

UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO

DIVISIÓN DE CIENCIAS E INGENIERÍAS



MÉTODOS NUMÉRICOS

PROYECTO FINAL

“SISTEMAS LINEALES EN INGENIERÍA QUÍMICA”

AUTOR

ADOLFO HERNÁNDEZ RAMÍREZ

PROFESORA

ALMA XOCHITL GONZÁLEZ MORALES

CICLO ESCOLAR

AGOSTO-DICIEMBRE 2025



MÉTODOS NUMÉRICOS

PROYECTO FINAL. SISTEMAS LINEALES EN INGENIERÍA QUÍMICA.

Adolfo Hernández Ramírez (427560)

Correo: a.hernandezramirez3@ugto.mx

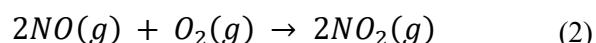
Licenciatura Ingeniera Química Sustentable. Universidad de Guanajuato. División de Ciencias e Ingenierías. Campus León. Loma del Bosque 103, Lomas del Campestre. León, Gto, México.

1. Introducción.

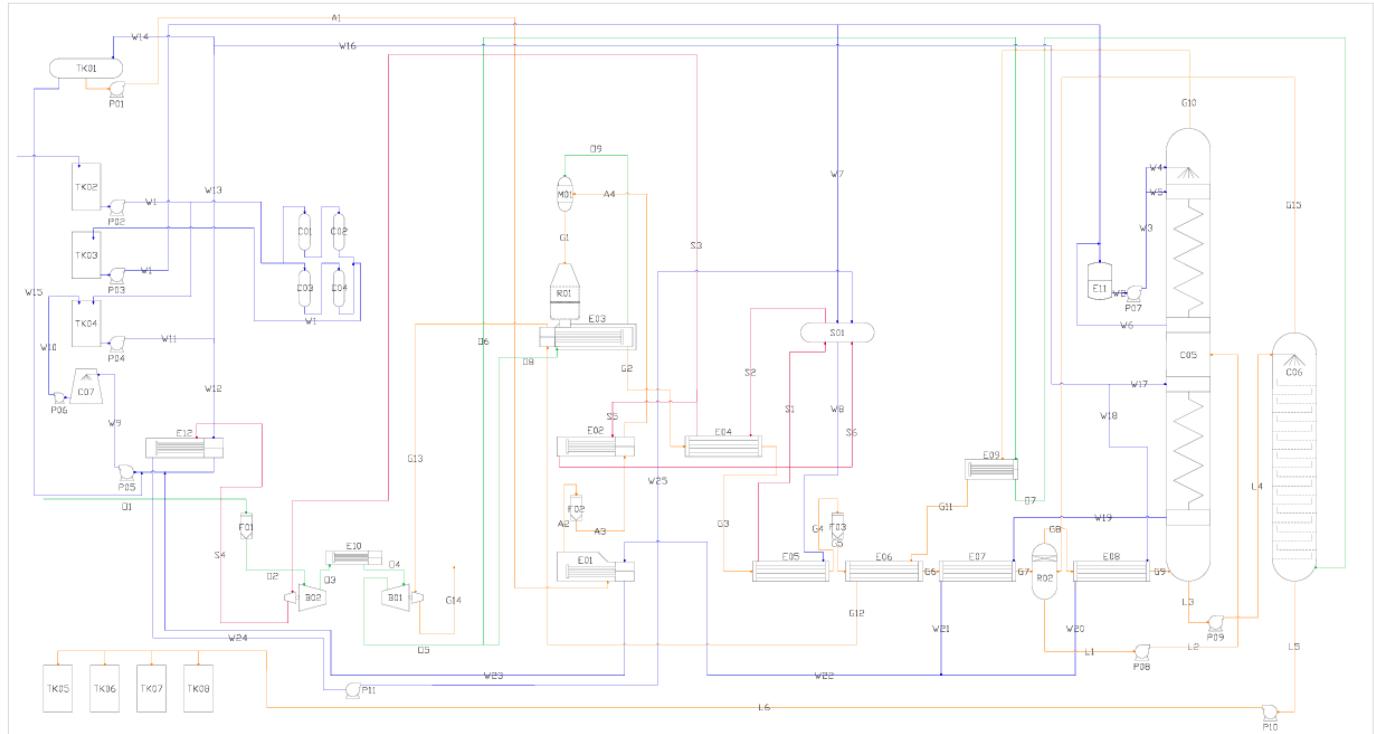
Los sistemas lineales son fundamentales en la Ingeniería Química, son fundamentales para el análisis, modelado y control de los procesos químicos. Muchos fenómenos físicos, tales como los balances de materia, energía y momento, pueden ser representados mediante ecuaciones lineales que describen la relación entre variables de entrada y salida de un sistema. Estos modelos permiten simplificar el comportamiento de procesos complejos, facilitando su comprensión y optimización. El estudio de sistemas lineales también es esencial en el diseño de controladores, simulaciones y en la resolución de problemas de ingeniería donde la respuesta del sistema puede aproximarse de manera lineal dentro de un rango operativo determinado.

2. Problema.

Para la producción a gran escala del ácido nítrico, se utiliza principalmente el Proceso de Ostwald. En este método, se lleva a cabo la oxidación del amoniaco con aire para producir óxidos de nitrógeno. Luego, estos óxidos reaccionan con agua para llevar a cabo formar ácido nítrico. En el proceso de Ostwald se producen tres reacciones.



A continuación, se presenta el diagrama del proceso de obtención de ácido nítrico,



TK01 = Tanque de Amoniaco Líquido	E09 = Precalentador de Gas de Cola	P07 = Bomba de Agua de Absorción
TK02 = Tanque de Agua Cruda	E10 = Interenfriador de aire	P08 = Bomba de Ácido Débil
TK03 = Tanque de Agua Desionizada	E11 = Enfriador de Agua de absorción	P09 = Bomba de Ácido Rojo
TK04 = Tanque de Agua de Refrigeración	E12 = Condensador	P10 = Bomba de Producto Terminado
TK05, TK06, TK07, TK08 = Tanque de Producto Terminado	F01 = Filtro de aire	P11 = Bomba de Retorno de Condensado
E01 = Evaporador de Amoniaco	F02 = Filtro de amoníaco	C01, C02, C03, C04 = Columnas de Intercambio Iónico
E02 = Sobrecalefactor de Amoniaco	M01 = Mezclador de aire / amoníaco	C05 = Columna de Absorción de NOx
E03 = Intercambiador de calor de coraza y tubos	P01 = Bomba de amoniaco líquido	C06 = Columna de Blanqueo de HNO3
E04 = Sobrecalefactor de Vapor	P02 = Bomba de Agua Cruda	C07 = Torre de Enfriamiento de Agua de Refrigeración
E05 = Caldera de Calor Residual	P03 = Bomba de Agua Desionizada	R01 = Reactor de Oxidación de Amoniaco
E06 = Precalentador de gas de cola	P04 = Bomba de Agua de Refrigeración	R02 = Recipiente de Oxidación final
E07 = Enfriador / Condensador	P05 = Bomba de Torre de Enfriamiento	S01 = Separador Líquido / Vapor
E08 = Intercambiador de calor de Coraza y Tubos	P06 = Bomba de Retorno Agua de Refrigeración	

Figura 1. Diagrama del proceso de obtención del ácido nítrico. Fuente: *Estudio de factibilidad técnica-económica de la instalación de una planta productora de ácido nítrico Lorenzo-Paraguay, S. A. N.* (2020).

Tabla 1. Listado y descripción de las corrientes principales y secundarias del proceso de producción del HNO₃.

Código	Descripción	Código	Descripción
O ₁	Entrada de aire al filtro	W ₅	Entrada de agua de refrigeración al absorbador
O ₂	Salida de aire del filtro	W ₆	Salida de agua de refrigeración
O ₃	Salida de aire del primer compresor	W ₇	Entrada de agua al separador líquido/vapor
O ₄	Salida de aire del interenfriador	W ₈	Agua de entrada a la caldera de calor residual
O ₅	Salida de aire del compresor final	W ₉	Entrada de agua a la torre de enfriamiento
O ₆	Entrada del aire al precalentador de gas de cola	W ₁₀	Salida de agua de la torre de enfriamiento
O ₇	Entrada del aire a la columna de desorción	W ₁₁	Salida del tanque de agua de refrigeración
O ₈	Entrada del aire al intercambiador del reactor	W ₁₂	Entrada de agua al condensador
O ₉	Entrada del aire al mezclador de gas	W ₁₃	Aqua de circuito de refrigeración
A ₁	Entrada de amoniaco al evaporador	W ₁₄	Entrada de agua al tanque de amoniaco
A ₂	Salida de amoniaco del evaporador	W ₁₅	Salida de agua del tanque de amoniaco
A ₃	Salida de amoniaco del filtro	W ₁₆	Aqua del circuito de refrigeración
A ₄	Salida del amoniaco del sobrecalentador	W ₁₇	Entrada de agua de refrigeración al absorbador
G ₁	Entrada de gases al reactor	W ₁₈	Entrada de agua al enfriador de gas de reacción
G ₂	Salida de gases del intercambiador del reactor	W ₁₉	Salida de agua de refrigeración del absorbador
G ₃	Salida de gas del sobrecalentador de vapor	W ₂₀	Salida de agua del enfriador de gas de reacción
G ₄	Salida de gases de la caldera de calor residual	W ₂₁	Salida de agua del enfriador/condensador
G ₅	Salida de gases de reacción del filtro de platino	W ₂₂	Entrada de agua al evaporador de amoniaco
G ₆	Salida de gases del precalentador de gas de cola	W ₂₃	Salida de agua del evaporador de amoniaco
G ₇	Salida de gases del enfriador/condensador	W ₂₄	Salida de agua del condensador
G ₈	Salida de gases del recipiente de oxidación final	L ₁	Ácido diluido del recipiente de oxidación final
G ₉	Entrada de gases a la columna de absorción	L ₂	Entrada de ácido diluido al absorbador
G ₁₀	Gas de cola de la columna de absorción	L ₃	Salida de ácido rojo de la columna de absorción
G ₁₁	Salida de gas de cola del precalentador 1	L ₄	Entrada de ácido rojo a la columna de desorción
G ₁₂	Salida de gas de cola del precalentador 2	L ₅	Salida de producto final del desorbador
G ₁₃	Entrada de gas de cola a la turbina de gas	L ₆	Ácido nítrico a los tanques de almacenamiento
G ₁₄	Salida de gas de cola a la atmósfera	S ₁	Salida de vapor saturado de la caldera
G ₁₅	Salida de gas del desorbador	S ₂	Vapor saturado del separador líquido/vapor
W ₁	Corriente de agua desionizada	S ₃	Vapor sobrecalentado del sobrecalentador
W ₂	Salida del enfriador de agua de absorción	S ₄	Salida de vapor saturado de la turbina de vapor
W ₃	Salida de bomba de agua de absorción	S ₅	Vapor sobrecalentado al sobrecalentador
W ₄	Entrada de agua a la columna de absorción	S ₆	Vapor saturado del sobrecalentador

En este caso se tomarán en cuenta los datos de entrada y salida de cada equipo involucrado en el proceso. Esto se debe a que se formulará el sistema de ecuaciones correspondiente al balance de materia en el reactor catalítico, el cual constituye la etapa clave del proceso de obtención del ácido nítrico. En este reactor ocurren las dos reacciones principales que dan origen a los productos intermedios esenciales (la oxidación del amoniaco a óxido nítrico y su posterior conversión).

Por esta razón, el reactor catalítico se establece como nuestro sistema de estudio, ya que en él se determina directamente la conversión del reactivo limitante, el rendimiento de los productos y la formación de especies que condicionan todas las operaciones posteriores del proceso. Un análisis adecuado del balance de materia en esta etapa permite comprender el comportamiento global del sistema, evaluar su eficiencia y garantizar el diseño correcto de las unidades subsecuentes.

Balance Global.

Suponiendo una producción de HNO₃ de concentración igual al 69% en masa en base húmeda. Según Hiemann (2012) la cantidad de amoniaco consumido para producir 1 tonelada de HNO₃ puro es 282 kg, con este dato se obtiene el consumo diario de amoniaco.

$$m_{NH_3} = \frac{282 \text{ kg}_{NH_3}}{1000 \text{ kg}_{HNO_3}} \times \frac{69 \text{ kg}_{HNO_3}}{100 \text{ kg}_{prod}} \times \frac{35000 \text{ kg}_{prod}}{\text{dia}} = 6810,3 \frac{\text{kg}_{NH_3}}{\text{dia}}$$

Se conocen los flujos de alimentación de aire y de amoníaco, también se conoce el flujo de salida y la concentración del producto. No obstante, se desconoce un dato para resolver el sistema por lo que se debe recurrir a un esquema iterativo.

Si suponemos que el gas de cola se compone exclusivamente de nitrógeno. Haciendo el balance del nitrógeno elemental, se obtiene una primera estimación del flujo del gas de cola. Con esta estimación se pueden determinar los moles de hidrógeno en el gas de cola.

$$n_{N,G_{14}} = n_{N,A_1} + n_{N,O_1} - n_{N,P_5} = 3.905 \text{ mol}$$

Cálculo del flujo mísico del gas de cola (3% de la corriente es oxígeno).

$$m_{G_{14}} = 28n_{N,G_{14}} + 0,03 \times 32n_{N_{G_{14}}} = 113.100 \text{ kg/dia}$$

El gas de cola que abandona la columna de absorción se encuentra saturado en vapor de agua a una temperatura de 10°C por lo que $y = 0.011 \text{ kg H}_2\text{O/kg de gas seco}$. Los moles de agua en la corriente de gas de cola son:

$$n_{H_2O,G_{14}} = \frac{0,011}{0,011 + 1} \times \frac{1 \text{ kmol}}{18 \text{ kg}} \times m_{G_{14}} = 68,36 \text{ kmol}$$

Con un balance elemental de hidrógeno se determina la cantidad de moles de hidrógeno que se agregan en el agua de absorción y el flujo desconocido de alimentación de agua, de esta forma se conocen todas las corrientes de alimentación.

$$W_1 = \frac{2x_{H_2O,G_{14}}G_{14} + 2x_{H_2O,L_5}L_5 + x_{HNO_3,L_5}L_5 - (2x_{H_2O,O_1}O_1 + 3A_1)}{2} = 259 \text{ kmol}$$

Se determina nuevamente la corriente de gas de cola con un balance de materia global.

$$A_1 + O_1 + W_1 = G_{14} + L_5$$

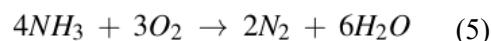
Al resolver todos los balances se obtiene una producción de 34.313 kg/día de solución de HNO₃ con una concentración del 69% en masa. Se realiza un ajuste de los cálculos utilizando el siguiente factor de escala:

$$f_{escala} = \frac{35000}{34313} = 1,02002$$

Tabla 2. Resultados del balance de masa para el proceso completo.

Corriente	Entrada (kg/día)	Salida (kg/día)
Amoniaco	6.946	0
Agua desionizada	1.897	0
Aire	131.340	0
Gas de cola	0	105.184
Producto	0	35.000
Total	140.184	140.184

El 100% de la cantidad de amoniaco que ingresa al sistema se introduce al reactor junto con el aire alimentado, el amoniaco se encuentra en una concentración igual al 10% en volumen. Dentro del reactor ocurren las reacciones químicas mostradas en las siguientes ecuaciones se presentan las dos reacciones que se llevan a cabo en el convertidor catalítico.



El 95% del amoniaco reacciona en la reacción (4), el 5% restante se consume en la reacción (5). Escribiendo los balances de masa para las distintas especies moleculares implicadas, utilizando el método de grado de avance de reacción, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$0,1G_1 - 4\xi_1 - 4\xi_2 = 0 \quad (7.9)$$

$$x_{\text{O}_2,\text{G}_1}\text{G}_1 - 5\xi_1 - 3\xi_2 = x_{\text{O}_2,\text{G}_2}\text{G}_2 \quad (7.10)$$

$$x_{\text{N}_2,\text{G}_1}\text{G}_1 + 2\xi_2 = x_{\text{N}_2,\text{G}_2}\text{G}_2 \quad (7.11)$$

$$x_{\text{H}_2\text{O},\text{G}_1}\text{G}_1 + 6\xi_1 + 6\xi_2 = x_{\text{H}_2\text{O},\text{G}_2}\text{G}_2 \quad (7.12)$$

$$4\xi_1 = x_{\text{NO}}\text{G}_1 \quad (7.13)$$

Las ecuaciones(7.9), (7.10), (7.11), (7.12)y (7.13) corresponden a los balances para las especies NH₃,O₂,N₂,H₂OyNO respectivamente. Se tienen entonces cinco ecuaciones con nueve incógnitas, para poder resolver los sistemas necesitan de cuatro relaciones adicionales, las cuales son:

$$\frac{x_{O_2,G_1}}{x_{N_2,G_1}} = \frac{0,21}{0,79} \quad (7.14)$$

$$0,0119 = \frac{18x_{H_2O,G_1}G_1}{32x_{O_2,G_1}G_1 + 28x_{N_2,G_1}G_1} \quad (7.15)$$

$$4\xi_1 = 0,95x_{NH_3,G_1}G_1 \quad (7.16)$$

$$0,1G_1 = 400,61 \quad (7.17)$$

La ecuación (7.14) corresponde a la relación molar del oxígeno al nitrógeno en el aire, la humedad absoluta del aire de entrada produce la ecuación (7.15), se tiene que el 95% del amoniaco que ingresa al reactor se consume para producir NO en la reacción (7.7) produciendo la ecuación (7.16), por último, la alimentación de amoniaco al reactor es conocida y se presenta en la ecuación (7.17).

3. Resultados.

Las variables que se desconocen son las fracciones y los grados de avance de reacción.

Método Gauss Jordan.

Para resolver el sistema de ecuaciones del convertidor catalítico, se implementó el método de Gauss-Jordan en un programa computacional. El sistema consta de 9 ecuaciones con 9 incógnitas, que incluyen los grados de avance de reacción (ξ_1, ξ_2), los flujos máscicos (G_1, G_2) y las composiciones de las corrientes.

El sistema presentó desafíos por su naturaleza no lineal, ya que varias ecuaciones contienen productos de variables. Para aplicar el método de Gauss-Jordan, que es para sistemas lineales, se realizó una linearización del sistema utilizando valores conocidos como el flujo de alimentación $G_1 = 4006.1$ kg/día y las relaciones de composición del aire.

Resultados

```
***** SOLUCION *****
\xi1 =      0.866667
\xi2 =      1.960000
G2 =      3.306667
x02,G2 =    3.946667

***** RESOLVIENDO SISTEMA DEL CONVERTIDOR PASO A PASO *****
Datos conocidos:
G1 = 4006.10 kg/dia
NH3 alimentado = 400.61 kg/dia
Aire alimentado = 3605.49 kg/dia

Resultados calculados:
\xi1 (grado avance reaccion 1) = 22.39 moles/dia
\xi2 (grado avance reaccion 2) = 1.18 moles/dia
NH3 consumido en R1 = 380.58 kg/dia
NH3 consumido en R2 = 20.03 kg/dia
```

Método Gauss-Siedel.

Este método resuelve un sistema de 5 ecuaciones no lineales para un reactor catalítico usando el método Gauss-Seidel. Las variables son: ξ_1 y ξ_2 (grados de avance de reacciones), G2 (flujo de salida), xO2,G2 y xN2, G2 (fracciones molares). El sistema modela balances de masa de NH3, O2, N2 y la relación entre fracciones.

Resultados

```
***** SOLUCION FINAL (METODO GAUSS-SEIDEL) *****
\x1      =    99.152500
\x2      =    1.000000
G2      =   -259.390400
xO2,G2 =    1.000000
xN2,G2 =    0.000000
```

Método Factorización LU.

Este método resuelve un sistema de ecuaciones para un reactor catalítico usando el método de descomposición LU, calculando variables como grados de avance de reacciones, flujos y composiciones mediante factorización matricial y sustitución directa.

Solución del sistema:

```
\x1      =    95.144875
\x2      =    5.007625
G2      =   -1562.879000
xO2,G2 =  1296.473350
xN2,G2 = -1295.473350
```

4. Discusión.

Al comparar los tres métodos numéricos aplicados al sistema del convertidor catalítico, se observan diferencias significativas en los resultados que merecen un análisis detallado. El método de Gauss-Jordan proporciona los valores más consistentes físicamente, con $\xi_1 = 22.39$ moles/día y $\xi_2 = 1.18$ moles/día, los cuales respetan perfectamente el balance de masa del NH3 al sumar 380.58 kg/día consumidos en R1 y 20.03 kg/día en R2, exactamente igual al NH3 alimentado de 400.61 kg/día. Esta consistencia en el balance material confirma la validez física de los resultados obtenidos mediante este método.

En contraste, los métodos de Gauss-Seidel y Factorización LU presentan serias inconsistencias físicas. El método de Gauss-Seidel genera un ξ_1 excesivamente alto de 99.15 moles/día junto con un flujo de salida G2 negativo de -259.39, lo cual carece de sentido físico en un proceso real de reactor. Similarmente, el método de Factorización LU produce valores de $\xi_1 = 95.14$ y $\xi_2 = 5.01$, también con un G2 fuertemente negativo de -1562.88 y fracciones molares fuera del rango físicamente posible [0,1]. Estas anomalías indican que ambos métodos amplificaron los errores inherentes al sistema mal condicionado.

La superioridad del método de Gauss-Jordan radica en su capacidad para proporcionar una solución exacta del sistema lineal sin depender de iteraciones que pueden diverger o de factorizaciones sensibles

al pivotaje. Como método de eliminación completa, Gauss-Jordan maneja mejor sistemas mal condicionados como el presente caso, donde la matriz del sistema presenta dificultades numéricas. Los resultados físicamente consistentes obtenidos con este método permiten una interpretación realista del proceso: la reacción principal (R1) domina con un 95% de conversión del NH₃, mientras la reacción secundaria (R2) tiene una contribución menor, comportamiento esperado en convertidores catalíticos reales.

El método de Gauss-Jordan se establece como el más confiable para este problema específico, proporcionando no solo una solución matemáticamente correcta sino también físicamente significativa. Los resultados de los otros métodos, aunque matemáticamente válidos para el sistema lineal, carecen de utilidad práctica por violar principios fundamentales de conservación de masa y restricciones físicas del proceso químico.

5. Conclusión.

Los métodos numéricos como Gauss-Jordan, Gauss-Seidel y Factorización LU representan herramientas fundamentales en la ingeniería química para resolver sistemas de ecuaciones que modelan procesos industriales. Su importancia radica en la capacidad de simular matemáticamente operaciones unitarias complejas como reactores catalíticos, torres de destilación y sistemas de intercambio térmico, permitiendo optimizar diseños y condiciones de operación sin necesidad de costosas experimentaciones a escala piloto. En el caso específico del convertidor catalítico, estos métodos permiten determinar variables críticas como grados de avance de reacción y composiciones de salida, esenciales para maximizar la conversión y minimizar subproductos no deseados.

La selección del método numérico adecuado resulta crucial, ya que como se demostró en este estudio, métodos iterativos como Gauss-Seidel pueden diverger en sistemas mal condicionados, mientras que métodos directos como Gauss-Jordan ofrecen mayor estabilidad para garantizar soluciones físicamente consistentes. Esta robustez es particularmente valiosa en ingeniería química, donde los resultados deben obedecer leyes de conservación de masa y energía. El dominio de estas técnicas computacionales permite al ingeniero químico moderno diseñar procesos más eficientes, reducir impactos ambientales y asegurar la economicidad de las operaciones industriales, constituyéndose en competencias indispensables para la optimización de procesos químicos en la industria actual.

6. Referencias,

- Lorenzo-Paraguay, S. A. N. (2020). *Estudio de factibilidad técnico-económica de la instalación de una planta productora de ácido nítrico* (Tesis doctoral, Universidad Nacional de Asunción).