

DISEÑO DE UNA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL PARA LA ENSEÑANZA
DE REACTORES CSTR

MARÍA ALEJANDRA QUINTERO PINILLA
GABRIEL FERNANDO RODRÍGUEZ GARCÍA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA

2009

DISEÑO DE UNA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL PARA LA ENSEÑANZA
DE REACTORES CSTR

MARÍA ALEJANDRA QUINTERO PINILLA

GABRIEL FERNANDO RODRÍGUEZ GARCÍA

Trabajo de grado presentado como requisito parcial
para optar al título de Ingeniero Químico

Director

ÁLVARO RAMÍREZ GARCÍA

Ingeniero Químico. Ph.D.

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA

2009

*A Dios, por mi vida, la de mi familia y todo lo que me ha brindado, especialmente
por darme sabiduría y calma en los momentos difíciles.*

*A mis papás, por su inmenso amor, consejos, sacrificios y apoyo en cada
momento de mi vida, gracias por hacerme quien soy y por todos sus
esfuerzos para que pueda alcanzar mis sueños.*

A Dani, porque ser su modelo a seguir me impulsa a ser cada día mejor.

*A mis amigos, los de siempre, los que llegaron hace poco y los que ya no están, por
todos los momentos compartidos y por formar parte de mi vida,
especialmente a Jose y Jessica.*

Los quiero mucho... Mariale

A mis padres, Cecilia y Constantino, por su amor, confianza y apoyo incondicional

A mis hermanos, Carlos y Miguel por su amor y su paciencia

A mi sobrino Jostin Andrés por su respeto y afecto

A mascota Napoleón por colmarme de cariño

A todos mis amigos que participaron

de este gran paso en mi vida

Gabriel Fernando Rodríguez García

AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan sus más sinceros agradecimientos a:

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER, por la formación brindada.

ÁLVARO RÁMIREZ GARCÍA, Ingeniero Químico Ph. D, director de este trabajo, por su coordinación y participación en este proyecto.

CRISÓSTOMO BARAJAS FERREIRA, Ingeniero Químico M.Sc, por su orientación y sugerencias durante la elaboración de este trabajo.

Diego Andrés Armando Ballesteros, Ingeniero Químico, por su colaboración y apoyo.

A todos los que de una u otra forma contribuyeron en la culminación exitosa de este proyecto.

TABLA DE CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	13
1. PRESENTACIÓN DEL PROYECTO	3
1.1. OBJETIVOS	3
1.1.1. Objetivo General.....	3
1.1.2. Objetivos Específicos	3
1.2. DESCRIPCIÓN Y PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	3
1.3. ANTECEDENTES	4
1.4. PRESENTACIÓN DE LA SOLUCIÓN PROPUESTA	5
1.5. POBLACIÓN OBJETIVO.....	6
2. DISEÑO DE LA HERRAMIENTA	7
2.1. ÁREAS DE CONTENIDO.....	7
2.2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.....	8
2.3. DISEÑO DE LA INTERFAZ.....	8
3. DESARROLLO DE LA HERRAMIENTA	12
3.1. DESARROLLO DE ALGORITMOS Y PROGRAMACIÓN	12
3.2. ORGANIZACIÓN Y DIGITALIZACIÓN DE LA INFORMACIÓN	13
3.3. ENSAMBLE DE LA HERRAMIENTA	13
3.4. PRUEBAS Y AJUSTES.....	14
4. CONCLUSIONES.....	15
5. RECOMENDACIONES	16
BIBLIOGRAFÍA	17
ANEXOS	19

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Primer marco: encabezado	9
Figura 2. Segundo marco: menú principal	10
Figura 3. Tercer marco: área de contenido	10
Figura 4. Cuarto marco: pie de página.....	10
Figura 5. Vista completa de la interfaz.....	11

LISTA DE ANEXOS

	pág.
ANEXO A. Diagrama de flujo para evaluar el estado estable	19
ANEXO B. Diagrama de flujo para el encendido en continuo	21
ANEXO C. Diagrama de flujo para el encendido en discontinuo	23
ANEXO D. Manual del usuario para la herramienta.....	26
ANEXO E. Manual de usuario para los programas	29

RESUMEN

TÍTULO: DISEÑO DE UNA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL PARA LA ENSEÑANZA DE REACTORES CSTR.*

AUTORES: Quintero Pinilla, María Alejandra; Rodríguez García, Gabriel Fernando. **

PALABRAS CLAVES: Reactor, CSTR, herramienta computacional

DESCRIPCIÓN:

Se desarrolló una herramienta computacional enfocada a reactores CSTR, que incorpora conceptos básicos sobre reacciones químicas, contenido sobre este tipo de equipos y programas para la obtención de sus condiciones de encendido y operación; este material está dirigido especialmente a estudiantes de la asignatura diseño de reactores, con el fin de brindar aspectos fundamentales en el estudio de reactores CSTR, complementando y afianzando los temas vistos en la asignatura y sirviendo de apoyo a los docentes en su labor educativa.

La elaboración de la herramienta se inició con la definición de las áreas de contenido a incluir y su posterior revisión bibliográfica, luego se continuó con el diseño de la interfaz de usuario donde se incorporaron los temas definidos previamente, obteniendo como resultado una herramienta apta para la publicación web, con un entorno agradable y sencillo para el estudiante.

Paralelamente al diseño y desarrollo de la interfaz, se elaboraron códigos de programación que solucionan mediante métodos numéricos las ecuaciones de balance de masa y energía que rigen a este reactor, generando los resultados en forma de gráfica, buscando que el estudiante las interprete y utilice en la resolución de su problema.

Este material se convierte en una opción de consulta rápida sobre un tema de vital importancia para el ingeniero químico, motivando y familiarizando a los estudiantes en el estudio de reactores CSTR, y con la generación de códigos de programación.

* Proyecto de grado

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas, Escuela de Ingeniería Química, Director: Álvaro Ramírez García Ph.D.

ABSTRACT

TITLE: DESIGN OF A COMPUTACIONAL TOOL FOR THE TEACHING OF CSTR (Continuous Stirred-Tank Reactor) *

AUTHORS: Quintero Pinilla, María Alejandra; Rodríguez García, Gabriel Fernando **

KEY WORDS: Reactor, CSTR, computational tool.

DESCRIPTION:

Has been developed a computational tool focus on CSTR (Continuous Stirred-Tank Reactor), that incorporates basic concepts about chemical reactions, content about this type of equipment and programs to obtain the operating and no-steady state conditions; this material is specially for students of the subject Reactors design, in order to provide fundamental aspects in the study of CSTR, complementing and strengthening the material seen in the subject and providing supporting the teachers in their educational work.

The development of the tool began with the definition of the content areas to include and subsequent bibliographical review, then the design of the user interface which incorporates the themes previously defined, resulting in a tool suitable for web publishing, with a nice and simple navigation environment for the student

Parallel to the design and interface development, programming codes were developed, which solves the equations of mass and energy balance that governed this type of reactor, generating the results in graphical form that the student interprets and uses solving your problem.

This material becomes on a quick check option about a theme of vital importance for the chemical engineer, motivating and familiarizing students in the study of CSTR and with programming and generation of codes.

*Degree Project

** Engineering Physical-Chemical Faculty, Department of chemical Engineering,
Director: Álvaro Ramírez García Ph. D.

INTRODUCCIÓN

Una de las tareas más importantes para un ingeniero químico es el diseño, operación y optimización de reactores, ya que son parte fundamental en la mayoría de procesos industriales; el reactor de tanque con agitación continua o CSTR es comúnmente utilizado gracias a que sus condiciones de mezcla perfecta y operación en estado estable permiten un fácil control de la temperatura y la calidad del producto.

Conocer las condiciones de estado estable y en el encendido (donde no se cumple la condición de estabilidad, al igual que en el apagado) es fundamental al momento de resolver problemas que involucren este tipo de reactores, para esto, es necesario solucionar sistemas matemáticos de ecuaciones que se obtienen al realizar los balances de masa y energía; hoy en día se cuenta con diversos programas informáticos que facilitan la resolución de dichos sistemas de ecuaciones aplicando métodos numéricos.

Por otro lado, a pesar del continuo avance de la ciencia, no se han logrado incorporar totalmente en los procesos de aprendizaje los numerosos recursos tecnológicos con los que se cuenta hoy en día, sin embargo, las herramientas computacionales han ido ganando terreno como complementos a la educación impartida por los docentes; por esta razón se buscan estrategias que mejoren e incrementen la asimilación del contenido ofrecido en las aulas de clase y complementando los métodos convencionales de estudio.

Con el desarrollo de esta herramienta computacional para la enseñanza de reactores CSTR se busca incorporar conceptos básicos sobre reacciones químicas, contenido referente a esta clase de reactores y programas para la obtención de sus condiciones de estado estable y encendido; información clave para la resolución de problemas que involucren este tipo de equipos, fundamentales en diversos procesos industriales.

Para lograr el éxito de esta herramienta se deben tener en cuenta aspectos fundamentales en el desarrollo de este tipo de materiales educativos: ser de fácil uso, presentar la información de manera concreta e interesante, motivar al estudiante, recordar el aprendizaje anterior y estimular la práctica; todo esto buscando que el estudiante afiance, desarrolle y complemente satisfactoriamente los contenidos.

1. PRESENTACIÓN DEL PROYECTO

1.1. OBJETIVOS

1.1.1. Objetivo General

Diseñar una herramienta computacional enfocada a la enseñanza de reactores CSTR para los estudiantes de Diseño de Reactores o aquellos interesados en el tema.

1.1.2. Objetivos Específicos

- Diseñar y desarrollar códigos de programación que proporcionen de manera gráfica las condiciones del Estado Estable y el encendido del reactor CSTR.
- Brindar al estudiante una herramienta complementaria en el estudio de reactores CSTR para afianzar y esclarecer conceptos vistos en la asignatura Diseño de Reactores.
- Presentar al estudiante conceptos básicos y preliminares para la solución de problemas que involucren reactores CSTR.
- Contribuir con el desarrollo de herramientas de apoyo para la enseñanza de asignaturas en la Escuela de Ingeniería Química

1.2. DESCRIPCIÓN Y PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El ingeniero químico siempre estará vinculado con los reactores, pues son parte fundamental en la mayoría de procesos industriales, en el caso de los reactores CSTR, a tratar en esta herramienta, las condiciones de estado estable y

encendido son las claves para el desarrollo de problemas que involucren este tipo de equipos.

Esto implica el planteamiento de sistemas de ecuaciones que se resuelven aplicando diversos métodos numéricos, lo cual en ocasiones puede resultar tedioso; hoy en día se cuenta con la ayuda de programas enfocados a la simulación numérica que facilitan la resolución de problemas de este tipo.

Sin embargo, a pesar de las ventajas que brinda la tecnología, la mayor parte de los estudiantes no están familiarizados con este tipo de programas y no los consideran como una alternativa; se requiere generar interés en la implementación de dichos software, incentivando al conocimiento de los lenguajes de programación y mostrando las ventajas de generar códigos que harán mucho más amigable la solución de problemas que enfrentan día a día en sus diversas áreas de estudio.

De igual forma, muchas veces los conceptos de las diferentes asignaturas se presentan de una forma poco tangible, por lo tanto el estudiante recurre a consultas en los textos que pueden resultar poco efectivas ya que muchas veces la información se presenta con un nivel de dificultad mayor al manejado en clase; es así que surge la necesidad de presentar los contenidos de una forma atractiva e interesante, incrementando la asimilación y comprensión por parte de los estudiantes, y sirviendo de apoyo a los docentes en su labor educativa.

1.3. ANTECEDENTES

En la escuela de Ingeniería Química de la Universidad Industrial de Santander se han desarrollado herramientas computarizadas, conocidas como MEC (Material Educativo Computarizado) que abarcan diversas áreas del programa de pregrado: intercambiadores de calor, fenómenos de transporte, termodinámica, operaciones

de absorción, introducción a la ingeniería química y ósmosis inversa; últimamente se desarrolló una herramienta con los conceptos básicos de la asignatura diseño de reactores, donde cual se incluyen aspectos generales e importantes del reactor CSTR, sin embargo no se profundiza en dichos conceptos, ni se incluyen herramientas para el cálculo de las condiciones relevantes para este tipo de reactor (estado estable y encendido) .

De igual forma hace 10 años se realizó una propuesta de una herramienta para el diseño y simulación de reactores CSTR, herramienta desarrollada en VISUAL BASIC 5.0, la cual tenía como objetivo el cálculo de diversas expresiones como entropía, espontaneidad del proceso, temperatura de operación, conversión, concentraciones etc.... pero no incluía gráficos representativos con las curvas de balance molar y de energía del reactor ni la curva de operación durante el encendido. No obstante, previo a la revisión bibliográfica del presente trabajo, nunca se tuvo conocimiento sobre dicha herramienta ya que nunca fue implementada en los equipos de cómputo de la escuela de Ingeniería Química

1.4. PRESENTACIÓN DE LA SOLUCIÓN PROPUESTA

Los reactores CSTR se encuentran presentes en cualquier proceso industrial que implique una operación básica, por esta razón el conocimiento sobre este tipo de equipos es de vital importancia para los ingenieros químicos, con el desarrollo de esta herramienta computacional para la enseñanza de reactores CSTR, se busca incorporar elementos tecnológicos como una nueva estrategia educativa que aporte significativamente al proceso de aprendizaje, enriqueciendo los procesos de enseñanza de diseño de reactores, específicamente para reactores CSTR; permitiendo que el estudiante afiance el contenido más profunda e interactivamente.

La obtención de las condiciones de estado estable y encendido es parte fundamental en el desarrollo de problemas que involucren reactores CSTR, se quiere ofrecer programas para conocer estas condiciones de operación, generando gráficos de tal forma que el usuario pueda interpretar los resultados obtenidos y utilizarlos en el desarrollo de su problema.

Como contenido teórico se incluirán conceptos básicos sobre reacciones químicas y contenido referente al reactor CSTR, todo esto como base para finalmente presentar los programas desarrollados.

1.5. POBLACIÓN OBJETIVO

La herramienta computacional para la enseñanza de reactores CSTR está dirigida a estudiantes de la asignatura Diseño de Reactores o cualquier otro que esté interesado en adquirir, afianzar y complementar sus conocimientos sobre este tipo de reactores; de igual forma, toda la comunidad de la escuela de Ingeniería Química se podrá beneficiar, ya cualquier estudiante puede tener acceso a la herramienta bien sea para utilizarla como material de consulta o usando los programas incluidos que facilitarán o servirán como base para la resolución de problemas relacionados con reactores CSTR; los docentes de la asignatura Diseño de Reactores que deseen complementar sus explicaciones a los estudiantes; y finalmente los docentes de la asignatura Métodos en Ingeniería Química podrán utilizar la herramienta y los programas incluidos en ella como apoyo en las temáticas de métodos numéricos específicamente Runge Kutta.

2. DISEÑO DE LA HERRAMIENTA

2.1. ÁREAS DE CONTENIDO

Se realizó una primera aproximación al contenido de la herramienta, indicando los temas a incluir y una descripción global del temario.

Como su nombre lo indica, la herramienta está diseñada específicamente para reactores CSTR, el contenido principal está enfocado a aspectos claves de este tipo de reactor, sin embargo, se contempló incluir temas que sirvan para una rápida revisión de los conceptos básicos que sirven como punto de partida y son fundamentales para facilitar el aprendizaje de todo lo referente a reactores CSTR.

Como parte primordial de esta herramienta se incluyen programas que gráficamente proporcionarán las condiciones de operación en el encendido y durante el resto del proceso (estado estable) que facilitarán el desarrollo de problemas que involucren reactores CSTR.

La estructura del contenido se centrará en tres partes principales, la primera incluirá conceptos básicos, la segunda conceptos del reactor CSTR y una última con los programas.

En cuanto a conceptos básicos, se incluirán temas como: que es una reacción química, como se clasifican las reacciones químicas, que es velocidad y orden de reacción, que es conversión, que es un reactor químico.

En lo referente al contenido sobre reactores CSTR se presentarán las generalidades, balances de molar y de energía, condiciones de estabilidad, encendido del reactor. Finalmente, para los programas, se contará con una descripción detallada de cada uno y se ilustrará con un ejemplo de aplicación resuelto con la ayuda de dichos programas.

2.2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

Una vez definido el enfoque que se quiere dar a la herramienta, se inició con una revisión bibliográfica del contenido sobre reactores CSTR (las fuentes son mencionadas en la bibliografía) con el fin de obtener las bases teóricas necesarias para el posterior desarrollo de los algoritmos y programas; se seleccionó el software *SCILAB 5.1.1*, ya que es libre, liviano y fácil de usar, con un lenguaje de programación sencillo y funciones incorporadas para el desarrollo de los sistemas de ecuaciones.

2.3. DISEÑO DE LA INTERFAZ

Se decidió continuar con el nombre propuesto en el título de este trabajo: herramienta computacional para la enseñanza de reactores CSTR, seguidamente se inició con la selección de los recursos de software y hardware necesarios para el desarrollo de la herramienta, tratando siempre que sean de fácil acceso y manejo.

Para el desarrollo de la interfaz se seleccionó el formato HTML ya que es el adecuado para una futura publicación en internet, es el lenguaje usado por los navegadores para mostrar las páginas web al usuario, hoy en día es la interfaz más extendida en la red, permite agrupar textos, imágenes y enlaces con referencias a otras páginas por medio de enlaces hipertexto. Se optó por trabajar en *Adobe Dreamweaver CS4*, en su versión de prueba, como editor HTML para diseñar páginas y aplicaciones Web; gracias a sus aplicaciones de edición visual, Dreamweaver permite crear páginas web sin escribir una sola línea de código, de igual forma, si el usuario prefiere puede crear el código manualmente.

En la elaboración del diseño de la interfaz se tuvo en cuenta suprimir en lo posible la barra de desplazamiento horizontal y vertical, debido a que esto puede generar

distracciones en el usuario; de igual forma, se debe crear un ambiente amigable y fácil de manejar, para esto se tiene en cuenta la escogencia del color (verde institucional Universidad Industrial de Santander), tamaño y tipo de letra, cantidad y distribución del contenido.

En el diseño de la herramienta es importante tener en cuenta que la información sea de fácil acceso, sin que la presentación de los contenidos sea rígida ni se obligue al usuario a seguir una secuencia no deseada, organizando la información de tal forma que el usuario navegue cómodamente y tenga la posibilidad de encontrar de manera clara y rápida lo que busca, esto se logra con la inclusión de menús y submenús tipo persiana, facilitando la navegación.

Se decide trabajar con 4 marcos: el encabezado, el menú de navegación, el área de contenido y el pie de página.

- **Encabezado:** corresponde al primer marco, ubicado en la parte superior de la planilla, donde se encuentra el título del material junto con el logo de la Universidad Industrial de Santander.

Figura 1. Primer marco: encabezado



- **Menú principal:** corresponde al segundo marco, se encuentra en la parte inferior del marco del encabezado, contiene el menú de navegación con los siguientes temas: Inicio, Conceptos Básicos, CSTR, Programas, Descargas y Enlaces de Interés.

Figura 2. Segundo marco: menú principal



- **Área de contenido:** corresponde al tercer marco, donde se presentará la información, se ubica debajo de los dos marcos anteriores.

Figura 3. Tercer marco: área de contenido

La reacción química y la ecuación de la reacción

La reacción química es el fenómeno en el que los reactivos se convierten en productos. Cambia la identidad química; se destruyen y reconfiguran enlaces químicos.

Considérese el caso de la producción de ácido nítrico a partir de dióxido de nitrógeno según la reacción:

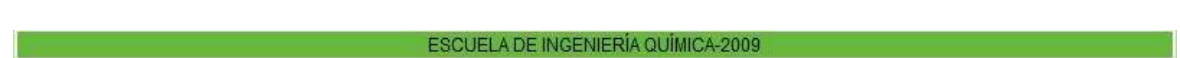
$$3\text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{HNO}_3 + \text{NO}$$

La anterior representa la reacción química: los reactivos, dióxido de nitrógeno y agua, se convierten en productos, ácido nítrico y monóxido de nitrógeno.

Adicionalmente, la ecuación contiene información sobre la estequiometría de la reacción: por cada 2 moles de dióxido de nitrógeno que reaccionen, que cambien de identidad química, reaccionará un mol de agua, cambiará la identidad química de un mol de agua, y se formarán, aparecerá una nueva identidad química, 2 moles de ácido nítrico, y también se formará, aparecerá otra nueva identidad química, un mol de monóxido de nitrógeno.

- **Pie de página:** corresponde al cuarto marco, indica la finalización de la interfaz.

Figura 4. Cuarto marco: pie de página



Acoplando los cuatro marcos descritos anteriormente, se obtiene el diseño final de la interfaz.

Figura 5. Vista completa de la interfaz

Universidad Industrial de Santander

Herramienta Computacional Para La Enseñanza de Reactores CSTR

INICIO CONCEPTOS BÁSICOS CSTR PROGRAMAS DESCARGAS ENLACES DE INTERÉS

La reacción química y la ecuación de la reacción

La reacción química es el fenómeno en el que los reactivos se convierten en productos. Cambia la identidad química; se destruyen y reorganizan enlaces químicos.

Considérese el caso de la producción de ácido nítrico a partir de dióxido de nitrógeno según la reacción:

$$3\text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{HNO}_3 + \text{NO}$$

La anterior representa la reacción química: los reactivos, dióxido de nitrógeno y agua, se convierten en productos, ácido nítrico y monóxido de nitrógeno.

Adicionalmente, la ecuación contiene información sobre la estequiometría de la reacción: por cada 3 moles de dióxido de nitrógeno que reaccionen, cambian de identidad química, reaccionará un mol de agua, cambiará la identidad química de un mol de agua, y se formarán, aparecerá una nueva identidad química, 2 moles de ácido nítrico, y también se formará, aparecerá otra nueva identidad química, un mol de monóxido de nitrógeno.

ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA-2009

3. DESARROLLO DE LA HERRAMIENTA

3.1. DESARROLLO DE ALGORITMOS Y PROGRAMACIÓN

Se organizó la información con el fin de encontrar las ecuaciones que se debían resolver para definir el estado estable del reactor CSTR con intercambio de calor, considerando dos formas clásicas para la transferencia: en una se contempla el flujo rápido del fluido del intercambiador y en la otra el flujo un poco más lento. El diagrama de flujo con el algoritmo correspondiente se encuentra en el Anexo A.

Se establecieron las ecuaciones necesarias para evaluar el estado transitorio que se presenta en el encendido de un reactor CSTR, dejando las ecuaciones en términos de variables como temperatura, concentración, velocidad de reacción, sin considerar la conversión como variable ya que en el estado transitorio no se puede hacer una definición rigurosa de esta debido a la acumulación. El diagrama con el algoritmo para la resolución se encuentra en el Anexo B.

Como alternativa para el encendido se contempló la posibilidad de arrancar el reactor CSTR como un reactor discontinuo hasta que la temperatura o la concentración alcance las condiciones de operación estable y luego calcular el estado transitorio que se presenta al permitir el flujo continuo en el reactor. El diagrama de flujo con el algoritmo correspondiente se encuentra en el Anexo C.

En un aparte anterior se mencionó a *SCILAB 5.1.1* como la herramienta para ejecutar los programas, entre las principales razones se tiene que se trata de software libre de código abierto u Open Source, con lo que no se violarán los derechos de autor al ejecutar y compartir los programas; una segunda razón es la implementación de este software debido a su potencial numérico, en otras materias como Métodos Numéricos y Operaciones Unitarias, este programa también ofrece una interfaz parecida a otros programas comerciales, aunque en la versión 5.1.1 no estén incorporadas opciones como la generación de interfaz

gráfica de usuario más conocida como GUI.

Con ayuda de la revisión bibliográfica se buscaron las funciones de *SCILAB 5.1.1* que podían resolver de forma automática las ecuaciones sin la intervención del usuario, en las ocasiones en que no se contó con funciones determinadas se propusieron soluciones que no intervenían con la solución general del problema.

Debido a la ausencia de un manejo simbólico de *SCILAB 5.1.1*, una desventaja respecto a otros programas comerciales, algunos valores deben ser suministrados en forma de vector.

3.2. ORGANIZACIÓN Y DIGITALIZACIÓN DE LA INFORMACIÓN

Se sintetizó la información recolectada del material bibliográfico, en este momento se definieron las secciones en las cuales se dividiría cada parte del menú principal, y de esta forma organizar la información de manera adecuada; para la digitalización del contenido teórico se usó *Microsoft Office Word 2007* como editor de texto para luego ser incorporada en la plantilla en el editor HTML.

Se definió la cantidad aproximada de contenido que debe llevar cada hoja de tal manera de reducir al máximo la barra de navegación vertical, se buscó que los contenidos fueran claros y concisos, llevando una secuencia lógica de tal forma que el usuario logre un mayor entendimiento y un aprendizaje claro.

3.3. ENSAMBLE DE LA HERRAMIENTA

Una vez se ha organizado el contenido en un formato de texto compatible, en este caso *.doc* (*Microsoft Office Word 2007*), con la ayuda del editor HTML se introdujeron en la plantilla de la interfaz elaborada previamente, teniendo en cuenta los enlaces del menú.

3.4. PRUEBAS Y AJUSTES

Una vez toda la información se encuentra en la interfaz y la herramienta se encuentra totalmente montada, se comprueba que todos los enlaces funcionen adecuadamente, verificando que en el menú principal se encuentren activos todos los vínculos y las rutas de acceso sean correctas; se realizó una evaluación por parte de un estudiante de Ingeniería Química de noveno nivel, con el objetivo de señalar cualquier incoherencia durante la navegación o el aspecto gráfico de la herramienta.

Luego se realizó el manual del usuario en el que se incluye la información necesaria para la ejecución de los programas en SCILAB.

4. CONCLUSIONES

Es una herramienta de apoyo de la cual se beneficiarán estudiantes y profesores, puede ser utilizada individualmente o en grupos, y no tiene una estructura rígida para su navegación, por lo tanto se adapta al ritmo de cada estudiante

Gracias al uso del formato HTML, se obtuvo un paquete liviano apto para la publicación en internet, igualmente es una herramienta de fácil actualización, en la cual se puede incluir más información o fusionar con otro material de este tipo sobre un tema relacionado.

La utilización de software libre u Open Source en la resolución de problemas de ingeniería que involucren un manejo numérico ayuda a eliminar la dependencia al uso de programas comerciales fomentando la adquisición de nuevo conocimiento.

Esta herramienta se convierte en una opción de consulta rápida sobre un tema de vital importancia para el ingeniero químico, buscando motivar a los estudiantes en el diseño de los reactores CSTR al igual que los familiarizarlos con SCILAB fomentando el interés por la programación y desarrollo de códigos para la resolución de problemas.

5. RECOMENDACIONES

Es importante generar espacios de aprendizaje de software complementarios en la formación del ingeniero químico que surgen como herramientas para la resolución de problemas

Se recomienda la integración de la herramienta en las clases, como apoyo a los conceptos vistos.

Se sugiere la publicación en internet y ubicación de la herramienta en los computadores de sala de cómputo y del centro de estudios con el fin de lograr mayor difusión y acceso por parte del estudiantado.

BIBLIOGRAFÍA

ALQUIRICHE MIZAR, Jorge Luis y CASADIEGOS AGUDELO, Herenia. Desarrollo de material educativo computacional (MEC) para la enseñanza de ósmosis inversa en la escuela de ingeniería química. Bucaramanga, 2009, 49 p. Trabajo de grado (Ingeniero Químico). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química.

DÍAZ AMADOR, Alberto y GÓMEZ CABARCAS, Ernesto. Propuesta de una herramienta informática para el diseño y simulación de un reactor CSTR. Bucaramanga, 1999, 90 p. Trabajo de grado (Ingeniero Químico). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química.

FOGLER, H. Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 3 Ed. México: Pearson Educación, 2001.

FROMENT, Gilbert y BISCHOFF, Kenneth. Chemical reactor analysis and design. United States: John Wiley & Sons, Inc., 1979. 765 p.

LEVENSPIEL, Octave. Ingeniería de las reacciones químicas. 3 Ed. México: Editorial Limusa Wiley, 2006. 669 p.

MANTILLA RIBERO, César Andrés. Planeación y montaje de una herramienta computacional destinada al aprendizaje del diseño de reactores. Bucaramanga, 2009, 33 p. Trabajo de grado (Ingeniero Químico). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química.

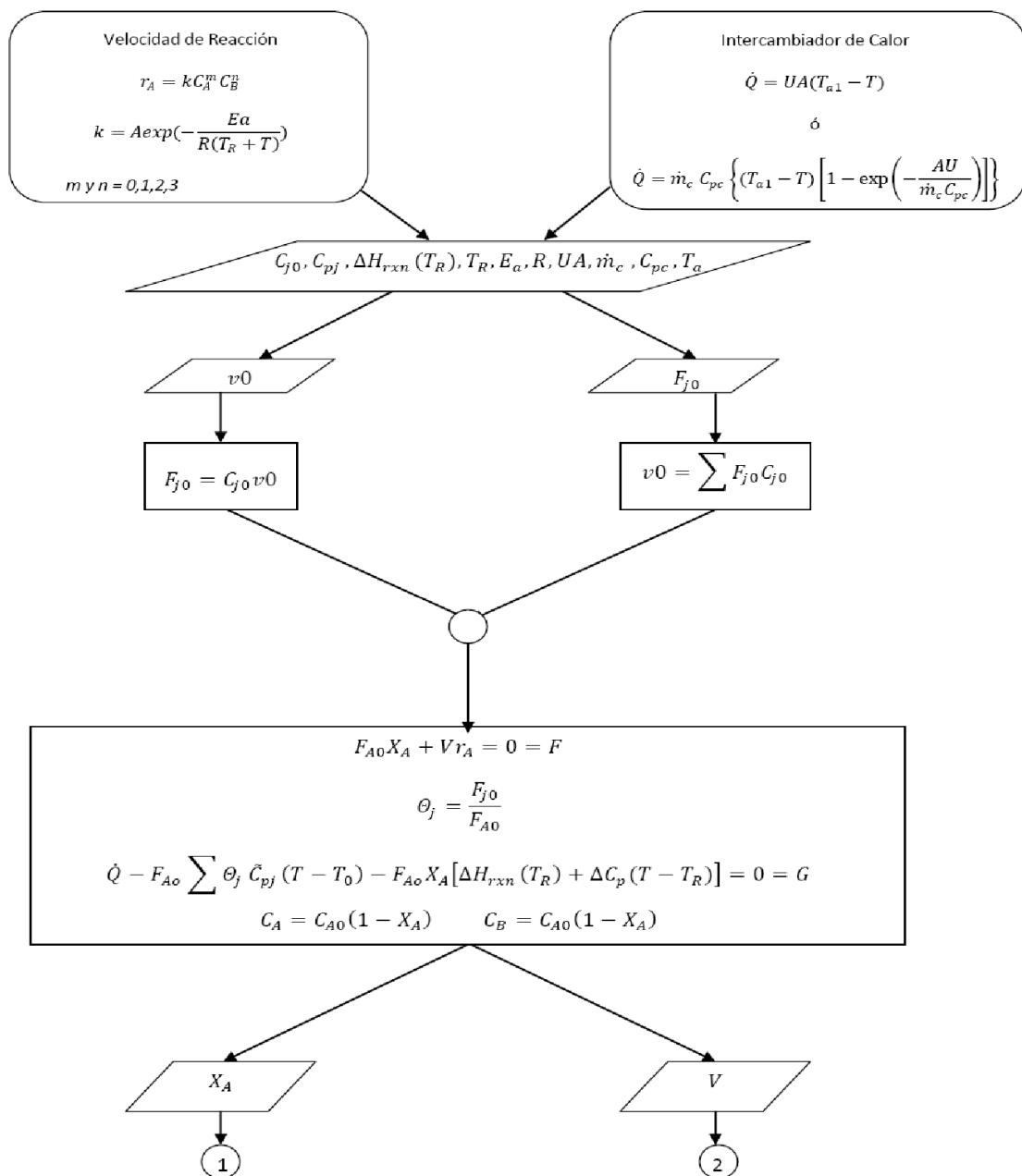
MEDRANO C, VALIENTE J.M., PLAZA I. "Evaluación de herramientas de software libre para cálculo numérico" Internet:

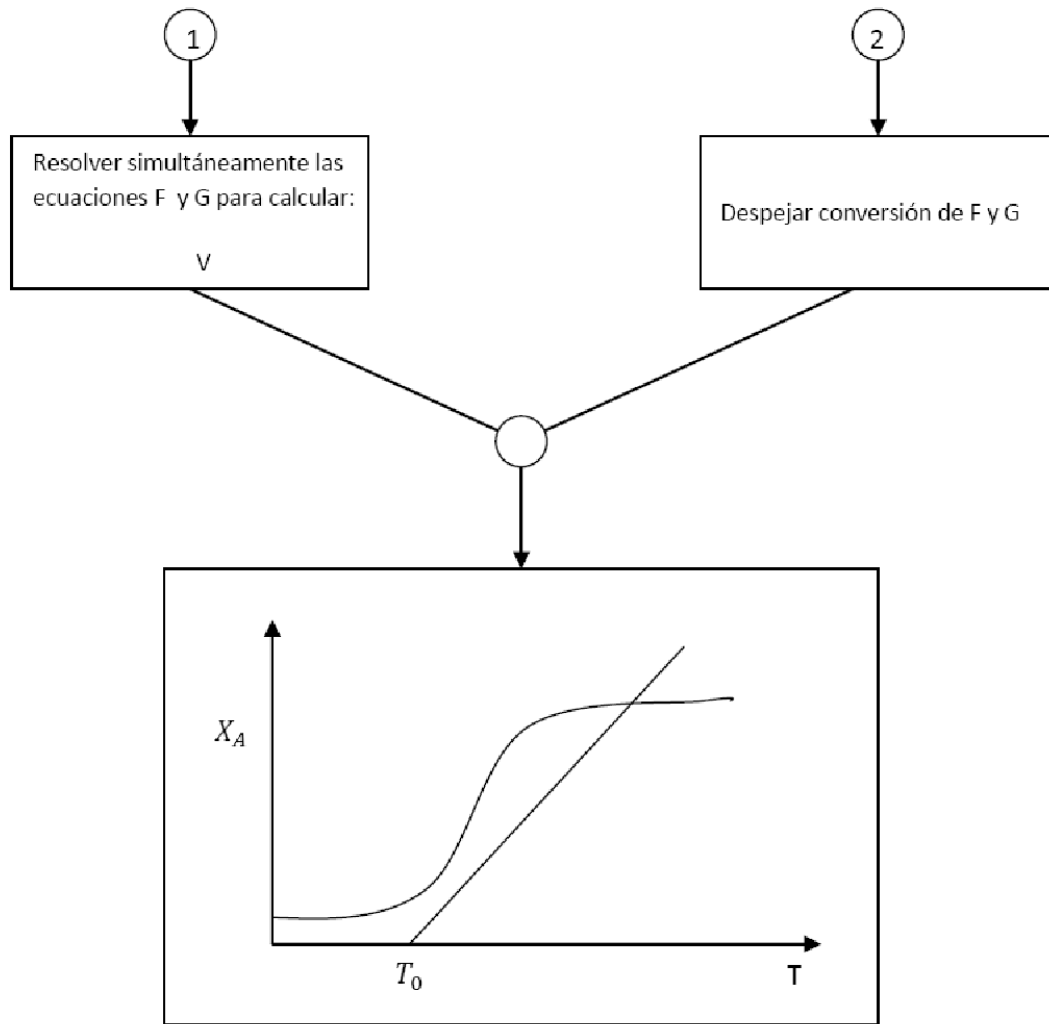
(<http://e-spacio.uned.es/ingenieriaindustrial/taee/2006/papers/2006S1C02.pdf>)

SMITH, J. M. Ingeniería de la cinética química. 3 Ed. México: Compañía editorial continental, S.A, 1995, 774 p.

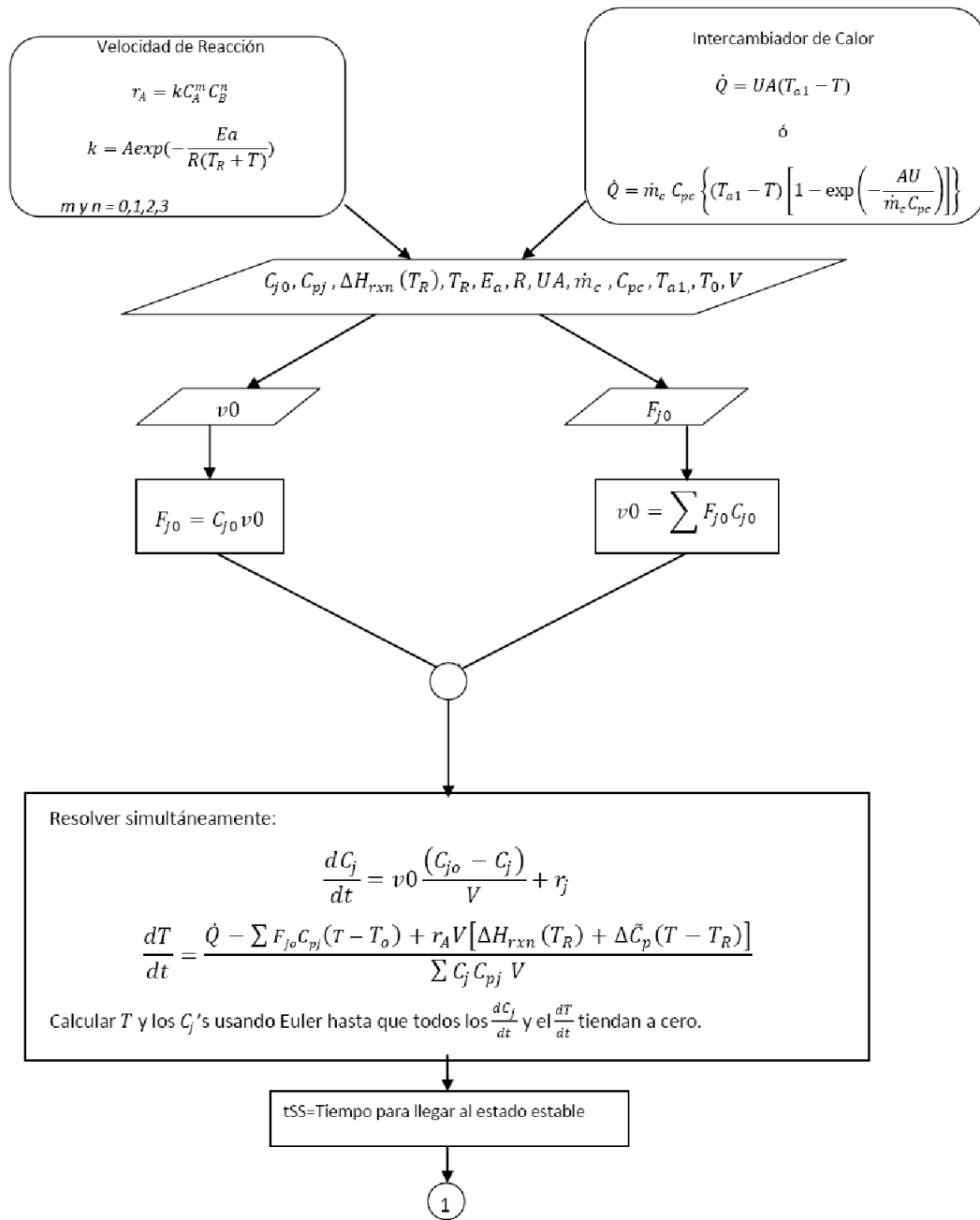
ANEXOS

ANEXO A. Diagrama de flujo para evaluar el estado estable





ANEXO B. Diagrama de flujo para el encendido en continuo



1

Resolver simultáneamente:

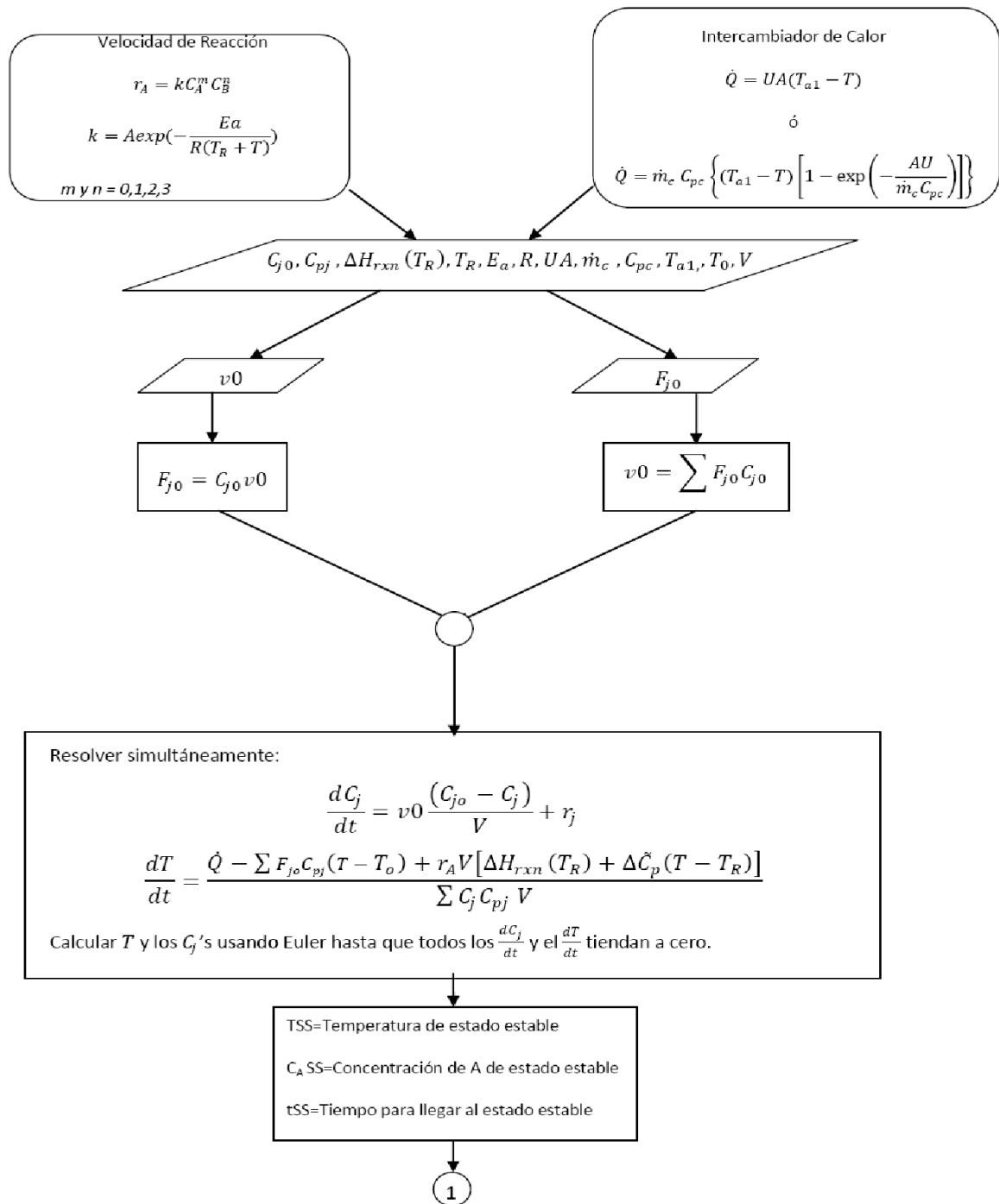
$$\frac{dC_j}{dt} = v_0 \frac{(C_{j_0} - C_j)}{V} + r_j$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \sum F_{j_0} C_{pj} (T - T_0) + r_A V [\Delta H_{rxn} (T_R) + \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)]}{\sum C_j C_{pj} V}$$

Aplicando el método Runge Kutta Cuarto Orden de Sliab con condiciones iniciales y tSS como criterio de parada.

Graficar Temperatura,
Concentración, Velocidad de
Reacción en función del tiempo.

ANEXO C. Diagrama de flujo para el encendido en discontinuo



1

Resolver simultáneamente con el método de Euler las siguientes ecuaciones y usar TSS y C_A SS como criterio de parada.

$$\frac{dC_j}{dt} = r_j$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} + r_A V [\Delta H_{rxn}(T_R) + \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)]}{\sum C_j C_{pj} V}$$

Calcular el tiempo de operación en Discontinuo, tf_{Batch} .

Resolver simultáneamente

$$\frac{dC_j}{dt} = r_j$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} + r_A V [\Delta H_{rxn}(T_R) + \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)]}{\sum C_j C_{pj} V}$$

Aplicando el método Runge Kutta Cuarto Orden de Sclab con tf_{Batch} como criterio de parada.

Obtener la Temperatura y la Concentración en función del tiempo.

Resolver simultáneamente:

$$\frac{dC_j}{dt} = v_0 \frac{(C_{j_0} - C_j)}{V} + r_j$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \sum F_{j_0} C_{pj} (T - T_o) + r_A V [\Delta H_{rxn}(T_R) + \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)]}{\sum C_j C_{pj} V}$$

Aplicando el método Runge Kutta Cuarto Orden de Sclab con las condiciones finales del Reactor Discontinuo como condiciones iniciales y TSS como criterio de parada.

2

2

Graficar Temperatura,
Concentración, Velocidad de
Reacción en función del
tiempo.

ANEXO D. Manual del usuario para la herramienta

Requerimientos del sistema

- **Requerimientos de hardware:**

Procesador: 300 MHZ o superior

Memoria RAM: 128 Mb o superior

- **Requerimientos de software:**

Cualquier Sistema Operativo (OS)

Internet Explorer 6.0 o superior

Mozilla Firefox 3.0 o superior

Opera 9.0 o superior

- **Resoluciones soportadas:**

800x600

1024x768

1152x864

1280x1024

1280x800 (16:10)

1280x768 (15:9)

Estructura de la herramienta

A continuación se presenta el entorno de la herramienta:

The screenshot shows a web interface with a green header. On the left, it says 'Universidad Industrial de Santander' next to a logo. The main title is 'Herramienta Computacional Para La Enseñanza de Reactores CSTR'. Below the title is a navigation menu with six items: INICIO, CONCEPTOS BÁSICOS, CSTR, PROGRAMAS, DESCARGAS, and ENLACES DE INTERÉS. The main content area is titled 'La reacción química y la ecuación de la reacción'. It contains text explaining chemical reactions and a chemical equation: $3\text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{HNO}_3 + \text{NO}$. At the bottom, it says 'ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA-2009'.

La interfaz está compuesta por 4 marcos: el encabezado, el menú de navegación, el área de contenido y el pie de página.

Encabezado: se encuentra el título del material junto con el logo de la Universidad Industrial de Santander.

Menú principal: contiene el menú principal de navegación, dividido en 6 módulos, con los submenús respectivos, de la siguiente forma:

- Inicio
- Conceptos Básicos
 - La reacción química y la ecuación química
 - Clasificación de las reacciones químicas
 - Principios de conservación de masa y energía en las reacciones químicas
 - Velocidad de reacción
 - Orden de reacción
 - Conversión
 - Reactor químico
- CSTR
 - Generalidades
 - Dinámica del reactor CSTR
 - Balance molar
 - Balance de energía
 - Concentración
 - Mezclado
 - Estabilidad
 - Encendido
- Programas
 - Estado estable
 - Encendido como reactor discontinuo
 - Encendido como reactor continuo
 - Ejercicio de aplicación
- Descargas
- Enlaces de Interés.

Área de contenido: es el marco de mayor tamaño y es donde se presenta toda la información

Pie de página: indica la finalización de la interfaz.

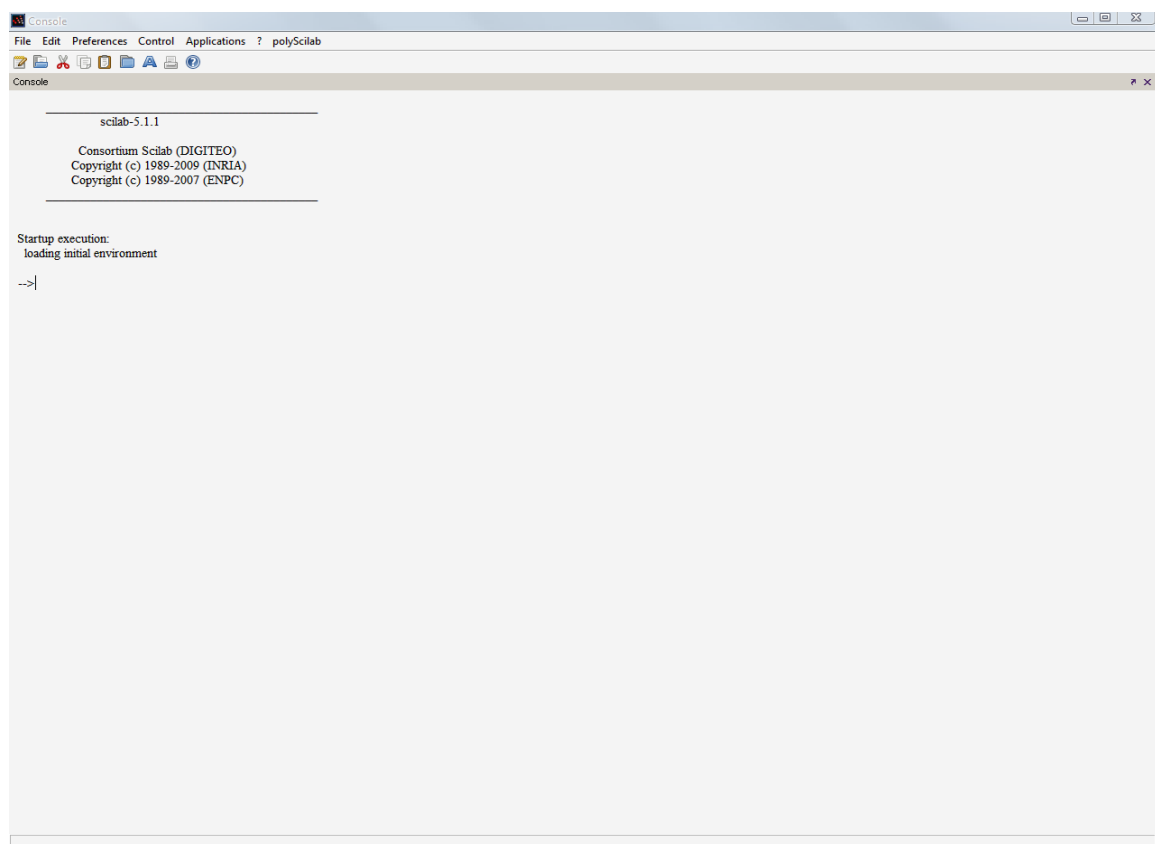
ANEXO E. Manual de usuario para los programas

Descargue los programas y déjelos en el escritorio, si no tiene instalado SCILAB descargue de la versión adecuada para su Sistema Operativo.

En nuestra herramienta puede encontrar la versión 5.1.1 de SCILAB para el sistema operativo de Microsoft Windows.

Después de la instalación busque el acceso directo en el escritorio o diríjase a la barra de tareas, Inicio, Todos los programas y busque el elemento SCILAB.

Cuando abra SCILAB se encontrará con la siguiente pantalla de trabajo.

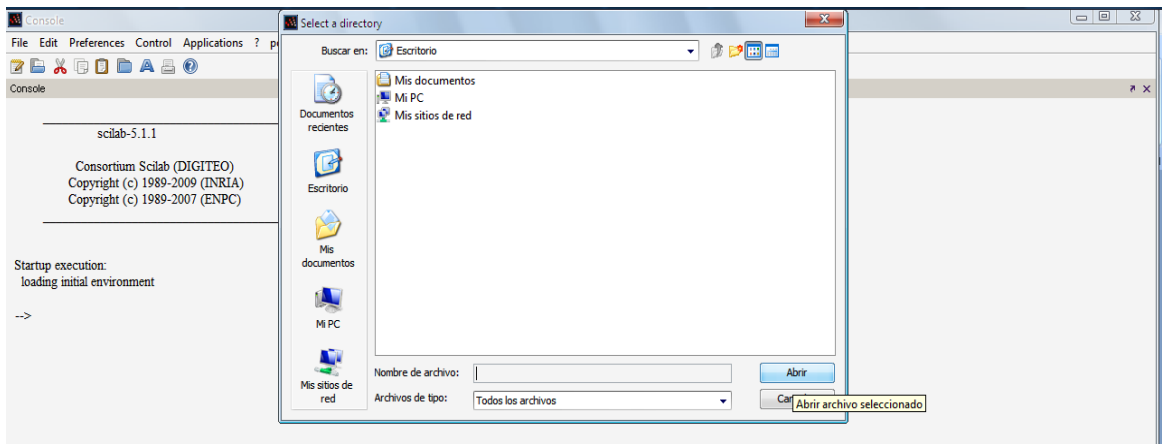
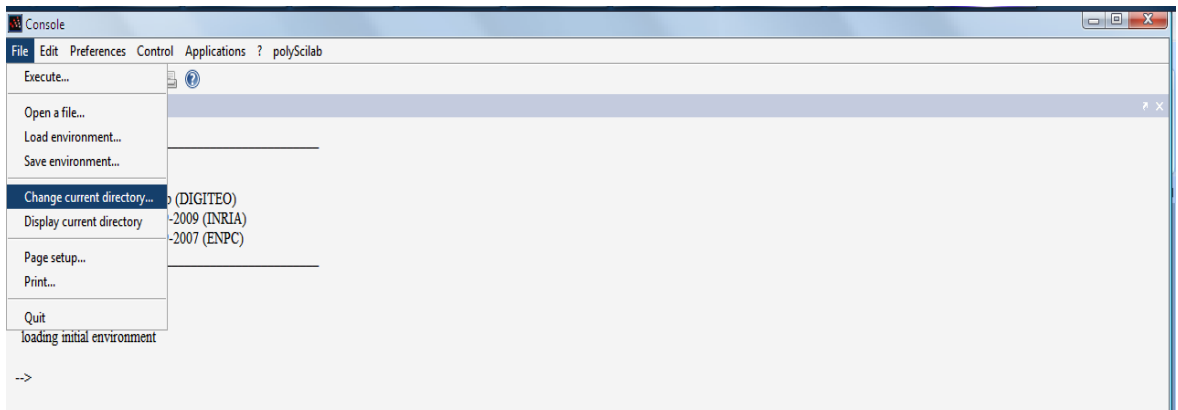


El símbolo --> significa que SCILAB es listo para recibir los comandos y ejecutarlos.

En el encabezado del programa encontrará el menú de opciones, entre ellas puede encontrar File, Edit, Preference, Control, Application y además la opción de Ayuda.

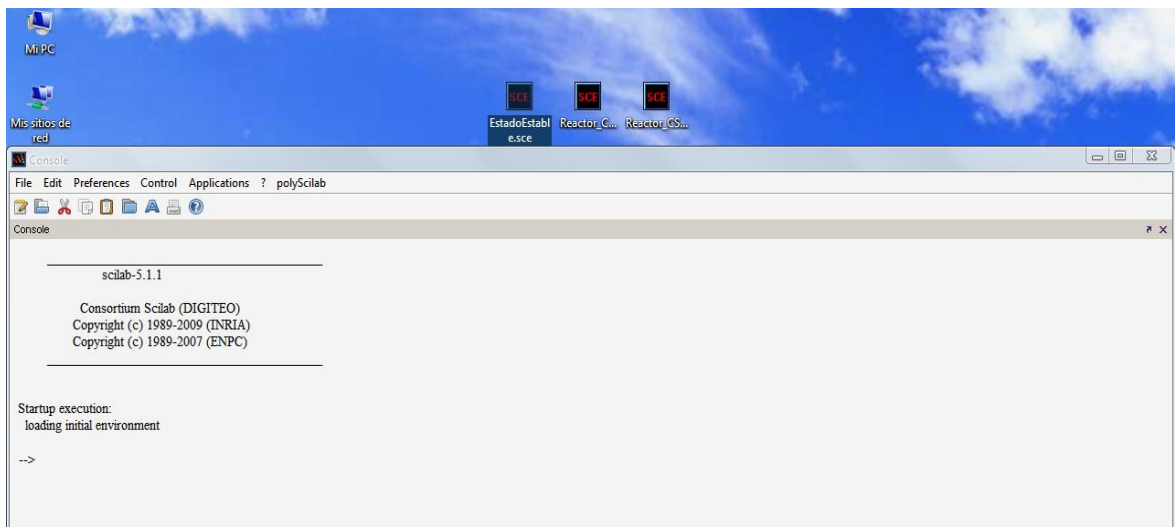


Para usar los programas se debe cargar el directorio donde usted guardó los archivos descargados, en este caso el Escritorio, esto lo puede hacer dirigiéndose al menú de opciones superior File → Change current directory y seleccione el Escritorio.

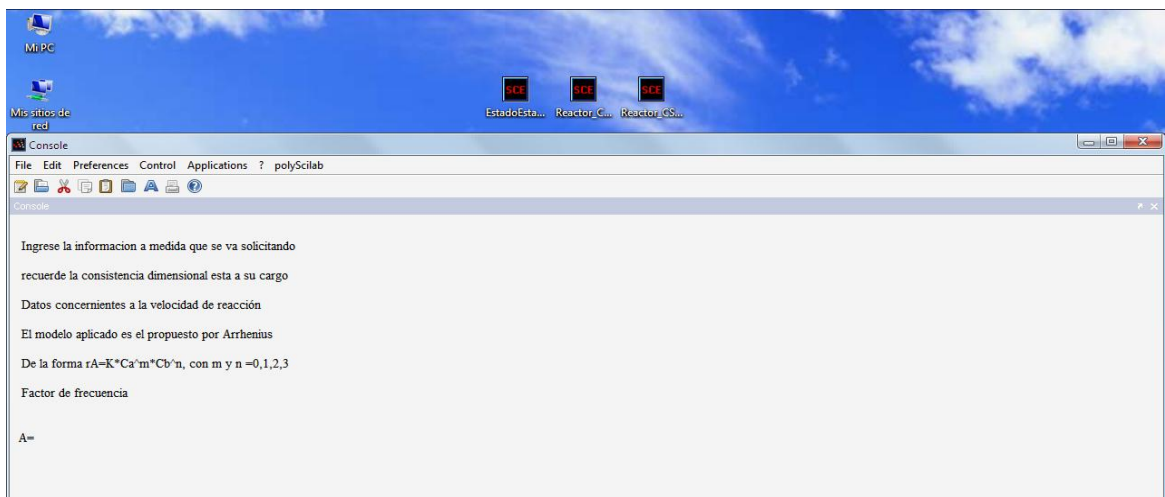


Al hacer el paso anterior, los programas están listos para ser ejecutados, para emprender esta tarea diríjase al escritorio seleccione el programa que quiere

ejecutar y arrástrelo hasta la pantalla de trabajo.



Una vez esto suceda, en la pantalla de trabajo de SCILAB comenzará a ejecutarse el programa y tendrá una vista igual a esta.

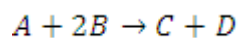


Cuando se ingresa un dato, mediante un enter, la pantalla de trabajo se limpia para solicitar otro y prestar además una indicación básica de cómo se debe introducir la información.

La cantidad de sustancias involucradas es indiferente para el programa, la única

condición es ingresar los coeficientes estequiométricos en forma de vector, conservando el mismo orden para el resto de información que se pide, explicándolo con un ejemplo:

Si la reacción sigue la siguiente ecuación:



Los coeficientes estequiométricos se ingresaran como: [-1 -2 1 1], si está presente un inerte recuerde que el coeficiente estequiométrico de este es cero.

Al final de la ejecución de los programas se presentan graficas que son relevantes en cada problema.