

Ejemplo de balance macroscópico de materia (BOF)

El proceso de horno básico de oxígeno (BOF) para la producción de acero es posible debido a que el calor liberado durante las reacciones de oxidación es suficiente para mantener fundido el arrabio, siendo necesario en muchas ocasiones adicionar chatarra para controlar la temperatura del reactor. Al final del proceso se obtiene acero primario que posteriormente será refinado para ser empleado en la producción de productos semi-terminados del mismo.

Al horno además de la chatarra y el arrabio, se le adiciona un escorificante que permite obtener una escoria estable y con la basicidad requerida para no atacar el refractario de trabajo del horno.

La Figura 1 presenta un esquema de los principales suministros y productos durante la operación del horno, información disponible para la producción de una tonelada métrica de acero se presenta en la Tabla 1.

El aire se incluye debido a que el análisis químico de los gases producidos se realiza en la campana de extracción, donde no es posible despreciar dicho aporte a la mezcla de gases.

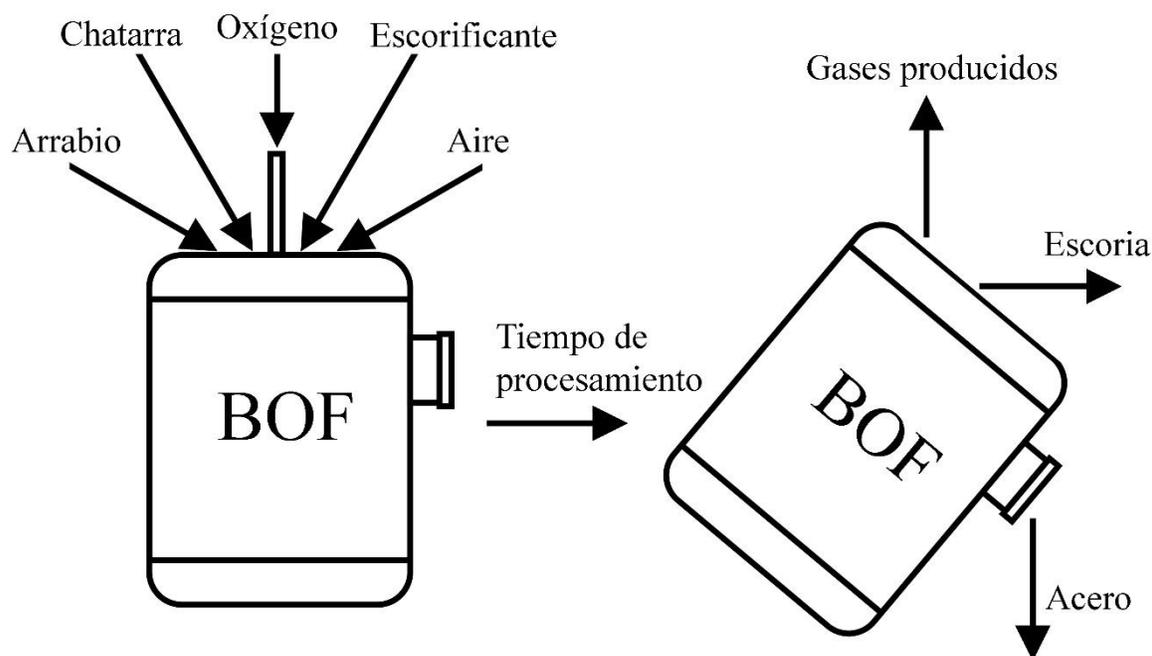


Figura 1.- Esquema de los insumos y productos del proceso de aceración mediante un horno básico de oxígeno (BOF).

Realice un balance de materia para el proceso de producción de acero primario en el horno BOF, con los datos proporcionados en la Tabla 1, esto es, obtenga la masa y composición química de todas las corrientes involucradas, considere que es un proceso por lotes (batch).

Tabla 1.- Información para la producción de una tonelada métrica de acero mediante un horno BOF.

Entradas				
Corriente	Masa (kg)	Componente	% másico	% molar
Arrabio	750	Si	1.5	----
		C	4.1	----
		Fe	----	----
Chatarra	¿?	Si	0.354	----
		C	0.646	----
		Fe	----	----
Escorificante	¿?	CaO	100	----
Oxígeno	¿?	O ₂	----	100
Aire	¿?	O ₂	----	21
		N ₂	----	79
Salidas				
Corriente	Masa (kg)	Componente	% másico	% molar
Acero	1000	Si	0.05	----
		C	0.05	----
		Fe	----	----
Escoria	¿?	FeO	35.1	----
		CaO	50.0	----
		SiO ₂	14.9	----
Gases producidos	¿?	O ₂	----	3.1
		N ₂	----	62.5
		CO ₂	----	34.4

Para realizar el balance comencemos por definir si el mismo se realizará en unidades másicas o molares. Dado que el proceso se basa principalmente en materiales sólidos y líquidos conviene que el mismo se realice en unidades másicas, por lo que es conveniente convertir la composición química de los gases que participan en el proceso de porcentaje molar a porcentaje másico. Para realizar la conversión, si bien se puede emplear la relación que existe entre fracción masa y fracción mol, podemos realizar la misma estableciendo una base de cálculo, por ejemplo 100 moles de cada gas, que si bien no será la cantidad final que se considerará en el balance, no afectará el tratamiento que se le dará a la composición química.

Obviando el oxígeno ya que tiene una composición de 100 % de O₂ tanto en porcentaje másico como molar, la conversión de la composición química del aire y de los gases producidos se puede realizar como sigue:

Aire:

Dado que nuestra base de cálculo es de 100 moles.

$$100 \text{ mol aire} \left(\frac{21 \text{ mol } O_2}{100 \text{ mol aire}} \right) \left(\frac{32 \text{ g } O_2}{1 \text{ mol } O_2} \right) = 672 \text{ g } O_2$$

$$100 \text{ mol aire} \left(\frac{79 \text{ mol } N_2}{100 \text{ mol aire}} \right) \left(\frac{28 \text{ g } N_2}{1 \text{ mol } N_2} \right) = 2212 \text{ g } N_2$$

Por lo que:

$$\text{Masa de aire} = 2884 \text{ g}$$

Con lo cual se puede calcular la fracción masa tanto del oxígeno como del nitrógeno en el mismo.

$$W_{O_2,aire} = \frac{672 \text{ g } O_2}{2884 \text{ g aire}} = 0.2330$$

$$W_{N_2,aire} = \frac{2212 \text{ g } N_2}{2884 \text{ g aire}} = 0.7670$$

Gases producidos:

Realizamos el proceso de manera similar a lo que se hizo en el caos del aire.

$$100 \text{ mol gases} \left(\frac{3.1 \text{ mol } O_2}{100 \text{ mol gases}} \right) \left(\frac{32 \text{ g } O_2}{1 \text{ mol } O_2} \right) = 99.2 \text{ g } O_2$$

$$100 \text{ mol gases} \left(\frac{62.5 \text{ mol } N_2}{100 \text{ mol gases}} \right) \left(\frac{28 \text{ g } N_2}{1 \text{ mol } N_2} \right) = 1750.0 \text{ g } N_2$$

$$100 \text{ mol gases} \left(\frac{34.4 \text{ mol } CO_2}{100 \text{ mol gases}} \right) \left(\frac{44 \text{ g } CO_2}{1 \text{ mol } CO_2} \right) = 1513.6 \text{ g } CO_2$$

$$\text{Masa de gases producidos} = 3362.8 \text{ g}$$

$$W_{O_2,gases} = \frac{99.2 \text{ g } O_2}{3362.8 \text{ g gases}} = 0.0295$$

$$W_{N_2,gases} = \frac{1750.0 \text{ g } N_2}{3362.8 \text{ g gases}} = 0.5204$$

$$W_{CO_2,gases} = \frac{1513.6 \text{ g } CO_2}{3362.8 \text{ g gases}} = 0.4501$$

Una vez calculados estos datos podemos realizar un esquema del proceso con todos los datos conocidos, tal como el que se muestra en la Figura 2.

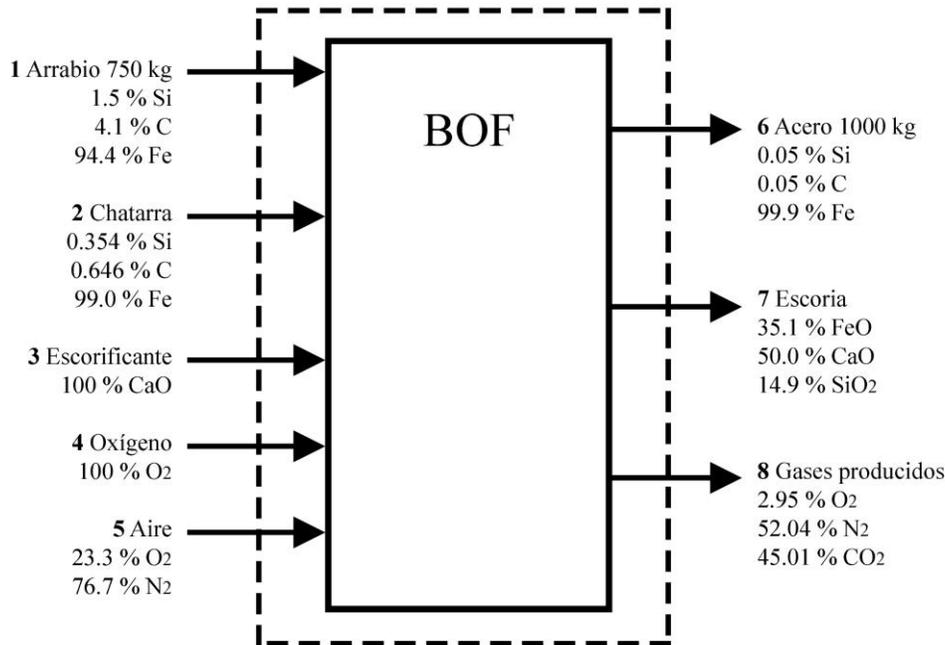


Figura 2.- Esquema de todas las corrientes del proceso BOF consideradas en el balance con los datos conocidos de las mismas.

Ahora que hemos recopilado todos los datos conocidos se pueden comenzar a escribir las ecuaciones de balance, para este ejemplo en particular realizaremos el balance de una forma ligeramente distinta. Hasta este momento hemos realizado el balance escribiendo una ecuación por cada componente del sistema, es decir, en este caso además de la ecuación de balance general, se podría realizar una ecuación de balance para el Si, C, Fe, CaO, O₂, N₂, FeO, SiO₂ y el CO₂. Sin embargo, también es posible realizar el balance por cada elemento que intervenga en el proceso, realizando una ecuación para balancear cada uno de ellos además de la ecuación de balance general, en este caso además del balance general, se pueden realizar ecuaciones de balance para el Si, C, Fe, Ca, O y N.

Es importante señalar que la principal diferencia entre ambos balances es la consideración de los términos fuentes, en el caso del balance por componente esta información es importante para realizarlo y con los resultados se podría analizar el aporte de los mismos. En el caso del balance por elemento no se consideran los términos fuente, y es necesario calcularlos al finalizar el balance para obtener información de los mismos.

Cualquiera de las dos aproximaciones lleva a la misma solución, la mayoría de las veces el empleo de uno u otro depende de la información que tengamos del proceso para elegir la más óptima, en este caso, al no contar con información de los términos fuente, realizar un balance por elemento es una buena aproximación, por lo que realizaremos el balance de esa manera.

Balance general:

$$\begin{aligned}
 E - S + G &= Ac \\
 E - S &= 0 \\
 m_1 + m_2 + m_3 + m_4 + m_5 - m_6 - m_7 - m_8 &= 0 \\
 750 \text{ kg} + m_2 + m_3 + m_4 + m_5 - 1000 \text{ kg} - m_7 - m_8 &= 0 \\
 m_2 + m_3 + m_4 + m_5 - m_7 - m_8 &= 250 \text{ kg}
 \end{aligned}$$

Si:

$$\begin{aligned}
 E - S + G &= Ac \\
 E - S &= 0
 \end{aligned}$$

Al realizar el balance por elemento es necesario que en la ecuación no solo se considere el elemento balanceado, sino también la manera en la que se presenta en cada corriente considerada, es decir, en forma de un elemento o de un compuesto.

$$m_{Si,Si,1} + m_{Si,Si,2} - m_{Si,Si,6} - m_{Si,SiO_2,7} = 0$$

Esto se puede reescribir de la siguiente manera:

$$W_{Si,Si} W_{Si,1} m_1 + W_{Si,Si} W_{Si,2} m_2 - W_{Si,Si} W_{Si,6} m_6 - W_{Si,SiO_2} W_{SiO_2,7} m_7 = 0$$

Ya que:

$$W_{Si,SiO_2} W_{SiO_2,7} m_7 = \left(\frac{m_{Si}}{m_{SiO_2}} \right) \left(\frac{m_{SiO_2}}{m_7} \right) m_7 = m_{Si,SiO_2,7}$$

Aquí existe un dato que no conocemos pero que podemos calcular fácilmente, que es la fracción masa de Si en el SiO₂, la cual calcularemos considerando una base de cálculo, que pueden ser 100 g de SiO₂. Aprovecharemos también para calcular la fracción masa de O en el mismo.

$$\begin{aligned}
 100 \text{ g SiO}_2 \left(\frac{1 \text{ mol SiO}_2}{60 \text{ g SiO}_2} \right) \left(\frac{1 \text{ mol Si}}{1 \text{ mol SiO}_2} \right) \left(\frac{28 \text{ g Si}}{1 \text{ mol Si}} \right) &= 46.67 \text{ g Si} \\
 100 \text{ g SiO}_2 \left(\frac{1 \text{ mol SiO}_2}{60 \text{ g SiO}_2} \right) \left(\frac{2 \text{ mol O}}{1 \text{ mol SiO}_2} \right) \left(\frac{16 \text{ g O}}{1 \text{ mol O}} \right) &= 53.33 \text{ g O}
 \end{aligned}$$

$$W_{Si, SiO_2} = \frac{46.67 \text{ g Si}}{100 \text{ g SiO}_2} = 0.4667$$

$$W_{O, SiO_2} = \frac{53.33 \text{ g O}}{100 \text{ g SiO}_2} = 0.5333$$

Ahora sustituimos todos los datos conocidos en nuestra ecuación de balance:

$$(1.0)(0.015)(750 \text{ kg}) + (1.0)(0.00354)m_2 - (1.0)(0.0005)(1000 \text{ kg})$$

$$- (0.4667)(0.1490)m_7 = 0$$

$$11.25 \text{ kg Si} + 0.00354m_2 - 0.5 \text{ kg Si} - 0.0695m_7 = 0$$

$$0.00354m_2 - 0.0695m_7 = -10.75 \text{ kg Si}$$

C:

$$E - S + G = Ac$$

$$E - S = 0$$

$$m_{C,C,1} + m_{C,C,2} - m_{C,C,6} - m_{C,CO_2,8} = 0$$

$$W_{C,1}m_1 + W_{C,2}m_2 - W_{C,6}m_6 - W_{C,CO_2}W_{CO_2,8}m_8 = 0$$

$$100 \text{ g CO}_2 \left(\frac{1 \text{ mol CO}_2}{44 \text{ g CO}_2} \right) \left(\frac{1 \text{ mol C}}{1 \text{ mol CO}_2} \right) \left(\frac{12 \text{ g C}}{1 \text{ mol C}} \right) = 27.27 \text{ g C}$$

$$100 \text{ g CO}_2 \left(\frac{1 \text{ mol CO}_2}{44 \text{ g CO}_2} \right) \left(\frac{2 \text{ mol O}}{1 \text{ mol CO}_2} \right) \left(\frac{16 \text{ g O}}{1 \text{ mol O}} \right) = 72.73 \text{ g O}$$

$$W_{C,CO_2} = \frac{27.27 \text{ g C}}{100 \text{ g CO}_2} = 0.2727$$

$$W_{O,CO_2} = \frac{72.73 \text{ g O}}{100 \text{ g CO}_2} = 0.7273$$

$$(0.041)(750 \text{ kg}) + 0.00646m_2 - (0.0005)(1000 \text{ kg}) - (0.2727)(0.4501)m_8 = 0$$

$$30.75 \text{ kg C} + 0.00646m_2 - 0.5 \text{ kg C} - 0.1227m_8 = 0$$

$$0.00646m_2 - 0.1227m_8 = -30.25 \text{ kg C}$$

Fe:

$$E - S + G = Ac$$

$$E - S = 0$$

$$m_{Fe,Fe,1} + m_{Fe,Fe,2} - m_{Fe,Fe,6} - m_{Fe,FeO,7} = 0$$

$$W_{Fe,1}m_1 + W_{Fe,2}m_2 - W_{Fe,6}m_6 - W_{Fe,FeO}W_{FeO,7}m_7 = 0$$

$$100 \text{ g FeO} \left(\frac{1 \text{ mol FeO}}{72 \text{ g FeO}} \right) \left(\frac{1 \text{ mol Fe}}{1 \text{ mol FeO}} \right) \left(\frac{56 \text{ g Fe}}{1 \text{ mol Fe}} \right) = 77.78 \text{ g Fe}$$

$$100 \text{ g FeO} \left(\frac{1 \text{ mol FeO}}{72 \text{ g FeO}} \right) \left(\frac{1 \text{ mol O}}{1 \text{ mol FeO}} \right) \left(\frac{16 \text{ g O}}{1 \text{ mol O}} \right) = 22.22 \text{ g O}$$

$$W_{Fe,FeO} = \frac{77.78 \text{ g Fe}}{100 \text{ g FeO}} = 0.7778$$

$$W_{O,FeO} = \frac{22.22 \text{ g O}}{100 \text{ g FeO}} = 0.2222$$

$$(0.9440)(750 \text{ kg}) + 0.9900m_2 - (0.9990)(1000 \text{ kg}) - (0.7778)(0.3510)m_7 = 0$$

$$708 \text{ kg C} + 0.9900m_2 - 999 \text{ kg C} - 0.2730m_7 = 0$$

$$0.9900m_2 - 0.2730m_7 = 291 \text{ kg de Fe}$$

Ca:

Aquí hay que mencionar que para el caso del Ca y el N, al únicamente presentarse en forma de CaO y N₂ respectivamente, se podrían balancear directamente esas especies, considerando únicamente en el caso del CaO, que al realizar el balance como especie el O asociado debería omitirse en el caso del balance del oxígeno. En este caso realizaremos completamente el balance para cada elemento, es decir, Ca y N.

$$E - S + G = Ac$$

$$E - S = 0$$

$$m_{Ca,CaO,3} - m_{Ca,CaO,7} = 0$$

$$W_{Ca,CaO}W_{CaO,3}m_3 - W_{Ca,CaO}W_{CaO,7}m_7 = 0$$

$$100 \text{ g CaO} \left(\frac{1 \text{ mol CaO}}{56 \text{ g CaO}} \right) \left(\frac{1 \text{ mol Ca}}{1 \text{ mol CaO}} \right) \left(\frac{40 \text{ g Ca}}{1 \text{ mol Ca}} \right) = 71.43 \text{ g Ca}$$

$$100 \text{ g CaO} \left(\frac{1 \text{ mol CaO}}{56 \text{ g CaO}} \right) \left(\frac{1 \text{ mol O}}{1 \text{ mol CaO}} \right) \left(\frac{16 \text{ g O}}{1 \text{ mol O}} \right) = 28.57 \text{ g O}$$

$$W_{Ca,CaO} = \frac{71.43 \text{ g Ca}}{100 \text{ g CaO}} = 0.7143$$

$$W_{O,CaO} = \frac{28.57 \text{ g O}}{100 \text{ g CaO}} = 0.2857$$

$$(0.7143)(1.00)m_3 - (0.7143)(0.50)m_7 = 0$$

$$m_3 - 0.5m_7 = 0$$

O:

$$E - S + G = Ac$$

$$E - S = 0$$

$$m_{O,CaO,3} + m_{O,O_2,4} + m_{O,O_2,5} - m_{O,FeO,7} - m_{O,CaO,7} - m_{O,SiO_2,7} - m_{O,O_2,8} - m_{O,CO_2,8} = 0$$

$$W_{O,CaO}W_{CaO,3}m_3 + W_{O_2,4}m_4 + W_{O_2,5}m_5 - W_{O,FeO}W_{FeO,7}m_7 - W_{O,CaO}W_{CaO,7}m_7$$

$$- W_{O,SiO_2}W_{SiO_2,7}m_7 - W_{O_2,8}m_8 - W_{O,CO_2}W_{CO_2,8}m_8 = 0$$

$$(0.2857)(1.00)m_3 + (1.00)m_4 + (0.2330)m_5 - (0.2222)(0.3510)m_7 - (0.2857)(0.50)m_7$$

$$- (0.5333)(0.1490)m_7 - (0.0295)m_8 - (0.7273)(0.4501)m_8 = 0$$

$$0.2857m_3 + m_4 + 0.2330m_5 - 0.0780m_7 - 0.14285m_7 - 0.0795m_7 - 0.0295m_8$$

$$- 0.3274m_8 = 0$$

$$0.2857m_3 + m_4 + 0.2330m_5 - 0.30035m_7 - 0.3569m_8 = 0$$

N:

$$E - S + G = Ac$$

$$E - S = 0$$

$$m_{N,N_2,5} - m_{N,N_2,8} = 0$$

$$W_{N_2,5}m_5 - W_{N_2,8}m_8 = 0$$

$$0.7670m_5 - 0.5204m_8 = 0$$

Una vez terminadas de obtener las ecuaciones de balance podemos resolver el mismo, en este caso utilizaremos las ecuaciones de los elementos y el balance general lo emplearemos para comprobar la

solución. Resolveremos el sistema de ecuaciones mediante el método de Gauss-Jordan, ya que podemos reacomodarlas en forma de matriz.

Ya que nuestro sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 0.00354m_2 - 0.0695m_7 &= -10.75 \text{ kg Si} \\
 0.00646m_2 - 0.1227m_8 &= -30.25 \text{ kg C} \\
 0.9900m_2 - 0.2730m_7 &= 291 \text{ kg de Fe} \\
 m_3 - 0.5m_7 &= 0 \\
 0.2857m_3 + m_4 + 0.2330m_5 - 0.30035m_7 - 0.3569m_8 &= 0 \\
 0.7670m_5 - 0.5204m_8 &= 0
 \end{aligned}$$

Lo podemos representar de la siguiente manera:

$$\begin{bmatrix}
 0.00354 & 0 & 0 & 0 & -0.0695 & 0 \\
 0.00646 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.1227 \\
 0.9900 & 0 & 0 & 0 & -0.2730 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & -0.5 & 0 \\
 0 & 0.2857 & 1 & 0.2330 & -0.30035 & -0.3569 \\
 0 & 0 & 0 & 0.7670 & 0 & -0.5204
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 m_2 \\
 m_3 \\
 m_4 \\
 m_5 \\
 m_7 \\
 m_8
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 -10.75 \\
 -30.25 \\
 291 \\
 0 \\
 0 \\
 0
 \end{bmatrix}$$

Que se puede presentar de la siguiente manera:

0.00354	0	0	0	-0.0695	0	-10.75
0.00646	0	0	0	0	-0.1227	-30.25
0.99	0	0	0	-0.273	0	291
0	1	0	0	-0.5	0	0
0	0.2857	1	0.233	-0.30035	-0.3569	0
0	0	0	0.767	0	-0.5204	0

La cual podemos comenzar reordenando dicha matriz como sigue:

0.99	0	0	0	-0.273	0	291
0	1	0	0	-0.5	0	0
0	0.2857	1	0.233	-0.30035	-0.3569	0
0	0	0	0.767	0	-0.5204	0
0.00354	0	0	0	-0.0695	0	-10.75
0.00646	0	0	0	0	-0.1227	-30.25

De manera resumida la solución de la matriz mediante el método de Gauss-Jordan se presenta a continuación. Es pertinente mencionar que en este caso al no estar totalmente interconectadas las ecuaciones de balance, es posible que la solución mediante otra metodología, sin embargo, en sistemas con menos suposiciones o con ecuaciones totalmente interconectadas, resolver la ecuación mediante matrices es una herramienta valiosa que se debe tener en mente.

Paso 1:

1	0	0	0	-0.2758	0	293.9394
0	1	0	0	-0.5	0	0
0	0	3.5002	0.8155	-0.5513	-1.2492	0
0	0	0	1	0	-0.6785	0
0	0	0	0	-19.3570	0	-3330.6626
0	0	0	0	0.2758	-18.9938	-4976.6019

Paso 2:

1	0	0	0	0	0	341.3876
0	1	0	0	-0.5	0	0
0	0	1	0	-0.1575	-0.1988	0
0	0	0	1	0	-0.6785	0
0	0	0	0	1	0	172.0649
0	0	0	0	0	1	264.5099

Paso 3:

1	0	0	0	0	0	341.3876
0	1	0	0	0	0	86.0325
0	0	1	0	0	-0.1988	27.1002
0	0	0	1	0	0	179.4667
0	0	0	0	1	0	172.0649
0	0	0	0	0	1	264.5099

Solución:

1	0	0	0	0	0	341.3876
0	1	0	0	0	0	86.0325
0	0	1	0	0	0	79.6881
0	0	0	1	0	0	179.4667
0	0	0	0	1	0	172.0649
0	0	0	0	0	1	264.5099

Por lo tanto, la solución del balance es la siguiente:

$$\begin{aligned} \text{masa de arrabio} &= m_1 = 750.00 \text{ kg} \\ \text{masa de chatarra} &= m_2 = 341.39 \text{ kg} \\ \text{masa de escorificante} &= m_3 = 86.03 \text{ kg} \\ \text{masa de oxígeno} &= m_4 = 79.69 \text{ kg} \\ \text{masa de aire} &= m_5 = 179.47 \text{ kg} \\ \text{masa de acero} &= m_6 = 1000.00 \text{ kg} \\ \text{masa de escoria} &= m_7 = 172.06 \text{ kg} \\ \text{masa de gases producidos} &= m_8 = 264.51 \text{ kg} \end{aligned}$$

Las cuales podemos sustituir en la ecuación de balance general para comprobar que la solución sea válida:

$$\begin{aligned} m_1 + m_2 + m_3 + m_4 + m_5 - m_6 - m_7 - m_8 &= 0 \\ 750.00 \text{ kg} + 341.39 \text{ kg} + 86.03 \text{ kg} + 79.69 \text{ kg} + 179.47 \text{ kg} \\ - 1000.00 \text{ kg} - 172.06 \text{ kg} - 264.51 \text{ kg} &= 0 \\ 1436.58 \text{ kg} - 1436.57 \text{ kg} &= 0 \end{aligned}$$

Y dado que la misma se cumple, podemos considerar que la solución es válida para el sistema.