "NÚMERO DE DIVISIONES="; m%
y(1) = 1
a(0, 1) = 1
a(0, 2) = ti
y(2) = ti
zz = 1
dz = 1 / m%
a(0, 0) = 0

GOSUB integrando
GOTO irr1
integrando:
FOR i% = 1 TO m%
GOSUB derivada
FOR j% = 1 TO 2
y(j%) = y(j%) + dery(j%) * dz
a(i%, j%) = y(j%)
NEXT j%
a(i%, 0) = a(i% - 1, 0) + dz
NEXT i%
RETURN

derivada:
dery(1) = -a4 * EXP(-a5 / y(2)) * y(1)
dery(2) = -a2 * (y(2) - tw) + a3 * a4 * EXP(-a5 / y(2)) * y(1)
RETURN

irr1:
IF rq = 3 THEN GOTO sidisper
PRINT " PRESENTACIÓN DE RESULTADOS"
PRINT "          1. TABLA DE RESULTADOS"
PRINT "          2. PRESENTACIÓN GRÁFICA"
PRINT "   ENTRAR LA SELECCIÓN (1-2)"
INPUT pre
IF pre < 1 OR pre > 2 THEN GOTO irr1
n1 = 2
nn = 1
ON pre GOTO tabla, gráfica

tabla:
PRINT "          TABLA DE RESULTADOS"
PRINT : PRINT " LONG      CONCENTRACIÓN  TEMPERATURA"
FOR i% = 0 TO m% STEP 50
PRINT USING "###.###"; i% / m%; SPC(4); a(i%, 1); SPC(11); a(i%, 2)
NEXT i%

gráfica:
'Opciones de graficación

PRINT CHR$(12): IF n1 = 1 THEN GOTO irr1
PRINT : PRINT "          OPCIÓN DE GRÁFICAS"

```



```

PRINT : PRINT " 1. CADA VARIABLE POR SEPARADO"
PRINT : PRINT " 2. PERFILES DE TEMPERATURA (caso comparativo)"
ir2:
PRINT : INPUT "SELECCIÓN(1-2)"; G1
IF G1 < 1 OR G1 > 2 THEN GOTO ir2
ON G1 GOTO va, ir1
va:
FOR IP = 1 TO n1 STEP nn
ns = IP: NF = IP
YTIT$ = " TEMPERATURA ": XTIT$ = "DISTANCIA AXIAL X"
IF IP = 1 THEN
YTIT$ = "CONCENTRACIÓN": XTIT$ = "DISTANCIA AXIAL X"
END IF
PRINT : PRINT
PRINT : PRINT " OPCIONES DE ESCALA"
PRINT : PRINT " 1. SELECCIÓN MANUAL DE MÁXIMA Y MÍNIMA"
PRINT : PRINT " 2. SELECCIÓN AUTOMÁTICA DE MÁXIMA Y MÍNIMA"
regreso:
PRINT : INPUT "SELECCIÓN(1-2)"; G2
IF G2 < 1 OR G2 > 2 THEN GOTO regreso:
IF G2 = 2 THEN PRINT CHR$(12): GOSUB graficando: GOTO ir3
PRINT : PRINT " ESCALAS PARA VARIABLES "; IP
PRINT : INPUT "MÍNIMO X="; MINX: PRINT : INPUT "MÁXIMO X="; MAXX
PRINT : LINE INPUT "ESPECIFAR TÍTULO EJE X:", XTIT$
PRINT : INPUT "MÍNIMO Y="; MINY: PRINT : INPUT "MÁXIMO Y="; MAXY
PRINT : LINE INPUT "ESPECIFAR TÍTULO EJE Y:", YTIT$
PRINT CHR$(12): GOSUB ir19
ir3:
FOR PAUSE = 1 TO 10000: NEXT PAUSE
LOCATE 25, 1: INPUT "Pulsar Enter para ver próxima gráfica", KK$
SCREEN 12: WIDTH 80: PRINT CHR$(12)
NEXT IP
END
GOTO ir5
ir1:
CLS
ns = 2: NF = n1
tit1:
YTIT$ = " TEMPERATURA ": XTIT$ = "DISTANCIA AXIAL"
PRINT : PRINT
PRINT : PRINT " OPCIONES DE ESCALAS"
PRINT : PRINT " 1. SELECCIÓN MANUAL DE MÁXIMA Y MÍNIMA"
PRINT : PRINT " 2. SELECCIÓN AUTOMÁTICA DE MÁXIMA Y MÍNIMA"
ir6:
PRINT : INPUT "SELECCION(1-2)"; G2
IF G2 < 1 OR G2 > 2 THEN GOTO ir6
IF G2 = 2 THEN PRINT CHR$(12): GOSUB graficando: GOTO ir4
PRINT : PRINT " ESCALAS PARA TODAS LAS VARIABLES"
PRINT : INPUT "MÍNIMO X="; MINX: PRINT : INPUT "MÁXIMO X="; MAXX
PRINT : LINE INPUT "ESPECIFAR TÍTULO EJE X:", XTIT$
PRINT : INPUT "MÍNIMO Y="; MINY: PRINT : INPUT "MÁXIMO Y="; MAXY
PRINT : LINE INPUT "ESPECIFICAR TÍTULO EJE Y:", YTIT$
CLS
GOSUB ir19
ir4:
FOR PAUSE = 1 TO 10000: NEXT PAUSE
LOCATE 25, 1: INPUT "Pulsar Enter para continuar", KK$
SCREEN 12: WIDTH 80: PRINT CHR$(12)
IF rq = 3 THEN END
ir5:
RETURN

```

graficando:

```
'Graficación
'
'Localiza máxima y mínima para escalas de los ejes
MINX = a(0, 0): MAXX = a(0, 0): MINY = a(0, ns): MAXY = a(0, ns)
FOR K = 0 TO m%
  IF a(K, 0) < MINX THEN MINX = a(K, 0)
  IF a(K, 0) > MAXX THEN MAXX = a(K, 0)
FOR j = ns TO NF
  IF a(K, j) < MINY THEN MINY = a(K, j)
  IF a(K, j) > MAXY THEN MAXY = a(K, j)
NEXT j: NEXT K
IF MAXX = 0 GOTO ir7
FACT = INT(LOG(ABS(MAXX))) / LOG(10)
TEMP = MAXX / (10 ^ FACT)
MAXX = (INT(TEMP + .999)) * (10 ^ FACT)
ir7:
IF MINX = 0 GOTO ir8
FACT = INT(LOG(ABS(MINX))) / LOG(10)
TEMP = MINX / (10 ^ FACT)
MINX = (INT(TEMP)) * (10 ^ FACT)
ir8:
IF MAXY = 0 GOTO ir9
FACT = INT(LOG(ABS(MAXY))) / LOG(10)
TEMP = MAXY / (10 ^ FACT)
MAXY = (INT(TEMP + .999)) * (10 ^ FACT)
ir9:
IF MINY = 0 GOTO ir19
FACT = INT(LOG(ABS(MINY))) / LOG(10)
TEMP = MINY / (10 ^ FACT)
MINY = (INT(TEMP)) * (10 ^ FACT)
ir19:
CLS
CLS : SCREEN 12
VIEW (56, 1)-(536, 322)
IF MINY = MAXY THEN MINY = MINY / 2: MAXY = 2 * MAXY
IF MINY = MAXY AND MINY = 0 THEN MINY = -1: MAXY = 1
WINDOW (MINX, MINY)-(MAXX, MAXY)
'Dibuja los ejes
DX = (MAXX - MINX) / 10: DY = (MAXY - MINY) / 10
IF MINY / MAXY > 0 THEN YZ = MINY ELSE YZ = 0
x = MINX: PSET (x, YZ)
FOR i = 1 TO 10
  x = x + DX: YT = YZ + ABS(DY / 10)
  LINE -(x, YZ), 15: LINE -(x, YT), 15: LINE -(x, YZ), 15
NEXT i
IF MINX / MAXX > 0 THEN XZ = MINX ELSE XZ = 0
y = MINY
PSET (XZ, y)
FOR i = 1 TO 10
  y = y + DY: XT = XZ + ABS(DX / 10)
  LINE -(XZ, y), 15: LINE -(XT, y), 15: LINE -(XZ, y), 15
NEXT i
'
DELX = (MAXX - MINX): DELY = (MAXY - MINY)
FOR i = 0 TO 10 STEP 2
  LBX = MINX + i * DELX / 10: LBX = INT(LBX * 100) / 100
  LN = LEN(STR$(LBX))
  LOCATE 22, 6 + i * 2 * 3: PRINT LBX
ir10:
NEXT i
FOR i = 0 TO 10
  IF IP = 1 THEN
```

```

LBY = MINY + i * DELY / 10: LBY = INT(LBY * 100) / 100
ELSE
LBY = MINY + i * DELY / 10: LBY = INT(LBY * 100) / 100
END IF
LN = LEN(STR$(LBY))
ir11:
IF LN >= 7 THEN LN = LN - 1: GOTO ir11
LOCATE 21 - i * 2, 7 - LN: PRINT LBY
NEXT i
'Centra título eje vertical
IF LEN(YTIT$) > 5 GOTO ir13
V1 = 3 + (14 - LEN(YTIT$)) / 2
FOR i = 1 TO LEN(YTIT$)
LOCATE V1 + i, 1: PRINT MID$(YTIT$, i, 1)
NEXT i
GOTO ir12
ir13:
FOR i = 1 TO 16
LOCATE 5 + i, 1: PRINT MID$(YTIT$, i, 1)
NEXT i
ir12:
COLOR 15
'Centra título horizontal
IF LEN(XTIT$) > 35 GOTO ir14
LOCATE 23, 10 + (36 - LEN(XTIT$))
PRINT XTIT$
GOTO ir15
ir14:
LOCATE 23, 5: PRINT MID$(XTIT$, 1, 36)
ir15:
'Dibuja la función

FOR j = ns TO NF
IF j <= 7 THEN KK = j: ELSE KK = j + 1
x = a(0, 0): y = a(0, j)
PSET (x, y)
FOR i = 1 TO m%
x = a(i, 0): y = a(i, j)
LINE -(x, y), KK
NEXT i
NEXT j

RETURN

END

```

#### BIBLIOGRAFÍA

1. Borio, D. O., Gatica, J. A., Porras, J. E.. Wall cooled fixed bed reactors: parametric sensitivity as a design criterion. AIChEJ. 35(2), 1989.
2. Burghardt A., Zaleski T. Longitudinal dispersion at small and large Peclet numbers in chemical flow reactors. Chemical Engineering Science, 1968, Vol. 23, pp. 575-591.
3. But J. B. Reaction kinetics and reactor design. Prentice Hall, 1980.
4. Carnahan, B., Luther, A.. Cálculo numérico. Métodos, aplicaciones. Ed. Rueda. Madrid, 1979.
5. Constantinides, A.. Applied numerical methods with personal computers. McGraw-Hill Book Co, 1988.
6. Doraswamy, L., Sharma, M.. Heterogeneous reactions: Analysis, examples and reactor design. John Wiley & Sons, 1984.
7. Froment, G. F., Bischoff, K.. Chemicals reactors analysis and design. John Wiley & Sons, 1979.
8. Holland C. D., Rayford G. A. Fundamentals of chemical reaction engineering. Prentice Hall international series in the physical and chemical engineering sciences. 1979.
9. Jenson, V. B., Jeffreys, G. V. Métodos matemáticos aplicados en ingeniería química. Editorial Alhambra. Madrid, 1969.
10. Levenspiel O. El omnilibro de los reactores químicos. Editorial Reverté S.A., 1986.
11. Nauman B. E. Chemical Reactor Design. John Wiley & Sons Inc. 1987.