



Fecha de presentación 13/07/2020

1. RESUMEN

Se realizó la simulación del proceso de oxidación de SO_2 a SO_3 correspondiente a un reactor catalítico de lecho fijo utilizando V_2O_5 como catalizador; se plantearon balances molares y de energía, además, se implementaron algunos métodos como: regla de la palanca, línea de operación adiabática, curvas de isovelocidad al igual que el análisis cinético el cual permitió obtener la progresión óptima de temperatura. Los resultados obtenidos muestran que para este proceso de múltiples etapas la conversión máxima fue de 0.96. Para el desarrollo de algunas incógnitas se implementó el método numérico Newton Raphson al igual que el método de los trapecios para el desarrollo de las integrales numéricas.

2. INTRODUCCIÓN

El ácido sulfúrico H_2SO_4 es el compuesto químico que más se produce en todo el mundo, convirtiéndose en uno de los elementos más importantes en la industria. Sus principales aplicaciones son: Fertilizantes, Baterías de los automóviles, Limpiador de desagües, Refinería de petróleo, entre otros.

El precursor para la producción de H_2SO_4 es el SO_3 , el cual se obtiene de la oxidación de SO_2 en un reactor catalítico de lecho empacado que consta de cuatro etapas con Inter- enfriamientos, utilizando V_2O_5 como catalizador. Se trata de una reacción reversible y exotérmica en la que se necesitan altas presiones y bajas temperaturas para alcanzar altas conversiones.

Esta reacción consume oxígeno y produce calor. La reducción del oxígeno disponible y el aumento de temperatura del gas de proceso limitan la conversión. La cantidad de catalizador compensa la reducción de oxígeno a medida que la conversión avanza, además de que a través de anillos grande permite reducir la caída de presión y aumenta la capacidad de ensuciamiento, logrando un mayor tiempo entre cada tamizado del catalizador.

La temperatura del sistema es muy importante para poder obtener la conversión deseada, por lo que es necesario enfriar el gas que abandona la primera etapa para poder ingresar a la etapa siguiente y así sucesivamente hasta pasar por las cuatro etapas que conforman el sistema.

Una representación de la oxidación de SO_2 a SO_3 es la que se muestra en la figura 1, el cual consta de un reactor tubular, intercambiadores de calor y una torre de absorción garantizando la buena operatividad y máxima conversión del sistema.

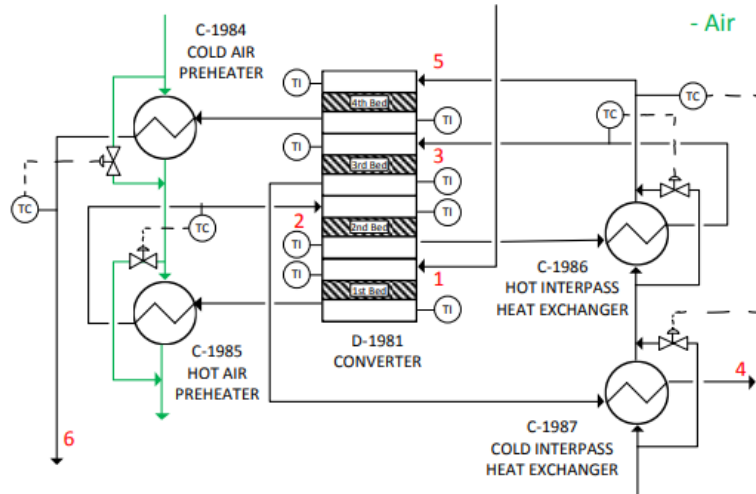
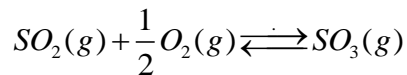


Figura 1. Sistema para la conversión de dióxido de azufre en trióxido de azufre (1)

3. ALGORITMO DE SOLUCIÓN

Se realiza el planteamiento de la reacción principal de oxidación del dióxido de azufre.



Para efectos prácticos se nombra al SO_2 , O_2 , SO_3 y N_2 (inerte) como A, B, C e I respectivamente.

3.1. TABLA ESTEQUIOMÉTRICA.

Considerando SO_2 como reactivo límite.

SUSTANCIA	Nio (t=0)	CAMBIO POR RXN	Ni (t→ ∞)
A	F_{Ao}	$-F_{Ao} X_A$	$F_{Ao} (1 - X_A) = F_A$
B	F_{Bo}	$-1/2 F_{Ao} X_A$	$F_{Ao} (\theta_B - 1/2 X_A) = F_B$
C	0	$F_{Ao} X_A$	$F_{Ao} X_A = F_C$
I	F_{Io}	0	$F_{Io} = F_I$
TOTAL	$F_{To} = F_{Ao} + F_{Bo} + F_{Io}$	$-1/2 F_{Ao} X_A$	$F_{Ao} (1 + \theta_B + \theta_I - 1/2 X_A) = F_T$

3.2. PROPIEDADES PARA CADA UNO DE LOS COMPONENTES.

3.2.1. SUSTANCIAS PURAS

Para el cálculo de las energías libres de Gibbs y de las entalpías se emplearon los valores correspondientes a las ecuaciones tomadas de libro *handbook of thermodynamic properties* de Yaws (2), las cuales se muestran a continuación:

Tabla 1. Entalpías de formación para cada componente.

Sustancia	ΔH_f° (KJ/mol)
SO ₂	-296.8
O ₂	0
SO ₃	-395.7
N ₂	0

Tabla 2. Constantes de capacidades caloríficas para cada componente.

$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$ (J / mol.K)					
Sustancia	A	B	C	D	E
SO ₂	29.637	0.034735	$9.2903 \cdot 10^{-6}$	$-2.9885 \cdot 10^{-8}$	$1.0937 \cdot 10^{-11}$
O ₂	29.526	$-8.8999 \cdot 10^{-3}$	$3.8083 \cdot 10^{-5}$	$-3.2629 \cdot 10^{-8}$	$8.8607 \cdot 10^{-12}$
SO ₃	22.466	0.11981	$-9.0842 \cdot 10^{-5}$	$2.5503 \cdot 10^{-8}$	$-7.9208 \cdot 10^{-13}$
N ₂	29.342	$-3.5395 \cdot 10^{-3}$	$1.0076 \cdot 10^{-5}$	$-4.3116 \cdot 10^{-9}$	$2.5935 \cdot 10^{-13}$

Tabla 3. Constantes de viscosidad para cada componente.

$\mu_{gas} = A + BT + CT^2$ (μP)			
Sustancia	A	B	C
SO ₂	-11.103	0.502	$-1.08 \cdot 10^{-4}$
O ₂	44.224	0.562	$-1.13 \cdot 10^{-4}$
SO ₃	-12.039	0.543	$-1.6 \cdot 10^{-4}$
N ₂	42.606	0.475	$-9.88 \cdot 10^{-5}$

Tabla 4. Propiedades a condiciones críticas para cada componente.

SUSTANCIA	Tc (K)	Pc (bar)	ω
SO ₂	430.75	77.809	0.245
O ₂	154.58	49.7705	0.022
SO ₃	490.85	80.9968	0.422
N ₂	126.1	33.4961	0.04

3.2.2. PROPIEDADES DE MEZCLA

Viscosidad

Para el cálculo de la viscosidad de mezcla se tiene en cuenta el método de Wilke presentado en el libro properties of gases and liquids de Prausnitz.(3) el cual se encuentra descrito por la siguiente ecuación.

$$\mu_{mix} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \mu_i}{\sum_j y_j \phi_{ij}} \quad \text{Ec.1}$$

Siendo:

y_i = Composición de cada componente

μ_i = Viscosidad de cada componente

ϕ_{ij} = Parámetro de interacción binario para cada para cada par de compuestos.

Pm_i = Pesos moleculares de cada componente

Además, el parámetro ϕ_{ij} se encuentra descrito por la siguiente expresión:

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{Pm_j}{Pm_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{Pm_i}{Pm_j} \right) \right]^{\frac{1}{2}}}$$

Haciendo uso de la ecuación 7, la ecuación resultante para el sistema es:

$$\mu_{mix} = \frac{y_A \mu_A}{y_A + y_B \phi_{AB} + y_C \phi_{AC} + y_D \phi_{AD}} + \frac{y_B \mu_B}{y_B + y_A \phi_{BA} + y_C \phi_{BC} + y_D \phi_{BD}} + \frac{y_C \mu_C}{y_C + y_A \phi_{CA} + y_B \phi_{CB} + y_D \phi_{CD}} + \frac{y_D \mu_D}{y_D + y_A \phi_{DA} + y_B \phi_{DB} + y_C \phi_{DC}} \quad \text{Ec.2}$$

Densidad

Para determinar la densidad de mezcla es empleada la ecuación de gases de ideales.

$$\rho_{mix} = \frac{P}{Pm_{mix} RT} \quad \text{Ec.3}$$

3.3 ANÁLISIS TERMODINÁMICO

Para el cálculo de la entalpía de reacción haciendo la corrección por temperatura y presión se hará uso de la ecuación 4, la cual se encuentra deducida en el anexo 1 del documento.

$$\Delta H_{rxn}(T, P) = \Delta H_{rxn}(T, P_o) + \sum_{i=1}^q \nu_i \left\{ RT(Z-1) + \frac{T(da/dT) - a}{2\sqrt{2}b} * \ln \left(\frac{Z + (1 + \sqrt{2})B}{Z + (1 - \sqrt{2})B} \right) \right\} \quad \text{Ec.4}$$

Los parámetros correspondientes a la ecuación 4 se muestran en la sección 1.3 del anexo 1.

3.4. CINÉTICA DE LA REACCIÓN.

Para la ley de velocidad se utilizará la expresión que se encuentra reportada en el artículo *Simulation of an industrial adiabatic multi-bed catalytic reactor for sulfur dioxide oxidation using the Maxwell–Stefan model* de los autores Miguel-Ángel Gómez-García a, Izabela Dobrosz-Gómez, Edison GilPavas , Jacek Rynkowski (4)

Nota: En el artículo *Modeling and simulation of a catalytic reactor for the oxidation of SO₂ to SO₃, using V₂O₅ as catalyst* de Bolaño P. Leda (5), detallan dos velocidades de reacción, pero la segunda que es para un intervalo de temperatura se indetermina cuando la concentración inicial del producto es cero, se tomó la decisión de solo trabajar con la velocidad de reacción que se reporta en el artículo del autor Gomez G. Miguel Á.(4), que a su vez se reporta en el otro artículo, es decir, solo trabajar con una velocidad de reacción.

$$r_{so_2} = - \frac{K_1 P_B P_A \left(1 - \frac{P_C}{Kp P_A P_B^{0.5}} \right)}{22.414 (1 + K_2 P_A + K_3 P_C)^2} \quad \text{Ec.5}$$

Siendo

$$K_1 = \exp(12.160 - 5473/T)$$

$$K_3 = \exp(-71.745 + 52596/T)$$

$$K_2 = \exp(-9.953 + 8619/T)$$

$$Kp = \exp(11300/T - 10.68)$$

Dejando la ecuación de la ley de velocidad, es decir la ecuación 5 en términos de la presión total y los flujos molares se obtiene:

$$r_{so_2} = - \frac{k_1 (P^*(F_B / F_T)) (P^*(F_A / F_T)) \left(1 - \frac{(P^*(F_C / F_T))}{kp (P^*(F_A / F_T)) (P^*(F_B / F_T))^{0.5}} \right)}{22.414 (1 + K_2 (P^*(F_A / F_T)) + K_3 (P^*(F_C / F_T)))} \quad \text{Ec.6}$$

3.5. BALANCE MOLAR

Para la realización del balance molar se empleará la ecuación 7, la cual se deduce en el anexo 1.

$$\frac{dF_i}{dw} = - \frac{k_1 (P^*(F_B / F_T)) (P^*(F_A / F_T)) \left(1 - \frac{(P^*(F_C / F_T))}{kp (P^*(F_A / F_T)) (P^*(F_B / F_T))^{0.5}} \right)}{22.414 (1 + K_2 (P^*(F_A / F_T)) + K_3 (P^*(F_C / F_T)))} \quad \text{Ec. 7}$$

3.6. BALANCE DE ENERGÍA

Para la realización del balance de energía se empleará la ecuación 8, la cual se deduce en el anexo 1.

$$\frac{dT}{dW} = \frac{r_{SO_2}(X, T) H_{rxn}}{F_{Ao} (1 - X_A) C_{pA} - F_{Ao} (\theta_B - 1 / 2 X_A) C_{pB} + F_{Ao} X_A C_{pC} + F_{Ao} \theta_I C_{pI}} \quad \text{Ec. 8}$$

3.7. CURVAS DE ISOVELOCIDAD

Para el cálculo de las curvas de isovelocidad, se tiene en cuenta el algoritmo de cálculo mostrado en el libro *ELEMENTOS PARA EL ANÁLISIS Y DISEÑO DE REACTORES QUÍMICOS* de Miguel Ángel Gómez García (6), el cual se presenta en la Figura 2.

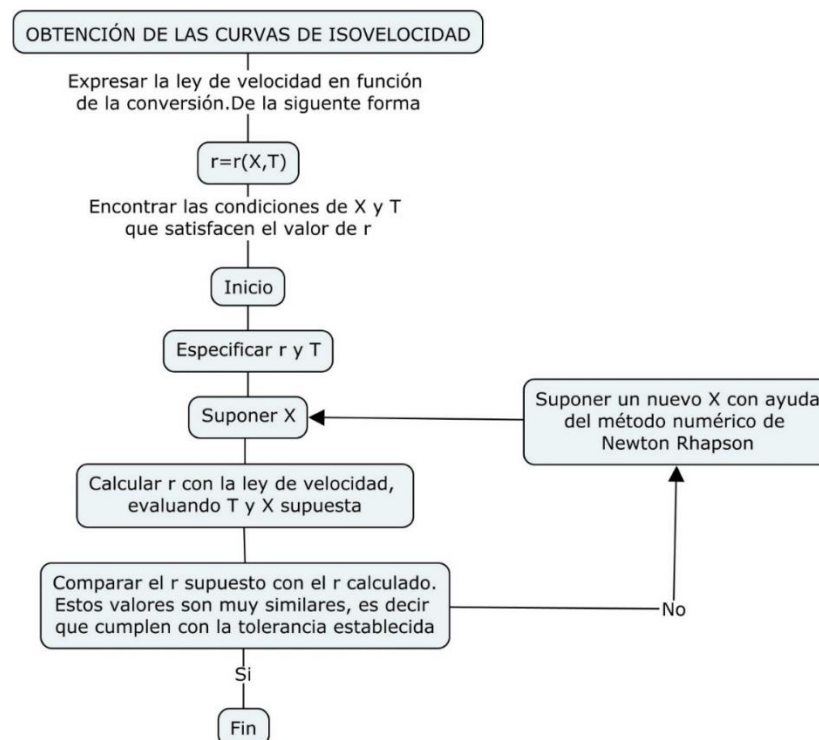


Figura 2. Algoritmo de cálculo para la realización de las curvas de isovelocidad

Una vez se obtienen las curvas de isovelocidad para cada una de las leyes de velocidad pertinentes se traza la progresión óptima de temperatura (POT), la cual cruza por cada uno de los puntos máximos de dichas curvas.

3.8. LÍNEA DE OPERACIÓN ADIABÁTICA.

Para la realización de las líneas de operación adiabáticas, se empleará la ecuación 9, la cual se deduce en el anexo 1.

$$X_{A,BE} = \frac{\sum \theta_i C_{p_i}}{(-H_{rxn})} T - \frac{\sum \theta_i C_{p_i} (T_{io})}{(-H_{rxn})} \quad \text{Ec. 9}$$

Como son conocidas las propiedades del calor de reacción, capacidad calorífica, temperatura de alimento y coeficientes estequiométricos para cada una de las sustancias involucradas, se da un rango de temperaturas (623~1073 K) tomando como base los datos proporcionados por el artículo, obteniendo así diferentes pares de datos conversión-temperatura.

Además, se grafican estos pares de datos hasta el corte obtenido de la progresión óptima de temperatura (POT) realizado en la sección 3.7.

3.9. REGLA DE LA PALANCA

Una vez se obtiene la línea de operación adiabática la cual corta con la POT, se calcula el área bajo la curva empleando el método de los trapecios.

Para este método se aproxima el área bajo una línea que une dos puntos de interés los cuales corresponden al valor máximo y mínimo de la integral, en ese caso se parte desde un punto a (Temperatura de alimentación) hasta un punto s (corte con la POT).

Posteriormente con las parejas de datos Conversión-Temperatura obtenidas de la línea de operación adiabática se evalúa la ley de velocidad (r_A), luego se determina el inverso de la misma ($1/r_A$); con estos datos se calcula la integral numérica con la siguiente ecuación:

$$\int_a^s \frac{d}{dT} \frac{1}{-r_A} dX_A = h \left(\frac{1}{-r_A|_{X_{A1}}} - \frac{1}{-r_A|_{X_{A2}}} \right) + h \left(\frac{1}{-r_A|_{X_{An-1}}} - \frac{1}{-r_A|_{X_{An}}} \right) \quad \text{Ec. 10}$$

Donde h corresponde a la altura del trapecio la cual se encuentra descrita por: $h = (s - a) / n$

Siendo n el número de valores correspondientes para la función en el intervalo $a-s$.

Luego como la pendiente de la línea de operación adiabática es conocida se extrapola dicha línea dando valores de temperatura hasta un valor posterior para el cual se calcula de igual manera la integral en el intervalo $s-b$ verificando que dicho valor sea aproximado al de la integral del intervalo $a-s$.

3.10 DETERMINACIÓN DE LA TEMPERATURA FINAL DE ENFRIAMIENTO.

Determinado el punto b se calcula el valor de la velocidad de reacción correspondiente, a su vez se hace uso del valor de conversión del extremo b obteniendo un sistema de 1 ecuación con 1 incógnita que en este caso sería la temperatura de enfriamiento, luego se procede a solucionar el sistema haciendo uso del método numérico Newton Raphson realizado en el software Matlab[®]

Para la realización de cada una de las etapas siguientes se continua con el mismo procedimiento descrito anteriormente.

Nota: Como en el comienzo se tuvieron problemas con los datos para la simulación ya que no se tenían valores de flujo, propiedades del catalizador y composiciones de entrada al reactor se usaron los datos obtenidos del artículo *Simulation of an industrial adiabatic multi-bed catalytic reactor for sulfur dioxide oxidation using the Maxwell–Stefan model* de Gomez G. Miguel Á (4).

Aunque la temperatura de entrada en el sistema utilizada si corresponde al valor reportado en el artículo simulado (5).

4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

- **Balance Molar y de energía.**

Al realizar el balance molar y de energía para el sistema con respecto a la masa del catalizador se obtuvo la *Figura 3*, en la cual se observó que a medida que aumentaba la masa del catalizador tanto la conversión como la temperatura aumentaban, alcanzando valores máximos de 0.7424 y 875.4108 K respectivamente.

Además, por ser una reacción exotérmica y a su vez reversible los resultados obtenidos cumplen el comportamiento real del sistema.

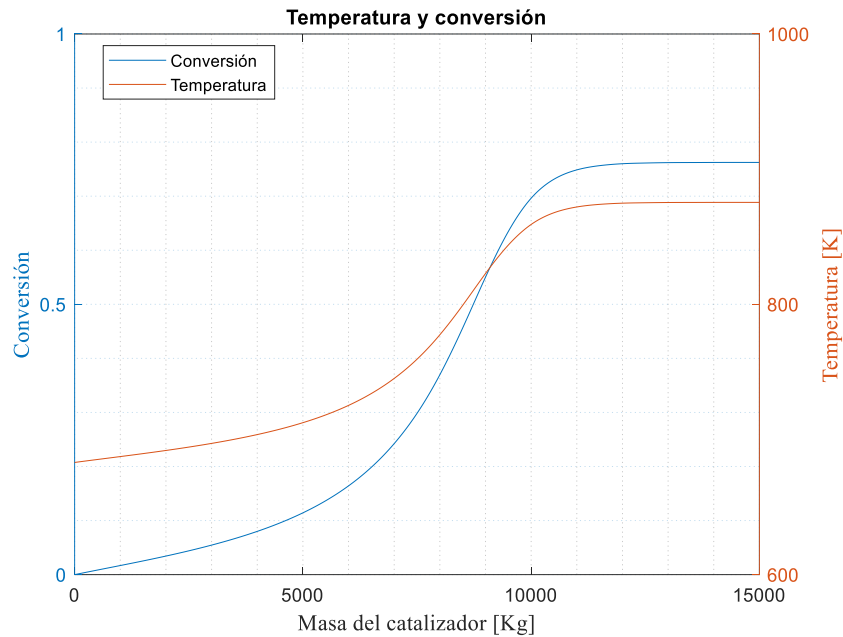


Figura 3. Perfiles de Temperatura y conversión.

- **Variación de los flujos molares**

En la figura 4 se puede observar la variación de los flujos con respecto a la masa del catalizador, en la cual tanto el SO_2 como el O_2 disminuyen, mientras que el SO_3 al ser un producto aumenta hasta el punto en que su variación es tan mínima que se vuelven constante en aproximadamente 12000 Kg de catalizador, alcanzando así la estabilidad del sistema.

Además, dicha figura nos permite confirmar que, para que el proceso fuera óptimo y obtuviera su máxima conversión, era necesario ir modificando la temperatura de alimento en cada una de las etapas del reactor haciendo uso de intercambiadores de calor que permitieran hacer enfriamientos a conversión constante, para tener un mayor control del sistema y así poder alcanzar la mayor conversión posible.

A continuación, se presentarán los resultados obtenidos de conversión y temperaturas, de la entrada y de la salida para cada una de las etapas.

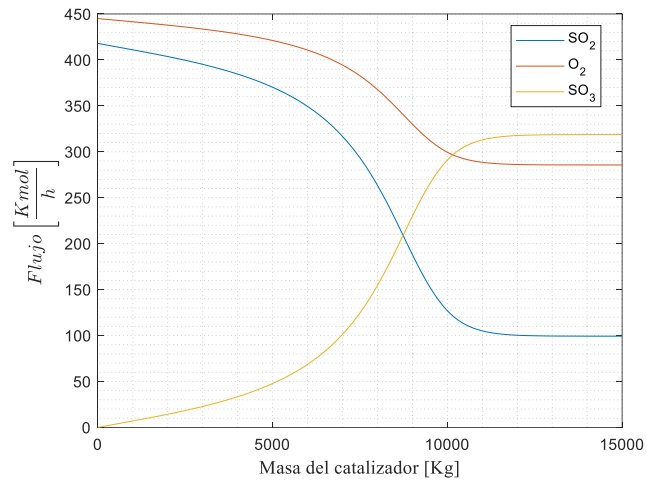


Figura 4. Variación de los flujos molares con respecto a la masa del catalizador.

- **POT y Curvas de isovelocidad**

Al darle valores a las leyes de velocidad se obtuvieron los perfiles de la *figura 5* y al tomar los valores máximos de los mismos se obtuvo la progresión óptima de temperatura, la cual nos permitió observar la naturaleza del comportamiento de la velocidad de reacción, temperatura y conversión del sistema, además, de determinar la región de operación óptima del reactor.

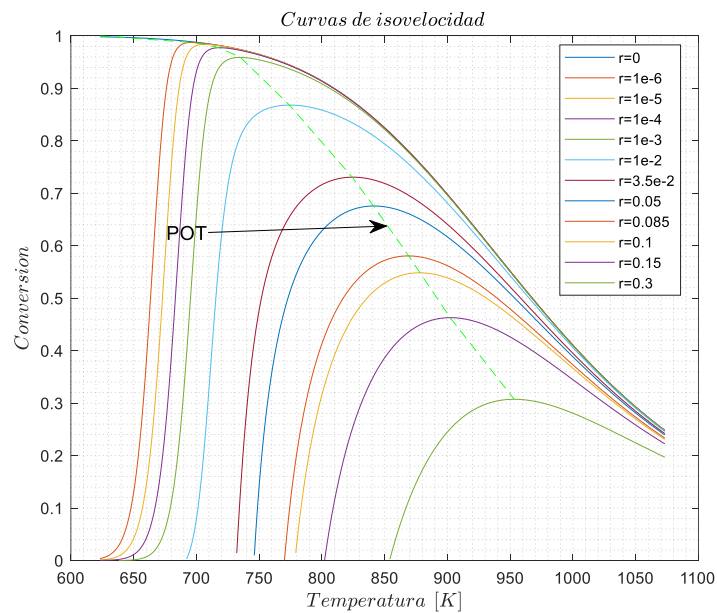


Figura 5. Curvas de isovelocidad.

- **Línea de operación adiabática y etapas de reacción**

Como se aprecia en la *Figura 6* la línea de operación adiabática nos permitió definir la trayectoria de cambio de la temperatura y conversión dentro del reactor catalítico a medida que progresaba la reacción.

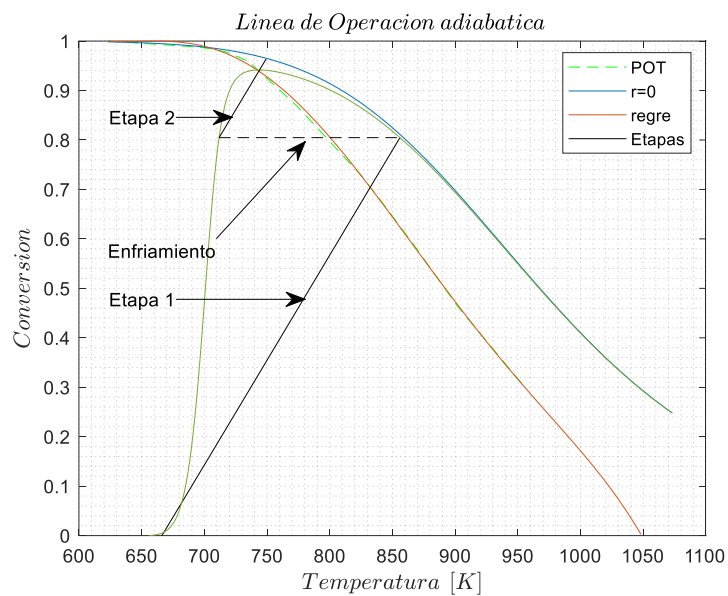


Figura 6. Etapas de reacción del proceso de oxidación de dióxido de azufre.

Tabla 5. Datos obtenidos para cada una de las etapas del reactor.

Etapa	Temperatura Entrada (K)	Temperatura Salida (K)	Conversión
1	666.15	855.9754	0.8046
2	711.7492	749.2557	0.9637

5. CONCLUSIONES

- Se realizó la simulación del artículo *Modelamiento y simulación de un reactor catalítico para la oxidación de SO_2 a SO_3 , utilizando V_2O_5 como catalizador*, conociendo un poco más acerca del proceso de oxidación de SO_2 a SO_3 y de las implicaciones que tiene el mismo para obtener un adecuado funcionamiento.
- A medida que se modifique la temperatura de alimento en la primera etapa, se modificara el número de etapas y a su vez la conversión a la salida de la etapa final.
- Como la ley de velocidad está limitada por la temperatura es necesario realizar enfriamientos entre cada etapa, para poder alcanzar la mayor conversión del sistema.
- La línea de progresión óptima de temperatura nos permitió determinar el rango óptimo de operación del proceso.

- Se realizó el análisis de una sola etapa para saber si la conversión máxima obtenida es la indicada para el proceso y a su vez se comparó con el análisis del proceso en varias etapas verificando que el comportamiento de este último es el más eficiente.

6. BIBLIOGRAFÍA

1. -chile V. UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARÍA DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AMBIENTAL. 2016.
2. (PDF) Handbook of Thermodynamic Diagrams, Volume | Maestria Metalurgia - Academia.edu [Internet]. [cited 2020 Jul 12]. Available from: https://www.academia.edu/22660465/Handbook_of_Thermodynamic_Diagrams_Volume
3. Hdz T. The Properties of Gases & Liquids, 4th Edition (R. C. Reid, J. M. Prausnitz & B. E. Poling) [Internet]. [cited 2020 Jul 12]. Available from: https://www.academia.edu/33161453/The_Properties_of_Gases_and_Liquids_4th_Edition_R._C._Reid_J._M._Prausnitz_and_B._E._Poling_
4. Gómez-García MÁ, Dobrosz-Gómez I, GilPavas E, Rynkowski J. Simulation of an industrial adiabatic multi-bed catalytic reactor for sulfur dioxide oxidation using the Maxwell–Stefan model. Chem Eng J. 2015 Dec 15;282:101–7.
5. Pernett Bolaño LDC, Ochoa Martínez IA, Robledo Barrios ME, Rueda Durán CA. Modelamiento y simulación de un reactor catalítico para la oxidación de SO₂ a SO₃, utilizando V₂O₅ como catalizador. Prospectiva [Internet]. 2016 Feb 26 [cited 2020 Jul 12];14(1):39. Available from: <http://dx.doi.org/10.15665/rp.v14i1.647>
6. Garcia MAG, Alzate JF, Viana WO. Elementos para el análisis y diseño de reactores químicos. 2012. 8 p.

ANEXO 1

1. ANÁLISIS TERMODINÁMICO

1.1.CÁLCULO DE $\Delta H^{\circ}rxn$

Para el cálculo de la entalpia estándar de reacción se tendrán en cuenta los parámetros establecidos en la tabla 1.

$$\Delta H^{\circ}rxn \left[\frac{KJ}{Kmol_{SO_2}} \right] = [(\Delta H^{\circ}f_{SO_3}) - (\Delta H^{\circ}f_{SO_2})] \quad Ec.1$$

1.2.CORRECCIÓN POR TEMPERATURA

Para la corrección por temperatura de ΔH_{rxn} , deben ser considerados los parámetros establecidos en la tabla 2, además se tiene en cuenta las siguientes ecuaciones.

$$\Delta H_{rxn}(T, P_o) = \Delta H^{\circ}rxn + \int_{T_o}^T \Delta C_p^{\circ} dT \quad Ec.2$$

$$C_p \left[\frac{KJ}{Kmol * K} \right] = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 \quad Ec.3$$

$$\Delta C_p^{\circ} = \sum_{i=1}^q \nu_i * C_{p_i} \quad Ec.4$$

Reemplazando las ecuaciones 1 y 4 en 3 se obtiene:

$$\Delta H_{rxn}(T, P_o) = [(\Delta H^{\circ}f_{SO_3}) - (\Delta H^{\circ}f_{SO_2})] + \int_{T_o}^T \sum_{i=1}^q \nu_i * C_{p_i} dT \quad Ec.5$$

1.3.CORRECCIÓN POR PRESIÓN

Para la corrección por presión de ΔH_{rxn} , se tiene en cuenta las siguientes ecuaciones.

$$\Delta H_{rxn}(T, P) = \Delta H_{rxn}(T, P_o) + \sum_{i=1}^q \nu_i \left\{ RT(Z-1) + \frac{T(da/dT) - a}{2\sqrt{2}b} * \ln \left(\frac{Z + (1 + \sqrt{2})B}{Z + (1 - \sqrt{2})B} \right) \right\} \quad Ec.6$$

Los parámetros correspondientes a la ecuación 6 se muestran a continuación:

$$a = 0.45724 \frac{R^2 T^2}{P_c}$$

$$\alpha = \left(1 + k \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{1}{2}} \right)^2$$

$$ar = a\alpha \quad B = \frac{bP}{RT}$$

$$b = \frac{0.0778(RT_c)}{P_c}$$

$$A = \frac{ar.P}{R^2 T^2}$$

$$Z^3 - (1-B)Z^2 + (A-3B^2-2B)Z - (AB-B^2-B^3) = 0$$

2. BALANCE MOLAR

Inicialmente se plantea el balance general para el reactor

$$E + G = S + A \quad \text{Ec. 7}$$

Dejando la ecuación 7 en términos de flujos y considerando el sistema en estado estable, se obtiene:

$$(F_i)_w + r_i \Delta w = (F_i)_{w+\Delta w} \quad \text{Ec. 8}$$

Dividiendo la ecuación 8 por Δw y reorganizando un poco se obtiene:

$$\lim_{\Delta w \rightarrow 0} \left(\frac{(F_i)_{w+\Delta w} - (F_i)_w}{\Delta w} \right) = r_i$$

Y por definición el límite anterior equivale a la derivada de flujo molar con respecto a la masa de catalizador como se muestra en la ecuación 9.

$$\frac{dF_i}{dw} = r_i \quad \text{Ec. 9}$$

Reemplazando la ley de velocidad, es decir la ecuación 5 del documento en la ecuación 9, se obtiene la ecuación final para el balance molar:

$$\frac{dF_i}{dw} = - \frac{k_1 \left(P \frac{FB}{FT} \right) \left(P \frac{FA}{FT} \right) \left(1 - \frac{\left(P \frac{FC}{FT} \right)}{kp \left(P \frac{FA}{FT} \right) \left(P \frac{FB}{FT} \right)^{0.5}} \right)}{22.414 \left(1 + K_2 \left(P \frac{FA}{FT} \right) + K_3 \left(P \frac{FC}{FT} \right) \right)} \quad \text{Ec. 10}$$

3. BALANCE DE ENERGÍA

Inicialmente se plantea el balance general para el reactor

$$E + G = S + A$$

Considerando que no se está generando nada y que tampoco se tiene algún tipo de acumulación con el tiempo el balance queda:

$$E - S = 0$$

$$\dot{E}_{in} - \dot{E}_{out} = 0 \quad \text{Ec. 11}$$

Como se muestra en la Ecuación 11, el flujo de energía lo puedo describir de la siguiente manera:

$$\dot{E} = \dot{Q} + \dot{W} + FE \quad \text{Ec. 12}$$

De la ecuación 12 se sabe que el flujo de trabajo se encuentra descrito tanto por un trabajo de eje como por un flujo de trabajo que se encuentra relacionado con la presión que ejerce el fluido al ingresar al sistema como se muestra a continuación:

$$\dot{W} = \dot{w}_{eje} + FP\bar{V} \quad \text{Ec. 13}$$

El flujo de energía también se encuentra conformado por diferentes tipos de energía como lo son la energía interna, cinética y potencial como se muestra en la ecuación 14

$$E = U + K + P \quad \text{Ec. 14}$$

De las ecuaciones 13 y 14 se pueden despreciar tanto el trabajo de eje como las energías cinética y potencial ya que el valor de estas es insignificante.

Ahora teniendo en cuenta estas consideraciones y remplazando las ecuaciones 13 y 14 en la ecuación 12 y posteriormente en la ecuación 11 se tiene que:

$$\dot{E} = \dot{Q} + FP\bar{V} + FEU \quad \text{Ec. 15}$$

$$\dot{Q}_{in} + F_{in}P_{in}\bar{V}_{in} + F_{in}U_{in} - (\dot{Q}_{out} + F_{out}P_{out}\bar{V}_{out} + F_{out}U_{out}) = 0 \quad \text{Ec. 16}$$

Considerando que no hay flujo de calor a la entrada del sistema y reorganizando la ecuación 16:

$$F_{in}(P_{in}\bar{V}_{in} + U_{in}) - (\dot{Q}_{out} + F_{out}P_{out}\bar{V}_{out} + F_{out}U_{out}) = 0$$

$$F_{in}(P_{in}\bar{V}_{in} + U_{in}) - \dot{Q}_{out} - F_{out}(P_{out}\bar{V}_{out} + U_{out}) = 0 \quad \text{Ec. 17}$$

Luego por definición de entalpia (PV+U) se obtiene la siguiente expresión:

$$F_{in}H_{in} - \dot{Q}_{out} - F_{out}H_{out} = 0 \quad \text{Ec. 18}$$

Ahora continuando con el balance y considerando la presencia del catalizador en el lecho.

$$F_w H_w - \Delta \dot{Q}_{\Delta A} - F_{w+\Delta w} H_{w+\Delta w} = 0 \quad \text{Ec. 19}$$

Sabiendo que el delta de calor se encuentra descrito por:

$$\Delta \dot{Q} = U \Delta A (T - T_a) \quad \text{Ec. 20}$$

y que existe un factor alpha el cual permite tener una relación entre el área y la masa de catalizador como se muestra en la ecuación 21

$$\alpha = \frac{\Delta A}{\Delta W} \quad \text{Ec. 21}$$

$$\Delta A = \Delta W \alpha \quad \text{Ec. 22}$$

Reemplazando la ecuación 22 en la ecuación 20 y está en la ecuación 19

$$\Delta \dot{Q} = U \Delta W \alpha (T - T_a) \quad \text{Ec. 23}$$

$$F_w H_w - U \Delta W \alpha (T - T_a) - F_{w+\Delta w} H_{w+\Delta w} = 0 \quad \text{Ec. 24}$$

Agrupando términos y aplicando el límite

$$\lim_{\Delta W \rightarrow 0} \frac{F_{w+\Delta W} H_{w+\Delta W} - F_w H_w}{\Delta W} = -U \alpha (T - T_a) \quad \text{Ec. 25}$$

De la ecuación 25 se sabe que esta definición corresponde a la derivada, por lo tanto

$$\frac{dFH}{dW} = -U \alpha (T - T_a) \quad \text{Ec. 26}$$

Como: $\frac{dFH}{dW} = F \frac{dH}{dW} + H \frac{dF}{dW}$

Y teniendo en cuenta que del balance molar ya se tienen una expresión que modela el comportamiento de $\frac{dF}{dW}$ (Ecuación 9) entonces se tiene:

$$\frac{dFH}{dW} = F \frac{dH}{dW} + H r_A \quad \text{Ec. 27}$$

Continuando, por definición el cambio de la entalpia corresponde a: $dH = Cp dT$ y reemplazando esta expresión y la ecuación 26 en la ecuación 27 se llega a:

$$-U \alpha (T - T_a) = F \frac{Cp dT}{dW} + H r_A \quad \text{Ec. 28}$$

Ahora despejando el cambio de la temperatura con respecto a la masa de catalizador y teniendo en cuenta la definición de entalpia de reacción:

$$\frac{dT}{dW} = \frac{-U \alpha (T - T_a) - H r_A}{\sum F_i Cp_i} \quad \text{Ec. 29}$$

$$\frac{dT}{dW} = \frac{-U \alpha (T - T_a) + r_A H_{rxn}}{\sum F_i Cp_i} \quad \text{Ec. 30}$$

Como se conoce que la ley de velocidad es con respecto al dióxido de azufre (SO₂) y haciendo uso de la tabla estequiométrica para reemplazar cada uno de los flujos se llega a:

$$\frac{dT}{dW} = \frac{-U \alpha (T - T_a) + r_{SO_2} H_{rxn}}{F_{Ao} (1 - X_A) Cp_A - F_{Ao} (\theta_B - 1/2 X_A) Cp_B + F_{Ao} X_A Cp_C + F_{Ao} \theta_I Cp_I} \quad \text{Ec. 31}$$

Considerando el sistema adiabático

Al considera que el sistema es adiabático el flujo de calor se vuelve cero por lo tanto la expresión de la ecuación 31 queda:

$$\frac{dT}{dW} = \frac{r_{SO_2}(X, T)H_{rxn}}{F_{Ao}(1 - X_A)Cp_A - F_{Ao}(\theta_B - 1/2X_A)Cp_B + F_{Ao}X_A Cp_C + F_{Ao}\theta_I Cp_I} \quad \text{Ec. 32}$$

4. LÍNEA DE OPERACIÓN ADIABÁTICA

Para la realización del diagrama correspondiente a las etapas de reacción se tuvieron en cuenta los siguientes pasos:

1. Se parte del balance de energía realizado en la sección 3 teniendo en cuenta la ecuación 18.

$$F_{in}H_{in} - \dot{Q}_{out} - F_{out}H_{out} = 0$$

Ahora considerando que es un sistema que opera adiabáticamente ($\dot{Q}_{out} = 0$) y que los flujos descritos en la ecuación anterior son flujos totales como se describe a continuación:

$$F = \sum F_i \quad H = \sum H_i$$

Se reemplazan estas consideraciones en dicha Ecuación

$$\sum F_{io}H_{io} - \sum F_iH_i = 0 \quad \text{Ec. 33}$$

Posteriormente expandiendo las sumatorias para cada una de las sustancias involucradas en la reacción se llega a:

$$F_{Ao}H_{Ao} + F_{Bo}H_{Bo} + F_{Co}H_{Co} + F_{Io}H_{Io} - (F_AH_A + F_BH_B + F_CH_C + F_IH_I) = 0 \quad \text{Ec. 34}$$

Ahora teniendo en cuenta las relaciones de alimento y la estequiometría:

$$F_{Ao}\theta_A H_{Ao} + F_{Bo}\theta_B H_{Bo} + F_{Co}\theta_C H_{Co} + F_{Io}\theta_I H_{Io} - F_{Ao}\left(\theta_{Ao} + \frac{vA}{|vA|}X\right)H_A -$$

$$F_{Ao}\left(\theta_B + \frac{vB}{|vA|}X\right)H_B - F_{Ao}\left(\theta_C + \frac{vC}{|vA|}X\right)H_C - F_{Ao}\left(\theta_I + \frac{vI}{|vA|}X\right)H_I = 0 \quad \text{Ec. 35}$$

Agrupando los términos de la ecuación 35 se obtiene la siguiente expresión:

$$F_{Ao}\sum \theta_i H_{io} - F_{Ao}\sum \theta_i H_i - F_{Ao}\sum \frac{v_i}{|v_A|}XH_i = 0 \quad \text{Ec. 36}$$

Reorganizando un poco la expresión anterior y conociendo la definición del calor de reacción se llega a:

$$F_{Ao}\sum \theta_i (H_{io} - H_i) - X_A F_{Ao}H_{rxn} = 0 \quad \text{Ec. 37}$$

Luego desglosando un poco el término $\sum \theta_i (H_{io} - H_i)$ de la ecuación 37 se tiene:

$$\sum \theta_i (H_{io} - H_i) = \sum \theta_i \left(Hf_i^\circ + \int_{T^\circ}^{T_{io}} Cp_i dT - Hf_i^\circ + \int_{T^\circ}^T Cp_i dT \right)$$

En donde por propiedades de las integrales, cambiando los límites de integración y considerando que la capacidad calorífica es constante la expresión generada es:

$$\sum \theta_i (H_{io} - H_i) = \sum \theta_i Cp_i (T_{io} - T) \quad \text{Ec. 38}$$

Finalmente reemplazando la ecuación 38 en la ecuación 37 se obtiene la siguiente expresión:

$$F_{Ao} \sum \theta_i Cp_i (T_{io} - T) - X_A F_{Ao} H_{rxn} = 0 \quad \text{Ec. 39}$$

2. De la Ecuación 39 es despejada la conversión (Ecuación 40), y reorganizando un poco se obtiene una ecuación de la forma $y = mx + b$ la cual corresponde a la línea de operación adiabática (Ecuación 41).

$$X_{A, BE} = \frac{F_{Ao} \sum \theta_i Cp_i (T_{io} - T)}{F_{Ao} (-H_{rxn})} \quad \text{Ec. 40}$$

$$X_{A, BE} = \frac{\sum \theta_i Cp_i}{(-H_{rxn})} T - \frac{\sum \theta_i Cp_i (T_{io})}{(-H_{rxn})} \quad \text{Ec. 41}$$

ANEXO 2

Código realizado en el software Matlab®

Balance molar y de energía

En la línea de código siguiente se realiza la entrada de todos los datos conocidos que se tienen en el sistema:

```
P          = 2.0265;                                %[Bar]
To         = 683;                                    %Kelvin
Fac_ef     = 1;                                       %Factor de efectividad
Di         = 10.7;                                    %[m]
A          = pi*Di^2/4;                               %Área de sección transversal [m^2]
coef       = [-1 -0.5 1 0];
%% Fracción molar

x_A        = 8.36/100;
x_B        = 8.9/100;
x_I        = 82.74/100;
x_C        = 0;
Fracc      = [x_A x_B x_I x_C];
%% Peso molecular

PMA        = 64.066;                                %[Kg/Kmol]
PMB        = 16;                                     %[Kg/Kmol]
PMC        = 80.066;                                %[Kg/Kmol]
PMI        = 28.013;                                %[Kg/Kmol]
PM         = [PMA PMB PMC PMI];                     %[Kg/Kmol]
%% Flujos de alimentación

FT         = 5000;                                    %[Kmol/h]
m          = FT*(x_A*PMA+x_B*PMB+x_I*PMI);           %[Kg/h]
FAo        = FT*x_A;                                  %[Kmol/h]
FBo        = FT*x_B;                                  %[Kmol/h]
FCo        = FT*x_C;                                  %[Kmol/h]
FIo        = FT*x_I;                                  %[Kmol/h]

%% Relaciones de entrada

Theta_B    = FBo/FAo;
Theta_I    = FIo/FAo;
Theta_A    = FAo/FAo;
Theta_C    = FCo/FAo;
Theta_T    = [Theta_A Theta_B Theta_C Theta_I];

%% Propiedades del catalizador
W_f        = 1.5e4;                                    %[Kg]-->Peso del Catalizador
rho_c      = 33.8*(1/2.2)*(1/0.3048^3);               %[kg/m^3]
phi        = 0.43;                                     %Porosidad
dp         = 0.013;                                    %m
```

```

Cp      = [29.637 0.034735 9.2903E-6 -2.9885E-8 1.0937E-11
           29.526 -8.8999E-3 3.8083E-5 -3.2629E-8 -8.8607E-12
           22.466 0.11981 -9.0842E-5 2.550e-8 -7.9208E-13
           29.342 -3.5395e-3 1.0076e-5 -4.3116e-9 2.5935e-13]; % KJ/Kmol~K -
--> Yaws

w      = [0.245 0.022 0.422 0.04]; % Factor acéntrico--->Yaws
Pc     = [77.809 49.7705 80.9968 33.4961]; % [Atm] ---> Yaws
Tc     = [430.75 154.58 490.85 126.1]; % K ---> Yaws
coef   = [-1 -0.5 1 0]; % Coeficientes estequiométricos
Hf     = [-296800 0 -395700 0]; % KJ/Kmol ---> Yaws
Gf     = [-300100 0 -371100 0]; % KJ/Kmol ---> Yaws
Sf     = (Gf-Hf)/298.15; % KJ/Kmol~K---> Yaws
Hrxn_o = sum(Hf.*coef); % KJ/Kmol

```

Todas las propiedades termodinámicas obtenidas se tomaron del libro “handbook of thermodynamic properties – Yaws”.

Se hace un vector de temperatura para analizar el sistema en una sola etapa, y observar los valores de conversión y temperatura máxima a la salida del reactor.

```

%% Temperatura
T_final_Cur = 800+273.15; %K Temperatura para
hacer las curvas de equilibrio
T_inicial_Cur = 350+273.15; %K Temperatura para
hacer las curvas de equilibrio
T_Cur = T_inicial_Cur:T_final_Cur; %K

```

Se presenta las líneas de código para resolver el balance:

```

function
[dYdw]=fun_PFR_ODE(~,Y,Fac_ef,FAo,Theta_B,Theta_I,Cp,coef,m,A,dp,phi,rho_c,F
I,PM,To,Po)
X=Y(1); T=Y(2); P=Y(3);
%% Propiedades termodinámicas
w=[0.245 0.022 0.422 0.04]; % Factor acéntrico ---> Yaws
Pc=[78.84 50.43 82.07 33.94]; % [Bar] ---> Yaws
Tc=[430.75 154.58 490.85 126.1] % K ---> Yaws
Hf=[-296800 0 -395700 0]; % KJ/Kmol ---> Yaws
Gf=[-300100 0 -371100 0]; % KJ/Kmol ---> Yaws
Sf = (Gf-Hf)/298.15; % KJ/Kmol~K---> Yaws
Hrxn = H_T(T,P,Cp,w,Tc,Pc,coef,Hf);
r_1 = fun_r1(X,Theta_B,Theta_I,P,T,FAo);
FT= FAo*(1+Theta_B+Theta_I-((1/2)*X)); % [Kmol/h]
FA = FAo*(1-X); % [Kmol/h]
FB = FAo*(Theta_B-((1/2)*X)); % [Kmol/h]
FC = FAo*X; % [Kmol/h]

%% Viscosidad de cada sustancia y mezcla
x_A = FA/FT;

```

```

x_B      = FB/FT;
x_I      = FI/FT;
x_C      = FC/FT;
Fracc    = [x_A x_B x_I x_C];
mu_Ec=[-11.103 0.502 -1.08E-4
        44.224 0.562 -1.13E-4
        -12.039 0.543 -1.6E-4
        42.606 0.475 -9.88E-5];    %[micropoise]

for j=1:length(coef)
mu_fun = @(x) mu_Ec(j,1)+mu_Ec(j,2)*x+mu_Ec(j,3)*x^2;
mu_eval(j) = feval(mu_fun,T);
end

% Viscosidad de la mezcla
for i=1:length(coef)
for j=1:length(coef)
if j~=i
F_I(i,j)=(1+(mu_eval(i)/mu_eval(j))^0.5*(PM(j)/PM(i))^(1/4))^2/(8*(1+PM(i)/PM(j)))^0.5;
else
F_I(i,j)=1;
end
end
end
mu_mix_Eval = 0;
for j=1:length(coef)
mu_mix_Eval = (Fracc(j)*mu_eval(j))/(sum(Fracc.*F_I(j,:))) + mu_mix_Eval; %
[micropoise]
end
mu_mix_Eval=mu_mix_Eval*1e-7;          %% Kg/m~s

%% Densidad
R_rho = 0.08205;                      %[atm*m3/Kmol~K]
PM_mix = sum(PM.*Fracc);
rho_o = (P/(PM_mix*R_rho*T));
% Balance molar
dXdw = (r1*Fac_ef)/(-FAo);

% Evaluación de las capacidades caloríficas

for i=1:length(coef)
fCp= @(x) (Cp(i,1)+Cp(i,2)*x+Cp(i,3)*x.^2+Cp(i,4)*x.^3+Cp(i,5)*x.^4;
Cp_Val(i) = feval(fCp,T);              % KJ/Kmol~K
end

dTdw=(r1*(Hrxn))/(FA*Cp_Val(1)+FB*Cp_Val(2)+FC*Cp_Val(3)+FI*Cp_Val(4));
%---> Balance de energía
dPdw=-(m/A)*(1/dp)*((1-
phi)/(phi^3))*((10.5*X)/(rho_o))*(Po/P)*(T/To)*((150*mu*(1-
phi)/dp)+(1.75*m/A))*(1/(rho_c*(1-phi)*A))    %---> Balance de Momento
dYdw = [dXdw dTdw dPdw]';

```

```
end
```

El sistema se soluciona con un ode45 el cual viene programado por defecto en el software Matlab®

Curvas de isovelocidad:

Para resolver hallar los valores de tempera y conversión de las curvas de isovelocidad de usa el método numérico Newton Raphson, el código para este es:

```
function[x1,iter,error,fun]=N_R1(f,xo,v,n)
% f:función
% xo:estimado inicial
% v:paso
% n:#max de iteraciones
iter=1;
error=1;
tol=1e-5;
while error>tol
    iter=iter+1;
    fun=feval(f,xo);
    fun_aum=feval(f,xo+v);
    der=(fun_aum-fun)/v;
    x1=xo-fun/der;
    error=abs((x1-xo)/x1);
    xo=x1;
    if iter>n
        break
    end
end
end
end
```

Con el método se hallan los valores llamando la función con el siguiente código:

```
for i=1:length(T_Cur)
[Conversion(i),iter,error,fun]=N_R1(@(X) fun_r1(X,Theta_B,Theta_I,P,T_Cur(i),
FAo,0),xo,v,n);
end
```

Donde la función que se resuelve por el método numérico es la siguiente:

```
Function
[r1]=fun_r1_OBT(Y,X,Theta_B,Theta_I,P,FAo,R_Val)
T=Y(1);
K1=fun_K1(T);
K2=fun_K2(T);
K3=fun_K3(T);
Kp=fun_Kp(T);
FT=FAo*(1+Theta_B+Theta_I-((1/2)*X));           %[lbmol/h]
FA=FAo*(1-X);                                   %[lbmol/h]
FB=FAo*(Theta_B-((1/2)*X));                     %[lbmol/h]
```

```

FC=FAo*X; %[lbmol/h]
r1=-R_Val+(K1.*(P/FT).^2*FB.*FA.*(1-
((P.*FC)./FT)./(P./FT).^(3/2).*FA.*(FB).^(1/2).*Kp))./(22.414.*(1+P./FT.*(
FA.*K2+FC.*K3))^2);
end

```

R_Val es el valor de la ley de velocidad que debe de tener para hallar los valores de conversión que corresponden a cada temperatura.

Los valores obtenidos de conversión, dependiendo del valor de la velocidad de reacción da valores negativos, por lo tanto, en el momento de graficar las curvas dan algo extrañas, por lo mismo y porque se sabe que la conversión no puede ser negativa, se debe de anular la parte negativa y solo graficar los valores mayores a cero.

La línea POT se calcula tomando los valores donde la conversión es máxima en cada uno de los valores de velocidad e reacción calculados, entre más valores de velocidad de reacción se tengan se obtiene una línea POT mucho más precisa.

Para calcular la línea de operación adiabática del reactor 1 se debe de hacer un balance de energía el cual esta descrito anteriormente, las líneas de código que traducen eso al lenguaje computacional es:

```

function [XB_E]=fun_X_BE(T,P,Theta_T,To,Cp,coef)
    w = [0.245 0.022 0.422 0.04]; % Factor acéntrico---> Yaws
    Pc = [78.84 50.43 82.07 33.94]; % [Bar] ---> Yaws
    Tc = [430.75 154.58 490.85 126.1]; % K ---> Yaws
    Hf = [-296800 0 -395700 0]; % KJ/Kmol ---> Yaws
    Gf = [-300100 0 -371100 0]; % KJ/Kmol ---> Yaws
    Sf = (Gf-Hf)/298.15; % KJ/Kmol~K -> Yaws
    Hrxn = H_T(T,P,Cp,w,Tc,Pc,coef,Hf);
    for i=1:length(coef)
        fCp=@(x)(Cp(i,1)+Cp(i,2)*x+Cp(i,3)*x.^2+Cp(i,4)*x.^3+Cp(i,5)*x.^4);
        Cp_Val(i) = feval(fCp,T); % KJ/Kmol~K
        Cp_Valo(i)= feval(fCp,To);
    end
    XB_E=((sum(Cp_Val.*Theta_T)*T)/(-Hrxn))(sum(Cp_Valo.*Theta_T)*To)/(-Hrxn);
end

```

Para saber hasta qué valor de temperatura y valor de conversión llega la línea de operación adiabática es decir hasta dónde llega a tocar la línea de POT se hace una función objetivo donde se igualan las dos ecuaciones la de la conversión y la de la línea POT. Con el valor terminal de corte con la línea POT se hace uso de la regla de la palanca, y para resolverlo se hace uso del método numérico de los trapecios indicado para integrales numéricas, estos métodos se explican anteriormente, las líneas de código son:

```

%% Método de los trapecios
% Etapa 1
I1 = 0;
h = (X_BER1(end)-X_BER1(1))/length(X_BER1);

```



```

for i=1:length(X_BER1)-1
I1 = (h*(rA1_INV(i)+rA1_INV(i+1))/2)+I1;
end
error = 1;
tol = 1e-1;
I1_b = 0;
h = (X_BER1_b(end)-X_BER1_b(1))/length(X_BER1_b);
for i=1:length(X_BER1_b)-1
I1_b = (h*(rA1_INV_b(i)+rA1_INV_b(i+1))/2)+I1_b;
error=abs(abs(I1_b)-abs(I1))/abs(I1_b);
if error<tol
break
break
end
end
X_BER1_b = X_BER1_b(1:i); TR1_b = TR1_b(1:i);
rA1_b = rA1_b(1:i);

```

Ya teniendo el punto final de la etapa 1, con el valor de temperatura, conversión, y flujos, se estima el valor de la velocidad de reacción y se halla la curva de isovelocidad para saber hasta donde es indicado enfriar. Las líneas de código que describen el proceso son:

```

%% Enfriamiento
FAo1=FAo*(1-X_BER1_b(end));
FBol=FAo*(Theta_B-0.5*X_BER1_b(end));
FCol=FAo*X_BER1_b(end);
FIOl=FIO;
%% Curva de corte enfriamiento
for i=1:length(T_Cur)
[Conversion_etapa1(i),iter,error,fun]=N_R1(@(X) fun_r1(X,Theta_B,Theta_I,P,T_Cur(i),FAo1,rA1_b(end)),xo,v,n);
End
for i=1:length(Conversion_etapa1)
if Conversion_etapa1(i)<0
Conversion_etapa1(i)=NaN;
elseif Conversion_etapa1(i) == Inf
Conversion_etapa1(i)=NaN;
end
end
end

```

La temperatura se halla con Newton Raphson de una función objetivo, la función objetivo es la siguiente:

```

function[r1]=fun_r1_OBT(Y,X,Theta_B,Theta_I,P,FAo,R_Val)
T=Y(1);
K1=fun_K1(T);
K2=fun_K2(T);
K3=fun_K3(T);
Kp=fun_Kp(T);
FT=FAo*(1+Theta_B+Theta_I-((1/2)*X)); % [lbmol/h]
FA=FAo*(1-X); % [lbmol/h]

```

```

FB=FAo*(Theta_B-((1/2)*X)); %[lbmol/h]
FC=FAo*X; %[lbmol/h]
r1=-R_Val+(K1.*(P/FT).^2*FB.*FA.*(1-
((P.*FC)./FT)./(P./FT).^(3/2).*FA.*(FB).^(1/2).*Kp))./(22.414.*(1+P./FT.*(
FA.*K2+FC.*K3))^2);
end

[T2o]=N_R1(@ (Y)
fun_r1_OBT(Y,X_BER1_b(end),Theta_B,Theta_I,P,FAo,rA1_b(end)),700,1e-12,400);

```

Para las etapas siguientes se hace lo mismo que se describió anteriormente.

Se obtienen dos etapas, ya que se alimenta a la temperatura que dicen en el artículo de la autora Bolaño

P. Leda,