



Cómo obtener con Matlab una solución numérica a un problema de balance de materia en régimen estacionario

Apellidos, nombre	Cardona Navarrete, Salvador C. (scardona@iqn.upv.es) Fombuena Borràs, Vicent (vifombor@upv.es)
Departamento	Departamento de Ingeniería Química y Nuclear (DIQN)
Centro	Escuela Politécnica Superior de Alcoy (EPSA) Universitat Politècnica de València (UPV)

1 Resumen de las ideas clave

Tanto el profesional de la ingeniería química como el alumnado que se está formando en esta disciplina hace uso, frecuentemente, de los balances de materia en régimen estacionario como herramienta para deducir información desconocida de procesos con los que normalmente interacciona.

El planteamiento de los balances de materia en régimen estacionario se traduce en un problema matemático consistente en un sistema de ecuaciones algebraicas que hay que resolver. En función de la complejidad del proceso a estudiar, el sistema de ecuaciones planteado puede ser de tal magnitud que su resolución manual no sea práctica. Es necesario acudir, en este caso, al uso de software matemático que hoy en día está al alcance de las universidades y una gran mayoría de empresas, como es el caso de Matlab.

Sin embargo, no todos los usuarios disponen de los conocimientos de métodos numéricos, algoritmos de cálculo o habilidades de programación informática necesarios para implementar una forma eficiente de resolver estos sistemas de ecuaciones que se generan.

Es por ello que, en este artículo, se proporciona al lector una herramienta informática desarrollada en Matlab, en forma de plantilla-guía, que el usuario sólo debe adaptar al problema de balance de materia que cada vez tenga que resolver. No siendo necesarias, por parte del usuario, habilidades muy desarrolladas de cálculo o programación.

A lo largo del artículo se describe cómo se utiliza esta herramienta aplicándola a un ejemplo concreto, y cómo su uso puede, aparte de proporcionar la solución de las variables desconocidas, servir como realimentación para mejorar el planteamiento de los balances de materia en diferentes situaciones.

2 Introducción

Los **balances de materia y energía** son dos de las herramientas más utilizadas en el ámbito de la **ingeniería química**. Tanto los alumnos, durante su etapa formativa académica, como los titulados, durante su vida profesional, hacen un uso continuado de los balances de materia y energía. Con ello consiguen determinar variables típicas en los procesos químicos como flujos, composiciones, velocidades de reacción, temperaturas, etc. a partir de otras variables ya conocidas.

El planteamiento de los balances de materia y energía en régimen estacionario conduce a un problema matemático que consiste en un **sistema de ecuaciones algebraicas**, que puede ser tanto lineal como no lineal. En procesos químicos de cierta complejidad se pueden generar sistemas con un elevado número de ecuaciones e incógnitas. Ello supone, junto a la dificultad intrínseca del planteamiento de los balances, una dificultad añadida de resolución matemática del sistema de ecuaciones para determinar las variables de interés del proceso desconocidas.

Hoy en día existe software matemático de propósito general, como **Matlab**, que permite resolver rápidamente distintas tipologías de problemas matemáticos, como pueden ser los sistemas de ecuaciones algebraicas. No obstante, si el usuario no posee una competencia adecuada en programación informática y métodos



numéricos, la existencia de este software matemático no se aprecia como una ayuda y ni siquiera se contempla su uso.

Teniendo en cuenta lo anterior, muchas veces los docentes restringimos los problemas reales de balances de materia a los que se enfrenta el alumnado a situaciones sencillas para que el problema matemático resultante sea simple. Pero, ¿por qué debemos hacer esto hoy en día si disponemos de métodos numéricos, una enorme potencia de cálculo y software matemático al alcance de nuestro alumnado? ¿Cómo podemos ayudar a que enfrenten estos problemas, aunque carezcan de habilidades de programación informática o conocimientos profundos de cálculo matemático?

Hay que tener en cuenta que no se pretende centrar el artículo en el planteamiento de los balances de materia, sino en su resolución. Es por ello que es conveniente que el lector conozca la metodología a seguir para realizar correctamente un balance de materia, siendo el libro de G. V. Reklaitis una magnífica referencia para ello [1]:

- **Analizar el problema**, identificando las **variables flujos** y **composiciones** de cada corriente, así como las cantidades que se pueden **asignar directamente** a algunas de estas variables.
- Identificar los **volúmenes de control** necesarios para resolver el proceso, asignar a cada reacción independiente una **variable velocidad de reacción** y analizar la **estequiometría** de cada reacción en cada volumen de control.
- Identificar las **relaciones adicionales** que proporciona el problema y escribir las ecuaciones asociadas.
- Escoger la **base de cálculo**.
- Realizar el **análisis de grados de libertad** de todo el proceso y verificar que éste da cero.
- Plantear las **ecuaciones de balance de materia independientes** en cada volumen de control.
- **Resolver matemáticamente** el sistema de ecuaciones algebraicas que resulta de plantear el balance de materia en régimen estacionario.

Es en este último punto en el que vamos a centrar este artículo. En este sentido, en este trabajo se proporciona un fichero desarrollado en Matlab por los autores que permite resolver sistemas de ecuaciones algebraicas, denominado **steady_state_balances_solver.m**, junto con una plantilla, nombrada **plantilla_BM.m**, en la que el usuario escribe el sistema de ecuaciones que se deduce del planteamiento de balances de materia en régimen estacionario. Ambos ficheros están a disposición del lector, poniéndose en contacto con los autores del artículo. La rapidez y sencillez del cálculo matemático con Matlab utilizando estos ficheros permite que el alumno pueda centrarse sólo en los aspectos ingenieriles del problema a resolver y analizar fácilmente los resultados que se obtienen.

3 Objetivos

La lectura de este artículo tiene como principales objetivos:

- Proporcionar una herramienta informática con la que resolver los problemas matemáticos que resultan de plantear balances de materia en régimen estacionario.



- Guiar al lector en el uso de la herramienta y aplicarla para resolver un ejemplo concreto.
- Facilitar que el alumno se enfrente a problemas reales y complejos al reducir las dificultades matemáticas que debe afrontar, de forma que se pueda centrar en el análisis ingenieril de los procesos y en ver rápidamente el efecto de modificar algunas variables sobre la solución final.

4 Desarrollo

La metodología consiste en proporcionar al alumnado los dos ficheros mencionados en la introducción: `steady_state_balances_solver.m` y `plantilla_BM.m`. De los dos, el único que es modificado cada vez es el correspondiente a `plantilla_BM.m`, en el que se introduce el sistema de ecuaciones algebraicas deducido de plantear el balance de materia en régimen estacionario. Esta plantilla puede aplicarse a cada ejercicio diferente que tenga que resolverse.

El contenido de `plantilla_BM.m` puede verse en la Figura 1. Se ha estructurado de manera que el alumno se limita a trasladar directamente al fichero la información reflejada en el análisis de grados de libertad que se haya realizado previamente:

- Las variables con valores especificados (**specified variables**).
- Las ecuaciones correspondientes a las relaciones adicionales (**additional relations**).
- Las ecuaciones de balance de materia independientes (**independent material balance equations**).
- Junto con el sumatorio igual a uno de las fracciones molares de cada corriente (**summation of the mole or mass fractions for each stream**).

```
% Take into account all the independent material balance equations, the
% specified variables, the additional relations and the summation of the
% mole or mass fractions for each stream

% Write the equations following this exemple: eq{1}=F1==3

%% SPECIFIED VARIABLES
eq{1}=;
eq{2}=;

%% ADDITIONAL RELATIONS
eq{3}=;
eq{4}=;

%% INDEPENDENT MATERIAL BALANCE EQUATIONS
% VC1
eq{5}=;
eq{6}=;
% VC2
eq{7}=;
eq{8}=;

%% SUMMATION OF THE MOLE OR MASS FRACTIONS FOR EACH STREAM
eq{9}=;
eq{10}=;
```

Figura 1. `plantilla_BM.m`

Como ejemplo de aplicación de esta metodología se va a resolver el balance de materia en régimen no estacionario aplicado al proceso mostrado en la Figura 2 [2]. Corresponde a una columna de destilación a la que se alimenta una mezcla de acetona (P), ácido acético (A) y anhídrido acético (H), corriente 1, para obtener dos corrientes, una rica en A, corriente 3, y otra rica en H, corriente 5. En dicha figura se muestran las variables especificadas y las variables que se quieren calcular, así como los volúmenes de control considerados.

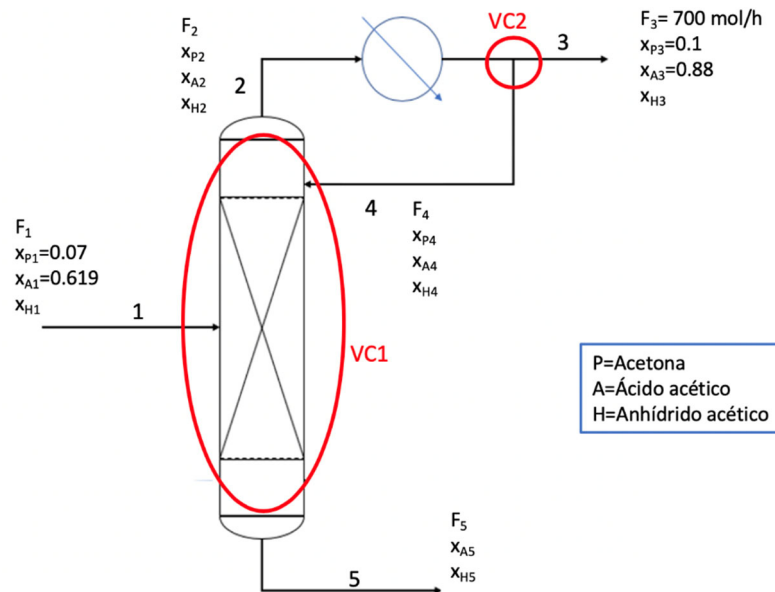


Figura 2. Diagrama de flujo del proceso a resolver [2]

El balance de materia proporciona el sistema de ecuaciones mostrado en la Figura 3 [2], considerando que se establece que el flujo molar F_4 es el 60% del flujo molar F_2 . El análisis de grados de libertad del proceso daría como resultado que los grados de libertad son cero, ya que la suma del número de ecuaciones de balance independientes, 6, más el número de variables especificadas, 5, más el número de relaciones adicionales, 3, coincide con el número de variables independientes, 14. Es indispensable que los **grados de libertad** sean **cero** para poder pasar a resolver el problema, tanto haciendo uso de Matlab como si se decide realizar un cálculo manual, y determinar el valor de cada variable desconocida.

Por tanto, no debería pasarse a aplicar las herramientas informáticas proporcionadas en este artículo mientras no se tenga la certeza que el número de grados de libertad es cero. Tanto si el número de grados de libertad es positivo como negativo, no será posible obtener una solución. Si es positivo porque hay más variables desconocidas (incógnitas) que ecuaciones para obtenerlas, y si es negativo porque hay demasiadas ecuaciones y hay que eliminar previamente aquellas que no sean necesarias.



- **Balance de materia en VC1:**

$$P \rightarrow F_1 \cdot X_{P1} + F_4 \cdot X_{P4} - F_2 \cdot X_{P2} = 0$$

$$A \rightarrow F_1 \cdot X_{A1} + F_4 \cdot X_{A4} - F_2 \cdot X_{A2} - F_5 \cdot X_{A5} = 0$$

$$H \rightarrow F_1 \cdot X_{H1} + F_4 \cdot X_{H4} - F_2 \cdot X_{H2} - F_5 \cdot X_{H5} = 0$$

- **Balance de materia en VC2:**

$$P \rightarrow F_2 \cdot X_{P2} - F_3 \cdot X_{P3} - F_4 \cdot X_{P4} = 0$$

$$A \rightarrow F_2 \cdot X_{A2} - F_3 \cdot X_{A3} - F_4 \cdot X_{A4} = 0$$

$$H \rightarrow F_2 \cdot X_{H2} - F_3 \cdot X_{H3} - F_4 \cdot X_{H4} = 0$$

- **Relaciones adicionales:**

$$F_4 = 0.6 \cdot F_2$$

$$X_{P3} = X_{P4}$$

$$X_{A3} = X_{A4}$$

Figura 3. Ecuaciones de balance de materia independientes y relaciones adicionales [2].

Si trasladamos la información contenida en las Figuras 2 y 3 al fichero plantilla_BM.m, y le cambiamos el nombre del fichero a **problema_columna.m**, tendríamos como resultado el contenido mostrado en la Figura 4. Simplemente hay que tener en cuenta que el = de la ecuación escrita en papel se convierte en == al escribir esa ecuación en la plantilla correspondiente. También habrá que añadir o quitar tantas etiquetas **eq{ }**, y reenumerarlas, como haga falta. Además, habrá que añadir los sumatorios de fracciones molares en cada una de las corrientes que haya en el proceso, 5 en el ejemplo, con más de un componente.

Es importante remarcar que estas ecuaciones adicionales de los sumatorios de fracciones molares no aparecen reflejadas en el análisis de grados de libertad, ya que en esta contabilidad de variables y ecuaciones independientes tampoco se consideran todas las variables fracciones molares de cada corriente. Recordar que si en una corriente hay N componentes, sólo se consideran N-1 variables composición independientes a la hora de realizar el análisis de grados de libertad.



```
% Take into account all the independent material balance equations, the
% specified variables, the additional relations and the summation of the
% mole or mass fractions for each stream

% Write the equations following this exemple: eq{1}=F1==3;
% Write ; always at the end of the equations

%% SPECIFIED VARIABLES
eq{1}=F3==700;
eq{2}=xP1==0.07;
eq{3}=xA1==0.619;
eq{4}=xP3==0.1;
eq{5}=xA3==0.88;

%% ADDITIONAL RELATIONS
eq{6}=F4==0.6*F2;
eq{7}=xP3==xP4;
eq{8}=xA3==xA4;

%% INDEPENDENT MATERIAL BALANCE EQUATIONS
% VC1
eq{9}=F1*xP1+F4*xP4-F2*xP2==0;
eq{10}=F1*xA1+F4*xA4-F2*xA2-F5*xA5==0;
eq{11}=F1*xH1+F4*xH4-F2*xH2-F5*xH5==0;
% VC2
eq{12}=F2*xP2-F3*xP3-F4*xP4==0;
eq{13}=F2*xA2-F3*xA3-F4*xA4==0;
eq{14}=F2*xH2-F3*xH3-F4*xH4==0;

%% SUMMATION OF THE MOLE OR MASS FRACTIONS FOR EACH STREAM
eq{15}=xP1+xA1+xH1==1;
eq{16}=xP2+xA2+xH2==1;
eq{17}=xP3+xA3+xH3==1;
eq{18}=xP4+xA4+xH4==1;
eq{19}=xA5+xH5==1;
```

Figura 4. problema_columna.m

Una vez completado el fichero problema_columna.m es cuando pasamos a ejecutar el fichero steady_state_balances_solver.m. Es la función solve de la Toolbox de cálculo simbólico de Matlab quien se encarga de resolver simultáneamente el sistema de ecuaciones algebraicas planteado.

Tras aparecer el encabezado del programa, se le pide al alumno el nombre del fichero con el balance de materia a resolver, que debe estar ya preparado de acuerdo a lo visto anteriormente. En negrita se indica lo que debe introducir el usuario y en cursiva la información que devuelve el programa.

Steady-state balance file name (without extension): **problema_columna**

Es importante no poner la extensión del fichero de Matlab que contiene las ecuaciones cuando se pide el nombre, ya que, en caso contrario, se genera un error. A continuación, el programa devuelve la siguiente información:



Please, verify that these are the variables of your problem

Columns 1 through 13

'F1' 'F2' 'F3' 'F4' 'F5' 'xA1' 'xA2' 'xA3' 'xA4' 'xA5' 'xH1' 'xH2' 'xH3'

Columns 14 through 19

'xH4' 'xH5' 'xP1' 'xP2' 'xP3' 'xP4'

The number of variables (19) is the same as the number of equations (19)

El fichero `steady_state_balances_solver.m` extrae automáticamente las variables que intervienen en las ecuaciones introducidas en `problema_columna.m` y las muestra en pantalla. Además, compara el número de variables con el número de ecuaciones. **Siempre debe aparecer igualado el número de ecuaciones con el de incógnitas**, ya que eso es consecuencia de resolver un problema con los grados de libertad igual a cero. En caso de que esto no ocurriera, significaría que:

- Nos hemos equivocado a la hora de realizar el análisis de grados de libertad del problema y deberíamos revisarlo.
- Nos hemos equivocado al introducir las ecuaciones en `problema_columna.m`, bien porque hemos olvidado introducir alguna ecuación o hemos añadido alguna que no tocaba.
- Hemos escrito incorrectamente alguna variable en las ecuaciones y Matlab las considera como variables diferentes. Es bastante habitual escribir, por error, con mayúscula y minúscula una misma variable a lo largo de la plantilla, dando lugar a que se contabilicen como variables diferentes. Por ejemplo, escribir `xA1` y `XA1` hace que Matlab contabilice dos variables cuando, en realidad, debería ser una.

Es por eso que el programa le indica al usuario que revise las variables que ha extraído automáticamente Matlab para verificar que coinciden con las variables reales del problema a resolver. Además, observaremos que el número de variables e incógnitas que indica Matlab, 19 en el ejemplo, siempre es igual al número de variables contabilizadas en el análisis de grados de libertad, 14 en el ejemplo, más el número de ecuaciones de sumatorios de fracciones molares que hemos añadido en la plantilla, 5 en el ejemplo.

Es necesario establecer todas las correcciones que sean pertinentes para que, al final, sea igual el número de variables al de ecuaciones y se pueda avanzar en la resolución matemática del problema.

Seguidamente, el programa le pregunta al usuario qué tipo de solución pretende obtener, numérica o analítica. En la mayoría de problemas, como el del ejemplo, queremos determinar una solución numérica ya que disponemos de valores numéricos para las variables especificadas. En este caso escogeremos la opción 1. La opción analítica, 2, se escoge cuando las variables especificadas no tienen un valor numérico asignado sino parámetros genéricos y queremos determinar qué relación tienen las variables desconocidas del problema con estos parámetros especificados. Esta opción será objeto de estudio en otro artículo docente.

Which type of solution do you prefer, numerical (1) or analytical (2)?: 1



A continuación, el programa devuelve las soluciones matemáticas del problema que estamos resolviendo. En el caso de que haya varias soluciones matemáticas el programa las devuelve todas y le pide al usuario que escoja cuál de todas tiene sentido físico. En el caso de que sólo haya una solución matemática, como ocurre en este ejemplo, directamente Matlab proporciona también la solución física, tal como se muestra en la Figura 5.

Mathematical Solutions:	Physical Solution:
[F1, 1000]	[F1, 1.0000e+03]
[F2, 1750]	[F2, 1.7500e+03]
[F3, 700]	[F3, 7.0000e+02]
[F4, 1050]	[F4, 1.0500e+03]
[F5, 300]	[F5, 3.0000e+02]
[xA1, 619/1000]	[xA1, 6.1900e-01]
[xA2, 22/25]	[xA2, 8.8000e-01]
[xA3, 22/25]	[xA3, 8.8000e-01]
[xA4, 22/25]	[xA4, 8.8000e-01]
[xA5, 1/100]	[xA5, 1.0000e-02]
[xH1, 311/1000]	[xH1, 3.1100e-01]
[xH2, 1/50]	[xH2, 2.0000e-02]
[xH3, 1/50]	[xH3, 2.0000e-02]
[xH4, 1/50]	[xH4, 2.0000e-02]
[xH5, 99/100]	[xH5, 9.9000e-01]
[xP1, 7/100]	[xP1, 7.0000e-02]
[xP2, 1/10]	[xP2, 1.0000e-01]
[xP3, 1/10]	[xP3, 1.0000e-01]
[xP4, 1/10]	[xP4, 1.0000e-01]

Figura 5. Soluciones matemáticas y con sentido físico de problema_columna.m

La solución física del problema queda registrada también en un fichero de texto que se genera automáticamente, **physical_solution.txt**, que queda a disposición del usuario tras la ejecución de `steady_state_balances_solver.m`

Como todas las variables calculadas quedan registradas en el *workspace* de Matlab, el usuario puede realizar, a posteriori, cualquier cálculo que desee a partir de todos los flujos, composiciones o velocidades de reacción que acaba de calcular.

Finalmente, una vez resuelto este problema, el usuario podría modificar algunos de los valores especificados para las variables del problema y analizar, rápidamente, qué cambios se producirían en las variables desconocidas del problema, dentro de la filosofía de lo que se conoce como el análisis "What if?". Simplemente se irían realizando cada vez esas modificaciones en la plantilla `problema_columna.m` y ejecutando el nuevo fichero haciendo uso de `steady_state_balances_solver.m`.

5 Conclusiones

Llegados a este punto, podemos establecer las siguientes conclusiones:

- El uso de plantillas-guía confirma su utilidad para que el alumnado afronte con garantías el estudio de procesos complejos en los que se apliquen balances de materia.



- La introducción de Matlab en la resolución de problemas de balances de materia en régimen estacionario permite a los alumnos **centrarse en el aspecto ingenieril** de este tipo de problemas, dejando en un **segundo plano** la **dificultad** del **problema matemático** asociado.
- Todo ello **sin** que los usuarios tengan una **elevada habilidad** en el **manejo de Matlab**.
- Estas plantillas facilitan el modificar valores de variables del proceso para ver rápidamente el efecto sobre otras variables del mismo (análisis "**What if?**")
- En consecuencia, el alumno mejora su capacidad de análisis e interpretación de los resultados obtenidos y su competencia de pensamiento crítico.
- Y, finalmente, el alumno es consciente de la importancia de los métodos numéricos y conoce herramientas informáticas útiles que puede utilizar tanto a nivel académico como profesional.

6 Bibliografía

[1] Reklaitis, G. V.: "Balances de Materia y Energía". McGraw Hill, México, 1989

[2] Fombuena Borrás, V.; Cardona Navarrete, S. C.; Domínguez Candela, I. (2020). Ejemplo de resolución de un balance de materia en una columna de destilación. <http://hdl.handle.net/10251/144694>