

BALANCEO DE ECUACIONES QUIMICAS EN PROCESOS INDUSTRIALES

Integrantes	Código
Bracamonte Perez Reyes, Bracamonte	201820027
Guerrero Alejos, Jeremy	201820024
Mantovani, Diego	
Arias Corzo, Valeria	201810105

Sección:

2

Profesor:

Jabo ,Rosa

2019-1

ÍNDICE

Tabla de contenido

1. RESUMEN.....	3
2. INTRODUCCIÓN.....	3
3. OBJETIVOS.....	3
4. MARCO TEORICO	4
<i>4.1 Parte matemática.....</i>	<i>4</i>
<i>4.2 Parte química</i>	<i>5</i>
5. METODOLOGIA.....	6
<i>5.1 Identificación del proceso para generar urea</i>	<i>6</i>
<i>5.2 Reacciones químicas a balancear.....</i>	<i>7</i>
<i>5.3 Planteamiento de sistema de ecuaciones lineales con la matriz de la ecuación química.....</i>	<i>7</i>
6. RESULTADOS.....	8
<i>6.1 Pequeña muestra del código.....</i>	<i>8</i>
<i>6.2 Muestra de interfaz de Scilab.....</i>	<i>8</i>
7. DISCUCION	9
8. CONCLUSIÓN.....	9
9. BIBLIOGRAFIA	9

1. RESUMEN

Este proyecto busca generar un código hecho en Scilab el cual pueda resolver el balanceo de ecuaciones químicas. Nos enfocamos en la ecuación química para la producción de amoníaco, la cual es de suma importancia en los procesos industriales, de ahí el motivo para enfocarnos en este material en específico. Además, presentamos el desarrollo del proceso algebraico dentro del programa en Scilab. Finalmente presentamos las conclusiones a las que pudimos llegar luego de desarrollar este método, describiendo las ventajas y sus limitaciones que encontramos.

2. INTRODUCCIÓN

Los procesos industriales, en los que participa un ingeniero químico, es necesario hallar los cálculos de los coeficientes estequiométricos de las reacciones químicas para obtener la menor pérdida posible y hacer más eficiente el proceso químico. Muchas veces estos cálculos se pueden volver excesivamente largos y pesados. Esto a causa del volumen de las reacciones químicas, la cantidad de los reactantes y productos de estos. Es por ello que se busca reducir esta carga operativa a los ingenieros y usar la capacidad de las computadoras de realizar operaciones sucesivas rápidamente para poder acelerar este proceso. En otras palabras, el ingeniero hace el proceso analítico del proceso químico, mientras que la máquina, gracias a un algoritmo, se ocupa del proceso operativo. Pero ¿Qué algoritmo podríamos usar para resolver estos cálculos estequiométricos?

¿Sobre qué principios o métodos matemático podemos basarnos para producir este algoritmo?

3. OBJETIVOS

Nosotros nos enfocamos en realizar un algoritmo capaz de realizar la parte operativa del proceso de balanceo de ecuaciones químicas.

Además, este algoritmo lo plasmaremos dentro del software de Scilab puesto que este permite operar fácilmente matrices. El programa que haremos permitirá balancear ecuaciones químicas por el método algebraico. De este modo, optimizar el proceso de obtención de un producto industrialmente, en este caso el amoníaco.

4. MARCO TEORICO

4.1 Parte matemática

¿Que es un sistema de ecuaciones lineales?

Una ecuación lineal en las variables x_1, \dots, x_n es una ecuación que puede escribirse de la forma:

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n = b$$

Fig 1. Representación de ecuación lineal

donde b y los coeficientes a_1, \dots, a_n son números reales o complejos, por lo general conocidos. El subíndice n puede ser cualquier entero positivo. [1]

Un sistema de ecuaciones lineales consta de un conjunto de ecuaciones con 2 o más incógnitas. Para hallar el valor de cada incógnita es de esperar que el número de incógnitas sea el mismo que el número de ecuaciones. Sin embargo, hay que resaltar que no todos los sistemas de ecuaciones lineales tienen solución.

¿Cómo se representa un sistema de ecuaciones lineales?

La información esencial de un sistema lineal puede reescribirse de una manera compacta. De esta manera facilita su manipulación y la capacidad de extraer soluciones a partir de operaciones esenciales. Este arreglo rectangular se llama matriz:

$$\begin{array}{rcl} x_1 - 2x_2 + x_3 & = & 0 \\ 2x_2 - 8x_3 & = & 8 \\ -4x_1 + 5x_2 + 9x_3 & = & -9 \end{array} \longrightarrow \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 0 & 2 & -8 \\ -4 & 5 & 9 \end{bmatrix} \quad [2]$$

Fig 2. Representación de extracción de matriz de los coeficientes de las ecuaciones

¿Cómo se clasifican los sistemas de ecuaciones lineales?

Los sistemas de ecuaciones lineales se pueden en 2 tipos:

Incompatible. - cuando no tiene solución.

Compatible. - cuando tiene solución.

Además, existe un subgrupo compatible en donde se pueden clasificar en:

Determinado. - cuando la solución es única

Incompatible. - cuando la solución es infinita.

¿Cómo se resuelve un sistema de ecuaciones lineales?

Hay diferentes maneras de encontrar las soluciones de un sistema de ecuaciones lineales, dependiendo de las características del sistema se puede optar por uno o por otro. Los métodos de solución son los siguientes: sustitución, igualación, reducción, método gráfico y método de Gauss, siendo este último el que se tratará en el presente proyecto.

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} 2 & 2 & -6 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 3 \\ 3 & 3 & -2 \end{pmatrix} \xrightarrow{F_1 \leftrightarrow F_3} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 6 \\ 3 & 3 & -2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{matrix} F_2 \rightarrow F_2 - 2F_1 \\ F_3 \rightarrow F_3 - 2F_1 \\ F_4 \rightarrow F_4 - 3F_1 \end{matrix}} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 5 & -6 \\ 0 & 6 & -12 \\ 0 & 9 & -11 \end{pmatrix} \rightarrow \\
 & \xrightarrow{F_3 \rightarrow \frac{1}{6}F_3} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 5 & -6 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 9 & -11 \end{pmatrix} \xrightarrow{F_2 \leftrightarrow F_3} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 5 & -6 \\ 0 & 9 & -11 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{matrix} F_3 \rightarrow F_3 - 5F_2 \\ F_4 \rightarrow F_4 - 9F_2 \end{matrix}} \\
 & \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 7 \end{pmatrix} \xrightarrow{F_4 \rightarrow F_4 - \frac{7}{4}F_3} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} 3 \text{ filas no nulas} \\ \text{rg}(A) = 3 \end{matrix}
 \end{aligned}$$

[3]

Fig 3. Representación de método de Gauss

4.2 Parte química

Importancia de amoniaco en la industria

NH₃, es un compuesto de tres átomos el cual es la base inorgánica más simple y una fuente importante de nitrógeno para muchas aplicaciones [4]. Este compuesto es la base de varias reacciones químicas, tanto orgánicas como orgánicas, gracias a las propiedades electroquímicas propias de esta molécula. Algunas de las aplicaciones de esta molécula dentro de la industria se pueden encontrar en:

- La industrial de refrigeration:

“It is well known that the ammonia-water mixture was the working pair of the first absorption refrigeration system patented by Ferdinand Carre in 1860...the specific properties of this mixture are responsible for its continuous use in refrigeration and for its extension to the air conditioning and heat pump fields.” [5]

- La industrial de fertilizantes:

“Nitrogen fertilization is a major component of the cost of agricultural production, due to the high cost and low efficiency of fertilizers... The integration of new technologies in urea fertilization can reduce N losses by volatilization. These losses were most reduced when using nitrate and ammonium sulfate.” [6]

Reacción Habert Bosch para la industrialización de procesos

En los primeros años del siglo veintes, existían una gran demanda de amoníaco para ser usado en la síntesis de fertilizantes y explosivos. Por esta razón, muchos científicos se dedicaron a estudiar la manera de sintetizar amoníaco a partir del nitrógeno ambiental, hasta que Haber dio con la solución, y Bosch ideó la manera de sintetizar amoníaco a gran escala. Ellos comercializaron este proceso en el año 1910 [7].

A partir de este suceso nace el proceso de Haber Bosch, el cual consiste en incitar la reacción entre nitrógeno e hidrogeno gaseosos, para la formación de NH_3 . Este proceso tiene gran importancia en diversas industrias a nivel mundial, ya que es el más usado para obtener amoniaco en grandes cantidades.

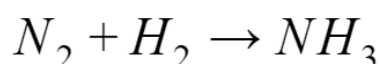
5. METODOLOGIA

Como ya se sabe el problema a resolver es la necesidad de ese algoritmo, el cual se va a modelar a partir de un método algebraico dado por sistemas de ecuaciones lineales. Ahora se va a describir las ecuaciones químicas a balancear y modelar.

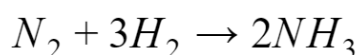
5.1 Identificación del proceso para generar urea

Obtención de amoniaco:

Reacción sin balancear:



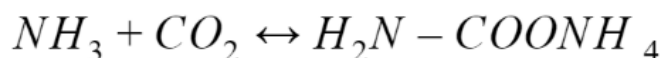
Reacción balanceada:



Obtención de urea:

1. Primera reacción (obtención de carbamato, producto intermedio):

Reacción sin balancear:

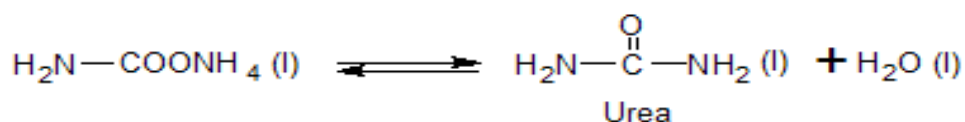


Reacción balanceada:



2. Segunda reacción:

Reacción sin balancear= Reacción balanceada



5.2 Reacciones químicas a balancear

1	$NH_3 + CO_2 \leftrightarrow H_2N - COONH_4$
2	$H_2N - COONH_4 (l) \rightleftharpoons H_2N - \overset{\overset{O}{\parallel}}{C} - NH_2 (l) + H_2O (l)$ <p style="text-align: center;">Urea</p>

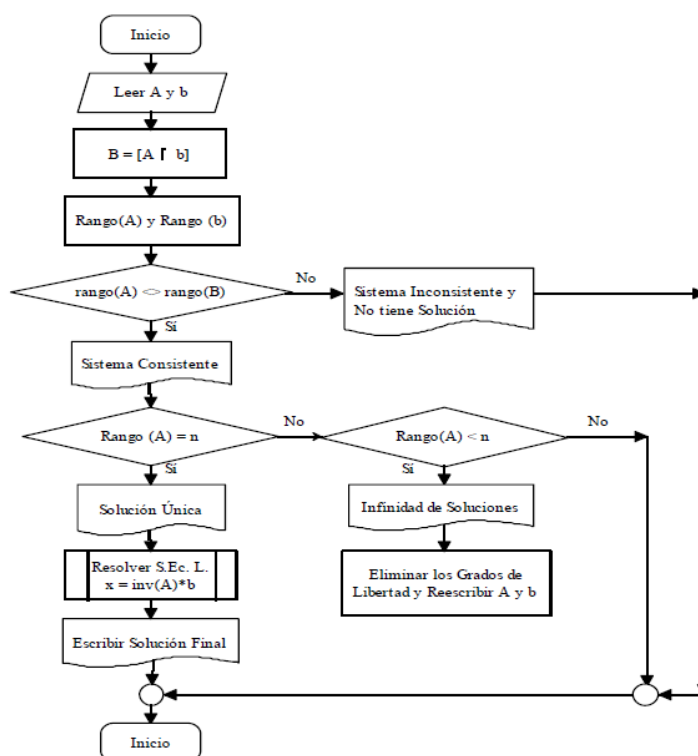
Tabla 1. Lista de ecuaciones químicas a balancear

5.3 Planteamiento de sistema de ecuaciones lineales con la matriz de la ecuación química

Reacción 1 A B C $NH_3 + CO_2 \leftrightarrow H_2N - COONH_4$						
compuestos	NH ₃	CO ₂	H ₂ N - COONH ₄	X	=	Valor Asignado
átomo	N:	1	0	-2	A 0 B 0 C	$C = n \in \mathbb{N} - \{0\}$
	H:	3	0	-6		
	C:	0	1	-1		
	O:	0	2	-2		
A*x=b					b	
A						

Tabla 2. Matriz de los coeficientes de la reacción química

5.4 Diagrama de flujo



[8]

Fig 4. Algoritmo del programa

6. RESULTADOS

Pequeña muestra del código

```
function [fin]=balanceo()
//llamado de balanceo
printf('INTRODUCE LOS REACTIVOS \n\n')
n="sí"
CAD=""
while (n~="no")
    S=input('Introduzca reactivo: ','s')
    CAD=char(CAD,S)
    n=input("¿desea agregar otro reactivo? (reponda si o no): ','s')
    if (n~="no")
        CAD=char(CAD,"+")
    end
end
CAD=char(CAD,"--->")
n="sí"
while (n~="no")
    S=input('Introduzca producto: ','s')
    CAD=char(CAD,S)
    n=input("¿desea agregar otro producto?(reponda si o no): ','s')
    if (n~="no")
        CAD=char(CAD,"+")
    end
end

for k=2:(size(CAD)(1))//Se muestra la reacción a balancear
    printf(CAD(k))
end
#####
//Se pide los valores de la cantidad de átomos
printf("\n\nIntroduzca en forma de matriz el número de átomos por reactivo y luego del producto ")
printf("\nEjemplo:\n")
printf("Para: HNO2 + KMnO4 + H2SO4 ---> HNO3 + MnSO4 + K2SO4 + H2O\n")
printf("Matriz del reactivo\n")
disp([1 0 2 ;1 0 0;2 4 4;0 1 0;0 1 0])
printf("Matriz del producto\n")
disp([1 0 0 2;1 0 0 0;3 4 4 1;0 0 2 0;0 1 0 0;0 1 1 0])
REAC=input("Matriz del reactivo: ")
PROD=input("Matriz del producto: ")
#####
printf('Balanceamos la ecuación para obtener Amoniaco\n');

A=[REAC -PROD]
b=zeros(size([A])(1),1)
//Comprobamos por Roché Forbenius
[Aa,rA,rAb,n]=forbenius(A,b)
n1=n
printf('\nEl rango de la Matriz A es: %d\n',rA);
printf('\nEl rango de la Matriz aumentada Aa es: %d\n',rAb );
printf('\nEl el numero de variables n es: %d\n',n1 )
if (rA ~= rAb) then
    printf('El sistema no tiene solucion ');
elseif (rA ==n1) then
    printf('El sistema tiene solucion unica \n');
else
    printf('El sistema tiene infinitas soluciones ');
end
[r,c]=size(PROD)
//Si tiene infinitas soluciones le quitamos grados de libertad
while(rA<n)
    y=input('Asigne una variable al ultimo término del balnceo para eliminar grados de libertad: ')
    b=-y*(A(:,(size([A])(2))))
    A=A(:,(1:(size([A])(2))-1))
    [Aa,rA,rAb,n]=forbenius(A,b)
end
```



```

Matriz del reactivo: [1 0;3 0;0 1;0 2]

Matriz del producto: [2;6;1;2]

Balanceamos la ecuación para obtener Amoniaco
nEl rango de la Matriz A es: 2
nEl rango de la Matriz aumentada Aa es: 2
El el numero de variables n es: 3
El sistema tiene infinitas soluciones
Asigne una variable al ultimo término del balnceo para eliminar grados de libertad: 1

nEl rango de la Matriz A es: 2
nEl rango de la Matriz aumentada Aa es: 2
El el numero de variables n es: 2
El sistema tiene solucion unica

La reacción balanceada es:
2NH3      +      1CO2      --->      1H2N-COONH4
ans  =

fin

```

7. DISCUSION

Comentar acerca de las ventajas y limitaciones del método aplicado para un programa

La ventaja principal que ofrece este método es la rapidez con la que puede determinar los valores de los coeficientes asociada a cada molécula. Se puede balancear las ecuaciones en pocos pasos, simplemente copiando los reactantes y los productos con sus valores propios. Naturalmente esta herramienta puede acelerar el proceso de balanceo para procesos industriales.

Aunque también se puede observar que este método tiene una limitación significativa, y esta radica en que no es posible hacer el balanceo de ecuaciones con coeficientes fraccionarios.

8. CONCLUSIÓN

Finalmente, podemos concluir que haciendo un código en Scilab usando como base métodos matemáticos simples, como es la obtención de la matriz de coeficientes de un sistema de ecuaciones, podemos atacar problemas mayores. Los cuales no necesariamente requieren demasiado análisis, pero sí el poder computacional de una máquina. Gracias a un algoritmo correcto es posible optimizar el tiempo de procesos industriales en lo que intervienen muchos reactantes y productos.

9. BIBLIOGRAFIA

[1]D. Lay, S. Lay and J. McDonald, *Algebra lineal y sus aplicaciones*. Ciudad de México: Pearson Educación, 2016, p. 2.

[2]D. Lay, S. Lay and J. McDonald, *Algebra lineal y sus aplicaciones*. Ciudad de México: Pearson Educación, 2016, p. 4.

- [3]C. Gauss, "Cálculo del Rango de una Matriz - Método de Gauss", *Lagrangianos*, 2019. [Online]. Available: <http://lagrangianos.blogspot.com/2015/08/calculo-del-rango-de-una-matriz-metodo.html>. [Accessed: 04- May- 2019].
- [4]F. Amoníaco, "Fórmula Del Amoniaco - Propiedades Físicas y Químicas", *amoniaco.org*, 2019. [Online]. Available: <https://www.amoniaco.org/formula/>. [Accessed: 04- May- 2019].
- [5] J. Fernandez-Seara and J. Sieres, "The importance of the ammonia purification process in ammonia-water absorption systems", 2006.
- [6] M. F. L. and L. P. H. C., "AMMONIA VOLATILIZATION FROM COATED UREA FORMS", 2013.
- [7]"Proceso de Haber | La Guía de Química", *Quimica.laguia2000.com*, 2019. [Online]. Available: <https://quimica.laguia2000.com/reacciones-quimicas/proceso-de-haber>. [Accessed: 04- May- 2019].
- [8]A. Regalado-Méndez, F. K. Delgado-Vidal, R. Martínez-López and E. Peralta-Reyes, "Balanceo de Ecuaciones Químicas Integrando las Asignaturas de Química General, Álgebra Lineal y Computación: Un Enfoque de Aprendizaje Activo", 2014.