



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

Apellidos, nombre	Cardona Navarrete, Salvador C. (scardona@iqn.upv.es) Fombuena Borràs, Vicent (vifombor@upv.es) Domínguez Candela, Iván (ivdocan@doctor.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

Los profesionales de la ingeniería química y, por tanto, los que estudiáis esta disciplina utilizáis, frecuentemente, los balances de energía en régimen estacionario como herramienta para determinar variables como temperaturas o potencias térmicas involucradas en los procesos bajo estudio.

Al plantear un balance de energía en régimen estacionario se genera un problema matemático integrado por un sistema de ecuaciones algebraicas que ha de ser resuelto. El sistema de ecuaciones resultante puede ser difícil o engorroso de resolver de forma manual, dependiendo de la complejidad del proceso analizado. El uso de software matemático de propósito general, como Matlab, puede ayudar en la obtención de una solución matemática. Se trata de un software que hoy en día está al alcance de las universidades y muchas empresas.

Lamentablemente, las habilidades de programación informática, los conocimientos de métodos numéricos o de algoritmos de cálculo que se requieren para programar eficientemente la resolución de estos sistemas de ecuaciones, no forman parte del conjunto de habilidades de todos los usuarios, sobre todo de los estudiantes universitarios de primeros cursos.

Así pues, este artículo pretende proporcionaros una plantilla-guía, desarrollada en Matlab, que sólo tenéis que adaptar al problema concreto de balance de energía que tengáis que resolver en cada momento. Por tanto, no se requieren habilidades muy desarrolladas de programación o cálculo matemático por vuestra parte.

En este artículo docente se describe cómo se utiliza esta herramienta mediante su aplicación a un ejemplo concreto. Aparte de proporcionar la solución de las variables desconocidas, su uso puede servir como realimentación para mejorar el planteamiento de los balances de energía.

2 Objetivos

Tras la lectura de este artículo, seréis capaces de:

- Utilizar una plantilla-guía de Matlab con la que resolver los problemas matemáticos que resulten de plantear balances de energía en régimen estacionario.
- Aplicar la herramienta a la resolución de un ejemplo concreto en el que se aplica un balance de energía.
- Enfrentar problemas reales, que pueden llegar a ser bastante complejos, minimizando las dificultades matemáticas que os podéis encontrar, de manera que el enfoque lo centréis en el análisis de los procesos desde una óptica ingenieril.
- Realizar análisis del tipo *What if?*, ya que el uso de estas plantillas-guía os permitirá ver rápidamente el efecto de modificar algunas variables sobre la solución final.



3 Introducción

Dos de las herramientas más utilizadas en el ámbito de la **ingeniería química** son los **balances de materia y energía**. Se hace un uso continuado de los balances de materia y energía tanto a nivel académico como profesional, con la finalidad de obtener las variables características de los procesos químicos como flujos, composiciones, velocidades de reacción, temperaturas, potencias térmicas, potencias mecánicas, etc, a partir de otras variables de entrada que ya se conocen.

Al plantear los balances de materia y energía en régimen estacionario el problema real se convierte en un problema matemático consistente en un **sistema de ecuaciones algebraicas**, lineal o no lineal. El sistema puede tener un gran número de ecuaciones e incógnitas, sobre todo en procesos químicos de cierta complejidad. Así pues, a la dificultad propia que tiene el plantear los balances de materia y energía, se le une la dificultad que supone resolver matemáticamente el sistema de ecuaciones resultante con el fin de calcular las variables desconocidas del proceso.

Es posible utilizar software matemático de propósito general, como **Matlab**, para resolver diferentes tipos de problemas matemáticos, entre los que se encuentran los sistemas de ecuaciones algebraicas, tanto lineales como no lineales. Sin embargo, esta posibilidad no se suele contemplar cuando el usuario no posee una competencia adecuada en programación informática y/o métodos numéricos.

Este hecho propicia, sobre todo en los primeros cursos, que los docentes restrinjamos los problemas reales de balances de materia y energía que tenéis que resolver a casos sencillos en los que el problema resultante sea simple a la hora de determinar su solución matemática. Es por ello que surge la cuestión de por qué tenemos que estar sometidos a esta limitación cuando tenéis a vuestro alcance, hoy en día, métodos numéricos, una enorme potencia de cálculo y software matemático. Y, consecuentemente, surge una segunda cuestión: **¿cómo podemos ayudaros a que podáis afrontar estos problemas, aunque vuestras habilidades de programación informática o vuestros conocimientos de cálculo matemático no sean elevados?**

Hay que tener en cuenta que no se pretende centrar el artículo en el planteamiento de los balances de materia y energía, sino en su resolución. Es por ello que es conveniente que conozcáis la metodología a seguir para realizar correctamente un balance de materia y energía, siendo el libro de G. V. Reklaitis una magnífica referencia para ello [1]. Simplemente recordad que cuando planteáis un balance de energía, siempre es necesario plantear también un balance de materia. Puede ocurrir que primero tengáis que resolver el balance de materia y, posteriormente, paséis a resolver el balance de energía. En ese caso, por comodidad, podéis resolver ambos balances simultáneamente, pero no es una obligación. No obstante, hay casos en que ambos balances tienen que ser resueltos, necesariamente, de forma simultánea, no habiendo otra alternativa de resolución.

En este trabajo utilizaréis un fichero de Matlab denominado **steady_state_balances_solver.m**, programado por nosotros, que os permitirá resolver sistemas de ecuaciones algebraicas, lineales o no lineales, junto con una plantilla-guía, también de Matlab, designada **plantilla_BM_BE.m**. Esta plantilla-guía os permite trasladar el sistema de ecuaciones deducido de plantear en régimen estacionario sólo balances de materia, únicamente balances de energía (suponiendo que se ha resuelto previamente el balance de materia correspondiente), o balances de materia junto con los de energía, permitiendo la resolución simultánea de ambos balances.



Si queréis conseguir ambos ficheros, sólo es necesario que os pongáis en contacto con nosotros por e-mail. La sencillez de uso de estos ficheros, junto con la rapidez de cálculo con Matlab, os permitirá centraros en los aspectos ingenieriles del problema a resolver y realizar un análisis de los resultados obtenidos con suma facilidad.

4 Desarrollo

La metodología se basa en que hagáis uso de los dos ficheros indicados en la introducción: **steady_state_balances_solver.m** y **plantilla_BM_BE.m**. El único que modificaréis cada vez es el correspondiente a **plantilla_BM_BE.m**, en el que se introduce el sistema de ecuaciones algebraicas resultante de plantear los balances en régimen estacionario. Para cada problema que tuvierais que resolver, adaptaríais esta plantilla.

El contenido de la **plantilla_BM_BE.m** lo podéis ver en la Figura 1. Se ha estructurado de manera que trasladéis directamente al fichero la información reflejada en el análisis de grados de libertad que hayáis realizado previamente:

- Las variables del balance de materia con valores especificados (**specified variables material balance**).
- Las ecuaciones correspondientes a las relaciones adicionales del balance de materia (**additional relations material balance**).
- Las ecuaciones de balance de materia independientes (**independent equations material balance**).
- El sumatorio igual a uno de las fracciones molares o másicas de cada corriente (**summation of the mole or mass fractions for each stream**).
- Las variables del balance de energía con valores especificados (**specified variables energy balance**). Estas variables pueden ser temperaturas, calores específicos, entalpías estándar de formación, calores latentes de cambio de fase y potencias térmicas o mecánicas.
- Las ecuaciones de balance de energía independientes (**independent equations energy balance**). En este punto se calculan las entalpías en función de la información proporcionada al definir las variables especificadas.

Como ejemplo de aplicación de esta metodología vamos a resolver el balance de energía en régimen estacionario aplicado al proceso mostrado en la Figura 2 [2]. Corresponde a un horno de cal adiabático al que se alimenta CaCO_3 (Z), coque (C) y aire, mezcla de O_2 (O) y N_2 (N), las tres corrientes a 25 °C, y se extraen dos corrientes. Una de ellas es una corriente sólida de CaO (K) a 520°C y la otra es una corriente gaseosa formada por CO_2 (D) y N_2 (N) a 400°C. En dicha figura se muestran las variables especificadas y las variables que se quieren calcular, así como el volumen de control considerado, todas las reacciones químicas que tienen lugar y los datos adicionales para resolver el problema.

El balance de materia junto con el de energía proporciona el sistema de ecuaciones mostrado en la Figura 3 [2]. Para que el análisis de grados de libertad del proceso dé como resultado que los grados de libertad son cero, es necesario resolver simultáneamente ambos tipos de balances. **¿Esto ocurre siempre?** No. En otros casos, podréis resolver antes el balance de materia y posteriormente el de energía, situación que suele ser la más común. Cuando es posible resolver primero el balance de materia y después el de energía, por comodidad podéis resolver ambos balances al mismo tiempo. Pero no es una obligación, como sí ocurre en el proceso de este artículo docente.



Si queréis hacer uso de las plantillas de Matlab, es mucho más cómodo resolver ambos balances al mismo tiempo. Así pues, sea tanto por necesidad como por comodidad, utilizaremos la plantilla-guía **plantilla_BM_BE.m** incorporando las ecuaciones tanto del balance de materia como del de energía.

```
% 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. Also take into account the energy
% balance equations.

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

%% SPECIFIED VARIABLES MATERIAL BALANCE
eq{1}=;
eq{2}=;
%% ADDITIONAL RELATIONS MATERIAL BALANCE
eq{3}=;
eq{4}=;
%% INDEPENDENT EQUATIONS MATERIAL BALANCE
% VC1
eq{5}=;
eq{6}=;
% VC2
eq{7}=;
eq{8}=;
%% SUMMATION OF THE MOLE OR MASS FRACTIONS FOR EACH STREAM
eq{9}=;
eq{10}=;
%% SPECIFIED VARIABLES ENERGY BALANCE
% T (temperatures)
eq{11}=T0==25;
eq{12}=;
% cp (specific heat capacities)
eq{13}=;
eq{14}=;
% h0 (standard enthalpies of formation)
eq{15}=;
eq{16}=;
% lambda (latent heat)
eq{17}=;
eq{18}=;
% q or w (heat rate or mechanical power)
eq{19}=;
eq{20}=;
%% INDEPENDENT EQUATIONS ENERGY BALANCE
% Energy equation
% VCA
eq{21}=;
% VCB
eq{22}=;
% Definition of enthalpies
eq{23}=;
eq{24}=;
```

Figura 1. *plantilla_BM.m*

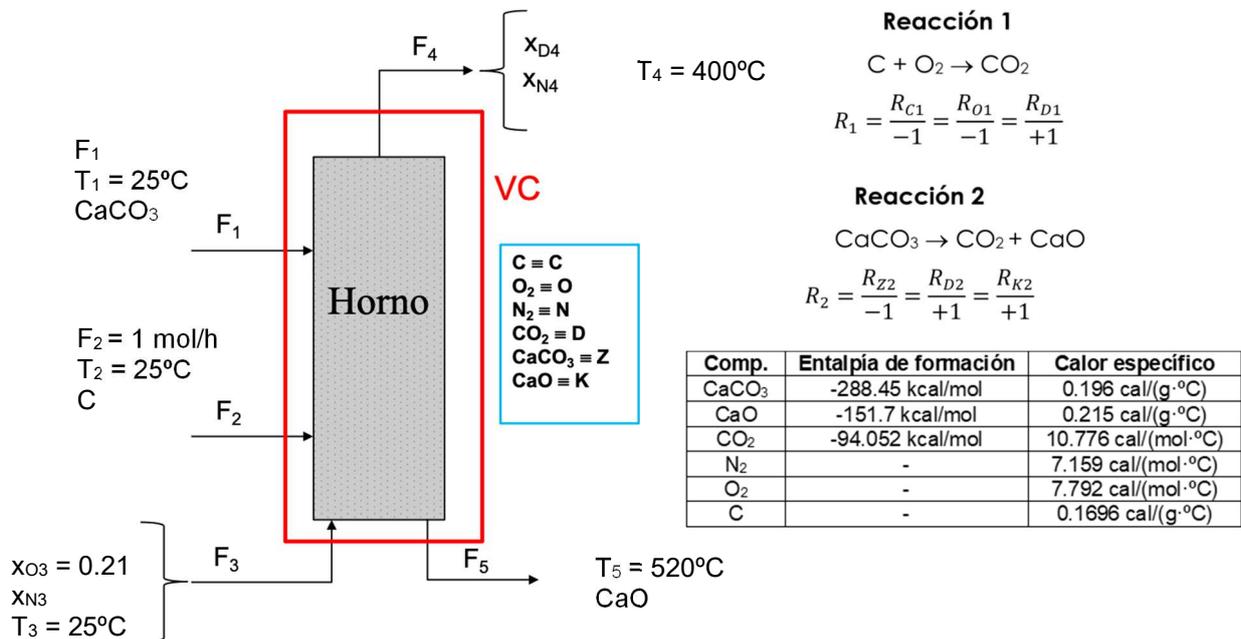


Figura 2. Diagrama de flujo del proceso a resolver [2]

• **Balance de materia:**

$$\begin{aligned} C \rightarrow & F_2 - R_1 = 0 \\ O \rightarrow & F_3 \cdot x_{O3} - R_1 = 0 \\ N \rightarrow & F_3 \cdot x_{N3} - F_4 \cdot x_{N4} = 0 \\ D \rightarrow & -F_4 \cdot x_{D4} + R_1 + R_2 = 0 \\ Z \rightarrow & F_1 - R_2 = 0 \\ K \rightarrow & -F_5 + R_2 = 0 \end{aligned}$$

• **Balance de energía:**

$$F_1 \cdot h_1 + F_2 \cdot h_2 + F_3 \cdot (x_{O3} \cdot h_{O3} + x_{N3} \cdot h_{N3}) - F_4 \cdot (x_{D4} \cdot h_{D4} + x_{N4} \cdot h_{N4}) - F_5 \cdot h_5 = 0$$

• **Definición de las entalpías:**

$$\begin{aligned} Z \rightarrow & h_1 = h_Z^0 + c_{pZ} \cdot (T_1 - T^0) \\ C \rightarrow & h_2 = c_{pC} \cdot (T_2 - T^0) \\ O \rightarrow & h_{O3} = c_{pO} \cdot (T_3 - T^0) \\ N \rightarrow & h_{N3} = c_{pN} \cdot (T_3 - T^0) \\ & h_{N4} = c_{pN} \cdot (T_4 - T^0) \\ D \rightarrow & h_{D4} = h_D^0 + c_{pD} \cdot (T_4 - T^0) \\ K \rightarrow & h_5 = h_K^0 + c_{pK} \cdot (T_5 - T^0) \end{aligned}$$

Figura 3. Ecuaciones de balance de materia y energía [2].

Si incorporáis las ecuaciones de la Figura 3 al fichero **plantilla_BM_BE.m**, y lo renombráis como **problema_horno_cal.m**, generaréis el contenido de la Figura 4. Hay que tener en



cuenta que el = de la ecuación escrita en papel se convierte en == en la plantilla correspondiente. Tenéis que añadir o quitar tantas etiquetas **eq{ }**, y renumerarlas, como sea necesario. Por otra parte, añadiréis los sumatorios de fracciones molares de los componentes presentes en las corrientes con más de un componente, así como los datos disponibles de temperaturas, calores específicos, entalpías estándar de formación, calores latentes de cambio de fase, potencias térmicas o potencias mecánicas.

Tras completar el fichero **problema_horno_cal.m** tenéis que ejecutar el fichero **steady_state_balances_solver.m**. La resolución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas planteado la realiza la función solve de la Toolbox de cálculo simbólico de Matlab.

El programa os pide el nombre del fichero con el balance de energía a resolver. En negrita y cursiva se muestra lo que debéis introducir y sólo en cursiva la información que devuelve el programa.

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

No hay que poner la extensión del fichero de Matlab con las ecuaciones cuando el programa pide el nombre de este fichero. **¿Qué pasaría si lo hiciéramos?**. Que se generaría un error. Seguidamente, el programa devuelve la siguiente información:

Please, verify that these are the variables of your problem

Columns 1 through 14

'CPC' 'CPD' 'CPK' 'CPN' 'CPO' 'CPZ' 'F1' 'F2' 'F3' 'F4' 'F5' 'R1' 'R2' 'T0'

Columns 15 through 28

'T1' 'T2' 'T3' 'T4' 'T5' 'h1' 'h2' 'h5' 'hD0' 'hD4' 'hK0' 'hN3' 'hN4' 'hO3'

Columns 29 through 33

'hZ0' 'xD4' 'xN3' 'xN4' 'xO3'

The number of variables (33) is the same as the number of equations (33)

El fichero **steady_state_balances_solver.m** muestra en pantalla automáticamente las variables de las ecuaciones en el fichero **problema_horno_cal.m**. También compara el número de variables y el de ecuaciones. **El número de ecuaciones debe ser igual al de incógnitas**, dado que siempre se resuelve un problema cuando el valor de los grados de libertad es cero. **Si esto no ocurre, ¿cuáles pueden ser las causas?**:

- Hemos cometido un error al hacer el análisis de grados de libertad del problema y debemos revisarlo.
- Nos hemos confundido al escribir las ecuaciones en **problema_horno_cal.m**, al olvidar introducir alguna ecuación o añadir alguna que no era necesaria.
- Hemos escrito erróneamente alguna variable en las ecuaciones, por lo que Matlab las considera como diferentes. Es bastante típico escribir, por equivocación, con minúscula y mayúscula una misma variable en la plantilla-guía, lo que provoca que se cuenten como variables diferentes. Por ejemplo, Matlab considera xD4 y Xd4 como dos variables diferentes cuando se trata sólo de una.

Así pues, el programa os avisa para que reviséis las variables que automáticamente muestra Matlab y que verifiquéis que son realmente las variables del problema a resolver. Deberéis



realizar todas las correcciones necesarias hasta que coincida el número de variables con el de ecuaciones y podáis avanzar al siguiente paso.

```
% 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. Also take into account the energy
% balance equations.

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

%% SPECIFIED VARIABLES MATERIAL BALANCE
eq{1}=F2==1;
eq{2}=xO3==0.21;
%% ADDITIONAL RELATIONS MATERIAL BALANCE
%% INDEPENDENT EQUATIONS MATERIAL BALANCE
% VC1
eq{3}=F2-R1==0;
eq{4}=F3*xO3-R1==0;
eq{5}=F3*xN3-F4*xN4==0;
eq{6}=-F4*xD4+R1+R2==0;
eq{7}=F1-R2==0;
eq{8}=-F5+R2==0;
%% SUMMATION OF THE MOLE OR MASS FRACTIONS FOR EACH STREAM
eq{9}=xO3+xN3==1;
eq{10}=xD4+xN4==1;
%% SPECIFIED VARIABLES ENERGY BALANCE
% T (temperatures)
eq{11}=T0==25;
eq{12}=T1==25;
eq{13}=T2==25;
eq{14}=T3==25;
eq{15}=T4==400;
eq{16}=T5==520;
% cp (specific heat capacities)
eq{17}=CPZ==0.196*100;
eq{18}=CPC==0.1696*12;
eq{19}=CPO==7.792;
eq{20}=CPN==7.159;
eq{21}=CPD==10.776;
eq{22}=CPK==0.215*56;
% h0 (standard enthalpies of formation)
eq{23}=hZ0== -288450;
eq{24}=hD0== -94052;
eq{25}=hK0== -151700;
% lambda (latent heat)
% q or w (heat rate or mechanical power)
%% INDEPENDENT EQUATIONS ENERGY BALANCE
% Energy equation
% VCA
eq{26}=F1*h1+F2*h2+F3*(xO3*hO3+xN3*hN3)-F4*(xD4*hD4+xN4*hN4)-F5*h5==0;
% Definition of enthalpies
eq{27}=h1==hZ0+CPZ*(T1-T0);
eq{28}=h2==CPC*(T2-T0);
eq{29}=hO3==CPO*(T3-T0);
eq{30}=hN3==CPN*(T3-T0);
eq{31}=hD4==hD0+CPD*(T4-T0);
eq{32}=hN4==CPN*(T4-T0);
eq{33}=h5==hK0+CPK*(T5-T0);
```

Figura 4. problema_horno_cal.m

A continuación, el programa os consulta el tipo de solución que queréis obtener, numérica o analítica. Generalmente, como en este ejemplo, obtendréis una solución numérica cuando se disponga de valores numéricos para las variables especificadas, por lo que escogeréis la opción 1. Cuando las variables especificadas no tienen un valor numérico asignado sino parámetros genéricos, se escogería la opción analítica, 2. Con ello se determinan las relaciones funcionales entre las variables desconocidas del problema y los parámetros especificados.

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

Inmediatamente el programa muestra en pantalla la solución matemática del balance de energía. Si hay varias soluciones matemáticas el programa las proporciona todas y os pedirá que elijáis la que, de todas, tiene sentido físico. En este ejemplo, en el que sólo hay una solución matemática, Matlab proporciona directamente la solución física, tal como se muestra en la Figura 5. La solución física del problema se graba automáticamente en un fichero de texto, **physical_solution.txt**.

<i>Mathematical Solutions:</i>	<i>Physical Solution:</i>
[CPC, 1272/625]	[CPC, 2.0352e+00]
[CPD, 1347/125]	[CPD, 1.0776e+01]
[CPK, 301/25]	[CPK, 1.2040e+01]
[CPN, 7159/1000]	[CPN, 7.1590e+00]
[CPO, 974/125]	[CPO, 7.7920e+00]
[CPZ, 98/5]	[CPZ, 1.9600e+01]
[F1, 22375275/14755664]	[F1, 1.5164e+00]
[F2, 1]	[F2, 1.0000e+00]
[F3, 100/21]	[F3, 4.7619e+00]
[F4, 277921025/44266992]	[F4, 6.2783e+00]
[F5, 22375275/14755664]	[F5, 1.5164e+00]
[R1, 1]	[R1, 1.0000e+00]
[R2, 22375275/14755664]	[R2, 1.5164e+00]
[T0, 25]	[T0, 2.5000e+01]
[T1, 25]	[T1, 2.5000e+01]
[T2, 25]	[T2, 2.5000e+01]
[T3, 25]	[T3, 2.5000e+01]
[T4, 400]	[T4, 4.0000e+02]
[T5, 520]	[T5, 5.2000e+02]
[h1, -288450]	[h1, -2.8845e+05]
[h2, 0]	[h2, 0.0000e+00]
[h5, -728701/5]	[h5, -1.4574e+05]
[hD0, -94052]	[hD0, -9.4052e+04]
[hD4, -90011]	[hD4, -9.0011e+04]
[hK0, -151700]	[hK0, -1.5170e+05]
[hN3, 0]	[hN3, 0.0000e+00]
[hN4, 21477/8]	[hN4, 2.6846e+03]
[hO3, 0]	[hO3, 0.0000e+00]
[hZ0, -288450]	[hZ0, -2.8845e+05]
[xD4, 111392817/277921025]	[xD4, 4.0081e-01]
[xN3, 79/100]	[xN3, 7.9000e-01]
[xN4, 166528208/277921025]	[xN4, 5.9919e-01]
[xO3, 21/100]	[xO3, 2.1000e-01]

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



Al quedar registradas en el workspace de Matlab todas las variables calculadas podéis realizar, a posteriori, los cálculos que deseéis a partir de los flujos, composiciones, velocidades de reacción, temperaturas o potencias térmicas que acabáis de calcular.

Una vez se ha resuelto el problema, podéis modificar los valores especificados de algunas variables para analizar, rápidamente, los cambios que se producirían en las variables desconocidas del problema, de acuerdo al análisis “**What if?**”. Simplemente se realizan cada vez las modificaciones en la plantilla **problema_horno_cal.m** y se ejecuta el nuevo fichero mediante el programa **steady_state_balances_solver.m**.

5 Conclusiones

Llegados a este punto, podemos establecer las siguientes conclusiones:

- Las plantillas-guía son útiles para que afrontéis con garantías el estudio de procesos complejos en los que se apliquen balances de energía.
- El uso de Matlab para resolver problemas de balances de energía en régimen estacionario facilita que os **centréis en el aspecto ingenieril del problema** y dejéis en un **segundo plano** la **dificultad** del **problema matemático** asociado.
- Aunque **no poseáis una elevada habilidad** en el manejo de Matlab.
- Las plantillas facilitan el modificar valores de variables del proceso para que veáis rápidamente el efecto sobre otras variables del mismo (análisis “**What if?**”)
- Por tanto, trabajáis vuestra **capacidad de análisis** e **interpretación de los resultados obtenidos** y de **pensamiento crítico**.

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. (2021). Resolución de un Balance de Energía Aplicado a un Horno Quemador de Cal. Artículo docente.