

Asistente para el Análisis de Procesos Químicos Homagno

Armando Rojas-Vargas

Resumen

Desarrollo de un software para asistir a los investigadores y tecnólogos en el cálculo de disoluciones, suspensiones, equipos tecnológicos; al realizar ensayos, balances de masa y energía, mediciones y conversión unidades de medida. Se calculan las propiedades de filtración de pulpas como la resistencia de la membrana y específica de la torta, método a presión constante; velocidad de sedimentación y área unitaria, método de Talmadge y Fitch; análisis de la curva de distribución del tiempo de residencia, aplicando los modelos: tanques en serie, dispersión y Wolf-Resnick. Se implementaron los algoritmos para calcular intercambiadores de calor de tubos y corazas, de placas, tubos concéntricos, intercambiadores iónicos, tanques mezcladores. Se estiman las propiedades termodinámicas del agua, puntos de burbuja y rocío de mezclas binarias aplicando los modelos de van Laar, Margules, Wilson, así como propiedades psicrométricas. El software permite calcular platillos de orificio y el nivel de tanques con distintos cabezales. Se realiza el balance de masa en una industria productora de níquel, según el esquema tecnológico de Nicaro, en lixiviación, destilación y absorción; balance de masa y energía de combustión según análisis elemental de combustible y por orsat, así como el cálculo del diagrama de Otswale. Los resultados fueron validados apoyado en la literatura consultada. La versión dispone de una base de datos para estimar las propiedades físico – químicas de las sustancias y las constantes de los modelos; en la ayuda se refleja la descripción de los algoritmos y modelos aplicados.

Palabras clave: software, operaciones unitarias, proceso Caron

Introducción

Homagno fue concebido como un “Asistente para el Análisis de Procesos Químicos” dirigido al investigador. Posteriormente, se incorporaron aplicaciones específicas para las industrias del Níquel con la tecnología Carbonato

Amoniaco o proceso Caron. Actualmente dispone de métodos de aplicación general para cualquier proceso tecnológico: mediciones, ensayos, diseños, balances de masa y energía, y conversión de magnitudes físicas.

Debe su nombre al poema "Homagno" del Héroe Nacional de Cuba José J. Martí Pérez, cuya identidad retoma en otros tres poemas, para reflejar su visión del hombre.

Para el desarrollo de Homagno, actualmente en su versión v.2.5.7, se realiza una búsqueda bibliográfica y establecen procedimientos e instrucciones con el desarrollo de los algoritmos, se validan a partir de las fuentes consultadas y en equipos reales del entorno de trabajo, utilizando el Microsoft Excel; y se procede a la programación en "Visual Studio".

Este trabajo tiene el propósito de mostrar algunas de las prestaciones del software Homagno v.2.5.7.

Desarrollo

Aplicaciones de transferencia de calor

Se implementaron algoritmos para el cálculo de equipos de transferencia de calor como intercambiadores de doble tubo, tubos y corazas, y de placas. Para estimar los coeficientes individuales de transferencia de calor, se aplican los modelos de los siguientes autores:

- Fluidos en tuberías y tubos, excepto agua, régimen laminar, transición y turbulento. (Kern, 1983)
- Vapor de agua. (Kern, 1983)
- Fluido agua por los tubos. (Kern, 1983)
- Fluidos por la coraza y deflectores segmentados 25 %. (Kern, 1983)
- Fluidos entre placas (Muley, 1999; Wanniarachchi, 1995; Thonon, 1995; Shah, 1988; Kumar, 1984)

Cálculos del diámetro de aislantes para tuberías cilíndricas. Aplica modelos tales como: para convección libre (Pavlov, 1981); convección forzada (Morgan, 1975); exterior e interior de edificios (ASHRAE, 2005).

Aplicaciones de transferencia de masa.

La versión incluye el cálculo de intercambiadores iónicos, dispone de las propiedades de solutos para la regeneración (NaCl, NaOH, HCl, H₂SO₄).

Balance de masa y energía en generadores de vapor, ya sea según el análisis elemental del hidrocarburo o el análisis de Orsat. Se validó con la literatura utilizada y los generadores de vapor de la planta productora de Níquel Nicaro (1943 - 2013), a una productividad de 90,72 t/h de vapor sobrecalentado, 265 °C, 15 % de exceso de aire y una eficiencia bruta referida al VCS de 85,48 %. Aplica el método de aproximaciones sucesivas para calcular el flujo de combustible, de ser necesario. (Cruz & Pons, 1985)

Con Homagno se calcula la temperatura de burbuja (T_B) y rocío (T_R), aplica los modelos de van Laar, Margules y Wilson; para la presión de vapor, el modelo de Antoine. Dispone en la base de datos de 22 compuestos químicos. En la tabla no. 2, se muestra la T_B para la mezcla binaria agua – 1-butanol, calculada aplicando van Laar y Wilson, en la literatura se reporta $T_B=92,4$ °C, $Y_{H_2O}=0,7675$, en la figura 1 se compara con los valores experimentales reportados por Perry (1999). Aplica método de aproximaciones sucesivas y parametrización de la composición. (Aguilera, 1988)

Tabla No. 1. Punto de burbuja para la mezcla binaria agua – 1-butanol
Fuente: Homagno v.2.5.7

Temperatura de burbuja	(T_B , °C)	93,58
Presión de burbuja	(P_B , mm Hg)	760,04
ITEMS	agua	1-butanol
(X, fracción molar)	0,772	0,228
(Y, fracción molar)	0,772	0,228
T. ebullición (°C)	100,00	118,30
Pv (mm Hg)	601,12	290,18

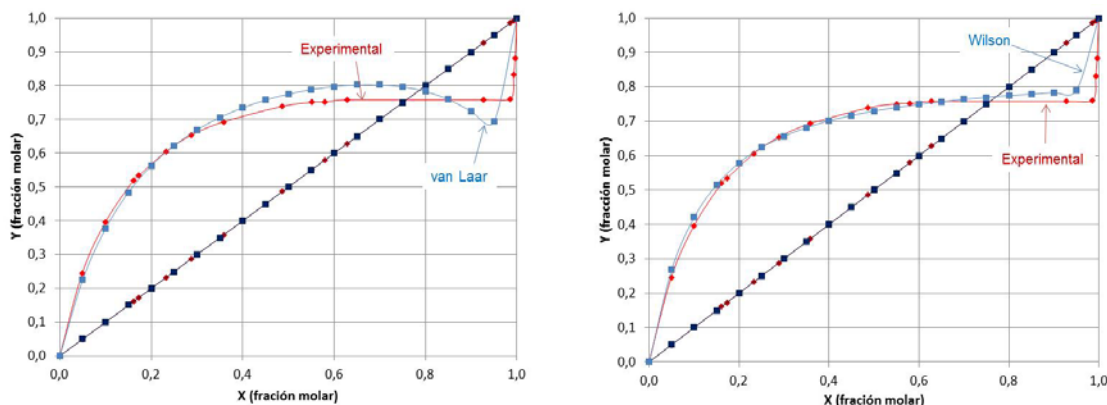


Figura 1
Punto de burbuja para la mezcla binaria agua – 1-butanol
Fuente: Homagno v.2.5.7

Reacción química.

Homagno despliega las ventanas del balance de masa de Lixiviación, destilación y absorción simulando el circuito de la planta de Nicaro (1943 - 2013) de extracción de níquel y cobalto por la tecnología carbonato amoniacal. Aplica el método de aproximaciones sucesivas para obtener la posición de equilibrio o estabilidad, de los perfiles de amoníaco y concentración de sólidos. Emite mensajes de error para ajustar las condiciones de operación que se le soliciten. El balance se valida con el modelo de Caja Negra. En la figura 1 se muestra un estimado para la planta de níquel en Nicaro.

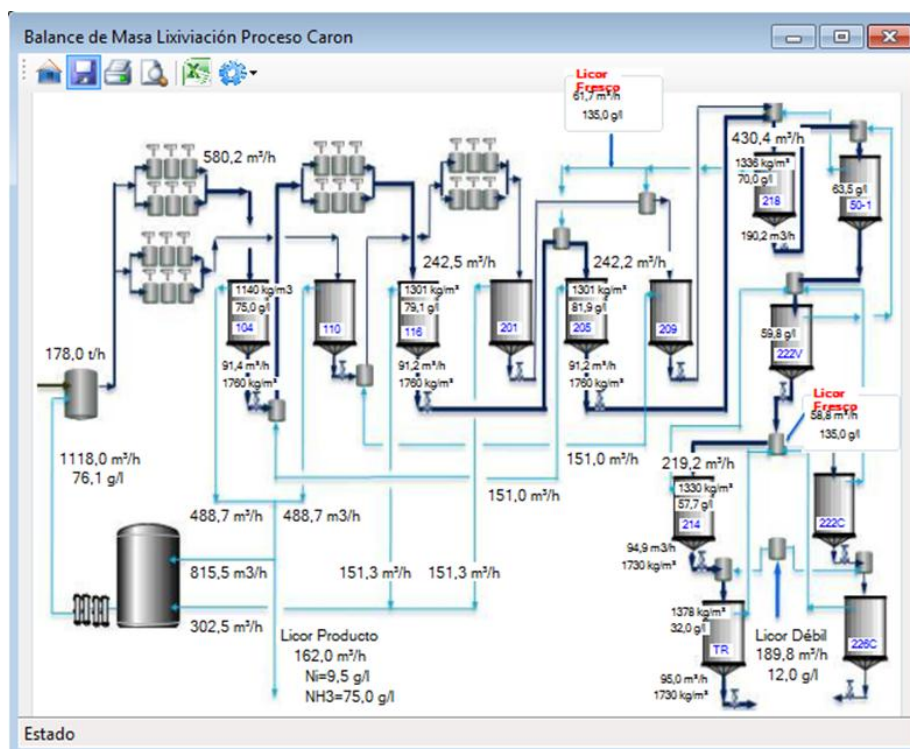


Figura 2

Balance de masa en lixiviación planta de Níquel Nicaro (1943 - 2013)

Fuente: Homagno v.2.5.7

El algoritmo estima los flujos de licor fresco y licor débil; densidad de alimentación a cada sedimentador; los flujos de licor de reboso y de pulpa por el fondo de los sedimentadores; flujo de licor fresco de compensación; pérdidas de amoníaco; flujos de aire según dosis, velocidad de aireación y tiempo de retención.

Ofrece el diagrama de Ostwale para combustibles o mezclas de combustibles cuyo análisis elemental debe ser introducido o seleccionado de la base de datos de Homagno. En la figura 3, las líneas azules representan el monóxido

de carbono (CO, %) y las rojas, el aire en exceso (e, %) para la combustión de la antracita.

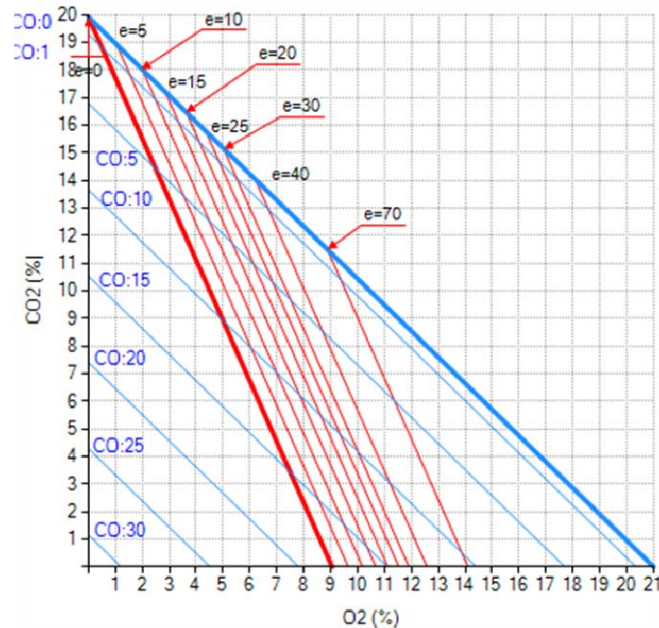


Figura 3. Diagrama de Ostwale

Carbón Antracita: C- 80,5 %; S-0,55%; N-0,8%; H-2,3%; H₂O-1%; O-5,65%;
 Cenizas 9,2%. A 25 °C y humedad Y= 0,017 kg/kg

Fuente: Homagno v.2.5.7

Para facilitar la preparación de disoluciones, incluye algoritmos de cálculo de concentración (másica, molar, al tanto por ciento en masa, molar, normal) en la ionización e hidrólisis de soluciones ácidas, básicas y sales; en las disoluciones buffer, emite recomendaciones para elevar la capacidad amortiguadora.

Transporte de la cantidad de movimiento.

Dispone de algoritmos para el cálculo de tanques de mezclado y potencia de agitación, para sistemas de impelente simple, dual o múltiple, líquido – sólido y gas – líquido – sólido. El usuario dispone de los factores de forma de 9 tipos de impelentes, entre ellos: Turbina de hojas rectas y disco central (RT), propela marina 2:1, turbina de hojas curvas, ancla y doble hélice; así como una descripción de los mismos según los criterios: flujo primario (radial, axial, tangencial), velocidad de rotación, viscosidad de trabajo y aplicaciones. Se listan posibles nombres reportados en la literatura para el mismo prototipo. Para los impelentes del tipo RT, utiliza los modelos siguientes para estimar el

número de aireación: Calderbank (1958), Nagata (1975), Reuss et al. (1980), Hughmark (1980).

Para la validación, se aplicaron los estudios realizados por Rodríguez (1983), Arrebola (1988) y Otero (1990), para un total de 6 sistemas de agitación g-l-s, se obtuvo error absoluto para la potencia instalada entre 0,3 y 11,8 %. El ejemplo que se ilustra, toma mediciones realizadas a los turbo aireadores de lixiviación de la planta productora de níquel en “Punta Gorda”, con impelente inferior único de turbina y 6 paletas rectas, diámetro 4 m, altura de la suspensión 4,14 m, volumen 52,02 m³, 4 baffles, 77 rpm, diámetro del impelente 1400 mm. Para estimar el número de aireación, el modelo de Calderbank (1958) dio buenos resultados, como se refleja en la tabla No. 1.

Tabla No. 1 Potencia de agitación

Criterios	Valor		Error (%)
	Observado	Predicho	
Potencia calculada $P = d^5 n^3 \rho N_p$ (P, kW)	-	79,8	-
Potencia entregada sin aireación. (P_0 , kW)	73,8	60,15	18,5
Potencia entregada con aireación (P_1 , kW)	33,9	29,58	12,7
Potencia instalada (P_2 , kW)	55	48,5	11,8
Corrección por factores de forma (P_k/P)	-	0,754	-
Corrección por alimentación de aire al impelente inferior (P_g/P)= (P_1/P_0)	0,459	0,492	-7,0
Rendimiento $(P_m/P)^{-1} = P_1/P_2$	61,6 %	-	-
Corrección por rendimiento del sistema motor – reductor (P_m/P)	1,62	1,64	-

Se pueden aplicar con Homagno, ensayos tales como: análisis de la curva de distribución del tiempo de residencia, utilizando los modelos tanques en serie y dispersión (Levespiel, 1974), modelo Wolf y William Resnick (1963). Se presentan los resultados a través de gráficos y en un reporte Excel, se exponen criterios para la interpretación de los resultados. (Rojas-Vargas, 2010)

Se desarrolló la solución matemática al método de determinación de la velocidad de sedimentación y área unitaria de sedimentación (A_1) por el método de Talmadge y Fitch (1955). Se calculan los valores de velocidad de sedimentación libre, punto crítico, velocidad crítica, tiempo y área unitaria. Los resultados se validaron con suspensiones de minerales lateríticos, como los procesados en la industria del níquel Nicaro, ilustrado en la figura 4. Los

resultados se compararon con el método de Kinch (A_2), la fórmula de Coe y Clevenger (A_3), y el comportamiento en la instalación industrial (A_0), resultando, $A_0 > A_1 > A_2 > A_3$.

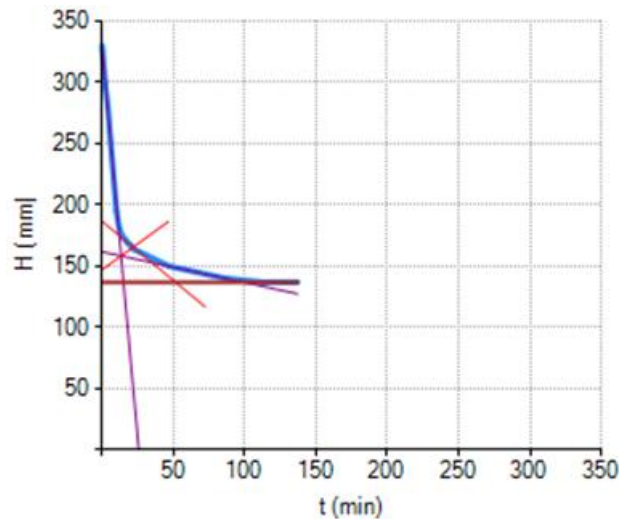


Figura 4.
Área unitaria de sedimentación
Velocidad crítica: 0,42 m/h
Fuente: Homagno v.2.5.7

Para los ensayos de filtración, se presenta el método para calcular la resistencia de la membrana y la resistencia específica de la torta a presión constante que parte del Modelo General de Filtración. A partir de introducir los datos de volumen de filtrado en función del tiempo, representa gráficamente, calcula las resistencias, muestra la calidad de ajuste y los puntos influyentes para la toma de decisiones. (Kasatkin, 1981)

Presenta un facilitador para preparar suspensiones y expresar la concentración como: X (kg sólido / m³ de pulpa); kg sólido / m³ de líquido; concentración al tanto por ciento de sólidos y de líquidos; relación líquido - sólido, entre otras.

En las mediciones, desarrolla algoritmos tales como: el cálculo de flujos de gases por tubo Pitot (McCabe-Smith, 1976); cálculo de platillo de orificios para agua, vapor de agua, otros líquidos y gases, tomas de esquina, de bridas y radio, diámetro exterior de tubería mayor a 12,5 mm, según modelos consultados en la literatura y utilizados para la validación. En la ayuda se ofrecen especificaciones para la fabricación y montaje. (ISO 5197:1991; Eckman, 1977)

La versión incluye el cálculo del volumen y nivel de tanques cilíndricos, ya sean horizontales, verticales, cónicos truncados, esféricos, con cabezal hemisférico, semielíptico 2:1, elíptico 2:1, torisférico y plano.

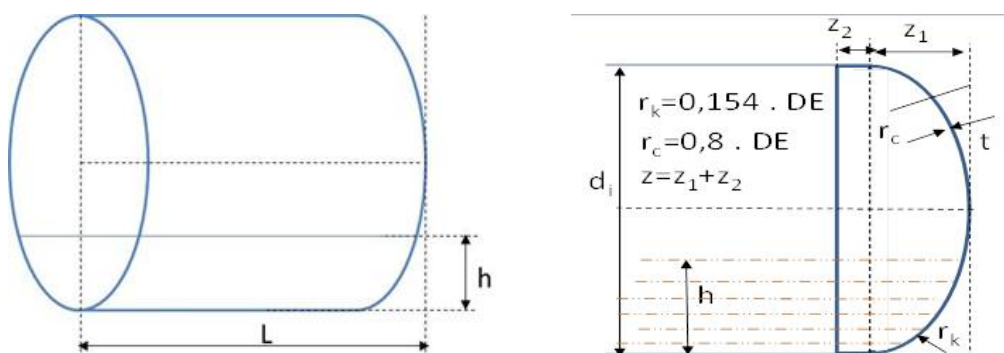


Figura 5

Cálculo de volumen de tanques, cilíndrico horizontal, cabezal semi - elíptico horizontal 2:1

Fuente: Homagno v.2.5.7

Generalidades

Homagno dispone de una base de datos de varias sustancias para estimar las propiedades físico – químicas, archivos de ayuda y validación, los resultados de cálculo los exporta a Excel.

Se muestra la tabla periódica de los elementos, la cual incluye información sobre las propiedades físico - químicas, periódicas, aplicaciones, entre otras.

Parte de este trabajo es dedicado especialmente al profesor Aguilera de la Universidad de Oriente, facultad de Ingeniería Química.

Los archivos de instalación de GECO v.2.5.7 ocupan 67,1 MB.

Próxima versión

Construcción de diagramas de Pourbaix y balance de masa y energía en un horno de calcinación, típico de las industrias del níquel Nicaro y Punta Gorda.

Conclusiones

Homagno es un producto de software que aspira asistir en su quehacer a investigadores, tecnólogos, docentes y estudiantes, para lo cual se validan los algoritmos y la ayuda puede ser un material complementario de consulta.

Bibliografía

- AGUILERA R. J. (1988) Sistema Multicomponente Hidrocarburo - Agua. Dirección de Información Científico - Técnica. Instituto Superior Politécnico Julio Antonio Mella, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, 1988, p. 75.
- ARREBOLA A. M. (1988) Determinación del consumo de potencia eficiencia de absorción de oxígeno, tiempo de residencia y tiempo de mezclado en la 1ra etapa de turbo aireadores en la planta de lixiviación serie B de la empresa ECG. Inédito. Biblioteca Técnica NicaroTec. [Consultado agosto 2016]
- CRUZ VIERA, L.; PONS HERNÁNDEZ, A. (1985). Introducción a Ingeniería Química. La Habana: Pueblo y Educación. SNC:RA01.46001.3.
- DONALD Q. KERN (1983). Procesos de Transferencia de Calor. Editorial Pueblo y Educación, La Habana.
- ECKMAN, D. P. (1977). Industrial Instrumentation. Editorial Pueblo y Educación, p. 279.
- KASATKIN, A., G. (1981) Operaciones Básicas y Aparatos de Tecnología Química. Impreso en la URSS, Editorial Pueblo y Educación, T. I. p. 729.
- KUMAR, H., (1984), "The Plate Heat Exchanger: Construction and Design," Institute of Chemical Engineering Symposium Series, No. 86:1275-1288.
- LEVESPIEL, O. "Ingeniería de las reacciones químicas". Editorial Pueblo y Educación, Ciudad de La Habana, 1974, pp. 277-347.
- OTERO, J.L. (1990). Modificación de los turbo aireadores de la planta de lixiviación ECG. Inédito. Biblioteca Técnica NicaroTec. [Consultado agosto 2016]
- MULEY, A., MANGLIK R.M. (1999). Experimental study of turbulent flow heat transfer and pressure drop in a plate heat exchanger with chevron plates. Journal of Heat Transfer, Vol 121, Transactions of the ASME, pp. 110-117.
- MCCABE-SMITH (1976). Operaciones Unitarias en Ingeniería Química. Editorial Pueblo y Educación, La Habana, 1976.
- PAVLOV K.F, ROMANKOV P.G., NOSKOV A.A (1981) Problemas y ejemplos para el curso de operaciones básicas y aparatos en tecnología química. Editorial Mir, Moscú.
- PERRY, R. H. (1999) Perry's Chemical Engineers' Handbook. VI Edición, versión electrónica. Tabla 13-1.

- RODRÍGUEZ R. G, (1983). Informe preliminar de los turbo aireadores de lixiviación, RRL. Inédito. Biblioteca Técnica NicaroTec. [Consultado agosto 2016]
- ROJAS-VARGAS, A.; GARCÍA, A. P (2010). Análisis de la curva de distribución del tiempo de residencia en un Sistema de Lixiviación”. Vol. XXX, No. 1, 2010, págs. 61-68. Revista Tecnología Química.
- SHAH, R. K., AND FOCKE, W. W. (1988). “Plate Heat Exchangers and their Design Theory”. Heat Transfer Equipment Design, R. K. Shah at al., eds, Hemisphere Publishing Co., Washington, DC, pp. 227-254.
- THONON, B., VIDIL, R., AND MARVILLET, C. (1995). “Recent Research and Developments in plate Heat Exchangers” Jorunal of chemical Enhanced Head Transfer, Vol. 2, Nos. 1-2, pp. 149-155.
- WANNIARACHCHI, A. S., RATNAM, U., TILTON, B. E., DUTTA-ROY, K., ASME (1995). Approximate correlations for chevron-type plate heat exchangers. National Heat Transfer Conference, Vol. 12, pp. 145-151.

Autor

Armando Rojas Vargas

Ingeniero Químico, Máster en Ciencias. Profesor
Instructor Adjunto de la Facultad de Ingeniería Química
de la Universidad de Oriente. Especialista
Automatización, SERCONI, Empresa de Servicios
Técnicos de Computación, Comunicaciones y
Electrónica "Rafael Fausto Orejón Forment",
CUBANIQUEL

arojas@eros.moa.minem.cu