

# Un Modelo de Simulación de Sistemas Multirreactivos

En el presente trabajo se llama la atención sobre la necesidad de desarrollar modelos matemáticos que permitan predecir el comportamiento, mediante simulación de sistemas multirreactivos. Se plantea entonces, la primordial intervención de la Investigación de Operaciones, para la solución del problema expuesto.

Esta presentación comienza con una introducción al problema, luego se comentan algunas generalidades de las reacciones químicas, en forma sencilla, en seguida se formula y explica el modelo generado junto con una secuencia de resolución propuesta y se menciona la generación de un programa de computador, para plasmar el modelo. Finalmente, se dan las conclusiones más importantes del trabajo, así como dos apéndices donde se ilustran, tanto la autodocumentación, como una corrida del programa elaborado.

**DANIEL BOGOYA MALDONADO**  
Ingeniero Químico, M.I.S.  
Profesor Asistente  
Universidad Nacional

Una de las grandes industrias del mundo actual la constituye aquella que se dedica a la transformación de materiales básicos en productos que revierten en un mejoramiento de la especie humana, empleando para ello las reacciones químicas. Tales reacciones químicas, suceden cuando se ponen, en contacto especies químicas que se pueden transformar espontáneamente, si las condiciones les favorecen, hasta aproximarse a la condición de equilibrio, donde su contenido energético merodea el valor mínimo.

El grado de transformación de unas especies en otras se puede cuantificar mediante modelos cinéticos, donde se estima un perfil de composiciones en función del tiempo, o mediante modelos termodinámicos, por medio de los cuales se estima un perfil de composiciones en función de la distancia al punto de equilibrio.

La solución numérica de los modelos mencionados permite predecir los valores de las variables inmersas en la problemática de la transformación, facilitando enormemente la digestión y optimización de los procesos químicos, tanto existentes como en vías de diseño. En los procesos existentes se puede simular la transformación real, mediante la solución del modelo, conociendo así las respuestas más probables, después de diversas perturbaciones de las variables controlables, mientras que en el diseño de procesos la simulación se convierte en la mejor herramienta para escoger los valores de las variables controlables de modo que tal proceso tenga el perfil deseado.

Corresponde aquí enfatizar la necesidad de la presencia de la investigación de operaciones, para contribuir al logro de soluciones del problema planteado. De tal suerte que en este trabajo se aborda la labor de formular un modelo de simulación de transformaciones químicas, con el cual se pueden predecir valores de variables referentes al proceso; así como la de indicar un esquema de resolución, que se caracteriza por su tendencia a ser programado en máquinas computadoras. Los resultados del programa confeccionado, se ilustran en dos apéndices.

## GENERALIDADES DE LAS REACCIONES QUIMICAS

El campo de las reacciones químicas es amplia-

mente útil para aquellas industrias que se dedican a la transformación de materiales básicos en productos de mayor valor, llevando a cabo una o varias etapas de tales reacciones químicas.

Las reacciones químicas se suceden cuando se ponen en contacto diversas especies químicas, que al reordenarse molecularmente pueden llegar a una configuración más estable.

Cuando las especies químicas que se quieren transformar se llevan a la etapa de reacción (o de reordenación molecular), necesitan un estímulo para iniciar el proceso de transformación. Una vez iniciado éste, la rapidez del cambio es tanto mayor cuanto más fuerte es el estímulo que induce el cambio; pero tal rapidez va decreciendo en el tiempo, en la medida en la que las especies químicas posean menor energía y por tanto, menor potencial para inducir el cambio.

### Tipos de especies químicas

Cuando se lleva a cabo una etapa de transformación se pueden identificar las diferentes especies químicas que intervienen en ella, bien sea como reactivos, como productos o como inertes. Se conocen como reactivos aquellas especies que van disminuyendo su cantidad; como productos, aquellas que van aumentando su cantidad; y como inertes, aquellas que mantienen constante su cantidad durante toda la transformación.

### Expresión de cada reacción química

Por medio de los cambios llevados a cabo y de la identificación de las especies químicas que participan en la transformación, se pueden relacionar las diferentes especies; mediante ecuaciones que indican la proporción entre las cantidades de unas u otras especies que se consumen y la proporción entre otra u otras especies que se forman. Estas ecuaciones representan físicamente a las diferentes reacciones químicas que se llevan a cabo durante la transformación molecular, a razón de una ecuación por cada reacción química.

### Modelos de análisis

Una vez definido el conjunto de reacciones químicas que se llevan a cabo en una transformación, para estudiar las variables que allí se entrelazan se puede abordar el tema, bien sea desde el punto de vista cinético, o bien desde el termodinámico.

En lo referente al aspecto cinético, se evalúa la composición del sistema reactivo en un tiempo determinado, sin tener en cuenta el grado de desequilibrio. Además se puede evaluar el tiempo necesario para alcanzar algún valor de composición, incluso la que se tenga en la condición de equilibrio. En otras palabras, se puede determinar el comportamiento de la velocidad de transformación en el tiempo, o estimar el perfil de composiciones del sistema reactivo como función del tiempo.

Desde el punto de vista termodinámico, se evalúa la composición del sistema reactivo en un instante dado, sin tener en cuenta el tiempo transcurrido ni

la velocidad a la que sucedió el cambio. Termodinámicamente se puede establecer la composición del sistema reactivo para algún grado de desequilibrio e, incluso, para la condición de equilibrio, independiente del tiempo y de la velocidad del cambio; así, se puede estimar un perfil de composiciones del sistema reactivo como función de la distancia a la condición de equilibrio; o como función del grado de desequilibrio en el que se encuentra el sistema en cada instante.

### Coefficientes estequiométricos

Identificada la relación existente entre las cantidades formadas y desaparecidas, de cada especie química con las otras por medio de ecuaciones, los coeficientes que afectan a cada especie química se denominan coeficientes estequiométricos y con ellos se pueden definir los números estequiométricos, que tienen el mismo valor de los coeficientes mencionados y la siguiente convención de signos:

Positivos, para los componentes que sean productos de la reacción; negativos, para los componentes que sean reactivos de reacción; y nulos, para los componentes que sean inertes en la reacción.

Para el caso de un sistema multirreactivo, donde se lleven a cabo varias reacciones químicas simultáneamente, el conjunto de ecuaciones que se desprende es el siguiente:

$$\alpha_{11}A_{11} + \alpha_{12}A_2 + \dots + \alpha_{1c}A_c = 0$$

$$\alpha_{21}A_1 + \alpha_{22}A_2 + \dots + \alpha_{2c}A_c = 0$$

$$\alpha_{m1}A_1 + \alpha_{m2}A_2 + \dots + \alpha_{mc}A_c = 0$$

donde:

$A_i$  ( $i = 1, 2, \dots, c$ ), representa a cada componente, o especie química.

$\alpha_j$  ( $j = 1, 2, \dots, m; i = 1, 2, \dots, c$ ) es el número estequiométrico del componente  $A_i$  en la  $j$ ª reacción.

### Variable de conversión

Para conocer la cantidad que aparece o desaparece de cada componente es necesario determinar la conversión, el progreso o el grado de extensión de cada reacción química. La variable de conversión es la que indica el grado de reordenamiento molecular o de transformación de unas especies químicas en otras. El valor que toma la conversión nunca puede exceder al que corresponde a la condición de equilibrio bajo condiciones de transformación espontánea; es decir, descendiendo hacia configuraciones más desordenadas, con menor contenido energético. De otra parte, en el caso de sistemas multirreactivos se debe tener para cada reacción química linealmente independiente, una variable de conversión asociada.

### FORMULACION DE UN MODELO DE SIMULACION

La idea de formular un modelo, tiene el propósito de integrar un conjunto de ecuaciones para

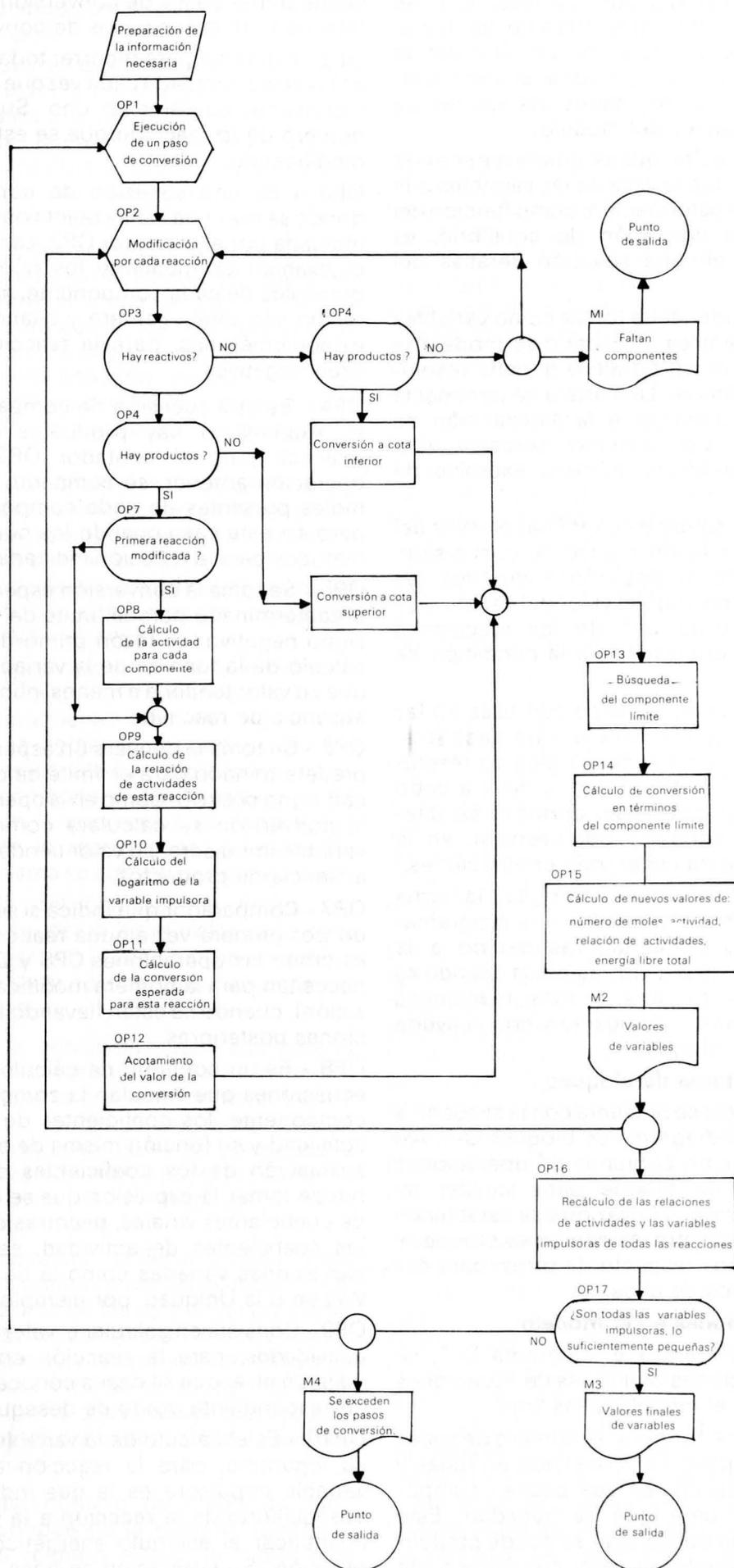


DIAGRAMA D-1

Diagrama de Bloques del Modelo

representar la transformación química. Con tal conjunto de ecuaciones, la manera de simular al sistema multirreactivo consiste en resolver el modelo matemático que representa el comportamiento de tales sistemas, dados los valores de algunas de las variables del modelo.

Puesto que la simulación que se quiere tener exige el conocimiento de los valores de las variables que intervienen en la transformación, como función del progreso hacia la condición de equilibrio, es necesario pensar en una solución iterativa del modelo.

La primera resolución, debe tomar como variables de entrada las que entrega el usuario del modelo; la segunda, aquellas que produce la primera resolución y así sucesivamente. La manera de terminar la simulación debe obedecer a la satisfacción de alguna condición, por ejemplo: cercanía a la condición de equilibrio o número excesivo de resoluciones.

Dentro del modelo se debe cuantificar el valor del cambio en cada iteración o paso de conversión, que es función de la posición energética del sistema reactivo. Conocido el valor del estímulo se puede desplazar cada una de las reacciones identificadas para avanzar hacia la condición de equilibrio.

El desarrollo del modelo se hace con base en las expresiones más representativas para cada evaluación, junto con la secuencia lógica de resolución de variables. Tal desarrollo se lleva a cabo mediante diagramas de bloques donde se establecen ecuaciones y variables por despejar, en la secuencia exigida para evitar indeterminaciones.

El modelo de simulación que se formula y la forma de resolución están encaminados a la programación en máquinas computadoras debido a la extensión y complejidad de los cálculos cuando se aplica a sistemas de tres o más reacciones químicas. Veámoslo a continuación, con la ayuda de un diagrama de bloques.

### Diagrama de bloques

La versión del modelo se presenta con la secuencia de resolución en el diagrama de bloques D-1. Así se quiere sintetizar un conjunto de operaciones afines dentro de un bloque para facilitar su visualización y análisis, a la vez que se establecen los lazos que existen entre los diferentes bloques y la necesidad de unos respecto de otros, para dar una secuencia lógica de ellos.

### Operaciones en el modelo

Tomando como referencia el diagrama D-1, se explican las operaciones o bloques de ecuaciones que intervienen en el modelo. Ellas son:

OP1 - Contador para controlar el número de veces que se ejecuta un paso de conversión en todas y cada una de las reacciones que posean componentes suficientes para que se sucedan. Este número de pasos de conversión se puede predefinir para que no exceda un valor caprichoso (de

veinte o más pasos de conversión), ni llegue a ser mínimo (uno o dos pasos de conversión).

OP2 - Contador para recorrer todas las reacciones del sistema simulado cada vez que el contador OP1 incrementa su valor en uno. Su valor indica el número de la reacción que se está sucediendo o modificando.

OP3 - Es una sucesión de comparaciones en donde se examina si hay reactivos para la reacción indicada por el contador OP2. La forma de realizar el examen es mediante los números de moles presentes de cada componente, mediante comparación con cero, siempre y cuando sus números estequiométricos, para la reacción en cuestión, sean negativos.

OP4 - Es otra sucesión de comparaciones donde se examina si hay productos de la reacción indicada para el contador OP2. Como en la operación anterior, se comparan los números de moles presentes de cada componente con cero, pero en este caso cuando los números estequiométricos para la reacción indicada, sean positivos.

OP5 - Se toma la conversión esperada con el valor predeterminado para el límite de conversión, con signo negativo. La razón primordial, estriba en el cálculo de la función de la variable impulsora, ya que su valor tendería a menos infinito, a causa de la ausencia de reactivos.

OP6 - Se toma la conversión esperada con el valor predeterminado para el límite de conversión, pero con signo positivo. Como en la operación anterior, si la conversión se calculara como función de la variable impulsora, su valor tiende a infinito, por la ausencia de productos.

OP7 - Comparador que indica si se está modificando por primera vez alguna reacción. El propósito es omitir las operaciones OP8 y OP9 (que solo se necesitan para la primera modificación de composición), cuando se estén llevando a cabo modificaciones posteriores.

OP8 - Es un conjunto de cálculos, por medio de ecuaciones que vinculan la composición de cada componente, los coeficientes de fugacidad y de actividad y su función misma de actividad. Para la evaluación de los coeficientes de fugacidad se puede tomar la expresión que se deriva partiendo de coeficientes viriales; mientras que para evaluar los coeficientes de actividad, se pueden tomar expresiones variadas como la de Van Laar, la de Wilson o la Uniquac, por ejemplo.

OP9 - Consiste en calcular el valor de la relación de actividades, para la reacción en estudio, en el instante en el que se desea conocer el estímulo y el correspondiente grado de desequilibrio.

OP10 - Es el cálculo de la variable impulsora y de su logaritmo, para la reacción en cuestión. La variable impulsora es la que indica el grado de desequilibrio de la reacción a la vez que permite cuantificar el estímulo energético que posee tal reacción. Su evaluación se hace relacionando la

constante de equilibrio con la relación de actividades de cada reacción.

OP11 - Constituye el cálculo de la conversión esperada para la reacción que se quiere modificar. El cálculo se realiza con una expresión funcional entre la variable impulsora y la mencionada conversión. En el cálculo se debe asegurar que la variable conversión quede confinada dentro del intervalo previsto: -100% a 100%.

OP12 - Este acotador impide que la conversión de la reacción en estudio tome valores por fuera del intervalo que define el límite de conversión. La razón primordial para que exista esta cota es la de asegurar que el número de pasos de conversión no sea extremadamente pequeño; ya que tanto con veinte o más pasos, como con uno o dos se estarían haciendo simulaciones caprichosas e imprácticas.

OP13 - Es otra sucesión de comparaciones donde se busca el componente limitante de la reacción. Las comparaciones se establecen entre las relaciones de los números de moles de los componentes y sus números estequiométricos de reactivos, cuando la conversión es positiva, y de productos cuando la conversión es negativa.

La presencia de esta operación en el modelo es valiosa porque hace que la conversión se dé en términos del componente límite e impide que alguno de ellos se agote, incurriéndose aún en números de moles negativos. También es importante ver que el componente límite es uno de los productos, cuando la conversión es negativa, ya que el sentido de la reacción se invierte y los productos de la misma se constituyen en reactivos. Así, la búsqueda del componente límite, sea reactivo o producto, permite controlar cada paso de conversión, para la reacción en cuestión, porque admite la presencia de todo componente, aun a nivel de trazas.

OP14 - Se lleva la conversión esperada para la reacción que se quiere modificar, desde la magnitud porcentual hasta la que está en términos del componente límite. Es decir, que la conversión queda ahora expresada en moles del componente límite, que deben transformarse hasta productos si el componente límite es un reactivo, o hasta reactivos si es un producto.

OP15 - En esta operación se llevan a cabo varios cálculos para cada componente del sistema con el fin de tener los valores de las diferentes propiedades, luego del paso de conversión. Prácticamente aquí es donde se produce el traslado del estado del sistema que se esté simulando, ya que se están modificando (en forma discreta) las propiedades de cada componente como función del estímulo que indujo el cambio.

El nuevo valor del número de moles de cada componente se conoce de la relación funcional existente entre el número inicial de moles y la conversión esperada. En este nuevo estado del

sistema es conveniente evaluar el contenido energético para tenerlo como punto de referencia, ya que tal contenido energético debe ser continuamente menor al llevar a cabo pasos de conversión hacia la condición de equilibrio.

OP16 - Aquí se recalculan todas las relaciones de actividades y las variables impulsoras para compararlas posteriormente en la operación OP17. Es necesario efectuar esta operación porque luego de modificar la última reacción, en un paso de conversión, todas las demás reacciones tienen un grado de desequilibrio diferente al que tenían cuando se modificaron.

Más claramente se puede ilustrar este ejemplo: se modifica la primera reacción de un conjunto de tres, encontrando nuevos valores para las propiedades de cada componente; así, tanto la relación de actividades como la variable impulsora de tal reacción son actuales. Luego se modifica la segunda reacción y los nuevos valores de las propiedades de cada componente, si bien satisfacen la relación de actividades y la variable impulsora de la segunda reacción, ya no son actuales para la relación de actividades ni para la variable impulsora de la primera reacción.

En forma análoga se modifica la tercera y última reacción con lo cual se alteran los valores de las propiedades de los componentes, ocasionando una variación en las relaciones de actividades y en las variables impulsoras de la primera y de la segunda reacciones, aunque se satisfagan estas variables para la tercera y última reacción. Por tanto, es fundamental recalcular cada uno de estos valores, para que sean representativos de una situación actual.

OP17 - Es un comparador que permite examinar el tamaño de cada variable impulsora para conocer la magnitud del próximo cambio esperado. Si el cambio esperado es muy pequeño macroscópicamente, se puede considerar que el sistema alcanzó el equilibrio; pero si al contrario, es todavía apreciable, se puede proceder a un nuevo paso de conversión para todas las reacciones.

El tamaño de la variable impulsora se considera pequeño o apreciable, a criterio propio. Sin embargo, como una pauta se puede considerar pequeño cuando la disminución causada en la energía libre de Gibbs por el paso de conversión sea del orden de uno por millón; y apreciable, cuando la conversión esperada sea del orden del límite de conversión.

En esta operación, se dan las siguientes opciones: la terminación de los pasos de conversión, porque el tamaño de las variables impulsoras sea pequeño. También la terminación, porque el número de pasos sea alto, aunque el tamaño de las variables impulsoras sea apreciable. De otra parte, la continuación de los pasos de conversión, porque su número sea pequeño y el tamaño de las variables impulsoras sea alto.

Nuevamente, el número de pasos de conversión se considera alto a criterio propio. Para este trabajo se ha considerado que alto es del orden de veinte o más y se controla en la operación OP1.

### Puntos de salida

Como puntos de salida del modelo se consideran aquellas interfases en donde se debe abandonar la resolución. Tal terminación puede obedecer a diferentes condiciones, que bien se cumplen o bien se dejan de cumplir. Tales puntos son:

Por falta de componentes, cuando los datos dados para la resolución del modelo son incompletos en lo referente a número de moles de los componentes; es decir, se han omitido los componentes necesarios para que por lo menos suceda o avance una de las reacciones involucradas. Durante el cálculo se detecta la no existencia del número mínimo de componentes que permiten llevar a cabo reacción alguna, si las operaciones OP3 y OP4 tienen respuesta negativa y consecutiva, por tantas veces como reacciones químicas haya, controlado este número con el contador de la operación OP2. Esta terminación se da como anormal.

Otro tipo de terminación se logra cuando el tamaño de las variables impulsoras es lo suficientemente pequeño, tipo que se presenta luego de la operación OP17. Esta terminación, que se considera como normal, se maneja a criterio propio y no necesariamente se deben cumplir los pasos de conversión que se desean tener.

Un tercer punto de terminación lo constituye la satisfacción del número de pasos de conversión previsto, terminación que se da como normal, y desde luego, a criterio propio. Esta terminación se puede lograr, aunque el tamaño deseado de las variables impulsoras no se alcance, pero no se continúa la resolución porque se considera un procedimiento altamente exhaustivo.

## CONFECCION DE UN PROGRAMA DE COMPUTADOR

Una vez formulado y probado el modelo de simulación se plasma en un programa de computador (en lenguaje PL/1) y se estructura dentro de un sistema llamado ALETHIA, sistema que se encuentra actualmente cargado en una de las librerías del centro de cómputo de la Universidad Nacional de Colombia. El sistema generado tiene una subrutina de presentación, a manera de autodocumentación para que el usuario que lo llame a ejecución conozca dentro de los listados los siguientes aspectos:

- Qué hace el sistema
- Qué información necesita para operar
- Qué validación de datos de entrada hace
- Qué tipos de mensajes emite
- Qué información entrega al iniciar la operación
- Qué información entrega luego de cada modificación y

- Qué información entrega al terminar la operación.

ALETHIA tiene una estructura jerárquica, que se caracteriza por poseer un módulo de mando, dos módulos de iniciación, tres módulos de proceso, diez y nueve subrutinas de cálculo y doce subrutinas de impresión. Con esta jerarquización e independización de módulos se pretende facilitar su comprensión, uso y mantenimiento.

Cabe resaltar aquí la importancia del sistema ALETHIA, tanto en el campo didáctico como en el industrial, porque es una herramienta que ayuda al conocimiento de la dinámica de diversísimos procesos, bien sea para el estudio de las respuestas más probables a diferentes estímulos, o para la predicción de valores de variables en la síntesis de posibles procesos.

Para ilustrar algunas características del sistema ALETHIA, en los apéndices A-1 y A-2, que se encuentran al final de este trabajo, se pueden observar la autopresentación y una corrida de prueba. Debido a la extensión de los listados, en el apéndice A-2 solo se colocan las respuestas de la simulación del primero y del décimo octavo y último pasos de conversión.

## CONCLUSIONES

- Es muy importante desarrollar modelos que representen, lo más cercanamente posible, sistemas multirreactivos. Con la identificación de las variables, su organización mediante ecuaciones y el establecimiento de una secuencia lógica de resolución se está favoreciendo la digestión racional del comportamiento de dichos sistemas multirreactivos.
- El desarrollo de modelos como el presentado se puede enmarcar dentro de la aplicación de la Investigación de Operaciones en el campo de las reacciones químicas, donde se acondicionan la presentación de la información pertinente, para darle un tratamiento matemático adecuado.
- El modelo que se desarrolla, junto con la secuencia de solución presentada y los controles de rigor en cada caso, constituyen un aporte para el estudio sistemático de los métodos donde se lleven a cabo varias transformaciones químicas simultáneamente. En el mencionado modelo se consideran profundamente los conceptos de discreción de la transformación, teniendo en cuenta la problemática química y su tratamiento matemático.
- El modelo presentado, después de probado, se programa en lenguaje PL/1 y se estructura dentro de un sistema de simulación ALETHIA, que se encuentra disponible en el centro de cómputo de la Universidad Nacional de Colombia. Para ilustrar sus respuestas, se tienen dos apéndices con parte de los listados correspondientes, con los cuales se verificó la confiabilidad.

## APENDICE A-1 (LISTADO DE AUTODOCUMENTACION)

### A L E T H I A

ALETHIA ES UN SISTEMA QUE SIMULA TRANSFORMACIONES QUIMICAS, LLEVADAS A CABO EN UN REACTOR HASTA LLEGAR A LA VECINDAD DE LA CONDICION DE EQUILIBRIO ESTABLECIDA. LAS TRANSFORMACIONES SIMULADAS, SE REALIZAN EN FASE GASEOSA, A PRESION Y TEMPERATURA CONSTANTES.

PARA INICIAR LA OPERACION, EL SISTEMA NECESITA INFORMACION SOBRE:

NUMERO DE ESPECIES QUIMICAS INDEPENDIENTES  
 PRESION DEL SISTEMA MULTIREACTIVO (EN PASCALES)  
 TEMPERATURA DEL SISTEMA MULTIREACTIVO (EN GRADOS KELVIN)  
 NUMERO DE REACCIONES QUIMICAS INDEPENDIENTES  
 NUMERO INICIAL DE MOLES DE CADA COMPONENTE  
 PRESION CRITICA DE CADA COMPONENTE (EN PASCALES)  
 TEMPERATURA CRITICA DE CADA COMPONENTE (EN GRADOS KELVIN)  
 FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICO DE CADA COMPONENTE  
 FACTOR ACENTRICO DE CADA COMPONENTE  
 ENERGIA LIBRE MOLAR DE CADA COMPONENTE A CONDICIONES DEL SISTEMA (EN JULIOS POR MOL)  
 FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE EN EL ESTADO DE REFERENCIA (EN PASCALES)  
 NUMERO ESTEQUIOMETRICO DE CADA COMPONENTE EN CADA REACCION  
 PARAMETRO DE INTERACCION DE CADA PAR PARA LA ECUACION DE WILSON (EN JULIOS POR MOL)  
 VALORES A CRITERIO PROPIO PARA LAS VARIABLES NI, EP, ATENUA, PLC Y LC.

CUANDO EL USUARIO ENTREGA VALORES PARA LAS VARIABLES NI, EP, ATENUA, PLC Y LC, EL SISTEMA VALIDA ESTOS DATOS PARA VERIFICAR QUE ESTEN DENTRO DEL INTERVALO PREVISTO. EN CASO DE ANOMALIA, IMPRIME UN MENSAJE ACLARATORIO Y ASIGNA UN VALOR.

A CONTINUACION SE ILUSTRAN LOS INTERVALOS PREVISTOS PARA TALES VARIABLES Y EL VALOR ASIGNADO POR EL SISTEMA, CUANDO DETECTA VALORES INVALIDOS.

VARIABLE	LIMITE INFERIOR	LIMITE SUPERIOR	VALOR ASIGNADO
NI	0	20	10
EP	0	10	1
ATENUA	0	100	10
PLC	0	0.5	0.5
LC	0	1	0

CUANDO EL SISTEMA EMPIEZA LA OPERACION, ENTREGA INFORMACION SOBRE:

NUMERO DE REACCIONES QUIMICAS EN COMPETENCIA

NUMERO DE ESPECIES QUIMICAS INDEPENDIENTES

OPRESION DEL SISTEMA MULTIREACTIVO (EN PASCALES)

TEMPERATURA DEL SISTEMA MULTIREACTIVO (EN GRADOS KELVIN)

OPRESION CRITICA DE CADA COMPONENTE (EN PASCALES)

TEMPERATURA CRITICA DE CADA COMPONENTE (EN GRADOS KELVIN)

VOLUMEN CRITICO DE CADA COMPONENTE (EN METROS CUBICOS POR MOL)

FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICO DE CADA COMPONENTE

FACTOR ACENTRICO DE CADA COMPONENTE

VOLUMEN MOLAR DE CADA COMPONENTE A CONDICIONES DEL SISTEMA (EN METROS CUBICOS POR MOL)

ENERGIA LIBRE MOLAR DE CADA COMPONENTE A CONDICIONES DEL SISTEMA (EN JULIOS PRO MOL)  
 FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE EN EL ESTADO DE REFERENCIA (EN PASCALES)  
 SEGUNDO COEFICIENTE VIRIAL DE CADA PAR DE COMPONENTES (EN METROS CUBICOS POR MOL)  
 PARAMETRO DE INTERACCION DE CADA PAR PARA LA ECUACION DE WILSON (EN JULIOS POR MOL)  
 NUMERO ESTEQUIOMETRICO DE CADA COMPONENTE EN CADA REACCION  
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO DE CADA REACCION  
 NUMERO INICIAL DE MOLES DE CADA COMPONENTE  
 COMPOSICION INICIAL DE CADA COMPONENTE  
 COEFICIENTE D FUGACIDAD INICIAL DE CADA COMPONENTE  
 COEFICIENTE DE ACTIVIDAD INICIAL DE CADA COMPONENTE  
 ACTIVIDAD INICIAL DE CADA COMPONENTE  
 ENERGIA LIBRE MOLAR PARCIAL INICIAL DE CADA COMPONENTE (EN JULIOS POR MOL)  
 ENERGIA LIBRE TOTAL INICIAL DEL SISTEMA (EN JULIOS)

CUANDO EL SISTEMA VA OPERANDO, UNA VEZ MODIFICADA LA COMPOSICION Y EL CONTENIDO DE  
 ENERGIA DEL SISTEMA MULTIREACTIVO, POR LA CONVERSION DE UNA REACCION QUIMICA,  
 ENTREGA INFORMACION SOBRE:

NUMERO DE LA REACCION MODIFICADA Y POR QUE VEZ  
 GRADO DE CONVERSION  
 COMPONENTE LIMITE  
 RELACION DE ACTIVIDADES  
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO  
 VARIABLE IMPULSORA  
 NUMERO DE MOLES DE CADA COMPONENTE  
 COMPOSICION DE CADA COMPONENTE  
 COEFICIENTE D FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE  
 COEFICIENTE DE ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE  
 ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE  
 ENERGIA LIBRE MOLAR PARCIAL DE CADA COMPONENTE (EN JULIOS POR MOL)  
 ENERGIA LIBRE TOTAL DEL SISTEMA (EN JULIOS)

CUANDO EL SISTEMA DETECTA FALTA DE COMPONENTES, IMPRIME ESTE MENSAJE:

ESTE PROGRAMA TERMINA, PORQUE NO HAY EL NUMERO MINIMO DE ESPECIES QUIMICAS, QUE PERMITAN LLEVAR A CABO REACCION ALGUNA

CUANDO EL SISTEMA EFECTUE LAS MODIFICACIONES DE COMPOSICION PEDIDAS, SIN ALCANZAR LA VECINDAD A LA CCNDICION DE EQUILIBRIO ESTABLECIDA,

IMPRI ME ESTE MENSAJE:

ESTE PROGRAMA TERMINA, PORQUE SE HAN REALIZADO (N1) MODIFICACIONES DE COMPOSICION A CADA UNA DE LAS REACCIONES QUIMICAS, SIN ALCANZAR LA VECINDAD DE LA CONDICION DE EQUILIBRIO ESTABLECIDA  
SE SUGIERE AUMENTAR EL VALOR DEL NUMERO DE MODIFICACIONES,  
Y/O AUMENTAR EL TAMANO DE LA VECINDAD DE LA CONDICION DE EQUILIBRIO.

CUANDO EL SISTEMA TERMINA NORMAL LA OPERACION, ENTREGA ESTA INFORMACION:

ESTE PROGRAMA TERMINA, PORQUE SE HA ALCANZADO LA VECINDAD DE LA CONDICION DE EQUILIBRIO ESTABLECIDA, LUEGO DE (K) MODIFICACIONES DE COMPOSICION, POR CADA REACCION QUIMICA.

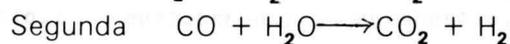
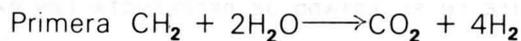
SE ENTREGAN VALORES FINALES DE ESTAS VARIABLES:

RELACION DE ACTIVIDADES DE CADA REACCION  
CONSTANTE DE EQUILIBRIO DE CADA REACCION  
NUMERO DE MOLES DE CADA COMPONENTE  
COMPOSICION DE CADA COMPONENTE  
COEFICIENTE D FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE  
COEFICIENTE DE ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE  
ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE  
ENERGIA LIBRE MOLAR PARCIAL DE CADA COMPONENTE (EN JULIOS POR MOL)  
ENERGIALIBRE TOTAL DEL SISTEMA (EN JULIOS)

## APENDICE A-2 (LISTADO PARCIAL DE UNA CORRIDA DE SIMULACION)

Para este caso, se ha tomado un sistema de prueba caracterizado así:

Número de reacciones químicas: dos, e este orden,



Número de componentes: cinco, en este orden



Presión: 101325 pascales

Temperatura: 1000 grados Kelvin

SE COMIENZA LA SIMULACION DE UNA TRANSFORMACION QUIMICA, CON LA SIGUIENTE INFORMACION:

NUMERO DE REACCIONES QUIMICAS EN COMPETENCIA:	2				
NUMERO DE ESPECIES QUIMICAS INDEPENDIENTES:	5				
PRESION DEL SISTEMA MULTIREACTIVO:	1.013250E+05	PASCALES			
TEMPERATURA DEL SISTEMA MULTIREACTIVO:	1000.00	GRADOS KELVIN			
PRESION CRITICA DE CADA COMPONENTE (EN PASCALES):	4.600155E+06	2.204832E+07	3.495712E+06	7.376460E+06	1.296960E+06
TEMPERATURA CRITICA DE CADA COMPONENTE (EN GRADOS KELVIN):	190.67	647.10	132.90	304.20	33.20
VOLUMEN CRITICO DE CADA COMPONENTE (EN METROS CUBICOS POR MOL):	9.921296E-05	5.612404E-05	9.324739E-05	9.394792E-05	6.491375E-05
FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICO DE CADA COMPONENTE:	0.2990	0.2300	0.2950	0.2740	0.3050
FACTOR ACENTRICO DE CADA COMPONENTE:	0.0070	0.3480	0.0410	0.2250	0.0000

VOLUMEN MOLAR DE CADA COMPONENTE A CONDICIONES DEL SISTEMA (EN METROS CUBICOS POR MOL):

8.211845E-02    7.309399E-05    8.213222E-02    8.211470E-02    8.211374E-02

ENERGIA LIBRE MOLAR DE CADA COMPONENTE A CONDICIONES DEL SISTEMA (EN JULIOS POR MOL):

1.929900E+04    -1.925890E+05    -2.005800E+05    -3.958480E+05    0.000000E+00

FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE EN EL ESTADO DE REFERENCIA (EN PASCALAS):

1.013250E+05    1.013250E+05    1.013250E+05    1.013250E+05    1.013250E+05

SEGUNDO COEFICIENTE VIRIAL DE CADA PAR DE COMPONENTES (EN METROS CUBICOS POR MOL):

6.30920E-05    3.050175E-05    7.206509E-05    6.533464E-05    7.513512E-05

2.523896E-05    -7.293500E-05    4.363449E-05    5.608718E-06    6.518865E-05

7.059080E-05    5.166185E-05    7.679804E-05    7.657445E-05    7.505373E-05

6.415785E-05    6.657025E-06    7.676566E-05    5.919654E-05    8.558683E-05

6.524139E-05    6.842756E-05    6.652664E-05    7.567462E-05    5.831498E-05

PARAMETRO DE INTERACION DE CADA PAR PARA LA ECUACION DE WILSON (EN JULIOS POR MOL):

0.0000    0.0000    0.0000    0.0000    0.0000

0.0000    0.0000    0.0000    0.0000    0.0000

0.0000    0.0000    0.0000    0.0000    0.0000

0.0000    0.0000    0.0000    0.0000    0.0000

0.0000    0.0000    0.0000    0.0000    0.0000

NUMERO ESTEQUIMETRICO DE CADA COMPONENTE EN CADA REACCION:

-1.00    -2.00    0.00    1.00    4.00

0.00    -1.00    -1.00    1.00    1.00

CONSTANTE DE EQUILIBRIO DE CADA REACCION:

3.671519E+01    1.380183E+00

NUMERO INICIAL DE MOLES DE CADA COMPONENTE:

2.000000E+00    3.000000E+00    9.999999E-11    9.999999E-11    9.999999E-11

COMPOSICION INICIAL DE CADA COMPONENTE:

4.000000E-01    6.000000E-01    1.999999E-11    1.999999E-11    1.999999E-11

COEFICIENTE DE FUGACIDAD INICIAL DE CADA COMPONENTE:

1.001019E+00    9.992651E-01    1.001376E+00    1.000753E+00    1.001721E+00

COEFICIENTE DE ACTIVIDAD INICIAL DE CADA COMPONENTE:

5.599419E-01    6.027415E-03    5.588017E-01    5.589802E-01    5.589898E-01

ACTIVIDAD INICIAL DE CADA COMPONENTE:

2.278044E+01    3.613790E-03    1.119140E-11    1.118801E-11    1.119902E-11

ENERGIA LIBRE MOLAR PARCIAL INICIAL DE CADA COMPONENTE (EN JULIOS POR MOL):

6.841645E+03    -2.393403E+05    -4.102322E+05    -6.055027E+05    -2.096466E+05

ENERGIA LIBRE TOTAL INICIAL DEL SISTEMA:

-7.043374E+05    JULIOS

NUMERO DE LA REACCION MODIFICADA:	1				
NUMERO DE VECES QUE SE HA MODIFICADO:	1				
GRADO DE CONVERSION (EN MOLES DEL COMPONENTE LIMITE):	7.500000E-01				
COMPONENTE LIMITE:	2				
RELACION DE ACTIVIDADES:	4.477579E+04				
CONSTANTE DE EQUILIBRIO:	3.671518E+01				
VARIABLE IMPULSORA:	8.199783E-04				
NUMERO DE MOLES DE CADA COMPONENTE:	1.250000E+00	1.500000E+00	9.999999E-11	7.500000E-01	3.000000E+00
COMPOSICION DE CADA COMPONENTE:	1.923077E-01	2.307692E-01	1.538461E-11	1.153846E-01	4.615384E-01
COEFICIENTE DE FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE:	1.000710E+00	9.998801E-01	1.000907E+00	1.000714E+00	1.000975E+00
COEFICIENTE DE ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:	5.631299E-01	3.141078E-03	9.630820E-01	9.631426E-01	9.631463E-01
ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:	1.853487E-01	7.247766E-04	1.483005E-11	1.112111E-01	4.449622E-01
ENERGIA LIBRE MOLAR PARCIAL DE CADA COMPONENTE (EN JULIOS POR MOL):	5.274117E+03	-2.526984E+05	-4.078916E+05	-4.141089E+05	-6.732633E+03
ENERGIA LIBRE TOTAL DEL SISTEMA:	-7.032344E+05 JULIOS				

NUMERO DE LA REACCION MODIFICADA:	2				
NUMERO DE VECES QUE SE HA MODIFICADO:	1				
GRADO DE CONVERSION (EN MOLES DEL COMPONENTE LIMITE):	-3.750000E-01				
COMPONENTE LIMITE:	4				
RELACION DE ACTIVIDADES:	3.868608E+02				
CONSTANTE DE EQUILIBRIO:	1.380183E+00				
VARIABLE IMPULSORA:	3.567648E-03				
NUMERO DE MOLES DE CADA COMPONENTE:	1.250000E+00	1.875000E+00	3.750000E-01	3.750000E-01	2.625000E+00
COMPOSICION DE CADA COMPONENTE:	1.923077E-01	2.894615E-01	5.769230E-02	5.769230E-02	4.038461E-01
COEFICIENTE DE FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE:	1.000719E+00	9.997988E-01	1.000929E+00	1.000695E+00	1.001024E+00
COEFICIENTE DE ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:	9.371215E-01	3.395061E-03	9.370580E-01	9.371393E-01	9.371438E-01
ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:	1.807449E-01	9.791472E-04	5.411123E-02	5.410329E-02	3.788494E-01
ENERGIA LIBRE MOLAR PARCIAL DE CADA COMPONENTE (EN JULIOS POR MOL):	5.046578E+03	-2.501973E+05	-2.248304E+05	-4.200996E+05	-8.069992E+03
ENERGIA LIBRE TOTAL DEL SISTEMA:	-7.258441E+05 JULIOS				

NUMERO DE LA REACCION MODIFICADA:	1			
NUMERO DE VECES QUE SE HA MODIFICADO:	18			
GRADO DE CONVERSION (EN MOLES DEL COMPONENTE LIMITE):	-2.537677E-04			
COMPONENTE LIMITE:	4			
RELACION DE ACTIVIDADES:	4.710637E+01			
CONSTANTE DE EQUILIBRIO:	3.671518E+01			
VARIABLE IMPULSORA:	7.794101E-01			
NUMERO DE MOLES DE CADA COMPONENTE:				
1.403379E+00	2.369487E+00	5.627266E-01	3.388445E-02	1.823708E+00
COMPOSICION DE CADA COMPONENTE:				
2.266006E-01	3.825959E-01	9.086221E-02	5.471248E-03	2.944701E-01
COEFICIENTE DE FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE:				
1.000753E+00	9.996309E-01	1.000999E+00	1.000670E+00	1.001156E+00
COEFICIENTE DE ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:				
6.718712E-01	3.911134E-03	8.717822E-01	8.718978E-01	8.719028E-01
ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:				
1.577153E-01	1.495831E-03	7.929111E-02	4.773561E-03	2.570459E-01
ENERGIA LIBRE MOLAR PARCIAL DE CADA COMPONENTE (EN JULIOS POR MOL):				
5.811137E+03	-2.466741E+05	-2.216536E+05	-4.402851E+05	-1.129497E+04
ENERGIA LIBRE TOTAL DEL SISTEMA:				
			-7.365835E+05	JULIOS

NUMERO DE LA REACCION MODIFICADA:	2			
NUMERO DE VECES QUE SE HA MODIFICADO:	18			
GRADO DE CONVERSION (EN MOLES DEL COMPONENTE LIMITE):	-1.950120E-03			
COMPONENTE LIMITE:	4			
RELACION DE ACTIVIDADES:	9.689964E+00			
CONSTANTE DE EQUILIBRIO:	1.380183E+00			
VARIABLE IMPULSORA:	1.424342E-01			
NUMERO DE MOLES DE CADA COMPONENTE:				
1.403379E+00	2.371436E+00	5.646766E-01	3.193433E-02	1.821757E+00
COMPOSICION DE CADA COMPONENTE:				
2.266006E-01	3.829107E-01	9.117711E-02	5.156368E-03	2.941552E-01
COEFICIENTE DE FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE:				
1.000753E+00	9.996305E-01	1.000999E+00	1.000670E+00	1.001156E+00
COEFICIENTE DE ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:				
6.715969E-01	3.913123E-03	8.715071E-01	8.716226E-01	8.716285E-01
ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:				
1.976531E-01	1.497823E-03	7.954079E-02	4.497413E-03	2.566903E-01
ENERGIA LIBRE MOLAR PARCIAL DE CADA COMPONENTE (EN JULIOS POR MOL):				
5.808520E+03	-2.466630E+05	-2.216275E+05	-4.407806E+05	-1.130648E+04
ENERGIA LIBRE TOTAL DEL SISTEMA:				
			-7.366154E+05	JULIOS

ESTE PROGRAMA TERMINA, PORQUE SE HA ALCANZADO LA VECINDAD DE LA CONDICION DE EQUILIBRIO ESTABLECIDA, LUEGO DE 18 MODIFICACIONES DE COMPOSICION POR CADA REACCION QUIMICA. LOS VALORES FINALES DE LAS VARIABLES SON:

RELACION DE ACTIVIDADES DE CADA REACCION:

4.407294E+01      9.699964E+00

CONSTANTE DE EQUILIBRIO DE CADA REACCION:

3.671519E+01      1.780183E+00

NUMERO DE MOLES DE CADA COMPONENTE:

1.403379E+00      2.371436E+00      5.646766E-01      3.193433E-02      1.821757E+00

COMPOSICION DE CADA COMPONENTE:

2.266006E-01      3.829107E-01      9.117711E-02      5.156368E-03      2.941552E-01

COEFICIENTE DE FUGACIDAD DE CADA COMPONENTE:

1.010753E+00      9.996305E-01      1.000999E+00      1.000670E+00      1.001156E+00

COEFICIENTE DE ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:

8.715969E-01      3.913123E-03      8.715071E-01      8.716226E-01      8.716285E-01

ACTIVIDAD DE CADA COMPONENTE:

1.976531E-01      1.497823E-03      7.954079E-02      4.497413E-03      2.566903E-01

ENERGIA LIBRE MOLAR PARCIAL DE CADA COMPONENTE (EN JULIOS POR MOL):

5.808520E+03      -2.466630E+05      -2.216275E+05      -4.407806E+05      -1.130648E+04

ENERGIA LIBRE TOTAL DEL SISTEMA:

-7.366154E+05      JULIOS

#### BIBLIOGRAFIA

1. Amundson: Mathematical methods in chemical engineering. Prentice Hall. 1966.
2. Bogoya: Diseño e implementación de un modelo simulador de sistemas multirreactivos homogéneos, isobáricos e isotérmicos. Universidad Nacional de Colombia. 1982.
3. Kobayashi: Modeling and analysis. Addison Wesley. 1978.
4. Luyben: Process modeling, simulation and control for chemical engineers. Mc. Graw Hill. 1980.