25

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

"ESTRATEGIA PARA LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE BALANCES DE MATERIA"

TESIS

MARIANA ELIZABETH DOMÍNGUEZ OVIEDO

TITULO DE INGENIERO QUÍMICO

MEXICO, D.F. 1994

JURADO ASIGNADO AL TEMA:

EXAMENES PROFESIONALES
FAC. DE QUIMICA

PRESIDENTE: M.EN I.ALEJANDRO ANAYA DURAND

SECRETARIO: ING. RAMÓN ARNAUD HUERTA

VOCAL: DR. ENRIQUE BAZÚA RUEDA

1ER. SUPLENTE: ING. ANTONIO VALIENTE BARDERAS

2O. SUPLENTE: ALEJANDRO IÑIGUEZ HERNÁNDEZ

TEMA:

" ESTRATEGIA PARA LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE BALANCES DE MATERIA"

FIRMA DEL ASESOR:

ING. ENRIQUE BAZÚA RUEDA

FIRMA DEL SUSTENTANTE:

MARIANA ELIZABETH DOMÍNGUEZ OVIEDO

MÉXICO D.F A 14 DE SEPTIEMBRE DE 1994.

a DIOS

PEDI fuerzas para los grandes logros
me hizo débil para que aprendiera humildemente a obedecer

PEDI riquezas para poder ser feliz,
me diò pobreza para poder ser sabio.

PEDI salud para hacer cosas grandes,
me diò debilidad para hacer cosas buenas.

PEDI poder para alcanzar las alabanzas del hombre,
me diò debilidad para sentir la necesidad de Dios.

PEDI de todo para poder disfrutar de la vida
me concediò la vida, para poder disfrutar de todo

NO RECIBI nada de lo que pedí,
pero sí todo lo que necesité,

más me fueron concedidas todas
las peticiones que no hice.

NO PEDI nacer y DIOS me diò un padre y una madre maravillosos,
Yo, entre todos los hombres,

¡SOY LA MAS AFORTUNADA!

A mis padres Imelda y Héctor, porque en todo el camino recorrido, siempre se han encontrado ahí, dispuestos a todo, incluso a dar la vida por mi.
Porque me han enseñado que en la vida, para lograr a hacer algo importante, se requiere de disciplina, amor y dedicación.
Porque en ellos he encontrado un envidiable ejemplo lo seguir.
Porque jamás me han fallado y sé que jamás lo harán.
Porque les debo todo lo que soy, han hecho de mi una mujer de bien.
Porque este trabajo significa uno de los logros más importantes en mi vida y precisamente ellos son lo más hermoso de mi vida.
DIOS LOS BENDIGA.

TE AMO
No solo por lo que eres,
sino por lo que soy
cuando estoy contigo.

TE AMO
No solo por lo que
has hecho de ti,
sino por lo que
estas haciendo de mi

TE AMO
Por lo parte de mi ser
que sacas a flote,

TE AMO
por ignorar
aquellos defectos y debilidades
que ves en mi.

TE AMO
por mirar tan dentro de mi alma
como nadie lo habia hecho
y sacar a la luz mi belleza

TE AMO

A MI SARDINE

Al hombre que amo con todas las fuerzas de mi corazón, Ernesto Barrera Mora (OSS), por su apoyo, comprensión y fuerza.
Por ese estado de ánimo y esa sonrisa, que jamás se han visto corrompidos por los fracasos y los dias difíciles.
Por todos esos hermosos momentos que hemos compartido juntos y por los que han de venir.
Porque en todo momento estas ahí, ya sea para brindarme una palabra de consuelo o darme la mano cuando he caido, o bien inyectandome fuerzas para seguir la lucha diaria.
Porque has considerado mis éxitos y mis sueños como si fueran tuyos, y como tales has luchado por que se lleven a cabo.
Porque estar contigo cada dia, es como estar soñando despierta.
Porque tú has sido la inspiración de este éxito.

Cuando un hermano se va, deja un espacio vacío que no lo puede llenar nada. A alguien que quise muchísimo y siempre vivirá en mi corazón, José Carlos Cabello. Porque dejaste un vacío en cada uno de nosotros.

AGRADECIMIENTOS

De una manera especial, quiero agradecer al Dr. Enrique Bazúa Rueda, magnífico profesor y excelente persona, todo el apoyo brindado para llevar a cabo este proyecto. El mérito de este trabajo es 100% suyo, Doctor. Fue realmente un placer trabajar con usted.

Quiero agradecer también al Ing.Alejandro Anaya Durand, excelente profesor y persona, sus interesantes comentarios para hacer de este trabajo algo más sobresaliente, su interés y su apoyo incondicional. Además de lo aprendido en sus clases, muy buenas por cierto, siempre se preocupó por nosotros más allá de los salones de clases. Mi más profundo respeto Ingeniero.

Al Dr. Sergio Fuentes Maya, quien ha tenido una influencia sumamente positiva en mi vida. Profesor, sus consejos, ánimo y filosofía ante la vida, me han permitido ver más lejos de lo que pensaba que mis ojos podían ver, ir más allá de lo que estaba convencida que mis pies podían andar y lograr cosas que ni en sueños había imaginado. Mil gracias por todo.

A mi Papá, que casi se paró de cabeza, para que este trabajo saliera adelante de la mejor forma. Por tus consejos, apoyo incondicional, preocupación y desvelos. Te quiero mucho papi.

A Ernesto, por esos días maratónicos para poder terminar este trabajo. Por tu consejo, apoyo y comprensión. Porque si aveces pensé que no lo lograría, tu despejabas mis dudas

A mi Mamá y a Pepé, por estar siempre en contacto conmigo y brindarme su apoyo moral y cariño.

A Gusy, Héctor y Tania por la preocupación e interés que han mostrado por este trabajo. Porque los quiero muchísimo.

A todo el personal de la Dirección de Presupuestación y de Cómputo, en especial a Francisco, Mary Carmen, Chela, Livia, Juanita, Alma, Olivia, Aida, Rafael, Arturo, Ricardo y Jenny, por el apoyo incondicional que recibí de ustedes siempre.

Al equipo de Cómputo Académico, en especial al Lic Jovv, . Angeles, Lety, Paty, Hugo, Willy, Adela, Maribel, Marcia, Leopoldo, Rosa María y Marina, gracias al cual fue posible publicar este trabajo de una forma profesional.

Al Lic Trejo y su equipo, por haberme invertido tanto tiempo de trabajo.

A la Coordinación de Posgrado, en especial a María Elena y Magda por tanta lata.

A todo el personal de la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería, en especial a la Maestra Idalia Flores de la Mota, al Maestro Gonzalo Negroe Pérez, a Héctor, Gris, al Maestro Ricardo Aceves, al Maestro Federico Santoyo, a Cruz y a la maestra Norma Uribe, por todo el cariño y apoyo que he recibido de ustedes en todo momento.

A mis abuelitas Tere y Lolin que quiero con todo el corazón.

A ti, Tía Mary Oviedo, porque siempre me has brindado cosas buenas, cuando más las he necesitado: consejos, ánimo y mucho cariño.

A mi tíos Silvia, Sergio y Agustín que siempre han sido a todo dar conmigo.

A una familia muy linda, la familia Pérez Gómez, por todo su cariño.

A dos amigos que quiero muchisimo: Laurita y Eduardo Ustariz, magnificas personas y excelentes amigos.

A mis amigos: Gaby, Victor, Chucho, Emilia, Raúl, Gabo y Monsy, por todo.

A mis tios William y Fanny, porque con ustedes me sentido como en familia, porque son excelentes amigos. !Viva Colombia y Perú!

Con un agradecimiento y reconocimiento especial a una señora que le debo mucho, Sra. Oliva, por sus consejos, cariño y por consentirme siempre. Porque me ha brindado un apoyo sumamente importante.

A mi pueblito lindo, Tequisquiapan (Sucursal del cielo en la tierra) y en especial a mis grandes amigas: Jose, Azucena, Claudia, Carmen, Paty, Perly.

A mis primos que tanto quiero: Chava, Angélica, Adriana, Silvia y Ale.

Estrategia para la Resolución de Problemas de Balances de Materia

Contenido

Matriz cuadrada

Matriz diagonal

Matriz identidad

Matriz nula

Operaciones con matrices:

Adición y sustracción de matrices

Multiplicación de una matriz por un escalar

Multiplicación de matrices

Operaciones elementales

Inversa de una matriz

Inversión de matrices

Algoritmo de solución del método de Gauss

Fase progresiva

Fase regresiva

Gauss-Jordan.

EJEMPLOS DE SOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES

EJEMPLO 1: Solución de un sistema de ecuaciones por el método de Gauss.

EJEMPLO 2: Solución de un sistema de ecuaciones por el método Gauss-Jordan.

EJEMPLO 3: Sistema de ecuaciones consistente e indeterminado.

EJEMPLO 4: Sistema de ecuaciones inconsistente.

EJEMPLO 5: Sistema de ecuaciones consistente y determinado.

I. Introducción

Al visitar una industria química y observar la compleja red de tuberías y los complicados equipos que forman parte del proceso químico, viene una pregunta a mi mente: ¿Cómo es posible diseñar y controlar procesos tan complicados? La respuesta no es fácil. Se requieren de un número importante de especialistas de diferentes ramas de la ingeniería, así como todo un cúmulo de conocimientos de matemáticas, química, física y termodinámica entre otras ciencias. Le concierne al Ingeniero Químico gran parte de esta tarea.

En la construcción de una planta química de cierto producto ¿Cuáles son los primeros pasos que se deben seguir? Antes que nada se debe conocer el método de obtención (las reacciones químicas involucradas) de dicho producto. En caso de existir varias alternativas se eligirá aquella opción que resulte más conveniente. Este trabajo se lleva a cabo en un laboratorio.

Para determinar cuáles son las condiciones óptimas de trabajo, se lleva a cabo la reacción bajo distintas condiciones. Esto quiere decir que de un ensayo a otro se pueden variar algunas de las variables de proceso (manteniendo las otras constantes). Por ejemplo, se puede mantener la presión de operación constante pero se puede variar la temperatura. Al final de cada reacción se analiza el producto resultante (cantidad y pureza). Después se procede a mantener la temperatura constante y variar ahora la presión. Así se establece una comparación entre los distintos ensayos que se llevaron a cabo. Se establece entonces cuáles son las condiciones óptimas en las que se debe llevar a cabo dicha reacción.

En cada uno de los ensayos la cantidad de materia total antes y después de la reacción química es la misma, esto cumple con el principio fundamental de la conservación de la masa: "La masa no se crea ni se destruye unicamente se transforma".

Entonces es necesario establecer un conteo de la materia involucrada para poder evaluar el rendimiento de una reacción química y seguir su curso. Esto se refiere más explícitamente al hecho de que dada cierta cantidad de reactivos y aplicando las condiciones necesarias para que reaccionen, al final de la reacción química, cuantificados los productos podemos establecer que cantidad de materia reaccionó para dar el producto deseado, así como aquella que no reaccionó o formó otros subproductos. De acuerdo a esto, es de importancia fundamental cuantificar adecuadamente la masa que interviene en la reacción química. Este es un ejemplo sencillo de una reacción química llevada a cabo en un laboratorio cuyos equipos son matraces, refrigerantes, tubos de vidrio, canastas de calentamiento, etc. El mismo principio fundamental rige a las enormes plantas de proceso. De hecho antes de hacer una planta química es necesario experimentar en los laboratorios y después ya con la información proporcionada en esa primera experimentación construir una planta piloto cuyo objetivo es escalar el trabajo realizado en el laboratorio y analizar los resultados. Por lo general las plantas piloto son experimentaciones a gran escala antes de hacer la planta definitiva.

El trabajo realizado en la planta piloto es muy similar al realizado en el laboratorio: moviendo ciertas condiciones de operación encontrar las condiciones óptimas. Se podría pensar que las condiciones en el laboratorio ya nos dieron suficiente información sobre el proceso de obtención de nuestro producto, sin embargo el proceso a escala se comporta con ciertas diferencias con respecto al proceso realizado en el laboratorio. Esto se debe que al manejar cantidades más grandes de reactivos, existen nuevas condiciones que no existían en el laboratorio. Entonces las experimentaciones realizadas en la planta piloto determinan de una forma más precisa cuáles serán las condiciones reales de la planta industrial.

¿Cuál es la estrategia que se sigue para escalar el trabajo desarrollado en el laboratorio a la planta piloto? ¿Cómo se determinarán las dimensiones de los equipos y de la red de tubería? La base fundamental para el dimensionamiento de los equipos y tubería es precisamente el balance de materia, que no es otra cosa que cuantificar la cantidad de materia que entra al proceso, la que se produce en él (o se transforma) y la que sale.

Con los balances de materia es posible determinar las condiciones de todas las corrientes de un proceso (flujos, composiciones, temperatura y presión) a partir de ciertos datos conocidos de algunas de ellas.

Conocidas las condiciones de operación en cada corriente de un proceso es posible determinar el tamaño que deben tener los equipos, así como sus materiales de construcción (ejemplo: si una corriente tiene una concentración alta de ácido sulfúrico se debe de manejar en una tubería con materiales especiales, ya que para las tuberías que normalmente se utilizan dicho ácido suele ser muy corrosivo).

Se podría decir entonces que el balance de materia es el cimiento y la base de la Ingeniería Básica de cualquier planta industrial. A partir de él es posible dimensionar cada uno de los equipos integrantes del proceso, así como la red de tuberías.

La finalidad del presente trabajo es introducir al estudiante a los problemas de balances de materia y proporcionarle una metodología para resolverlos de una forma ordenada y eficiente.

Esta estrategia de resolución se basa en el análisis del sistema de interés: tipo de proceso, corrientes que intervienen en él, componentes involucrados y variables que especifican el proceso. Se detalla también como se deben plantear las ecuaciones que definen al sistema.

Planteadas las variables que intervienen en el proceso, así como las ecuaciones que lo describen, se realiza un análisis de grados de libertad que permita determinar si el problema ha sido correctamente planteado, si se encuentra subespecificado y se pueden fijar ciertas variables, ó si se encuentra sobrespecificado y su planteamiento no es del todo correcto, ó bien no tiene solución. Se establecen las bases para determinar si un balance de materia es congruente o si es absurdo.

Analizados los grados de libertad del sistema, se propone una estrategia de resolución para llegar a la solución (algoritmo de resolución). Finalmente se resuelven numéricamente los problemas y se comentan los resultados obtenidos.

La justificación de esta metodología consiste en que permite visualizar de una forma integral el problema, de tal forma que se determina el camino a seguir para resolverlo (en caso de que tenga solución) antes de introducir cualquier número.

Esta estrategia permite desarrollar agilidad en la resolución de problemas.

II. Conceptos preliminares

1. UTILIDAD DEL BALANCE DE MATERIA

Los balances de materia y energía sirven para determinar las condiciones de todas las corrientes de un proceso (flujos, composiciones, temperatura y presión), a partir de datos de algunas de ellas.

En los balances de materia se usan como variables el flujo y las composiciones de las corrientes. En los balances de energía se introducen las variables de presión y temperatura. El presente trabajo se limita únicamente a balances de materia.

2. BALANCE DE MATERIA

Es el conteo de la cantidad de materia que interviene en un proceso. Debe cumplir con el principio fundamental de conservación de la masa: "La masa no se crea ni se destruye, únicamente se transforma".

3. ELEMENTOS DE UN DE BALANCE DE MATERIA

En un problema de balance de materia existen los siguientes elementos:

1. El sistema seleccionado, con sus corrientes de entrada y salida.
2. Las variables de las corrientes que describen los flujos y composiciones de cada corriente.
3. El sistema de ecuaciones de balance de materia.
4. Las relaciones adicionales que se deriven del enunciado del problema.
5. La base de cálculo seleccionada.

4. SISTEMA

Porción restringida del universo en donde se lleva a cabo un fenómeno. Puede ser abierto en el caso que se transfiera materia a los alrededores, es decir que se sobrepasen las fronteras del sistema o bien cerrado en el caso de que no haya ninguna interacción con el entorno.

FIGURA 1. Sistema abierto: Se intercambia materia con los alrededores. La linea punteada indica la frontera del sistema

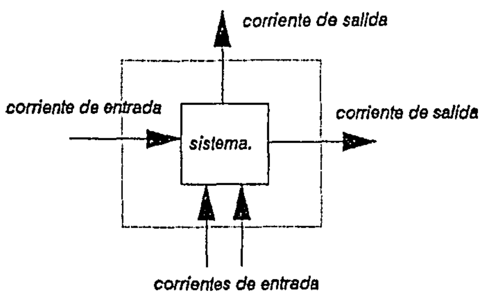


FIGURA 2. Sistema cerrado: No hay intercambio de materia con los alrededores. La linea punteada indica la frontera del sistema

5. FLUJO

Cantidad de materia que pasa por cierta sección por unidad de tiempo.

$$\text{Flujo} = \frac{\text{Cantidad de materia}}{\text{Unidad de tiempo}}$$

6. FLUJO MOLAR

La cantidad de materia se expresa en moles, de tal forma que:

$$\text{Flujo Molar} = \frac{\text{Moles}}{\text{Unidad de tiempo}}$$

7. FLUJO MASICO

La cantidad de materia se expresa en unidades de masa, entonces:

$$\text{Flujo Másico} = \frac{\text{Masa}}{\text{Unidad de tiempo}}$$

8. FLUJO VOLUMETRICO

La cantidad de materia se expresa como el volumen correspondiente.

$$\text{Flujo Volumétrico} = \frac{\text{Volumen}}{\text{Unidad de tiempo}}$$

9. COMPOSICION

Se refiere a la cantidad de algún componente con respecto a la cantidad de mezcla total. Así, la composición del componente i [X_i], está definida como:

$$\text{Composición} = \frac{\text{Cantidad del componente i}}{\text{Cantidad total de la mezcla}}$$

Las unidades más utilizadas para medir la concentración son:

10. FRACCION MOL

Definida como la relación de moles del componente i y los moles totales de la mezcla:

$$\text{Fracción mol del componente i} = \frac{\text{Moles del componente i}}{\text{Moles totales de la mezcla}}$$

11. FRACCION MASA

Llamada también fracción peso y es la relación existente entre la masa del componente i y la masa total de la mezcla:

$$\text{Fracción masa del componente i} = \frac{\text{Masa del componente i}}{\text{Masa total de la mezcla}}$$

12. DENSIDAD

La densidad de una sustancia mide la masa por unidad de volumen.

$$\text{Densidad} = \frac{\text{Masa}}{\text{Volumen}}$$

13. SISTEMA ABIERTO EN ESTADO ESTABLE O REGIMEN PERMANENTE

Un sistema abierto en el cual no se observa acumulación neta de masa con respecto al tiempo, es decir, que la cantidad de materia que entra o sale del sistema es la misma en cualquier momento (no tiene dependencia del tiempo), se dice que está a régimen permanente o en estado estacionario.
El sistema puede ser desde una planta química hasta un equipo individual. ESTE TRABAJO SE LIMITA UNICAMENTE A SISTEMAS DE ESTE TIPO.

14. VARIABLES ASIGNADAS A UNA CORRIENTE

Para poder identificar una corriente cualquiera de un proceso, desde el punto de vista de balance de materia, es necesario conocer el flujo y su composición.
Supóngase que se tiene una corriente con n componentes. Si se quisiera identificar esa corriente ¿Cuáles son los datos mínimos que se deben de conocer? Primero que nada se deben tener identificados todos los componentes que forman parte de la corriente.
En cada corriente la suma de fracciones mol de todos sus componentes es uno:

$$\sum_{i=1}^{n} X_i = 1.0$$

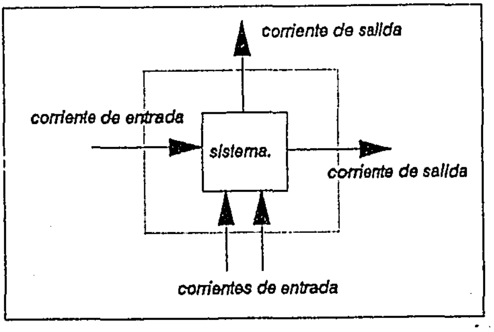
entonces basta con conocer n-1 composiciones, ya que la otra se obtiene simplemente por diferencia:

$$x_{n-1} = 1.0 - \sum_{i=1}^{n-1} x_i$$

En consecuencia de lo anterior, para especificar una corriente cualquiera basta con conocer el flujo y n-1 composiciones. Esta son las **variables independientes asignadas a una corriente.** Dicho de otra forma, cada corriente tiene un flujo y n composiciones, pero como las suma de todas las composiciones es igual a 1, solo el flujo y n-1 composiciones son independientes, ya que la otra composición se encuentra en función de las composiciones conocidas.

15. ECUACION GENERAL DE BALANCE DE MATERIA SIN REACCION QUIMICA

Dado cualquier sistema abierto:



Siempre se cumple:

$$\boxed{\text{Entradas} = \text{Salidas} + \text{Acumulación}}$$

A esta ecuación se le denomina **ecuación general de balance de materia** y es simplemente la ley de la conservación de la masa. Es decir, la masa total de entrada es igual a la masa total de salida más la materia que se acumuló en dicho sistema.

La acumulación es positiva en el caso de que entre más de lo que sale y negativa en el caso de que salga más de lo que entra.

16. ECUACION DE BALANCE DE MATERIA PARA PROCESOS A REGIMEN PERMANENTE

Para procesos a régimen permanente el término de acumulación es igual a cero, por lo tanto la ecuación general de Balance de Materia se simplifica a:

$$\boxed{\text{Entradas} = \text{Salidas}}$$

17. NOTACION UTILIZADA PARA LA RESOLUCION DE PROBLEMAS DE BALANCE DE MATERIA SIN REACCION QUIMICA

1.- Para identificar cada una de las corrientes que forman parte del problema, se utilizarán letras mayúsculas: A, B, C, etc.

2.- Se enumeran todos los componentes que se encuentran presentes en el sistema de interés: i= 1, 2, ... n (n componentes).

3.- Al escribir composiciones, se utilizará la misma notación tanto para fracciones mol como para fracciones peso, de acuerdo al contexto del problema que se este resolviendo (esto se hace por simplicidad). Es decir, se debe de determinar de antemano que unidades se van a manejar y estableciendo esto será indiferente la notación. Por ejemplo, si los flujos están en moles, para tener consistencia en las unidades, las composiciones deben manejarse en fracción mol. Por el contrario, si se están manejando los flujos en masa, la composición debe estar en fracción masa. Entonces, para denotar fracción mol o fracción peso del componente i en la corriente A, el número del componente (i) se utilizará como subíndice y la letra de la corriente (A) como superíndice. De acuerdo con esto quedaría:

X_i^A que denota la composición del componente i en la corriente A

4.- El flujo molar, másico ó volumétrico total de la corriente de interés, se identificará simplemente con la letra que identifique la corriente. Al igual que en la composición, es necesario establecer de antemano las unidades correspondientes para evitar confusiones. Así:

A Representa el flujo (másico o molar, según lo indiquen las unidades) de la corriente A.

5.- En el caso del flujo por componente, tampoco se establecerá diferencia entre flujo molar y flujo másico:

Ai se refiere al flujo del componente i en la corriente A y puede ser calculado de la siguiente forma:

$$\boxed{A_i = A\, X_i^A}$$

En donde:

A es el flujo total (másico o molar) de la mezcla

X_i^A es la composición (fracción masa o mol) del componente i en la mezcla.

Es importante señalar que debe existir consistencia en las unidades de la expresión anterior, es decir, si el flujo se expresa en moles, la composición se debe expresar en fracción mol. Así mismo, si el flujo se maneja en masa, la composición se debe expresar en fracción masa.

18. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA QUE SE PUEDEN PLANTEAR PARA UN SISTEMA SIN REACCION QUIMICA

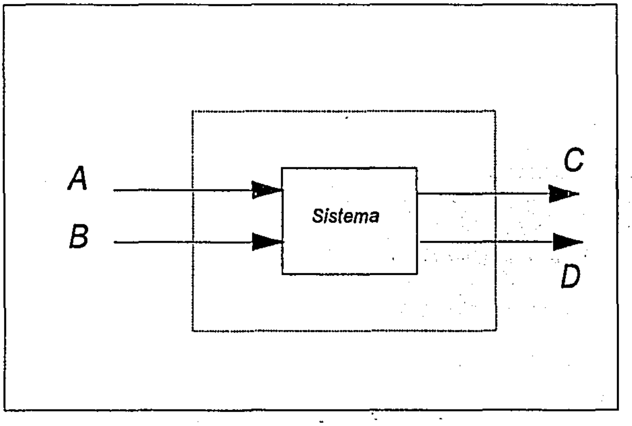
Dado algún problema de balance de materia es posible establecer:

a) Una ecuación de balance total.

b) Una ecuación de balance por cada componente presente en la mezcla. Si se tienen n componentes, entonces es posible establecer n ecuaciones de balance por componente.

Es preciso señalar que se puede realizar un balance de materia ya sea en un equipo en particular o en toda una planta de proceso. En cualquier caso, una vez seleccionado el sistema, se deben reconocer las corrientes de entrada y salida, y entonces se pueden plantear los balances de materia, ya sea total o por componente.

Por ejemplo, para un sistema que tenga a las corrientes A y B como entradas y a las corrientes C y D como salidas, y que contenga tres componentes:



Las ecuaciones de balance de materia son las siguientes:

Balance total $A + B = C + D$

Balance del componente 1: $AX_1^A + BX_1^B = CX_1^C + DX_1^D$

Balance del componente 2: $AX_2^A + BX_2^B = CX_2^C + DX_2^D$

Balance del componente 3: $AX_3^A + BX_3^B = CX_3^C + DX_3^D$

19. ECUACIONES INDEPENDIENTES DE BALANCE

En general, en un sistema con n componentes, la ley de conservación de la masa originará n+1 ecuaciones, en las cuales, sólo n son independientes. Esto se debe a que siempre se podrá generar la ecuación n+1 a partir de las otras. Por ejemplo, si se suman las ecuaciones de balance de materia por cada componente se obtiene la ecuación de balance total.

20. RELACIONES ADICIONALES

En algunos problemas de balances de materia, además de las ecuaciones de balance se pueden plantear otras ecuaciones que incluirán diversas especificaciones que se imponen en el sistema. Estas especificaciones sirven para reducir el número de variables desconocidas y son importantes en la formulación del problema. En términos generales, la información especificada puede tomar diferentes formas, pero a menudo consistirá de la asignación directa de valores a las variables de las corrientes, o de la imposición de relaciones entre las variables, a este tipo de ecuaciones se les llamará **relaciones adicionales**. Algunos tipos de relaciones adicionales son:

a) Razones de flujo. Por ejemplo, que el flujo molar de la corriente B, es cuatro veces el flujo molar de la corriente A. Esto se indica de la siguiente forma:

$$B = 4A$$

b) Relaciones de composición. Por ejemplo, los componentes 1 y 3 en la corriente A se encuentran en una relación de 1:4. Lo anterior se indica de la siguiente manera:

$$\frac{X1A}{X_3A} = \frac{1}{4}$$

c) Recuperaciones fraccionales. Por ejemplo, en la corriente de destilado (D) se obtiene el 80% del componente 3 alimentado en la corriente A. Esto da lugar a la siguiente relación adicional:

$$0.80AX_3{}^A = DX_3{}^D$$

Estas relaciones, sea cual fuere la que aparezca en un problema particular, se manejan simplemente como ecuaciones adicionales, que pueden utilizarse junto con las ecuaciones de balances de materia independientes para obtener las variables desconocidas.

21. BASE DE CALCULO

Existen problemas en los cuales no se asigna valor a ninguno de los flujos totales de las corrientes. Para propósitos de cálculo puede asignarse una magnitud arbitraria al flujo de cualquiera de las corrientes. A esto se le conoce como selección de una base de cálculo. Esta selección no afecta el resultado del problema, ya que el resto de los flujos serán proporcionales a ella. Una vez resuelto el problema se puede cambiar de base con solo multiplicar todos los flujos por el mismo factor. Las composiciones de las corrientes no se alteran por el cambio de base.

22. BALANCES DE MATERIA EN SISTEMAS REACCIONANTES

Hasta ahora se han presentado los conceptos para resolver problemas en donde las operaciones involucradas solo han presentado cambios físicos. Absorbedores, columnas de destilación, mezcladores, divisores, filtros e intercambiadores de calor son algunos ejemplos de equipos que solo involucran fenómenos físicos.

La parte vital de un proceso químico es la reacción química, de ahí que en muchas ocasiones se dice que el corazón de un proceso es el reactor químico (equipo en el cual se llevan a cabo las reacciones químicas). A continuación se introducirá algunos conceptos importantes relacionados con reacciones químicas, con la finalidad de desarrollar una estrategia para resolver problemas de balances de materia en procesos en donde se llevan a cabo reacciones químicas.
Las reacciones químicas suelen representarse como fórmulas matemáticas constituidas por fórmulas que representan la composición de una sustancia en función de los átomos componentes.

23. BALANCEO DE ECUACIONES

La ecuación química balanceada es una ecuación algebraica con todos los reactivos del lado izquierdo y todos los productos del lado derecho, tal que el número total de átomos de cada elemento es el mismo para ambos lados de la ecuación.
Nota: El signo igual generalmente se reemplaza por una flecha que indica hacia que lado se desplaza la reacción.

24. RELACIONES MOLECULARES EN LAS ECUACIONES QUIMICAS

El número de moléculas de reactivos y productos presentes en una reacción química se indican mediante coeficientes en las fórmulas que representan las moléculas. Estos coeficientes reciben el nombre de COEFICIENTES ESTEQUIOMETRICOS. Por ejemplo, la combustión del amoníaco en oxígeno se representa mediante la ecuación química balanceada:

$$\underset{(4\ \text{moléculas})}{4NH_3} + \underset{(3\ \text{moléculas})}{3O_2} \text{ -----> } \underset{(2\ \text{moléculas})}{2N_2} + \underset{(6\ \text{moléculas})}{6H_2O}$$

en la cual los coeficientes algebraicos 4,3,2 y 6 indican que 4 moléculas de NH_3 reaccionan con 3 moléculas de O_2 para formar 2 moléculas de N_2 y 6 de H_2O.
Hay reacciones químicas que se llevan a cabo instantáneamente al mezclar los reactivos, algunas se llevan a cabo en su totalidad al transcurrir determinado tiempo y otras se llevan a cabo solo parcialemente aún después de haber transcurrido un tiempo muy grande; esto es, que no necesariamente siempre se agotan los reactivos.

25. NOTACION GENERALIZADA PARA SISTEMAS CON REACCION QUIMICA

Se denotará una reacción química de la siguiente forma:

Reacción química: $\sum v_i A_i = 0$

En donde:

v_i = Coeficiente estequiométrico del componente i.
A_i = Fórmula química del componente i.

Ejemplo: Dadas las siguientes reacciones:

$$CH_4 + H_2O \text{ ------> } CO + 3H_2 \qquad \ldots (1)$$
$$CO + H_2O \text{ ------> } CO_2 + H_2 \qquad \ldots (2)$$

encontrar los coeficientes estequiométricos.

Las reacciones anteriores se reescriben pasando los productos del lado izquierdo de la ecuación con signo negativo, como si se estuviera realizando una operación con una ecuación algebraica; el resultado es:

$$CH_4 + H_2O - CO - 3H_2 = 0 \qquad ..(1')$$
$$CO + H_2O - CO_2 - H_2 = 0 \qquad ...(2')$$

Los coeficientes estequiométricos son:

COMPUESTO	PRIMERA REACCION	SEGUNDA REACCION
CH_4	-1	0
H_2O	-1	-1
CO	+1	-1
H_2	+3	+1
CO_2	0	+1

Como se puede apreciar, los coeficentes estequiométricos son positivos cuando se trata de productos y negativos cuando se trata de reactivos. En caso de tener componentes inertes (que no están presentes en la reacción química) el coeficiente estequiométrico es igual a cero. En resúmen, los coeficientes estequiométricos siguen la notación:

$v_i > 0$	Productos
$v_i < 0$	Reactivos
$v_i = 0$	Inertes

26. BALANCE DE MATERIA EN UN REACTOR QUIMICO

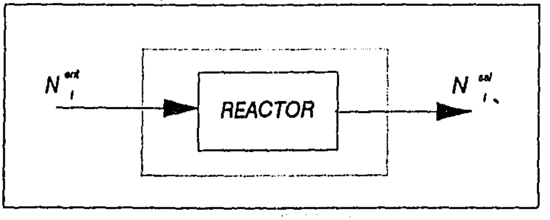
Para los balances de materia en procesos sin reacción química, los flujos másicos de los componentes a la entrada y a la salida de algún equipo en particular se mantienen constantes. En el caso de que ocurra una reacción química ya no sucede esto, ya que al llevarse a cabo la reacción los átomos que forman las moléculas de los reactivos se agrupan de una forma diferente (para dar lugar a los productos).

Debido a lo anterior el balance de materia para un sistema reaccionante se tratará de una forma diferente, incorporando la aparición o desaparición de los compuestos presentes en las reacciones químicas.

A los equipos en donde se llevan a cabo reacciones químicas se les llama reactores. Pueden ser intermitentes (aquellos que se cargan al principio y cuando la reacción química ha llegado a su término se vacía) ó bien contínuos (son los reactores que tienen una alimentación contínua, así como una formación de productos contínua).

En estos problemas es preferible trabajar con flujos en moles y composiciones en fracción mol.

Supóngase que se tiene un reactor químico:



Enrique Bazúa Rueda
Mariana Elizabeth Domínguez Oviedo

El balance de materia para cada componente asociado a este reactor químico está dado por:

$$N_i^{sal} = N_i^{ent} + \nu_\varepsilon$$

En donde:

N_i^{en} = Moles del componente i en la entrada al reactor (alimentación)
Unidades: mol (para un rector intermitente), kgmol/hr (para un reactor contínuo).
N_i^{sal} = Moles del componente i en la salida del reactor.
Unidades: mol, kgmol/hr
ε = Grado de avance de la reacción (Extensión de la reacción)
Unidades: mol, kgmol/hr

Importante: Para un sistema de varias reacciones, habrá un avance (ε) para cada una de ellas.

Nota: N_i^{ent}, N_i^{sal} y ε deben tener las mismas unidades.

Considere la reacción química

$$CH_4 + H_2O \dashrightarrow CO + 3H_2$$

Los balances de materia para cada componente son:

REACTIVOS:

$$NCH_4^{sal} = NCH_4^{ent} - \varepsilon$$
$$NH_2O^{sal} = NH_2O^{ent} - \varepsilon$$

PRODUCTOS:

$$NCO^{sal} = NCO^{ent} + \varepsilon$$
$$NH_2^{sal} = NH_2^{ent} + 3\varepsilon$$

Si a un reactor se alimentan 25 moles de CH_4 y 50 moles de H_2O las ecuaciones anteriores quedan como:

$$NCH_4^{sal} = 25 - \varepsilon$$
$$NH_2O^{sal} = 50 - \varepsilon$$
$$NCO^{sal} = \varepsilon$$
$$NH_2^{sal} = 3\varepsilon$$

Supongamos que el avance de la reacción es de 15 moles, esto es ε = 15 moles, entonces la salida del reactor contiene 10 moles de CH_4, 35 moles de H_2O, 15 moles de CO y 45 moles de H_2.

27. RELACION ESTEQUIOMETRICA

Se dice que los reactivos i y j están en relación estequiométrica si:

$$\frac{N_i^{ent}}{N_j^{ent}} = \frac{\nu_i}{\nu_j}$$

Para la reacción química

$N_2 + H_2 \text{---}> 2NH_3$

Los reactivos N_2 estarán en relación estequiométrica si:

$$\frac{N_{H2}^{ent}}{N_{N2}^{ent}} = \frac{3}{1}$$

Esto es, si los moles de N_2 a la entrada son 230, las moles de H_9a la entrada, para que se encuentre en proporción estequiométrica, deben ser 690.

28. PORCENTAJE EN EXCESO

Para la reacción química

$N_2 + 3H_2 \text{---}> 2NH_3$

Si la alimentación al reactor es de:

$N_{N2}^{ent} = 230$ kgmol/hr

$N_{H2}^{ent} = 840$ kgmol/hr

El H_2 se encuentra en exceso. Las moles de H_2 estequiométricos de entrada serán:

$(N_{H2}^{ent})_{est} = 230 \times 3/1 = 690$ kgmol/hr

El porcentaje de exceso del H_2 es de:

$(\%\ \text{Exceso}) = (840/690 - 1) \times 100 = 21.7\%$

Considere otro ejemplo; la alimentación al reactor es de 540 kgmol-hr de H2 y el N2 se encuentra con un 25% de exceso. Para calcular las moles de N2 a la entrada del reactor, primero se calculan los moles estequiométricos.

$(N_{N2}^{ent})_{est} = 540 \times 1/3 = 180$ kgmol/hr

y los moles reales a la entrada estarán dados por:

$(N2^{ent}) = 180 \times (1 + 25\text{-}100) = 180 \times 1.25 = 225$ kgmol/hr

29. REACTIVO LIMITANTE Y EXTENSION MAXIMA DE LA REACCION

El reactivo limitante es el compuesto que primero se acabará en una reacción química si ésta prosigue hasta su extensión máxima. Los reactivos que no se consumen totalmente se encuentran en exceso. El reactivo limitante y la extensión máxima dependen de la composición de la alimentación. Considere la reacción química:

$N_2 + 3H_2 \text{---}> 2NH_3$

y que la alimentación al reactor es de 230 kg/kgmol de N_2 y 840 kgmol/hr de H_2. El balance de materia está dado por:

$N_{N_2}^{sal} = 230 - \varepsilon$

$N_{H_2}^{sal} = 840 - 3\varepsilon$

Para calcular la extensión máxima se igualan a cero las moles de salida de cada compuesto y se calcula ε.

Para el N2 se obtiene:

$NN_2^{sal} = 230 - \varepsilon = 0$

$\therefore \varepsilon = 230$ kgmol/hr

Para el H2 se obtiene:

$NH_2^{sal} = 840 - 3\varepsilon = 0$

$\therefore \varepsilon = 280$ kgmol/hr

De estos dos valores de ε)230 y 280= el más pequeño, 230 kgmol/hr, es la extensión máxima de la reacción, el N_2 es el reactivo limitante y el H_2 se encuentra en exceso. Para apreciar lo anterior con más claridad se presenta una tabla con difrentes valores de ε y se dá la salida del reactor. Note que nunca pueden ser NEGATIVOS los moles de salida de un compuesto.

EFLUENTE DEL REACTOR (kgmol/hr)				
ε (kgmol/hr)	N_2	H_2	NH_3	**Totales**
0	230	840	0	1070
80	150	600	160	910
230	0	150	460	610
250	-20	90	500	570
280	-50	0	560	510
300	-70	-60	600	470

30. CONCEPTOS ADICIONALES

Para ilustrar los siguientes conceptos considere la reacción:

$N_2 + 3H_2 \dashrightarrow 2NH_3$

y que se tiene una alimentación al reactor de 150 kgmol/hr de N_2 y 390 kgmol-hr de H_2.

a) % Conversión de un reactivo

$$\% \text{ Conversión} = \left[\frac{N_i^{ent} - N_i^{sal}}{N_i^{ent}} \right] \times 100$$

$$\% \text{ Conversión} = \left[\frac{vi\ \varepsilon}{N_i^{ent}} \right] \times 100$$

$$N_i^{sal} = N_i^{ent} \left[1 - \frac{\% \text{ Conversión}}{100} \right]$$

Si se tiene una conversión del 85% del H_2 entonces:

$$N_{H2}^{sal} = 390 \left[1 - \frac{85}{100} \right] = 390 \quad (1 - 0.85)$$

$$N_{H2}^{sal} = N_{H2}^{ent} - 3\varepsilon$$

$$58.5 = 390 - 3\varepsilon$$

$$\therefore\ \varepsilon = 110.5 \text{ kgmol/hr}$$

Note que la extensión máxima en este caso es de 130 kgmol/hr.
La composición del efluente del reactor es:

$N_{N2}^{sal} = 150 - 110.5 = 39.5$ kgmol/hr

$N_{H2}^{sal} = 390 - 3 \times 110.5 = 58.5$ kgmol/hr

$N_{NH3}^{sal} = 2 \times 110.5 = 221$ kgmol/hr

Nota: Solo los reactivos limitantes pueden llegar a una conversión del 100%.

b) % CONVERSION DE UNA REACCION

Se define como el % de conversión del reactivo limitante. Se puede demostrar que:

$$\% \text{ Conversión de una reacción} = \frac{\varepsilon}{\varepsilon max} \times 100$$

c) % PRODUCCION DE UN PRODUCTO UNA REACCION

$$\% \text{ Producción de i} = \frac{(N_i)\text{producidos}}{(N_i)\text{producidos máximos}} \times 100$$

La producción máxima de un producto se calcula con la extensión máxima de la reacción εmax.

$$\% \text{ Producción de } i = \left[\frac{\nu i\ \varepsilon}{\nu i\ \varepsilon max.} \right] \times 100$$

o bien

$$\% \text{ Producción de } i = \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon max.} \right] \times 100$$

31. NOTACION UTILIZADA PARA PROBLEMAS CON REACCION QUIMICA

Sean A, B, C corrientes en un proceso a régimen permanente:

A, B, C = Flujos molares de las corrientes

X_i^A, X_i^B, X_i^C = Fracción mol del componente i en cada una de las corrientes.

N_i^A, N_i^B, N_i^C = Flujo molar del componente i en cada una de las corrientes.

$$\boxed{\begin{array}{c} N_i^A = X_i^A\, A \\ N_i^B = X_i^B\, B \\ N_i^C = X_i^C\, C \end{array}}$$

En procesos batch la cantidad de Ni representará los moles de i presentes en la mezcla.

32. COMO RESOLVER UN PROBLEMA DE BALANCE DE MATERIA

Con la finalidad de atacar los problemas de balances de materia de una forma ordenada, íntegral y eficiente, en este trabajo se proponen los siguientes pasos:

1. Entender que hace el proceso, la función de cada equipo, por lo menos cualitativamente. Dicho de otra manera, cuál es la finalidad del equipo, qué cambios sufren las corrientes, qué fases se forman, etc.

2. Escoger si se va a plantear el problema en moles o en masa. En el caso de balances de materia en sistemas sin reacción química puede utilizarse indiferentemente moles o masa. En el caso de balances de materia en sistemas reaccionantes, por simplicidad de cálculos es conveniente trabajar siempre en moles.

3. Seleccionar el sistema de interés, identificar sus fronteras. Es de suma importancia delimitar el sistema para no incluir corrientes o equipos que no forman parte de él.

4. Identificar las corrientes que forman parte del sistema: entradas, salidas, recirculaciones, corrientes intermedias, etc.

5. Identificar los equipos. Añadir equipos artificiales cuando se junten o dividan corrientes.

6. Asignar los valores contenidos en el enunciado del problema a las variables correspondientes. Para poder identificar una corriente cualquiera de un proceso, es necesario conocer el flujo y su composición. Debido a que la suma de las fracciones mol o peso en una corriente es igual a 1, basta con conocer el flujo y n-1 composiciones para especificar la corriente. Estas son las variables independientes..

7. Establecer una base de cálculo, solo cuandos sea necesario. Existen problemas en los cuales no se asigna valor a ninguno de los flujos totales de las corrientes. Para propósitos de cálculo puede asignarse una magnitud arbitraria al flujo de cualquiera de las corrientes. Esta selección no afecta el resultado del problema, ya que el resto de los flujos serán proporcionales a ella.

8. Realizar un análisis de las variables que intervienen en el proceso, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas. Hacer un conteo de las variables independientes.

9. Establecer las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema. Estas son ecuaciones que incluyen diversas especificaciones que se imponen en el sistema. Estas relaciones, sea cual fuere la que aparezca en un problema particular, se manejan simplemente como ecuaciones adicionales independientes.

10. Establecer las ecuaciones de balance de materia: ecuación de balance total y ecuaciones de balance por componente. Si se tienen n componentes, entonces es posible establecer n ecuaciones de balance por componente. Recordar que sólo se utilizarán para la resolución, las ecuaciones independientes. En general, en un sistema con n componentes, la ley de conservación de la masa originará n+1 ecuaciones, en las cuales, sólo n son independientes. Esto se debe a que siempre se podrá generar la ecuación n+1 a partir de las otras. Por ejemplo, si se suman las ecuaciones de balance de materia por cada componente se obtiene la ecuación de balance total.

11. Establecer un análisis de grados de libertad. Este determinará si el problema tiene solución, se encuentra subespecificado ó no tiene solución debido a que está mal planteado.
Los grados de libertad están definidos de la siguiente forma:
Grados de libertad = Número de incógnitas - Número de ecuaciones
Cuando los grados de libertad son iguales a cero, significa que el problema se encuentra bien especificado y tiene solución única.
Cuando los grados de libertad son mayores a cero, significa que el problema se encuentra subespecificado, esto es, que se deben fijar algunas variables para que el problema tenga solución única.
En el caso de que los grados de libertad sean menores a cero, significa que el problema se encuentra mal planteado y no tiene solución. En este caso es necesario verificar los datos.

12. De acuerdo al análisis de grados de libertad, determinar una estrategia de resolución, es decir, un camino a seguir para llegar a la solución.

13. Resolver el problema numéricamente.

14. Comprobar los resultados obtenidos.

15. En el caso de sea necesario, realizar comentarios derivados de los resultados numéricos.

III. Problemas sobre conceptos básicos

PROBLEMA 1. TRANSFORMACION DE FLUJOS Y COMPOSICIONES DE MASA A MOLES.

Objetivo: Dadas las especificaciones de una corriente de proceso, se pretende que el estudiante maneje de una forma fluida las unidades de flujo y composición y la transformación de masa a moles.

Del proceso de obtención del amoniaco se da a continuación las especificaciones de la corriente correspondiente al efluente del reformador primario:

COMPONENTE		FLUJO MASICO (kg/hr)
Nitrógeno	(N_2)	465.28
Argón	(Ar)	8.61
Hidrógeno	(H_2)	7,791.83
Monóxido de carbono	(CO)	15,077.09
Dióxido de carbono	(CO_2)	24,774.60
Metano	(CH_4)	9,447.61
Agua	(H_2O)	76,539.22
Densidad	(kg/m^3)	9.645

A partir de la información anterior calcule:
1. La fracción masa.
2. El porciento en masa.
3. El flujo molar.
4. La fracción mol.
5. El porciento en mol.
6. El peso molecular promedio.
7. El flujo volumétrico.
8. El porciento en masa base seca.
9. El porciento en mol base seca.

SOLUCION:

Se le llamará a la corriente del reformador primario corriente "A".

1. CALCULO DE LA FRACCION MASA

La fracción masa o peso es la relación entre la masa de cierto componente y la masa total:

$$\textbf{Fracción masa del componente i} = \frac{\textbf{Masa del componente}_i}{\textbf{Masa total de A}}$$

Ahora bien, en el caso de la corriente de este problema, las masas están referidas a una unidad de tiempo (masa por unidad de tiempo), si esta unidad de tiempo es la misma, entonces la fracción masa se puede expresar como un cociente de flujos másicos:

$$\boxed{\textbf{Fracción masa del componente i} = \frac{\textbf{Flujo másico del componente i}}{\textbf{Flujo másico total de A}}}$$

Si se analiza dimensionalmente la expresión anterior se tienen las siguientes unidades:

$$\text{Fracción masa} = \frac{\dfrac{\text{Masa del componente i}}{\text{Unidad de tiempo}}}{\dfrac{\text{Masa total de A}}{\text{Unidad de tiempo}}}$$

De tal forma que si la unidad de tiempo es la misma, se elimina y quedan las mismas unidades que la expresión inicial:

$$\text{Fracción masa del componente i} = \frac{\text{Masa del componente i}}{\text{Masa total de A}}$$

El flujo másico total es la suma de los flujos másicos de todos los componentes presentes en la corriente:

$$\text{Flujo másico total [A]} = \sum_{i=1}^{7} A_i = A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5 + A_6 + A_7$$

$$A = 465.28 + 8.61 + 7{,}791.83 + 15{,}077.09 + 24{,}774.60 + 9{,}447.61 + 76{,}539.22$$

$$A = 134{,}104.24 \text{ kg/hr}$$

Entonces la fracción masa se obtiene al efectuar el cociente de cada uno de los flujos másicos (por componente) entre el flujo másico de A:

COMPONENTE	FRACCION MASA $= \frac{\text{Flujo másico del componente i}}{\text{Flujo másico de A}}$
Nitrógeno	$\frac{465.28}{134,104.24} = 0.00347$
Argón	$\frac{8.61}{134,104.24} = 0.00006$
Hidrógeno	$\frac{7,791.83}{134,104.24} = 0.05810$
Monóxido de carbono	$\frac{15,077.09}{134,104.24} = 0.11243$
Dióxido de carbono	$\frac{24,774.60}{134,104.24} = 0.18474$
Metano	$\frac{9,447.61}{134,104.24} = 0.07045$
Agua	$\frac{76,539.22}{134,104.24} = 0.57074$

Nota: la suma de las fracciones masa debe dar 1.

2. PORCIENTO EN MASA

A partir de la fracción masa, el porcentaje en masa se obtiene al multiplicar la fracción masa por 100.

Componente	**Fraccion masa**	**Porcentaje en masa = Fracción masa*100**
Nitrógeno	0.00347	0.347
Argón	0.00006	0.006
Hidrógeno	0.05810	5.810

Componente	Fraccion masa	Porcentaje en masa = Fracción masa*100
Monóxido de carbono	0.11243	11.243
Dióxido de carbono	0.18474	18.474
Metano	0.07045	7.045
Agua	0.57074	57.074

Nota: Al sumar el porcentaje en masa de todos los componentes, debe dar 100.

3. CALCULO DEL FLUJO MOLAR DE CADA COMPONENTE

El flujo molar del componente i en la corriente es el número de moles de ese componente por unidad de tiempo. Las especificaciones de la corriente A están dadas en kg/hr, es decir, flujo másico. Es necesario entonces transformar la masa a moles. Para transformar la masa a moles, es necesario utilizar el peso molecular de cada componente. El número de moles de cada componente es:

$$\boxed{\text{Número de moles} = \frac{\text{Masa}}{\text{Peso Molecular}}}$$

Como se están manejando flujos se tiene entonces:

$$\boxed{\frac{\text{Número de moles}}{\text{Unidad de tiempo}} = \frac{\text{Masa/Unidad de tiempo}}{\text{Peso Molecular}}}$$

Que es lo mismo que:

$$\boxed{\text{Flujo molar} = \frac{\text{Flujo másico}}{\text{Peso Molecular}}}$$

El peso molecular de un componente se obtiene al sumar el peso atómico de cada uno de los elementos presentes en dicho compuesto multiplicado por el número de átomos de cada uno. El peso atómico se lee de la tabla periódica de los elementos.

Por ejemplo, calcular el peso molecular del dióxido de carbono (CO_2):

Leyendo de la tabla periódica de los elementos se obtienen los pesos atómicos del carbono y del oxígeno:

Carbono 12.01 kg/kgmol
Oxígeno 16.00 kg/kgmol

En una molécula de dióxido de carbono se tienen presentes un átomo de carbono y dos átomos de oxígeno, entonces el peso molecular del dióxido de carbono (CO_2) sería:

$$PM_{CO2} = 12.01 + 2(16.00)$$
$$PM_{CO2} = 44.01 \text{ kg/kgmol}$$

Es decir, un kgmol de dióxido de carbono tiene una masa de 42.01 kg. Es interesante hacer notar que la relación del peso molecular (kg/kgmol) podría estar en otras unidades, por ejemplo lb/lbmol, g/gmol, tonelada/tonelada mol, siempre y cuando se guarde la relación dimensional. Esto es, el peso molecular del CO_2 es también 44.01 g/gmol ó 44.01 lb/lbmol.
De la misma forma que se calculó el peso molecular del dióxido de carbono, se calcula el peso molecular de cada uno de los demás compuestos, así:

COMPONENTE	FORMULA	CALCULO DEL PESO MOLECULAR	PESO MOLECULAR
Nitrógeno	(N_2)	2(14.01)	28.02
Argón	(Ar)	1(39.95)	39.95
Hidrógeno	(H_2)	2(1.01)	2.02
Monóxido de carbono	(CO)	1(12.01) + 1(16.00)	28.01
Dióxido de carbono	(CO_2)	1(12.01) + 2(16.00)	44.01
Metano	(CH_4)	1(12.01) + 4(1.01)	16.05
Agua	(H_2O)	2(1.01) + 1(16.00)	18.02

Con el peso molecular y el flujo másico que se da de dato del problema, es posible calcular el flujo molar (moles de cada componente/unidad de tiempo).

$$\text{Flujo molar del componente i} = \frac{\text{Flujo másico del componente i}}{\text{Peso Molecular del componente i}}$$

No resulta conveniente que el estudiante memorice este tipo de expresiones. Basta con que conozca las unidades que desea obtener y de acuerdo a la información existente, manipule las expresiones de tal forma que obtenga dichas unidades. Por ejemplo, en el caso anterior se sabe que las unidades del flujo molar son de moles por unidad de tiempo. Si se dispone del flujo másico en kg/hr y el peso molecular cuyas unidades son kg/kgmol, si se multiplicaran ambas expresiones se obtiene la siguiente expresión:

$$\left|\frac{kg}{hr}\right|\left|\frac{kg}{kgmol}\right| = \left|\frac{kg^2}{kgmol\ hr}\right|$$

Las unidades obtenidas de esta forma no son las correspondientes al flujo molar (moles/hr) entonces la operación que se debe hacer para eliminar los kg, es dividir entre el peso molecular y no multiplicar por éste como se hizo anteriormente. Las unidades quedaran entonces:

$$\frac{\frac{kg}{hr}}{\frac{kg}{kgmol}} = \frac{kgmol}{hr}$$

Calculando entonces el flujo molar de cada componente se tiene:

COMPONENTE	FLUJO MASICO [kg/hr]	PESO MOLECULAR [kg/kgmol]	FLUJO MOLAR [kgmol/hr]
Nitrógeno	465.28	28.02	16.605
Argón	8.61	39.95	0.216
Hidrógeno	7,791.83	2.02	3,857.340
Monóxido de carbono	15,077.09	28.01	538.275
Dióxido de carbono	24,774.60	44.01	562.931
Metano	9,447.61	16.05	588.640
Agua	76,539.22	18.02	4,247.46

4. CALCULO DE LA FRACCION MOL

La fracción mol de un componente es la relación entre el número de moles de ese componente y el número total de moles de la mezcla:

$$\boxed{\text{Fracción mol del componente i} = \frac{\text{Moles del componente i}}{\text{Moles totales de la mezcla}}}$$

ó bien, la fracción mol puede expresarse como la relación de los flujos molares:

$$\boxed{\text{Fracción mol del componente i} = \frac{\text{Flujo molar del componente i}}{\text{Flujo molar total de la mezcla}}}$$

Si se analizan las unidades, la unidad de tiempo se cancela (siempre y cuando se encuentre en las mismas unidades). Supóngase que el flujo molar se encuentra en moles/hora:

$$\text{Fracción mol del componente i} = \left| \frac{\dfrac{\text{moles del componente i}}{\text{hr}}}{\dfrac{\text{moles totales de la mezcla}}{\text{hr}}} \right|$$

$$\text{Fracción mol del componente i} = \frac{\text{Flujo molar del componente i}}{\text{Flujo molar total de la mezcla}}$$

Y quedaría entonces:

$$\text{Fracción mol del componente i} = \frac{\text{Flujo molar del componente i}}{\text{Flujo molar total de la mezcla}}$$

El flujo molar de cada componente se calculó en el inciso anterior. El flujo molar de la mezcla es la suma de los flujos individuales, entonces:

$$\text{Flujo molar de A} = \sum_{i=1}^{7} \text{Flujo molar del componente i}$$

$$A = 16.605 + 0.216 + 3{,}857.34 + 538.275 + 562.931 + 588.64 + 4{,}247.46$$
$$A = 9{,}811.467 \text{ kgmol/hr}$$

La fracción mol se calcula a continuación al dividir cada uno de los flujos molares por componente entre el flujo molar total:

COMPONENTE	FLUJO MOLAR [kgmol/hr]	FRACCION MOL
Nitrógeno	16.605	0.00169
Argón	0.216	0.00002
Hidrógeno	3,857.340	0.39315
Monóxido de carbono	538.275	0.05486
Dióxido de carbono	562.931	0.05737
Metano	588.640	0.06000
Agua	4,247.460	0.43291
Total	9,811.467	1.00000

5. CALCULO DEL PORCENTAJE EN MOL

Calculada la fracción mol, se calcula el porcentaje en mol al multiplicar ésta por 100:

COMPONENTE	FRACCION MOL	PORCENTAJE EN MOL
Nitrógeno	0.00169	0.169
Argón	0.00002	0.002
Hidrógeno	0.39315	39.315
Monóxido de carbono	0.05486	5.486
Dióxido de carbono	0.05737	5.737
Metano	0.06000	6.000
Agua	0.43291	43.291
Total	1.00000	100.000

6. CALCULO DEL PESO MOLECULAR PROMEDIO

El peso molecular promedio de la corriente A, se puede calcular de dos formas:

a) $\overline{PM} = \sum_{i=1}^{n} PM_i \, x_i$

En donde $\overline{PM}$ = Peso molecular promedio de la mezcla.
PM_i = Peso molecular del componente i.
x_i = Fracción mol del componente i.

Anteriormente se calculó el peso molecular de cada uno de los compuestos presentes en A, así como las fracciones mol, entonces se tiene que:

COMPONENTE	FRACCION MOL	PESO MOLECULAR	FRACCION MOL*PESO MOLECULAR
Nitrógeno	0.00169	28.02	0.0474
Argón	0.00002	39.95	0.0008
Hidrógeno	0.39315	2.02	0.7942
Monóxido de carbono	0.05486	28.01	1.5366
Dióxido de carbono	0.05737	44.010	2.5249
Metano	0.06000	16.05	0.9630
Agua	0.43291	18.02	7.8010

Entonces el peso molecular promedio sería la suma de todos los valores de la última columna:

$$\overline{PM} = \sum_{i=1}^{n} PM_i \, x_i$$

$$\overline{PM} = 0.0474 + 0.0008 + 0.7942 + 1.5366 + 2.5249 + 0.963 + 7.8010$$

$$\overline{PM} = 13.67 \text{ kg/kgmol}$$

b) Las unidades del peso molecular son masa/moles, si se quiere obtener el peso molecular de la mezcla entonces:

$$\overline{PM} = \frac{\text{Masa total}}{\text{Moles totales}}$$

O bien, como un cociente de flujos referidos a la misma unidad de tiempo:

$$\overline{PM} = \frac{\text{Flujo másico total}}{\text{Flujo molar total}}$$

Entonces el peso molecular promedio calculado de esta forma sería:

$$\overline{PM} = \frac{\text{Flujo másico total}}{\text{Flujo molar total}}$$

$$\overline{PM} = \frac{134{,}104.24 \ \text{kg/hr}}{9{,}811.467 \ \text{kmol/hr}}$$

$$\overline{PM} = 13.67 \ \text{kg/kgmol}$$

Nótese que el peso molecular promedio calculado de ambas formas da el mismo resultado (con un pequeño error de redondeo en algunos casos).

7. FLUJO VOLUMETRICO

El flujo volumétrico es el volumen por unidad de tiempo. Si se tiene información de flujos másicos, para transformar masa en volumen, es necesario utilizar la densidad cuyas unidades son de masa por unidad de volumen (masa/volumen). Se tiene como dato la densidad de la corriente A:

Densidad = 9.645 kg/m^3

Como las unidades del flujo volumétrico son de volumen/tiempo, entonces es necesario dividir el flujo másico entre la densidad para obtener dichas unidades:

$$\text{Flujo volumétrico} = \frac{\text{Flujo másico}}{\text{Densidad}}$$

Analizando las unidades de la expresión anterior:

$$\text{Flujo volumétrico} = \frac{\dfrac{\text{Masa}}{\text{Tiempo}}}{\dfrac{\text{Masa}}{\text{Volumen}}} = \frac{\text{Volumen}}{\text{Tiempo}}$$

Calculando entonces el flujo volumétrico de la corriente A:
Flujo volumétrico = (134,104.24 kg/hr)(1/9.645 m^3/kg)
Flujo volumétrico = 13,904.02 m^3/hr

8. PORCIENTO EN MASA BASE SECA

Para calcular el porciento en masa base seca de la corriente A no se toma en cuenta el agua:

$$\text{Fracción masa en base seca} = \frac{\text{Flujo másico del componente i}}{\text{Flujo másico total base seca}}$$

Porciento en masa base seca = Fracción masa en base seca * 100

COMPONENTE	FLUJO MASICO [kg/h]
Nitrógeno	465.28
Argón	8.61
Hidrógeno	7,791.83
Monóxido de carbono	15,077.09
Dióxido de carbono	24,774.60
Metano	9,447.61

Flujo másico total base seca = Σ Flujo másico del componente i
i=todos los componentes excepto agua

Flujo másico total base seca = 465.28 + 8.61 + 7,791.83 + 15,077.09 + 24,774.60 + 9,447.61
Flujo másico total base seca = 57,565.02 kg/hr

Entonces la fracción masa de cada componente en base seca es el flujo másico de ese componente entre el flujo másico total en base seca (57,565.02 kg). El porcentaje en masa base seca se calcula al multiplicar la fracción masa base seca por 100:

COMPONENTE	FLUJO MASICO [kg/hr]	FRACCION MASA BASE SECA	PORCENTAJE EN MASA BASE SECA
Nitrógeno	465.28	0.00808	0.808
Argón	8.61	0.00015	0.015
Hidrógeno	7,791.83	0.13536	13.536
Monóxido de carbono	15,077.09	0.26191	26.191
Dióxido de carbono	24,774.60	0.43038	43.038
Metano	9,447.61	0.16412	16.412
TOTAL BASE SECA	57,565.02	1	100

9. PORCIENTO EN MOL BASE SECA

Para este cálculo se partirá que se conoce solamente la fracción masa base seca de los componentes y el flujo másico total base seca y los pesos moleculares de los componentes.

Si el flujo másico total base seca (57,565.02 kg/hr) se multiplica por la fracción masa base seca, entonces se tiene el flujo másico de cada componente. Para transformar masa en moles es necesario utilizar el peso molecular de cada componente, entonces para el nitrógeno (PM = 28.020, fracción masa = 0.00808), el flujo molar se calcula con:

$$\text{Flujo molar de nitrógeno} = 57{,}565.02\ \text{kg base seca}\ \left|\ \frac{0.00808\ \text{kg de } N_2}{\text{kg base seca}}\ \right|\ \left|\ \frac{1\ \text{kmol}}{28.020\ \text{kg}}\ \right|$$

Flujo molar de nitrógeno = 16.6 kmol/hr

Calculando ahora el flujo molar para los demás componentes:

COMPONENTE	FRACCION MASA BASE SECA	PESO MOLECULAR	FLUJO MOLAR kgmol/hr
Nitrógeno	0.00808	28.02	16.6
Argón	0.00015	39.95	0.216
Hidrógeno	0.13536	2.02	3,857.434
Monóxido de carbono	0.26191	28.01	538.27
Dióxido de carbono	0.43038	44.01	562.94
Metano	0.16412	16.05	588.63

Note que estos valores son idénticos a los obtenidos en el apartado 3. de este problema.
Flujo molar total base seca = Σ Flujos molares de todos los componentes excepto el agua.
Flujo molar total base seca = 16.6 + 0.216 + 3,857.43 + 538.27 + 562.94 + 588.63
Flujo molar total base seca = 5,564.086 kmol/hora

Entonces al dividir el flujo molar de cada componente (excepto el agua) entre el flujo molar total base seca (5,564.086 kmol/hora), se obtiene la fracción mol base seca de cada componente. El porcentaje en mol se obtiene al multiplicar la fracción mol por 100:

COMPONENTE	FLUJO MOLAR kgmol/hr	FRACCION MOL BASE SECA	PORCENTAJE EN MOL BASE SECA
Nitrógeno	16.6	0.00298	0.298
Argón	0.216	0.00004	0.004
Hidrógeno	3,857.43	0.69327	69.327
Monóxido de carbono	538.27	0.09674	9.674
Dióxido de carbono	562.94	0.10117	10.117
Metano	588.63	0.10579	10.579
Total	5,564.086	1	100

Otra forma de calcular las fracciones mol, a partir de las fracciones masa, es utilizar una base de cálculo. Supongamos que no tomamos en cuenta el flujo molar base seca. Si se toma una base de 100 kg/hr (base seca) y se multiplica por la fracción masa base seca entonces se tiene el flujo másico de cada componente. Para transformar masa en moles es neceeario utlizar el peso molecular de cada componente, entonces para el nitrógeno (PM=28.020, fracción masa=0.00808) el flujo molar se calcularía:

$$\text{Flujo molar de nitrógeno base seca} = \left| \frac{100 \text{ kg}}{\text{hr}} \right| \left| \frac{0.00808 \text{ kg de } N_2}{\text{kg base seca}} \right| \left| \frac{1 \text{ kmol}}{28.020 \text{ kg}} \right|$$

Flujo molar de nitrógeno base seca = 0.0288 kmol/hr
Calculando ahora el flujo molar para los demás componentes:

COMPONENTE	FRACCION MASA BASE SECA	PESO MOLECULAR	FLUJO MOLAR
Nitrógeno	0.00808	28.020	0.0288
Argón	0.00015	39.950	0.0004
Hidrógeno	0.13536	2.02	6.70
Monóxido de carbono	0.26191	28.010	0.9351
Dióxido de carbono	0.43038	44.010	0.9779
Metano	0.16412	16.05	1.0226

Flujo molar total base seca = Σ Flujos molares de todos los componentes base seca
Flujo molar total base seca = 0.0288 + 0.0004 + 6.70 + 0.9351 + 0.9779 + 1.0226
Flujo molar total base seca = 9.66 kmol/hora

Entonces al dividir el flujo molar de cada componente entre el flujo molar total base seca (9.66kmol/hora), se obtiene la fracción mol base seca de cada componente. El porcentaje en mol se obtiene al multiplicar la fracción mol por 100:

COMPONENTE	FLUJO MOLAR	FRACCION MOL BASE SECA	PORCENTAJE EN MOL BASE SECA
Nitrógeno	0.0288	0.00298	0.298
Argón	0.0004	0.00004	0.004
Hidrógeno	6.70	0.6936	69.36
Monóxido de carbono	0.9351	0.09675	9.675
Dióxido de carbono	0.9779	0.10118	10.118
Metano	1.0226	0.10580	10.590
Total	9.66	1	100

PROBLEMA 2. TRANSFORMACIÓN DE FLUJOS Y COMPOSICIONES DE MOLES A MASA.

Objetivo:** **Dadas las especificaciones de una corriente de proceso, se pretende que el estudiante maneje de una forma fluida las unidades de flujo y composición y su transformación de moles a masa.

Se da a continuación las especificaciones de la corriente correspondiente al efluente del reformador secundario del proceso de obtención del amoníaco:

COMPONENTE		FRACCION MOL
Nitrógeno	(N_2)	0.13975
Argón	(Ar)	0.00179
Hidrógeno	(H_2)	0.35554
Monóxido de Carbono	(CO)	0.08018
Dióxido de Carbono	(CO_2)	0.04968
Metano	(CH_4)	0.00208
Agua	(H_2O)	0.37098
		1.00000

A partir de la información anterior calcule:

1 Flujo molar por componente en base a 1000 mol/hr de mezcla.
2. Flujo másico.
3. Fracción peso.
4. Porcentaje en mol.
5. Porcentaje en masa.
6. Peso molecular promedio.
7. Porciento en masa base seca.
8. Porciento en mol base seca.

SOLUCION:

Se le llamará a la corriente efluente del reformador secundario corriente B.

1. FLUJO MOLAR POR COMPONENTE

Tomando como base un flujo molar de 1000 moles/hr de mezcla, el flujo molar por componente se calcularía:

Flujo molar por componente = Flujo molar * Fracción mol

Analizando las unidades:

$$\text{Flujo molar por componente} = \left|\frac{\text{moles totales de mezcla}}{\text{hr}}\right| \left|\frac{\text{moles del componente i}}{\text{moles totales de mezcla}}\right|$$

$$\text{Flujo molar por componente} = \frac{\text{moles del componente i}}{\text{hr}}$$

Calculando entonces el flujo molar por componente:

COMPONENTE	FRACCION MOL	FLUJO MOLAR POR COMPONENTE moles/hr
Nitrógeno	0.13975	139.75
Argón	0.00179	1.79
Hidrógeno	0.35554	355.54
Monóxido de Carbono	0.08018	80.18
Dióxido de Carbono	0.04968	49.68
Metano	0.00208	2.08
Agua	0.37098	370.98
	1.00000	1000.00

2. FLUJO MASICO.

Las unidades del flujo másico son: kg del componente i/unidad de tiempo. Las unidades del flujo molar son: moles del componente i/unidad de tiempo. Se utiliza el peso molecular para transformar la masa en moles. En este caso la operación que se debe de realizar es una multiplicación para tener consistencia en las unidades. Para el nitrógeno se tiene:

$$\frac{139.5 \text{ moles de } N_2}{\text{hr}} = \left| \frac{28.02 \text{ kg de } N_2}{1 \text{ mol de } N_2} \right| = \frac{3.9158 \text{ kg de } N_2}{\text{hr}}$$

Note que el peso molecular en este caso se utilizó con las unidades de g/mol, y fué necesario introducir un factor de conversión de unidades de g a kg.

COMPONENTE	FLUJO MOLAR	PESO MOLECULAR	FLUJO MASICO kg/hr
Nitrógeno	139.75	28.02	3.91580
Argón	1.79	39.95	0.07151
Hidrógeno	355.54	2.02	0.71819
Monóxido de Carbono	80.18	28.01	2.24584
Dióxido de Carbono	49.68	44.01	2.18642
Metano	2.08	16.05	0.03338
Agua	370.98	18.02	6.68506

3. CÁLCULO DE LA FRACCIÓN MASA.

La fracción masa o peso es la relación que existe entre la masa de cierto componente y la masa total:

$$\text{Fracción masa del componente i} = \frac{\text{Masa del componente i}}{\text{Masa total de B}}$$

A partir de los flujos másicos calculados en el inciso anterior es posible calcular la fracción masa como un cociente de flujos másicos:

$$\text{Fracción masa} = \frac{\text{Flujo másico del componente i}}{\text{Flujo másico total de B}}$$

Si se analiza dimensionalmente la expresión anterior se tienen las siguientes unidades:

$$\text{Fracción masa} = \frac{\dfrac{\text{Masa del componente i}}{\text{Unidad de tiempo}}}{\dfrac{\text{Masa total de B}}{\text{Unidad de tiempo}}}$$

De tal forma que si la unidad de tiempo es la misma, se elimina y quedan exactamente las mismas unidades que la expresión inicial:

$$\text{Fracción masa del componente i} = \frac{\text{Masa del componente i}}{\text{Masa total de B}}$$

El flujo másico total es la suma de los flujos másicos de todos los componentes presentes en la corriente:

$$\text{Flujo másico total [B]} = \sum_{i=1}^{7} B_i = B_i + B_2 + B_3 + B_4 + B_5 + B_6 + B_7$$

B = 3.91580+0.07151+0.71819+2.24584+2.18642+0.03338+6.68506

B = 15.8562 kg de mezcla/hr

Entonces la fracción masa se obtiene al efectuar el cociente de cada uno de los flujos másicos (por componente) entre el flujo másico de B:

COMPONENTE	FRACCION MASA = $\frac{\text{Flujo másico del componente i}}{\text{Flujo másico de A}}$
Nitrógeno	$\frac{3{,}915.80}{15{,}856.2} = 0.0247$
Argón	$\frac{71.51}{15{,}856.2} = 0.0045$
Hidrógeno	$\frac{718.19}{15{,}856.2} = 0.0453$
Monóxido de Carbono	$\frac{2{,}245.84}{15{,}856.2} = 0.1416$
Dióxido de Carbono	$\frac{2{,}186.42}{15{,}856.2} = 0.1379$
Metano	$\frac{33.38}{15{,}856.2} = 0.0021$
Agua	$\frac{6{,}685.06}{15{,}856.2} = 0.4216$

Nota: La suma de las fracciones masa debe dar 1.

4. PORCENTAJE EN MOL

Las especificaciones de la corriente B están dadas en fracción mol. Para calcular el porcentaje en mol basta multiplicar esta fracción mol por 100.

COMPONENTE	FRACCION MOL	PORCENTAJE EN MOL
Nitrógeno	0.13975	13.975
Argón	0.00179	1.790
Hidrógeno	0.35554	35.554
Monóxido de Carbono	0.08018	8.018
Dióxido de Carbono	0.04968	4.968
Metano	0.00208	2.080
Agua	0.37098	37.098
Total	1	100

5. PORCENTAJE EN MASA

A partir de la fracción masa calculada en el inciso 3, se calcula el porcentaje en masa al multiplicarla por 100:

COMPONENTE	FRACCION MASA	PORCENTAJE EN MASA
Nitrógeno	0.0247	2.47
Argón	0.0045	0.45
Hidrógeno	0.0453	4.53
Monóxido de Carbono	0.1416	14.16
Dióxido de Carbono	0.1379	13.79
Metano	0.0021	0.21
Agua	0.4216	42.16

6. PESO MOLECULAR PROMEDIO

$$\overline{PM} = \sum_{i=1}^{n} PM_i \, x_i$$

En donde $\overline{PM}$ = peso molecular promedio de la mezcla
PM_i = peso molecular del componente i.
x_i = fracción mol del componente i.

COMPONENTE	PESO MOLECULAR	FRACCION MOL	PESO MOLECULAR*FRACCION MOL
Nitrógeno	28.02	0.13975	3.916
Argón	39.95	0.00179	0.072
Hidrógeno	2.02	0.35554	0.718
Monóxido de Carbono	28.01	0.08018	2.246
Dióxido de Carbono	44.01	0.04968	2.186
Metano	16.05	0.00208	0.033
Agua	18.02	0.37098	6.685

Entonces el peso molecular promedio de B sería la suma de todos los valores de la última columna del cuadro anterior:

$$\overline{PM} = \sum_{i=1}^{n} PM_i \, x_i$$

$$\overline{PM} = 3.916 + 0.072 + 0.718 + 2.246 + 2.186 + 0.033 + 6.685$$

$$\overline{PM} = 15.86 \text{ g/mol}$$

Calculado el peso molecular promedio de otra forma:

$$\overline{PM} = \frac{\text{Masa total}}{\text{Moles totales}}$$

O bien, como un cociente de flujos referidos a la misma unidad de tiempo:

$$\overline{PM} = \frac{\text{Flujo másico total}}{\text{Flujo molar total}}$$

Se tomo como base un flujo molar total de 1000 moles/hr, por otro lado el flujo másico total se calculó en el inciso 3 (15.8562 kg/hr)(Nota importante: Observar que la base de cálculo debe ser la misma para los flujos molar y másico para que se tenga consistencia en las unidades).
Entonces el peso molecular promedio calculado de esta forma sería:

$$\overline{PM} = \frac{15{,}856.2 \ \text{kg/hr}}{1{,}000 \ \text{kmol/hr}}$$

$$\overline{PM} = 15.86 \text{ kg/kmol}$$

7. PORCIENTO EN MASA BASE SECA

Para calcular el porciento en masa base seca de la corriente B se desarrollan los cálculos de forma similar a los incisos 3 y 5 sin tomar en cuenta el agua:

$$\text{Porciento en masa base seca} = \frac{\text{Flujo másico del componente i en base seca}}{\text{Flujo másico total base seca}} * 100$$

Porciento en masa base seca = Fracción masa en base seca * 100

COMPONENTE	FLUJO MASICO [kg del componente i/hr]
Nitrógeno	3.91580
Argón	0.07151
Hidrógeno	0.71819
Monóxido de Carbono	2.24584
Dióxido de Carbono	2.18642
Metano	0.03338
Agua	6.68506

Flujo másico base seca = Flujo másico total - Flujo másico del agua
Flujo másico base seca = 15.8562 - 6.68506
Flujo másico base seca = 9.17114 kg/hr

COMPONENTE	FLUJO MASICO [kg del componente I/hr]	FRACCION MOL BASE SECA	PORCIENTO EN MASA BASE SECA
Nitrógeno	3.91580	0.427	42.70
Argón	0.07151	0.0078	0.78
Hidrógeno	0.71819	0.0783	7.83
Monóxido de carbono	2.24584	0.2449	24.49
Dióxido de carbono	2.18642	0.2384	23.84
Metano	0.03338	0.0036	0.36

8. PORCIENTO EN MOL BASE SECA

A partir de los flujos molares por componente (calculados en el inciso 1) es posible calcular la fracción mol en base seca:

$$\text{Fracción mol base seca} = \frac{\text{Moles del componente i}}{\text{Moles totales base seca}}$$

O bien:

$$\text{Fracción mol base seca} = \frac{\text{Flujo molar del componente i}}{\text{Flujo molar base seca}}$$

COMPONENTE	FLUJO MOLAR POR COMPONENTE mol/hr
Nitrógeno	139.75
Argón	1.79
Hidrógeno	355.54
Monóxido de Carbono	80.18
Dióxido de Carbono	49.68
Metano	2.08
Agua	370.98

Flujo molar total = 1000 moles/hr (Recordar que fue la base de cálculo seleccionada)

Flujo molar base seca = Flujo molar total - Flujo molar del Agua
Flujo molar base seca = 1000 moles/hr - 370.98 moles/hr
Flujo molar base seca = 629.02 moles/hr

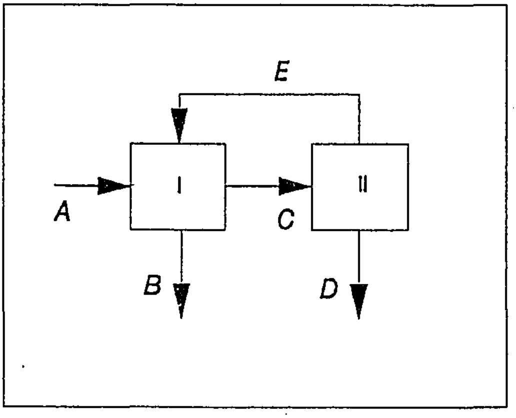
Entonces:

COMPONENTE	FLUJO MOLAR POR COMPONENTE mol/hr	FRACCION MOL BASE SECA	PORCIENTO EN MASA BASE SECA
Nitrógeno	139.75	0.2222	22.22
Argón	1.79	0.0028	0.28
Hidrógeno	355.54	0.5652	56.52
Monóxido de carbono	80.18	0.1275	12.75
Dióxido de carbono	49.68	0.0790	7.90
Metano	2.08	0.0033	0.33

PROBLEMA 3. VARIABLES Y ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA.

Objetivo: Dado un proceso identificar las variables involucradas y las ecuaciones de balance de materia que se pueden establecer.

Considere el siguiente proceso (cada caja representa un equipo), en donde la mezcla de alimentación está formada por 3 componentes: w, v y z. El proceso se encuentra a régimen permanente.



1. Identifique las variables asociadas a este proceso.

2. Plantee las ecuaciones de balance de materia en cada equipo y un balance global, el cual contenga todas las corrientes de entrada y salida al proceso total.

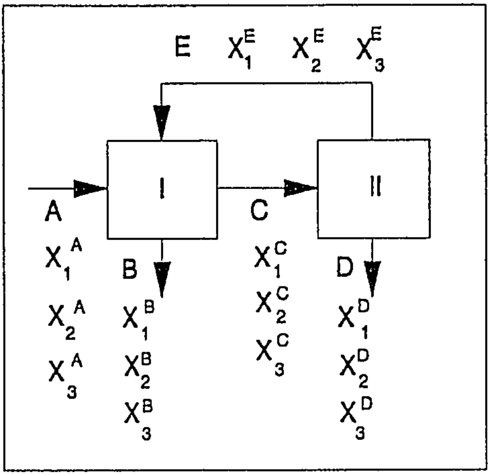
3. Plantee las relaciones adicionales que se derivan de los siguientes enunciados. (Suponga que se manejan flujos molares y composiciones en fracción mol)
a) El flujo molar de la corriente E es la tercera parte del flujo molar de la corriente A.
b) El flujo molar de z en la corriente A es cuatro veces mayor que en la corriente D.
c) El 80% del componente z que es alimentado al proceso es recuperado en la corriente E.
d) La relación molar de los componentes w y v en la alimentación es de 1:4

SOLUCION

Para identificar las corrientes se les asigna letras mayúsculas, de tal forma que para las 5 corrientes se les adignará las letras A, B, C, D y E.
A cada uno de los componentes se les asignará un número:
w: 1
v: 2
z: 3

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

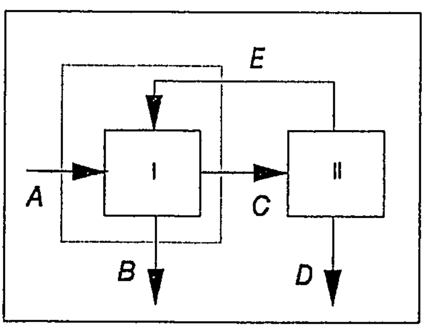
Cada corriente tiene 4 variables: Flujo y 3 composiciones, pero sólo 3 de ellas son independientes, el flujo y 2 composiciones. Recuerde que la fracción mol suma 1.0 y por lo tanto la otra composición se obtiene por diferencia.



2. ECUACIONES DE BALANCES DE MATERIA

Se plantearán los balances tomando como sistema cada equipo y todo el proceso.

SISTEMA: EQUIPO I



Ecuación general de balance para procesos a régimen permanente:

ENTRADAS = SALIDAS

Ecuación de balance total:

$$A + E = C + B \qquad \text{... (1)}$$

Hay 3 ecuaciones de balance por componente (n=3):

Para el componente 1:

$$AX_1^A + EX_1^E = CX_1^C + BX_1^B \qquad \text{... (2)}$$

Para el componente 2:

$$AX_2^A + EX_2^E = CX_2^C + BX_2^B \qquad \text{... (3)}$$

Para el componente 3:

$$AX_3^A + EX_3^E = CX_3^C + BX_3^B \qquad \text{... (4)}$$

De este sistema de 4 ecuaciones, solo 3 son independientes.
Para demostrar que solo 3 de las ecuaciones anteriores son independientes basta con manipular 3 de ellas y obtener la cuarta. Por ejemplo, si se suman las 3 ecuaciones por componente se tiene:

$$AX_1^A + EX_1^E = CX_1^C + BX_1^B \qquad \text{... (2)}$$

$$AX_2^A + EX_2^E = CX_2^C + BX_2^B \qquad \text{... (3)}$$

$$AX_3^A + EX_3^E = CX_3^C + BX_3^B \qquad \text{... (4)}$$

$$A(X_1^A + X_2^A + X_3^A) + E(X_1^E + X_2^{EA} + X_3^E) = C(X_1^C + X_2^C + X_3^C) + B(X_1^B + X_2^B + X_3^B) \qquad \text{...(4a)}$$

Como la suma de las fracciones mol de una corriente es igual a 1.0:

$$X_1^A+X_2^A+X_3^A = 1.0$$

$$X_1^E+X_2^E+X_3^E = 1.0$$

$$X_1^C+X_2^C+X_3^C = 1.0$$

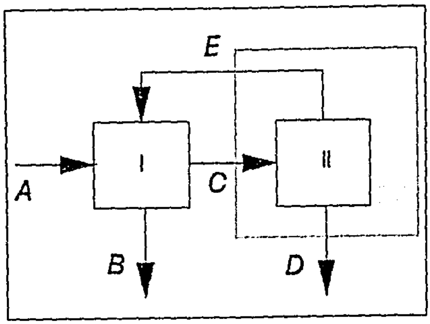
$$X_1^B+X_2^B+X_3^B = 1.0$$

La expresión (4a) se simplifica a:

$$A + E = C + B$$

que es precisamente la ecuación (1), de balance de materia total. De la misma forma como se escogieron las 3 ecuaciones de balance por componente, se podrían haber escogido dos de ellas y la de balance total para obtener la otra ecuación por componente.

SISTEMA: EQUIPO II:



Ecuación de balance total:

$$C = E + D \qquad \text{... (5)}$$

Ecuaciones por componente:

Para el componente 1:

$$CX_1{}^C = EX_1{}^E + DX_1{}^D \qquad \text{... (6)}$$

Para el componente 2:

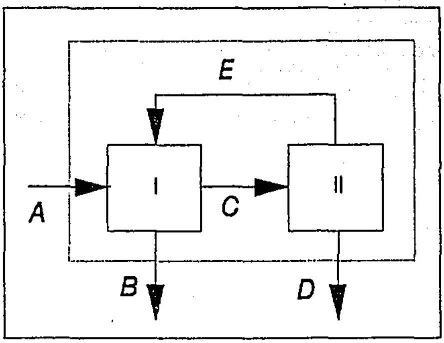
$$CX_2{}^C = EX_2{}^E + DX_2{}^D \qquad \text{... (7)}$$

Para el componente 3:

$$CX_3{}^C = EX_3{}^E + DX_3{}^D \qquad \text{... (8)}$$

De este sistema de 4 ecuaciones, solo 3 son independientes, por la misma razón enunciada en las ecuaciones del equipo I.

SISTEMA: EL PROCESO COMO UN TODO



Ecuación de balance total:

$$A = B + D \qquad \text{... (9)}$$

Ecuaciones por componente:

Para el componente 1:

$$AX_1^A = BX_1^B + DX_1^D \qquad \text{... (10)}$$

Para el componente 2:

$$AX_2^A = BX_2^B + DX_2^D \qquad \text{... (11)}$$

Para el componente 3:

$$AX_3^A = BX_3^B + DX_3^D \qquad \text{... (12)}$$

3. CONTABILIDAD DE VARIABLES Y ECUACIONES INDEPENDIENTES

La siguiente pregunta que se tiene que resolver es determinar el número de ecuaciones independientes. Como se indicó anteriormente, de las ecuaciones para el equipo I (Ecuación 1 a 4) sólo tres de ellas son independientes. Lo mismo sucede para las ecuaciones el equipo II y las correspondientes al balance global. Lo anterior da un total de nueve ecuaciones. Pero, ¿son estas ecuaciones independientes?. Si se suman las ecuaciones 1 y 5 da como resultado la ecuación 9, si se suman las ecuaciones 2 y 6 da como resultado la ecuación 10 y así para el resto de ecuaciones. De lo anterior se observa que el balance tomando como sistema todo el proceso puede obtenerse sumando los balances por cada equipo. Entonces, en general se podrán plantear balances de materia independientes para cada equipo. Las ecuaciones de balance para todo el proceso son dependientes de los anteriores. En este problema se tienen entonces:

Número de variables = 5 x 3 = 15
Número de ecuaciones de balance de materia independientes = 2 x 3 = 6

4. ESTRATEGIA DE SOLUCION

Puede surgir la inquietud de cuál es la forma más adecuada de atacar un problema en particular, es decir, si utilizar los balances en los equipos o utilizar el balance para todo el proceso; esto depende de la naturaleza del problema, de los datos del problema y los valores que se desean calcular. Cabe mencionar que ambos sistemas son equivalentes, es decir, el balance por equipos y el balance para todo el proceso. Lo que se hace al resolver el problema por equipos es que un problema se divide en problemas individuales (en este caso dos, ya que se tienen 2 equipos) de tal forma que primero se resuelve uno de esos problemas y con esta información se procede a atacar el segundo problema. Sin embargo, esto no siempre es posible hacerlo ya que la información existente puede impedir directamente resolver equipor por equipo. Es entonces en donde se debe de recurrir a un balance que contenga a los dos equipos. Si se utiliza el balance para todo el proceso se integran ambos problemas y se resuelven simultáneamente.

La diferencia fundamental que existe entre atacar un problema con los balances individuales por equipos y el balance para todo el proceso es la información de las ecuaciones que cada uno maneja.

Si se analiza las ecuaciones del balance tomando como sistema todo el proceso se puede observar que no contiene información sobre la corriente C ni E. Esto puede simplificar ciertos cálculos pero también puede complicar otros si lo que queremos conocer es las especificaciones de estas corrientes (corriente intermedia y de recirculación).

Para demostrar que ambas formas (ecuaciones por equipos y ecuación para todo el proceso) son equivalentes, basta con sumar las ecuaciones por equipos y esto conduce a las ecuaciones del balance para el proceso.

Entonces para el problema anterior se tienen 6 ecuaciones de balance linealmente independientes. Pueden escogerse las 3 del equipo I y las 3 del equipo II. Y como se mencionó las del balance para el proceso serían dependientes de ellas. Es importante señalar que se pueden escoger las 3 ecuaciones independientes de cualquiera de los equipos y las 3 ecuaciones del balance para el proceso y sucede exactamente los mismo (se pueden obtener las 3 ecuaciones del otro equipo a partir de las anteriores). La elección de las ecuaciones estará en función de los datos, de las incógnitas y del camino más corto para llegar a la solución.

5. RELACIONES ADICIONALES

a) El flujo molar de la corriente E es la tercera parte del flujo molar de la corriente A.

Relación adicional que se deriva de este enunciado es:

$$E = \frac{1}{3} A$$

o bien:

$$A = 3E$$

b) El flujo molar de z en la corriente A es cuatro veces mayor que en la corriente D.

El flujo molar del componente z en la corriente A se representa como: $A\,X_3^A$

Así mismo, el flujo de z en la corriente D se representa como: $D\,X_3^D$

De tal forma que la relación adicional estará dada por:

$$A\,X_3^A = 4\,D\,X_3^D$$

O bien:

$$D\,X_3^D = \frac{1}{4} A\,X_3^A$$

c) El 80% del componente z que es alimentado al proceso es recuperado en la corriente E.

$$0.80\,A\,X_3^A = E\,X_3^E$$

d) La relación molar del componente w y v en la alimentación es de 1:4

$$\frac{A\,X_1^A}{A\,X_2^A} = \frac{1}{4}$$

Simplificando la expresión anterior se obtiene la siguiente:

$$\frac{X_1^A}{X_2^A} = \frac{1}{4}$$

o bien:

$$X_2^A = 4X_1^A$$

IV. Problemas de balance de materia en un equipo

PROBLEMA 4. BALANCE DE MATERIA EN UN SOLO EQUIPO A REGIMEN PERMANENTE

Objetivo: Plantear las ecuaciones de balance de materia asociadas a un equipo.

2,800 lb/hr de desecho procedentes de cierto proceso químico contienen 34% en peso de amoníaco en agua. Se quiere aprovechar esta corriente de desecho para otro proceso, sin embargo, la concentración requerida de amoníaco para este segundo proceso es de 45% en peso. ¿Qué volumen de amoníaco puro se debe introducir a la mezcla de desecho para que cumpla con los requerimientos del segundo proceso? (Para llevar a cabo esta operación de mezclado se utiliza un tanque). (Densidad del Amoníaco = 23.7 lb/ft^3)

SOLUCION:

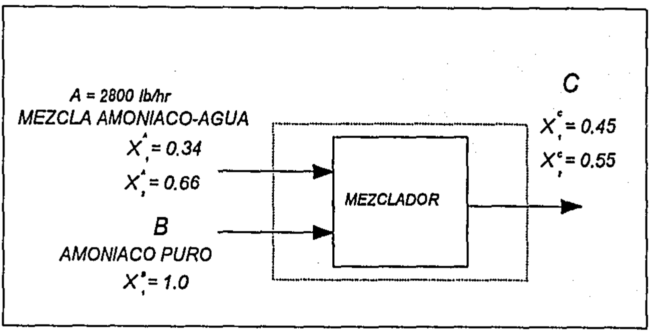
NOTACION:

a) Corrientes:
   A: Corriente de desecho
   B: Amoniaco
   C: Producto

b) Componentes: 1: Amoniaco, 2: Agua

c) Este problema se resolverá con las cantidades expresadas en masa

SISTEMA:



El proceso anterior consiste en una operación de mezclado. Una corriente efluente de cierto proceso quiere ser aprovechada para otro, sin embargo, las condiciones a las que debe entrar al nuevo proceso son diferentes. Por lo tanto lo que se busca es que cantidad de amoniaco puro debe agregarse a esta corriente para que su concentración aumente y pueda cumplir con las especificaciones requeridas para el nuevo proceso.

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES:

Se tienen 3 corrientes y dos componentes, por lo tanto se tiene 1 flujo y una composición (en este caso se toma el amoniaco) para cada corriente las cuales constituyen las variables independientes de este sistema (la composición del agua es dependiente de la composición del amoniaco ya que la suma de las fracciones masa es igual a 1.0).

Se hace una tabla de variables en la cual se visualicen las que son conocidas (en las que se da su valor) y las que son incógnitas (en las cuales se anotará la letra N). En el caso de que en alguna corriente no este presente alguno de los componentes, se anotará un guión.

TABLA DE VARIABLES

Corriente	Fracción 1	masa 2	Flujo [lb/hr]	Número de incógnitas
A	0.34	0.66	2800	0: Corriente especifida
B	1.00	-	N	1: El flujo
C	0.45	0.55		1: El flujo

Número de variables independientes desconocidas = 2

2. ECUACIONES DE BALANCES DE MATERIA:

Se tiene una ecuación de balance total y una ecuación de balance por componente:

Balance total:

$A + B = C$ ... (1)

Balance por componente:

AMONIACO: $AX_1^A + BX_1^B = CX_1^C$ ... (2)

AGUA: $AX_2^A = CX_2^C$ ... (3)

Número de ecuaciones independientes = 2 (Una de ellas es dependiente de las otras).

Para visualizar mejor que hay una ecuación linealmente dependiente, por ejemplo, se puede escribir el balance del agua de la siguiente forma:

$A(1-X_1^A) = C(1-X_1^C)$ ... (3a)

Grados de libertad = # de incógnitas - # de ecuaciones
Grados de libertad = 2 - 2
Grados de libertad = 0
Por lo tanto el problema se encuentra bien especificado y tiene solución única.

3. SOLUCION NUMERICA:

Las variables desconocidas son:
El flujo (lb/hr) de amoniaco puro: B
El flujo (lb/hr) de la mezcla de salida: C

De las 3 ecuaciones de balance (balance total, y 2 balances por componente, sólo 2 son independientes; se eligen entonces 2 de ellas). En este caso se elige el balance total y el balance del amoniaco:

Balance total:

$$A + B = C \qquad \text{... (1)}$$

Sustituyendo A:

$$2800 + B = C \qquad \text{... (4)}$$

Balance para el amoniaco:

$$AX_1{}^{A} + BX_1{}^{B} = CX_1{}^{C} \qquad \text{... (2)}$$

Sustituyendo los valores conocidos se obtiene la siguiente ecuación:

$$952 + B = 0.45C \qquad \text{... (5)}$$

La ecuaciones (4) y (5) forman un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas. Utilizando el método de adición-sustracción para resolverlo: Multiplicando la Ecuación (1) por -1 y sumando ambas ecuaciones:

$- B - C = -2800$ Ecuación (1) multiplicada por (-1)

$B - 0.45C = -952$ Ecuación (2)

$- 1.45C = -3752$ Suma de ambas ecuaciones

$$C = \frac{-3752}{-1.45}$$

C = 2587.6 lb/hr

Sustituyendo el valor de C en la Ecuación (1), se obtiene el valor de B:

$$B + C = 2800$$

$$B + 2587.6 = 2800$$

$$B = 2800 - 2587.6$$

$$B = 212.4 \text{ lb/hr}$$

Entonces:

B = 212.4 lb/hr
C = 2587.6 lb/hr

B es el flujo másico del amoniaco. Para calcular el volumen volumétrico es necesario utilizar el dato de la densidad proporcionado en la redacción del problema. Como lo que queremos obtener es flujo volumétrico, cuyas unidades son volumen por unidad de tiempo, la operación que se debe de llevar a cabo es una división:

$$212.4\ \frac{lb}{hr}\ \Bigg|\ \frac{ft^3}{23.7\ lb}\ \Bigg| = 8.96\ \frac{ft^3}{hr}$$

Resultado = Es necesario introducir al tanque mezclador un flujo volumétrico de 8.96 ft^3/hr de amoniaco puro para cumplir con los requerimientos de 45% en peso de amoníaco del segundo proceso.

PROBLEMA 5. BALANCE DE MATERIA A REGIMEN PERMANENTE EN UN SOLO EQUIPO INCORPORANDO RELACIONES ADICIONALES.

Objetivo: Que el estudiante reconozca, además de las ecuaciones de balance de materia, otro tipo de ecuaciones derivadas del enunciado del problema.

La extracción líquido-líquido es un proceso de separación que consiste en la recuperación de un soluto de una solución mediante la mezcla con un solvente. El solvente de extracción utilizado debe ser insoluble o soluble solamente a un grado limitado en la solución que se va a extraer. Además, el soluto a extraer deberá tener una elevada afinidad por el solvente de extracción. La extracción líquido-líquido se realiza mediante dos pasos básicos:

1. Mezcla íntima del solvente de extracción con la solución a la que se le va a aplicar la extracción.

2. Separación de la solución mezclada en dos fases inmiscibles.

Es decir, la solución que originalmente tiene el soluto es inmiscible con el solvente que se utiliza, de tal forma que lo que sucede en la extracción es que el soluto (que tiene una mayor afinidad por el solvente) se transfiere de la solución al solvente.

La fase líquida que contiene la concentración más alta de solvente y la concentración más pequeña del líquido de alimentación se conoce como extracto. La otra fase líquida, que contiene una mayor concentración del líquido de alimentación y una concentración pequeña de solvente, se conoce como refinado. La extracción puede llevarse cabo en una o varias etapas dependiendo de la afinidad del soluto por el solvente utilizado. Esta operación a nivel industrial se lleva a cabo en torres.

A continuación se muestra un diagrama de flujo de un proceso de extracción en el cual se tiene una solución de alimentación de 500 kg/hr cuya composición es de 90% en peso de metiletilcetona y 10% en peso de etilenglicol. Se va a extraer el etilenglicol en una sola etapa mediante el contacto con agua pura. Se considera que la metiletilcetona y el agua son inmiscibles.

Se sabe que la fracción masa del etilenglicol en el extracto es el doble de la correspondiente a la alimentación. La composición del etilenglicol en el refinado es de 2% en peso. Se desea conocer la cantidad de agua que se debe de utilizar para llevar a cabo esta operación. Además se quiere conocer las especificaciones de todas las corrientes que participan en el proceso.

1. Haga un análisis de las variables involucradas, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas y plantee las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.

2. Plantee las ecuaciones de balance de materia.

3. Efectúe un análisis de grados de libertad. De acuerdo a éste, ¿Esta correctamente planteado el problema?. En caso de que tenga solución, plantee una estrategia de resolución y resuelva numéricamente el problema.

SOLUCION:

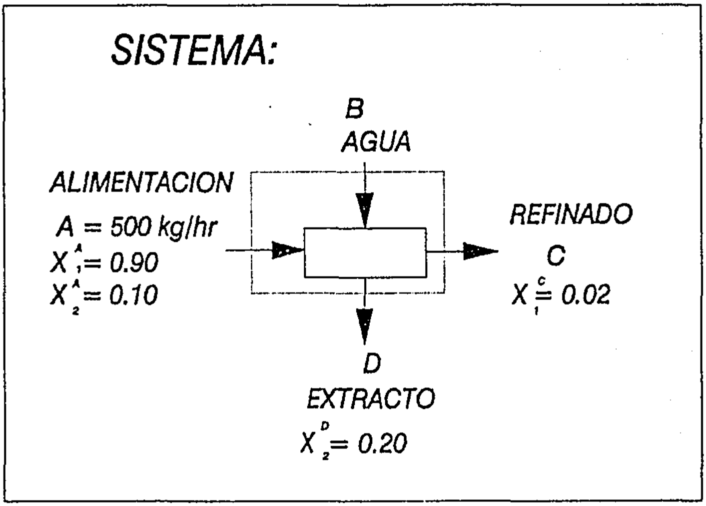
Se le asigna una letra a cada corriente, de tal forma que la corriente A es la corriente de la solución de alimentación, la corriente B es la de agua pura, la D el extracto y la C el refinado.

Se tienen 3 componentes (n=3):

1: Etilenglicol

2: Metiletilcetona

3: Agua



a) Para poder especificar cada corriente que contiene n componentes, es necesario conocer n-1 composiciones y el flujo [Ya que la otra composición es dependiente de estas ya que la suma de las fracciones mol es igual a 1.0].

Una observación importante en este problema en particular, es que no todos los componentes están presentes en todas las corrientes, por lo que se debe tener cuidado de analizar que componentes tiene cada corriente, de tal forma que no se introduzcan variables que no existen. La corriente A por ejemplo, tiene 2 componentes, no contiene agua (componente 3), entonces las variables independientes de esta corriente son el flujo y 1 composición. La corriente B tiene solo 1 componente por lo que la única variable independiente es el flujo. La corriente C tiene también dos componentes, al igual que la D.

A continuación se presenta una tabla en donde realiza un análisis de las variables. Se indica para cada corriente las variables que se conocen y las incógnitas aparecen con la letra N. Las variables que no existen en esa corriente [por ejemplo, la composición del agua (componente 2) en la corriente de alimentación] se señalan con un guión.

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

Este problema se resolverá usando flujos másicos en Kg/hr y composiciones en fracciones masa.

	FLUJO kg/hr	FRACCIONES PESO DE CADA COMPONENTE				# de incógnitas
Corriente		1	2	3	4	
A	500	0.32	0.68	-	-	0: Corriente especificada
B	N	-	1.00	-	-	1: Flujo
C	N	0.02	0.98	-	-	1: Flujo
D	N	N	-	N	-	2: Flujo y 1 composición
Número total de variables independientes desconocidas = 4						

2. RELACIONES ADICIONALES

De acuerdo al enunciado del problema, la relación de fracción masa del etilenglicol en las soluciones de extracto y alimentación es de 2. La relación adicional queda entonces:

$$X_1^{D} = 2X_1^{A} \qquad \ldots (1)$$

3. ECUACIONES DE BALANCE

Ecuación de balance total:

$$A + B = C + D \qquad \ldots (2)$$

Ecuaciones de balance por componente:

Componente 1:

El etilenglicol está presente en las corrientes A, C y D. En la corrientee B no, por eso ese término no aparece:

$$AX_1^A = CX_1^C + DX_1^C \qquad \text{... (3)}$$

Componente 2:

El metiletilcetona está presente sólo en A y C.:

$$AX_2^A = CX_2^C \qquad \text{... (4)}$$

Componente 3:

El agua está presente sólo en las corrientes B y D, además en B es el único componente por lo que la fracción mol es igual a 1.0:

$$B = DX_3^D \qquad \text{... (5)}$$

Número de ecuaciones de balance de materia independientes = 3.

4. ANALISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

El número de grados de libertad está definido como la diferencia entre el número de incógnitas menos el número de ecuaciones independientes:

Grados de libertad = No. de Incógnitas - No. de Ecuaciones

De acuerdo a la tabla de variables se tienen 4 variables independientes desconocidas. El número de ecuaciones independientes es la suma de las ecuaciones de balance de materia y las relaciones adicionales (3+1=4). Entonces los grados de libertad son:

Grados de libertad = 4 - 4
Grados de libertad = 0
Por lo que el problema se encuentra especificado y tiene solución única.

5. SOLUCION NUMERICA

Para decidir cuál será la estrategia de resolución, se procede a analizar el sistema de ecuaciones. Se tienen 4 ecuaciones de balance, pero solo 3 de ellas son independientes.

Se eligen entonces 3 de estas ecuaciones y junto con la relación adicional forman el sistema a resolver. Independientemente cuáles 3 ecuaciones de balance se elijan, la solución será la misma.

Eligiendo las primeras 3 ecuaciones de balance (2, 3 y 4, así como la relación adicional, ecuación 1) el sistema queda:

$X_1{}^D = 2X_1{}^A$ ... (1)

$A + B = C + D$ ... (2)

$AX_1{}^A = CX_1{}^C + DX_1{}^D$ ... (3)

$AX_2{}^A = CX_2{}^C$ ... (4)

En la ecuación (1) la única incógnita es $X_1{}^D$ de donde:

$X_1{}^D = 2X_1{}^A$

$X_1{}^D = 2(0.1)$

$X_1{}^D = 0.2$

y por lo tanto $X_3{}^D = 0.8$

Así mismo, de la ecuación (4) la única incógnita es el flujo de la corriente C, por lo que:

$AX_2{}^A = CX_2{}^C$ ... (4)

$$C = \frac{(500)(0.9)}{0.98} = 459.18 \text{ kg/hr}$$

Con estos valores, en la ecuación (3) la única incógnita es D:

$AX_1{}^A = CX_1{}^C + DX_1{}^D$ ... (3)

$$D = \frac{(500)(0.1)-(0.02)(459.18)}{0.2}$$

$D = 204.1$ kg/hr

Así, de (2):

$A + B = C + D$

$B = 459.18 + 204.1 - 500$

$B = 163.28$ kg/hr

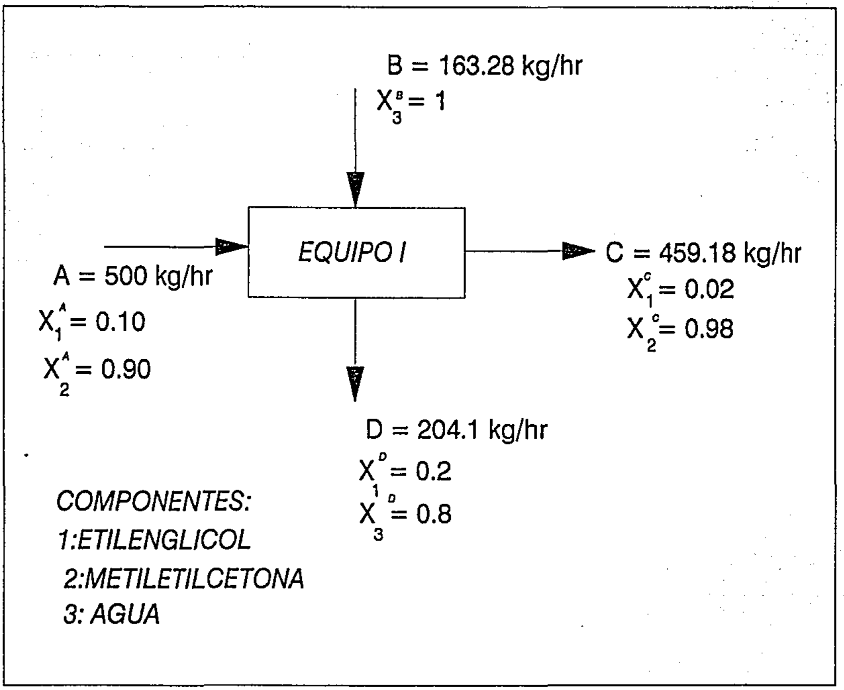
La ecuación de balance de materia que no se utilizó, sirve para comprobar los resultados; del balance para el agua:

B = 163.28 kg/hr y DX_3^D = (204.1 kg/hr)(0.8) = 163.28 kg/hr, con lo cual se cumple este balance.

6. RESULTADO:

Se requieren 163.28 kg/hr de agua pura para poder llevar a cabo esta operación.

Las especificaciones de todas las corrientes se dan en el siguiente diagrama:



PROBLEMA 6. BALANCE DE MATERIA A RÉGIMEN PERMANENTE EN UN SOLO EQUIPO UTILIZANDO BASE DE CÁLCULO.

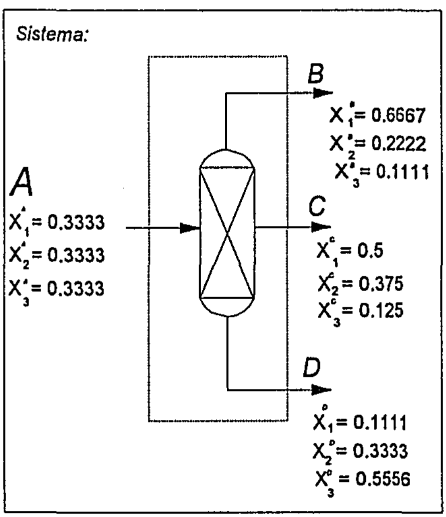
***Objetivo:* Reconocer en que casos es posible establecer una base de cálculo y lo que sucede con las otras variables del proceso.**

Se quiere destilar una mezcla equimolar de 3 componentes: benceno, tolueno y xileno en una columna de destilación empacada. La composición de la corriente de domos en fracción mol es de: 0.6667 de benceno, 0.2222 de tolueno. Existe una salida lateral en la cual se tiene la siguiente composición en fracción mol: 0.5 de benceno, 0.375 de tolueno. Así mismo, la composición de la corriente de fondos de de 0.1111 de benceno y 0.5556 de xileno. Se desea conocer las especificaciones de todas las corrientes contenidas en el proceso.

1. Realice un análisis de las variables. Plantee las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.
2. Plantee las ecuaciones de balance.
3. Efectúe el análisis de grados de libertad. ¿Esta correctamente planteado el problema?. En caso de tener solución, plantee una estrategia de resolución y resuelva numéricamente el problema.
4. Realice un escalamiento del problema para visualizar que es lo que sucede.

SOLUCION:

Existen 4 corrientes: Se le asigna una letra a cada una.
Enumerando los componentes (n=3): 1:Benceno, 2:Tolueno y 3:Xileno.



1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

Este problema se resolverá usando flujos molares en mol/hr y composiciones en fracción mol.

	FLUJO	FRACCION MOL DE CADA COMPONENTE			# Incógnitas
Corriente	mol/hr	1	2	3	
A	N	1/3	1/3	1/3	1: Flujo
B	N	0.6667	0.2222	0.1111	1: Flujo
C	N	0.5	0.375	1.125	1: Flujo
D	N	0.1111	0.3333	0.5556	1: Flujo
Número total de incógnitas = 4					

2. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA

$A = B + C + D$ ... (1)

$AX_1^A = BX_1^B + CX_1^B + DX_1^B$ ... (2)

$AX_2^A = BX_2^B + CX_2^B + DX_2^B$ ... (3)

$AX_3^A = BX_3^B + CX_3^B + DX_3^B$ ... (4)

Número de ecuaciones independientes = 3

3. ANÁLISIS DE LOS GRADOS DE LIBERTAD.

Se tiene un sistema de 3 ecuaciones linealmente independientes y 4 incógnitas [A,B,C y D]. Por lo que:

Grados de libertad = # Incógnitas - # Ecuaciones
Grados de libertad = 4 - 3
Grados de libertad = 1

Cuando los grados de libertad son mayores que cero en un sistema, significa que se tienen soluciones múltiples, es decir, que el proceso se encuentra subespecificado. Es posible en estos casos fijar alguna de las variables desconocidas, de tal forma que los grados de libertad sean igual a cero y así obtener una solución.

Nótese que todos los flujos son incógnitas. En este caso es posible establecer una base de cálculo (la alimentación [A] por ejemplo) de tal forma que los demás flujos se encuentran en función de este flujo.

Muy importante: En este caso en particular, independientemente de la base de cálculo seleccionada, las composiciones no cambian. Lo único que se modifica en este caso son los flujos de las otras corrientes, pero la relación de flujos se mantendrá constante..

4. SOLUCION NUMERICA

Estableciendo una base de cálculo de A = 1000 moles/hr, y sustituyendo los valores conocidos en las ecuaciones (1), (2) y (3) se obtiene:

$$\begin{aligned} 1000 &= B + C + D \\ 333.3 &= 0.6667B + 0.5C + 0.1111D \\ 333.3 &= 0.2222B + 0.375C + 0.3333D \end{aligned}$$

Este es un sistema de tres ecuaciones independientes con tres incógnitas, el cual puede ser resuelto con cualquiera de los métodos de resolución de ecuaciones lineales.
Se resolverá el sistema anterior por el método de Gauss-Jordan:

* Escribiendo la matriz ampliada:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1000 \\ 0.6667 & 0.5 & 0.1111 & 333.3 \\ 0.2222 & 0.375 & 0.3333 & 333.3 \end{array}\right| \approx$$

* Multiplicando el primer renglón por (-0.6667) y sumándolo al segundo renglón:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1000 \\ 0 & -0.1667 & -0.5556 & -333.4 \\ 0.2222 & 0.375 & 0.3333 & 333.3 \end{array}\right| \approx$$

* Multiplicando el primer renglón por (-0.2222) y sumándolo al tercer renglón:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1000 \\ 0 & -0.1667 & -0.5556 & -333.4 \\ 0 & 0.1528 & 0.1111 & 111.1 \end{array}\right| \approx$$

* Multiplicando el segundo renglón por (-1/0.1667) con la finalidad de hacer el pivote 1:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1000 \\ 0 & 1 & 3.333 & 2000 \\ 0 & 0.1528 & 0.1111 & 111.1 \end{array}\right| \approx$$

* Multiplicando el segundo renglón por (-0.1528) y sumándolo al tercer renglón:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1000 \\ 0 & 1 & 3.333 & 2000 \\ 0 & 0 & -0.3982 & -194.5 \end{array}\right| \approx$$

* Multiplicando el tercer renglón por (-1/0.3982):

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1000 \\ 0 & 1 & 3.333 & 2000 \\ 0 & 0 & 1 & 488.45 \end{array}\right| \approx$$

* Multiplicando el tercer renglón por (-3.333) y sumándolo al segundo renglón:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1000 \\ 0 & 1 & 0 & 372 \\ 0 & 0 & 1 & 488.45 \end{array}\right| \approx$$

* Restándole al primer renglón el tercero:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 511.55 \\ 0 & 1 & 0 & 372 \\ 0 & 0 & 1 & 488.45 \end{array}\right| \approx$$

* Por último, se le resta al primer renglón el segundo:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 139.55 \\ 0 & 1 & 0 & 372 \\ 0 & 0 & 1 & 488.45 \end{array}\right|$$

Por tanto la solución para A=1000 moles/hr es:

B = 139.55 moles/hr
C = 372.00 moles/hr
D = 488.45 moles/hr

5. ESCALAMIENTO DEL PROBLEMA

Se realizará un escalamiento del problema, con la finalidad de demostrar que la relación de flujos se mantiene constante, de acuerdo a la base de cálculo seleccionada.

Eligiendo A = 2000 moles/hr.

El sistema de ecuaciones quedaría:

$$\begin{array}{rcrcrcr} 2000 & = & B & + & C & + & D \\ 666.67 & = & 0.6667B & + & 0.5C & + & 0.1111D \\ 666.67 & = & 0.2222B & + & 0.375C & + & 0.3333D \end{array}$$

* La matriz ampliada es:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1000 \\ 0.6667 & 0.5 & 0.1111 & 333.3 \\ 0.2222 & 0.375 & 0.3333 & 333.3 \end{array}\right| \approx$$

Como se puede observar, la matriz de coeficientes es la misma (ya que se refiere a las composiciones, que permanecen sin cambio), por lo que se pueden aplicar las mismas operaciones elementales utilizadas en el inciso anterior al vector columna del lado izquierdo, para obtener la solución:

* Multiplicando el primer renglón por (-0.6667) y sumándolo al segundo renglón:

$$\left|\begin{array}{c} 2000 \\ 666.67 \\ 666.67 \end{array}\right| \approx$$

* Multiplicando el primer renglón por (-0.2222) y sumándolo al tercer renglón:

$$\left|\begin{array}{c} 2000 \\ -666.73 \\ 666.67 \end{array}\right| \approx$$

* Multiplicando el segundo renglón por (-1/0.1667) con la finalidad de hacer el pivote 1:

$$\left|\begin{array}{c} 2000 \\ -666.73 \\ 222.27 \end{array}\right| \approx$$

* Multiplicando el segundo renglón por (-0.1528) y sumándolo al tercer renglón:

$$\begin{vmatrix} 2000 \\ 3999.58 \\ 222.27 \end{vmatrix} \approx$$

* Multiplicando el tercer renglón por (-1/0.3982):

$$\begin{vmatrix} 2000 \\ 3999.58 \\ -388.87 \end{vmatrix} \approx$$

* Multiplicando el tercer renglón por (-3.333) y sumándolo al segundo renglón:

$$\begin{vmatrix} 2000 \\ 3999.58 \\ 976.56 \end{vmatrix} \approx$$

* Restándole al primer renglón el tercero:

$$\begin{vmatrix} 2000 \\ 744.71 \\ 976.56 \end{vmatrix} \approx$$

* Por último, se le resta al primer renglón el segundo:

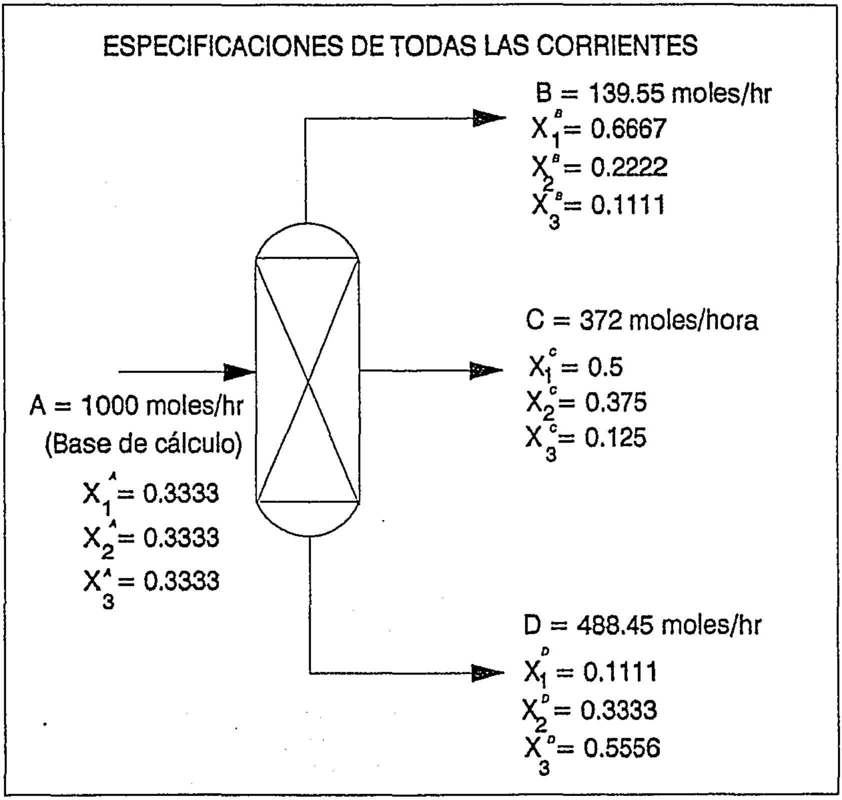
$$\begin{vmatrix} 1023.44 \\ 744.71 \\ 976.56 \end{vmatrix} \approx$$

Por tanto la solución para A= 2,000 moles/hr es:

B = 1,023.44 moles/hr
C = 744.71 moles/hr
D = 976.56 moles/hr

Comparando estos valores con los obtenidos al tomar como base A = 1000 moles/hora, se observa que se mantiene una relación lineal. Es decir, para el doble de flujo de alimentación, los flujos de salida también se duplican.

6. RESULTADOS



V. Balances de materia en varios equipos.

PROBLEMA 7. BALANCE DE MATERIA A RÉGIMEN PERMANENTE PARA VARIOS EQUIPOS.

Objetivo: Plantear los balances de materia por equipos, el balance de todo el proceso y de acuerdo a los grados de libertad, elegir una estrategia de resolución.

Una mezcla de benceno, tolueno y xileno es alimentada a una torre de destilación (EQUIPO I). El producto de fondos tiene una composición de 10% de tolueno y no tiene benceno. (Nota: Todas las composiciones se encuentran en porciento en masa). Por otra parte, se alimentan a otra torre de destilación (EQUIPO II) 2800 lb/hr de una mezcla de los mismos componentes cuyas composiciones son: 45% de benceno, 28% de tolueno. La corriente de domos tiene una composición del 63% de benceno y 20% de tolueno; la corriente de fondo tiene solamente 22% de benceno. El producto de domos de ambas torres de destilación es mezclado (EQUIPO III) y es alimentado a una tercera torre de destilación (EQUIPO IV) en donde se recupera en el producto de domos 2010 lb/hr de mezcla y se sabe que la composición del tolueno es 21.3%. Las especificaciones del producto de fondos son: 990 lb/hr, 23% de benceno y 42% de tolueno. Por otro lado el producto de fondos de los equipos I y II se mezcla (EQUIPO V). Se sabe que el 90% del benceno alimentado en el equipo II se recupera en la corriente de domos del equipo IV. Se tomó una muestra del efluente del equipo V y se pudo determinar por cromatografía que tenía 10% de benceno.

Se desea conocer las especificaciones de la corriente de alimentación al equipo I, la corriente efluente del equipo V y la corriente de mezclado de los productos de domo.

De acuerdo a la información anterior:

1. Haga un diagrama de flujo de proceso, indicando los equipos y las corrientes involucradas. Haga un análisis de las variables involucradas, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas. Plantee las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.

2. Plantee las ecuaciones involucradas en cada equipo y realice un balance global que involucre todas las corrientes de entrada y salida del proceso.

3. Efectúe un análisis de grados de libertad. ¿Esta correctamente planteado el problema?, ¿Tiene una o varias soluciones?

4. En el caso de que tenga solución, plantee una estrategia de resolución y resuelva numéricamente el problema.

SOLUCION:
1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

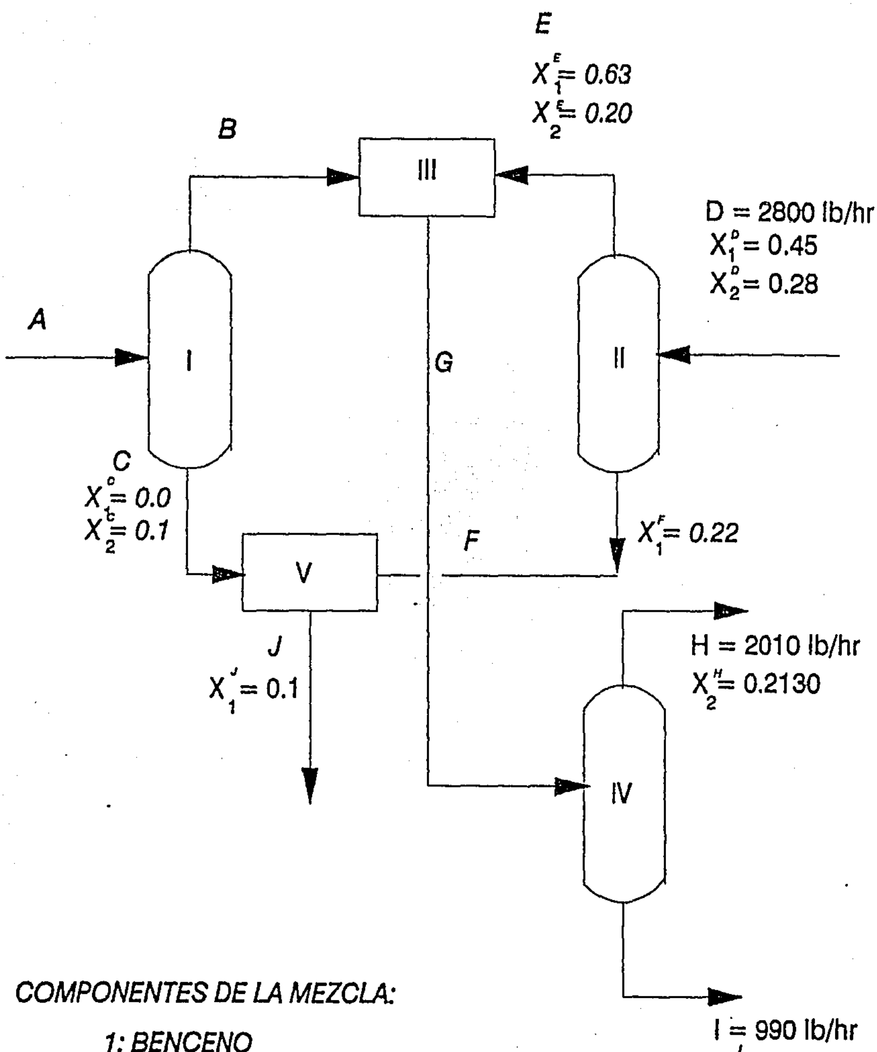
A continuación, se muestra el diagrama de flujo de proceso. A cada equipo están asociadas las corrientes de entrada y salida. Se le asignó una letra a cada corriente y un número a cada componente. Se tienen 10 corrientes (A, B, C, D, E, F, G, H, I y J). Se tienen 3 componentes (n=3).

Inmediatamente después del diagrama de flujo de procesos, se da la tabla de variables en donde se indica para cada corriente las variables que se conocen y las incógnitas aparecen con la letra N.

En este problema los flujos másicos estarán en lb-hr y las composiciones en fracción masa.

		FRACCION MASA			
CORRIENTE	FLUJO [lb/hr]	1	2	3	# de variables desconocidas
A	N	N	N	N	3: flujo y 2 composiciones
B	N	N	N	N	3: flujo y 2 composiciones
C	N	-	0.100	0.900	1: flujo
D	2800	0.450	0.280	0.270	0
E	N	0.630	0.200	0.170	1: flujo
F	N	0.220	N	N	2: flujo y 1 composición
G	N	N	N	N	3: flujo y 2 composiciones
H	2010	N	0.213	N	1: 1 composición
I	990	0.230	0.420	0.350	0
J	N	0.100	N	N	2: 1 flujo y 1 composición
		Número total de incógnitas = 16			

DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO



COMPONENTES DE LA MEZCLA:

1: BENCENO

2: TOLUENO

3: XILENO

Nota: La composición del xileno (componente 3) en la corrientes C, D, E, e I no se da explícitamente en el problema, pero se puede obtener sencillamente en base al hecho de que la suma de las fracciones masa en cada corriente es igual a 1.0

De acuerdo a lo anterior se desconocen 7 flujos y 9 composiciones lo que da un total de 16 incógnitas.

2. RELACIONES ADICIONALES

Se menciona en el problema que el 90% del benceno alimentado en el equipo II se recupera en la corriente de domos del equipo IV. Entonces la relación adicional que corresponde al enunciado anterior es la siguiente:

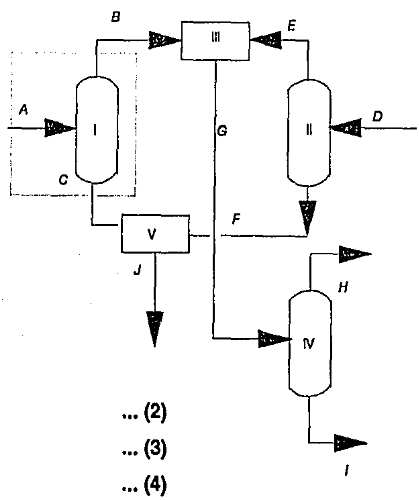
$$0.9\, X_1^D\, D = H\, X_1^H \qquad \text{... (1)}$$

Esta ecuación está asociada a los equipos II y IV y contiene variables de las corrientes D y H. Esta relación se deberá utilizar en los sistemas que involucren a las corrientes D y H simultáneamente.

3. ECUACIONES DE BALANCES DE MATERIA

Las Ecuaciones de Balance de Materia y Relaciones Adicionales por equipo son las siguientes:

SISTEMA: EQUIPO I



$$A = B + C \qquad \text{... (2)}$$

$$AX_1^A = BX_1^B \qquad \text{... (3)}$$

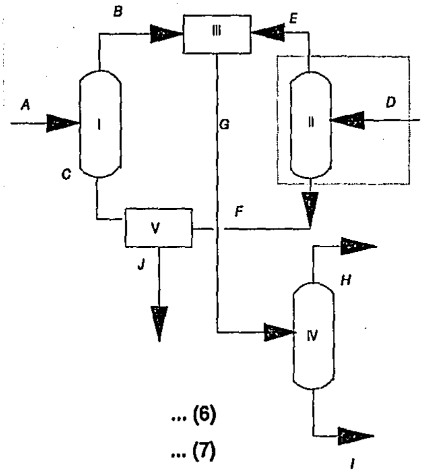
$$AX_2^A = BX_2^B + CX_2^C \qquad \text{... (4)}$$

$$AX_3^A = BX_3^B + CX_3^C \qquad \text{... (5)}$$

No hay relaciones adicionales

Número de ecuaciones independientes = 3

SISTEMA: EQUIPO II

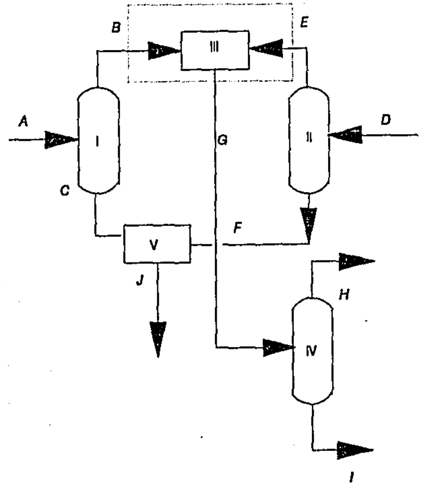


$$D = E + F \qquad \dots (6)$$
$$DX_1^D = EX_1^E + FX_1^F \qquad \dots (7)$$
$$DX_2^D = EX_2^E + FX_2^F \qquad \dots (8)$$
$$DX_3^D = EX_3^E + FX_3^F \qquad \dots (9)$$

No hay relaciones adicionales

Número de ecuaciones independientes = 3.

SISTEMA: EQUIPO III



$B + E = G$ ... (10)

$BX_1^B + EX_1^E = GX_1^G$ ... (11)

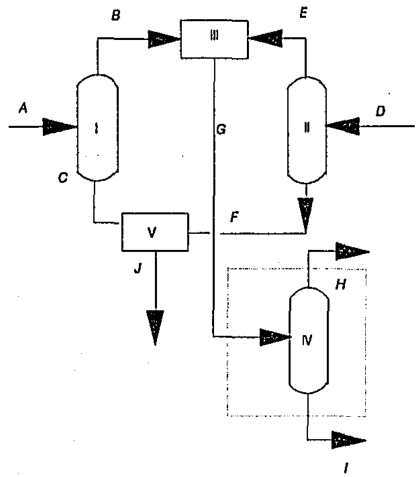
$BX_2^B + EX_2^E = GX_2^G$ ... (12)

$BX_3^B + EX_3^E = GX_3^G$ ... (13)

No hay relaciones adicionales

Número de Ecuaciones Independientes = 3

SISTEMA: EQUIPO IV



$G = H + I$ ... (14)

$GX_1^G = HX_1^H + IX_1^I$ ... (15)

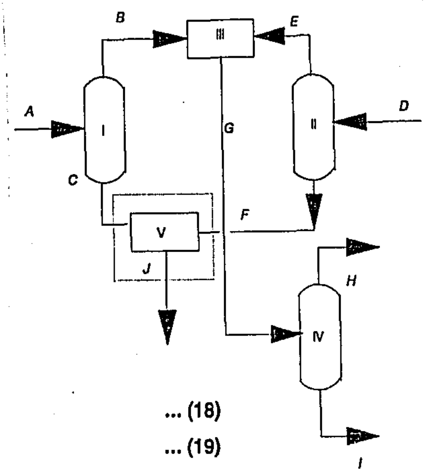
$GX_2^G = HX_2^H + IX_2^I$ ... (16)

$GX_3^G = HX_3^H + IX_3^I$ ... (17)

No hay relaciones adicionales

Número de Ecuaciones Independientes = 3

SISTEMA: EQUIPO V



$C + F = J$ ... (18)

$FX_1^F = JX_1^J$ ... (19)

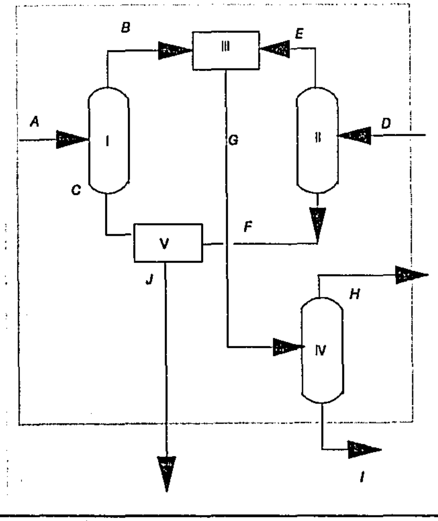
$CX_2^C + FX_2^F = JX_2^J$ ... (20)

$CX_3^C + FX_3^F = JX_3^J$ ... (21)

No hay relaciones adicionales

Número de Ecuaciones Independientes = 3

SISTEMA: TODO EL PROCESO



Enrique Bazúa Rueda
Mariana Elizabeth Domínguez Oviedo

$$A + D = J + H + I \qquad ...(22)$$
$$AX_1^A + DX_1^D = JX_1^J + HX_1^H + IX_1^I \qquad ...(23)$$
$$AX_2^A + DX_2^D = JX_2^J + HX_2^H + IX_2^I \qquad ...(24)$$
$$AX_3^A + DX_3^D = JX_3^J + HX_3^H + IX_3^I \qquad ...(25)$$

Como en este sistema intervienen las corrientes D y H, entonces se debe incluir la relación adicional al juego de ecuaciones.

Relación Adicional:

$$0.9\, X_1^D\, D = X_1^H\, H \qquad ...(1)$$

Número de Ecuaciones Independientes = 3+1 = 4
(3 Ecuaciones de Balance y la Relación Adicional).

4. ANALISIS DE LOS GRADOS DE LIBERTAD.

Hay que construir una tabla de grados de libertad (Tabla donde se resuma las variables y ecuaciones que se tienen para cada uno de los sistemas). En cada caso se incluye el número total de incógnitas y además se pone el número de ecuaciones de balance, las relaciones adicionales y su suma dá el número total de ecuaciones. Los grados de libertad se definen como la diferencia del número de incógnitas menos el número total de ecuaciones:

[Grados de libertad] = [Número de incógnitas]-[Número total de Ecuaciones]

Se escogió como sistema en primer lugar cada uno de los equipos por separado y al proceso. En estos casos ya se indicó, cuales son las corrientes involucradas y ya se plantearon las ecuaciones necesarias. Para hacer la tabla se ven las corrientes de entrada y salida al sistema y se suman los números de las variables desconocidas asociadas a estas corrientes. Por ejemplo para el equipo I como sistema, se tienen las corrientes A, B y C. Las corrientes A y B tienen 3 incógnitas cada una y la corriente C tiene una incógnita, por lo que el número de incógnitas para este equipo es de 7.

Por otro lado, se considera todo el proceso como sistema. Entonces se consideran todas las corrientes que entran y las que salen y el sistema de ecuaciones involucrado. Por tanto para todo el proceso se tienen 6 incógnitas, 3 ecuaciones de balance y una ecuación adicional, lo que da como resultado 2 grados de libertad.

Por último se realiza un análisis de grados de libertad global, el cual involucra todas las corrientes del proceso, es decir, no sólo las que entran y salen, sino las involucradas en todos y cada uno de los equipos. Entonces análisis de grados de libertad global consiste en sumar todas las incógnitas pertenecientes a todas las corrientes, así como sumar todas las ecuaciones independientes de cada equipo y las relaciones adicionales.

Equipo Número:	I	II	III	IV	V	P	G
Número de Incógnitas:	7	3	7	4	5	6	16
Ecuaciones de Balance:	3	3	3	3	3	3	15
Ecuaciones Adicionales:	0	0	0	0	0	1	1
Total de Ecuaciones:	3	3	3	3	3	4	16
Grados de Libertad:	4	0	4	1	2	2	0

Nota: P significa "todo el proceso", es decir, que se tomó como sistema el proceso completo. G significa global, es decir, tomando en cuenta todas las variables y ecuaciones asociadas a cada equipo.

Las condiciones que debe reunir la tabla de grados de libertad para que el problema tenga solución son:

1. Que los grados de libertad globales sean igual a cero, esto significa que el problema tiene solución única y se encuentra perfectamente especificado. En caso de que se tenga un valor negativo, el problema no se encuentra bien especificado y no tiene solución.

2. Que los grados de libertad en cada equipo en el proceso sean cero o mayores a cero. En caso de que se tenga un valor negativo para los grados de libertad de cualquier equipo, o para el proceso, entonces el problema no se encuentra correctamente planteado y por lo tanto no tiene solución.

3. En caso de que no se hayan especificado ningún flujo, los grados de libertad globales deben ser igual a uno. En este caso se puede escoger una base y asignarle un valor a cualquier flujo.Una vez hecho esto se corrige la tabla de grados de libertad y se deben cumplir las condiciones de los puntos 1 y 2.

4. En caso de que los grados de libertad globales sean mayores a uno, con excepción de lo dicho en el punto 3, el problema se encuentra subespecificado y faltan asignar valores a algunas variables antes de resolver el problema, para cumplir con los puntos 1, 2 y 3.

Este problema cumple con los puntos 1 y 2 y por lo tanto está bien especificado y tiene solución única.

5. ESTRATEGIA DE RESOLUCION

Unidades: Para tener consistencia se manejaran los flujos en lb/hr, y las composiciones en fracciones masa.

La principal herramienta para resolver problemas de este tipo, será el análisis de los grados de libertad. La elaboración correcta de esta tabla es la que dará la pauta de la estrategia a seguir.

Muy importante: No se introducirá ningún número hasta tener bien definida la estrategia de resolución, es decir, el algoritmo a seguir.

1. Analizando la tabla de grados de libertad, se observa que en el equipo II el número de grados de libertad es cero. Por lo tanto, el problema puede empezarse a resolver por este equipo. Eligiendo la ecuación de balance total y 2 de las ecuaciones por componente:

Sistema de ecuaciones:

$D = E + F$ ... (6)

$DX_1^D = EX_1^E + FX_1^F$ ... (7)

$DX_2^D = EX_2^E + FX_2^F$ ... (8)

De este conjunto de ecuaciones se desconoce E, F y X_2^F, se tienen 3 ecuaciones y 3 incógnitas.

2. Resuelto el equipo II: conocidos los flujos E y F y la composición X_2^F la tabla de grados de libertad quedaría de la siguiente forma:

[Note que los equipos involucrados con estas variables son el III, y el V; es decir, son aquellos equipos en los cuales los grados de libertad se verán modificados].

Equipo Número:	I	III	IV	V	P
Número de Incógnitas:	7	6	4	5	6
Ecuaciones de Balance:	3	3	3	3	3
Ecuaciones Adicionales:	0	0	0	0	1
Total de Ecuaciones:	3	3	3	3	4
Grados de Libertad:	4	3	1	0	2

Ahora los grados de libertad del equipo V son cero, el siguiente paso es resolver este equipo.
Sistema de ecuaciones del equipo V:

$C + F = J$ ... (18)

$FX_1^F = JX_1^J$ ... (19)

$CX_2^C + FX_2^F = JX_2^J$ ... (20)

De este sistema de 3 ecuaciones independientes las variables que se desconocen son: C, J y X_2^J.

3. Resuelto el eqipo V y conocidas las especificaciones de las corrientes C, F y J la tabla de grados de libertad quedaría de la siguiente forma:

[Nota: El único equipo que contiene estas corrientes y cuyos grados de libertad son modificados es el I, el equipo III y el IV permanecen sin cambio]

Equipo Número:	I	III	IV	P
Número de Incógnitas:	6	6	4	4
Ecuaciones de Balance:	3	3	3	3
Ecuaciones Adicionales:	0	0	0	1
Total de Ecuaciones:	3	3	3	4
Grados de Libertad:	3	3	1	0

A pesar de que en ninguno de los equipos se tienen 0 grados de libertad, observe que en el Balance realizado en todo el proceso, el número de grados de libertad es cero. En este caso, el problema se continúa resolviendo utilizando las ecuaciones contenidas en este balance. Este un buen ejemplo para ilustrar que a veces resulta útil plantear otros balances (además de los que involucran a los equipos individuales).

El sistema de ecuaciones del balance en todo el proceso es:

$$A + D = J + H + I \qquad \text{... (22)}$$

$$AX_1^A + DX_1^D = JX_1^J + HX_1^H + IX_1^I \qquad \text{... (23)}$$

$$AX_2^A + DX_2^D = JX_2^J + HX_2^H + IX_2^I \qquad \text{... (24)}$$

$$AX_3^A + DX_3^D = JX_3^J + HX_3^H + IX_3^I \qquad \text{... (25)}$$

Relación Adicional:

$$0.9\, X_1^D\, D = H\, X_1^H \qquad \text{... (1)}$$

Número de Ecuaciones Independientes = 3+1 = 4 (3 Ecuaciones de Balance y la Relación Adicional). Las incógnitas son: A, X_1^A, X_2^A y X_1^H

4. Una vez resuelto los balances de todo el proceso, la tabla de grados de libertad quedaría:

Equipo Número:	I	III	IV
Número de Incógnitas:	3	6	3
Ecuaciones de Balance:	3	3	3
Ecuaciones Adicionales:	0	0	0
Total de Ecuaciones:	3	3	3
Grados de Libertad:	0	3	0

Analizando la tabla anterior, el siguiente paso en la resolución del problema es resolver individualmente los equipos I y IV.

El sistema de ecuaciones asociado al equipo I es:

$$A = B + C \qquad \dots (2)$$

$$AX_1^A = BX_1^B \qquad \dots (3)$$

$$AX_2^A = BX_2^B + CX_2^C \qquad \dots (4)$$

En donde se desconocen las especificaciones de la corriente B: B, X_1^B, X_2^B.

Las ecuaciones del equipo IV son:

$$G = H + I \qquad \dots (14)$$

$$GX_1^G = HX_1^H + IX_1^I \qquad \dots (15)$$

$$GX_2^G = HX_2^H + IX_2^I \qquad \dots (16)$$

En este caso las incógnitas son las especificaciones de la corriente G: G, X_1^G, X_2^G.

5. Por último, resueltos los equipos I y IV la tabla de grados de libertad quedaría:

Equipo Número:	III
Número de Incógnitas:	0
Ecuaciones de Balance:	0
Ecuaciones Adicionales:	0
Total de Ecuaciones:	0
Grados de Libertad:	0

¿Qué es lo que indica el análisis de esta tabla? En primer término, que el problema ya ha sido resuelto. En segundo término, QUE YA NO SE DEBEN RESOLVER LAS ECUACIONES DEL EQUIPO III. Esto indica que este sistema de ecuaciones es DEPENDIENTE DE LOS ANTERIORES [linealmente dependiente]. Puede surgir la siguiente inquietud: ¿No son independientes todos los balances por equipos? Efectivamente, si solo se hubiesen planteado 5 sistemas de ecuaciones (1 por cada equipo), estos sistemas serían independientes. Sin embargo se introdujo un balance adicional: El balance para todo el proceso. Entonces existía un sistema dependiente de los otros.

El problema ha sido resuelto, se conocen todas y cada una de las especificaciones de todas las corrientes del proceso. El sistema de ecuaciones del equipo III puede servir para verificar la solución numérica (Comprobar cálculos).

Muy importante: La intención de introducir otros balances adicionales a los balances por equipos es buscar varias alternativas para abordar el problema. Usar uno u otro solo depende de la simplicidad de resolución, es decir para cada problema en particular existirán diferentes sistemas alternativos útiles.

6. ALGORITMO DE RESOLUCION:

El resumen de lo expuesto en el punto anterior proporciona el algorítmo de solución:

1. Se resuelve el sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas correspondientes al equipo II y se obtienen los valores de E, F y X_2^F.

2. Se resuelve el sistema de ecuaciones del equipo V (3 ecuaciones y 3 incógnitas). Obteniendo el valor de: C, J y X_2^J.

3. Se resuelve el sistema de ecuaciones correspondiente a todo el Proceso (4 ecuaciones y 4 incógnitas), de tal forma que se obtienen los valores de: A, X_1^A, X_2^A y X_1^H.

4. Resolver individualmente los equipos I y IV. Obteniendo así: B, X_1^B, X_2^B, y G, X_1^G, X_2^G respectivamente.

5. Por último se utiliza el sistema de ecuaciones que involucran al equipo III para comprobar los resultados obtenidos.

7. SOLUCION NUMERICA:

1. Se resuelve el sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas correspondientes al equipo II: E, F y X_2^F

$$D = E + F \quad \ldots (6)$$

$$DX_1^D = EX_1^E + FX_1^F \quad \ldots (7)$$

$$DX_2^D = EX_2^E + FX_2^F \quad \ldots (8)$$

Sustituyendo:

$$2800 = E + F \quad \ldots (6a)$$

$$1260 = 0.63E + 0.22F \quad \ldots (7a)$$

$$784 = 0.20E + X_2^F\ F \quad \ldots (8a)$$

Si se analizan las ecuaciones (6a) y (7a) tienen las incógnitas son E y F mientras que (8a) además de tener a E y F tiene a X_2^F. Por lo tanto se resuelve el sistema formado por (6a) y (7a) y con estos resultados se obtiene de (8a) X_2^C. Por el método Gauss Jordan:

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2800 \\ 0.63 & 0.22 & 1260 \end{array}\right|$$

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2800 \\ 0 & -0.41 & -504 \end{array}\right|$$

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2800 \\ 0 & 1 & 1229.27 \end{array}\right|$$

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1570.73 \\ 0 & 1 & 1229.27 \end{array}\right|$$

Entonces

E = 1570.73 lb/hr

F = 1229.27 lb/hr

Sustituyendo E y F en (8a):

$$\mathbf{784 = 0.20E + X_2^C F} \qquad \text{... (8a)}$$

$$X_2^F = \frac{784 - 0.20E}{F}$$

$$X_2^F = \frac{784 - 0.20(1570.73)}{1229.27}$$

$$X_2^F = 0.3822$$

2. Se resuelve el sistema de ecuaciones del equipo V. Obteniendo entonces el valor de: C, J, X_2^J

$$\mathbf{C + F = J} \qquad \text{... (18)}$$

$$\mathbf{FX_1^F = JX_1^J} \qquad \text{... (19)}$$

$$\mathbf{CX_2^C + FX_2^F = JX_2^J} \qquad \text{... (20)}$$

Sustituyendo:

$$C + 1229.27 = J \qquad \text{... (18a)}$$

$$270.44 = 0.10J \qquad \text{... (19a)}$$

$$0.10C + 469.58 = X_2^J J \qquad \text{... (20a)}$$

En la ecuación (19a) la única incógnita es J. Con el valor de J en la ecuación (18a) se obtiene C y por último con el valor de J y C se obtiene de (20a) el valor de X_2^J:

$$270.44 = 0.10J \qquad \text{... (19a)}$$

$$J = \frac{270.44}{0.10}$$

$$J = 2704.4 \text{ lb/hr}$$

Sustituyendo J en (18a):

$$C + 1229.27 = J \qquad \text{... (18a)}$$

$$C = J - 1229.27$$

$$C = 2704.4 - 1229.27$$

$$C = 1475.13 \text{ lb/hr}$$

Con el valor de C y F se obtiene de (20a) el valor de X_2^J:

$$0.10C + 469.83 = X_2^J J \qquad \text{... (20a)}$$

$$X_2^J = \frac{0.10C+469.83}{J}$$

$$X_2^J = \frac{0.10(1475.13)+469.83}{2704.4}$$

$$X_2^J = 0.2283$$

3.- Se resuelve el sistema de ecuaciones correspondiente a todo el proceso (4 ecuaciones y 4 incógnitas), de tal forma que se obtienen los valores de: A, X_1^A, X_2^A y X_1^H.

El sistema de Ecuaciones del Balance de materia en todo el Proceso es:

$$A + D = J + H + I \qquad \text{... (22)}$$

$$AX_1^A + DX_1^D = JX_1^J + HX_1^H + IX_1^I \qquad \text{... (23)}$$

$$AX_2^A + DX_2^D = JX_2^J + HX_2^H + IX_2^I \qquad \text{... (24)}$$

Relación Adicional:

$$0.9\, X_1^D\, D = H\, X_1^H \qquad \ldots (1)$$

Sustituyendo los valores conocidos:

$$A + 2800 = 2704.4 + 2010 + 990 \qquad \ldots (22a)$$

$$AX_1^A+2800(0.45)=2704.4(0.10)+2010X_1^H+(990)(0.23) \qquad \ldots (23a)$$

$$AX_2^A+2800(0.28)=2704.4(0.2283)+2010(0.213)+(990)(0.42) \qquad \ldots (24a)$$

$$0.9(0.45)(2800) = 2010\, X_1^H \qquad \ldots (1)$$

Simplificando

de (22a) —> A = 2904.4 lb/hr

de (23a):

$$AX_1^A + 1260 = 270.44 + 2010X_1^H + 227.7$$

$$AX_1^A - 2010X_1^H = -761.86$$

Sustituyendo el valor de A:

$$2904.4X_1^A - 2010X_1^H = -761.86 \qquad \ldots (23b)$$

En la expresión (23b) se tienen 2 incógnitas: X_1^A y X_1^H

de (24a):

$$AX_2^A + 2800(0.28) = 2704.4(0.2283) + 2010(0.213) + (990)(0.42)$$

$$AX_2^A + 784 = 617.41 + 428.13 + 415.8$$

$$AX_2^A = 677.34$$

Sustituyendo el valor de A:

$$2904.4X_2^A = 677.34$$

$$X_2^A = 0.2332$$

Sustituyendo en (1):

$$0.9(0.45)(2800) = 2010\, X_1^H$$

$$X_1^H = \frac{0.9(0.45)(2800)}{2010}$$

$$X_1^H = 0.5642$$

Por último, si se sustituye este valor en (23b) se obtiene:

$$\mathbf{2904.4X_1^A - 2010(0.5642) = -761.86} \qquad \textbf{... (23b)}$$

$$X_1^A = 0.1281$$

4.- Resolver individualmente los equipos I y IV. Obteniendo así: B, X_1^B, X_2^B, y G, X_1^G, X_2^G respectivamente.

Resolviendo el equipo I:

$$\mathbf{A = B + C} \qquad \textbf{... (2)}$$

$$\mathbf{AX_1^A = BX_1^B} \qquad \textbf{... (3)}$$

$$\mathbf{AX_2^A = BX_2^B + CX_2^C} \qquad \textbf{... (4)}$$

En donde se desconocen las especificaciones de la corriente B: B, X_1^B, X_2^B

Sustituyendo valores:

$$\mathbf{2904.4 = B + 1475.13} \qquad \textbf{... (2a)}$$

$$\mathbf{2904.4(0.1281) = BX_1^B} \qquad \textbf{... (3a)}$$

$$\mathbf{2904.4(0.2332) = BX_2^B + 1475.13(0.1)} \qquad \textbf{... (4a)}$$

De (2a) la única incógnita es B:---> B = 1429.27 lb/hr

Sustituyendo el valor de B en (3a) la única incógnita es X_1^B:

$$2904.4(0.1281) = BX_1^B \qquad ... (13)$$

$$2904.4(0.1281) = 1429.27X_1^B$$

$$X_1^B = 0.2603$$

En (4a) al sustituir el valor de B la única incógnita es X_2^B:

$$2904.4(0.2332) = BX_2^B + 1475.13(0.1) \qquad ... (14)$$

$$677.31 = 1429.27\,X_2^B + 147.513$$

$$X_2^B = 0.3707$$

Resolviendo ahora el equipo IV:

$G = H + I$ ... **(14)**

$GX_1^G = HX_1^H + IX_1^I$ ... (15)

$GX_2^G = HX_2^H + IX_2^I$ ... (16)

Incógnitas: G, X_1^G, X_2^G.

Sustituyendo valores:

$G = 2010 + 990$ ... **(14a)**

$GX_1^G = 2010(0.5642) + 990(0.23)$ ... **(15a)**

$GX_2^G = 2010(0.213) + 990(0.42)$ ... **(16a)**

De (14a) ---> $G = 3000$ lb/hr

Sustituyendo el valor de G en (15a), se obtiene el valor de X_1^G.

$GX_1^G = 2010(0.5642) + 990(0.23)$ ... (15a)

$3000X_1^G = 2010(0.5642) + 990(0.23)$

$X_1^G = 0.4539$

Sustituyendo el valor de G en (16a), se obtiene ahora el valor de X_2^G.

$GX_2^G = 2010(0.213) + 990(0.42)$ ... (16a)

$3000X_2^G = 428.13 + 415.8$

$3000X_2^G = 843.93$

$X_2^G = 0.2813$

5.- Por último se utiliza el sistema de ecuaciones del equipo III para comprobar los valores obtenidos.

$B + E = G$ ... (10)

$1429.27 + 1570.73 = 3000$

$3000 = 3000$ ---> Se cumple

$BX_1^B + EX_1^E = GX_1^G$ ... **(11)**

$(0.2603)(1429.27) + (1570.73)(0.63) = 3000(0.4539)$

$372.04 + 989.6 = 1361.7$

$1361.64 \approx 1361.7 \rightarrow$ Se cumple (Existe un pequeño error por redondeo).

$$BX_2^B + EX_2^E = GX_2^G \qquad \text{... (12)}$$

(1429.27)(0.3707) + (1570.73)(0.20) = (3000)(0.2813)

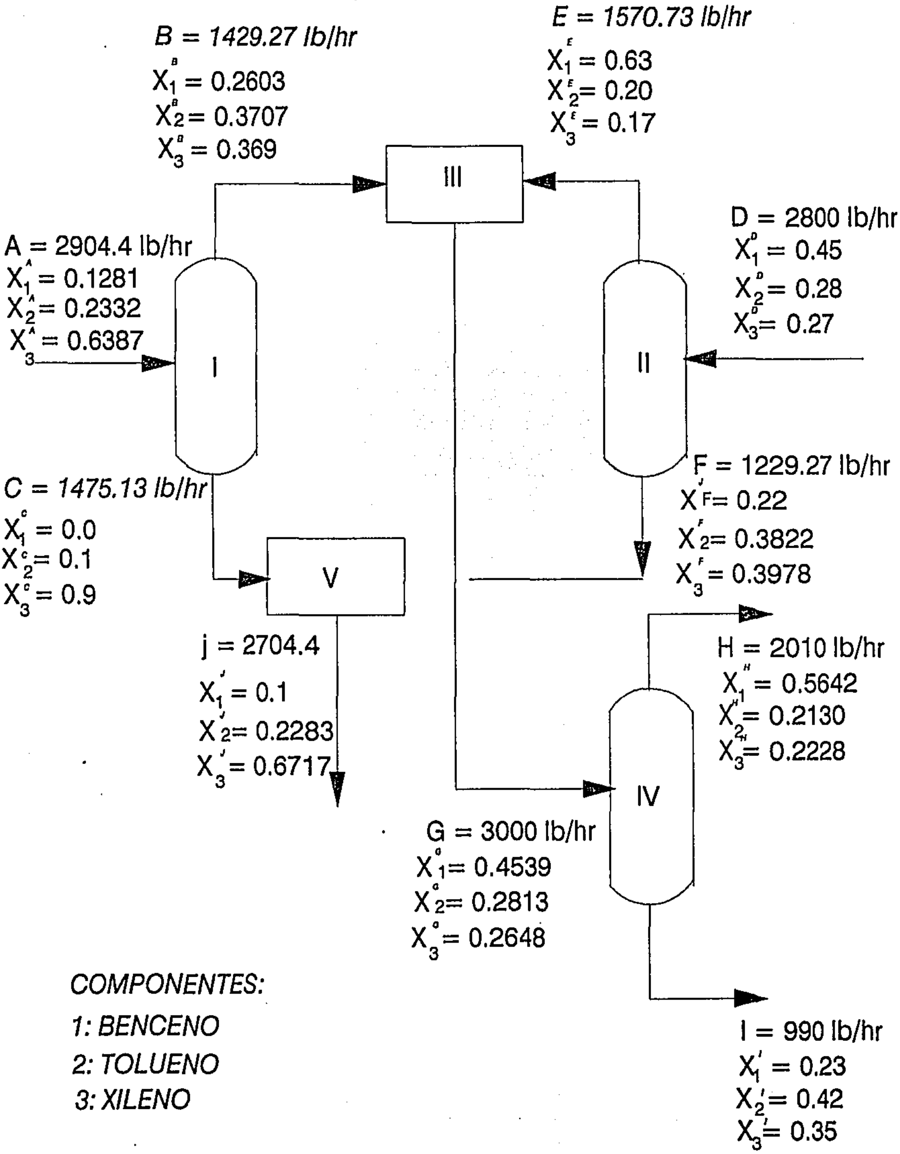
529.83 + 314.146 = 843.9

843.98 ≈ 843.9 → Se cumple.

(Existe un pequeño error por redondeo)

8. RESULTADOS

El problema ha sido completamente resuelto. Las especificaciones de todas las corrientes se dan en el siguiente diagrama:



COMPONENTES:

1: BENCENO

2: TOLUENO

3: XILENO

PROBLEMA 8. BALANCE DE MATERIA A REGIMEN PERMANENTE PARA VARIOS EQUIPOS.

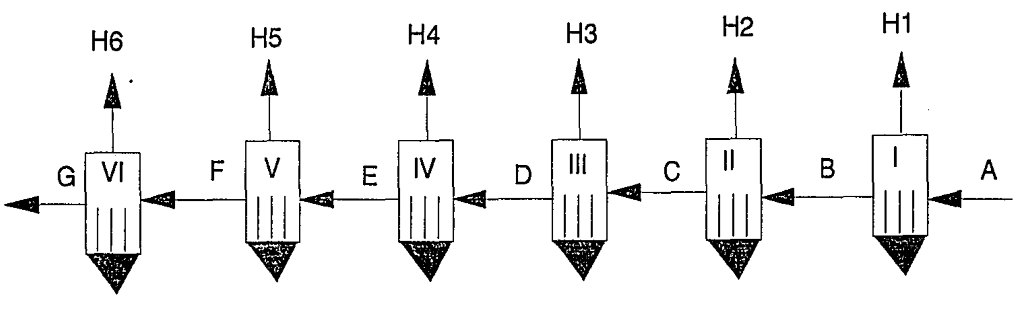
Objetivo: Reconocer la utilidad de plantear balances por equipos y un balance global.

Se quiere concentrar 250,000 Kg/hr de una solución de salmuera cuya composición de NaCl es de 42% en peso hasta 84% en peso. Con la finalidad de ahorrar energía se va a realizar esta operación en varias etapas para lo cual se utilizarán seis evaporadores conectados en serie. En cada uno de estos equipos se evapora la misma cantidad de agua. Se desea saber que cantidad de agua se necesita evaporar para llevar a cabo esta operación.

1) Realice un análisis de las variables involucradas, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas y plantee las relaciones adicionales que se derivan del problema.
2) Plantee las ecuaciones involucradas.
3) Efectúe un análisis de grados de libertad. De acuerdo a éste, ¿Se encuentra correctamente planteado el problema?, en caso de que tenga solución, plantee una estrategia de solución y resuelva numéricamente el problema.
4) Dé las especificaciones de todas las corrientes que intervienen en este proceso.

SOLUCION:

Se le asigna una letra a cada una de las corrientes presentes en el proceso de tal suerte que se tienen 13 corrientes (A, B, C, D, E, F, G, H1, H2, H3, H4, H5 y H6).
Enumerando los equipos del I al VI.
En este problema 2 componentes se encuentran presentes en la mezcla:
1: Sal (NaCl)
2: Agua



1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

Se presenta la tabla de variables. Se especifica el valor de las variables conocidas. Las incógnitas aparecen con la letra N.

Los flujos másicos se especificarán en Kg/hr y las composiciones en fracciones masa.

CORRIENTE	FLUJO	FRACCION PESO DE CADA COMPONENTE		# incógnitas
	Kg/hr	1	2	
A	100,000	0.42	0.58	0:Corriente especificada
B	N	N	N	2:Flujo y 1 composición
C	N	N	N	2:Flujo y 1 composición
D	N	N	N	2:Flujo y 1 composición
E	N	N	N	2:Flujo y 1 composición
F	N	N	N	2:Flujo y 1 composición
G	N	0.84	0.16	1:Flujo
H1	N	-	1.0	1:Flujo
H2	N	-	1.0	1:Flujo
H3	N	-	1.0	1:Flujo
H4	N	-	1.0	1:Flujo
H5	N	-	1.0	1:Flujo
H6	N	-	1.0	1:Flujo
Número total de variables desconocidas = 17				

2. RELACIONES ADICIONALES:

De acuerdo al enunciado del problema, la cantidad de agua evaporada en cada uno de los equipos es la misma, por lo cual se pueden plantear las siguientes relaciones adicionales:

H1 = H2 **... (1)**

La ecuación (1) está asociada a los equipos I y II.

$$H2 = H3 \qquad \ldots (2)$$

La ecuación (2) está asociada a los equipos II y III.

$$H3 = H4 \qquad \ldots (3)$$

La ecuación (3) está asociada a los equipos III y IV.

$$H4 = H5 \qquad \ldots (4)$$

La ecuación (4) está asociada a los equipos IV y V.

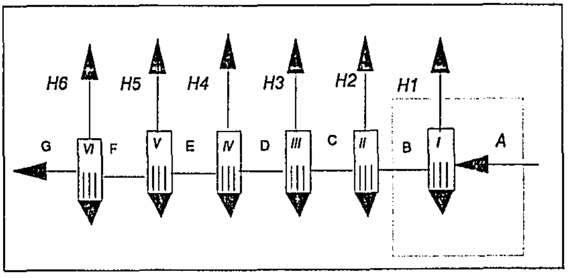
$$H5 = H6 \qquad \ldots (5)$$

La ecuación (5) está asociada a los equipos V y VI.

3. ECUACIONES DE BALANCES DE MATERIA

Se tienen 6 equipos, para cada uno de ellos se puede plantear un balance total y 2 balances por componente.

SISTEMA: EQUIPO I



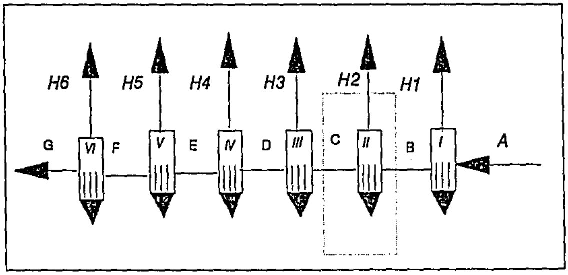
$$A = B + H1 \qquad \ldots (6)$$

$$AX_1{}^A = BX_1{}^B \qquad \ldots (7)$$

$$AX_2{}^A = BX_2{}^B + H1 \qquad \ldots (8)$$

No hay relaciones adicionales asociadas a este equipo.

SISTEMA: EQUIPO II



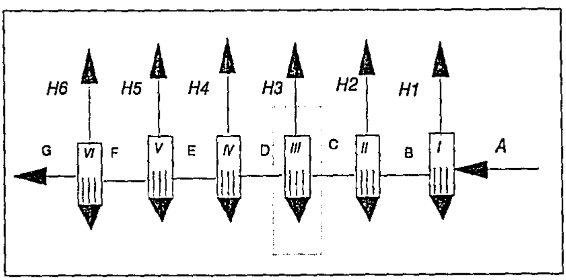
$$B = C + H2 \qquad \dots (9)$$

$$BX_1^B = CX_1^C \qquad \dots (10)$$

$$BX_2^B = CX_2^C + H2 \qquad \dots (11)$$

No hay relaciones adicionales asociadas a este equipo.

SISTEMA: EQUIPO III



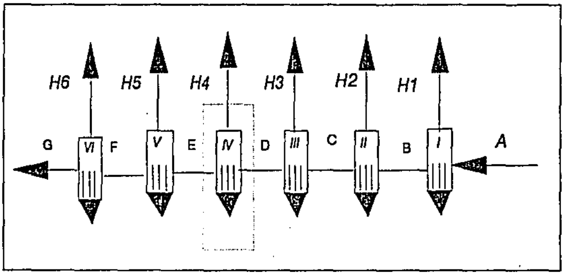
$$C = D + H3 \qquad \dots (12)$$

$$CX_1^C = DX_1^D \qquad \dots (13)$$

$$CX_2^C = DX_2^D + H3 \qquad \dots (14)$$

No hay relaciones adicionales asociadas a este equipo.

SISTEMA: EQUIPO IV



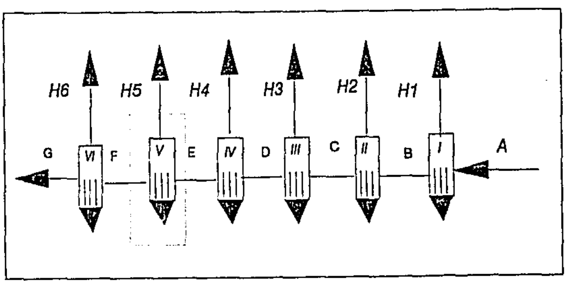
$D = E + H4$ ... (15)

$DX_1^D = EX_1^E$ ...(16)

$DX_2^D = EX_2^E + H4$ ... (17)

No hay relaciones adicionales asociadas a este equipo.

SISTEMA: EQUIPO V



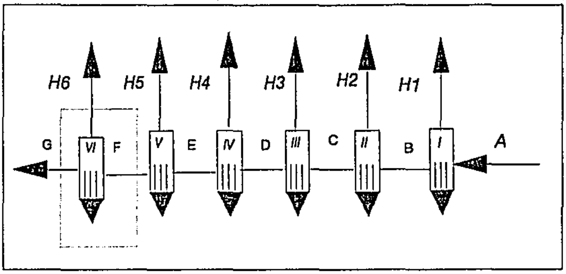
$E = F + H5$ ... (18)

$EX_1^E = FX_1^F$ ... (19)

$EX_2^E = FX_2^F + H5$ ... (20)

No hay relaciones adicionales asociadas a este equipo.

SISTEMA: EQUIPO VI



$F = G + H6$ ... (21)

$FX_1{}^F = GX_1{}^G$ ... (22)

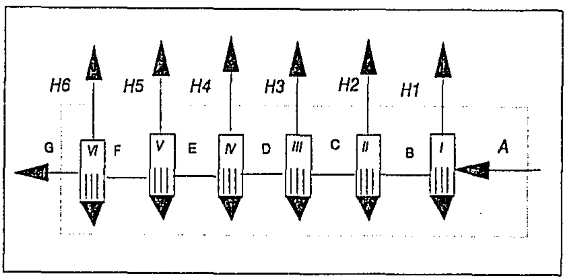
$FX_2{}^F = GX_2{}^G + H6$ ... (23)

No hay relaciones adicionales asociadas a este equipo.

Para cada equipo se tienen 2 ecuaciones independientes. Por lo tanto se tiene un total de 12 ecuaciones de balance.

Es posible establecer un balance tomando como sistema todo el proceso. Este sería el siguiente:

SISTEMA: TODO EL PROCESO



$A = G + H1 + H2 + H3 + H4 + H5 + H6$ ... (24)

$AX_1{}^A = GX_1{}^G$ ... (25)

$AX_2{}^A = GX_2{}^G + H1 + H2 + H3 + H4 + H5 + H6$ ... (26)

Las 5 relaciones adicionales, ecuación 1 a 5, están asociadas con este sistema.

4. ANALISIS DE LOS GRADOS DE LIBERTAD.

Equipo Número:	I	II	III	IV	V	VI	Todo el proceso	Global
Número de Incógnitas:	3	5	5	5	5	4	7	17
Ecuaciones de Balance:	2	2	2	2	2	2	2	12
Ecuaciones Adicionales:	0	0	0	0	0	0	5	5
Total de Ecuaciones:	2	2	2	2	2	2	7	17
Grados de Libertad:	1	3	3	3	3	2	0	0

La tabla anterior indica que el problema se encuentra bien especificado y tiene solución única.

5. ESTRATEGIA DE RESOLUCION

Analizando la tabla de grados de libertad, se puede observar que tomando en cuenta como sistema todo el proceso, los grados de libertad son igual a cero. El sistema de ecuaciones de balance es:

$A = G + H1 + H2 + H3 + H4 + H5 + H6$ ... (24)

$AX_1^A = GX_1^G$ ... (25)

$AX_2^A = GX_2^G + H1 + H2 + H3 + H4 + H5 + H6$ ... (26)

Además, las relaciones adicionales asociadas a todo el proceso son:

$H1 = H2$ ... (1)

$H2 = H3$ ... (2)

$H3 = H4$ ... (3)

$H4 = H5$ ... (4)

$H5 = H6$ ... (5)

Las incógnitas de este sistema de ecuaciones son: Los flujos G, H1, H2, H3, H4, H5, H6, dando un total de 7.

Se tienen 2 ecuaciones de balance independientes y 5 relaciones adicionales independientes que dan un total de 7 ecuaciones y 7 incógnitas, por lo que el sistema está correctamente planteado.

De las relaciones adicionales se puede simplificar el sistema ya que:

$H1 = H2 = H3 = H4 = H5 = H6 = H$

De tal forma que en vez de tener 6 incógnitas se simplifica a una. Sustituyendo H en las ecuaciones de balance (25) y (26):

$$A = G + 6H \qquad ...(27)$$

$$AX_1^A = GX_1^G \qquad ...(28)$$

En este sistema de ecuaciones, simplificado, las únicas incógnitas son G y H. Utilizando cualquier método de resolución de sistemas de ecuaciones lineales se puede conocer estos valores.
Conocida la cantidad de agua que utilizará cada una de los evaporadores. La cantidad total viene dada por 6H.
Es necesario conocer las composiciones de las corrientes B, C, D, E y F, para esto, es posible plantear una tabla adicional de grados de libertad para visualizar de que forma se ha simplificado el problema:

Equipo Número:	I	II	III	IV	V	VI
Número de Incógnitas:	2	4	4	4	4	2
Ecuaciones de Balance:	2	2	2	2	2	2
Ecuaciones Adicionales:	0	0	0	0	0	0
Total de Ecuaciones:	2	2	2	2	2	2
Grados de Libertad:	0	2	2	2	2	0

El siguiente paso sería resolver los equipos I y VI (independientemente), en los cuales los grados de libertad son igual a cero.

EQUIPO I:

$$A = B + H \qquad ...(6)$$

$$AX_1^A = BX_1^B \qquad ...(7)$$

$$AX_2^A = BX_2^B + H \qquad ...(8)$$

De este sistema las incógnitas son B y X_1^B

EQUIPO VI:

$$F = G + H \qquad ...(21)$$

$$FX_1^F = GX_1^G \qquad ...(22)$$

$$FX_2^F = GX_2^G + H \qquad ...(23)$$

Así mismo las incógnitas de este sistema son F y X_1^F.

Resueltos los dos sistemas anteriores, la tabla de grados de libertad quedaría:

Equipo Número:	II	III	IV	V
Número de Incógnitas:	2	4	4	2
Ecuaciones de Balance:	2	2	2	2
Ecuaciones Adicionales:	0	0	0	0
Total de Ecuaciones:	2	2	2	2
Grados de Libertad:	0	2	2	0

Se resuelven ahora independientemente los sistemas de los equipos II y V.

EQUIPO II:

$$B = C + H \qquad \dots (9)$$

$$BX_1^B = CX_1^C \qquad \dots (10)$$

$$BX_2^B = CX_2^C + H \qquad \dots (11)$$

De este sistema las incógnitas son C y X_1^C

EQUIPO V:

$$E = F + H \qquad \dots (18)$$

$$EX_1^E = FX_1^F \qquad \dots (19)$$

$$EX_2^E = FX_2^F + H \qquad \dots (20)$$

De este sistema las incógnitas son E y X_1^E.

Los grados de libertad se simplifican a:

Equipo Número:	III	IV
Número de Incógnitas:	2	2
Ecuaciones de Balance:	2	2
Ecuaciones Adicionales:	0	0
Total de Ecuaciones:	2	2
Grados de Libertad:	0	0

Enseguida se puede resolver el equipo III o el IV y al resolver cualquiera de los dos, el otro ya queda especificado. Es decir, de estos dos sistemas sólo uno es independiente. El otro puede servir para comprobar los cálculos obtenidos.

Eligiendo el sistema de ecuaciones del equipo III:

EQUIPO III:

$C = D + H$ ... (12)

$CX_1^C = DX_1^D$ ... (13)

$CX_2^C = DX_2^D + H$ ... (14)

De este sistema las incógnitas son D y X_1^D

El problema ha sido resuelto, se conocen todas y cada una de las especificaciones de las corrientes involucradas, ahora se procede a comprobar los cálculos con el sistema de ecuaciones correspondiente al equipo IV:

EQUIPO IV:

$D = E + H$ ... (15)

$DX_1^D = EX_1^E$ ... (16)

$DX_2^D = EX_2^E + H$ ... (17)

De acuerdo a esta estrategia de resolución se puede plantear el siguiente:

6. ALGORITMO DE RESOLUCION

1. Se resuelven las ecuaciones (27) y (28) y se obtienen los valores de los flujos G y H.
2. Se resuelven las ecuaciones (6) y (7), obteniendo los valores de B y X_1^B.
3. Se resuelven las ecuaciones (21) y (22), obteniendo los valores de F y X_1^F.
4. Se resuelven las ecuaciones (9) y (10), obteniendo los valores de C y X_1^C.
5. Se resuelven las ecuaciones (18) y (19), obteniendo los valores de E y X_1^E.
6. Se resuelven las ecuaciones (12) y (13), para obtener D y X_1^D.
7. Con las ecuaciones (15) y (16) del equipo IV se comprueban los valores anteriores.
8. FIN.

7. SOLUCION NUMERICA

1. Se resuelven las ecuaciones (27) y (28) y se obtienen los valores de los flujos G y H.

$A = G + 6H$ ... (27)

$AX_1^A = GX_1^G$ ... (28)

Sustituyendo valores:

$250{,}000 = G + 6H$

$250{,}000(0.42) = 0.84G$

Simplificando:

$250{,}000 = G + 6H$

$105{,}000 = 0.84G$

Resolviendo el sistema por el método Gauss-Jordan, la matriz aumentada está dada por:

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 6 & 250{,}000 \\ 0.84 & 0 & 105{,}000 \end{array}\right| \approx$$

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 6 & 250{,}000 \\ 0 & -5.04 & -105{,}000 \end{array}\right| \approx$$

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 125{,}000 \\ 0 & 1 & 20{,}833.33 \end{array}\right|$$

$G = 125{,}000$ Kg/hr
$H = 20{,}833.33$ Kg/hr

2. Se resuelven las ecuaciones (6) y (7), obteniendo los valores de B y X_1^B.

$A = B + H$ ... (6)

$AX_1^A = BX_1^B$ ... (7)

Sustituyendo valores:

$\mathbf{250{,}000 = B + 20{,}833.33}$ ... (6a)

$\mathbf{(250{,}000)(0.42) = BX_1^B}$ ... (7a)

De (6a) ----> $B = 229{,}166.67$ Kg/hr

De (7a) ----> $X_1^B = 0.4582$

3. Se resuelven las ecuaciones (21) y (22), obteniendo los valores de F y X_1^F.

$\mathbf{F = G + H}$ ... (21)

$\mathbf{FX_1^F = GX_1^G}$ ... (22)

Sustituyendo valores:

$\mathbf{F = 125{,}000 + 20{,}833.33}$ ... (21a)

$\mathbf{FX_1^F = 125{,}000(0.84)}$ ... (22a)

De (21a) ----> $F = 145{,}833.33$ Kg/hr

Con este valor de (22a) ----> $X_1^F = 0.72$

4. Se resuelven las ecuaciones (9) y (10), obteniendo los valores de C y X_1^C.

$$B = C + H \qquad \text{... (9)}$$

$$BX_1^B = CX_1^C \qquad \text{... (10)}$$

Sustituyendo valores:

$$229{,}166.67 = C + 20{,}833.33 \qquad \text{... (9a)}$$

$$229{,}166.67(0.4582) = CX_1^C \qquad \text{... (10a)}$$

De (9a) ----> $C = 208{,}333.34$ Kg/hr

Con este valor de (10a) ----> $X_1^C = 0.5040$

5. Se resuelven las ecuaciones (18) y (19), obteniendo los valores de E y X_1^E.

$$E = F + H \qquad \text{... (18)}$$

$$EX_1^E = FX_1^F \qquad \text{... (19)}$$

Sustituyendo valores:

$$E = 145{,}833.33 + 20{,}833.33 \qquad \text{... (18a)}$$

$$EX_1^E = 145{,}833.33(0.72) \qquad \text{... (19a)}$$

De (18a) ----> $E = 166{,}666.66$ Kg/hr

Con este valor de (19a) ----> $X_1^E = 0.63$

6. Se resuelven las ecuaciones (12) y (13), para obtener D y X_1^D.

$$C = D + H \qquad \text{... (12)}$$

$$CX_1^C = DX_1^D \qquad \text{... (13)}$$

Sustituyendo valores:

$$208{,}333.34 = D + 20{,}833.33 \qquad \text{... (12a)}$$

$$(208{,}333.34)(0.5040) = DX_1^D \qquad \text{... (13a)}$$

De (12a) ----> $D = 187{,}500.01$ Kg/hr

Con este valor de (13a) ----> $X_1^D = 0.56$

7. Con las ecuaciones (15) y (16) del equipo IV se comprueban los valores anteriores.

$$D = E + H \qquad \text{... (15)}$$

$$DX_1^D = EX_1^E \qquad \text{... (16)}$$

Sustituyendo valores:

$$187{,}500.01 = 166{,}666.66 + 20{,}833$$

$$187{,}500.01 \approx 187{,}499.66$$

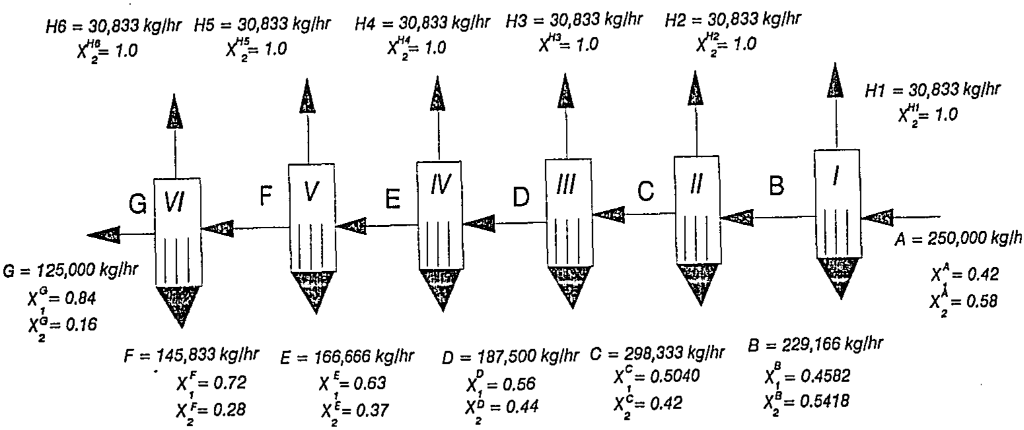
(Existe un pequeño error de redondeo)

$$(187{,}500.01)(0.56) = 166{,}666.66(0.63)$$

$$105{,}000 \approx 104{,}999.58$$

6. FIN.

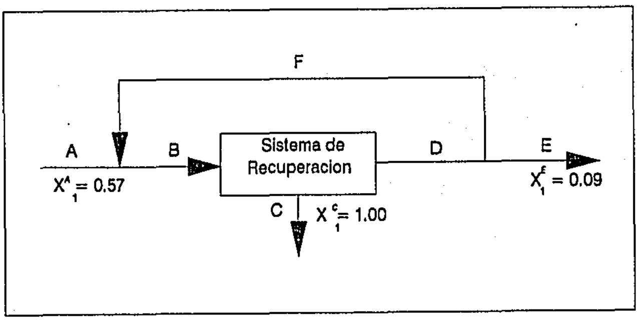
Las especificaciones de todas las corrientes están dadas a continuación:



PROBLEMA 9. BALANCE DE MATERIA EN UN SISTEMA CON RECIRCULACION.

Objetivo: Manejar los sistemas con recirculaciones y verificar que se cumple el balance de materia.

Se desea recuperar cierto solvente de un gas de desperdicio mediante el siguiente proceso:



La unidad de recuperación es capaz de eliminar de la corriente gaseosa tres cuartas partes del solvente presentes en la alimentación combinada a la unidad (es decir, la suma de la corriente de entrada al proceso y de la recirculación). Se desea conocer las especificaciones de todas las corrientes y calcular la fracción de recirculación (es decir, que parte de la alimentación se recircula). Las composiciones están en fracción masa.

De acuerdo a la información anterior:

1. Haga un análisis de las variables que intervienen en el proceso, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas. Plantee las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.
2. Plantee las ecuaciones de balance por equipos y escriba también las relaciones adicionales asociadas a cada equipo.
3. Efectúe un análisis de grados de libertad. ¿Esta correctamente planteado el problema?, ¿Tiene una o varias soluciones?
4. En el caso de que tenga solución, plantee una estrategia de resolución y resuelva numéricamente el problema.

SOLUCION:

Se tienen 6 corrientes (A, B, C, D, E y F), 2 componentes:

1. Solvente
2. Gas de desperdicio

Además del sistema de purificación, se considerarán tanto el mezclador como el divisor como equipos artificiales, de tal forma que el proceso tiene 3 equipos: I, el mezclador; II, el sistema de recuperación y III el divisor.

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

En la siguiente tabla se indica para cada corriente las variables que se conocen, las incógnitas aparecen con la letra N y las corrientes en las que no exista alguno de los componentes, en la fracción masa asociada a ese componente se anotará un guión.

	FLUJO	FRACCION MASA DE CADA COMPONENTE		# de incógnitas
CORRIENTE	Kg/s	1	2	
A	N	0.57	0.43	1: Flujo
B	N	N	N	2: Flujo y una composición
C	N	1.00	-	1: Flujo
D	N	N	N	2: Flujo y una composición
E	N	0.09	0.91	1: Flujo
F	N	N	N	2: Flujo y una composición
Número total de incógnitas = 9				

2. RELACIONES ADICIONALES:

Se menciona en el problema que la unidad de recuperación es capaz de eliminar tres cuartas partes del solvente presentes en la alimentación combinada a la unidad (es decir, la suma de la corriente de entrada al proceso y de la recirculación). La relación adicional está dada entonces por:

$$C = \frac{3}{4} X_1^B B \qquad \ldots (1)$$

Esta ecuación está asociada al equipo II.

También se puede ver en el diagrama de flujo de proceso que el equipo artificial III, es simplemente un divisor, por lo que la composición de la corriente D, E y F es igual. De lo anterior se derivan las relaciones adicionales:

$$X_1^D = X_1^E \qquad \ldots (2)$$

$$X_1^F = X_1^E \qquad \ldots (3)$$

Estas relaciones adicionales están asociadas al equipo III.

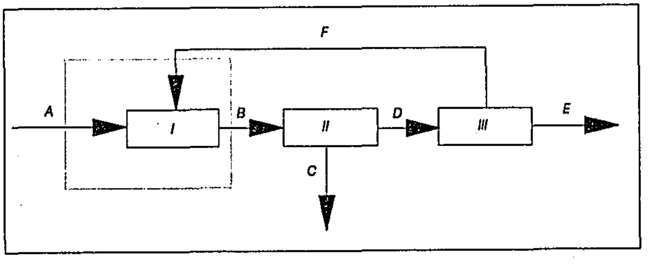
Como se conoce la composición de la corriente E, se pueden utilizar las ecuaciones anteriores para eliminar como incógnitas a las composiciones de las corrientes D y F. En este caso la tabla de variables queda de la siguiente manera:

	FLUJO	FRACCION MASA DE CADA COMPONENTE		# de incógnitas
CORRIENTE	Kg/s	1	2	
A	N	0.57	0.43	1: Flujo
B	N	N	N	2: Flujo y una composición
C	N	1.00	-	1: Flujo
D	N	0.09	0.91	1: Flujo
E	N	0.09	0.91	1: Flujo
F	N	0.09	0.91	1: Flujo
Número total de incógnitas = 7				

El número total de incógnitas disminuyó en dos al utilizar las relaciones adicionales, ecuaciones (2) y (3), por lo cual en lo que resta del problema, la relación adicional dada por la ecuación (1) es la única que falta por utilizar.

3. ECUACIONES DE BALANCES DE MATERIA

SISTEMA: EQUIPO I



$A + F = B$ ... (4)

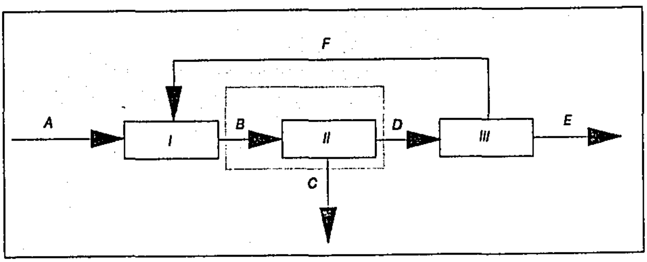
$AX_1^A + FX_1^F = BX_1^B$ ... (5)

$AX_2^A + FX_2^F = BX_2^B$ ... (6)

No hay relaciones adicionales

Número de Ecuaciones Independientes = 2

SISTEMA: EQUIPO II



$B = C + D$ ... (7)

$BX_1^B = C + DX_1^D$ ... (8)

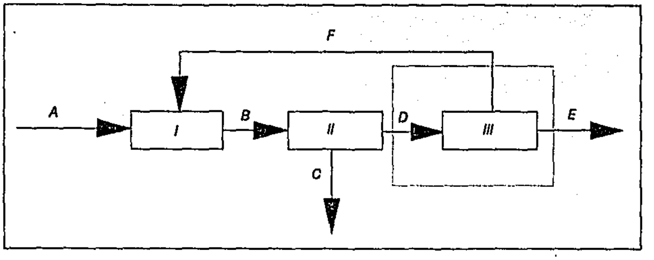
$BX_2^B = DX_2^D$ ... (9)

Relación adicional:

$C = \frac{3}{4} X_1^B B$ ... (1)

Número de Ecuaciones Independientes = 3

SISTEMA: EQUIPO III



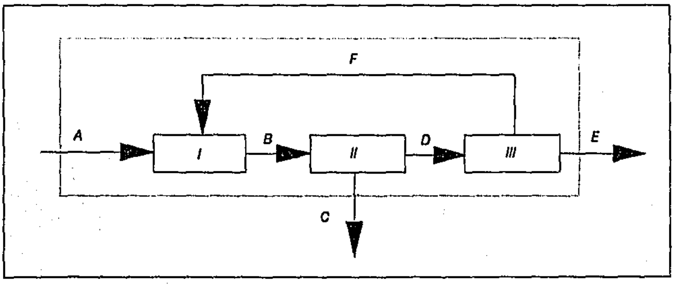
D = E + F ... (10)

Aquí no se hacen falta balances por componente, ya que las composiciones permanecen sin cambio antes y después del divisor.En un divisor solo se puede hacer el balance total de materia.

Número de Ecuaciones Independientes = 1

SISTEMA: TODO EL PROCESO

Se puede plantear un balance útil adicional: Tomando como sistema todo el proceso.



$A = C + E$ ... (12)

$AX_1^A = C + EX_1^E$ ... (13)

$AX_2^A = EX_2^E$ ... (14)

No hay relaciones adicionales

Número de Ecuaciones Independientes = 2

4. ANALISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

Equipo Número:	I	II	III	Todo el proceso	Global
Número de Incógnitas:	4	4	3	3	7
Ecuaciones de Balance:	2	2	1	2	5
Ecuaciones Adicionales:	0	1	0	0	1
Total de Ecuaciones:	2	3	1	2	6
Grados de Libertad:	2	1	2	1	1

El análisis global del problema da como incógnitas:

Flujos: A, B, C, D, E, F

Composiciones: X_1^B

Que suman 7.

Las ecuaciones para el análisis global son:

1ª opción: Ecuaciones: 1, 4, 5, 7, 8, 10 (Balances por equipos)

2ª opción: Ecuaciones: 1, 7, 8, 10, 12, 13 (Balances por equipos II y III y todo el proceso).

En los dos casos el número de ecuaciones es igual a 6

Como se puede observar en la tabla anterior, los grados de libertad del proceso global son igual a 1. Esto quiere decir que el sistema esta subespecificado o que tiene varias soluciones. Si se analiza la tabla de variables, se puede observar que no se especifica ningún flujo, por lo que es posible introducir una base de cálculo. Por ejemplo, la corriente de alimentación A = 10 kg/s. Los flujos restantes estarán en función de esta base de cálculo seleccionada, pero independientemente de esta base de cálculo, las composiciones no se afectan. En el enunciado del problema se pregunta por la razón de flujos F/A. Esta razón es independiente de la base que se tome.

5. ESTRATEGIA DE RESOLUCION

Al especificar el flujo de la corriente de alimentación , la tabla de grados de libertad se simplifica a:

Equipo Número:	I	II	III	Todo el proceso	Global
Número de Incógnitas:	3	4	3	2	6
Ecuaciones de Balance:	2	2	1	2	5
Ecuaciones Adicionales:	0	1	0	0	1
Total de Ecuaciones:	2	3	1	2	6
Grados de Libertad:	1	1	2	0	0

Los grados de libertad del balance global son igual a cero, por lo que el problema ya tiene solución. Observe también que el balance tomando como sistema todo el proceso, también tiene grados de libertad cero. Entonces es posible empezar a resolver el problema tomando este sistema.

Ecuaciones independientes tomando como sistema todo el proceso:

$$A = C + E \qquad \text{...(12)}$$

$$AX_1^A = CX_1^C + EX_1^E \qquad \text{...(13)}$$

Se resuelve el sistema y se obtienen los valores de los flujos C y E, por lo que la tabla de grados de libertad estaría dada ahora por:

Equipo Número:	I	II	III
Número de Incógnitas:	3	3	2
Ecuaciones de Balance:	2	2	1
Ecuaciones Adicionales:	0	1	0
Total de Ecuaciones:	2	3	1
Grados de Libertad:	1	0	1

El siguiente paso sería resolver el equipo II obteniendo los flujos de las corrientes B y D y la composición de la corriente B. La tabla de grados de libertad quedaría de la siguiente manera:

Equipo Número:	I	III
Número de Incógnitas:	1	1
Ecuaciones de Balance:	2	1
Ecuaciones Adicionales:	0	0
Total de Ecuaciones:	2	1
Grados de Libertad:	-1	0

La única incógnita que falta por encontrar es el flujo de la corriente F, el cual se obtiene por el balance de materia del equipo III (divisor), y el equipo I queda para comprobar los resultados, lo cual indica el valor negativo en los grados de libertad asociados a este equipo.

6. ALGORITMO DE RESOLUCION

1. Se introduce una base de cálculo y se resuelven las ecuaciones correspondientes a tomar como sistema todo el proceso. Se obtienen los valores de los flujos C y E.
2. Se resuelve el equipo II. Se obtienen los valores de los flujos B y D y las composiciones X_1^B y X_2^B.
3. Se resuelve el equipo III y se obtiene el flujo F.
4. Se comprueban los cálculos con el sistema de ecuaciones correspondiente al equipo I.
5. Al conocer las especificaciones de todas las corrientes, es posible calcular la razón de recirculación F/A.
6. FIN

7. RESOLUCION NUMERICA:

1.- Se introduce una base de cálculo (Flujo de la corriente A = 10 kg/s) y se resuelven las ecuaciones correspondientes a tomar como sistema todo el proceso. Se obtienen los valores de los flujos C y E.

$$A = C + E \qquad \text{... (12)}$$

$$AX_1^A = C + EX_1^E \qquad \text{... (13)}$$

Sustituyendo valores:

$$5.70 = C + 0.09E$$

$$10 = C + E$$

Resolviendo este sistema por el método de Gauss-Jordan:
La matriz ampliada sería:

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 10 \\ 1 & 0.09 & 5.70 \end{array}\right| \approx$$

Multiplicando el primer renglón por (-1) y sumándolo al segundo renglón:

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 10 \\ 1 & -0.91 & -4.30 \end{array}\right| \approx$$

Multiplicando el segundo renglón por (-1/0.91):

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 10 \\ 0 & 1 & 4.725 \end{array}\right| \approx$$

Multiplicando el segundo renglón por (-1) y sumándolo al primero:

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 5.275 \\ 0 & 1 & 4.725 \end{array}\right| \approx$$

Por lo tanto la solución de este sistema de ecuaciones es:

$C = 5.275$ kg/s
$E = 4.725$ kg/s

2. Se resuelve el equipo II.

Las ecuaciones de balance de materia son:

$$\mathbf{B = C + D} \qquad \dots (7)$$

$$\mathbf{BX_1{}^B = C + DX_1{}^D} \qquad \dots (8)$$

$$\mathbf{BX_2{}^B = DX_2{}^D} \qquad \dots (9)$$

y la relación adicional

$$C = \frac{3}{4} X_1{}^B B \qquad \dots (1)$$

Sustituyendo valores

$$B = 5.275 + D \qquad \dots (1)$$

$$BX_1{}^B = 5.275 + 0.09D \qquad \dots (2)$$

Enrique Bazúa Rueda
Mariana Elizabeth Domínguez Oviedo

$BX_2^B = 0.91D$ ... (3)

$5.275 = \frac{3}{4} X_1^B B$ ... (4)

Este es un sistema de tres ecuaciones independientes con tres incognitas: B, D y X_1^Be(Solo dos ecuaciones del balance de materia son independientes y X_2^B no es incógnita ya que $X_2^B = 1 - X_1^B$).

Sustituyendo (4) en (2) se obtiene D

$D = 19.537$ kg/s

y de la ecuación (1) se obtiene B

$B = 24.812$ kg/s.

La composición se obtiene de la ecuación (2) o (3), usando la otra para comprobar.

$X_1^B = 0.28347$

$X_2^B = 0.71653$

3. Se resuelve el equipo III y se obtiene el flujo F.

$D = E + F$ ... (10)

dando como resultado

$F = 24.262$ kg/s

4. Se comprueban los cálculos con el sistema de ecuaciones correspondiente al equipo I.

$A + 14.812 = 24.812 \Rightarrow$ Se cumple

$AX + F = B$ ... (4)

$10_1^A + FX_1^F = BX_1^B$ ... (5)

$(10)(0.57) + (14.812)(0.09) = (24.812)(0.28347)$

$5.70 + 1.3331 = 7.0335$

$7.0331 = 7.0335 \Rightarrow$ Se cumple (existe un pequeño error de redondeo)

$AX_2^A + FX_2^F = BX_2^B$ ... (6)

$(10)(0.43) + (14.812)(0.91) = (24.812)(0.71653)$

$4.3 + 13.4789 = 17.7785$

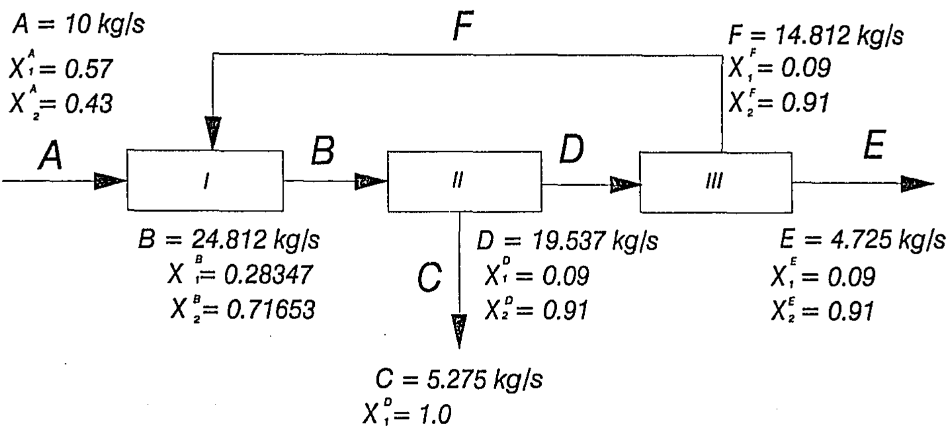
$17.7789 = 17.7785 \Rightarrow$ Se cumple

5. Al conocer las especificaciones de todas las corrientes, es posible calcular la razón de recirculación F/A.

$$\frac{F}{A} = \frac{14.812}{10} = 1.481$$

6. FIN

En el siguiente esquema se dan las especificaciones de todas las corrientes:



Enrique Bazúa Rueda
Mariana Elizabeth Domínguez Oviedo

VI. Aplicaciones

PROBLEMA 10. APLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA PROPUESTA A UNA PLANTA REAL.

Objetivo: Analizar la tabla de grados de libertad para determinar si el problema se encuentra bien especificado.

Del proceso de obtención de estireno de una planta de Petróleos Mexicanos, se describe a continuación la sección de destilación de estireno y se anexa diagrama de flujo de proceso.

En esta sección se separa la mezcla que proviene de la reacción de deshidrogenación del etilbenceno para producir estireno y que contiene los siguientes componentes:tolueno y estireno (productos de la reacción y residuos); etilbenceno y benceno (reactivos que no alcanzaron a transformarse en productos); α-metilestireno (subproducto de la reacción) y algo de agua.

La sección de destilación consta de cuatro columnas de destilación, de las cuales la columna etilbenceno/estireno DA-101 y la columna de estireno/residuos DA-103 se operan al vacío.

A la mezcla deshidrogenada se le agrega un inhibidor no sulfuroso, para evitar la polimerización del estireno y se alimenta a la columna de etilbenceno/estireno DA-101, donde se separa el etilbenceno y más ligeros por el domo, el estireno y residuos pesados por el fondo. El producto de domos se alimenta a la columna de recuperación de etilbenceno DA-102, donde por fondos se obtiene etilbenceno que posteriormente se recircula a la sección de deshidrogenación después de precalentar la corriente de alimentación, y por domos una mezcla de benceno-tolueno, que se separa en la columna DA-104, donde por domos se recupera el benceno que se recircula a la sección de reacción, y por fondos se obtiene tolueno como producto. Los fondos de la columna de etilbenceno/estireno DA-101 se alimentan a la columna de estireno/residuos DA-103 donde se recupera estireno como producto, que se enfría y se manda a almacenamiento, y por fondos se obtienen los residuos que se alimentan a un evaporador de película mojada, donde se recupera estireno por el domo del evaporador y se recircula al fondo de la columna estireno/residuos DA-103.

Ignorando el agente químico utilizado en esta sección (el inhibidor de polimerización), decida si es posible obtener el balance de materia de este proceso, si se especifican las corrientes de alimentación y de etilbenceno; así como el flujo molar del tolueno (0.19 kgmol/hr) y de los residuos (10.91 kmol/hr). Considere que todos los productos, excepto el etilbenceno y el residuo, se extraen puros. El residuo contiene α-metilestireno y estireno. Las composiciones de las corrientes de alimentación y de etilbenceno producto se dan en la siguiente tabla:

COMPONENTE	MEZCLA DESHIDROGENADA	ETILBENCENO
	COMPOSICION EN	FRACCION MOL
Benceno	0.0312	0.0033
Tolueno	0.0389	0.0033
Etilbenceno	0.3067	0.9352
Estireno	0.6166	0.0615
α-Metilestireno	0.0003	0.0000
Agua	0.0063	0.0000

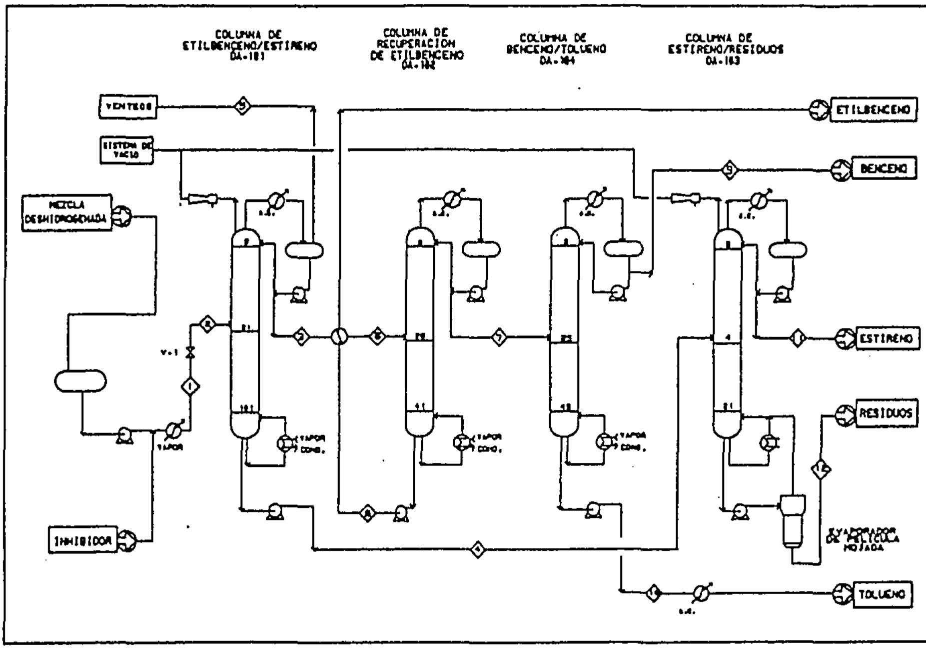
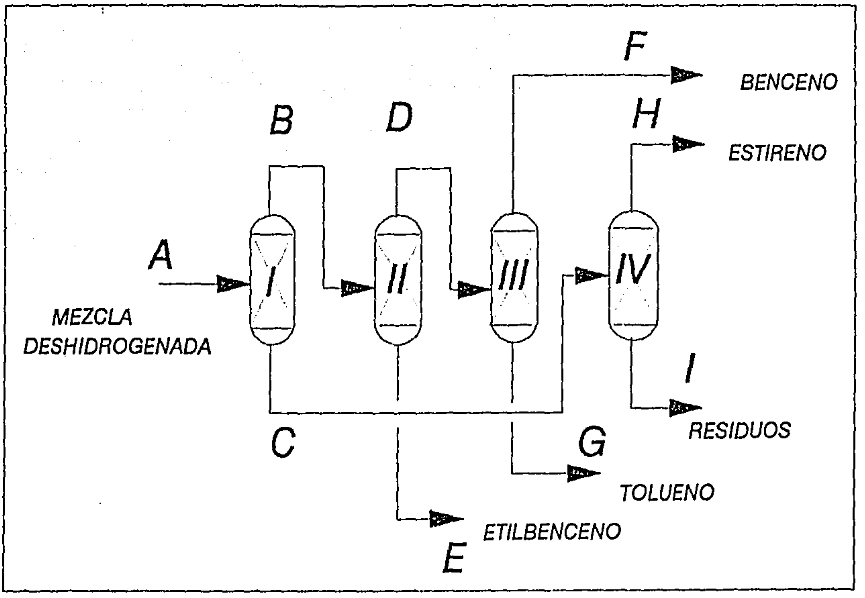


DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO SECCION DE DESTILACION DE ESTIRENO

Es conveniente simplificar el diagrama de flujo de proceso. Para finalidad de balance de materia, no importan ciertos equipos, como cambiadores de calor y bombas, debido a que la masa que entra a ellos es igual a la que sale.

Tampoco se consideran los reflujos de domos y fondos de las torres por regresar al mismo equipo. De esta forma, el diagrama queda simplificado de la siguiente forma:



SOLUCION:
La relación entre este diagrama simplificado y el diagrama de flujo de proceso es la siguiente:

Diagrama simplificado	Diagrama de flujo de proceso
Equipo I	Columna de etilbenceno/estireno
Equipo II	Columna de recuperación de etilbenceno
Equipo III	Columna de benceno/tolueno
Equipo IV	Columna de estireno/residuos
Corriente A	Corrientes 1 y 2
Corriente B	Corrientes 3 y 6
Corriente C	Corriente 4
---------------	Corriente 5
Corriente D	Corriente 7
Corriente E	Corriente 8
Corriente F	Corriente 9
Corriente G	Corriente 10
Corriente H	Corriente 11
Corriente I	Corriente 12

Se le asignó una letra mayúscula a cada corriente, de tal forma se tienen 9 corrientes (A, B, C, D, E, F, G, H e I). También se numeran los cuatro equipos, equipo I, la torre DA-101, equipo II, la torre DA-102, equipo III, la torre DA-104 y equipo IV, la torre DA-103. Para los componentes se asignó la siguiente notación:

Componentes:

1: Benceno
2: Tolueno
3: Etilbenceno
4: Estireno
5: α-metilestireno
6: Agua

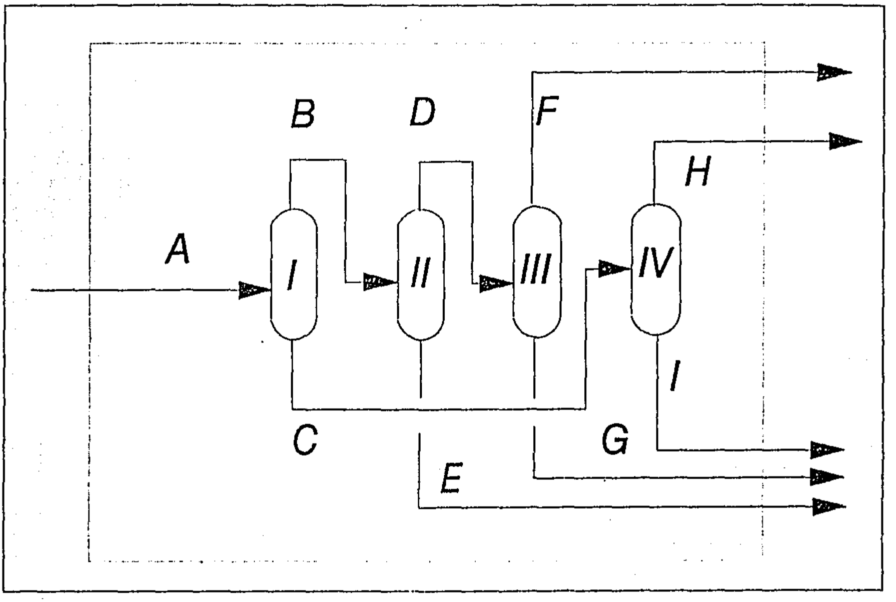
Para determinar si es posible plantear el balance de materia, es necesario analizar las variables que intervienen en el proceso simplificado, así como las ecuaciones independientes que describen cada uno de los sistemas. Con esta información, es posible establecer un análisis de grados de libertad para tomar una decisión.

A) ANALISIS DE LAS VARIABLES:

Del enunciado del problema se obtienen los datos para las corrientes A y E que están totalmente especificadas. Las corrientes F, G y H son componentes puros y solo para la corriente G se conoce el flujo. Para la corriente I se conoce el flujo pero no su composición. Las corrientes B, C y D se desconocen completamente tanto flujo como composición. Con esta información la tabla de variables queda como sigue:

	COMPOSICION (Fracción mol)						FLUJO	# Incógnitas
Corriente	1	2	3	4	5	6	kgmol/hr	
A	0.0312	0.0389	0.3067	0.6166	0.0003	0.0063	301.94	0
B	N	N	N	N	N	N	N	6
C	N	N	N	N	N	N	N	6
D	N	N	N	N	N	N	N	6
E	-	0.0033	0.9352	0.0615	-	-	95.1	0
F	1.0	-	-	-	-	-	N	1
G	-	1.0	-	-	-	-	0.19	0
H	-	-	-	1.0	-	-	N	1
I	-	-	-	N	N	-	10.91	1
Número de incógnitas								20

Antes de proseguir con el problema se analizará esta información para determinar si es consistente. Al proceso global, visto como un todo, se alimenta una corriente, la A, y se obtienen las corrientes E, F, G, H, I, como se ilustra en la siguiente figura:



La alimentación contiene los seis componentes del enunciado del problema. El benceno, componente 1, sale solamente por la corriente F, el tolueno, componente 2, sale parte por la corriente E y parte por la corriente G; el etilbenceno, componente 3, sale solamente por la corriente E; el estireno, componente 4, sale por tres corrientes, E, H e I; el α-metilbenceno, componente 5, sale solamente por la corriente I; y el agua, componente 6, no sale por ninguna corriente. De este análisis se observa una primera inconsistencia en el planteamiento del problema: No se puede cumplir el balance de materia para el agua. Para subsanar esta anomalía será necesario especificar por qué, cuál o cuáles corrientes saldrá el agua. **Digamos que el agua sale junto con el benceno en la corriente F.**

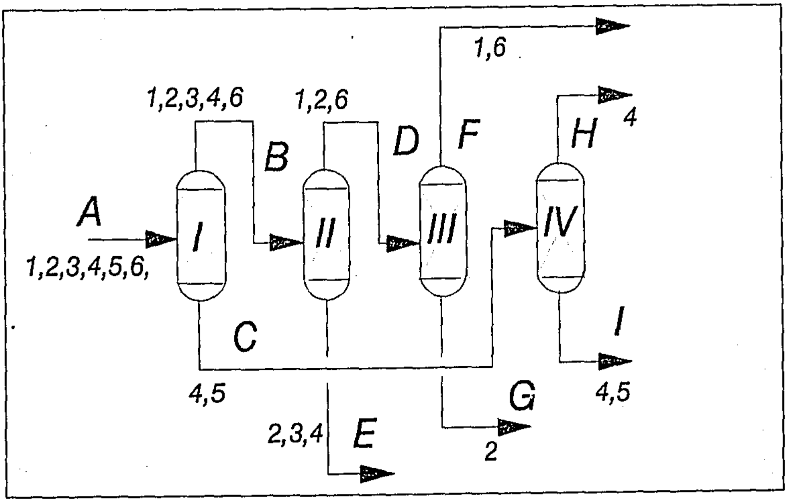
En segundo término se analizarán las corrientes intermedias, B, C y D, que en principio se ha supuesto que contienen todos los componentes presentes en la alimentación A.

Al equipo III se alimenta la corriente D y salen las corrientes F y G. Los componentes presentes en D deben ser los mismos componentes que en las corrientes F y G, ya que el equipo III solo sirve para separar los elementos presentes en su alimentación. Así, si la corriente F contiene a los componentes 1 y 6, y la corriente G al componente 2; entonces la corriente D solo contendrá a los componentes 1, 2 y 6.

Al equipo IV se alimenta la corriente C y salen las corrientes H e I. Los componentes presentes en las corrientes H e I son: el 4 en la corriente H y 4 y 5 en la corriente I. Por lo tanto la corriente C solo contendrá a los componentes 4 y 5.

De igual manera se encuentra que los componentes presentes en la corriente B, por análisis del equipo II, son: 1, 2, 3, 4 y 6.

Por último, el análisis del equipo I indica que los componentes asignados a las corrientes A, B y C son consistentes. Lo anterior se encuentra resumido en el siguiente esquema de proceso y en la tabla de variables corregida que se indica a continuación:



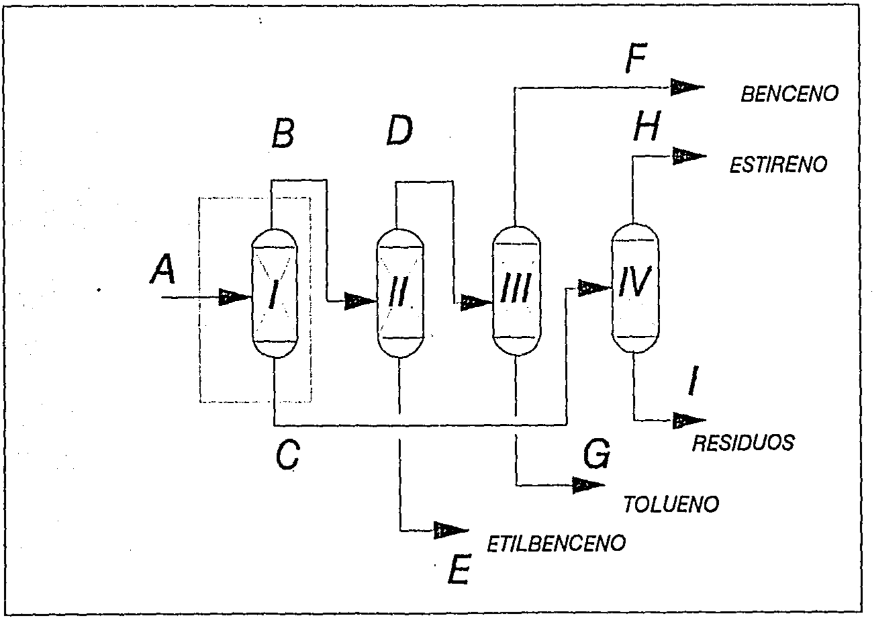
	COMPOSICION (Fracción mol)						FLUJO	# Incógnitas
Corriente	1	2	3	4	5	6	kgmol/hr	
A	0.0312	0.0389	0.3067	0.6166	0.0003	0.0063	301.94	0
B	N	N	N	N	-	N	N	5
C	-	-	-	N	N	-	N	2
D	N	N	-	-	-	N	N	3
E	-	0.0033	0.9352	0.0615	-	-	95.1	0
F	N	-	-	-	-	N	N	2
G	-	1.0	-	-	-	-	0.19	0
H	-	-	-	1.0	-	-	N	1
I	-	-	-	N	N	-	10.91	1
Número de incógnitas								14

2. RELACIONES ADICIONALES

En este problema no hay relaciones adicionales.

3. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA

SISTEMA: EQUIPO I



$A = B + C$ ... (1)

$AX_1{}^A = BX_1{}^B$ ... (2)

$AX_2{}^A = BX_2{}^B$ ... (3)

$AX_3{}^A = BX_3{}^B$ ... (4)

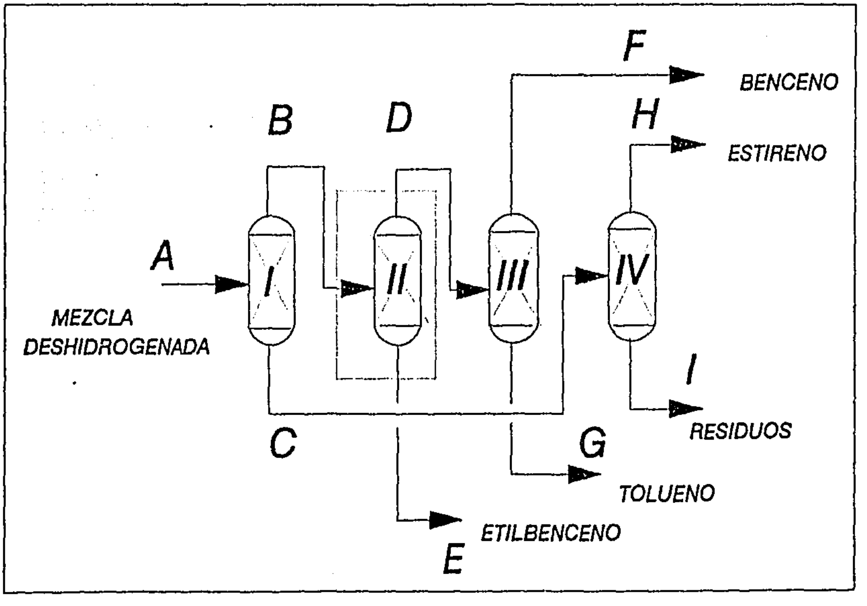
$AX_4{}^A = BX_4{}^B + CX_4{}^C$ ... (5)

$AX_5{}^A = CX_5{}^C$ ... (6)

$AX_6{}^A = BX_6{}^B$ ... (7)

No hay relaciones adicionales.
No. Ecuaciones independientes = 6
El número de incógnitas son los que corresponden a las corrientes A, B y C, que dan un total de siete.

SISTEMA: EQUIPO II



$B = D + E$ ... (8)

$BX_1{}^B = DX_1{}^D$ ... (9)

$BX_2^B = DX_2^D + EX_2^E$ ... (10)

$BX_3^B = EX_3^E$ ... (11)

$BX_4^B = EX_4^E$ ... (12)

$BX_6^B = DX_6^D$ ... (13)

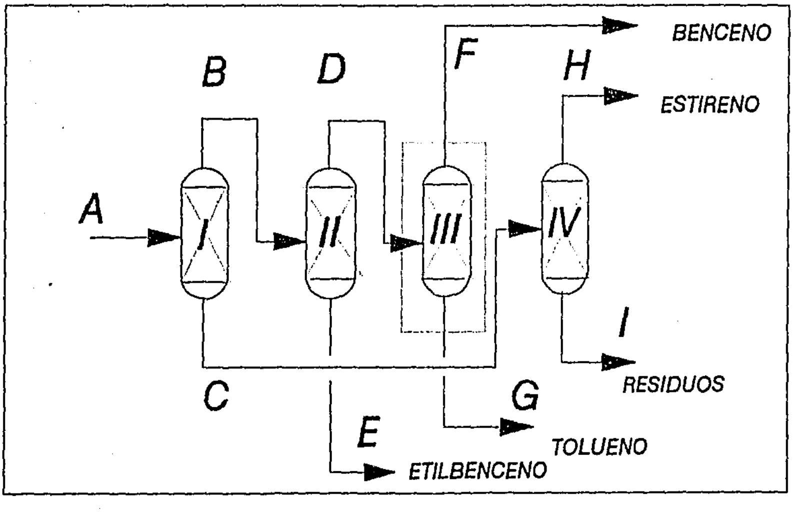
No hay relaciones adicionales asociadas al equipo II.

En las corrientes B, D y E no está presente el componente 5, por lo cual no se plantea la ecuación de balance para este componente, pero si para los demás componentes. Las ecuaciones de balance de materia que se deben plantear son para los componentes que se encuentren en las corrientes asociadas al equipo.

No. Ecuaciones independientes = 5

El número de incógnitas asociadas al equipo II son las que corresponden a las corrientes B, D y E que dan un total de 8.

SISTEMA: EQUIPO III



$D = F + G$ ... (14)

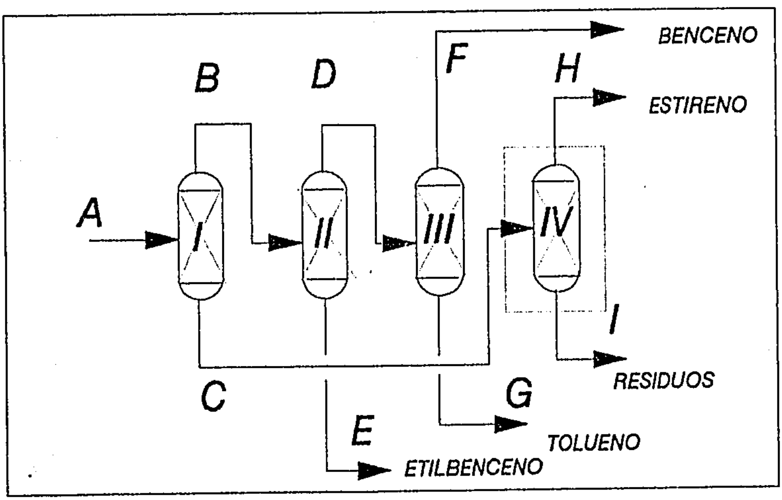
$DX_1^D = FX_1^F$ ... (15)

$DX_2^D = G$ ... (16)

$DX_6^D = FX_6^F$ ... (17)

No hay relaciones adicionales.
Número de ecuaciones independientes = 3
Número de incógnitas (Corrientes D, F y G) = 5

SISTEMA: EQUIPO IV



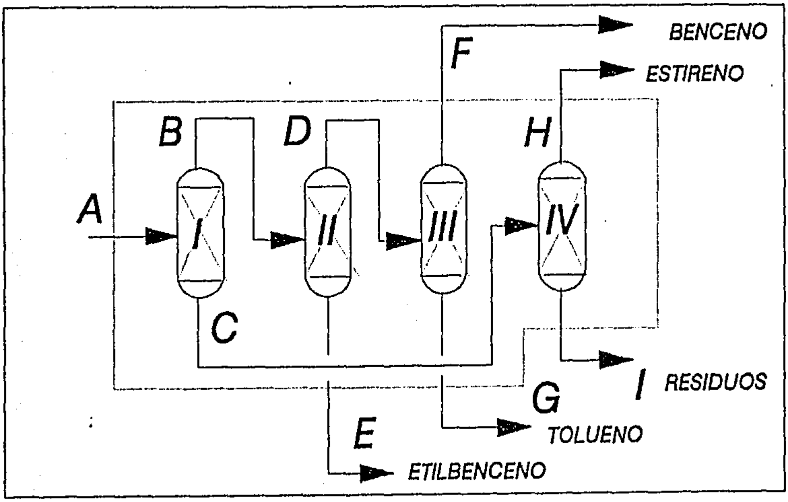
$C = H + I$ ... (18)

$CX_4^C = H + IX_4^I$ ... (19)

$CX_5^C = IX_5^I$ ... (20)

No hay relaciones adicionales asociadas al equipo IV.
Número de ecuaciones independientes = 2
Número de incógnitas (Corrientes C, H e I) = 4

SISTEMA: TODO EL PROCESO



$$A = E + F + G + H + I \quad \text{... (21)}$$

$$AX_1^A = FX_1^F \quad \text{... (22)}$$

$$AX_2^A = EX_2^E + G \quad \text{... (23)}$$

$$AX_3^A = EX_3^E \quad \text{... (24)}$$

$$AX_4^A = EX_4^E + H + IX_4^I \quad \text{... (25)}$$

$$AX_5^A = IX_5^I \quad \text{... (26)}$$

$$AX_6^A = FX_6^F \quad \text{... (27)}$$

No existen relaciones adicionales que involucren a todo el proceso.
Número de ecuaciones independientes = 6
Número de incógnitas (Corrientes A, E, F, G, H, I) = 4

4. ANÁLISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

El análisis global del proceso se realiza de la siguiente manera:

a) El número total de incógnitas es la suma de las incógnitas asociadas a todas las corrientes, en este caso de la A a la I, lo cual da un total de 14.

b) El número total de ecuaciones de balance es la suma de las ecuaciones independientes que se plantearon para cada equipo. En este caso da un total de 16. No es suman las ecuaciones como sistema todo el proceso ya que no son independientes a las de los equipos.

c) El número total de relaciones adicionales son las que se plantearon derivadas del enunciado del problema, a este caso no se tiene ninguna.

El resúmen de grados de libertad se presenta en la siguiente tabla:

EQUIPO	I	II	III	IV	Todo el proceso	Global
Incógnitas	7	8	5	5	4	14
Ec.Balance	6	5	3	3	2	-16
Rel.Adicionales	0	0	0	0	0	0
Σ Ecuaciones	6	5	3	3	2	16
Grados de libertad	1	3	2	2	-2	-2

Como los grados de libertad del análisis global da un número negativo, el problema se encuentra sobrespecificado y no tiene solución. Se han dado una mayor cantidad de datos que los necesarios. Es necesario eliminar dos datos para que de uno los grados de libertad globales.

Además el sistema de todo el proceso también da un número negativo en los grados de libertad, lo cual también da como conclusión que el problema se encuentre sobrespecificado.

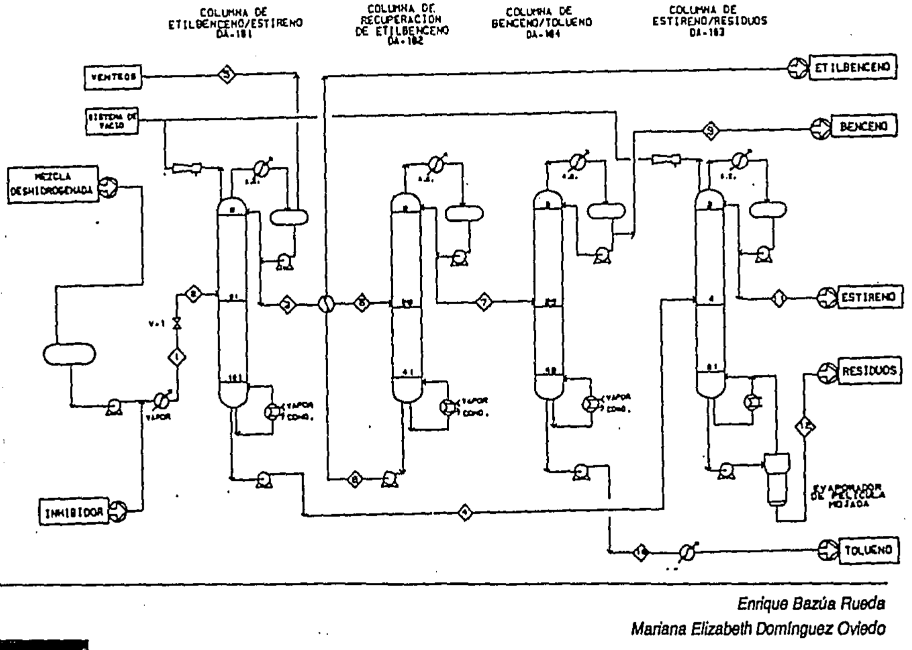
PROBLEMA 11: APLICACIÓN DE LAS METODOLOGÍA PROPUESTA A UNA PLANTA REAL.

Objetivo: Analizar un balance de materia obtenido en un simulador de procesos y tomar la decisión de aceptarlo o rechazarlo.

A continuación se da el balance de materia para algunas de las corrientes del proceso de destilación etilbenceno-estireno, obtenido por medio de un simulador de procesos. Las composiciones están dadas en fracción mol y los flujos totales en kgmol/hr.

CORRIENTE	1	3	4	7	8	9	10	11	12
Fracción mol									
Benceno	0.0312	0.0694	0.0000	0.4260	0.0000	0.9922	0.0004	0.0000	0.0000
Tolueno	0.0389	0.0948	0.0000	0.5632	0.0037	0.0007	0.9857	0.0000	0.0000
Etilbenceno	0.3067	0.7690	0.0014	0.0078	0.9171	0.0000	0.0137	0.0014	0.0000
Estireno	0.6166	0.0663	0.9980	0.0000	0.0792	0.0000	0.0001	0.9984	0.6696
α-Metilestireno	0.0003	0.0000	0.0005	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.3304
Agua	0.0063	0.0005	0.0000	0.0029	0.0000	0.0070	0.0000	0.0000	0.0000
Flujo total	301.943	117.76	178.59	19.18	98.58	8.26	10.91	178.40	0.1900

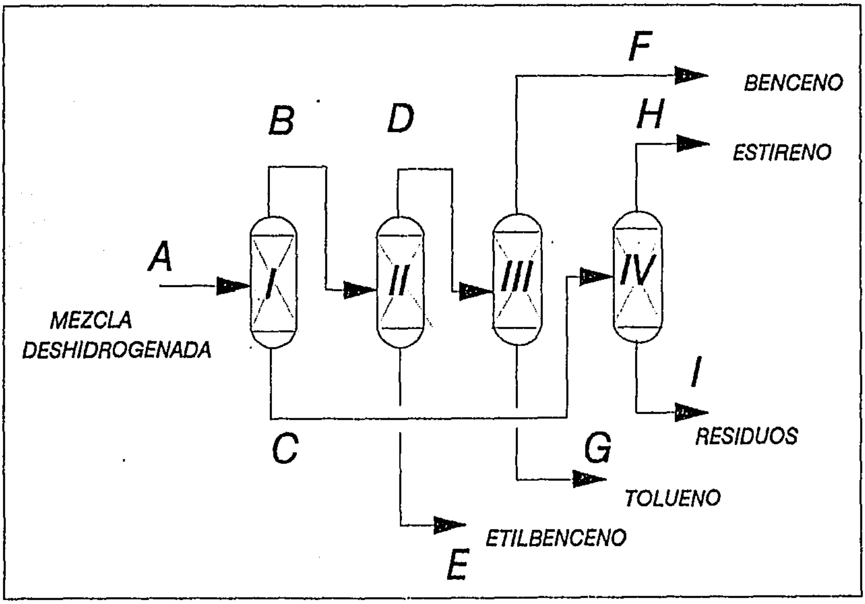
Es necesario decidir si este balance es confiable o no. Realice un análisis conveniente y evalúe el error obtenido, de acuerdo a esto tome una decisión.



Enrique Bazúa Rueda
Mariana Elizabeth Domínguez Oviedo

SOLUCION:

Es conveniente simplificar el diagrama anterior, como se efectuó en el problema 10.



Componentes:
1:Benceno
2:Tolueno
3:Etilbenceno
4:Estireno
5: α-Metilestireno
6: Agua

De acuerdo al diagrama simplificado, las corrientes (1), (3), (4), (7), (8), (9), (10), (11) y (12) corresponden respectivamente a las corrientes (A), (B), (C), (D), (E) (F), (G), (H) e (I)
Se realizarán análisis del balance de materia en cada equipo y en todo el proceso, anotando las ecuaciones que intervienen, sutietuyeno los valores del balance y escribiendo el error (e obtiene el valor entre ambos valores, y se divide entre el valor más pequeño. De acuerdo al error encontrado se tomará un decisión. Error mayor a 5% ya no es aceptable.

Para facilitar este análisis es conveniente hacer una tabla en donde se anoten los flujos por componente en cada una de las corrientes. Esto se logra multiplicando la fracción mol del componente por el flujo total de la corriente. Por ejemplo, el flujo molar del componente 1 (Benceno) en la corriente A está dado por:

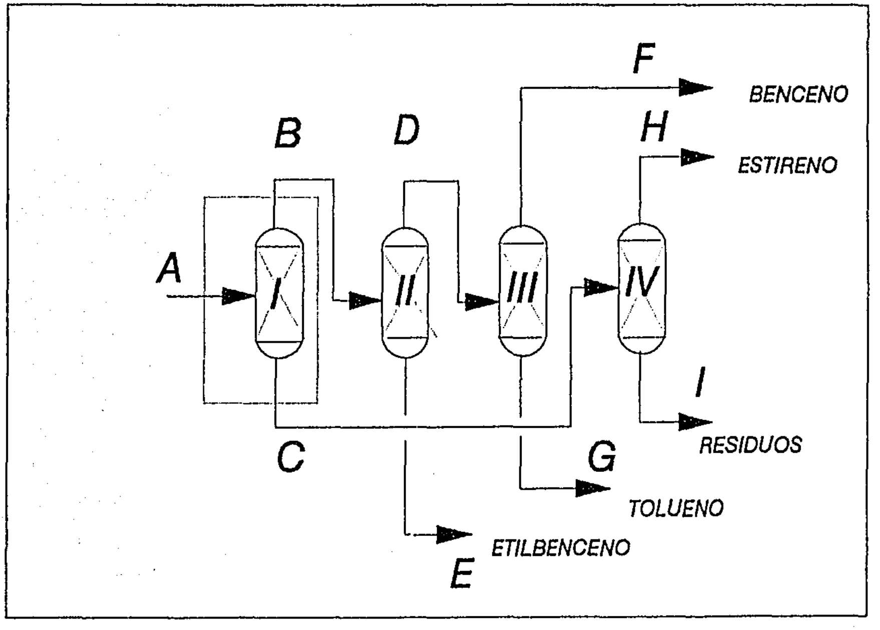
$$AX_1^A = (301.943)(0.0312) = 9.421 \text{ kgmol/hr}$$

En la tabla siguiente se anotan los resultados para todas las corrientes. Se conservan tres cifras después del punto decimal.

	Flujos molares por componente kgmol/hr						Flujo total kgmol/hr
Corriente	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	
A	9.421	11.746	92.606	186.178	0.091	1.902	301.943
B	8.173	11.164	90.557	7.807	0	0.059	117.760
C	0	0	0.250	178.233	0.089	0	178.590
D	8.171	10.802	0.150	0	0	0.056	19.180
E	0	0.365	90.408	7.808	0	0	98.580
F	8.196	0.006	0	0	0	0.058	8.260
G	0.004	10.754	0.149	0.001	0	0	10.910
H	0	0	0.250	178.115	0.036	0	178.400
I	0	0	0	0.127	0.063	0	0.190

Al sumar los flujos por componente no siempre da el valor del flujo total debido a los errores de redondeo, por ejemplo, la suma de los flujos por componente para la corriente A da como resultado 301.944; la diferencia con el flujo total de 301.943 es el error de redondeo en la última cifra significativa. Para la corriente C se tiene un error mayor, 178.572 comparado con 178.590; esto es debido a que las fracciones mol para esta corriente suman 0.9999 en lugar de 1.

Análisis para el equipo I:



Balance de materia total:

ENTRADAS	=	A	=	301.943 kmol/hr
SALIDAS	=	B + C	=	117.76 + 178.59
SALIDAS	=	296.350 kgmol/hr		
DIFERENCIA	=	SALIDAS - ENTRADAS		
DIFERENCIA	=	296.35 - 301.943	= -5.593 kgmol/hr	
ERROR	=	-(5.593/301.943) x 100		
ERROR	=	-1.85%		

Balance de materia para el componente 1:

ENTRADAS	=	$AX_1{}^A$ = 9.421 kgmol/hr
SALIDAS	=	BX1B + CX1 = 8.173 + 0 = 8.173 kgmol/hr
DIFERENCIA	=	SALIDAS - ENTRADAS
DIFERENCIA	=	8.173 - 9.421 = -1.248 kgmol/hr
ERROR	=	-(1.248/9.421) x 100 = -13.25%

De igual forma se prosigue con los demás componentes y equipos. En la tabla siguiente se resumen los resultados:

FLUJOS MOLARES kgmol/hr					
EQUIPO	I	II	III	IV	Proceso
Entradas					
1	9.421	8.173	8.171	0	9.421
2	11.746	11.164	10.802	0	11.746
3	92.606	90.557	0.150	0.250	92.606
4	186.178	7.807	0	178.233	186.178
5	0.091	0	0	0.089	0.091
6	1.902	0.059	0.056	0	1.902
Total	301.943	117.760	19.180	178.590	301.943
Salidas					
1	8.173	8.171	8.200	0	8.200
2	11.164	11.167	10.760	0	11.125
3	90.807	90.558	0.149	0.250	90.807
4	186.040	7.808	0.001	78.242	186.051
5	0.089	0	0	0.099	0.099
6	0.059	0.056	0.058	0	0.058
Total	296.350	117.760	19.170	178.590	296.340
Diferencia					
1	-1.248	-0.002	0.029	0	-1.221
2	-0.582	0.003	-0.042	0	-0.621
3	-1.799	0.001	-0.001	0	-1.799
4	-0.138	0.001	0.001	0.009	-0.127
5	-0.002	0	0	0.010	0.008
6	-1.843	-0.003	0.02	0	-1.844
Total	-5.593	0	-0.010	0	-5.603
Error (%)					
1	-13.25	-0.02	0.35	-	-12.96
2	-4.95	0.03	-0.39	-	-5.29
3	-1.94	0.001	-0.67	0	-1.94
4	-0.07	0.01	-	0.01	-0.07
5	-2.20	0	-	11.24	8.79
6	-96.90	-5.08	3.57	-	-96.95
Total	-1.85	0	-0.05	0	1.86

ANALISIS DE LOS RESULTADOS

De las diferencias en flujos molares y error en porcentaje de la tabla anterior se obtienen las siguietnes conclusiones:

1) Los balances de materia en el equipo I en el proceso y en el proceso como un todo no se cumplen.

2) Los balances de materia en los equipos II, III y IV se cumplen razonablemente bien.

3) Los errores en los balances de todo el proceso se deben a los errores de los balances del equipo I.

4) Los datos de flujos y composiciones no son aceptables y se deben rechazar.

5) Por lo tanto, es necesario realizar nuevamente los cálculos de los balances de materia, poniéndo especial atención al equipo I y sobre todo en el agua, que es donde se obtienen los errores más grandes.

VII. Balance de materia a régimen permanente con reacción química.

PROBLEMA 12. BALANCE DE MATERIA EN UN REACTOR.

Objetivo: Introducir al estudiante a los balances de materia con reacción química.

Supóngase que 1000 moles de alcohol etílico (C_2H_5OH), 2000 moles de dicromato de sodio ($Na_2Cr_2O_7$) y 7000 moles de ácido sulfhídrico (H_2SO_4) se cargan a un reactor intermitente. Debido a las condiciones de operación, el avance de la reacción es de 200 moles.

La reacción que se lleva a cabo es:

$$3\ C_2H_5OH + 2\ Na_2Cr_2O_7 + 8\ H_2SO_4 \longrightarrow 3\ CH_3COOH + 2\ Cr_2(SO_4)_3 + 2\ Na_2SO_4 + 11\ H_2O$$

1. Efectúe un análisis de las variables asociadas a este problema. Identifique cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas.
2. Plantee las ecuaciones de balance y en caso se existir, plantee las relaciones adicionales.
3. Realice el análisis de grados de libertad.
4. Calcule la composición de la mezcla al vaciar el reactor.
5. ¿Cuánto reaccionó de cada uno de los reactivos?
6. Demuestre que la masa que se carga al reactor coincide con la masa que se descarga en ambas formas de plantear el problema.

Plantee el problema siguiendo los incisos anteriores utilizando como variables el los moles totales de cada corriente y las composiciones en fracción mol. Calcule entonces la composición y el flujo de la corriente B.

SOLUCION:

A la alimentación al reactor se le llamará corriente "A" y a la de salida corriente "B".
Asignándole un número a cada uno de los componentes:
1: C_2H_5OH
2: $Na_2Cr_2O_7$
3: H_2SO_4
4: CH_3COOH
5: $Cr_2(SO_4)_3$
6: Na_2SO_4
7: H_2O

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

Considere como variables las moles de cada componente y las moles totales. Para problemas con reacción química se introduce una variable por cada reacción química. Esta variable es la extensión de reacción ε.

	MOLES DE CADA COMPONENTE								# DE INCOGNITAS
CORRIENTE	1	2	3	4	5	6	7	TOTALES	
A	1000	2000	7000	0	0	0	0	10,000	0
B	N	N	N	N	N	N	N	N	7

Note que para la corriente B se tienen solo 7 incógnitas, ya que las moles totales son iguales a la suma de las moles de cada componente.

2. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA

Balance de materia para el reactor, por componente:

$$N_i^B = N_i^A + \tau_i \varepsilon$$

COEFICIENTES ESTEQUIOMETRICOS:

$\tau_i > 0$ **Productos**
$\tau_i < 0$ **Reactivos**
$\tau_i = 0$ **Inertes**

	COMPONENTE	COEFICIENTE ESTEQUIOMETRICO
REACTIVOS		
1	C_2H_5OH	-3
2	$Na_2Cr_2O_7$	-2
3	H_2SO_4	-8
PRODUCTOS		
4	CH_3COOOH	3
5	$Cr_2(SO_4)_3$	2
6	Na_2SO_4	2
7	H_2O	11

En el caso de reacciones químicas es preferible plantear como ecuaciones independientes, los balances de materia por componente, y no usar para este fin el balance total.

Las ecuaciones de balance de materia para cada componentes son:

$$N_1^B = N_1^A + \nu_1 \varepsilon \qquad N_1^B = 1000 - 3\varepsilon \qquad \dots (1)$$
$$N_2^B = N_2^A + \nu_2 \varepsilon \qquad N_2^B = 2000 - 2\varepsilon \qquad \dots (2)$$
$$N_3^B = N_3^A + \nu_3 \varepsilon \qquad N_3^B = 7000 - 8\varepsilon \qquad \dots (3)$$
$$N_4^B = N_4^A + \nu_4 \varepsilon \qquad N_4^B = 3\varepsilon \qquad \dots (4)$$
$$N_5^B = N_5^A + \nu_5 \varepsilon \qquad N_5^B = 2\varepsilon \qquad \dots (5)$$
$$N_6^B = N_6^A + \nu_6 \varepsilon \qquad N_6^B = 2\varepsilon \qquad \dots (6)$$
$$N_7^B = N_7^A + \nu_7 \varepsilon \qquad N_7^B = 11\varepsilon \qquad \dots (7)$$

En todo el problema no hay relaciones adicionales, por lo tanto:
Número total de ecuaciones independientes = 7

3. ANALISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

Grados de libertad = Incógnitas - Ecuaciones independientes
Grados de libertad = 7-7 = 0
Por lo tanto el problema se encuentra correctamente especificado y tiene solución única.

4. COMPOSICION DE LA MEZCLA AL VACIAR EL REACTOR

Para conocer la composición de la mezcla al vaciar el reactor, es necesario calcular los moles finales de cada uno de los componentes. De las ecuaciones (1), (2), (3), (4), (5), (6) y (7) se observa que sustituyendo el valor de ε (200 moles) se obtienen de inmediato.

$N_1^B = 1000 - 3\varepsilon \quad ...(1)$

$N_1^B = 1000 - 3(200) = 1000 - 600 = 400$ moles

De la misma forma para (2), (3), (4), (5) (6) y (7), obteniendo:

$N_2^B = 1600$ moles

$N_3^B = 5400$ moles

$N_4^B = 600$ moles

$N_5^B = 400$ moles

$N_6^B = 400$ moles

$N_7^B = 2200$ moles

La composición de la mezcla al vaciar el reactor en fracción mol:

$$X_i^B = \frac{\text{Moles del componente i en B}}{\text{Moles totales en B}}$$

Moles totales en B = 400 + 1600 + 5400 + 600 + 400 + 400 + 2200 = 11,000

Por lo que la composición de la mezcla al vaciar el reactor en fracción mol es:

$X_1^B = 0.0364$

$X_2^B = 0.1455$

$X_3^B = 0.4909$

$X_4^B = 0.0545$

$X_5^B = 0.0364$

$X_6^B = 0.0364$

$X_7^B = 0.2000$

5. CALCULO DE LO QUE REACCIONO DE CADA UNO DE LOS REACTIVOS

Las moles que reaccionan de cada uno de los reactivos son: las moles de la carga inicial de cada uno de los reactivos menos las moles al vaciar el reactor, esto es:

Moles que reaccionan de C_2H_5OH = 1000 - 400 = 600 moles

Moles que reaccionan de $Na_2Cr_2O_7$ = 2000 - 1600 = 400 moles

Moles que reaccionan de H_2SO_4 = 7000 - 5400 = 1600 moles

Note que estas cantidades también se obtienen al multiplicar el coeficiente estequiométrico (ν_i) por el avance de la reacción (ε), esto es:

Moles que reaccionan de C_2H_5OH = 3 x 200 = 600 = 600 moles

Moles que reaccionan de $Na_2Cr_2O_7$ = 2 x 200 = 400 moles

Moles que reaccionan de H_2SO_4 = 8 x 200 = 1600 moles

6. CALCULO DE LA MASA A LA ENTRADA Y SALIDA DEL REACTOR

Note que las moles en esta reacción química no se conservan. A la entrada se tenían 10,000 moles y a la salida se tienen 11,000. Sin embargo, con el cálculo que se hará a continuación se demostrará que la masa sí se conserva.

En la corriente A se alimentan: 1000 moles de alcohol etílico, 2000 moles de dicromato de sodio y 7000 moles de ácido sulfúrico. Convirtiendo a masa se tiene:

Peso molecular del alcohol etílico = 46.08 g/mol

Peso molecular del dicromato de sodio = 261.98 g/mol

Peso molecular del ácido sulfúrico = 98.08 g/mol

$$1000 \text{ moles} \left| \frac{46.08 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right| = 46{,}080 \text{ g de } C_2H_5OH$$

$$2000 \text{ moles} \left| \frac{261.98 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right| = 523{,}960 \text{ g de } Na_2Cr_2O_7$$

$$7000 \text{ moles} \left| \frac{98.08 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \right| = 686{,}560 \text{ g de } H_2SO_4$$

Masa total de A = 46,080 + 523,960 + 686,560 = 1,256,600 gramos

Para la corriente de salida se hacen los mismos cálculos, que se encuentran resumidos en la tabla siguiente:

Componente	PM [g/mol]	Moles	Masa de cada componente en B
1	46.08	400	18,432
2	261.98	1,600	419,168
3	98.08	5,400	529,632
4	60.06	600	36,036
5	392.18	400	156,872
6	142.04	400	56,816
7	18.02	2,200	39,644

Masa total de B = 18,432+419,168+529,632+36,036+156,872+56,816+39,644
Masa total de B = 1,256,600 gramos

Note que:
Masa total de B = Masa total de A
Por lo tanto se cumple el balance de materia.

7. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA TOMANDO COMO VARIABLES EL FLUJO Y LA FRACCION MOL

Ahora se planteará el problema siguiendo la notación utilizada en balances de materia en sistemas sin reacción química, esto es, flujos totales y composición, con la finalidad de demostrar que esencialmente es lo mismo.

Las variables asociadas a cada corriente son: Los moles totales de la corriente y las composiciones en fracción mol.

Para conocer los moles totales de A, es necesario sumar los moles de cada componente:
A = Σ Flujo molar por componente
A = 1000 + 2000 + 7000 = 10,000 moles

Calculando ahora la fracción mol de la corriente "A":

$$X_i^A = \frac{\text{Moles del componente i en A}}{\text{Moles totales en A}}$$

$$X_1^A = \frac{1000}{10000} = 0.1$$

$$X_2^A = \frac{2000}{10000} = 0.2$$

$$X_3^A = \frac{7000}{10000} = 0.7$$

	FRACCION MOL DE CADA COMPONENTE							MOLES TOTALES	# DE INCOGNITAS
CORRIENTE	1	2	3	4	5	6	7		
A	0.1	0.2	0.7	0	0	0	0	10,000	0
B	N	N	N	N	N	N	N	N	7
Reacción química ε = 200 moles									
Número total de incógnitas									7

Las ecuaciones de balance por componente se plantean de la siguiente manera:

$$X_1^B\,B = X_1^A - 3\varepsilon$$
$$X_2^B\,B = X_1^A - 2\varepsilon$$
$$X_3^B\,B = X_3^A - 8\varepsilon$$
$$X_4^B\,B = X_4^A + 3\varepsilon$$
$$X_5^B\,B = X_5^A + 2\varepsilon$$
$$X_6^B\,B = X_6^A + 2\varepsilon$$
$$X_7^B\,B = X_6^A + 11\varepsilon$$

Y sustituyendo los valores conocidos (excepto ε) se obtiene:

$$X_1^B\,B = 1000 - 3\varepsilon \qquad \ldots (1)$$
$$X_2^B\,B = 2000 - 2\varepsilon \qquad \ldots (2)$$
$$X_3^B\,B = 7000 - 8\varepsilon \qquad \ldots (3)$$
$$X_4^B\,B = 3\varepsilon \qquad \ldots (4)$$
$$X_5^B\,B = 2\varepsilon \qquad \ldots (5)$$
$$X_6^B\,B = 2\varepsilon \qquad \ldots (6)$$
$$X_7^B\,B = 11\varepsilon \qquad \ldots (7)$$

Se han planteado 7 ecuaciones independientes y como se tienen 7 incógnitas el problema se puede resolver.

Sustituyendo el valor de ε =200 moles en las ecuaciones anteriores se obtiene:

$$X_1^B\,B = 400 \text{ moles}$$
$$X_2^B\,B = 1600 \text{ moles}$$
$$X_3^B\,B = 5400 \text{ moles}$$
$$X_4^B\,B = 600 \text{ moles}$$
$$X_5^B\,B = 400 \text{ moles}$$
$$X_6^B\,B = 400 \text{ moles}$$
$$X_7^B\,B = 2200 \text{ moles}$$

La solución de este sistema de ecuaciones procede de la siguiente manera:

a) Al sumar todas las ecuaciones, se obtienen los moles totales, B:
B = 11,000 moles

b) La composición se obtiene al despejar X_i^B de cada una de las ecuaciones:

X_1^B = 400/11,000 = 0.0364

X_2^B = 1600/11,000 = 0.1455

X_3^B = 5400/11,000 = 0.4909

X_4^B = 600/11,000 = 0.0545

X_5^B = 400/11,000 = 0.0364

X_6^B = 400/11,000 = 0.0364

X_7^B = 2200/11,000 = 0.2000

Note que estos resultados son idénticos a los obtenidos anteriormente.

PROBLEMA 13. CONCEPTOS DE BALANCES DE MATERIA CON REACCION QUIMICA.

Objetivo: Efectuar balances de materia con reacción química incorporando relaciones adicionales.

Se produce monóxido de carbono e hidrógeno al hacer reaccionar metano y agua. Se mezclan 150 moles de metano y 200 moles de agua. Reacciona el 90% del metano. Se desea conocer las especificaciones de la corriente de productos, así como el avance de la reacción.

1. Realice un análisis de las variables, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas.
2. Plantee las ecuaciones de balance.
3. Plantee las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.
4. Calcule los grados de libertad del sistema y determine si es posible reolver el problema. En caso de ser así, proponga una algoritmo de resolución y resuélvalo numéricamante.
5. Demuestre que se cumple la ley de conservación de la masa.
6. Dé la composición de las dos corrientes en fracción mol y fracción masa.

SOLUCION:

La corriente que contiene los productos se le llamará corriente "A" y a la de los productos "B".

Componentes:

1: Metano

2: Agua

3: Monóxido de carbono

4: Hidrógeno

La reacción que se lleva a cabo es la siguiente:

$CH_4 + H_2O \longrightarrow CO + 3H_2$

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

El problema se planteará usando como variables las moles de cada componente en las corrientes A y B. Se incorpora una variable (que en este problema es incógnita) por la reacción química.

Moles de cada componente					
Corriente	**1**	**2**	**3**	**4**	**# Incógnitas**
A	150	200	-	-	0
B	N	N	N	N	4
# reacciones químicas					1
Total de variables desconocidas (incógnitas)					5

2. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA

Las ecuaciones de balance de materia por cada componente son:

$N_1^B = 150 - \varepsilon$ ... (1)

$N_2^B = 200 - \varepsilon$ ... (2)

$N_3^B = \varepsilon$ ... (3)

$N_4^B = 3\varepsilon$ ... (4)

3. RELACIONES ADICIONALES:

Se menciona en el enunciado del problema que reacciona el 90% del metano, o sea que en la corriente de salida estará presente el 10% del metano que se alimenta. De lo anterior se deriva la siguiente relación adicional:

$N_1^B = 0.1N_1^A = 15$ moles ... (5)

4. ANALISIS DE LOS GRADOS DE LIBERTAD

El número de ecuaciones independientes son 4 de los balances de materia mas una relación adicional lo cual da un total de cinco.
Grados de libertad = # incógnitas - # ecuaciones independientes
Grados de libertad = 5 - 5 = 0
El problema se encuentra bien especificado y tiene solución única.

ESTRATEGIA DE RESOLUCION

El sistema de ecuaciones que se debe de resolver es:

$N_1^B = 150 - \varepsilon$ ... (1)

$N_2^B = 200 - \varepsilon$ ... (2)

$N_3^B = \varepsilon$ ... (3)

$N_4^B = 3\varepsilon$ ... (4)

$N_1^B = 15$ moles ... (5)

Analizando cuántas y cuáles son las incógnitas de cada ecuación, se puede determinar cuál será el camino a seguir en la resolución del problema:

Ecuación	# incógnitas	Incógnitas
1	2	ε, N_1^B
2	2	ε, N_2^B
3	2	ε, N_3^B
4	2	ε, N_4^B
5	0	N_1^B

En la tabla anterior se observa que la ecuación (5) da el valor de N_1^B, por lo cual ya no es incógnita. Con el valor de N_1^B, en la ecuación (1) la única incógnita sería ε. Conocido el valor de ε, es posible resolver las ecuaciones (2), (3) y (4) obteniendo respectivamente N_2^B, N_2^B y N_4^B.
De acuerdo a este análisis es posible establecer el siguiente:

ALGORITMO DE RESOLUCION

1.- Se resuelve la ecuación (1) y se calcula el valor de ε.
2.- Se resuelven las ecuaciones (2), (3) y (4) obteniendo respectivamente N_2^B, N_2^B y N_2^B.
3.- Fin

RESOLUCION NUMERICA:

1.- Se resuelve la ecuación (1) y se calcula el valor de ε.

$N_1^B = 150 - \varepsilon \quad ... (1)$

$15 = 150 - \varepsilon \dashrightarrow \varepsilon = 135$ moles

2.- Se resuelven las ecuaciones (2), (3) y (4) obteniendo respectivamente N_2^B, N_2^B y N_2^B.

$N_2^B = 200 - \varepsilon \quad ... (2)$

$N_2^B = 200 - 135 = 65$ moles

$N_3^B = \varepsilon \quad ... (3)$

$N_3^B = 135$ moles

$N_4^B = 3\varepsilon \ ... (4)$

$N_4^B = 3(135) = 405$ moles

En resúmen, los moles de cada componente en la corriente B son:

$N_1^B = 15$ moles

$N_2^B = 65$ moles

$N_3^B = 135$ moles

$N_4^B = 405$ moles

5. CONSERVACION DE LA MASA

CORRIENTE A

Componente	Moles	Peso Molecular	Masa (g)
Metano	150	16.05	2407.5
Agua	200	18.02	3604
		Masa total	6011.5

CORRIENTE B

Componente	Moles	Peso Molecular	Masa (g)
Metano	15	16.05	240.75
Agua	65	18.02	1171.3
Monoxido de Carbono	135	28.01	3781.35
Hidrógeno	405	2.02	818.1
		Masa total	6011.5

Masa total corriente A = Masa total corriente B = 6011.5 gramos ---> Cumple el balance de masa

6. COMPOSICION DE LAS DOS CORRIENTES.

Moles totales corriente A = 150 + 200 = 350 moles
Moles totales corriente B = 15 + 65 + 135 + 405 = 620 moles

CORRIENTE A

Componente	Moles	Fracción mol	Masa (g)	Fracción masa
Metano	150	0.4286	2407.5	0.4005
Agua	200	0.5714	3604	0.5995
	350	1.0000	6011.5	1.0000

CORRIENTE B

Componente	Moles	Fracción mol	Masa (g)	Fracción masa
Metano	15	0.0242	240.75	0.0400
Agua	65	0.1048	1171.3	0.1948
Monóxido de carbono	135	0.2177	3781.35	0.6290
Agua	405	0.6532	818.1	0.1361
	620	1.0000	6011.5	1.0000

PROBLEMA 14. CONCEPTOS DE BALANCES DE MATERIA CON REACCION QUIMICA.

Objetivo: Efectuar balances de materia con reacción química introduciendo el concepto de reactivo limitante.

Se produce monóxido de carbono e hidrógeno al hacer reaccionar metano y agua. Se mezclan 150 moles de metano y 200 moles de agua. Reacciona el 90% del agua. Se desea conocer las especificaciones de la corriente de productos, así como el avance de la reacción.

1. Realice un análisis de las variables, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas.
2. Plantee las ecuaciones de balance de materia.
3. Plantee las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.
4. Calcule los grados de libertad del sistema y determine si es posible resolver el problema. En caso de ser así, proponga una algoritmo de resolución y resuélvalo numéricamante.

SOLUCION:

La corriente que contiene los productos se le llamará corriente "A" y a la de los productos "B".

Componentes:

1: Metano

2: Agua

3: Monóxido de carbono

4: Hidrógeno

La reacción que se lleva a cabo es la siguiente:

$$CH_4 + H_2O \longrightarrow CO + 3H_2$$

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

	Moles de cada componente				
Corriente	**1**	**2**	**3**	**4**	**# Incógnitas**
A	150	200	-	-	0
B	N	N	N	N	4
# reacciones químicas					1
Total de variables desconocidas (incógnitas)					5

2. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA:

$N_1^B = 150 - \varepsilon$ ... (1)

$N_2^B = 200 - \varepsilon$ ... (2)

$N_3^B = \varepsilon$ ... (3)

$N_4^B = 3\varepsilon$ ... (4)

3. RELACIONES ADICIONALES:

Se menciona en el enunciado del problema que reacciona el 90% del agua, de lo que se deriva la siguiente relación adicional:

$\varepsilon = 0.9N_2^A = 180$ moles ... (5)

Σ Ecuaciones independientes: 4 (balance) + 1 (relación adicional) = 5

4. ANALISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

El número de ecuaciones independientes son 4 de los balances de materia mas una relación adicional, lo cual da un total de cinco.

Grados de libertad = # incógnitas - # ecuaciones independientes

Grados de libertad = 5 - 5 = 0

El problema se encuentra bien especificado y tiene solución única.

ESTRATEGIA DE RESOLUCION

El sistema de ecuaciones que se debe de resolver es:

$N_1^B = 150 - \varepsilon$ ... (1)

$N_2^B = 200 - \varepsilon$ ... (2)

$N_3^B = \varepsilon$ ... (3)

$N_4^B = 3\varepsilon$ ... (4)

$0.9N_2^A = 180$ ... (5)

Analizando cuántas y cuáles son las incógnitas de cada ecuación, se puede determinar cuál será el camino a seguir en la resolución del problema:

Ecuación	# incógnitas	incógnitas
1	2	ε, N_1^B
2	2	ε, N_2^B
3	2	ε, N_3^B
4	2	ε, N_4^B
5	0	ε

En la tabla anterior se observa que la ecuación (5) da el valor de ε, por lo cual ya no es incógnita. Con el valor de ε, en las ecuaciones (1), (2), (3) y (4) las únicas incógnita son respectivamente N_1^B, N_2^B, N_3^B y N_4^B.

RESOLUCION NUMERICA:

Se resuelven las ecuaciones (1), (2), (3) y (4), obteniendo respectivamente N_1^B, N_2^B, N_3^B y N_4^B.

$N_1^B = 150 - \varepsilon$ ... (1)

$N_1^B = 150 - 180 = N_1^B = -30$ ---> ¿Moles negativos?

No puede haber moles negativos. El problema se encuentra mal planteado. Note que los grados de libertad del problema son cero y sin embargo el problema no tiene solución. Lo que sucede es que no puede reaccionar el 90% del agua. Esto significa que existen cierto límite en el que los reactivos pueden reaccionar. Al avance de reacción asociado a ese límite se le denomina extensión ó avance máximo de reacción. Este concepto sirve para encontrar el reactivo limitante, esto es, el reactivo que se consume primero. Para obtener el avance máximo de reacción basta con igualar a cero los moles de los reactivos en la corriente de salida (N_1^B y N_2^B) y tomar el mínimo valor de ε encontrado:

$N_1^B = 150 - \varepsilon$ ... (1)

$0 = 150 - \varepsilon$

---> $\varepsilon = 150$ moles

$N_2^B = 200 - \varepsilon$ ... (2)

$0 = 200 - \varepsilon$

---> $\varepsilon = 200$ moles

El mínimo valor de ε encontrado es $\varepsilon = 150$ moles, esto significa que el metano es el reactivo limitante y que la reacción no puede llevarse a cabo arriba de este valor de ε.

PROBLEMA 15. CONCEPTOS DE BALANCES DE MATERIA CON REACCION QUIMICA.

***Objetivo:** Efectuar balances de materia con reacción química incorporando relaciones adicionales, el concepto de reactivo limitante y calcular el peso molecular de un producto, dados los pesos moleculares de los reactivos que lo forman.*

Se desean obtener 195.5 toneladas de un compuesto C a partir de la siguiente reacción:

2A + B —> C

Se mezclan partes iguales (en moles) de los reactivos A y B, en una corriente que también tiene un poco del compuesto C. La fracción mol de C en la corriente de productos es de 0.7. La reacción se lleva a cabo con una conversión del 100%. Se desean conocer los moles iniciales de A y B para satisfacer estos requerimientos, así como el avance de la reacción.

1. Realice un análisis de las variables, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas.
2. Plantee las ecuaciones de balance de materia.
3. Plantee las realaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.
4. Calcule los grados de libertad del sistema y determine si es posible resolver el problema.
5. En caso de ser así, proponga una algoritmo de resolución.
6. En caso de ser posible, resuélvalo numéricamante.
7. Si PM_A=80 y PM_B= 35.5 ¿Cuál es el PM del producto?
8. Calcule el flujo molar por componente en cada una de las corrientes, así como la fracción mol y la masa.

SOLUCION:

La corriente que contiene los reactivos se le llamará corriente "A" y a la de los productos "B".
Componentes:
1: A
2: B
3: C

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

Para trabajar en moles, es necesario transformar las 195.5 toneladas a kmoles. Se necesita conocer el peso molecular del compuesto C. En el inciso 7. se proporcionan datos para poder calcularlo. Se procederá entonces a resolver en primer término este inciso.

$PM_A=80$ y $PM_B= 35.5$

De acuerdo a la estequiometria de la reacción:

$$PM_C = 2PM_A + PM_B$$

$$PM_C = 2(80)+35.5$$

$$PM_C = 195.5$$

$$195.5 \text{ toneladas} \left| \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ tonelada}} \right| \left| \frac{41 \text{ kgmol}}{195.5 \text{ kg}} \right| = 1000 \text{ kgmol de producto C}$$

TABLA DE VARIABLES:

	kmoles de cada componente			
Corriente	1	2	3	# Incógnitas
A	N	N	N	3
B	N	N	1000	2
# reacciones químicas				1
Total de variables desconocidas (incógnitas)				6

2. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA.

$$N_1^B = N_1^A - 2\varepsilon \qquad \text{... (1)}$$

$$N_2^B = N_2^A - \varepsilon \qquad \text{... (2)}$$

$$N_3^B = N_3^A + \varepsilon \qquad \text{... (3)}$$

y sustituyendo el único valor que se conoce, $N_3^B = 1000$, se sustituye en la ecuación (3):

$$1000 = N_3^A + \varepsilon \qquad \text{... (3a)}$$

3. RELACIONES ADICIONALES:

Se menciona en el enunciado del problema que se mezclan A y B en partes iguales, de lo que se deriva la siguiente relación adicional:

$$N_1^A = N_2^A \qquad \text{... (4)}$$

La fracción mol de C en la corriente de productos es de 0.7; esto es, la fracción mol del componente 3 en la corriente B es de 0.7:

$$X_3^B = \frac{N_3^B}{N_1^B + N_2^B + N_3^B}$$

O bien; sustituyendo los valores conocidos:

$$X_3^B = \frac{1000}{N_1^B + N_2^B + 1000} = 0.7 \qquad ...(5)$$

La reacción se lleva a cabo con una conversión del 100%. Esto indica que se consume totalmente el reactivo limitante. Para determinar cual de los dos reactivos es el reactivo limitante usaremos la ecuación de balance de materia por los componentes 1 y 2 y la relación adicional, ecuación (4).

$$N_1^B = N_1^A - 2\varepsilon \qquad ...(1)$$

$$N_2^B = N_2^A - \varepsilon \qquad ...(2)$$

$$N_1^A = N_2^A \qquad ...(4)$$

Sustituyendo (4) en (2) se obtiene:

$$N_2^B = N_1^A - \varepsilon \qquad ...(2a)$$

Para obtener el reactivo limitante se iguala a cero los moles de los reactivos y se obtiene el valor de ε que será la conversión máxima de la reacción, esto es al 100%.

Usando el reactivo 1 (ecuación 1)

$$N_1^B = N_1^A - 2\varepsilon = 0 \quad \dashrightarrow \quad \varepsilon = N_1^A/2$$

Usando el reactivo 2 (ecuación 2a)

$$N_2^B = N_1^A - \varepsilon = 0 \quad \dashrightarrow \quad \varepsilon = N_1^A$$

El reactivo limitante es el componente 1.

La relación adicional, entonces:

$$N_1^B = 0 \qquad ...(6)$$

Se tienen entonces tres relaciones adicionales, que son las ecuaciones 4, 5 y 6.

4. ANALISIS DE LOS GRADOS DE LIBERTAD

Grados de libertad = # incógnitas - # ecuaciones independientes
Grados de libertad = 6 - 6 = 0
El problema se encuentra bien especificado y tiene solución única.

5. ESTRATEGIA DE RESOLUCION

El sistema de ecuaciones que se debe de resolver es:

$N_1^B = N_1^A - 2\varepsilon$ ... (1)

$N_2^B = N_2^A - \varepsilon$ ... (2)

$1000 = N_3^A + \varepsilon$ ... (3)

$N_1^A = N_2^A$ ... (4)

$\dfrac{1000}{N_1^B + N_2^B + 1000} = 0.7$ ... (5)

$N_1^B = 0$ ... (6)

Sustituyendo las relaciones adicionales (4) y (6) en las ecuaciones de balance (1), (2) y (5) respectivamente, el sistema anterior se simplifica a:

$0 = N_1^A - 2\varepsilon$ ... (1a)

$N_2^B = N_1^A - \varepsilon$ ... (2a)

$1000 = N_3^A + \varepsilon$ ... (3)

$\dfrac{1000}{N_2^B + 1000} = 0.7$ ... (5a)

Se tiene un sistema de 4 ecuaciones (1a, 2a, 3a y 4a) con 4 incógnitas: ε, N_1^A, N_3^A, N_2^B
Analizando las incógnitas de cada ecuación:

Ecuación	# incógnitas	incógnitas
1a	2	ε, N_1^A
2a	3	ε, N_1^A, N_2^B
3	2	ε, N_3^A
5a	1	N_2^B

De la tabla anterior se puede observar que la ecuación 5a tiene una sola incógnita N_2^B, por lo cual se resolverá primero. Una vez conocido el valor de N_2^B, la ecuación 2a queda con 2 incógnitas. Las ecuaciones 1a y 2a tienen la misma pareja de incógnitas: ε y N_1^A por lo cual se pueden resolver simultáneamente y por último N_3^A se obtiene de la ecuación 3. En resúmen, el algoritmo de cálculo es el siguiente:

ALGORITMO DE SOLUCION:

1.- Se resuelve la ecuación 5a y se obtiene N_2^B.
2.- Se resuelven simultáneamente las ecuaciones (1a) y (2a) y se obtiene ε y N_1^A.
3.- Se resuelve la ecuación 3 y se obtiene N_3^A.
4.- FIN.

6. SOLUCION NUMERICA:

1.- Se resuelve la ecuación 5a y se obtiene N_2^B.
Despejando N_2^B de la ecuación (5a):

$$N_2^B = \frac{1000 - 0.7 \times 1000}{0.7} = 428.6 \text{ kmol}$$

2.- Se resuelven simultáneamente las ecuaciones (1a) y (2a) y se obtiene ε y N_1^A.

Sustituyendo N_2^B en la ecuación 2a se obtiene:

$$428.6 = N_1^A - \varepsilon \qquad \text{... (2b)}$$

y junto con:

$$0 = N_1^A - 2\varepsilon \qquad \text{... (1a)}$$

constituyen un sistema de dos ecuaciones con 2 incógnitas. Restando (2b) - (1a) se obtiene:

$428.6 = \varepsilon$
o sea $\varepsilon = 428.6$ kmol

y sustituyendo este resultado en (2b) se obtiene

$428.6 = N_1^A - 428.6$

y despejando N_1^A se obtiene

$N_1^A = 857.2$ KMOL

Sustituyendo estos valores en la ecuación (3) y despejando N_3^A se obtiene:

$N_3^A = 571.4$ kmol

Los resultados se resumen en la siguiente tabla:

	kmoles de cada componente			kmoles totales
Corriente	**1**	**2**	**3**	
A	857.2	857.2	571.4	2285.8
B	0	428.6	1000	1428.6
Avance de la reacción química $\varepsilon = 428.6$ kmol				

8. RESULTADOS ADICIONALES

En la siguiente tabla se muestran los resultados adicionales que se piden en el enunciado del problema:

CORRIENTE A (ALIMENTACION)

	COMPONENTES			
	1	2	3	Total
kmol	857.2	857.2	571.4	2285.8
Fracción mol	0.3750	0.3750	0.250	1.0
Peso molecular	80	35.5	195.5	
Toneladas	68.576	30.4306	111.7087	210.7153
Fracción masa	0.3254	0.1444	0.5301	1.0

CORRIENTE B (PRODUCTO)

	COMPONENTES			
	1	2	3	Total
kmol	0	428.6	1000	1428.6
Fracción mol	0	0.3	0.7	1.0
Peso Molecular	80	35.5	195.5	
Toneladas	0	15.2153	195.5	210.7153
Fracción masa	0	0.0722	0.9278	1.0

PROBLEMA 16: CONCEPTOS DE BALANCES DE MATERIA CON REACCION QUIMICA.

Objetivo: Efectuar balances de materia en un sistema con dos reacciones químicas, se introduce el concepto de selectividad.

Se mezclan los reactivos U, V y W para dar lugar a los productos X, Y y Z de acuerdo a las siguientes reacciones:

U + V ---> X
U + W ---> Y + Z

Se alimentan a un reactor 100, 120 y 50 moles/hr de U, V y W respectivamente. Se convierte el 75% de U y la selectividad de la primera reacción es del 80%. Se desea conocer los moles de cada uno de los productos y el avance de cada reacción.

1. Realice un análisis de las variables, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas.
2. Plantee las ecuaciones de balance.
3. Plantee las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.
4. Calcule los grados de libertad del sistema y determine si es posible resolver el problema.
5. En caso de ser posible, proponga un algoritmo de resolución y resuélvalo numéricamante.
6. Dé la composición de las dos corrientes en fracción mol.

SOLUCION:

La corriente que contiene los reactivos se le llamará corriente "A" y a la de los productos "B".
Componentes:
U: 1
V: 2
X: 3
W: 4
Y: 5
Z: 6

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

Las variables a considerar son los flujos molares de cada componente y tendrán las unidades de moles/hr.

	Moles de cada componente						
Corriente	1	2	3	4	5	6	# Incógnitas
A	100	120	-	50	-	-	0
B	N	N	N	N	N	N	6
# reacciones químicas							2
Total de variables desconocidas (incógnitas)							8

2. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA

El grado de avance de la reacción 1 se denotará por ε_1 y el de la reacción 2 por ε_2.

$$N_1^B = 100 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 \quad \text{... (1)}$$

$$N_2^B = 120 - \varepsilon_1 \quad \text{... (2)}$$

$$N_3^B = \varepsilon_1 \quad \text{... (3)}$$

$$N_4^B = 50 - \varepsilon_2 \quad \text{... (4)}$$

$$N_5^B = \varepsilon_2 \quad \text{... (5)}$$

$$N_6^B = \varepsilon_2 \quad \text{... (6)}$$

El número de ecuaciones de balance de materia independientes son seis.

3. RELACIONES ADICIONALES

Se menciona en el enunciado del problema que reacciona el 75% del componente A, de lo que se deriva la siguiente relación adicional:

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 0.75N_1^A = 75 \text{ mol/hr} \quad \text{... (7)}$$

Escrito de otra forma (sobre el 25% de A):

$$N_1^B = 0.25N_1^A = 25 \text{ mol/hr} \quad \text{... (7a)}$$

Las ecuaciones 7 y 7a no son independientes, se debe escoger una de las dos. Para este problema se escogerá la ecuación 7.

La selectividad de la primera reacción es del 80%, de aquí la relación adicional es:

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} = 0.8 \quad \text{... (8)}$$

Se han planteado dos ecuaciones de relaciones adicionales.

4. ANALISIS DE LOS GRADOS DE LIBERTAD

El número de ecuaciones independientes es de ocho, seis de balance y dos de relaciones adicionales.
Grados de libertad = # incógnitas - # ecuaciones independientes
Grados de libertad = 8 - 8 = 0
El problema se encuentra bien especificado y tiene solución única.

5. ESTRATEGIA DE RESOLUCION

El sistema de ecuaciones que se debe de resolver es:

$$N_1^B = 100 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 \quad \text{... (1)}$$

$$N_2^B = 120 - \varepsilon_1 \quad \text{... (2)}$$

$$N_3^B = \varepsilon_1 \quad \text{... (3)}$$

$N_4^B = 50 - \varepsilon_2$ ... (4)

$N_5^B = \varepsilon_2$ ... (5)

$N_6^B = \varepsilon_2$ ... (6)

$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 75$ ... (7)

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} = 0.8 \qquad \text{... (8)}$$

Analizando cuántas y cuáles son las incógnitas de cada ecuación, se puede determinar cuál será el camino a seguir en la resolución del problema:

Ecuación	# Incógnitas	Incógnitas
1	3	$\varepsilon_1, \varepsilon_2$
2	2	ε_1, N_2^B
3	2	ε_1, N_3^B
4	2	ε_2, N_4^B
5	2	ε_2, N_5^B
6	2	ε_2, N_6^B
7	2	$\varepsilon_1, \varepsilon_2$
8	2	$\varepsilon_1, \varepsilon_2$

En la tabla anterior se observa que en las ecuaciones (7) y (8) las incognitas son ε_1 y ε_2, por lo que es posible resolverlas simultaneamente y obtener estos valores. Calculados los avances de las reacciones 1 y 2 es posible calcular de las ecuaciones (1), (2), (3), (4), (5) y (6) los valores de N_1^B, N_2^B, N_3^B, N_4^B, N_5^B y N_6^B respectivamente. De acuerdo a este análisis es posible establecer el siguiente:

ALGORITMO DE RESOLUCION

1.- Resolver simultáneamente las ecuaciones (7) y (8) para obtener los valores de ε_1 y ε_2.
2.- Resolver las ecuaciones (1), (2), (3), (4), (5) y (6) y obtener los valores de N_1^B, N_2^B, N_3^B, N_4^B, N_5^B y N_6^B respectivamente.
3.- Fin

RESOLUCION NUMERICA

1.- Resolver simultáneamente las ecuaciones (7) y (8)

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 75 \text{ mol/hr} \qquad \text{... (7)}$$

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} = 0.8 \qquad \text{... (8)}$$

Arreglando esta expresión se tiene:

$$0.2\varepsilon_1 - 0.8\varepsilon_2 = 0 \qquad \text{... (8a)}$$

Se tiene entonces el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 75 \qquad \text{... (7)}$$

$$0.2\varepsilon_1 - 0.8\varepsilon_2 = 0 \qquad \text{... (8a)}$$

Multiplicando (7a) por (-0.2) y sumando esta expresión a (8a) se obtiene la ecuación de primer grado:

$$-\varepsilon_2 = -15$$

$$\text{---}> \varepsilon_2 = 15 \text{ moles/hr}$$

Sustituyendo este valor en (7) se obtiene el valor de $^{-}{}_1$:

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 75 \qquad \text{... (7a)}$$

$$\varepsilon_1 + 15 = 75 \text{ ---}> \varepsilon_1 = 60 \text{ moles/hr}$$

Comprobando con la ecuación (8a):

$$0.2\varepsilon_1 - 0.8\varepsilon_2 = 0 \qquad \text{... (8a)}$$

$$0.2(60) - 0.8(15) = 0$$

$$0 = 0$$

2.- Resolver las ecuaciones (1), (2), (3), (4), (5) y (6) y obtener los valores de N_1^B, N_2^B, N_3^B, N_4^B, N_5^B y N_6^B respectivamente.

$$N_1^B = 100 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 \qquad \text{... (1)}$$

$$N_1^B = 100 - 60 - 15 = 25 \text{ moles/hr}$$

(Note que este valor concuerda con el obtenido mediante la ecuación 7a)

$$N_2^B = 120 - \varepsilon_1 \text{... (2)}$$

$$N_2^B = 120 - 60 = 60 \text{ moles/hr}$$

$$N_3^B = \varepsilon_1 = 60 \text{ moles/hr} \qquad \text{... (3)}$$

$N_4^B = 50 - \varepsilon_2$ ... (4)

$N_4^B = 50 - 15 = 35$ moles/hr

$N_5^B = \varepsilon_2$ ... (5)

$N_5^B = 15$ moles/hr

$N_6^B = \varepsilon_2$ ... (6)

$N_6^B = 15$ moles/hr

6. COMPOSICION

En resúmen, la corriente de salida del reactor, corriente B contiene:

$N_1^B = 35$ moles/hr

$N_2^B = 70$ moles/hr

$N_3^B = 50$ moles/hr

$N_4^B = 35$ moles/hr

$N_5^B = 15$ moles/hr

$N_6^B = 15$ moles/hr

Moles totales = 35 + 70 + 50 + 35 + 15 + 15
Moles totales = 220 moles/hr

La fracción mol de la corriente de salida es el cociente de los moles de cada componente y los moles totales:

$X_1^B = 0.1591$

$X_2^B = 0.3182$

$X_3^B = 0.2273$

$X_4^B = 0.1591$

$X_5^B = 0.0682$

$X_6^B = 0.0882$

PROBLEMA 17. CONCEPTOS DE BALANCES DE MATERIA CON REACCION QUIMICA

Objetivo: Efectuar balances de materia con reacción química incorporando el concepto de región permitida.

Se alimentan 65 moles de H_2, 20 moles de N_2 y 15 de CO_2 a un proceso de obtención de amoniaco. En la corriente de salida los porcentajes en mol del nitrógeno y del agua son 45 y 25% respectivamente. Se desea conocer la composición de la corriente de salida, así como el avance de las reacciones.

$N_2 + 3H_2 \longrightarrow 2NH_3$

$CO_2 + H_2 \longrightarrow CO + H_2O$

1. Realice un análisis de las variables, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas.
2. Plantee las ecuaciones de balance y las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.
3. Calcule los grados de libertad del sistema y determine si es posible resolver el problema. En caso de ser así, proponga un algoritmo de resolución y resuélvalo numéricamante.
4. Dé la composición de las dos corrientes en fracción mol.

SOLUCION:

La corriente que contiene los reactivos se le llamará corriente "A" y a la de los productos "B".
Componentes:
1: Nitrógeno
2: Hidrógeno
3: Amoniaco
4: Dióxido de carbono
5: Monóxido de carbono
6: Agua

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES

Las cantidades de cada componente se expresarán en moles, y estas serán las variables.

	Moles de cada componente						Moles totales	
Corriente	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**		**# Incógnitas**
A	20	65	-	15	-	-	100	0
B	N	N	N	N	N	N	N	6
Reacciones químicas								2
Total de variables desconocidas (incógnitas)								8

2. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA:

Por cada reacción química se tiene una variable. En este caso ε_1 será el grado de avance de la reacción 1 y ε_2 el grado de avance de la reacción 2. Ambas son incógnitas.

$N_1^B = 20 - \varepsilon_1$ ... (1)

$N_2^B = 65 - 3\varepsilon_1 - \varepsilon_2$ ... (2)

$N_3^B = 2\varepsilon_1$ ... (3)

$N_4^B = 15 - \varepsilon_2$ ... (4)

$N_5^B = \varepsilon_2$ ... (5)

$N_6^B = \varepsilon_2$ ... (6)

Moles totales $= 100 - 2\varepsilon_1$ ...(6a)

Se tienen seis ecuaciones independientes de balance de materia.

RELACIONES ADICIONALES:

Se menciona en el enunciado del problema que la fracción mol del amoniaco en la corriente de salida es de 45% en mol, es decir, la fracción mol es 0.45:

$$\frac{2\varepsilon_1}{100 - 2\varepsilon_1} = 0.45 \qquad \text{... (7)}$$

De igual forma, para el agua, cuya fracción mol a la salida es de 0.25, da la siguiente relación adicional:+

$$\frac{\varepsilon_2}{100 - 2\varepsilon_1} = 0.25 \qquad \text{... (8)}$$

Se tienen dos ecuaciones independientes de relaciones adicionales.

3. ANALISIS DE LOS GRADOS DE LIBERTAD

Grados de libertad = # incógnitas - ecuaciones independientes
Grados de libertad = 8 - 8 = 0
El problema se encuentra bien especificado y tiene solución única.

ESTRATEGIA DE RESOLUCION

El sistema de ecuaciones que se debe de resolver es:

$N_1^B = 20 - \varepsilon_1$ ... (1)

$N_2^B = 65 - 3\varepsilon_1 - \varepsilon_2$ ... (2)

$N_3^B = 2\varepsilon_1$ ... (3)

$N_1^B = 20 - \varepsilon_1$ ... (1)

$N_2^B = 65 - 3\varepsilon_1 - \varepsilon_2$ ... (2)

$N_3^B = 2\varepsilon_1$ ... (3)

$N_4^B = 15 - \varepsilon_2$ ... (4)

$N_5^B = \varepsilon_2$ ... (5)

$N_6^B = \varepsilon_2$ ... (6)

$$\frac{2\varepsilon_1}{100 - 2\varepsilon_1} = 0.45 \quad \text{... (7)}$$

$$\frac{\varepsilon_2}{100 - 2\varepsilon_1} = 0.25 \quad \text{... (8)}$$

Analizando cuántas y cuáles son las incógnitas de cada ecuación, se puede determinar cuál será el camino a seguir en la resolución del problema:

Ecuación	# incógnitas	incógnitas
1	2	ε_1, N_1^B
2	3	ε_1, ε_2, N_2^B
3	2	ε_1, N_3^B
4	2	ε_2, N_4^B
5	2	ε_2, N_5^B
6	2	ε_2, N_6^B
7	1	ε_1
8	2	ε_1, ε_2

En la tabla anterior se observa que la ecuación (7) tiene una única incógnita (ε_1). Conocido este valor, es posible calcular (8) ε_2. Con estos valores, ya es posible calcular los moles finales de todos los componentes de las demás ecuaciones.

ALGORITMO DE RESOLUCION:

1.- Resolver la ecuación (7) y obtener ε_1.
2.- Resolver (8) y obtener ε_2.
3.- Resolver (1), (2), (3), (4), (5), (6) y obtener N_1^B, N_2^B, N_3^B, N_4^B, N_5^B y N_6^B respectivamente.
4.- FIN

RESOLUCION NUMERICA:

1.- Resolver la ecuación (7) y obtener ε_1.

$$\frac{2\varepsilon_1}{100 - 2\varepsilon_1} = 0.45 \qquad \text{... (7)}$$

$2\varepsilon_1 = 0.45(100-2\varepsilon_1)$
$\varepsilon_1(2+0.9) = 45$
--> $\varepsilon_1 = 15.517$ moles

2.- Resolver (8) y obtener ε_2.

$$\frac{\varepsilon_2}{100 - 2\varepsilon_1} = 0.25 \qquad \text{... (8)}$$

Sustituyendo $\varepsilon_1 = 15.517$ moles se obtiene para ε_2:

$\varepsilon_2 = 17.241$ moles

3.- Sustituyendo los valores de ε_1 y ε_2 en las ecuaciones (1) a (6) se obtienen las N_i^B:

$N_1^B = 20 - \varepsilon_1 = 20 - 15.517 = 4.483$ moles

$N_2^B = 65 - 3\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = 65 - 3 \times 15.517 - 17.241$

$N_2^B = 1.208$ moles

$N_3^B = 2\varepsilon_1 = 2 \times 15.517 = 31.034$ mol

$N_4^B = 15 - \varepsilon_2 = 15 - 17.241 = -2.241$ mol

$N_5^B = \varepsilon_2 = 17.241$ mol

$N_6^B = \varepsilon_2 = 17.241$ mol

Observe que las moles del componente 4 (CO_2) son negativos, lo cual es imposible. Esto es debido a que el avance de la segunda reacción (ε_2=17.241 moles) es muy grande y no había suficiente CO_2 en la mezcla inicial (tan solo 15 moles) para que diera ese avance de reacción. Esto quiere decir que los avances de reacción no pueden tomar cualquier valor.

Esto indica que el problema se encuentra mal planteado. Note que aunque los grados de libertad son cero, no garantizan que el problema tenga solución factible. Así como en el problema 13, para una reacción química, el valor de ε calculado, daba como resultado moles de producción negativos, en el caso de dos reacciones existen valores permitidos de ε_1 y ε_2. Para poder conocer esta región factble, es necesario graficar las expresiones de las ecuaciones de balance, tal que los moles de salida de cada componente sean mayores o iguales a cero. Como se tienen dos variables ε_1 y ε_2 es posible escribir una de ellas en función de la otra, por ejemplo ε_2 en función de ε_1 de tal forma que en un sistema coordenado rectangular, el eje de las absisas corresponda a ε_1 y el de las ordenadas a ε_2. Si se traza la gráfica que representa cada una de las ecuaciones de balance se obtiene una región que cumple con todas las restricciones, llamada región factible y los puntos de parejas ordenadas $(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ comprendidos dentro de esta región se les llama valores permitidos ε_1 y ε_2.

El juego de desigualdades queda entonces de la siguiente forma:

$N_1^B = 20 - \varepsilon_1 \geq 0$ ... (1a)

$N_2^B = 65 - 3\varepsilon_1 - \varepsilon_2 \geq 0$ ... (2a)

$N_3^B = 2\varepsilon_1 \geq 0$ ... (3a)

$N_4^B = 15 - \varepsilon_2 \geq 0$ ... (4a)

$N_5^B = \varepsilon_2 \geq 0$ ... (5a)

$N_6^B = \varepsilon_2 \geq 0$ ... (6a)

Escribiendo ε_1 en función de ε_2 (tomando en cuenta las propiedades de las desigualdades), las expresiones anteriores quedarían de la siguiente forma:

$\varepsilon_1 \leq 20$ ... (1b)

$\varepsilon_2 \leq 65 - 3\varepsilon_1$ ... (2b)

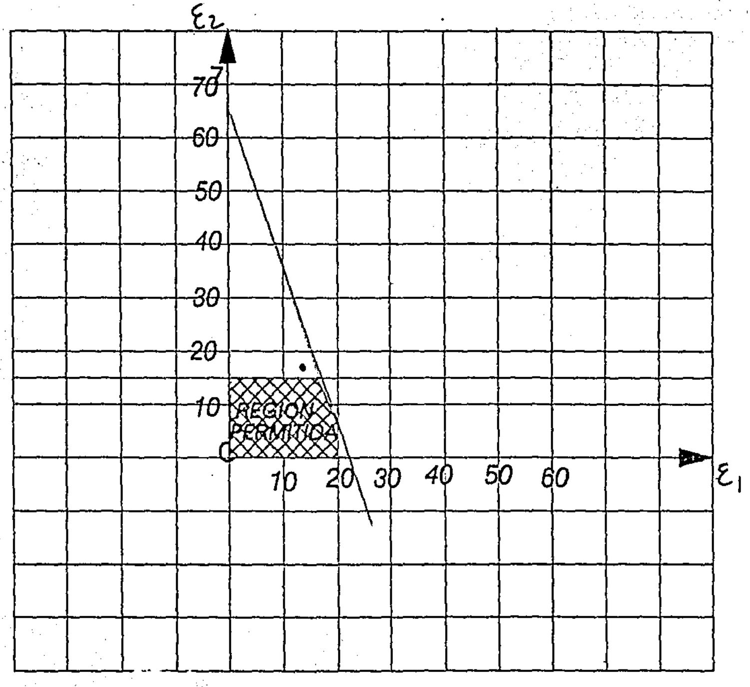
$\varepsilon_1 \geq 0$ ... (3b)

$\varepsilon_2 \leq 15$ ... (4b)

$\varepsilon_2 \geq 0$ ... (5b)

$\varepsilon_2 \geq 0$ ... (6b)

Graficando ε_2 vs. ε_1 se obtiene la siguiente región factible, las parejas ordenadas $(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ circunscritas dentro de esta región factible y su frontera son los valores permitidos.



Como se puede ver en la gráfica no es posible que ε_2 tome el valor de 17.241, ya que se encuentra fuera de la región permitida.

Si se modifican los datos del problema y se pide que la corriente de salida tenga 15% de H_2O, en lugar del 25%, la ecuación 8 se modifica:

$$\frac{\varepsilon_2}{100 - 2\varepsilon_1} = 0.15$$

y la solución del problema es:

$\varepsilon_1 = 15.517$ **moles**

$\varepsilon_2 = 10.345$ **moles**

Estos valores si están en la región permitida, y se corrobora porque la corriente de salida tiene la siguiente composición:

$N_1^B = 4.483$ **moles**	$X_1^B = 0.0650$ **moles**	
$N_2^B = 8.104$ **moles**	$X_2^B = 0.1175$ **moles**	
$N_3^B = 31.034$ **moles**	$X_3^B = 0.4500$ **moles**	(NH_3)
$N_4^B = 4.655$ **moles**	$X_4^B = 0.0675$ **moles**	
$N_5^B = 10.345$ **moles**	$X_5^B = 0.1500$ **moles**	
$N_6^B = 10.345$ **moles**	$X_6^B = 0.1500$ **moles**	(H_2O)

PROBLEMA #18. CONCEPTOS DE BALANCES DE MATERIA CON REACCIÓN QUÍMICA.

Objetivo: Efectuar balances de materia con reacción química incorporando el concepto de región permitida.

Se alimentan a un reactor químico 5 kgmol/hora de metano y 7 kgmol/hora de agua en donde se llevan a cabo las siguientes reacciones:

$$CH_4 + H_2O \longrightarrow CO + 3H_2$$

$$CO + H_2O \longrightarrow CO_2 + H_2$$

Analice el problema (variables, ecuaciones y grados de libertad) y de acuerdo a este análisis conteste lo siguiente:
a) ¿Es posible que la composición en fracción mol de agua a la salida del reactor sea de 0.3 y la del monóxido de carbono 0.2?.
b) ¿Es posible que se consuma en la reacción el 80% de metano y el 75% de agua?.
c) Suponga que se consume totalmente el metano ¿Cuál es el avance máximo que puede tomar la segunda reacción?

SOLUCION:

A la corriente de entrada al reactor químico, se le llamará corriente "A" y a la de salida "B".
Enumerando los componentes que participan en el balance:
1: Metano
2: Agua
3: Monóxido de carbono
4: Dióxido de carbono
5: Hidrógeno

ANALISIS DE LAS VARIABLES:

	Moles de cada componente					
Corriente	1	2	3	4	5	# incógnitas
A	5	7	-	-	-	0
B	N	N	N	N	N	5
Número de reacciones químicas (ε_1 y ε_2)						2
Total de incógnitas =						7

ECUACIONES DE BALANCE.

Realizando el balance de materia a la salida del reactor se tiene:

$$N_1^B = 5 - \varepsilon_1 \qquad \text{... (1)}$$

$$N_2^B = 7 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 \qquad \text{... (2)}$$

$N_3^B = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ ... (3)

$N_4^B = \varepsilon_2$ ... (4)

$N_5^B = 3\varepsilon_1 + \varepsilon_2$ ... (5)

Moles totales = $5 - \varepsilon_1 + 7 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \varepsilon_2 + 3\varepsilon_1 + \varepsilon_2$

Moles totales = $12 + 2\varepsilon_1$ ... (5a)

Total de ecuaciones independientes = 5

GRADOS DE LIBERTAD

Grados de libertad = 7 - 5 = 2
Se tienen 2 grados de libertad. Es un sistema subespecificado.

Note que no se conoce el avance de ninguna reacción y que éstos no pueden tomar cualquier valor (deben de estar dentro de una región permitida de valores) Es por eso que es necesario trazar la gráfica de ε_2 vs. ε_1 para encontrar esta región.

Para encontrar los límites de ε_1 y ε_2 se hará una gráfica de ε_2 vs. ε_1. Para cada compuesto se hace $N^{sal}{}_i = 0$ lo cual da una línea recta en dicha gráfica. Esta línea divide el plano en dos regiones, una es permitida (valores de ε_1 y ε_2 posibles) y otra es no permitida. Los valores de ε_1 y ε_2 permitidos quedarán acotados en una región delimitada por las líneas rectas.

De (1) se obtiene	$\varepsilon_1 = 5$	**(Línea 1)**
De (2)	$\varepsilon_2 = 7 - \varepsilon_1$	**(Línea 2)**
De (3)	$\varepsilon_2 = \varepsilon_1$	**(Línea 3)**
De (4)	$\varepsilon_2 = 0$	**(Línea 4)**
De (5)	$\varepsilon_2 = -3\varepsilon_1$	**(Línea 5)**

Para encontrar con mayor facilidad la región permitida conviene introducir un sistema de desigualdades en donde se requiera que los moles de salida de cada componente sean mayores o iguales a cero (en la estricta igualdad se encuentra la frontera).

Para el metano, por ejemplo, si se pretende conocer dónde estará los valores de $^-{}_1$ y $^-{}_2$ permitidos y dónde los valores prohibidos se resuelve la siguiente desigualdad:

$5 - \varepsilon_1 > 0$

$-\varepsilon_1 > -5$

$\varepsilon_1 < 5$

Lo cual corresponde a los valores permitidos de ε_1 y ε_2 para este componente. Lo que está afuera de esta región es precisamente la región prohibida de estos valores para este componente ($\varepsilon_1 > 5$).

Así, para los demás componentes los valores permitidos de ε_1 y ε_2 están dados por:

Para el agua:

$$7 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 > 0$$

$$-\varepsilon_2 > \varepsilon_1 - 7$$

$$\varepsilon_2 < 7 - \varepsilon_1$$

Para el monóxido de carbono:

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_2 > 0$$

$$-\varepsilon_2 > -\varepsilon_1$$

$$\varepsilon_2 < \varepsilon_1$$

Para el dióxido de carbono:

$$\varepsilon_2 > 0$$

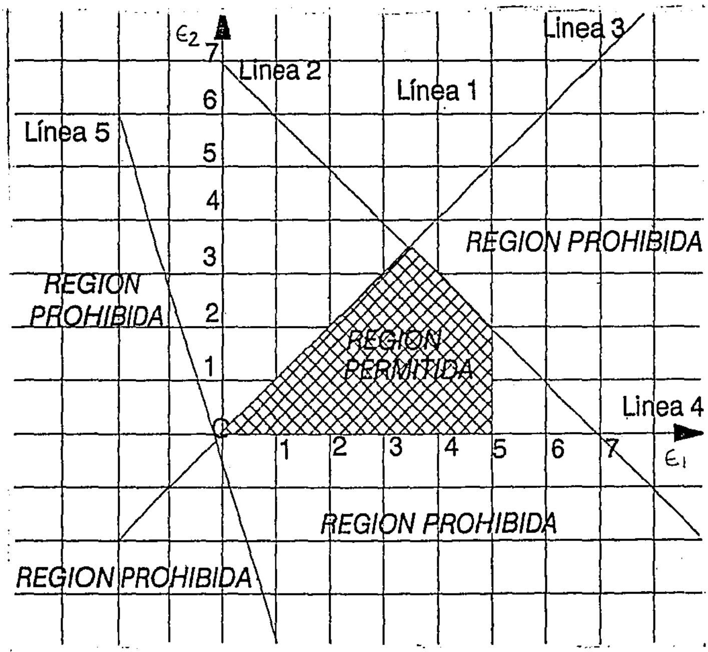
Para el hidrógeno:

$$3\varepsilon_1 + \varepsilon_2 > 0$$

$$\varepsilon_2 > -3\varepsilon_1$$

El lugar donde se intersectan todas estas desigualdades es precisamente la REGION PERMITIDA.

Trazando la gráfica se encuentra la región permitida de ε_1 y ε_2. Note que al aumentar ε_1 ó ε_2 se llegará alguna de las líneas que delimitan la región permitida. Esa línea corresponderá a $N_i = 0$ y ese componente i será el REACTIVO LIMITANTE. Además en la región permitida $N_i>0$ y en la región prohibida $N_i<0$:



A) ¿ES POSIBLE OBTENER UNA FRACCION MOL DE AGUA Y MONOXIDO DE CARBONO DE 0.3 Y 0.2 RESPECTIVAMENTE?

Note que estas dos condiciones, introducen 2 relaciones adicionales, 2 ecuaciones independientes adicionales. El número de grados de libertad del problema se ha reducido y aparentemente se encuentra bien especificado.

La fracción mol de agua a la salida del reactor serán las moles de agua a la salida del reactor entre las moles totales de salida, de acuerdo a las ecuaciones de balance de materia, esto es:

$$\frac{7 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2}{12 + \varepsilon_1} = 0.3 \qquad \text{... (6)}$$

Así como la fracción mol del monóxido de carbono serán:

$$\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{12 + \varepsilon_1} = 0.2 \qquad \text{... (7)}$$

Ordenando las ecuaciones anteriores se obtiene el siguiente sistema:

$$-1.3\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = -3.4 \quad \text{... (6a)}$$

$$0.8\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = 2.4 \quad \text{... (7a)}$$

Multiplicando (7a) por (-1) se obtiene:

$$-1.3\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = -3.4$$

$$-0.8\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = -2.4$$

Sumando estas dos expresiones se obtiene el valor de ε_1:

$$-2.1\varepsilon_1 = -5.8 \dashrightarrow \varepsilon_1 = 2.762 \text{ moles}$$

Sustituyendo este valor en (6a) es posible obtener el valor de ε_2:

$$-1.3(2.762) - \varepsilon 2 = -3.4 \dashrightarrow \varepsilon 2 = -0.190 \text{ moles}$$

Comprobando estos resultados con la expresión (7a):

$$0.8\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = 2.4 \qquad \text{(7a)}$$

$$0.8(2.762)+0.190 = 2.4$$

$$2.4 = 2.4$$

Como es de esperarse, por el valor negativo de ε_2, el valor de esta pareja (2.76, -0.188) se encuentra fuera de la región permitida (observar gráfica).
Por lo que se puede concluir que no es posible obtener a la salida del reactor una fracción mol de agua y monóxido de carbono de 0.3 y 0.2 respectivamente.

B) ¿ES POSIBLE QUE SE CONSUMA EL 80% DE METANO Y EL 75% DE AGUA?

Al igual que el inciso anterior, estas condiciones establecen 2 relaciones adicionales:
Para el metano:

$$N_1^B = 0.2\ N_1^A \qquad \text{... (6b)}$$

Para el agua:

$$N_2^B = 0.25\ N_2^A \qquad \text{... (7b)}$$

Resolviendo estas ecuaciones, junto con las de balance para obtener los valores de ε_1 y ε_2. Si estos valores se encuentran dentro de la región permitida, si son posibles estas dos conversiones, en caso contrario, son imposibles.

Si se analizan las ecuaciones (6b) y (7b) son ecuaciones con una sola incógnita ambas. Resolviéndola se tiene:

$$N_1^B = 0.2\ N_1^A \qquad \text{... (6b)}$$

$$N_1^B = 0.2\ (5) = 1\ \text{mol}$$

$$N_2^B = 0.25\ N_2^A \qquad \text{... (7b)}$$

$$N_2^B = 0.25\ (7) = 1.75$$

Sustituyendo estos valores en las ecuaciones de balance se obtiene:

$$N_1^B = 5 - \varepsilon_1 \qquad \text{... (1)}$$

$$1 = 5 - \varepsilon_1 \dashrightarrow \varepsilon_1 = 4$$

$$N_2^B = 7 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 \qquad \text{... (2)}$$

$$1.75 = 7 - 4 - \varepsilon_2 \dashrightarrow \varepsilon_2 = 1.25$$

Buscando esta pareja ordenada (4, 1.25) en la gráfica, se encuentra dentro de la región permitida. Por lo que se puede concluir que:
Es posible que se consuma en la reacción el 80% del metano y el 75% del agua.

C) ENCONTRAR EL VALOR MAXIMO DE ε_2 EN EL CASO DE QUE SE CONSUMA POR COMPLETO EL METANO.

Si se consume el metano totalmente, significa que las moles del metano a la salida del reactor son 0, esto conduce a la siguiente relación adicional:

$$N_1^B = 0 \qquad \text{... (6c)}$$

Ya que el metano se encuentra presente solo en la primera reacción, es posible con esta relación adicional obtener de (1) el valor de ε_1:

$$N_1^B = 5 - \varepsilon_1 \qquad \text{... (1)}$$

$$0 = 5 - \varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_1 = 5 \text{ moles}$$

Con ε_1=5 moles, si se analiza la gráfica, el valor máximo que puede tomar ε_2 es es 2.

El avance máximo de la segunda reacción, en el caso de que el metano se consuma completamente es de 2 moles.

PROBLEMA 19. BALANCE DE MATERIA A REGIMEN PERMANENTE CON VARIAS REACCIONES QUIMICAS.

Objetivo: Realizar el balance de un sistema con 4 reacciones químicas, introducir el concepto de cantidades estequiométricas y el concepto de reactivo en exceso.

Se va a quemar con aire una corriente de gas natural que tiene la siguiente composición:

Metano	(CH_4)	88.84% mol
Etano	(C_2H_6)	6.57
Propano	(C_3H_8)	2.20
Butano	(C_4H_{10})	1.87
Dióxido de Carbono	(CO_2)	0.49
Agua	(H_2O)	0.03

Las reacciones de combustión son:

$CH_4 + 2O_2 \longrightarrow CO_2 + 2H_2O$ ... (1)

$C_2H_6 + 7/2\ O_2 \longrightarrow 2CO_2 + 3H_2O$ ... (2)

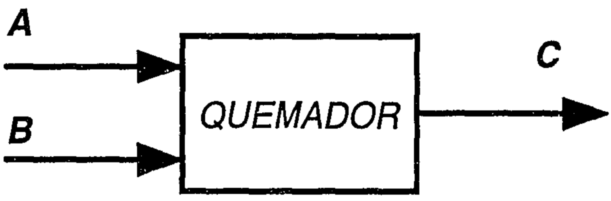
$C_3H_8 + 5O_2 \longrightarrow 3CO_2 + 4H_2O$ ... (3)

$C_4H_{10} + 13/2\ O_2 \longrightarrow 4CO_2 + 5H_2O$ ... (4)

Considere que el combustible se quema completamente.
Calcule:
a) La cantidad estequiométrica de aire necesario para la combustión. El aire contiene 79% en mol de Nitrógeno y 21% de Oxígeno.
b) Calcule la composición de los gases de combustión, usando el aire estequiométrico.
c) Calcule la composición de los gases de combustión base seca.
d) Calcule la composición de los gases de combustión utilizando un exceso de aire del 10%.
e) Calcule el exceso de aire utilizado para la combustión si se encuentra que en los gases de combustión se tiene 3% mol de O_2 base seca.

SOLUCION:

En el siguiente diagrama se representa el quemador; con dos alimentaciones, el combustible (gas natural), corriente A, y el aire, corriente B; los gases de combustión que salen del quemador corresponden a la corriente C.



Asignándole un número a cada uno de los componentes:

1: Metano	(CH_4)
2: Etano	(C_2H_6)
3: Propano	(C_3H_8)
4: Butano	(C_4H_{10})
5: Dióxido de carbono	(CO_2)
6: Agua	(H_2O)
7: Oxígeno	(O_2)
8: Nitrógeno	(N_2)

1. ANALISIS DE LAS VARIABLES:

Como no se especifica ningún flujo en el enunciado del problema, se tiene libertad para escoger una base. Tomando como base 100 moles/hr de gas natural se tiene la siguiente tabla de variables:

	FLUJO MOLAR DE CADA COMPONENTE (moles/hr)								# INCOGNITAS
CORRIENTE	1	2	3	4	5	6	7	8	
A	88.8	6.52	2.20	1.87	0.49	0.03	-	-	0
B	-	-	-	-	-	-	N	N	2
C	N	N	N	N	N	N	N	N	8
# de Reacciones Químicas (ε_1, ε_2, ε_3, ε_4)									4
Total de incógnitas									14

2. ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA:

Las ecuaciones de balance de materia para cada componente se dan a continuación. Para este problema se considera como alimentación la combinación de A y B.

$N_1^C = 88.84 - \varepsilon_1$ ... (1)

$N_2^C = 6.57 - \varepsilon_2$ ... (2)

$N_3^C = 2.20 - \varepsilon_3$ ... (3)

$N_4^C = 1.87 - \varepsilon_4$ ... (4)

$N_5^C = 0.49 + \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 + 3\varepsilon_3 + 4\varepsilon_4$ ... (5)

$N_6^C = 0.03 + 2\varepsilon_1 + 3\varepsilon_2 + 4\varepsilon_3 + 5\varepsilon_4$ ... (6)

$N_7^C = N_7^B - 2\varepsilon_1 - 7/2\, \varepsilon_2 - 5/\varepsilon_3 - 13/2\, \varepsilon_4$ ... (7)

$N_8^C = N_8^B$ ... (8)

Moles totales de C = Σ moles de cada componente

Moles totales de C = $88.84 - \varepsilon_1 + 6.57 - \varepsilon_2 + 2.20 - \varepsilon_3 + 1.87 - \varepsilon_4 + 0.49 + \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 + 3\varepsilon_3 + 4\varepsilon_4$
$+ 0.03 + 2\varepsilon_1 + 3\varepsilon_2 + 4\varepsilon_3 + 5\varepsilon_4 + N_7^B - 2\varepsilon_1 - 7/2\, \varepsilon_2 - 5\varepsilon_3 - 13/2\, \varepsilon_4 + N_8^B$

Moles totales de C = $100 + N_7^B + N_8^B + 1/2\varepsilon_2 + \varepsilon_3 + 3/2\varepsilon_4$
Número de ecuaciones independientes de balance de materia = 8

3. RELACIONES ADICIONALES

Del enunciado del problema se desprende que en los gases de combustión no se encuentra presente ninguno de los hidrocarburos (combustión total), lo cual da las siguientes ecuaciones:

$N_1^C = 0$ ... (9)

$N_2^C = 0$ ... (10)

$N_3^C = 0$ ... (11)

$N_4^C = 0$ ... (12)

Además se sabe que el aire tiene 79% en mol de nitrógeno y 21% de oxígeno, es decir, la relación molar existente entre el nitrógeno y oxígeno es 0.79/0.21. Esta información da origen a la siguiente relación adicional:

$$\frac{N_8^A}{N_7^A} = \frac{0.79}{0.21} \quad \text{... (15)}$$

Con las ecuaciones independientes (9), (10), (11), (12), y (13). Se tienen 5 relaciones adicionales que sumadas a las ecuaciones de balance de materia, da un total de 13 ecuaciones.

4. ANALISIS DE LOS GRADOS DE LIBERTAD

Grados de libertad = # Incógnitas - # Ecuaciones independientes
Grados de libertad = 14 - 13 = 1

Para resolver este problema será necesario especificar un dato adicional.
* En el inciso a) del enunciado se pide calcular el aire estequiométrico, lo cual proporciona el dato adicional.
* En el inciso d) se especifica un 10% de exceso de aire, lo cual da el dato adicional.
* En el inciso e) se especifica un 3% mol mol de O_2 base seca en los gases de combustión, lo cual proporciona el dato adicional.

5. CANTIDAD ESTEQUIOMETRICA DE AIRE.

Es aquella que tenga la cantidad de oxígeno necesaria para cumplir exactamente con la reacción de oxidación, es decir, que todos los hidrocarburos se consuman, de tal forma que a la salida del quemador el flujo molar de cada uno de ellos será igual a cero (ya que todos se consumieron).
Como se refiere a la cantidad exacta de oxígeno necesaria, a la salida del quemador el flujo molar del oxígeno también es cero. La cantidad de aire estequiométrico estará dada por la suma del oxígeno estequiométrico y el nitrógeno que acompaña a ese oxígeno en el aire.
Lo anterior proporciona una relación adicional:

$$N_7^C = 0 \qquad \text{... (4)}$$

con lo cual se tiene un sistema de 14 ecuaciones con 14 incógnitas.

ESTRATEGIA DE RESOLUCION

Se tienen 14 incógnitas y 14 ecuaciones independientes.
Si se sustituyen las ecuaciones (9), (10), (11), (12) y (14) en las ecuaciones de balance de materia (1), (2), (3), (4) y (7) respectivamente el sistema de ecuaciones se simplifica a:

$$0 = 88.84 - \varepsilon_1 \qquad \text{... (1a)}$$

$$0 = 6.57 - \varepsilon_2 \qquad \text{... (2a)}$$

$$0 = 2.20 - \varepsilon_3 \qquad \text{... (3a)}$$

$$0 = 1.87 - \varepsilon_4 \qquad \text{... (4a)}$$

$$N_5^C = 0.49 + \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 + 3\varepsilon_3 + 4\varepsilon_4 \qquad \text{... (5)}$$

$$N_6^C = 0.03 + 2\varepsilon_1 + 3\varepsilon_2 + 4\varepsilon_3 + 5\varepsilon_4 \qquad \text{... (6)}$$

$$0 = N_7^B - 2\varepsilon_1 - 7/2\,\varepsilon_2 - 5\varepsilon_3 - 13/2\,\varepsilon_4 \qquad \text{... (7a)}$$

$$N_8^C = N_8^B \qquad \text{... (8)}$$

$$\frac{N_8^A}{N_7^A} = \frac{0.79}{0.21} \qquad \text{... (13)}$$

Sistema de 9 ecuaciones independientes y 9 incógnitas: ε_1, ε_2, ε_3, ε_4, N_5^C, N_6^C, N_7^C, N_8^C y N_8^C.

Para determinar el camino a seguir para resolver este sistema, resulta útil hacer una tabla en donde se detalle cuántas y cuáles son las incógnitas de cada ecuación:

Ecuación	Incógnitas	# Incógnitas
1a	ε_1	1
2a	ε_2	1
3a	ε_3	1
4a	ε_4	1
5	$N_5^C, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4$	5
6	$N_6^C, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4$	5
7a	$N_7^B, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4$	5
8	N_8^B, N_8^C	2
13	N_7^B, N_8^B	2

En la tabla anterior se puede observar que las ecuaciones (1a), (2a), (3a), y (4a) tienen una incógnita, por lo cual es posible resolver cada una de ellas y obtener los valores de ε_1, ε_2, ε_3 y ε_4. Con estos valores, es posible obtener de la ecuación (7a) el valor de N_7^B, de la ecuación (5) el valor de N_5^C y de (6) el valor de N_6^C. Sustituyendo el valor de N_7^B en (13) se obtiene el valor de N_8^B.
Resuelto este sistema de ecuaciones, lo que se necesita de aire para cumplir con los requerimientos estequiométricos es precisamente la suma de la cantidad de oxígeno y nitrógeno:
Moles de aire estequiométrico = $N_7^B + N_8^B$

ALGORITMO PARA OBTENER LA CANTIDAD DE AIRE ESTEQUIMETRICO

1.- Se resuelven las ecuaciones (1a), (2a), (3a) y (4a) y se obtiene los valores de ε_1, ε_2, ε_3 y ε_4.
2.- Resolviendo la ecuación (7a) se obtiene el valor de N_7^B.
3.- Se resuelve las ecuaciones (5) y (6) obteniendo los valores de N_5^C y N_6^C respectivamente.
4.- Se resuelve (13) y se obtiene N_8^B.
5.- Se calcula los moles de aire estequiométrico al sumar los moles de oxígeno y nitrógeno.

RESOLUCION NUMERICA

1.- Se resuelven las ecuaciones (1a), (2a), (3a) y (4a) y se obtiene los valores de ε_1, ε_2, ε_3 y ε_4.

$$88.84 - \varepsilon_1 = 0 \quad \text{... (1a)}$$
$$6.57 - \varepsilon_2 = 0 \quad \text{... (2a)}$$
$$2.20 - \varepsilon_3 = 0 \quad \text{... (3a)}$$
$$1.87 - \varepsilon_4 = 0 \quad \text{... (4a)}$$

De donde ε_1 = 88.84 moles/hr, ε_2 = 6.57 moles/hr, ε_3 = 2.20 moles/hr y ε_4 = 1.87 moles/hr.

2.- Resolviendo la ecuación (7) se obtiene el valor de N_7^B.

$$0 = N_7^B - 2\varepsilon_1 - 7/2\,\varepsilon_2 - 5\varepsilon_3 - 13/2\,\varepsilon_4 \quad \text{... (7a)}$$

$$0 = N_7^B - 2(88.84) - 7/2\,(6.57) - 5(2.20) - 13/2\,(1.87)$$

$$0 = N_7^B - 223.83 \longrightarrow N_7^B = 223.83 \text{ moles/hr}$$

3.- Se resuelve las ecuacion (5) obteniendo el valor de N_5^C

$$N_5^C = 0.49 + \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 + 3\varepsilon_3 + 4\varepsilon_4 \quad \text{... (5)}$$

$$N_5^C = 0.49 + 88.84 + 2(6.57) + 3(2.2) + 4(1.87) = 116.55 \text{ moles/hr}$$

Se resuelve las ecuacion (6) obteniendo el valor de N_6^C.

$$N_6^C = 0.03 + 2\varepsilon_1 + 3\varepsilon_2 + 4\varepsilon_3 + 5\varepsilon_4 \quad \text{... (6)}$$

$$N_6^C = 0.03 + 2(88.64) + 3(6.57) + 4(2.2) + 5(1.87)$$

$$N_6^C = 215.57 \text{ moles}$$

4.- Se resuelve (13) y se obtiene N_8^B.

$$\frac{N_8^B}{N_7^B} = \frac{0.79}{0.21} \quad \text{... (15)}$$

$$N_8^B = N_7^B\,\frac{0.79}{0.21} = 223.83\,\frac{(0.79)}{0.21} = 842.03 \text{ moles/hr}$$

Las moles de Nitrógeno a la entrada y a la salida del reactor permanecen constantes debido a que es un componente inerte, ecuación (8), por lo que:

$$N_8^C = N_8^C \quad \text{... (8)}$$

$$N_8^C = 842.03 \text{ moles/hr}$$

5.- Se calcula los moles de aire estequiométrico al sumar los moles de oxígeno y nitrógeno.

Moles de aire estequiométrico = $N_7^B + N_8^B$

Moles de aire estequiométrico = 223.83 + 842.03

Moles de aire estequiométrico = 1065.86 moles/hr

6. COMPOSICION DE LOS GASES DE COMBUSTION (BASE HUMEDA):

N_5^C = 116.55 moles/hr

N_6^C = 215.57 moles/hr

N_8^C = 842.03 moles/hr

$N_{Totales}^C$ = 1174.15 moles/hr

Para obtener la composición en fracción mol:

$$\text{Fracción mol (gases de combustión)} = \frac{\text{Moles del componente i en la corriente C}}{\text{Moles totales en C}}$$

$$Yi = \frac{N_i^C}{N_T^C}$$

Así:

$Y_5^C = 0.0993$

$Y_6^C = 0.1836$

$Y_8^C = 0.7171$

Suma = 1.0000

7. COMPOSICION GASES DE COMBUSTION (BASE SECA)

$$\text{Fracción mol (base seca) en B} = \frac{\text{Moles del componente i en la corriente B}}{\text{Moles totales base seca en B}}$$

Moles totales base seca en B = 116.55 + 842.03 (CO_2 + N_2)
Moles totales base seca en B = 958.58 moles/hr

Así:

$$Yi = \frac{N_i}{N_T(\text{Base seca})}$$

$Y_5^C = 0.1216$
$Y_8^C = 0.8784$
Suma = 1.0000

8. CALCULOS UTILIZANDO UN EXCESO DE AIRE DEL 10%

$(N_{aire}^B)_{estequiométrico} = 1065.86$ moles/hr

$(N_{aire}^B)_{10\%\ exceso} = 1065.86(1.1) = 1172.45$ moles/hr

$N_8^B = (0.79)(1172.45) = 926.24$ moles/hr

$N_7^B = (0.21)(1172.45) = 246.21$ moles/hr

LOS MOLES DE SALIDA DE LOS GASES DE COMBUSTIÓN SERÍAN ENTONCES:

$N_5^C = 116.55$ moles/hr [Igual que el inciso anterior ya que se produce la misma cantidad de estos productos]

$N_6^C = 215.57$ moles/hr

$N_8^C = N_8^A$

$N_8^C = 926.24$ moles/hr

N_7^C = 246.21 - 223.83 (necesarios para la combustión) = 22.38 moles/hr

$N_{Totales}^C$ = 1280.74 moles/hr

La composición (fracción mol) es:

$Y_5^C = 0.0910$

$Y_6^C = 0.1683$

$Y_8^C = 0.7232$

$Y_7^C = 0.0175$

Y en base seca:

Moles totales base seca = 116.55 + 926.24 + 22.38 = 1065.17 moles/hr

$Y_5^B = 0.1094$

$Y_8^B = 0.8696$

$Y_7^B = 0.0210$

9. CALCULO DEL EXCESO DE AIRE SI EN LOS GASES DE COMBUSTION DE TIENE 3% DE O_2 BASE SECA.

La corriente de gases de combustión tendría la siguiente composición:

N_5^C **= 116.55 moles**

N_6^C **= 215.57 moles**

$$N_8^C = \frac{0.79}{0.21} N_7^A$$

$N_7^B = N_7^A$ **- 223.83 moles/hr**

Los moles totales en base seca serían:

$$(N_T^C)_{base\ seca} = N_5^C + N_8^C + N_7^C$$

$$(N_T^C)_{base\ seca} = 116.55 + 0.79/0.21\ N_7^B + N_7^B - 223.83$$

$$(N_T^C)_{base\ seca} = N_7^A/0.21 - 107.28$$

Así la composición del oxígeno (fracción mol) en base seca:

$$Y_7^B = \frac{\text{Moles de oxígeno en la salida}}{\text{Moles totales base seca}}$$

$$Y_7^B = \frac{N_7^A - 223.83}{N_7^A/0.21 - 107.28} = 0.03$$

(Se tiene 3% en mol de O_2 en los gases de combustión).

En esta ecuación la única incógnita es N_7^A ---> N_7^A = 257.36 moles/hr.
La cantidad de oxígeno estequiométrico (obtenido en uno de los incisos anteriores) fue: $\underline{N}_7^A$ = 223.83 moles. La relación entre el oxígeno de entrada y el oxígeno estequiométrico proporciona el exceso de oxígeno cuya relación coincide con el exceso de aire:

$$N_7^A = \frac{257.36}{223.83} = 1.15$$

Esto quiere decir que se tiene un 15% de exceso de aire.
Calculando ahora los moles a la salida del quemador, para así poder calcular la composición:

$$(N_{aire}^B)_{estequiométrico} = 1065.86 \text{ moles/hr}$$

$$N_{aire}^B = 1065.86(1.15) = 1225.74 \text{ moles/hr}$$

$$N_8^B = (0.79)(1225.74) = 968.33 \text{ moles/hr}$$

Los moles de oxígeno a la salida del quemador son la diferencia de los moles correspondientes al 15% de exceso y los que reaccionaron para llevar a cabo la combustión (cantidad estequimétrica de oxígeno):

$$N_7^C = N7^B - N_7(\text{estequiométrico})$$

$$N_7^C = 257.41 - 223.83 = 33.58 \text{ moles/hr}$$

Entonces los moles de salida de cada uno de los componentes utilizando 15% de exceso de aire serían:

$$N_5^C = 116.55 \text{ moles/hr}$$

$$N_6^C = 215.57 \text{ moles/hr}$$

$$N_8^C = 968.33 \text{ moles/hr}$$

$$N_7^C = 33.58 \text{ moles/hr}$$

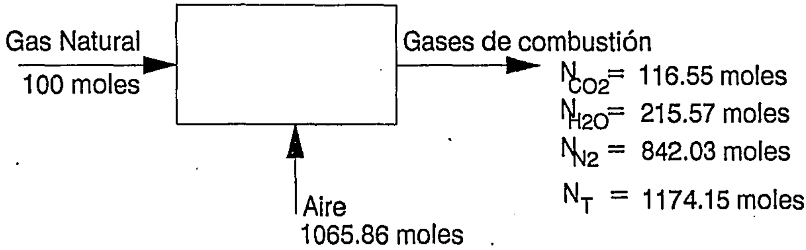
$$(N_T^C)_{base\ húmeda} = 116.55+215.57+968.33+33.58 = 1334.03 \text{ moles/hr}$$

$$(N_T^C)_{base\ seca} = 116.55+968.33+33.58 = 1118.46 \text{ moles/hr}$$

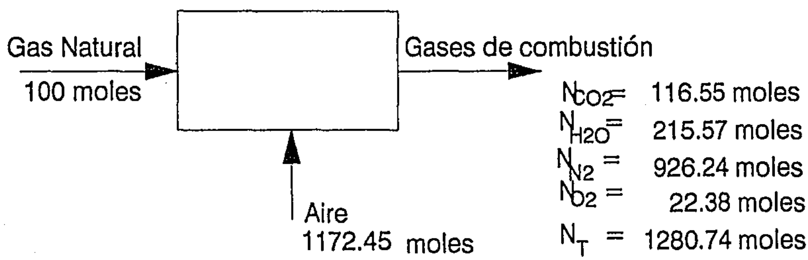
La composición sería entonces:

Fracción mol base húmeda	Fracción mol base seca
$Y_5^C = 0.0874$	$Y_5^C = 0.1042$
$Y_6^C = 0.1616$	$Y_8^C = 0.8658$
$Y_8^C = 0.7259$	$Y_7^C = 0.0300$
$Y_7^C = 0.0252$	

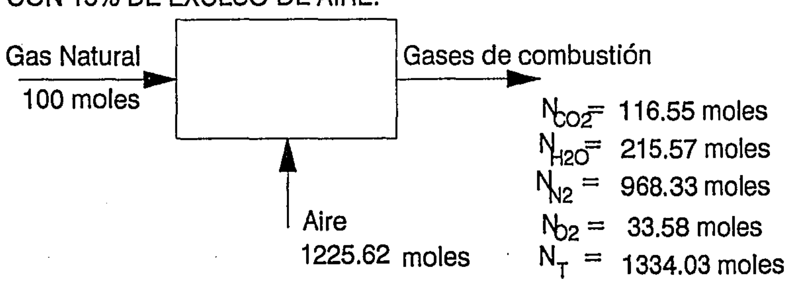
CON AIRE ESTEQUIOMETRICO:



CON 10% DE EXCESO DE AIRE:



CON 15% DE EXCESO DE AIRE:



Balance de materia con reacción química en varios equipos.

PROBLEMA 20. BALANCE DE MATERIA EN PROCESOS DE VARIOS EQUIPOS CON REACCIÓN QUÍMICA.

Objetivo: Resolver un problema de balance de materia haciendo un análisis equipo por equipo, simplificando la solución.

Se va a quemar una corriente de aceite combustible con 100% de exceso de aire. El aceite contiene 87.0 % en masa de C, 10% de H y 3% de S. El análisis de los gases de combustión muestra la presencia de N_2, O_2, CO_2, SO_2 Y H_2O solamente. Por restricciones ecológicas se debe controlar la emisión del dióxido de azufre a la atmósfera, pasando los gases de combustión por un absorbedor, en donde la mayor parte de SO_2 se absorbe en una solución alcalina. Los gases que salen del absorbedor contienen todo el N_2, O_2, H_2O, CO_2 y algo de SO_2 que entraron al mismo, y son desechados a la atmósfera. El absorbedor tiene una capacidad limitada por lo que las dos terceras partes de los gases de combustión son desviados y mandados a la chimenea sin pasar por el absorbedor. El absorbedor remueve el 92% del SO_2 que se le alimenta, esto gracias a 100 kmol de solución alcalina por cada 100 kmol de alimentación al quemador.

La Secretaría de Desarrollo Urbano y Ecología (SEDUE) ha establecido que el límite de emisión de los gases de chimenea combinados no exceda las 500 ppm (base seca). Se desea determinar si este proceso cumple con estas restricciones.

De acuerdo al enunciado anterior:

a) Realice un análisis de las variables que intervienen en el problema, cuáles son conocidas y cuáles son incógnitas.

b) Plantee las ecuaciones de balance de materia y las relaciones adicionales que se derivan del enunciado del problema.

c) Realice un análisis de los grados de libertad y de acuerdo a éste, establezca si el problema se encuentra especificado, sobrespecificado o subespecificado. En caso de que se pueda resolver, plantee un algoritmo de resolución y resuélvalo numéricamente.

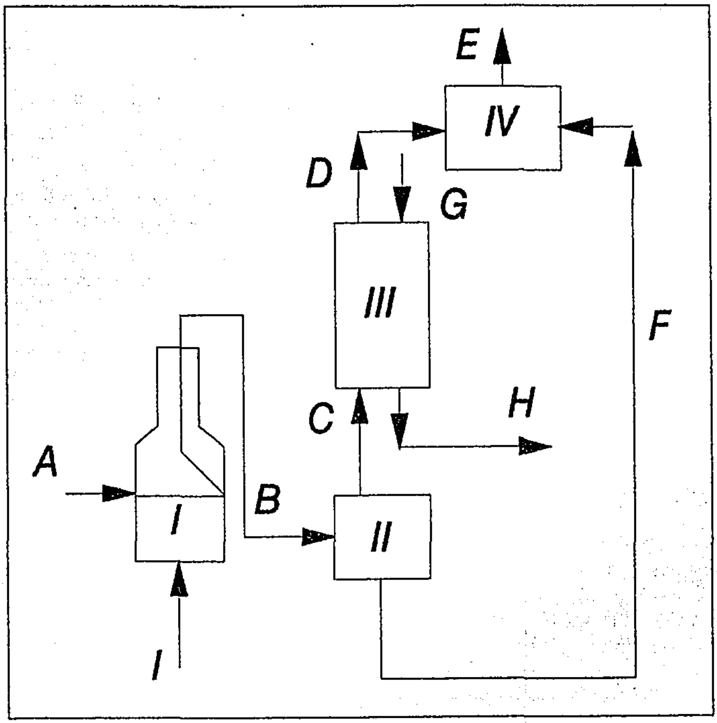
SOLUCION:

De acuerdo con el enunciado del problema, a continuación se muestra el diagrama del proceso. La corriente de gases de combustión se divide, por lo cual se asigna el equipo ficticio II, y como después se mezclan nuevamente, se introduce también un equipo ficticio, el IV.

Se asignó una letra mayúscula a cada una de las corrientes, se tiene un total de 8 corrientes (A, B, C, D, E, F, G, H e I). Enumerando los equipos, de tal suerte que el equipo I es el quemador, el II, el divisor, el III el absorbedor y el IV el mezclador.

Las corrientes de proceso corresponden a:
A: Aceite combustible
B: Gases de combustión
C: Fracción de los gases de combustión que se alimentan al absorbedor.
D: Gases de combustión tratados y que tienen un menor contenido de SO_2
E: Gases de combustión que se tiran a la chimenea
F: Fracción de los gases de combustión que no son tratados y se tiran a la atmósfera.
G: Solución alcalina
H: Solución alcalina que ya absorbió el SO_2
I: Aire para la combustión

Componentes:
1: Carbono
2: Hidrógeno
3: Azufre
4: Nitrógeno
5: Oxígeno
6: Dióxido de carbono
7: Dióxido de azufre
8: Agua
9: Solución alcalina



Antes de plantear la tabla de variables y las ecuaciones que intervienen en este proceso es útil examinar ciertos aspectos del problema.

Si se observa el diagrama de flujo de proceso, aparentemente se trata de un problema complejo. Cuatro equipos en total: un reactor, un divisor, un absorbedor y un mezclador.

En ciertas ocasiones resulta conveniente simplificar un problema muy grande, en caso de que los datos que proporcione el mismo lo permitan. Por ejemplo, el enunciado del problema indica que se va a llevar a cabo una combustión. Los reactivos son carbono, hidrógeno y azufre. La corriente de gases de combustión contiene nitrógeno, azufre, dióxido de carbono, dióxido de azufre y agua. También se menciona que se alimenta un exceso de 100% de aire. Con estos datos es posible concluir que se lleva a cabo una reacción completa, es decir, que el carbono, el hidrógeno y el azufre se consumen completamente.

Se da la composición de la corriente de alimentación al quemador y se dice además que se alimentan al absorbedor 100 kmol/hr de solución alcalina, por cada 100 kmol de la corriente de alimentación al quemador. Con este dato, es posible fijar la alimentación a 100 kmol. De esta forma, la corriente de aceite se encuentra completamente especificada.

También se dan suficientes datos para poder conocer la corriente de aire.

En conclusión, con los datos proporcionados en el enunciado del problema, es posible resolver el primer equipo (quemador).

Este análisis resulta muy útil, ya que permite simplificar el problema antes de plantearlo totalmente.

Otro dato que indica otra simplificación, es el que se refiere al equipo II. Es un divisor, en donde simplemente se divide un flujo, la composición de la mezcla no cambia en los divisores.

Si se resuelve el equipo I, la corriente B quedará totalmente especificada, entonces las incógnitas del separador son C y F. Se menciona además en el enunciado que sólo una tercera parte de la corriente de gases de combustión pasa por el absorbedor, o bien que se desvían de él dos terceras partes. Con estos datos se puede resolver el equipo II. Entonces, es posible especificar completamente las corrientes A, B, C, F e I. El problema entonces se divide en 3 subproblemas: El quemador, el divisor y por otro lado el absorbedor y el mezclador.

Con la finalidad de demostrar el grado de simplificación que se ha logrado con estas reflexiones, se da a continuación la tabla de variables del proceso total, sin ninguna simplificación:

	Fracción mol de cada componente									**Flujo**	**# Incógnitas**
Corriente	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**		
A	C	C	C	-	-	-	-	-	-	C	0
B	-	-	-	N	N	N	N	N	-	N	5
C	-	-	-	N	N	N	N	N	-	N	5
D	-	-	-	N	N	N	N	N	-	N	5
E	-	-	-	N	N	N	N	N	-	N	5
F	-	-	-	N	N	N	N	N	-	N	5
G	-	-	-	-	-	-	-	-	C	C	0
H	-	-	-	-	-	-	N	-	N	N	2
I	-	-		N	N	-	-	-	-	N	2
# Reacciones químicas											3
Total de Incógnitas											32

La letra C indica que la variable es conocida, y la letra N que nos se conoce, o sea, que es una incógnita.

Con la finalidad de desarrollar agilidad en el planteamiento de ecuaciones, a continuación, de una manera simpificada, se enumeraran las ecuaciones, tanto de balance como relaciones adicionales del problema. Esto es también con el propósito de determinar de una forma rápida si el problema se encuentra bien o mal planteado. Más adelante se plantean detalladamente las ecuaciones de cada equipo.

EQUIPO I: QUEMADOR

a) Ecuaciones de balance de materia

En las corrientes A, B e I intervienen 8 componentes. Existen por lo tanto, 8 ecuaciones independientes.

b) Relaciones adicionales

Se menciona en el enunciado del problema que se alimenta un 100% de exceso de aire. Otra relación adicional es la que se deriva de la composición del aire, éste contiene 79% en mol de nitrógeno y 21% de oxígeno.

Ecuaciones totales equipo I: 8 (balance) + 2 (relaciones acionales) = 10

c) Incógnitas

Las corrientes A, B e I tienen en total 7 incógnitas. Pero como se llevan a cabo las reacciones químicas:

$$C + O_2 \text{--->} CO_2$$

$$2H_2 + O_2 \text{--->} 2H_2O$$

$$S + O_2 \text{--->} SO_2$$

se debe adicionar una incógnita por cada reacción, el grado de avance. Por lo tanto el número total de incógnitas es de 7+3=10.

d) Grados de libertad

En este equipo se tienen 10 ecuaciones y 10 incógnitas, por lo tanto los grados de libertad son cero y se puede resolver.

EQUIPO II: DIVISOR

a) Ecuaciones de balance:

Como las composiciones en las corrientes de los divisores son iguales que en la corriente principal, se tiene solo una ecuación de balance de materia, la del balance total.

b) Relaciones adicionales:

Se menciona que una tercera parte de la corriente de los gases de combustión pasa por el absorbedor y las otras dos terceras partes se desvían. Esto da origen a una relación adicional.

Ecuaciones totales equipo II: 1 (balance) + 1 (relacionesacionales) = 2

c) Incógnitas:
Como ya se resolvió el equipo I, la corriente B está totalmente especificada. De las corrientes C y F se conocen las composiciones y solo quedan como incógnitas los flujos. Por lo tanto el número de incógnitas es de dos.

d) Grados de libertad:
En este equipo se tienen 2 ecuaciones y 2 incógnitas, por lo tanto los grados de libertad son cero y se puede resolver.

EQUIPO III: ABSORBEDOR
a) Ecuaciones de balance
Se tienen 6 componentes presentes (los 5 provenientes de los gases de combustión y la solución alcalina), por lo que es posible plantear 6 ecuaciones de balance de materia independientes.

b) Relaciones adicionales
Se menciona que el absorbedor remueve el 92 del dióxido de azufre que entra a él, esto da origen a una relación adicional.
Ecuaciones totales equipo III: 6 (balance) + 1 (relación adicional) = 7

c) Incógnitas
Las corrientes C y G están totalmente especificadas, después de resolver los equipos I y II.
En las corrientes D y H se tienen 5 y 2 incógnitas, respectivamente, por lo cual se tiene un total de 7 incógnitas.

d) Grados de libertad
En este equipo se tienen 7 ecuaciones y 7 incógnitas, por lo tanto los grados de libertad son cero y se puede resolver.

EQUIPO IV: MEZCLADOR
a) Ecuaciones de balance
Se tienen 5 componentes presentes, por lo que es posible plantear 5 ecuaciones de balance de materia independientes.
Ecuaciones totales equipo IV: 5 (balance) + 0 (no hay relaciones adicionales) = 5

b) Incógnitas
Las corrientes F y G se encuentran especificadas después de resolver los equipo I, II y III. En la corriente E se tienen 5 incógnitas, que es el número de incógnitas para este equipo.

c) Grados de libertad
En este equipo se tienen 5 ecuaciones y 5 incógnitas, por lo tanto los grados de libertad son cero y se pueden resolver.

En conclusión, este problema se puede resolver en forma secuencial, primero el equipo I y después los equipos II, III, IV, en ese orden.

ALGORITMO DE RESOLUCION

1.- Se resuelven las ecuaciones del quemador. Así, se obtienen las especificaciones de las corrientes I y B.

2.- Se resuelve el equipo II y se obtienen las especificaciones de las corrientes C y F.

3.- Se resuelven independientemente los equipos III y IV y se especifican así las corrientes D, H, y E.

4.- Se pueden comprobar los cálculos anteriores, al hacer un balance tomando como sistema el proceso total.

5.- FIN.

RESOLUCION NUMERICA

1. SISTEMA: EQUIPO I (QUEMADOR)

Se resuelven las ecuaciones del quemador. Así, se obtienen las especificaciones de las corrientes I y B. Para tener consistencia en las unidades, se manejará los flujos en moles y las composiciones en fracción mol. Tomando como base 100 kg de aceite combustible:

$$100 \text{ kg total} \left| \frac{0.87 \text{ kg de C}}{\text{kg totales}} \right| \left| \frac{1 \text{ kgmol de C}}{12.01 \text{ kg}} \right| = 7.24 \text{ kgmol de C}$$

$$100 \text{ kg total} \left| \frac{0.10 \text{ kg de } H_2}{\text{kg totales}} \right| \left| \frac{1 \text{ kgmol de } H_2}{2.02 \text{ kg}} \right| = 4.95 \text{ kgmol de } H_2$$

$$100 \text{ kg total} \left| \frac{0.03 \text{ kg de S}}{\text{kg totales}} \right| \left| \frac{1 \text{ kgmol de S}}{32.06 \text{ kg}} \right| = 0.09 \text{ kgmol de S}$$

Flujo molar total = Σ Flujos molares por componente

Flujo molar total = 7.24 + 4.95 + 0.09

Flujo molar total = 12.28 kgmol

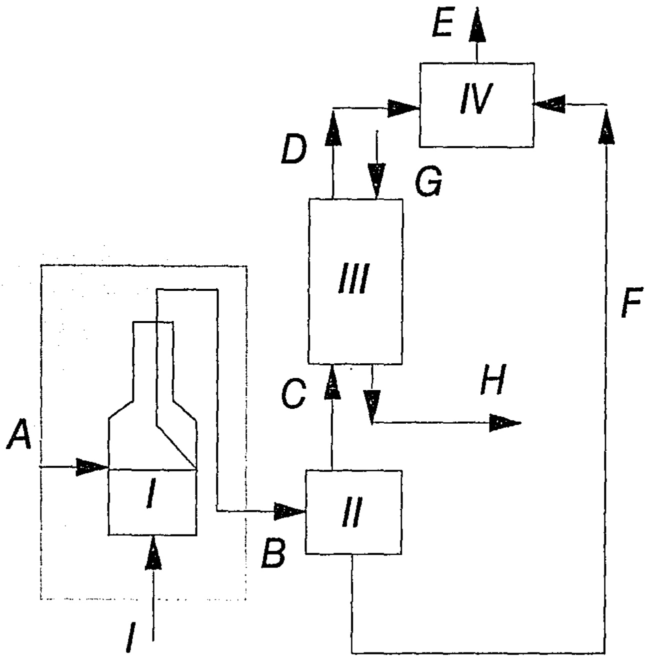
Entonces la fracción mol, se calcula al dividir el flujo molar de cada componente entre el flujo molar total, de tal forma que:

$$X_1^A = \frac{7.24}{12.28} = 0.590$$

$$X_2^A = \frac{4.95}{12.28} = 0.403$$

$$X_1^A = \frac{0.007}{12.28} = 0.007$$

Se adoptará como base un flujo molar de A de 100 kmol/hr por lo cual se tienen 59, 40.3 y 0.7 kmol/hr de C, H_2 y S, respectivamente.



En el quemador se llevan a cabo las siguientes reacciones:

$C + O_2 \text{--->} CO_2$

$2H_2 + O_2 \text{--->} 2H_2O$

$S + O_2 \text{--->} SO_2$

Las ecuaciones de balance de materia por componente en el quemador son:

C:	$0 = 59 - \varepsilon_1$	... (1)
H_20:	$0 = 40.3 - 2\varepsilon_2$	... (2)
S:	$0 = 0.7 - \varepsilon_3$	... (3)
N_2:	$N_4{}^B = N_4{}^I$	... (4)
O_2	$N_5{}^B = N_5{}^I - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \varepsilon_3$	... (5)
CO_2:	$N_6{}^B = \varepsilon_1$	... (6)
SO_2:	$N_7{}^B = \varepsilon_3$	... (7)
H_2O:	$N_8{}^B = 2\varepsilon_2$	... (8)

RELACIONES ADICIONALES:

* Se sabe que el aire contiene 79% de nitrógeno y 21% de oxígeno, de lo cual se deriva la siguiente relación adicional:

$$\frac{N_4^I}{N_5^I} = \frac{0.79}{0.21} \qquad \text{... (9)}$$

* Se tiene un exceso de 100% de aire, por lo cual en la corriente B se encontrará presente el oxígeno que esta en exceso. Para establecer la relación adicional derivada de este enunciado, se seguirá el siguiente razonamiento: Supongamos que se requieren 100 moles de O_2 para la combustión (cantidad estequiométrica). Entonces se alimentarán 100+100=200 moles de O_2, o sea que se introducirán 100 moles adicionales, que corresponden al 100% de exceso. De las 200 moles de O_2 alimentadas se usan 100 moles para la combustión y sobran 100 moles que terminan con los gases de combustión. Por lo tanto:

$$\frac{N_5^B}{N_5^I} = \frac{100}{200} = \frac{1}{2}$$

o bien:

$$N_5^B = \frac{1}{2} N_5^I \qquad \text{... (10)}$$

Analizando las incógnitas de cada una de las ecuaciones anteriores:

Ecuación	Incógnitas	# Incógnitas
1	ε_1	1
2	ε_2	1
3	ε_3	1
4	N_4^B, N_4^I	2
5	N_5^B, N_5^I, ε_1, ε_2, ε_3	5
6	N_6^B, ε_1	2
7	N_7^B, ε_3	2
8	N_8^B, ε_2	2
9	N_4^I, N_5^I	2
10	N_5^B, N_4^I	2

Es posible resolver las ecuaciones (1), (2) y (3) ya que son ecuaciones de una sola incógnita. Con estos valores es posible resolver las ecuaciones (6), (7) y (8). Por último las ecuaciones (4), (5), (9) y (10) pueden resolverse simultánamente. De acuerdo a este análisis, es posible establecer el siguiente:

ALGORITMO DE RESOLUCIÓN (EQUIPO I):

a) Se resuelven independientemente las ecuaciones (1), (2) y (3). Se obtienen los valores de $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ y ε_3 respectivamente.

b) Se resuelven independientemente las ecuaciones (6), (7) y (8). Se obtienen los valores de N_6^B, N_7^B, y N_8^B respectivamente.

c) Se resuelven simultaneamente las ecuaciones (4), (5), (9) y (10), para obtener N_4^B, N_4^I, N_5^B y N_5^I.

RESOLUCIÓN NUMÉRICA (EQUIPO I).

a) Se resuelven independientemente las ecuaciones (1), (2) y (3). Se obtienen los valores de $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ y ε_3 respectivamente.

$0 = 59 - \varepsilon_1$ ... (1)

---> $\varepsilon_1 = 59$ kmol

$0 = 40.3 - 2\varepsilon_2$ ... (2)

---> $\varepsilon_2 = 20.15$ kmol

$0 = 0.7 - \varepsilon_3$ ... (3)

---> $\varepsilon_3 = 0.7$ kmol

b) Se resuelven independientemente las ecuaciones (6), (7) y (8). Se obtienen los valores de N_6^B, N_7^B, y N_8^B respectivamente.

$N_6^B = \varepsilon_1$ ... (6)

---> $N_6^B = 59$ kmol

$N_7^B = \varepsilon_3$ ... (7)

---> $N_7^B = 0.7$ kmol

$N_8^B = 2\varepsilon_2$ ... (8)

---> $N_8^B = 40.30$ kmol

c) Se resuelven simultaneamente las ecuaciones (4), (5), (9) y (10), para obtener N_4^B, N_4^I, N_5^B y N_5^I. Sustituyendo los valores conocidos en la ecuación (5) y rearreglando la ecuación (9):

$N_4^B = N_4^I$ ... (4)

$N_5^B = N_5^I - 79.85$ ... (5a)

$N_4^I = \frac{0.79}{0.21} N_5^I$ ... (9a)

$N_5^B = 0.5\, N_5^I$ ... (10)

Sustituyendo (10) en (5a):

$0.5\ N_5^I = N_5^I - 79.85$

$\text{--->}\ N_5^I = 159.70$ kmol

Note que 79.85 kmol es la cantidad de O_2 estequiométrico, la cantidad requerida con el exceso del 100% es de 159.70 kmol.

Sustituyendo este valor en (9a) y en (5a):

$$N_4^I = \frac{0.79}{0.21} N_5^I \qquad \text{... (9a)}$$

$\text{--->}\ N_4^I = 600.78$ kmol

$$N_5^B = N_5^I - 79.85 \qquad \text{... (5a)}$$

$\text{--->}\ N_5^B = 79.85$ kmol

De (4): $\text{--->}\ N_4^B = N_4^I = 600.78$ kmol

A continuación se presenta un resúmen que contiene los moles de cada componente en las corrientes de alimentación y la de salida al equipo I. Se transforman los moles a masa para demostrar que se cumple el balance de materia:

Componente	**PM**	**Kmoles**	**Masa [kg]**	**Kmoles**	**Masa [kg]**
		Alimentación		**Salida**	
Carbono	12.01	59.00	708.59	---	---
Hidrógeno	2.02	40.30	81.41	---	---
Azufre	32.06	0.70	22.44	---	---
Nitrógeno	28.02	600.78	16,833.86	600.78	16,833.86
Oxígeno	32.00	159.70	5,110.40	79.85	2,555.20
Dióxido de carbono	44.01	----	---	59.00	2,596.59
Dióxido de azufre	64.06	----	---	0.70	44.84
Agua	18.02	----	---	40.30	726.21

Masa total de alimentación al equipo I = 708.59 + 81.41 + 22.44 + 16,833.86 + 5,110.40 = 22,756..70 kg

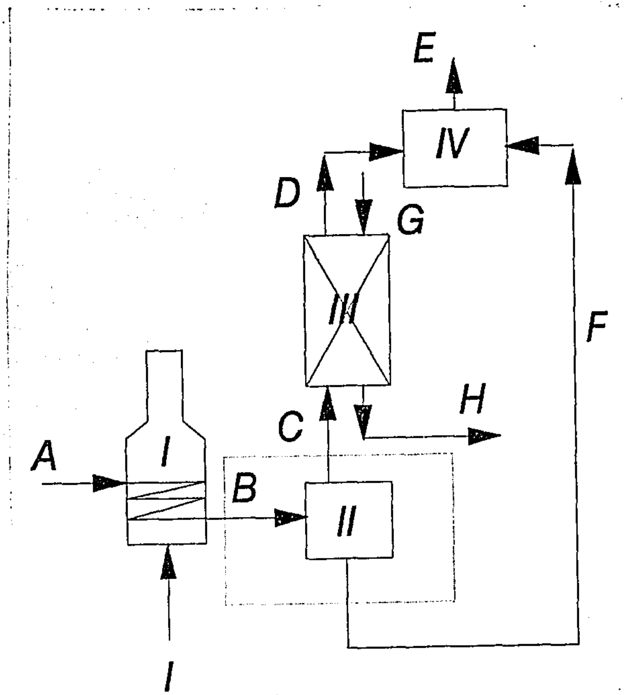
Masa total de salida del equipo I = 16,833.86 + 2,555.20 + 2,596.59 + 44.84 + 726.21 = 22,756.70 kg

Masa total de alimentación al equipo I = Masa total de salida = 22,756.70 kg

---> Se cumple el balance de masa.

2.- Se resuelve el equipo II y se obtienen las especificaciones de las corrientes C y F.

SISTEMA: Equipo II



Balance total:

$$B = C + F \qquad \text{... (11)}$$

Relaciones adicionales:

En el enunciado del problema se menciona que se desvían dos terceras partes (que no pasan por el absorbedor), de lo que se deriva la siguiente relación adicional:

$$C = \frac{1}{3} B \qquad \text{... (12)}$$

No. ecuaciones independientes: 1 (balance) + 1 (relación adicional) = 2

Se tienen también 2 incógnitas, C y F. (Las composiciones de B, C y F son las mismas, ya que lo único que se está separando es el flujo).

Resolución numérica equipo II:
De (12) es posible obtener el valor de C y con este valor en de la ecuación (11) se calcula el valor de F.

$B = 660.78 + 79.85 + 59 + 0.70 + 40.30 = 780.63$ kmol
$C = 1/3\ B$ ... (12)
$C = 1/3\ (780.63)$
$C = 260.21$ kmol

$B = C + F$ ... (11)
---> $F = 520.42$ kmol

Hasta ahora se conoce las especificaciones de las corrientes A, B, C, F e I.

3.- Se resuelven independientemente los equipos III y IV y se especifican así las corrientes D, H, y E.

SISTEMA: Equipo III

Balance total

$C + G = D + H.$ .. (13)

Balance por componente:

$CX_4^C = DX_4^D$ ... (14)
$CX_5^C = DX_5^D$ ... (15)
$CX_6^C = DX_6^D$ ... (16)
$CX_7^C = DX_7^D + HX_7^H$ ... (17)
$CX_8^C = DX_8^D$ ... (18)
$G = HX_9^H$ ... (18a)

RELACIONES ADICIONALES:
* El enunciado del problema menciona que el absorbedor remueve el 92% del SO_2 que se le alimenta, esto quiere decir que en la corriente D se tiene únicamente el 8% del dióxido de azufre alimentado. Esta relación adicional se puede escribir de dos formas equivalentes, pero sólo una es independiente:

$0.92CX_7^C = HX_7^H$ ... (19)

$0.08CX_7^C = DX_7^D$ ... (19a)

No. de ecuaciones independientes: 6 (balance) + 1 (relación adicional) = 7
No. de incógnitas: 7 (Las especificaciones de la corriente D (5) y de la corriente H (2)).
Grados de libertad = 7-7 = 0

Se utilizarán las 6 ecuaciones de balance por componente y la primera expresión de la relación adicional, ecuación (19). Sustituyendo los valores conocidos:

$0.2116 = HX_7^H$ ... (19a)

$200.26 = DX_4^D$ ... (14a)

$26.62 = DX_5^D$ ... (15a)

$19.67 = DX_6^D$ ... (16a)

$0.0187 = DX_7^D$ ... (17a)

$13.42 = DX_8^D$ ... (18b)

$100 = HX_9^H$ ... (18c)

Al analizar las expresiones anteriores, se nota que se conocen los flujos molares de todos los componentes en las corrientes D y H. Entonces, es sencillo obtener el flujo total, al sumarlos. Esto es:

$D = DX_4^D + DX_5^D + DX_6^D + DX_7^D + DX_8^D$

$D = 200.26 + 26.62 + 19.67 + 0.0187 + 13.42 = 259.99$ kmol

En la corriente H se encuentra el flujo molar total alimentado de solución alcalina más los moles que se extrajeron del gas portador:

$H = HX_7^H + HX_9^H$

$H = 0.2116 + 100 = 100.2116$ kmol

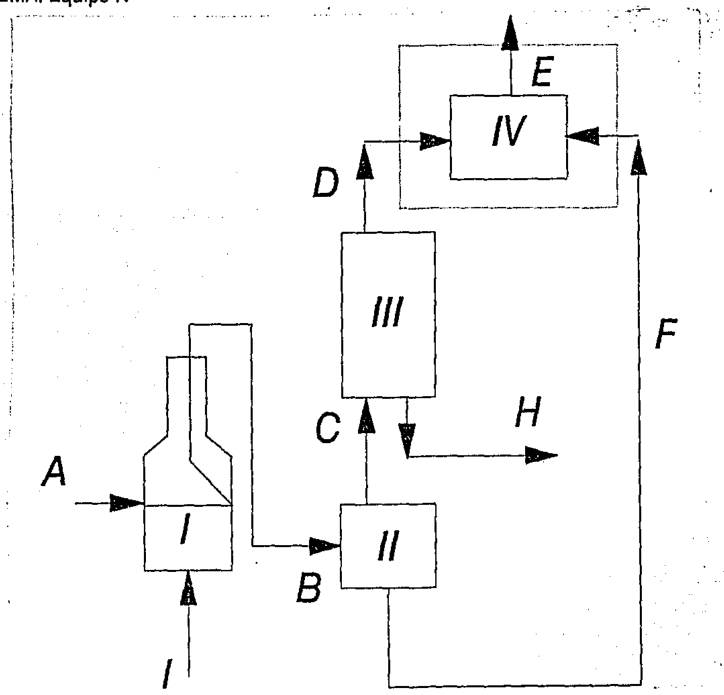
Comprobando los cálculos anteriores con la ecuación de balance total se tiene:

$C + G = D + H$ ... (13)

$260.21 + 100 = 259.99 + 100.2116$

360.21 = 360.20 ---> Se cumple el balance de masa.

SISTEMA: Equipo IV



Balance total:

$E = D + F$ ... (20)

Balance por componente:

$EX_4^E = DX_4^D + FX_4^F$ ... (21)

$EX_5^E = DX_5^D + FX_5^F$ ... (22)

$EX_6^E = DX_6^D + FX_6^F$ ... (23)

$EX_7^E = DX_7^D + FX_7^F$ ... (24)

$EX_8^E = DX_8^D + FX_8^F$ ... (24a)

Se utilizarán las 5 ecuaciones por componente y se comprobarán los resultados con la ecuación de balance total.

Sustituyendo los valores conocidos en las 5 expresiones por componente:

$EX_4{}^E = 200.26 + 400.52 = 600.78$ ... (21a)

$EX_5{}^E = 26.62 + 53.24 = 79.86$ ... (22a)

$EX_6{}^E = 19.67 + 39.34 = 59.01$ ... (23a)

$EX_7{}^E = 0.0187 + 0.47 = 0.4887$ ... (24a)

$EX_8{}^E = 13.42 + 26.85 = 40.27$ ... (24b)

Conocidos todos los flujos molares por componente, es posible calcular el flujo molar total de la corriente E:

$E = EX_4{}^E + EX_5{}^E + EX_6{}^E + EX_7{}^E + EX_8{}^E$

$E = 600.78 + 79.86 + 59.01 + 0.4887 + 40.27$

$E = 780.41$ kmol

Comprobando los resultados con la expresión de balance total (20):

$E = D + F$ ... (20)

$259.99 + 520.42 = 780.41$

$780.41 = 780.41$ ---> Se cumple el balance de masa

A continuación se da un resúmen de las especificaciones de todas las corrientes:

	FRACCION MOL DEL COMPONENTE i									FLUJO
Corriente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	[kmol]
A	0.59	0.40	0.07	-	-	-	-	-	-	100.00
B	-	-	-	0.7696	0.1023	0.0756	0.0009	0.0516	-	590.53
C	-	-	-	0.7696	0.1023	0.0756	0.0009	0.0516	-	260.21
D	-	-	-	0.7703	0.1024	0.0757	0.0001	0.0516	-	259.99
E	-	-	-	0.7698	0.1023	0.0756	0.0006	0.0516	-	780.41
F	-	-	-	0.7696	0.1023	0.0756	0.0009	0.0516	-	520.42
G	-	-	-	-	-	-	-	1.0000	-	100.00
H	-	-	-	-	-	-	0.0021	-	0.9979	100.2116
I	-	-	-	0.7900	0.2100	-	-	-	-	760.48

RESULTADO FINAL

1 ppm equivale a una composición de 10^{-6}, entonces 500 ppm:

$$500 \times 10\text{-}6 = 0.0005 \frac{\text{kmol de } SO_2}{\text{kmol total}}$$

La composición del SO_2 en la salida de los gases combinados de chimenea (corriente E) es de 0.0006 por lo que se puede concluir que este proceso no cumple con las restricciones impuestas por la Secretaría de Desarrollo Urbano y Ecología.

PROBLEMA 21. BALANCE DE MATERIA CON REACCIÓN QUÍMICA EN VARIOS EQUIPOS.

Objetivo: Aplicar todos los conceptos desarrollados en este trabajo.

La corriente de alimentación a un proceso de producción de amoniaco contiene 24.75% mol de N_2, 74.25% mol de H_2 y el resto son inertes (I). La alimentación se combina con una corriente de recirculación y se alimenta a un reactor donde el hidrógeno logra una conversión del 25%. Los productos gaseosos del reactor se pasan por un condensador en donde se condensa la mayor parte del amoniaco presente.

Los gases remanentes se recirculan, sin embargo, para evitar que se acumulen los inertes en el circuito de síntesis, se debe eliminar parte de la recirculación como purga.

La corriente de recirculación contiene 12.5% mol de inertes y 3% de amoniaco.

Se desea conocer la composición de todas las corrientes.

La reacción química para producir amoniaco es:

$$N_2 + 3H_2 \dashrightarrow 2NH_3$$

a) Aplique la metodología desarrollada en este trabajo para analizar el problema y determinar si tiene solución, en caso de que sea así, proponga un algoritmo y resuélvalo numéricamente.

b) ¿Cuánto reaccionó de cada uno de los reactivos?

c) Demuestre que la masa que entra al proceso coincide con la masa que sale de él.

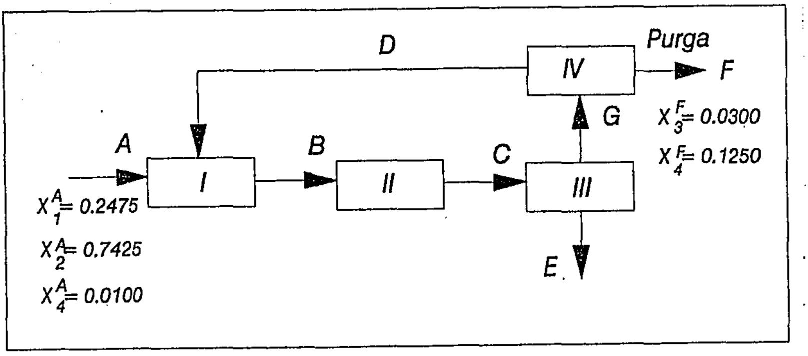
d) Calcule la relación moles gas de purga/moles que salen del condensador.

e) Calcule la relación: moles gas de recirculación al reactor/mol de alimentación fresca.

SOLUCION

Se le asigna una letra a cada una de las corrientes (ver diagrama), de tal forma que se tienen en total 7 corrientes (A, B, C, D, E, F y G).
Con números romanos se designarán los equipos que intervienen en este proceso:
I Mezclador (equipo imaginario)
II: Reactor
III: Condensador
IV: Divisor (equipo imaginario).

Asignando además un número a cada componente:
1: Nitrógeno (N_2)
2: Hidrógeno (H_2)
3: Amoniaco (NH_3)
4: Inertes



1. ANALISIS DE LAS VARIABLES.

	Fracción mol de cada componente					# DE INCOGNITAS
CORRIENTE	1	2	3	4	Flujo	
A	0.2475	0.7425	-	0.01	N	1
B	N	N	N	N	N	4
C	N	N	N	N	N	4
D	N	N	0.03	0.125	N	2
E	-	-	1	-	N	1
F	N	N	0.03	0.125	N	2
G	N	N	0.03	0.125	N	2
REACCIONES QUIMICAS:						1
Total de variables independientes desconocidas						17

Note que las composiciones de las corrientes D, G, y F son iguales, porque el divisor IV solo separa el flujo de G en dos partes: la purga F y la recirculación D.

2. RELACIONES ADICIONALES

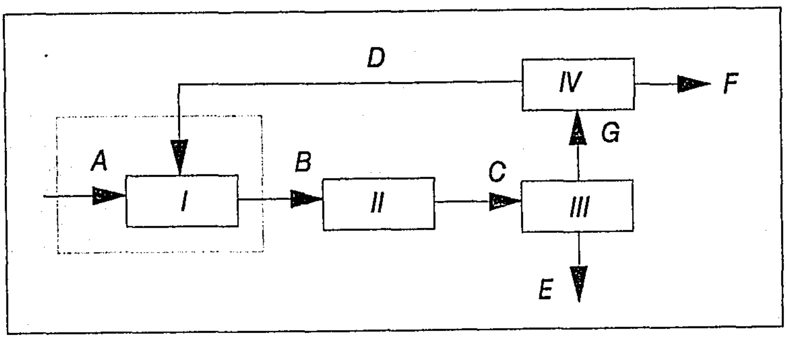
Del enunciado del problema se tiene la relación adicional que dice: ... se alimenta a un reactor donde el hidrógeno logra una conversión del 25%. Traducido este enunciado a una ecuación se obtiene:

$$CX_2^C\ B = 0.75\ BX_2^B \qquad \text{... (1)}$$

Ya que si reacciona el 25%, entonces el 75% restante del hidrógeno que se alimenta al reactor en la corriente B sale por la corriente C. Esta relación adicional está asociada al equipo II.

3.ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA

SISTEMA: EQUIPO I



$$A + D = B \qquad \text{... (2)}$$

N_2: $0.2475A + DX_1^D = BX_1^B$ ... (3)

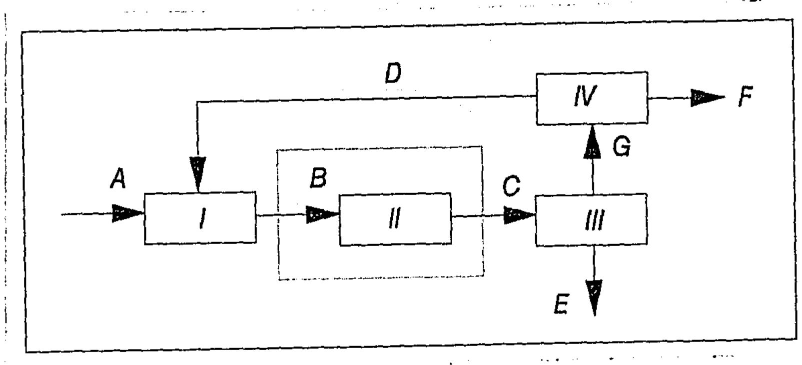
H_2: $0.7425A + DX_2^D = BX_2^B$ ... (4)

NH_3 $0.03D = BX_3^B$ ... (5)

I: $0.01A + 0.125D = BX_4^B$ ... (6)

No hay relaciones adicionales a este equipo.
Total de ecuaciones independientes: 4
Total de incógnitas : 1 (corriente A) + 4 (corriente B) + 2 (corriente D) = 7

SISTEMA: EQUIPO II



N_2: $X_1^C = BX_1^B - \varepsilon$ ... (7)

H_2: $X_2^C = BX_2^B - 3\varepsilon$ ... (8)

NH_3 $X_3^C = BX_3^B + 2\varepsilon$ ... (9)

I: $X_4^C = BX_4^B$ ... (10)

Moles totales en la corriente C = $BX_1^B - \varepsilon + BX_2^B - 3\varepsilon + BX_3^B + 2\varepsilon + BX_4^B$

Moles totales en la corriente C = $BX_1^B + BX_2^B + BX_3^B + BX_4^B - 2\varepsilon$ ... (11)

Para este equipo se aplica la relación adicional dada por la ecuación (1) :

CX_1^C B= 0.75 BX_2^B ... (1)

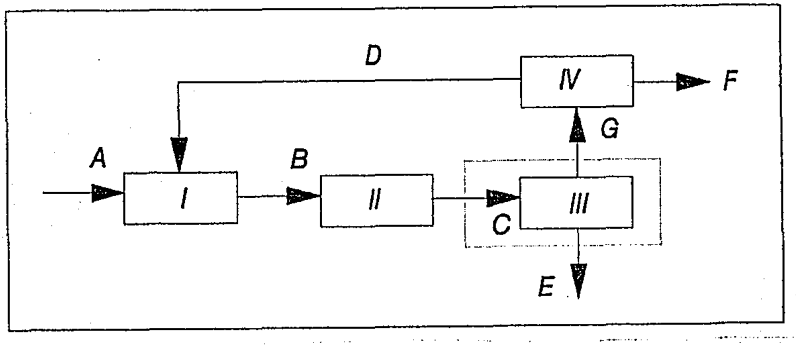
RELACIONES ADICIONALES:
Si combinamos las ecuaciones (8) y (1) se obtiene:

$0.25\ BX_2^B = 3\varepsilon$ ... (1a)

Esta es otra forma de representar la relación adicional (1).

Total de ecuaciones independientes: 4 (Balance) + 1 (Relación adicional) = 5
Total de incógnitas : 4 (corriente B) + 4 (corriente C) + 1 (reacción química) = 9

SISTEMA: EQUIPO III



$C = G + E$		... (12)
N_2:	$CX^C_1 = GX_1^G$	... (13)
H_2:	$CX_2^C = GX_2^G$	... (14)
NH_3:	$CX_3^C = 0.03G + E$	... (15)
I:	$CX_4^C = 0.125G$	... (16)

No hay relaciones adicionales asociadas a este equipo.

Total de ecuaciones independientes: 4
Total de incógnitas : 4 (corriente C) + 1 (corriente E) + 2 (corriente G) = 7

SISTEMA: EQUIPO IV

$$G = D + F \qquad \dots (17)$$

Relaciones adicionales

Como este equipo es un divisor, las composiciones de las corrientes D, G y F deben ser iguales. En los datos del problema se especifica la composición de NH3 e inertes, por lo cual solo basta por conocer una composición, ya sea la de N2 o la de H2. Lo anterior proporciona las siguientes relaciones adicionales:

$$x_1^G = x_1^F \qquad \dots (18)$$

$$x_1^G = x_1^D \qquad \dots (19)$$

Total de ecuaciones independientes: 1 (balance) + 2 (relaciones adicionales) = 3
Total de incógnitas : 2 (corriente D) + 2 (corriente G) + 2 (corriente F) = 6

4. GRADOS DE LIBERTAD

El número total de ecuaciones independientes son :
Equipo I : 4, Equipo II : 5, Equipo III : 4 y Equipo IV : 3, lo cual da un gran total de 16 ecuaciones.

Grados de libertad = # Incógnitas - # Ecuaciones independientes
Grados de libertad = 17 - 16 = 1

Como no se especificó ningún flujo en el problema, es posible establecer una base de cálculo, para reducir el número de grados de libertad a cero y encontrar una solución.
Estableciendo una base de cálculo de 100 kmol de alimentación, la tabla de variables quedaría:

	Fracción mol de cada componente					# DE INCOGNITAS
CORRIENTE	1	2	3	4	Flujo	
A	0.2475	0.7425	-	0.01	100	0
B	N	N	N	N	N	4
C	N	N	N	N	N	4
D	N	N	0.03	0.125	N	2
E	-	-	1	-	N	1
F	N	N	0.03	0.125	N	2
G	N	N	0.03	0.125	N	2
REACCIONES QUIMICAS:1						1
Total de variables independientes						16

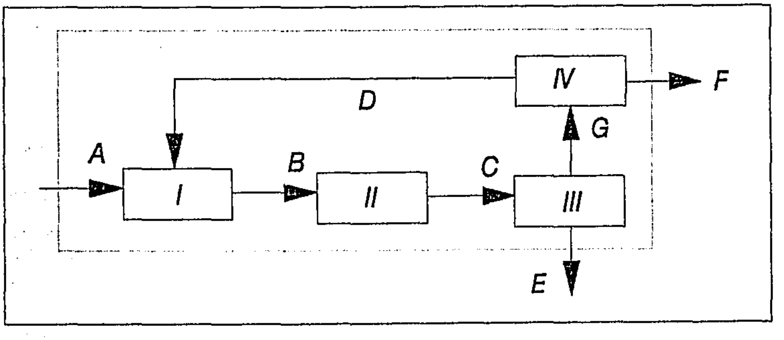
Y el número de grados de libertad es igual a cero, por lo que el problema se encuentra ya especificado.

5. ESTRATEGIA DE RESOLUCION

Para desarrollar una estrategia de solución, se realizará la tabla de grados de libertad para cada equipo, conla finalidad de observar si nos proporciona información adicional para determinar el camino a seguir.

Antes de escribir la tabla de grados de libertad, una herramienta acicional sería escribir un balance adicional, tomando como sistema todo el proceso. En este balance ya se tomará en cuenta la base de cálculo seleccionada.

SISTEMA: TODO EL PROCESO



N_2:	$FX_1^F = 24.75 - \varepsilon$	... (20)
H_2:	$FX_2^F = 74.25 - 3\varepsilon.$	... (21)
NH_3:	$E + 0.03F = 2\varepsilon$	... (22)
I:	$0.125F = 1$	... (23)

No hay relaciones adicionales para este sistema

Ecuaciones independientes = 4

Recuerde que este sistema es dependiente de los sistemas planteados anteriormente.

En el análisis de cada equipo se especificaron las ecuaciones independientes y las incógnitas. La única modificación después de haber introducido la base de cálculo, es que para el equipo I se reduce en 1 las incógnitas. El resumen del análisis por equipo se muestra en la siguiente tabla:

Equipo Número:	I	II	III	IV	Todo el proceso	GLOBAL
Número de Incógnitas:	6	9	7	6	4	16
Ecuaciones de Balance:	4	4	4	1	4	13
Ecuaciones Adicionales:	0	1	0	2	0	3
Total de Ecuaciones:	4	5	4	3	4	16
Grados de Libertad:	2	4	3	3	0	0

Note que los grados de libertad asociados al sistema que toma en cuenta el proceso como un todo, son cero. Por lo tanto, es posible empezar a resolver el problema con este sistema. Las incógnitas de este sistema de ecuaciones son: F, E, X_1^F y ε. Note que $X_2^F = 1 - X_1^F - 0.03 - 0.125$. El sistema de ecuaciones está formado por las ecuaciones de la (20) a la (23).

Las incógnitas, después de haber resuelto el sistema de todo el proceso son:

B, X_1^B, X_2^B, X_3^B (**X_4^B se obtiene por diferencia**)

C, X_1^C, X_2^C, X_3^C (**X_4^C se obtiene por diferencia**)

D y G

Note que la composición de las corrientes D y G ya se conocen porque son idénticas a la de la corriente F. Esto elimina dos incógnitas y ya se utilizaron las dos relaciones adicionales dadas por las ecuaciones (18) y (19). Con esto el problema se ha simplificado a un problema de 10 incógnitas.

Para los equipos I, II, III y IV se tienen 4, 5, 4 y 1 ecuaciones, respectivamente. (Para el equipo IV queda solo la ecuación (17) del balance total de materia, porque ya se usaron las relaciones adicionales 18 y 19). De estas 14 ecuaciones no se pueden utilizar todas, ya que al resolver los balances de materia del proceso global se usaron 4 ecuaciones. Por lo tanto, de las 14 ecuaciones de los equipos solo 14 - 4 = 10 son independientes, lo cual concuerda con las 10 incógnitas y el problema continua bien planteado.

Con esta aclaración, la tabla de grados de libertad queda de la siguiente manera:

Equipo Número:	I	II	III	IV
Número de Incógnitas:	5	8	5	2
Ecuaciones de Balance:	4	4	4	1
Ecuaciones Adicionales:	0	1	0	0
Total de Ecuaciones:	4	5	4	1
Grados de Libertad:	1	3	1	1

En ninguno de los equipos se tiene cero grados de libertad, por lo tanto no se puede resolver ninguno en forma aislada, sino que se tendrán que resolver en forma conjunta.
Al escoger el sistema de 10 ecuaciones se deben incluir las relaciones adicionales, y las ecuaciones de los balances de materia de los equipos que incluyan a las inógnitas. Por ejemplo, una selección puede ser la siguiente:

Del equipo I se tomarán los cuatro balances por componente:

$$0.2475A + DX_1{}^D = BX_1{}^B \qquad ..(3)$$

$$0.7425A + DX_2{}^D = BX_2{}^B \qquad ..(4)$$

$$0.03D = BX_3{}^B \qquad ..(5)$$

$$0.01A + 0.125D = BX_4{}^B \qquad ..(6)$$

Del equipo II se debe incluir la relación adicional , de la cual tomaremos la siguiente expresión:

$$0.25\,BX_2{}^B = 3\varepsilon \qquad ...(1a)$$

Del equipo III, al igual que en el equipo I se tomarán los cuatro balances por componente.

$$CX^C{}_1 = GX_1{}^G \qquad ..(13)$$

$$CX_2{}^C = GX_2{}^G \qquad ...(14)$$

$$CX_3{}^C = 0.03G + E \qquad ...(15)$$

$$CX_4{}^C = 0.125G \qquad ...(16)$$

Y del equipo IV, la ecuación de balance total:

$$G = D + F \qquad ..(17)$$

Entonces se tienen 10 ecuaciones y 10 incógnitas [Las especificaciones de la corriente B (4), las especificaciones de C (4), D y G.

Recuerde que A (base de cálculo), E, F, $X_1{}^F$ (que es igual a $X_1{}^D$ y a $X_1{}^G$) y ε se calcularán al resolver las ecuaciones correspondientes a tomar como sistema todo el proceso, por lo que a estas alturas del análisis ya no son incógnitas..

Analizando las incógnitas de cada una de las ecuaciones del sistema anterior:

Ecuación	Incógnitas	# Incógnitas
3	D, B, X_1^B	3
4	D, B, X_2^B	3
5	D, B, X_3^B	3
6	D, B, X_4^B	3
1a	B, X_2^B	2
13	C, G, X_1^C	3
14	C, G, X_2^C	3
15	C, G, X_3^C	3
16	C, G, X_4^C	3
17	D, G	2

La tabla anterior no proporciona claramente un camino a seguir para llegar a la solución. En ocasiones, por simplicidad, resulta útil que en vez de trabajar con composiciones, se trabaje con flujos molares. Esto es, en vez de tomar el flujo y la composición como dos incógnitas se tome como una sola (Por ejemplo $N_1^B = BX_1^B$).
De esta manera la tabla anterior se simplifica a:

Ecuación	Incógnitas	# Incógnitas
3	D, N_1^B	2
4	D, N_2^B	2
5	D, N_3^B	2
6	D, N_4^B	2
1a	N_2^B	1
13	G, N_1^C	2
14	G, N_2^C	2
15	G, N_3^C	2
16	G, N_4^C	2
17	D, G	2

Visto de esta forma, se puede encontrar de (1a) el flujo molar N_2^B, sustituyendo este valor en (4) es posible obtener el valor del flujo molar de la corriente D. Se este valor en (3), (5) y (6) para obtener los flujos molares N_1^B, N_3^B y N_4^B, respectivamente. Con todos los flujos molares por componente de B, es posible calcular el valor de B, simplemente sumándolos. Y cada una de las fracciones mol se obtiene al hacer el cociente de el flujo de cada componente entre el flujo total.
Así mismo se sustituye D en (17) y se obtiene el valor de G. Sustituyendo G en (13), (14), (15) y (16), se obtienen respectivamente N_1^C, N_2^C, N_3^C y N_4^C. Sumando todos estos flujos por componente es posible calcular el valor de C. Al realizar el cociente del flujo de cada componente en C entre el flujo total de C, se obtiene su fracción mol.

De acuerdo a todas estas reflexiones, es posible plantear el siguiente algoritmo de resolución.

6. ALGORITMO DE RESOLUCION

1. Se resuelven las ecuaciones (20), (21), (22) y (23) corrspondientes a tomar como sistema todo el proceso. Se obtienen entonces los valores de E, F, X_1^F y ε.
2. Se obtiene X_2^F por diferencia y se asigna la composición de F a D y G.
3. Se resuelve la ecuación (1a) y se obtiene el valor de N_2^B.
4. Se resuelve (4) para calcular el valor de D.
5. Se resuelve (3), (5) y (6) para obtener los flujos molares N_1^B, N_3^B y N_4^B, respectivamente.
6. Se calcula B, $B = BX_1^B + BX_2^B + BX_3^B + BX_4^B$
7. Se calculan la composición (en fracción mol) de B, al dividir cada uno de los flujos molares por componente entre el flujo molar total.
8. Se resuelve (17) y se obtiene el valor de G.
9. Se resuelven (13), (14), (15) y (16) y se obtienen respectivamente N_1^C, N_2^C, N_3^C y N_4^C.
10. Se calcula C, $C = CX_1^C + CX_2^C + CX_3^C + CX_4^C$
11. Se calculan la composición (en fracción mol) de C, al dividir cada uno de los flujos molares por componente entre el flujo molar total.
12. Se comprueban los cálculos anteriores con las 4 ecuaciones que no se utilizaron para los cálculos, éstas son las ecuaciones (7), (8), (9) y (10) correspondientes al equipo II.
13. FIN

7. SOLUCION NUMERICA

1.- Se resuelven las ecuaciones (20), (21), (22) y (23) correspondientes a tomar como sistema todo el proceso. Se obtienen entonces los valores de E, F, X_1^F y ¯.

$$FX_1^F = 24.75 - \varepsilon \qquad \text{... (20)}$$

$$FX_2^F = 74.25 - 3\varepsilon \qquad \text{... (21)}$$

$$E + 0.03F = 2\varepsilon \qquad \text{... (22)}$$

$$0.125F = 1 \qquad \text{... (23)}$$

Note que $X_2^F = 1 - X_1^F - 0.03 - 1.125$, por lo que no es una incógnita.
Analizando las incógnitas de cada ecuación:

Ecuación	Incógnitas	# Incógnitas
20	F, X_1^F, ε	3
21	F, X_1^F, ε	3
22	E, F, ε	3
23	F	1

Se resuelve (23) y se obtiene el valor de F, sustituyendo éste en (20) y (21) se tiene un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas: X_1^F, ε. Conocidos estos valores, de (22) se calcula E.

a) Se resuelve la ecuación (23) y se obtiene F:

$$0.125F = 1 \qquad \text{... (23)}$$

F = 8 kmol

b) Se resuelven simultáneamente (20) y (21) para obtener los valores de X_1^F y ε.

$$FX_1^F = 24.75 - \varepsilon \qquad \text{... (20)}$$

$$FX_2^F = 74.25 - 3\varepsilon \qquad \text{... (21)}$$

$$8X_1^F = 24.75 - \varepsilon$$

$$8(1-X_1^F-0.03-0.125) = 74.25 - 3\varepsilon$$

Rearreglando estas expresiones:

$$8X_1^F + \varepsilon = 24.75$$

$$-8X_1^F + 3\varepsilon = 67.49$$

Resolviendo el sistema anterior por el método de Gauss-Jordan:

$$\left|\begin{array}{cc|c} 8 & 1 & 24.75 \\ -8 & 3 & 67.49 \end{array}\right| \approx \left|\begin{array}{cc|c} 8 & 1 & 24.75 \\ 0 & 4 & 92.24 \end{array}\right| \approx \left|\begin{array}{cc|c} 8 & 1 & 24.75 \\ 0 & 1 & 23.06 \end{array}\right|$$

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & 1/8 & 3.09 \\ 0 & 1 & 23.06 \end{array}\right| \approx \left|\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 0.21 \\ 0 & 1 & 23.06 \end{array}\right|$$

Entonces:

$$X_1^F = 0.21$$

$$\varepsilon = 23.06 \text{ kmol}$$

y X_2^F se obtiene por diferencia.

$$X_2^F = 1 - 0.21 - 0.03 - 0.125 = 0.635$$

c) Se resuelve (22) para obtener el valor de E.

$\mathbf{E + 0.03F = 2\varepsilon}$ ... **(22)**

$E + 0.03(8) = 2(23.06)$

---> $E = 45.88$ kmol

2. La composición de la corriente F se asigna a la corriente D y G, por lo tanto

$X_1^D = X_1^G = X_1^F = 0.21$

$X_2^D = X_2^G = X_2^F = 0.635$

$X_3^D = X_3^G = X_3^F = 0.03$

$X_4^D = X_4^G = X_4^F = 0.125$

3. Se resuelve la ecuación (1a) y se obtiene el valor de N_2^B. (Recuerde que $N_2^B = BX_2^B$)

$\mathbf{0.25\,BX_2^B = 3\varepsilon}$ ... **(1a)**

$$N_2^B = \frac{3(23.06)}{0.25}$$

$N_2^B = 276.72$ kmol

4. Se resuelve (4) para calcular el valor de D.

$\mathbf{0.7425A + DX_2^D = BX_2^B}$ ... **(4)**

$$D = \frac{276.72 - 74.25}{0.635}$$

D = 318.85 kmol

5. Se resuelve (3), (5) y (6) para obtener los flujos molares N_1^B, N_3^B y N_4^B, respectivamente.

$\mathbf{0.2475A + DX_1^G = BX_1^B}$ ... **(3)**

$N_1^B = 24.75 + 0.21(318.85) = 91.71$ kmol

$\mathbf{0.03D = BX_3^B}$ ... **(5)**

$N_3^B = 0.03(318.85) = 9.57$ kmol

$\mathbf{0.01A + 0.125D = BX_4^B}$ ... **(6)**

$N_4^B = 1 + 0.125(318.85) = 40.86$ kmol

La ecuación (4) sirve para comprobar el valor de N_2^B

$0.7425A + DX_2^D = BX_2^B$ ... (4)

$N_2^B = 74.25 + 0.635(318.85) = 276.72$ kmol

6. Se calcula B, $B = BX_1^B + BX_2^B + BX_3^B + BX_4^B$

$B = 91.71 + 276.72 + 9.57 + 40.86$

$B = 418.86$ kmol

7. Se calculan la composición (en fracción mol) de B, al dividir cada uno de los flujos molares por componente entre el flujo molar total.

$$X_1^B = \frac{91.91}{418.86} = 0.219$$

$$X_2^B = \frac{276.72}{418.86} = 0.6607$$

$$X_3^B = \frac{9.57}{418.86} = 0.0228$$

$$X_4^B = \frac{40.86}{418.86} = 0.0976$$

8. Se resuelve (17) y se obtiene el valor de G.

$G = D + F$ ... (17)

$G = 318.85 + 8$

$G = 326.85$ kmol

9. Se resuelven (13), (14), (15) y (16) y se obtienen respectivamente N_1^C, N_2^C, N_3^C y N_4^C.

$CX^C_1 = GX_1^G$ ... (13)

$N_1^C = 0.21\ (326.85) = 68.64$ kmol

$CX_2^C = GX_2^G$ ... (14)

$N_2^C = 0.635\ (326.85) = 207.55$ kmol

$CX_3^C = 0.03G + E$ ... (15)

$N_3^C = 0.03\ (326.85) + 45.88 = 55.69$ kmol

$CX_4{}^C = 0.125G$ ... (16)

$N_4{}^C = 0.125\ (326.85) = 40.86$ kmol

10. Se calcula C, $C = CX_1{}^C + CX_2{}^C + CX_3{}^C + CX_4{}^C$

$C = 68.64 + 207.55 + 55.69 + 40.86 = 372.74$ kmol

11. Se calculan la composición (en fracción mol) de C, al dividir cada uno de los flujos molares por componente entre el flujo molar total.

$$X_1{}^C = \frac{68.64}{372.74} = 0.1841$$

$$X_2{}^C = \frac{207.55}{372.74} = 0.5568$$

$$X_3{}^C = \frac{55.69}{372.74} = 0.1494$$

$$X_4{}^C = \frac{40.86}{372.74} = 0.1096$$

12. Se comprueban los cálculos anteriores con las 4 ecuaciones que no se utilizaron para los cálculos, éstas son las ecuaciones (7), (8), (9) y (10) correspondientes al equipo II.

$CX_1{}^C = BX_1{}^B - \varepsilon$ ... (7)

$372.74(0.1841) = 418.66(0.219) - 23.06$

$68.62 \approx 60.63$ ---> Se cumple el balance

$CX_2{}^C = BX_2{}^B - 3\varepsilon$ ... (8)

$372.74(0.5568) \approx 418.86(0.6607) - 3(23.06)$

$207.54 \approx 207.56$ ---> Se cumple el balance

$CX_3{}^C = BX_3{}^B + 2\varepsilon$ ... (9)

$372.74(0.1494) \approx 418.86(0.0228) + 2(23.06)$

$55.69 \approx 55.67$ ---> Se cumple el balance

$CX_4{}^C = BX_4{}^B$ ... (10)

$372.74(0.1096) \approx 418.86(0.0976)$

$40.85 \approx 40.88$ ---> Se cumple el balance

A continuación se dan las especificaciones de todas las corrientes:

	Fracción mol de cada componente				
CORRIENTE	1	2	3	4	Flujo [kmol]
A	0.2475	0.7425	-	0.0100	100
B	0.2190	0.6607	0.0228	0.0976	418.86
C	0.1841	0.5568	0.1494	0.1096	372.74
D	0.2100	0.6350	0.0300	0.1250	318.85
E	-	-	1.0000	-	45.88
F	0.2100	0.6350	0.0300	0.1250	8
G	0.2100	0.6350	0.0300	0.1250	326.85
ε = 23.06 kmol					

8. CANTIDAD QUE REACCIONO DE CADA UNO DE LOS REACTIVOS

De hidrógeno, reaccionaron $3\varepsilon = 3(23.06) = 69.18$ kmol
De nitrógeno, reaccionó $\varepsilon = 23.06$ kmol
Note que se guarda la proporción estequiométrica de 3 a 1.

9. CONSERVACION DE LA MASA.

<u>Masa de entrada:</u>
La única corriente que entra al proceso es la corriente A, la cual contiene 24.75 moles de nitrógeno, 74.25 moles de hidrógeno y 1 mol de inertes. Transformando los moles a masa, utilizando el peso molecular de cada componente:

$$24.75 \text{ kmol de } N_2 \left| \frac{28.02 \text{ kg}}{1 \text{ kmol de } N_2} \right| = 693.5 \text{ kg}$$

$$74.25 \text{ kmol de } H_2 \left| \frac{2.02 \text{ kg}}{1 \text{ kmol de } H_2} \right| = 149.99 \text{ kg}$$

Se desconoce el peso molecular de los inertes, asignándole un valor X:

$$1 \text{ kmol de I} \left| \frac{X \text{ kg}}{1 \text{ kmol de I}} \right| = X$$

Masa total de entrada = 693.5 + 149.99 + X
Masa total de entrada = (843.49 + X) kmol

Masa de salida:
Salen del proceso las corrientes E y F.
Flujos molares de F:

$FX_1^F = 8(0.210) = 1.68$ kmol

$FX_2^F = 8(0.635) = 5.08$ kmol

$FX_1^F = 8(0.030) = 0.24$ kmol

$FX_1^F = 8(0.125) = 1.00$ kmol

Flujo molar de E = 781.8 (Amoniaco puro)

Transformando todos las moles anteriores a masa:

$$1.68 \text{ kmol de } N_2 \left| \frac{28.02 \text{ kg}}{1 \text{ kmol de } N_2} \right| = 47.07 \text{ kg}$$

$$5.08 \text{ kmol de } H_2 \left| \frac{2.02 \text{ kg}}{1 \text{ kmol de } H_2} \right| = 10.26 \text{ kg}$$

$$(0.24 + 45.88) \text{ kmol de } NH_3 \left| \frac{17.04 \text{ kg}}{1 \text{ kmol de } NH_3} \right| = 785.89 \text{ kg}$$

$$1 \text{ kmol de I} \left| \frac{X \text{ kg}}{1 \text{ kmol de I}} \right| = X$$

Masa total de salida = 47.07 + 10.26 + 785.89 + X
Masa total de salida = (843.22 + X) kmol

Masa total de entrada = Masa total de salida
(843.49 + X) kmol = (843.22 + X) kmol ---> Se cumple el balance

10. CALCULE LA RELACIÓN MOLES GAS DE PURGA/MOLES QUE SALEN DEL CONDENSADOR.

$$\frac{\text{Moles de gas de purga}}{\text{Moles que salen del condensador}} = \frac{F}{E} = \frac{8}{45.88} = 0.1744$$

11. CALCULE LA RELACIÓN: MOLES GAS DE RECIRCULACIÓN AL REACTOR/MOL DE ALIMENTACIÓN FRESCA.

$$\frac{\text{Moles gas de recirculación}}{\text{Moles de alimentación fresca}} = \frac{D}{A} = \frac{318.85}{100} = 3.1885$$

12. CONSIDERACIONES FINALES

El H_2 y N_2 se encuentra en proporción estequiométrica en la mezcla de alimentación, esto es 3 a 1. Como en la reacción se conservan en proporción 3 a 1, entonces la relación de moles en cualquiera de las corrientes del proceso B, C, G, D y F, debe ser 3 a 1. De los resultados del problema podemos comprobar lo anterior:

$$\frac{X_2{}^B}{X_1{}^B} = \frac{0.6607}{0.2190} = 3.017$$

$$\frac{X_2{}^C}{X_1{}^C} = \frac{0.5568}{0.1841} = 3.024$$

$$\frac{X_2{}^D}{X_1{}^D} = \frac{0.635}{0.2100} = 3.024$$

Las diferencias con respecto a 3 se deben a errores de redondeo.
Si se hubiera reconocido este hecho desde el principio, la solución del problema hubiera sido mas sencilla, ya que se hubiera el número de incógnitas.

PROBLEMA 22. BALANCE DE MATERIA CON REACCIÓN QUÍMICA EN VARIOS EQUIPOS.

Objetivo: Encontrar la influencia de algunas variables sobre otras.

Para el proceso de producción de NH3 descrito en el problema 21, se desea encontrar la influencia que tiene la composición de purga sobre la producción de amoniaco (corriente E).
Se compararían los resultados con las siguientes composiciones de purga:

a) $X_3^F = 0.03 \quad X_4^F = 0.125$

b) $X_3^F = 0.02 \quad X_4^F = 0.125$

c) $X_3^F = 0.00 \quad X_4^F = 0.125$

d) $X_3^F = 0.03 \quad X_4^F = 0.100$

El primer caso corresponde al problema 21. En los casos b y c se disminuye la cantidad de amoniaco en la corriente G, esto es, se hace más eficiente el proceso de separación del NH3 en el equipo III.
En el caso d) se deja una menor acumulación de inertes en el proceso.
Siguiendo la metodología planteada en el problema 21 se obtienen los siguientes resultados:

SOLUCION

Caso a) $X_3^F = 0.03 \qquad X_4^F = 0.125$

Corriente	1	2	3	4	FLUJO (kmol)
A	0.2475	0.7425	-	0.0100	100
B	0.2190	0.6607	0.0228	0.0976	418.86
C	0.1841	0.5568	0.1494	0.1096	372.74
D	0.2100	0.6350	0.0300	0.1250	318.85
E	-	-	1.0000	-	45.88
F	0.2100	0.6350	0.0300	0.1250	8
G	0.2100	0.6350	0.0300	0.1250	326.85
		ε = 23.06 kmol			

Caso b) $X_3^F = 0.02$ $\quad X_4^F = 0.125$

Corriente	1	2	3	4	FLUJO (kmol)
A	0.2475	0.7425	-	0.0100	100
B	0.2230	0.6803	-	0.0967	405.68
C	0.1875	0.5756	0.1279	0.1090	359.68
D	0.2150	0.6600	-	0.1250	305.68
E	-	-	1.0000	-	46
F	0.2150	0.6600	-	0.1250	8
G	0.2150	0.6600	-	0.1250	313.68
		$\varepsilon = 23$ kmol			

Caso c) $X_3^F = 0.00$ $\quad X_4^F = 0.125$

Corriente	1	2	3	4	FLUJO (kmol)
A	0.2475	0.7425	-	0.0100	100
B	0.2230	0.6803	-	0.0967	405.68
C	0.1875	0.5756	0.1279	0.1090	359.68
D	0.2150	0.6600	-	0.1250	305.68
E	-	-	1.0000	-	46.00
F	0.2150	0.6600	-	0.1250	8.00
G	0.2150	0.6600	-	0.1250	313.68

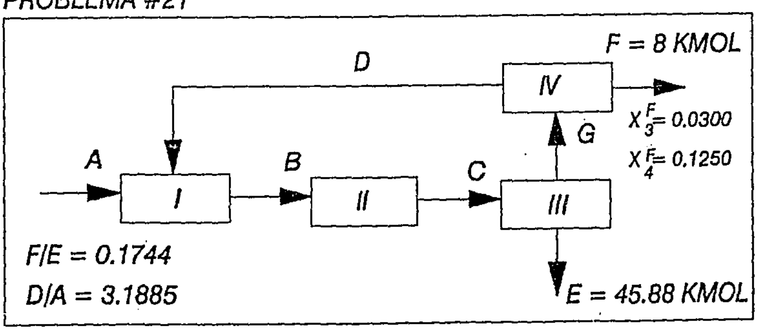
ε = 23 kmol	

Caso d) $X_3^F = 0.03$ $X_4^F = 0.100$

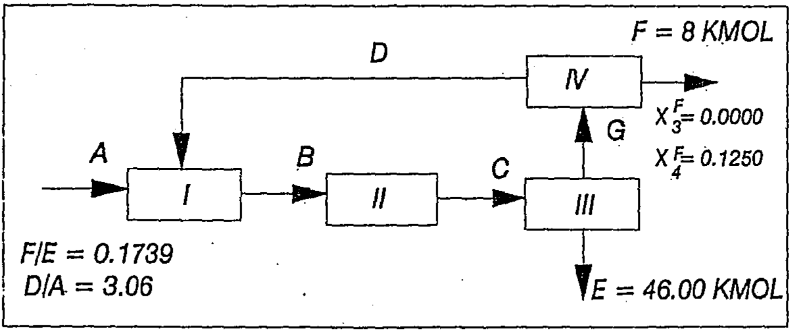
Corriente	1	2	3	4	FLUJO (kmol)
A	0.2475	0.7425	-	0.0100	100
B	0.2246	0.6753	0.0225	0.0776	401.24
C	0.1897	0.5707	0.1522	0.0874	356.10
D	0.2170	0.6530	0.0300	0.1000	301.24
E	-	-	1.0000	-	44.86
F	0.2170	0.6530	0.0300	0.1000	10
G	0.2170	0.6530	0.0300	0.1000	311.24
		ε = 22.58 kmol			

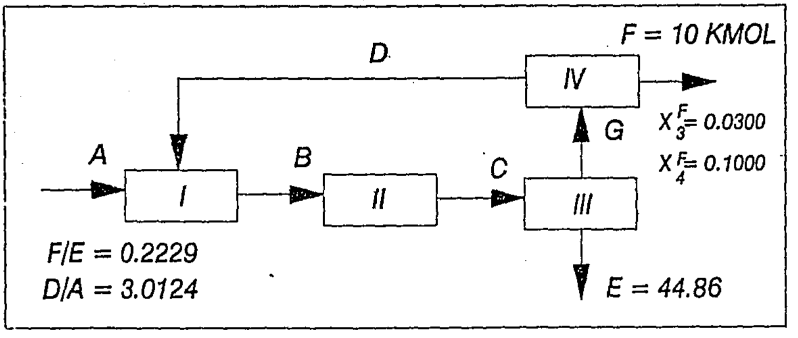
En los siguientes diagramas se presentan los resultados más importantes:

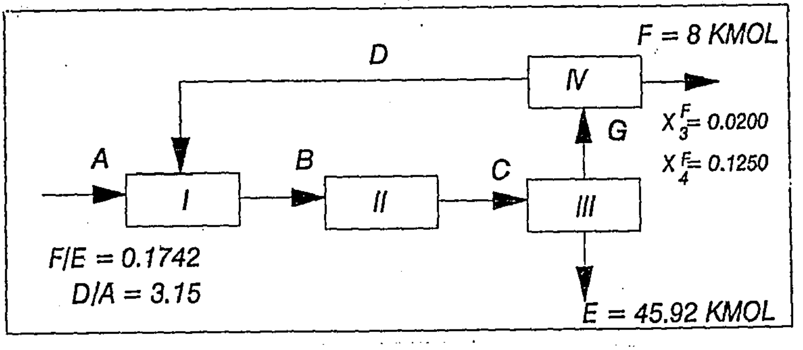
PROBLEMA #21



Enrique Bazúa Rueda
Mariana Elizabeth Domínguez Oviedo


F = 8 KMOL
D
IV
G
X_3^F= 0.0000
X_4^F= 0.1250
A
B
C
I
II
III
F/E = 0.1739
D/A = 3.06
E = 46.00 KMOL


F = 10 KMOL
D
IV
G
X_3^F= 0.0300
X_4^F= 0.1000
A
B
C
I
II
III
F/E = 0.2229
D/A = 3.0124
E = 44.86


F = 8 KMOL
D
IV
G
X_3^F= 0.0200
X_4^F= 0.1250
A
B
C
I
II
III
F/E = 0.1742
D/A = 3.15
E = 45.92 KMOL

Del análisis de estos resultados se obtienen las siguientes conclusiones:
a) La producción de NH_3 (corriente E) aumenta si se disminuye la cantidad de NH_3 en la corriente D, o sea, si se aumenta la eficiencia de la separación en el equipo III:
b) La producción de NH_3 aumenta si se mantiene un alto contenido de inertes en el circuito, y por lo tanto en la purga. Esto se debe a que al aumentar la concentración de inertes en la purga se disminuye su flujo, y por lo tanto, la cantidad de NH_3 que se pierde.
c) La cantidad máxima de NH_3 que se debería haber obtenido es igual a 49.5 kmol. Las pérdidas se deben a la purga en la cual va NH_3 y mezcla H_2-N_2 que no reaccionó. Para disminuir las pérdidas se debe disminuir el flujo de la corriente de inertes y disminuir la concentración de NH_3.
d) Los efectos benéficos en la producción de NH_3 redundan en una menor cantidad de corriente de recirculación (corriente D), lo cual también favorece, porque se circula menos gas por los equipos II y III (ver corrientes B y C).

IX. Conclusiones y recomendaciones

El objetivo de este trabajo fue introducir al estudiante a los problemas de balances de materia y proporcionarle una metodología para resolverlos de una forma ordenada y eficiente, creando además una herramienta para crear claridad de pensamiento.

Los recursos existentes para ayudar al estudiante a enfrentar problemas que exijan cierto grado de razonamiento son escasos. Casi no existe bibliografía que tenga como finalidad orientarlo por donde debe abordar un problema, que sugiera caminos, opciones y orden.

Al enfrentarse a algún problema, se suele empezar a hacer números, despejar fórmulas y obtener ciertos valores, muchas veces antes de saber que es lo que se está preguntando o cuál es el objetivo del problema. Se pierde mucho tiempo en estas divagaciones, ya que no existe una estructura a seguir.

Para enseñar los conceptos elementales de balances de materia, en cada uno de los problemas desarrollados, se han ido introduciendo poco a poco nuevos conceptos, siguiendo una misma metodología. Esto no quiere decir que se le imponga al estudiante una manera de pensar o de actuar y se le bloquee la creatividad. Simplemente se le da una opción abierta y sencilla de visualizar un problema de una forma integral, antes de introducir cualquier número.

El concepto de grados de libertad, fue manejado de una forma diferente a como usualmente se ha venido enseñando en los diferentes cursos universitarios. La finalidad de esto fue visualizar de una forma más sencilla lo qué son los grados de libertad, sin tener que memorizar una fórmula por cada tipo de equipo.

Además, en el transcurso de la resolución de un problema, en algunas ocasiones se propusieron varias tablas de grados de libertad muy sencillas que indican cuál es el camino a seguir para llegar a la solución.

Con esto se intentó explotar al máximo los recursos existentes para atacar un problema y saber exactamente cuales son los pasos a seguir para llegar a su solución, sin hacer ningún número. Esto se logró con un sencillo análisis de las variables existentes en el problema, las ecuaciones que intervienen y los grados de libertad que determinan si el problema tiene o no solución. En caso positivo, y cuando sea posible, se hace otro análisis más profundo para determinar qué camino se debe seguir para llegar a conocer las especificaciones que se requieren.

Subsecuentemente, se propone un algoritmo de resolución basado en las reflexiones hechas anteriormente y se resuelven numéricamente todos los problemas.

El uso de una gran cantidad de esquemas facilita el aprendizaje y permite visualizar mejor los problemas.

Con la finalidad de no dar un gran número de fórmulas, como punto de partida, se establecen las bases teóricas mínimas y a partir de ellas se van deduciendo paulatinamente el resto. Para la conversión de unidades, se utiliza el sistema matricial, nunca regla de tres, ya que no permite realizar un razonamiento adecuado.

Una contribución importante de este trabajo es que demuestra que es posible enseñar balances de materia sin importar que operaciones unitarias se esten llevando a cabo. Esto es, no se da una receta para resolver, por ejemplo, un absorbedor; otra para resolver un reactor químico, etc. Nada de recetas, todo estudiante es capaz de razonar y resolver un problema independientemente de que operación unitaria se este llevando a cabo, siempre y cuando comprenda los conceptos básicos de los balances de materia. Claro que es importante que este enterado, por lo menos de una manera cualitativa, qué es lo que sucede en cada equipo.

Por ejemplo, que la extracción líquido-líquido es un proceso de separación que consiste en la recuperación de un soluto de una solución mediante la mezcla con un solvente, y que lo único que se transfiere entre la solución y el solvente es el soluto. Es por esto, que cada uno de los problemas explica muy escuetamente lo que sucede en cada equipo.

Con esta colección de problemas se ha logrado introducir de una manera muy simple conceptos paulatinamente más complicados.

No se ha intentado de ningún modo introducir un gran cúmulo de conocimientos, fórmulas. Por el contrario, este trabajo ha intentado pecar de simplista, pero concreto.

Tal vez uno de los principales atributos de este trabajo, para quien lo estudia de una forma detallada y consciente, es visualizar cualquier problema desde otra perspectiva y crear seguridad en poder atacar nuevos problemas completamente distintos, así como resolver problemas de otras áreas.

Mediante la metodología propuesta en este trabajo es posible resolver cualquier tipo de problema de balance de materia. Mas aún, a pesar de que el estudio se limitó a balances de materia, los mismos conceptos pueden ser utilizados para balances de energía y a problemas que involucren ecuaciones termodinámicas o de equilibrio de fases.

Si esta herramienta es aprovechada tanto por los estudiantes como por los profesores, complementándola por supuesto, con problemas y teoría desarrollada en los libros de esta área, estoy segura que el aprendizaje, rendimiento y calidad del proceso enzeñanza-aprendizaje de la asignatura de balances de materia tendría un mejoramiento notable.

X. Referencias

Andersen L.B. y Wenzel L.A., Introduction to Chemical Engineering, Mc. Graw Hill, Nueva York, 1961.

Backhurst J.R., Harker J.H., Porter J.E., Problemas sobre transferencia de calor y masa, Editorial el Manual Moderno, S.A., México 1979.

Burden R.L, Análisis Numérico, Grupo Editorial Iberoamérica, México, D.F., 1985.

Castellan G.W., Fisicoquímica, Editorial Addison-Wesley Iberoaméricana, México, 1987.

Felder R.M. y Rousseau R.W., Elementary Principles of Chemical Processes, John Wiley, New York, 1986.

Foust A.S., Principios de Operaciones Unitarias, Editorial C.E.C.S.A., México, 1989.

García G.S y Lagos Z.O., "Ahorro energético en el proceso de destilación de etilbenceno/estireno empleando tecnologías alternativas", Tesis profesional, U.N.A.M., 1994.

Henley E.J., Seader J.D., Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química, Editorial Repla S.A., 1990.

Himmelblau D.M., Balances de Materia y Energía, Editorial Prentice Hall, Cuarta Edición, México 1988.

Hougen O.A., Watson K.M., Chemical Process Principles, Tomo I, John Wiley, Nueva York, 1959.

Kern D. Q., Procesos de Transferencia de Calor, Compañía Editorial Continental, México D.F., 1989.

Maddox N.R. y Hines L.A., Transferencia de Masa, Editorial Prentice Hall, México 1987.

McCabe W.L, Smith Julian C, Harriott Peter, Unit Operations of Chemical Engineering, Mc. Graw Hill, Fourth Edition, Singapore, 1985.

Perry R.H, Green D., Perry's Chemical Engineers'Handbook, Mc Graw-Hill International Editions, Japan, 1984.

Reklaitis G.V., Balances de Materia y Energía, Editorial Mc.Graw Hill, México, 1989.

Skoog D.A., West Donald, Química Analítica, Editorial Mc. Graw Hill, España, 1988.

Smith J.M., Ingeniería de la Cinética Química, Editorial C.E.C.S.A, México 1986.

Schmidt A.X. y List H.L., Material and Energy Balances, Prentice Hall, Englewood Cliffs, E.U.A., 1962.

APENDICE

SOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES

El caso general de un sistema de m ecuaciones lineales con n variables se puede representar de la siguiente forma:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2$$
$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + \ldots + a_{3n}x_n = b_3$$
$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n = b_m$$

Existen diversos métodos de resolución que permiten obtener los valores de las variables x_1, x_2, x_3, ..., x_n en caso de que éstos existan. Los métodos utilizados en este trabajo son los siguientes:

1.- Adición o sustracción.
2.- Sustitución.
3.- Gauss.
4.- Gauss-Jordan

Antes de desarrollar cualquier método de resolución de sistemas de ecuaciones lineales es necesario definir ciertos conceptos:

DEFINICION #1:
Se dice que un sistema de ecuaciones lineales es HOMOGENEO si es expresado como:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = 0$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = 0$$
$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + \ldots + a_{3n}x_n = 0$$
$$\vdots$$
$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n = 0$$

Es decir, todos los términos independientes b_i son iguales a cero.

DEFINICION #2:
Se dice que un sistema de ecuaciones lineales es **NO HOMOGENEO** si es expresado como:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2$$

$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + \dots + a_{3n}x_n = b_3$$

$$\vdots$$

$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m$$

Es decir, los términos independientes b_i no son todos iguales a cero.

DEFINICION #3:
CONJUNTO SOLUCION DE UNA ECUACION
Sea S_1 el conjunto formado por:

$$S_1 = \{(x_1,x_2) \mid x_1 \epsilon R,\ x_2 \epsilon R,\ a_{11}x_1+a_{12}x_2=b_1\}$$

Al conjunto S_1 se le denomina CONJUNTO SOLUCION de la ecuación $a_{11}x_1+a_{12}x_2+b_1=0$. Es decir, el conjunto S_1 representa a todos los pares ordenados (x_1,x_2) que satisfacen a esta ecuación.

Dado un sistema de 2 ecuaciones lineales no homogéneas:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2$$

De acuerdo con lo expresado anteriormente, cada una de estas ecuaciones tiene un conjunto solución. El conjunto solución del sistema está dado por los pares (x_1,x_2) que satisfacen a ambas ecuaciones a la vez. Este conjunto se obtiene de la intersección de ambos conjuntos solución. Entonces:

$$S_1 = \{(x_1,x_2) \mid x_1 \epsilon R,\ x_2 \epsilon R,\ a_{11}x_1+a_{12}x_2=b_1\}$$
$$S_2 = \{(x_1,x_2) \mid x_1 \epsilon R,\ x_2 \epsilon R,\ a_{21}x_1+a_{22}x_2=b_2\}$$

El conjunto solución del sistema de ecuaciones está dado por el conjunto S $(S_1 \cap S_2)$:

$$S=\{(x_1,x_2) \mid x_1 \epsilon R,\ x_2 \epsilon R,\ a_{11}x_1+a_{12}x_2+b_1=0 \text{ y } a_{21}x_1+a_{22}x_2+b_2=0)\}$$

DEFINICION #4
SISTEMA DE ECUACIONES LINEALES CONSISTENTE
Se dice que un sistema de ecuaciones lineales es consistente si su espacio de soluciones es no vacío.

DEFINICION #5
SISTEMA DE ECUACIONES LINEALES DETERMINADO
Se dice que un sistema de ecuaciones lineales es determinado porque su solución es única.

DEFINICION #6
SISTEMA DE ECUACIONES LINEALES CONSISTENTE E INDETERMINADO.
Si el conjunto solución de un sistema de ecuaciones es no vacío pero el número de soluciones es mayor de uno, se dice que el sistema es consistente e indeterminado.

DEFINICION #7
SISTEMA DE ECUACIONES INCONSISTENTE.
Un sistema de ecuaciones lineales es inconsistente cuando su conjunto solución es el conjunto vacío.

METODOS DE RESOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES

1.- METODO DE ADICION O SUSTRACCION

Para resolver algebraicamente un sistema de ecuaciones linealmente independientes de 2 variables, las dos ecuaciones se combinan de modo tal, que al sumarlas, se obtenga una sola ecuación con una incógnita. Después de que se haya conocido el valor de alguna de las 2 variables, el otro se obtiene sustituyendo el primer número en una de las ecuaciones dadas y se resuelve la ecuación resultante para la variable restante.

2.- METODO DE ELIMINACION POR SUSTITUCION

Si una de las ecuaciones, en un par de ecuaciones lineales de dos variables, es fácil de resolver para una de las variables en términos de la otra, un método muy eficaz para eliminar una de las variables es el método de sustitución. Se pueden seguir los siguientes pasos:

1.- Resuelva una de las ecuaciones para una variable en términos de la otra.

2.- Sustituya la solución obtenida en el paso 1 para esa variable en la segunda ecuación y así obtenga una ecuación de una variable.

3.- Resuelva la ecuación obtenida en el paso 2.

4.- Sustituya el valor encontrado en el paso 3 en la solución obtenida en el paso 1, y resuelva para la otra variable.

5.- Escriba el conjunto solución en la forma $\{(x,y)\}$, sustituyendo x y y por los valores encontrados en los pasos 3 y 4.

6.- Verifique la solución sustituyendo los valores para x y y del paso 5 en la ecuación dada y que no fue utilizada en el paso 1.

Este método puede ser utilizado para sistemas de ecuaciones de más de dos variables.

3.- METODO DE GAUSS

Este método es útil para resolver m ecuaciones con n variables. Antes de introducir éste método es necesario familiarizarse con matrices.

MATRIZ

Arreglo rectangular o cuadrado de números Reales que generalmente se utiliza para facilitar y realizar en forma más consisa las operaciones en la solución de sistemas de ecuaciones.

Notación:

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{vmatrix}$$

Tiene un orden de mxn

m = # de renglones

n = # de columnas

ALGUNOS TIPOS DE MATRICES ESPECIALES:

a) Matriz cuadrada: El número de renglones es igual al número de columnas (m=n).

Ejemplo:

$$A = \begin{vmatrix} 4 & 5 & 7 \\ 2 & 3 & -2 \\ 0 & 2 & 9 \end{vmatrix} \text{ (Matriz de orden 3x3)}$$

b) Matriz diagonal: Es aquella matriz cuadrada en la cual los elementos no diagonales son cero. Ejemplo:

$$B = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{vmatrix}$$

c) Matriz identidad: Es una matriz cuadrada en la cual los elementos de la diagonal principal son "1" y el resto de sus elementos son cero. Ejemplo:

$$I = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$ (Matriz identidad de orden 4x4)

d) Matriz nula: Es aquella matriz en la cual todos sus elementos son cero.

$$N = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

OPERACIONES CON MATRICES

Operaciones análogas a las de adición, sustracción, multiplicación y división de números reales se pueden definir para las matrices. Puesto que una matriz es una disposición de números reales, en lugar de un solo número real, algunas de las propiedades para los números reales no tienen equivalencia en las operaciones análogas con matrices.

ADICION Y SUSTRACCION DE MATRICES

Las matrices se pueden sumar o restar solamente si son del mismo órden. La suma o la diferencia de dos matrices de mxn es otra matriz de mxn cuyos elementos son las sumas o diferencias de los elementos correspondiente de las matrices originales; de modo que si:

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{vmatrix}$$

$$B = \begin{vmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{m1} & \cdots & b_{mn} \end{vmatrix}$$

entonces

$$A \pm B = C$$

$$A = \begin{vmatrix} a_{11}+b_{11} & \cdots & a_{1n}+b_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1}+b_{m1} & \cdots & a_{mn}+b_{mn} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ c_{m1} & \cdots & c_{mn} \end{vmatrix}$$

es decir, $(a_{ij}) + (b_{ij}) = (c_{ij})$, en donde $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$ para toda i y toda j.

Ejemplo 1:

$$\begin{vmatrix} 3 & 2 & -4 \\ 5 & 6 & 8 \\ 3 & 0 & 0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & 3 & 8 \\ -5 & -6 & 2 \\ 0 & 0 & -4 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 3 & 5 & 4 \\ 0 & 0 & 10 \\ 3 & 0 & -4 \end{vmatrix}$$

Ejemplo 2:

$$\begin{vmatrix} 3 & -10 \\ -11 & 25 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} -6 & -4 \\ 22 & -21 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 9 & -6 \\ -33 & 46 \end{vmatrix}$$

MULTIPLICACION DE UNA MATRIZ POR UN ESCALAR

Un solo número real (que equivale a una matriz de 1x1) se denomina escalar en las operaciones del álgebra matricial. Cuando una matriz se multimplica por un escalar, cada elemento de la matriz queda multiplicado por ese escalar (que es una constante); por lo tanto, si

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{vmatrix} \quad \text{y k es un escalar (o constante)}$$

entonces

$$k \times A_{mxn} = \begin{vmatrix} ka_{11} & \cdots & ka_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ ka_{m1} & \cdots & ka_{mn} \end{vmatrix} = k(a_{ij})_{mxn} = (ka_{ij})_{mxn}$$

Ejemplo 3:

$$3 \begin{vmatrix} 4 & -3 \\ 8 & -2 \\ -1 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 12 & -9 \\ 24 & -6 \\ -3 & 0 \end{vmatrix}$$

MULTIPLICACION DE MATRICES

Dos matrices se pueden multiplicar entre sí solo si el número de columnas en una de ellas es igual al número de filas en la otra. En particular, la matriz producto AB está definida solamente si el número de columnas en A es el mismo que el número de filas en B; en este caso se dice que las matrices A y B son compatibles o conformables ante la multiplicación, y la matriz producto tiene el mismo número de filas que A y el mismo número de columnas que B. Así, una matriz de mxn se puede multiplicar con una matriz nxp para obtener una matriz mxp.

Sea A una natriz de mxn y B una matriz de nxp. El producto matricial de A y B, denotado AB, es una matriz de mxp, C, cuyos elementos c_{ij} están dados por

$$cij = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}\, b_{kj} = ai1b1j + ai2b2j + \dots + ainbnj$$

para cada i= 1, 2,...,m y j=1, 2,..., p

El calculo de c_{ij} puede verse como la multiplicación de los elementos del i-ésimo renglón de A con los elementos correspondientes de la j-ésima columna de B, seguida de una suma. Es decir:

$$[a_{i1}, a_{12}, \dots a_{in}] \begin{vmatrix} b_{1j} \\ b_{2j} \\ \vdots \\ b_{nj} \end{vmatrix} = c_{ij}$$

donde:

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{in}b_{nj} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}b_{kj}$$

Esto esplica por qué el número de columnas de A sebe ser igual al número de renglones de B para que el producto AB esté bien definido. El siguiente ejemplo debe servir para aclarar más el proceso de la multiplicación matricial.

Ejemplo 4:

Sean:

$$A = \begin{vmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 0 & -2 & -3 \end{vmatrix}, \qquad B = \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 1 \\ 6 & 4 \end{vmatrix}$$

$$C = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -1 & 3 & 2 \end{vmatrix} \qquad D = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \\ 3 & 0 & 3 \end{vmatrix}$$

Entonces,

$$AD = \begin{vmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 0 & -2 & -3 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \\ 3 & 0 & 3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & -3 & 1 \\ 11 & -4 & 11 \\ -13 & 2 & -13 \end{vmatrix}$$

$$DA = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \\ 3 & 0 & 3 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 0 & -2 & -3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -1 & -2 & -6 \\ 1 & -3 & -10 \\ 6 & -3 & -12 \end{vmatrix}$$

Note que AD es distinto de DA.

$$BC = \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 1 \\ 6 & 4 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -1 & 3 & 2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 4 & 9 & 4 \\ -3 & 2 & 2 \\ 8 & 18 & 8 \end{vmatrix}$$

$$BC = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -1 & 3 & 2 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 1 \\ 6 & 4 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 5 & 5 \\ 6 & 9 \end{vmatrix}$$

Note que BC y CB no son ni siquiera del mismo tamaño.

Finalmente,

$$AB = \begin{vmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 0 & -2 & -3 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 1 \\ 6 & 4 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -1 & 1 \\ 20 & 15 \\ -16 & -14 \end{vmatrix}$$

mientras que $BA = \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 1 \\ 6 & 4 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 0 & -2 & -3 \end{vmatrix}$ no se puede calcular ya que estas matrices no son conformables

OPERACIONES ELEMENTALES

Existen cierto tipo de operaciones que se pueden realizar entre los componentes de una matriz y a estas transformaciones se les llama transformaciones elementales. Estas operaciones son las siguientes:

a) Las que se realizan sobre los renglones de una matriz.

1.- Intercambiar dos renglones cualesquiera.

2.- Multiplicar un renglón por un número no nulo.

3.- Sumar a un renglón cualquiera un múltiplo de otro renglón.

b) Las que se realizan sobre las columnas de una mátriz.

1.- Intercambiar dos columnas cualesquiera.

2.- Multiplicar una columna por un número no nulo.

3.- Sumar a una columna cualquiera un múltiplo de otra columna.

> DEFINICION #9
> INVERSA DE UNA MATRIZ
> Se dice que una matriz A tiene inversa si existe otra matriz B, tal que AB = I y y el producto BA = I. Existe a lo más una matriz B con estas características, denominada inversa de la matriz A (A^{-1}).

Nota: Para que exista la inversa de una matriz A que satisfaga la relación $A^{-1}A = AA^{-1} = I$, la matriz A debe ser cuadrada y su inversa también. A las matrices cuadradas que no tienen inversa se les llama singulares.

INVERSION DE MATRICES

Es posible obtener la inversa de una matriz de orden n utilizando operaciones elementales sobre los renglones de la matriz A y después aplicar las mismas operaciones sobre la matriz identidad y el resultado será con la matriz A transformada a la identidad y la matriz identidad original, se transforma en la matriz A^{-1}.

Ejemplo:

$$\text{Sea la matriz } A = \begin{vmatrix} 2 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \\ 1 & 2 & -1 \end{vmatrix}$$

Obtener A^{-1}.

a) Se coloca la matriz A y enseguida la matriz identidad correspondiente (3x3):

$$\begin{vmatrix} 2 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \\ 1 & 2 & -1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

b) Se aplican las transformaciones elementales necesarias a la matriz A, hasta obtener la matriz identidad. Estas mismas operaciones elementales se aplican a la matriz identidad, de tal forma que cuando se obtenga la matriz identidad del lado izquierdo, la matriz del lado derecho corresponde a la inversa de la matriz A.

El primer paso a seguir para obtener la inversa de A es hacer que el elemento a_{11} sea 1. Esto puede lograrse facilmente si se intercambia el renglón 1 por el renglón 3 (R_1<-->R_3). (Recordar que cada de las operaciones elementales que se utilizarán para transformar la matriz A en la identidad también se aplican a la matriz identidad).

$$\left|\begin{array}{ccc} 1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \\ 2 & 3 & -1 \end{array}\right| \left|\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{array}\right|$$

c) Ahora se requiere que el elemento a_{21} sea cero, esto puede obtenerse si se suma el renglón 2 y el renglón 1 (R_2+R_1).

$$\left|\begin{array}{ccc} 1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & -1 \end{array}\right| \left|\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{array}\right|$$

d) El siguiente elemento que se debe hacer cero es el a_{31} y esto se pude lograr multiplicando el renglón 1 por (-2) y sumarlo al renglón 3 ($-2R_1+R_3$).

$$\left|\begin{array}{ccc} 1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{array}\right| \left|\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -2 \end{array}\right|$$

e) Ahora el elemento que interesa hacer cero es el a_{32}, esto se logra facilmente al sumar R_2+R_3:

$$\left|\begin{array}{ccc} 1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{array}\right| \left|\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{array}\right|$$

f) El elemento de interés es ahora el a_{33} y se requiere que sea 1. Se debe lograr esto sin alterar las primeras dos columnas. Esto se puede lograr si se divide el renglón 3 por 2.

$$\left|\begin{array}{ccc} 1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{array}\right| \left|\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{array}\right|$$

g) El elemento que ahora debe de hacerse cero es el a_{23}. Esto se puede lograr si se multiplica el renglón 3 por (-1) y se le suma al renglón 2. $(-1R_3+R_2)$

$$\left|\begin{array}{ccc} 1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array}\right| \left|\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 1 \\ -1/2 & 1/2 & 3/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{array}\right|$$

h) Ahora se procede a hacer 0 el elemento a_{12} esto se logra al multiplicar el R_2 por -2 y sumarlo a R_1 $(R_1+(-2)R_2)$.

$$\left|\begin{array}{ccc} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array}\right| \left|\begin{array}{ccc} 1 & -1 & -2 \\ -1/2 & 1/2 & 3/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{array}\right|$$

i) Por último falta que el elemento a_{13} sea igual a cero. Esto se logra con la operación: R_3+R_1

$$\left|\begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array}\right| \left|\begin{array}{ccc} 3/2 & -1/2 & -5/2 \\ -1/2 & 1/2 & 3/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{array}\right|$$

Como se ha logrado obtener la matriz identidad en donde se encontraba la matriz A, entonces la matriz resultante (donde se encontraba antes la identidad) es la matriz inversa de A (A^{-1}).

Se puede comprobar sencillamente realizando la multiplicación: $AA^{-1}=I$

$$\left|\begin{array}{ccc} 2 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \\ 1 & 2 & -1 \end{array}\right| \left|\begin{array}{ccc} 3/2 & -1/2 & -5/2 \\ -1/2 & 1/2 & 3/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{array}\right| = \left|\begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array}\right|$$

ALGORITMO DE SOLUCION DEL METODO DE GAUSS

Ya familiarizado con el concepto de matrices y de operaciones elementales, ya es posible desarrollar el método de Gauss. Dado cierto sistema de ecuaciones de m ecuaciones con n incógnitas:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + \ldots + a_{3n}x_n &= b_3 \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned}$$

Se puede representar en forma matricial de la siguiente forma:

$$Ax = b$$

en donde:

A es una matriz de orden mxn formada por los coeficientes a_{ij}.

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{vmatrix}$$

x es una matriz de orden nx1 (vector columna) formado por las x_n incógnitas.

$$xn = \begin{vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{vmatrix}$$

b es una matriz de orden mx1 (vector columna) formada por los b_n términos independientes.

$$bn = \begin{vmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_m \end{vmatrix}$$

Entonces el sistema de ecuaciones (1) quedaría representado matricialmente (Ax=b) de la siguiente forma:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_m \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{vmatrix}$$

El método de Gauss consiste en dos fases: Una fase progresiva y otra regresiva.

FASE PROGRESIVA

En esta etapa se parte de una matriz ampliada [A|b] y por transformaciones elementales de los renglones se tiene un sistema equivalente, en el que la 1era ecuación tiene n variables, la segunda (n-1) variables, ... hasta la penúltima ecuación que contiene dos variables y la última ecuación tendrá 1 variable.

FASE REGRESIVA

Se usa el valor conocido de la última ecuación y se sustituye en la penúltima y se despeja la variable desconocida y así sucesivamente hasta obtener el valor de todas las variables del sistema.

4.- METODO GAUSS-JORDAN

Se parte de la matriz ampliada [A|b] y al igual que el método de Gauss se procede a realizar operaciones elementales en los renglones hasta transformar el lugar en donde se encontraba la matriz A, en la matriz identidad. De tal froma que la solución del sistema se encuentra en el vector columna en donde inicialmente se encontraba el vector b.

EJEMPLOS DE SOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES

El método de adición y sustracción, así como el método de sustitución son los métodos más conocidos para resolver sistemas de ecuaciones, por lo que a continuación no se presentan ejemplos de estos tipos de resolución..

EJEMPLO 1.- SOLUCION DE UN SISTEMA DE ECUACIONES POR EL METODO DE GAUSS

Resolver el siguiente sistema de ecuaciones por el método de Gauss.

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 + x_3 &= 6 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 &= 8 \\ 2x_1 - 3x_2 - x_3 &= 1 \end{aligned}$$

1.- FASE PROGRESIVA

La matriz ampliada $[A|b]$ sería:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 1 & 1 & 2 & 8 \\ 2 & -3 & -1 & 1 \end{array}\right|$$

Por transformaciones elementales de los renglones se debe obtener un sistema equivalente, en el cual la primera ecuación tiene n variables, la segunda n-1, ..., hasta la penúltima ecuación que contiene 2 variables y la última ecuación tendrá una. Esto es, se debe obtener una matriz en la cual, todos los elementos debajo de la diagonal principal son cero. A este tipo de matriz se le denomina triangular superior.

Multiplicando el primer renglón por (-1) y sumándolo al segundo renglón:

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & -2 & -1 & -2 \\ 2 & -3 & -1 & 1 \end{array}\right|$$

Multiplicando el primer renglón por (-2) y sumándolo al tercer renglón:

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & -2 & -1 & -2 \\ 0 & -1 & -3 & -11 \end{array}\right|$$

Multiplicando el tercer renglón por 4:

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & -2 & -1 & -2 \\ 0 & -4 & -12 & -44 \end{array}\right|$$

Multiplicando el segundo renglón por (-2) y sumándolo al tercer renglón:

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & -2 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -10 & -40 \end{array}\right|$$

Multiplicando el tercer renglón por (-1/10):

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & -2 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{array}\right|$$

2.- FASE REGRESIVA

De la matriz triangular superior anterior se puede leer el valor de x_3 (leyéndolo del último renglón), tal que $x_3=4$.

Sustituyendo este valor en la penúltima ecuación (segundo renglón), se puede obtener el valor de X_2.

$-2x_2-x_3=-2$ (Ecuación correspondiente al segundo renglón)

Sustituyendo $x_3 = 4$

$-2x_2-4=-2$

$\dashrightarrow x_2 =-1$

$x_1-x_2+x_3=6$ (Ecuación correspondiente al primer renglón)

Sustituyendo $x_3=4$ y $x_2=-1$:

$x_1-(-1)+4=6$

$\dashrightarrow x_1=1$

EJEMPLO 2. SOLUCION DE UN SISTEMA DE ECUACIONES POR EL METODO GAUSS-JORDAN

Resuelva el sistema de ecuaciones anterior por el método de Gauss-Jordan.

El método de Gauss-Jordan sigue los mismo pasos que el de Gauss hasta llegar a la matriz triangular superior. Sin embargo, el Gauss-Jordan continúa realizando transformaciones elementales hasta llegar a la matriz identidad. Finalmente se leen los valores de x1, x2 y x3.

La matriz triangular superior resultante de la eliminación gaussiana (ejercicio anterior) es:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & -2 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{array}\right|$$

Multiplicando el segundo renglón por (-1):

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{array}\right|$$

Multiplicando el segundo renglón por (1/2):

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & 1 & 1/2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{array}\right|$$

Multiplicando el tercer renglón por (-1/2) y sumándolo al segundo renglón:

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{array}\right|$$

Multiplicando el segundo renglón por (-1) y sumándolo al segundo renglón:

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 5 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{array}\right|$$

Multiplicando el tercer renglón por (-1) y sumándolo al primer renglón se obtiene:

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{array}\right|$$

La solución al sistema es

$x_1 = 1$

$x_2 = -1$

$x_3 = 4$

De acuerdo a esta solución, el sistema de ecuaciones es consistente y determinado, esto es, tiene solución única.

Comprobaciones:

Con la primera ecuación:

$x_1 - x_2 + x_3 = 6$

$1 - (-1) + 4 = 6$

$6 = 6$

Con la segunda ecuación:

$x_1+x_2+2x_3=8$

$1-1+2(4)=8$

$8=8$

Con la tercera ecuación:

$2x_1-3x_2-x_3=1$

$2(1)-3(-1)-4=1$

$1=1$

En los siguientes cuatro ejemplos, se seguirá utilizando el método de Gauss-Jordan con la finalidad de ilustrar los sistemas de ecuaciones: consistente e indeterminado, consistente y determinado, así como inconsistente.

EJEMPLO 3: SISTEMA DE ECUACIONES CONSISTENTE E INDETERMINADO

Resolver por el método de Gauss-Jordan el siguiente sistema de ecuaciones.

$$\begin{aligned} 2x_1 - 3x_2 + x_3 &= 5 \\ x_1 + x_2 - x_3 &= 3 \\ 4x_1 - x_2 - x_3 &= 11 \end{aligned}$$

La matriz ampliada sería:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 2 & -3 & 1 & 5 \\ 1 & 1 & -1 & 3 \\ 4 & -1 & -1 & 11 \end{array}\right|$$

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 3 \\ 2 & -3 & 1 & 5 \\ 4 & -1 & -1 & 11 \end{array}\right|$$

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -5 & 3 & -1 \\ 4 & -1 & -1 & 11 \end{array}\right|$$

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -5 & 3 & -1 \\ 0 & -5 & 3 & -1 \end{array}\right|$$

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -5 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right|$$

El sistema resultante es:

$$\begin{aligned} x_1+x_2-x_3&=3 \\ -5x_2-3x_3&=-1 \end{aligned}$$

Considerando x_3=c (cualquier valor) y sustituyéndolo en la ecuacion correspondiente al segundo renglón:

$$-5x_2-3c=-1$$

$$x_2 = \frac{-1+3c}{-5}$$

Este valor de x_2 se sustituye en la ecuación correspondiente al primer renglón de la matriz:

$$x_1+x_2-c = 3$$

$$x1+ \frac{-1+3c}{-5} -c = 3$$

$$x1 + \frac{-1+3c}{-5} - \frac{c}{1} = 3$$

$$x1 + \frac{-1+3c -5c}{-5} = 3$$

$$x1 + \frac{-1-2c}{-5} = 3$$

$$x1=\frac{1+2c}{-5} + \frac{3}{1}$$

$$x1 = \frac{1+2c -15}{-5}$$

$$x1 = \frac{2c -14}{-5}$$

Esto quiere decir que x_3 es una variable que puede tomar cualquier valor y de acuerdo a ese valor, dependerá el valor de las otras variables. Ya que este sistema tiene un número infinito de soluciones, se le llama consistente e indeterminado.

EJEMPLO 4. SISTEMA DE ECUACIONES INCONSISTENTE

Resuelva por el método de Gauss-Jordan el siguiente sistema de ecuaciones lineales.

$$\begin{aligned} x_1 - 3x_2 + x_3 &= 6 \\ 2x_1 + x_2 - 3x_3 &= -2 \\ x_1 + 4x_2 - 4x_3 &= 0 \end{aligned}$$

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -3 & 1 & 6 \\ 2 & 1 & -3 & -2 \\ 1 & 4 & -4 & 0 \end{array}\right|$$

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -3 & 1 & 6 \\ 0 & 7 & -5 & -14 \\ 1 & 4 & -4 & 0 \end{array}\right|$$

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -3 & 1 & 6 \\ 0 & 7 & -5 & -14 \\ 0 & 7 & -5 & -6 \end{array}\right|$$

$$\approx \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & -3 & 1 & 6 \\ 0 & 7 & -5 & -14 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{array}\right|$$

Como se puede apreciar, esta matriz conduce a un absurdo en la ecuación correspondiente al tercer renglón:

$0x_1+0x_2+0x_3=8$

$0=8$ (Absurdo)

Esto significa que el sistema no tiene solución, es decir, que es un sistema inconsistente.

EJEMPLO 5. SISTEMA DE ECUACIONES CONSISTENTE Y DETERMINADO

Resuelva por el método de Gauss-Jordan el siguiente sistema de ecuaciones lineales.

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 &= 4 \\ 2x_1 + x_2 &= 7 \\ 5x_1 - 2x_2 &= 19 \end{aligned}$$

$$\left|\begin{array}{cc|c} 1 & -1 & 4 \\ 2 & 1 & 7 \\ 5 & -2 & 19 \end{array}\right|$$

$$\approx \left| \begin{array}{cc|c} 1 & -1 & 4 \\ 0 & 3 & -1 \\ 5 & -2 & 19 \end{array} \right|$$

$$\approx \left| \begin{array}{cc|c} 1 & -1 & 4 \\ 0 & 1 & -1/3 \\ 5 & -2 & 19 \end{array} \right|$$

$$\approx \left| \begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 11/3 \\ 0 & 1 & -1/3 \\ 5 & -2 & 19 \end{array} \right|$$

$$\approx \left| \begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 11/3 \\ 0 & 1 & -1/3 \\ 0 & -2 & 2/3 \end{array} \right|$$

$$\approx \left| \begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 11/3 \\ 0 & 1 & -1/3 \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right|$$

De acuerdo a lo anterior, la solución al sistema de ecuaciones resultante es:

$x_1 = 11/3$

$x_2 = -1/3$

Este es entonces un sistema consistente y determinado ya que tiene solución única. Observe que en el último renglón de la última matriz todos los elementos son cero. Esto es correcto $(0x_1 + 0x_2 = 0)$ y no conduce a un absurdo. Note además que el sistema original tiene 3 ecuaciones y sólo 2 incógnitas. Los grados de libertad serían:

Grados de libertad = # Ecuaciones - # Incógnitas

2-3=-1.

Quiere decir que se tiene un sistema sobrespecificado y se podría pensar que no tiene solución. Sin embargo, este caso particular si tiene solución. ¿A qué se debe esto? A que el sistema no está formado por 3 ecuaciones independientes. Una de las ecuaciones es linealmente dependiente de las otras y esto se puede visualizar con el hecho de que al realizar operaciones elementales y hacer ceros el tercer renglón equivale a eliminar esta ecuación. Es decir, el rango de la matriz es 2 y no 3. Esto demuestra que es muy importante saber si el sistema es linealmente dependiente o independiente. También es importante hacer énfasis que los grados de libertad son la diferencia entre las incógnitas menos las ecuaciones independientes.

Comprobaciones:

Con la primera ecuación:

$x_1 - x_2 = 4$

$11/3 - (-1/3) = 4$

$4 = 4$

Con la segunda ecuación:

$2x_1 + x_2 = 7$

$2(11/3) + (-1/3) = 7$

$7 = 7$

Con la tercera ecuación:

$5x_1 - 2x_2 = 19$

$5(11/3) - 2(-1/3) = 19$

$19 = 19$