

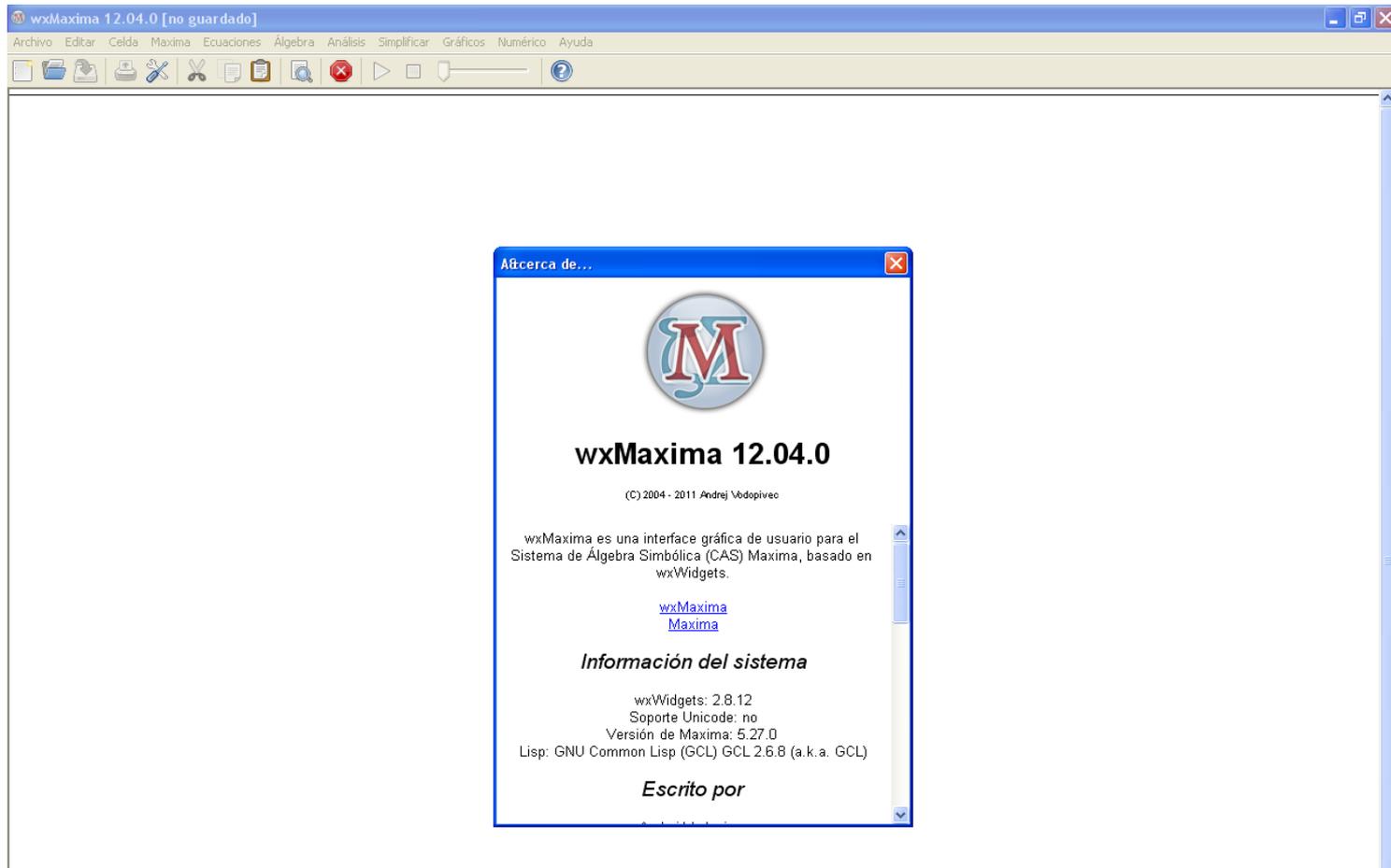


Escuela Universitaria de Energía y Minas  
Operaciones y Procesos  
PA 1ª

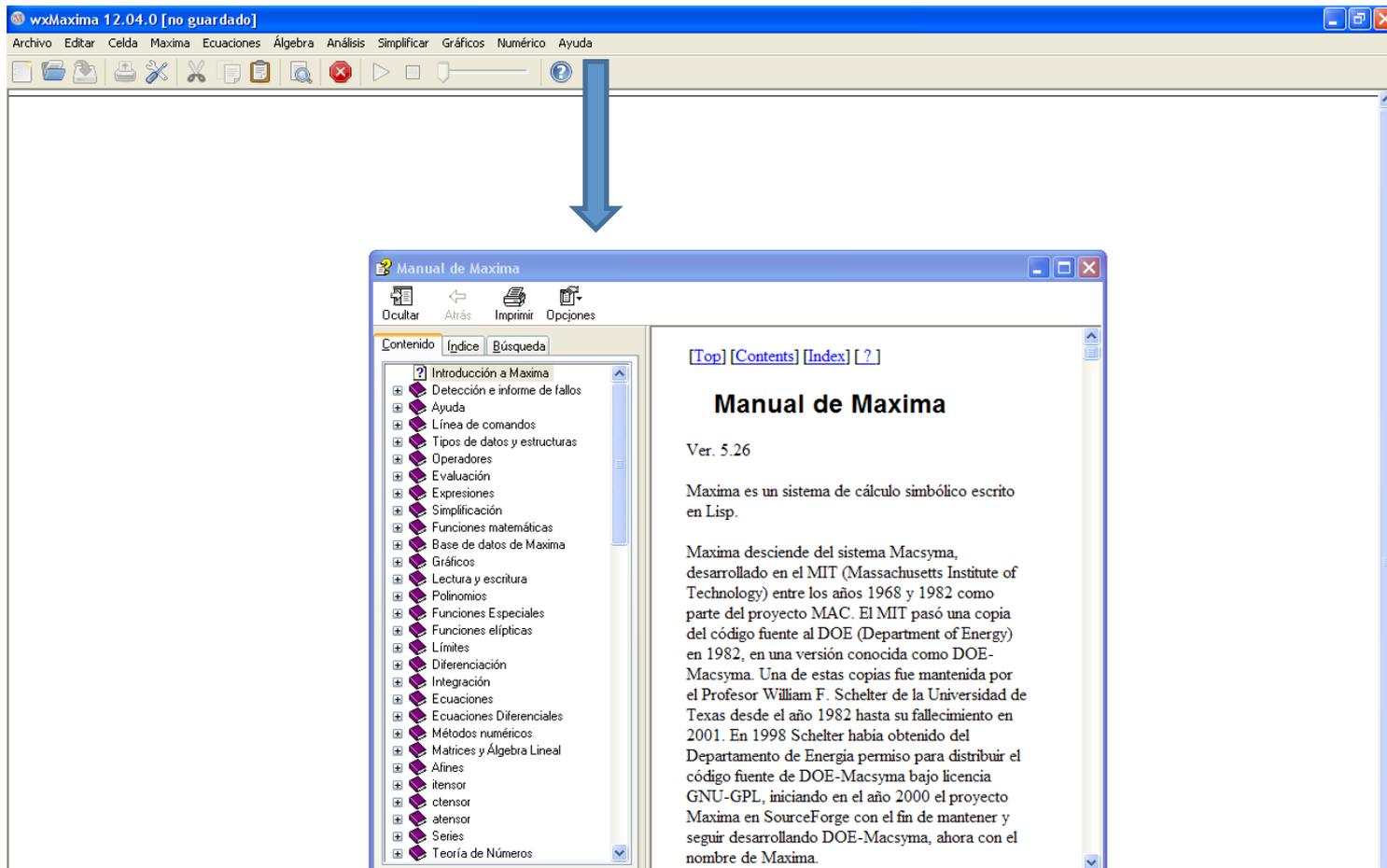


# Práctica 1ª : Cálculo Balance de Materia

Usaremos como herramienta de calculo el programa de calculo “Maxima”, potente y de distribución gratuita



En cualquier momento podemos consultar las pantallas de ayuda:



The image shows a screenshot of the wxMaxima software interface. The main window is titled "wxMaxima 12.04.0 [no guardado]" and has a menu bar with options: Archivo, Editar, Celda, Maxima, Ecuaciones, Álgebra, Análisis, Simplificar, Gráficos, Numérico, Ayuda. A blue arrow points from the "Ayuda" menu item to a smaller window titled "Manual de Maxima". This window has a toolbar with "Ocultar", "Atrás", "Imprimir", and "Opciones". It features a "Contenido" tab and a list of topics including "Introducción a Maxima", "Ayuda", "Línea de comandos", "Tipos de datos y estructuras", "Operadores", "Evaluación", "Expresiones", "Simplificación", "Funciones matemáticas", "Base de datos de Maxima", "Gráficos", "Lectura y escritura", "Polinomios", "Funciones Especiales", "Funciones elípticas", "Límites", "Diferenciación", "Integración", "Ecuaciones", "Ecuaciones Diferenciales", "Métodos numéricos", "Matrices y Álgebra Lineal", "Afinos", "Tensor", "Tensor", "Series", and "Teoría de Números". The main content area of the help window displays the title "Manual de Maxima" and "Ver. 5.26", followed by a paragraph describing Maxima as a symbolic calculation system written in Lisp, and a detailed history of the software's development from Maccsma at MIT to Maxima in SourceForge.



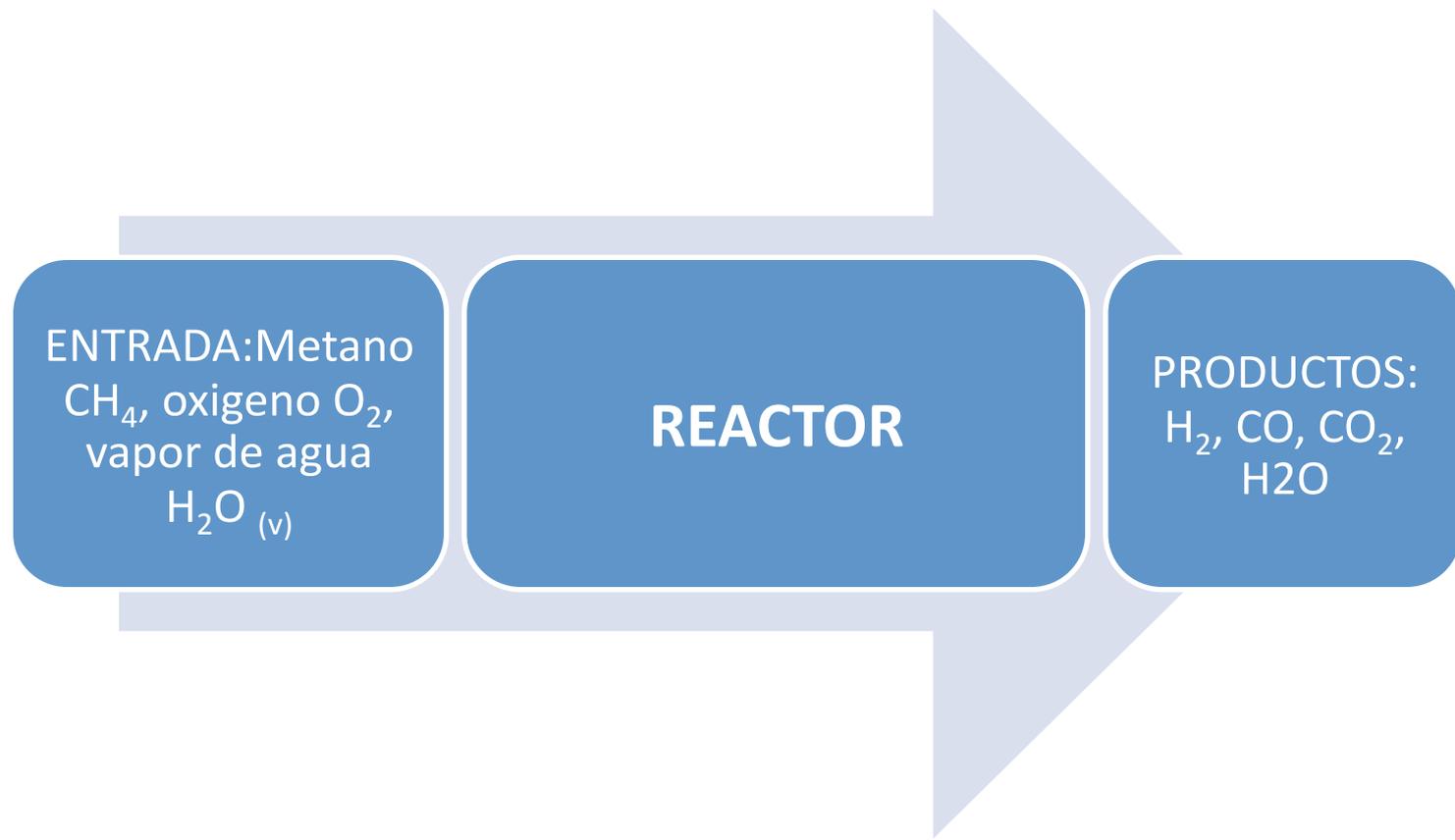
**Y con él vamos a**

***Resolver el siguiente problema:***

Calcular la composición de los gases resultantes de la reacción de metano con vapor de agua, suponiendo que los gases resultantes, que salen a  $925^{\circ}\text{C}$ , han alcanzado el equilibrio, y que la cte. de este equilibrio es 0,7.

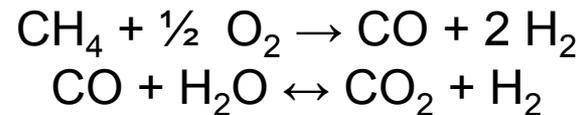
Suponer para los cálculos que se parte de 100 kg de metano a  $425^{\circ}\text{C}$ , 100 kg de oxígeno a la misma temperatura y la misma cantidad de vapor de agua a  $980^{\circ}\text{C}$ .

Las transformaciones las podemos representar en un diagrama de bloques:





Se producen las siguientes reacciones:



La constante de equilibrio, en función de las presiones parciales, de la segunda reacción es:

$$K_p = (p_{\text{CO}_2} * p_{\text{H}_2}) / (p_{\text{CO}} * p_{\text{H}_2}) = 0,7$$



Calculemos las condiciones de carga del reactor.  
Manejaremos como unidad de masa el kg, por lo que los resultados serán moles \*  $10^3$ , mol-kg.

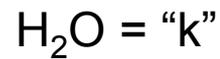
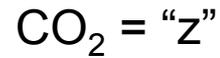
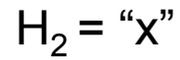
METANO, p.m. 16:  $100/16 = 6,25$  mol-kg.

OXIGENO, p.m. 32:  $100/32 = 3,125$  mol-kg

VAPOR, p.m. 18:  $100/18 = 5,556$



Identificamos los productos:



Planteamos nuestros balances:

Para el Carbono.-

Entra: 6,25 moles-kg, en forma de metano

Sale: “y” moles como CO y “z” moles de CO<sub>2</sub>

$$6,25 = y + z [1]$$

Hidrógeno.-

Entra : 4\*6,25= 25 en el metano y 2\*5,556 en el vapor de agua; 36,11 en total.

Sale: “2\*k” como agua y “2\*x” como H<sub>2</sub>

$$36,11 = 2*x + 2*k [2]$$



Oxígeno.-

Entra:  $2 \cdot 3,125$  en el  $O_2$ , 5,556 en el vapor de agua; total 11,808

Sale: “y” en forma de CO, “ $2 \cdot z$ ” en forma de  $CO_2$  y “k” en el vapor de agua.

$$11,808 = y + 2 \cdot z + k \quad [3]$$

Las presiones parciales, según la ley de Dalton, se pueden calcular como producto de las fracciones molares por la presión total:

$$p_i = x_i * p$$

El número total de moles:

$$x + y + z + k$$

Luego:

$$P_{CO_2} = (z/x+y+z+k) * p$$

$$P_{H_2} = (x/x+y+z+k) * p$$

$$P_{CO} = (y/x+y+z+k) * p$$

$$P_{H_2O} = (k/x+y+z+k) * p$$

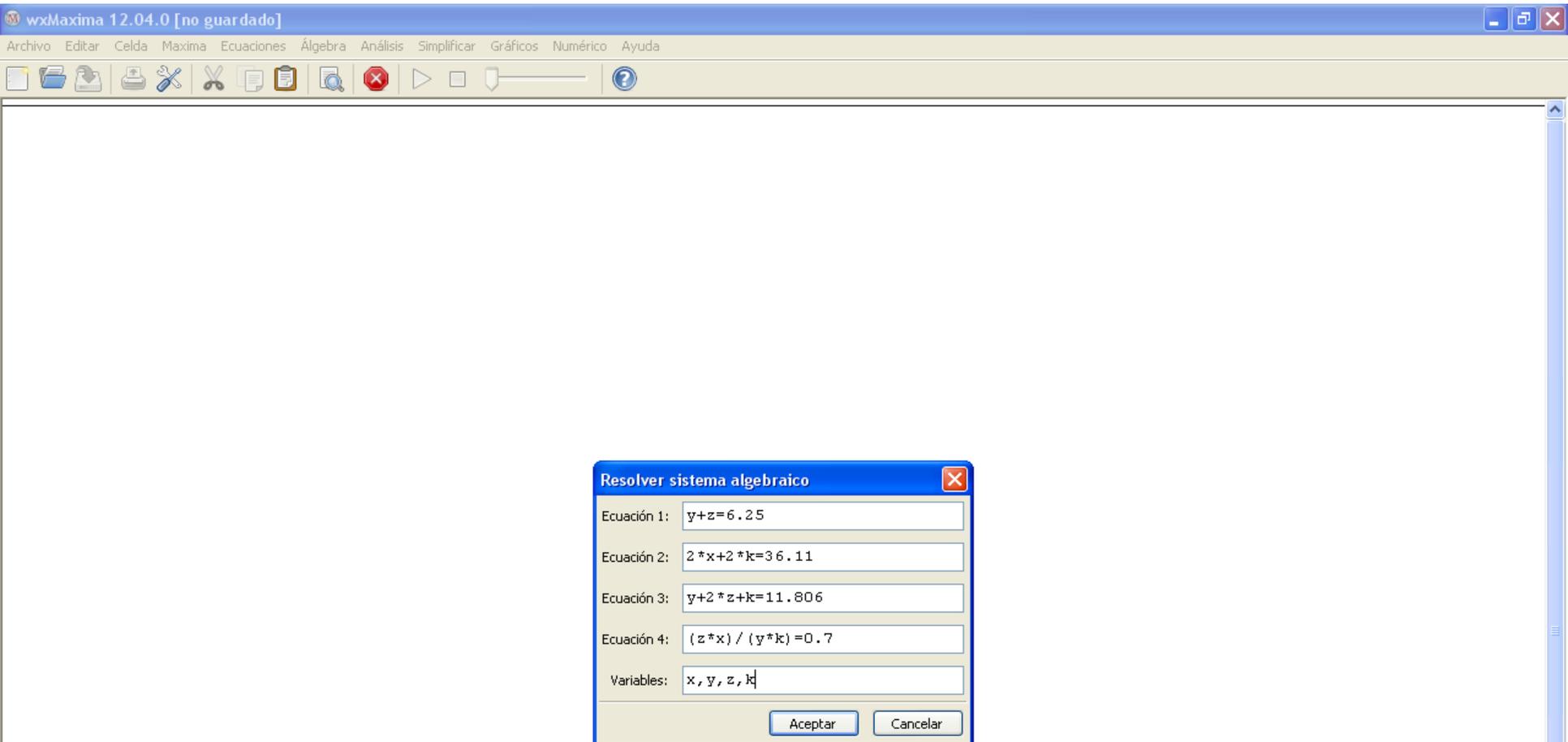


Sustituyendo estas presiones en la expresión de la cte. De equilibrio, y simplificando los denominadores correspondientes a las fracciones molares y las presiones totales, nos queda una nueva igualdad:

$$(z*x)/(y*k) = 0,7 \text{ [4]}$$

Recurrimos con esta cuatro igualdades al programa “Maxima”. Seleccionamos “ecuaciones”, “resolver sistema algebraico”, “4”, numero de ecuaciones y las introducimos:

Esta es la forma de redactar las ecuaciones:



The screenshot shows the wxMaxima 12.04.0 interface. The main window is titled "wxMaxima 12.04.0 [no guardado]". The menu bar includes "Archivo", "Editar", "Celda", "Maxima", "Ecuaciones", "Álgebra", "Análisis", "Simplificar", "Gráficos", "Numérico", and "Ayuda". The toolbar contains various icons for file operations, editing, and execution. A dialog box titled "Resolver sistema algebraico" is open, showing the following equations and variables:

**Resolver sistema algebraico**

Ecuación 1:  $y+z=6.25$

Ecuación 2:  $2 * x+2 * k=36.11$

Ecuación 3:  $y+2 * z+k=11.806$

Ecuación 4:  $(z * x) / (y * k)=0.7$

Variables:  $x, y, z, k$

Buttons: Aceptar, Cancelar

Seleccionamos “aceptar” nos aparece los resultados:

wxMaxima 12.04.0 [no guardado\*]

Archivo Editar Celda Maxima Ecuaciones Álgebra Análisis Simplificar Gráficos Numérico Ayuda

```
(%i1) algsys([y+z=6.25, 2*x+2*k=36.11, y+2*z+k=11.806, (z*x)/(y*k)=0.7], [x,y,z,k]);
```

$$(\%o1) \left[ \left[ x = -\frac{2\sqrt{2876746714} + 66319}{3000}, y = \frac{2^{3/2}\sqrt{41}\sqrt{35082277} + 122566}{3000}, z = -\frac{34027\sqrt{2}\sqrt{41}\sqrt{35082277} + 1839196016}{75 \cdot 2^{7/2}\sqrt{41}\sqrt{35082277} + 19895700}, k = \frac{2^{3/2}\sqrt{41}\sqrt{35082277} + 120484}{3000} \right], \right.$$

$$\left. \left[ x = \frac{2\sqrt{2876746714} - 66319}{3000}, y = -\frac{2^{3/2}\sqrt{41}\sqrt{35082277} - 122566}{3000}, z = -\frac{34027\sqrt{2}\sqrt{41}\sqrt{35082277} - 1839196016}{75 \cdot 2^{7/2}\sqrt{41}\sqrt{35082277} - 19895700}, k = -\frac{2^{3/2}\sqrt{41}\sqrt{35082277} - 120484}{3000} \right] \right]$$

No es la forma más cómoda de trabajar, por lo que transformamos las expresiones en resultados numéricos con cuatro decimales y expresión científica:

```
wxMaxima 12.04.0 [no guardado*]
Archivo  Editar  Celda  Maxima  Ecuaciones  Álgebra  Análisis  Simplificar  Gráficos  Numérico  Ayuda

(%i1) algsys([y+z=6.25, 2*x+2*k=36.11, y+2*z+k=11.806, (z*x)/(y*k)=0.7], [x,y,z,k]);
(%o1) [[x=-2*sqrt(2876746714)+66319/3000, y=(2^(3/2)*sqrt(41)*sqrt(35082277)+122566)/3000, z=-34027*sqrt(2)*sqrt(41)*sqrt(35082277)+1839196016/(75*2^(7/2)*sqrt(41)*sqrt(35082277)+19895700), k=(2^(3/2)*sqrt(41)*sqrt(35082277)+120484)/3000],
[x=(2*sqrt(2876746714)-66319)/3000, y=(2^(3/2)*sqrt(41)*sqrt(35082277)-122566)/3000, z=-34027*sqrt(2)*sqrt(41)*sqrt(35082277)-1839196016/(75*2^(7/2)*sqrt(41)*sqrt(35082277)-19895700), k=(2^(3/2)*sqrt(41)*sqrt(35082277)-120484)/3000]]

(%i2) float(%);
(%o2) [[x=-57.86320812841451, y=76.61220812841451, z=-70.36220812841447, k=75.91820812841451], [x=13.65054146174784, y=5.098458538252152, z=1.151541461747843, k=4.404458538252152]]

(%i5) fpprec:4$ bfloat(%o2);
(%o6) [[x=-5.786b1, y=7.661b1, z=-7.036b1, k=7.592b1], [x=1.365b1, y=5.098b0, z=1.152b0, k=4.404b0]]
```



Observamos dos grupos de soluciones. El número de moles no puede ser negativo. En el equilibrio tampoco podemos tener más reactivo que al inicio, por tener que desplazarse la reacción forzosamente en el sentido de los productos. No tenemos por ello ninguna duda respecto a la solución correcta.

Y nuestro problema ha quedado resuelto.



Escuela Universitaria de Energía y Minas  
Operaciones y Procesos  
PA 1ª

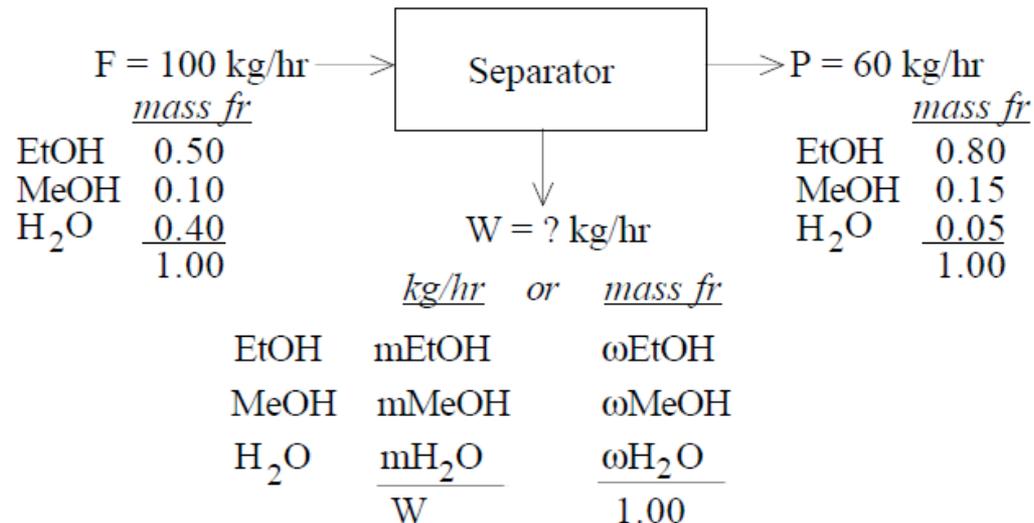


En la obra “PRINCIPIOS BÁSICOS Y CALCULOS EN INGENIERIA QUÍMICA”, sexta edición del autor David M. Himmelblau, y en un CD incluido nos encontramos una colección de interesantes problemas. De ellos vamos a proponer algunos para su resolución. Utilizaremos para los cálculos el programa “MAXIMA” y la hoja “EXCEL”:



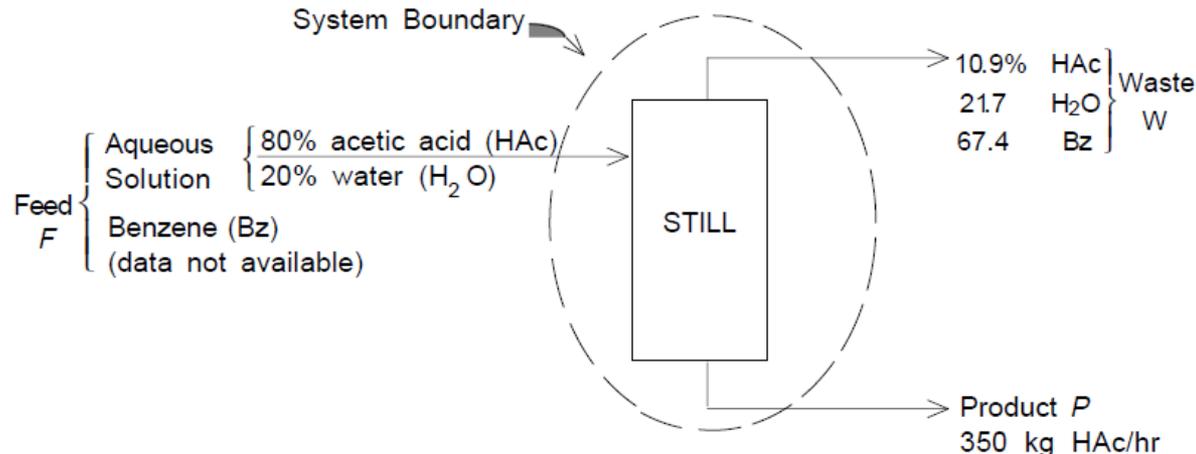
1.1.- Una solución compuesta de 50% de etanol (EtOH), 10% de metanol (MeOH), y 40% de agua (H<sub>2</sub>O) se alimenta a una velocidad de 100 kg / h en un separador que produce una corriente a razón de 60 kg / hr con la composición de 80% de EtOH, 15% de MeOH, y 5% H<sub>2</sub>O, y una segunda corriente de composición desconocida.

Calcular la composición (en%) de los tres compuestos en la corriente desconocida y su caudal en kg / h.



1.2.- Una torre de destilación continua se va a utilizar para separar ácido acético, agua y benceno.

En una operación de prueba, se obtuvieron los datos mostrados en la figura. Los datos del benceno en la alimentación no fueron captados, y por ello debemos calcular el flujo de alimentación por hora. ¿Cuántas ecuaciones independientes de balance de materiales pueden ser formuladas para este problema? ¿Cuántas variables cuyos valores son desconocidos existen en el problema?





Escuela Universitaria de Energía y Minas  
Operaciones y Procesos  
PA 1ª



Y ahora ya solo queda buscar libros y hacer nuevos ejercicios .....