



DESARROLLO DE UN MÓDULO DE CÁLCULO PARA LA SIMULACIÓN DINÁMICA DE UN REACTOR QUÍMICO POR CARGAS COMPATIBLE CON EL PROGRAMA SimdinUC

Carla Camacho, Zulay Niño y Sergio Pérez

Facultad de Ingeniería, Escuela de Ingeniería Química, Universidad de Carabobo, Valencia

Resumen

SimdinUC es un programa de simulación dinámica de procesos creado en 1991 por Niño y Pérez (Niño y Pérez, 1991), el cual carece de un módulo de cálculo que permita simular unidades de reacción por cargas. El objetivo general del presente trabajo consiste en desarrollar un módulo de cálculo para la simulación dinámica de reactores químicos por cargas, compatible con el programa SimdinUC. Para lo cual es necesario modelar matemáticamente el comportamiento de dichas unidades, codificar el modelo matemático en un lenguaje compatible con el programa principal, validar el módulo de cálculo desarrollado, crear una interfase gráfica, validar el flujo de la información a través de la interfase y crear una base de datos de parámetros cinéticos y termodinámicos. Una vez desarrollado, el módulo de cálculo arrojará resultados con desviaciones aceptables desde el punto de vista práctico, con relación a valores reales reportados en la bibliografía, así como con los obtenidos mediante el uso de otros programas de simulación. La interfase gráfica creada permite una fácil y amena interacción programa - usuario y la base de datos anexa al módulo facilita el suministro de la información requerida para la simulación, resultando una herramienta confiable para la simulación de unidades de reacción por cargas.

Palabras claves: Simulación Dinámica - SimdinUC - Reactor por Cargas

Abstract

SimdinUC is a program for dynamic simulation of processes created in 1991 by Niño and Pérez (Niño y Pérez, 1991), which lacks a calculation module that allows to simulate batch reactors. The general objective consists on developing such a calculation module for the dynamic simulation of chemical batch reactors and compatible with the program SimdinUC; hence it is necessary to model the behavior of these reactors mathematically, code the mathematical pattern in a compatible language with the main program, validate the module, create a graphic interface, then validate the flow of the information through the interface so as to create a database of kinetic and thermodynamic parameters. Once developed, the module will provide results with acceptable deviations, regarding results reported by the bibliography, as well as the results obtained by other simulation programs. The created graphic interface allows an easy and interesting "software-user" interaction and the annexed database to the module facilitates the supply of the information required for the simulation, resulting in a reliable tool for the simulation of batch reactors.

Key words: Dynamic Simulation - SimdinUC - Batch Reactor

INTRODUCCIÓN

Durante la última década, los programas de simulación de procesos se han implantado de forma generalizada en la industria química, llegando a convertirse en herramientas indispensables para el diseño, modificación y evaluación de equipos y plantas, dada la gran versatilidad que ofrecen en cuanto a la manipulación de las variables involucradas en los procesos, y el ahorro económico que proporcionan al permitir realizar el análisis de diversas alternativas para la mejora de un proceso, sin necesidad de materializar los cambios propuestos antes de obtener conclusiones confiables acerca de la conveniencia de implementar, o no, la alternativa en cuestión.

La Unidad de Investigación en Ingeniería de Procesos (U.I.I.P.) de la Universidad de Carabobo ha desarrollado una serie de programas y trabajos íntimamente relacionados al campo de la simulación de procesos, incursionando tanto en la simulación dinámica como en estado estacionario. En 1991 los profesores Zulay Niño y Sergio Pérez (Niño y Pérez, 1991), pertenecientes al equipo de trabajo de la U.I.I.P., desarrollaron, como trabajo de ascenso, los programas SIMDIN y SIMEST para la simulación de procesos químicos en condiciones transitorias y estacionarias, respectivamente.

SIMDIN fue creado a partir de la versión original DYNYSB (Jhonson y otros, 1969), al cual se le realizaron cambios a nivel del algoritmo de integración numérica, el procedimiento para el cálculo de propiedades físicas, la manera de almacenar la información y la forma de imprimir los resultados. La versión ejecutable fue creada mediante un compilador FORTRAN 77, contando con unidades de cálculo para la simulación de válvulas (dos tipos), controladores (dos tipos), mezclador, tanque de mezclado y tanque de calentamiento.

Como parte de los objetivos de la U.I.I.P., se mejoró el programa SIMDIN, de tal forma de tener a disponibilidad de la Universidad de Carabobo un programa de simulación dinámica que permita a sus estudiantes y profesores hacer uso de una herramienta de gran utilidad en el análisis de procesos, sin incurrir en los altos costos que significa la adquisición de software comerciales, y con miras a ofrecer un producto y servicio de alta calidad al parque industrial que se encuentra en el entorno de la Universidad. Para ello se estableció un grupo de trabajo para el desarrollo paralelo de tres proyectos: la creación de una interfase gráfica y la incorporación de un módulo de cálculo para evaporadores, la incorporación de un módulo de cálculo para destilaciones por cargas y finalmente la incorporación de un módulo de cálculo para unidades de reacción por cargas; para conformar el programa mejorado SimdinUC.

Específicamente, el módulo de cálculo para unidades de reacción por cargas se considera de importancia por cuanto muchos de los procesos de la industria farmacéutica, de los cosméticos, pinturas, y la llamada química fina, entre otras, involucran una unidad de este tipo y la mayoría de los programas de simulación comercial no se encuentran orientados hacia estos procesos, siendo de mayor interés económico para las empresas que los desarrollan los procesos asociados a la industria petrolera.

OBJETIVOS

El objetivo general del presente trabajo consiste en desarrollar un módulo de cálculo para la simulación dinámica de reactores químicos por cargas, compatible con el programa SimdinUC. Para lo cual es necesario cumplir con los siguientes objetivos específicos:

- √ Modelar matemáticamente el comportamiento de unidades de reacción por cargas.
- √ Codificar el modelo matemático en un lenguaje compatible con el programa principal.
- √ Validar el módulo de cálculo desarrollado, por medio de casos tratados en la literatura corriente y del uso de simuladores comerciales.
- √ Crear una interfase gráfica entre el usuario y el módulo de cálculo.
- √ Validar el flujo de la información a través de la interfase, Crear una base de datos de parámetros cinéticos y termodinámicos.

METODOLOGÍA

Para el logro de los objetivos propuestos, se empleó la siguiente metodología:

- √ Representación matemática del comportamiento de unidades de reacción por cargas.
- √ Aplicación del protocolo de programación del lenguaje Fortran 90/95.
- √ Realización de un estudio comparativo entre los resultados obtenidos, mediante el módulo de cálculo y los reportados por la bibliografía, así como los obtenidos por medio de programas comerciales.
- √ Programación orientada a objetos de la interfase programa-usuario mediante Visual Basic 5.0. Realización de una corrida con datos cuya respuesta es conocida para la verificación del flujo correcto de información a través de la interfase gráfica. Recopilación bibliográfica de parámetros cinéticos y termodinámicos aplicables al cálculo de unidades de reacción por carga.

DESARROLLO DEL MÓDULO DE CÁLCULO REAC01

El programa SimdinUC fue creado con el objetivo de simular procesos continuos en estado no estacionario, por lo que las herramientas y unidades de cálculo que ofrece al usuario se encuentran orientadas en este sentido; sin embargo, la simulación de operaciones por carga es de gran utilidad debido a que este tipo de operaciones se encuentran incluidas en muchos procesos industriales, por lo tanto y a fin de proveer de mayor versatilidad al programa, se incluyó un aparte dedicado a las operaciones por carga, dado su comportamiento dinámico. Una de las unidades contempladas en el mencionado aparte es el reactor por cargas.

La unidad de reacción por cargas representa un tanque agitado en donde son colocados inicialmente los diferentes reactantes, para la obtención de los productos deseados, como resultado de las reacciones químicas que se producen en el reactor, con transferencia de calor o no. Se realiza un balance de masa y energía, conociendo los valores iniciales de las variables de interés: concentración de cada especie y temperatura, al tiempo t_n , los cuales permiten el cálculo de estas variables al tiempo $t_n + 1$.

La unidad lleva por nombre REAC01, es la unidad tipo 13 dentro de SimdinUC, y se encuentra representada gráficamente por el esquema mostrado en la figura 1.

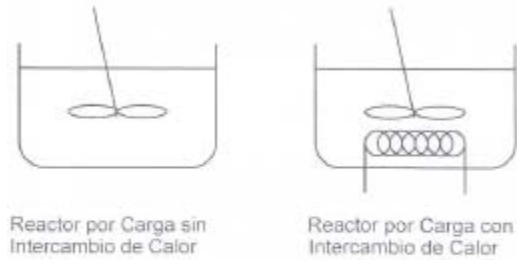


Figura 1.- Esquema de la Unidad de Reacción por Cargas REAC01

Los modelos matemáticos que definen la unidad de cálculo para reactores por carga son las ecuaciones (1) y (2) que representan los balances de masa y energía, respectivamente:

$$r_i = \frac{dC_i}{dt} \quad (1)$$

donde: $\frac{d(C_i V)}{dt}$

variación o acumulación de la especie i

r_i : velocidad de reacción de la especie i por unidad de volumen

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta\bar{H}_r)(-r_i)V}{m_i C_{p_w}} - \frac{UA(T - T_m)}{m_i C_{p_w}} \quad (2)$$

donde:

mT : masa total contenida en el reactor

C_{pm} : capacidad calórica de la mezcla reaccionante

$\frac{dT}{dt}$ variación de la temperatura en función del tiempo de reacción

$(-\Delta\bar{H}_r)$ calor de reacción por mol de especie i

U: coeficiente global de transferencia de calor

A: área de transferencia de calor

T: temperatura de reacción

T_m : temperatura del medio externo

El balance de masa se realiza para cada una de las especies involucradas en el proceso, considerando cada una de las reacciones en las cuales participa, haciendo uso de la expresión para la velocidad de reacción respectiva (ecuación (3) si se trata de una reacción irreversible, y combinación de las ecuaciones (3) y (4) si se trata de una reacción reversible). El balance de energía se realiza únicamente si la unidad opera no isotérmicamente.

$$r_i = k\phi(C_i) \quad (3)$$

donde:

$\Phi (C_i)$: función que depende de las concentraciones de las especies presentes (C_i), sean reactantes, productos, catalizador, inhibidor, etc.

k: constante de velocidad de reacción, depende exclusivamente de la temperatura

$$r = r_{directa} - r_{inversa} \quad (4)$$

Adicionalmente la unidad se encuentra en capacidad de calcular la constante de velocidad a una determinada temperatura mediante la ecuación de Arrhenius:

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (5)$$

donde:

E_a : energía de activación

R: constante universal de los gases

A: factor pre-exponencial ó de frecuencia

y también la conversión de un reactivo en particular que resulte de interés para el usuario (reactivo límite por defecto), haciendo uso de la ecuación (6):

$$X_A = \frac{(N_{A0} - N_A)}{N_{A0}} \quad (6)$$

donde:

X_A : conversión del reactante A para un instante de tiempo t de reacción

N_{A0} : moles iniciales del reactante A

N_A : moles del reactante A en el reactor para un instante de tiempo t de reacción

El algoritmo de cálculo empleado en la creación de la unidad de reacción por cargas, de manera general, es el siguiente:

- √ Cálculo de la constante de velocidad para cada una de las reacciones llevada a cabo.
- √ Cálculo de la concentración de cada una de las especies presentes.
- √ Cálculo de la temperatura.
- √ Cálculo de la conversión.

En la figura 2 (Página Siguiende)se muestra el diagrama de flujo que representa el algoritmo de cálculo de la unidad, de una manera más completa.

La ecuación del balance de masa será evaluada tantas veces como componentes diferentes hay en el proceso, estos valores son guardados junto con el resultado de la evaluación del balance de energía. Todas las evaluaciones son hechas con las variables conocidas al tiempo t_n . La concentración de cada uno de los componentes en el interior del reactor al tiempo t_n es calculada y almacenada. La temperatura es calculada al mismo tiempo y almacenada.

La concentración de cada uno de los componentes dentro del reactor al tiempo $t_n + 1$ y la temperatura son calculadas por una función de integración que hace uso de los métodos de Runge-Kutta-Merson (Merson, 1957) de primer, tercer y cuarto orden, y Runge-Kutta-Fehlberg (Fehlberg, 1968) de primer, segundo, tercer y cuarto orden; y luego son almacenados.

Interfase Gráfica

El módulo de cálculo REAC01 cuenta con una interfase gráfica que facilita la introducción de los datos concernientes a la simulación, por parte del usuario; y muestra los resultados obtenidos, de una manera clara y ordenada.

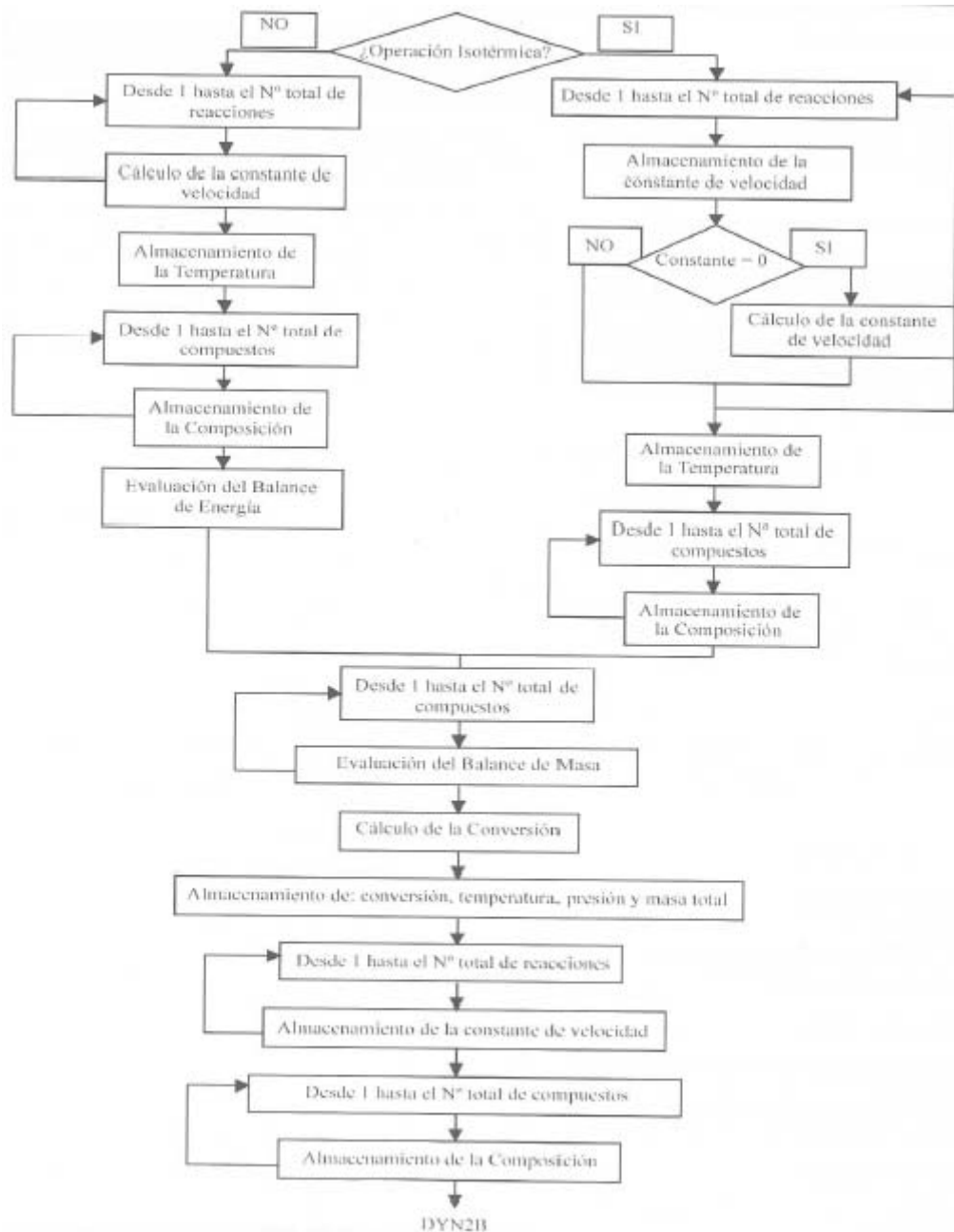


Figura 2.- Diagrama de flujo representativo del algoritmo de cálculo de la unidad REAC01

La interfase se desarrolló mediante la programación orientada a objetos bajo un ambiente gráfico, para lo cual fue necesario diseñar y codificar diferentes formularios, de acuerdo con los requerimientos del programa, haciendo uso de Visual Basic 6.0.

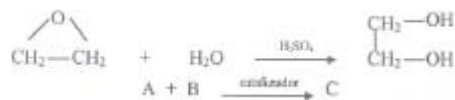
APLICACIÓN DEL MÓDULO DE CÁLCULO

La utilidad del módulo de cálculo desarrollado y el grado de compatibilidad con el programa de simulación principal, se verifica mediante su aplicación a diferentes casos, lo que permite obtener los resultados que deberán ser comparados con los reportados por la bibliografía y/o con los obtenidos con otros programas de simulación, a fin de poner de manifiesto su confiabilidad.

A continuación se presentan los resultados obtenidos en los casos considerados para la simulación de la unidad de reacción por cargas.

Caso 1: Reacción irreversible. Operación isotérmica

Se trata de la hidrolización de óxido de etileno para la formación de etilenglicol a una temperatura constante de 55 ° C en presencia de ácido sulfúrico como catalizador.



Condiciones operacionales:

- Operación isotérmica
- Temperatura: 55 °C
- Presión: 1atm
- Concentraciones iniciales, (kmol/m³): CA, 0 = 1.0; CB, 0 = exceso; CC, 0 = 0.0

Sistema Reaccionante:

- 1 Reacción irreversible de primer orden con respecto a A
- Coeficientes estequiométricos: A = -1; B = -1; C = 1
- Ordenes parciales: A = 1; B = 0; C = 0

Cinética de la reacción:

$$\begin{array}{l} -r_A = k_A C_A \\ k_A = 0.311 \text{ min}^{-1} \end{array}$$

Fogler (1999), reporta el perfil de concentración de etilenglicol para esta reacción por un lapso de tiempo de 10 minutos, el cual se presenta en la Tabla 1, junto al perfil obtenido al ejecutar la simulación en SimdinUC. Ambos perfiles se encuentran representados en la Figura 3.

Tabla 1.- Comparación del Perfil de Concentración de Etilenglicol en la Hidrolización de Oxido de Etileno, reportado por la bibliografía con el obtenido por SimdinUC

Concentración de Etilenglicol, (kmol/m ³)			
Tiempo, (min)	Bibliografía	SimdinUC	Desviación, (%)
0,0	0,000	0,000	0,00
0,5	0,145	0,144	0,69
1,0	0,270	0,267	1,11
1,5	0,376	0,373	0,80
2,0	0,467	0,463	0,86
3,0	0,610	0,606	0,65
4,0	0,715	0,712	0,42
6,0	0,845	0,845	0,35
10,0	0,957	0,955	0,21

Al comparar punto a punto el perfil experimental reportado por la bibliografía, con el obtenido mediante la simulación con SimdinUC, aplicando el método de Runge-Kutta-Fehlberg de 1° orden, se encuentra una máxima desviación de 1.11 %, lo cual a fines prácticos es una desviación muy pequeña, como puede observarse en la representación gráfica de ambos perfiles, donde las curvas generadas se superponen de manera perfecta.

Esto permite asegurar que los resultados obtenidos por medio de la simulación representan con un alto grado de confiabilidad los resultados experimentales; pudiéndose deducir que se logró una representación matemática adecuada del comportamiento de las unidades de reacción por cargas, así como la correcta adaptación del algoritmo de cálculo del módulo al programa principal; atribuyendo las desviaciones encontradas a los errores inherentes al método de cálculo empleado en la resolución de los modelos matemáticos.

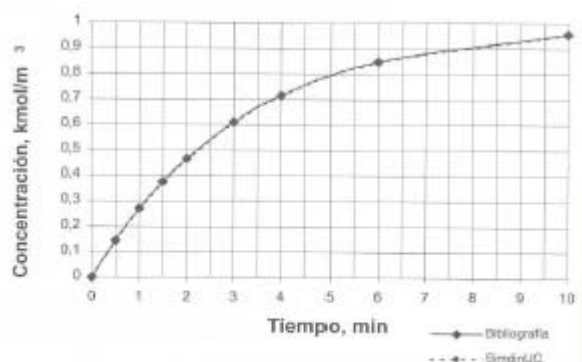


Figura 3.- Comparación del perfil de concentración de etilenglicol en la hidrolización de óxido de etileno, reportado por la bibliografía con el obtenido por SimdinUC

Caso 2: Reacción irreversible. Operación adiabática

Se tiene un compuesto puro A, el cual se descompone para formar B mediante una reacción de cinética de primer orden:



la expresión para la constante de velocidad de esta reacción es la siguiente:

$$k = 2.6352 \times 10^{14} e^{\frac{-28960}{1.987T}}$$

donde T es en K y k en h⁻¹. Se desea determinar el tiempo requerido para alcanzar una conversión de 97%. (Chen Hsing Ning, 1983).

Condiciones operacionales:

- √ Operación adiabática
- √ Temperatura inicial: 163 °C
- √ Presión: 1 atm
- √ Concentraciones iniciales, (g/cm³): CA, o=0.9; CB, o= 0.0

Sistema reaccionante:

- √ 1 Reacción irreversible de primer orden con respecto a A
- √ Coeficientes estequiométricos: A = -1; B = 1
- √ Ordenes parciales: A = 1; B = 0

Cinética de la reacción:

- √ -rA = kACA kA= f(Ea, Ae, T)
- √ Energía de activación, Ea: 28960 cal/mol
- √ Factor de frecuencia, Ae: 4.392x10¹² (para obtener kA en min⁻¹)

En la Tabla 2 se presentan los perfiles de concentración para el compuesto A y la temperatura a lo largo del tiempo, obtenidos mediante la simulación en SimdinUC (ver Figura 4). De la información correspondiente a la concentración de A puede extraerse que al cabo de 7 minutos se alcanza una conversión de 97.86%; Chen Hsing Ning (1983) reporta para esta reacción una conversión de 97% al cabo de 0.1159 horas (calculada mediante integración directa), lo cual en minutos es 6.954 minutos. Tomando por aproximación el tiempo reportado por Chen Hsing Ning (1983) como 7 minutos, la desviación encontrada en cuanto a la conversión es de 0.88%.

Tabla 2.- Perfiles de conversión y temperatura para la reacción del caso 2

Tiempo, min	Conversión de A, %	Temperatura, °C
0,0	0,00	163,00
0,5	0,71	164,17
1,0	1,47	165,44
1,5	2,34	166,89
2,0	3,28	168,44
2,5	4,25	170,05
3,0	5,53	172,18
3,5	6,82	174,32
4,0	8,50	177,11
4,5	10,52	180,46
5,0	12,54	183,81
5,5	16,47	190,34
6,0	20,41	196,88
6,5	31,23	214,84
7,0	97,86	325,44

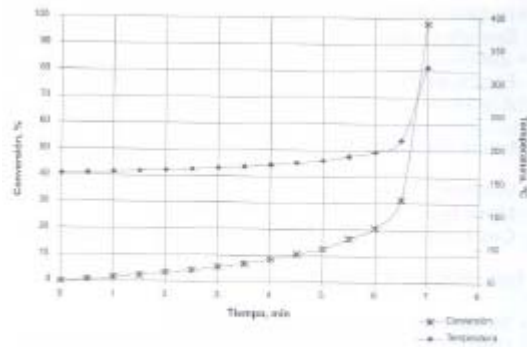


Figura 4.- Perfiles de conversión y temperatura para la reacción del caso 2

En el caso 2, se empleó el método de Runge-Kutta-Merson de 4° orden (Merson,1957), siendo la desviación encontrada en cuanto al valor de la conversión calculada por integración directa y reportada por la bibliografía, menor al 1%, lo que indica que el método de cálculo elegido y empleado por SimdinUC para la resolución de la unidad de reacción por cargas constituye una técnica confiable y de gran exactitud para la realización de este tipo de cálculos, de igual manera, este hecho ratifica la correcta adaptación del algoritmo de la unidad al programa principal.

Caso 3: Reacción reversible. Operación con transferencia de calor

Se tiene interés en evaluar el comportamiento dinámico en un reactor por cargas de la reacción reversible exotérmica:



disponiéndose de la siguiente información cinética (Pérez, 1994):

Reacción directa: $k_{o1} = 2.95 \times 10^7$ $E_{a1} = 11600$ cal/mol

Reacción inversa: $k_{o2} = 1.57 \times 10^{18}$ $E_{a2} = 29600$ cal/mol

Condiciones operacionales:

- √ Operación con transferencia de calor
- √ Temperatura inicial: 303 K
- √ Presión: 1 atm
- √ Concentraciones iniciales, (gmol/l): $C_{A,0} = 1.0$; $C_{B,0} = 0.0$

Sistema reaccionante:

- √ 1 Reacción reversible
- √ Coeficientes estequiométricos: $A_1 = -1$; $B_1 = 1$; $A_2 = 1$; $B_2 = -1$
- √ Ordenes parciales: $A_1 = 1$; $B_1 = 0$; $A_2 = 0$; $B_2 = 1$

Cinética de la reacción:

- √ $-r_A = k_1 C_A - k_2 C_B$
- √ $k_1 = f(E_{a1}, A_{e1}, T)$; $k_2 = f(E_{a2}, A_{e2}, T)$
- √ Energía de activación, (cal/mol): $E_{A1} = 11600$; $E_{A2} = 29600$
- √ Factor de frecuencia, (adm): $A_{e1} = 2.95 \times 10^7$; $A_{e2} = 1.57 \times 10^{18}$

Mezcla reaccionante:

- √ Volumen: 1000 lts
- √ Masa total: 1000 mol
- √ Capacidad calórica de la mezcla: 250 cal/gmol-K

Transferencia de Calor:

- √ Temperatura del medio externo: 300 K
- √ Coeficiente global de transferencia: 5 cal/m².K.min Área de transferencia de calor: 3 m²

En las Tablas 3 y 4 se presentan los resultados obtenidos mediante la simulación con SimdinUC y REACTUC (Pérez, 1994), respectivamente. Debido a que ambos programas manejan los intervalos de integración de manera diferente no fue posible realizar una comparación punto a punto a fin de obtener la desviación resultante; debido a que SimdinUC fija una cierta cantidad de intervalos de tiempo para los cuales calcula la conversión, mientras que REACTUC utiliza intervalos de conversión para los que calcula el tiempo de reacción necesario. Sin embargo, representar los perfiles resultantes en un mismo gráfico es de gran utilidad en la comparación de la información obtenida y permite tener una apreciación bastante confiable de la desviación existente, como se ve reflejado en las Figuras 5y6

Tabla 3.- Perfiles de conversión y temperatura obtenidos mediante SimdinUC para el caso 3 (Operación con transferencia de calor)

Tiempo, min	Conversión de A, %	Temperatura, °C
0,0	0,00	30,00
0,2	2,68	31,93
0,4	5,74	34,13
0,6	8,97	36,40
0,8	12,69	39,14
1,0	16,82	42,11
1,2	21,62	45,56
1,4	27,13	49,53
1,6	33,57	54,17
1,8	41,3	59,73
2,0	50,09	66,06
2,2	60,79	73,77
2,4	71,66	81,59
2,6	82,92	89,70
2,8	90,76	95,35
3,0	96,36	99,38
3,2	98,61	101,00
3,4	99,50	101,64
3,6	99,82	101,87
3,8	99,93	101,95
4,0	99,98	101,98

Tabla 4.- Perfiles de conversión y temperatura obtenidos mediante REACTUC para el caso 3 (Operación con transferencia de calor)

Tiempo, min	Conversión de A, %	Temperatura, °C
0,0	0	30,0
0,3	5	33,3
0,6	10	37,2
0,9	15	40,8
1,1	20	44,4
1,2	25	48,0
1,4	30	51,6
1,5	35	55,2
1,7	40	58,8
1,8	45	62,4
1,9	50	66,0
2,0	55	69,6
2,1	60	73,2
2,1	65	76,8
2,2	70	80,4
2,3	75	84,0
2,4	80	87,6
2,5	85	91,2
2,6	90	94,8
2,9	95	98,4

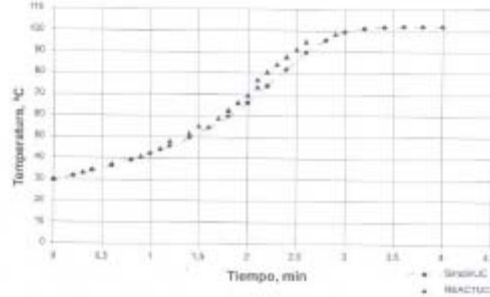


Figura 5.- Comparación de los perfiles de conversión obtenidos mediante SimdinUC y REATUC para el caso 3 (operación con transferencia de calor)

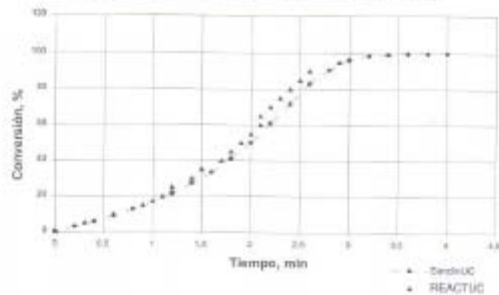


Figura 6.- Comparación de los perfiles de temperatura obtenidos mediante SimdinUC y REATUC para el caso 3 (operación con transferencia de calor)

En las Figuras 5 y 6, donde se encuentran representados los perfiles de conversión y temperatura correspondientes al caso 3, se aprecia como las curvas generadas con REACTUC y SimdinUC, son casi idénticas. Ambos programas hacen uso de la técnica de Runge-Kutta, sin embargo, REACTUC utiliza el método de Runge-Kutta de 4° orden y SimdinUC el método mejorado de Runge-Kutta-Merson de 4° orden, los cuales difieren sólo en los coeficientes empleados (Merson,1957), por lo tanto las diferencias existentes pueden ser atribuidas a este hecho.

CONCLUSIONES

- √ Los modelos matemáticos empleados en la caracterización de las unidades de reacción por carga representan satisfactoriamente el comportamiento real de las mismas.
- √ Sé logró una compatibilidad absoluta entre el programa principal SimdinUC y el módulo de cálculo desarrollado.
- √ Los resultados arrojados por el módulo de cálculo presentan desviaciones aceptables, con respecto a los resultados reportados por la bibliografía para los casos de estudio, así como en cuanto a los resultados obtenidos mediante el uso de otros programas de simulación, pudiéndose atribuir dichas desviaciones a los métodos de cálculo empleados.
- √ La interfase gráfica creada permite una fácil y amena interacción programa-usuario, lo que se traduce en una mayor comprensión, por parte del usuario, de la información procesada por el programa.
- √ La base de datos anexa al módulo de cálculo facilita el suministro de la información requerida por el programa para realizar la simulación, en el caso de aquellos parámetros termodinámicos y cinéticos desconocidos por el usuario.

AGRADECIMIENTO

Los autores de este trabajo desean expresar su agradecimiento al CDCH-UC por su valiosa colaboración en el financiamiento económico del mismo.

REFERENCIAS

1. Chen Hsing Ning (1983). Process Reactor Design. Allyn and Bacon, INC. Massachusetts, U.S.A.
2. Fehlberg, E (1968). Classical fifth, sixth, seventh, and eighth order Runge-Kutta formulas with step size control. Nasa Technical Report 287. Extract published in Computing, Vol. 4, 93-106 (1969).
3. Fogler, Scott (1999). Elements of Chemical Reaction Engineering. Third edition. Prentice Hall. New Jersey, U.S.A.
4. Jhonson, A. I. y otros (1969). DYNSSYS = Digital Computer Programs for Studying the Transient Behaviour of Systems Using a Modular Approach. Department of Chemical Engineering. Mc Master University, Hamilton, Ontario. 138 Págs.
5. Merson, R. H. (1957). An operational method for the study of integration processes. Proceeding of a symposium on data processing. Weapons Research Establishment, Salisbury, South Australia, 110-1 a 110-25.
6. Niño, Z. y Pérez, S. (1991). Simulación de Procesos Químicos en Estado Estacionario y No Estacionario. Trabajo de ascenso, Universidad de Carabobo, Valencia.
7. Pérez S. (1994). Desarrollo de Programas en el Area de la Ingeniería de las Reacciones Químicas, para la Simulación de Reactores. Trabajo de ascenso, Universidad de Carabobo, Valencia.