

TECNOLÓGICO DE ESTUDIOS SUPERIORES DE ECATEPEC  
DIVISIÓN DE INGENIERÍA MECÁNICA MECATRÓNICA E  
INDUSTRIAL



**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO EN MAESTRÍA EN  
EFICIENCIA ENERGÉTICA Y ENERGÍAS RENOVABLES**

**SIMULACIÓN, ANÁLISIS Y OPTIMIZACIÓN ENERGÉTICA DE UN  
PROCESO DE RECUPERACIÓN DE AZUFRE CON REACTORES  
BIOLÓGICOS**

**PRESENTA**

**ING. JOSÉ ABDIEL OLMEDO WOODER**

**DIRECTOR INTERNO: M. EN C. WENCESLAO C. BONILLA  
BLANCAS**

**DIRECTOR EXTERNO: DRA MARÍA ISABEL MORA GARRIDO**

**NOVIEMBRE DE 2016**



GOBIERNO DEL  
ESTADO DE MÉXICO

DICTAMEN DE LIBERACIÓN DE PROYECTO  
DE TESIS

**FO-TESE-DA-90**  
TIT05-ANEXO PM



DIRECCIÓN ACADÉMICA  
DIVISIÓN DE INGENIERÍA MECÁNICA, MECATRÓNICA E INDUSTRIAL  
MAESTRÍA EN EFICIENCIA ENERGÉTICA Y ENERGÍAS RENOVABLES

Fecha: 23 DE NOVIEMBRE DE 2016

Datos generales

Nombre del alumno:  
OLMEDO

WOODER

JOSÉ ABDIEL

Apellido paterno

Apellido materno

Nombres (s)

Matrícula: 201422375

PROYECTO: SIMULACIÓN, ANÁLISIS Y OPTIMIZACIÓN ENERGÉTICA DE UN PROCESO DE RECUPERACIÓN DE AZUFRE CON REACTORES BIOLÓGICOS

DIRECTOR: Interno: M. en C. WENCESLAO CUAUHTÉMOC BONILLA BLANCAS; Externo: Dra. MARÍA ISABEL MORA GARRIDO


Dictamen:

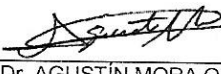
Con base en el registro No. POSG-MPEER/DIMMI/2015/01 correspondiente al periodo escolar 2016-2, asignado al proyecto de tesis SIMULACIÓN, ANÁLISIS Y OPTIMIZACIÓN ENERGÉTICA DE UN PROCESO DE RECUPERACIÓN DE AZUFRE CON REACTORES BIOLÓGICOS y presentado por el alumno referido; y después de haber sido desarrolladas las actividades requeridas, el Comité Tutorial, conformado por los integrantes que firman al calce, ha determinado que SI (X) NO ( ) han sido cubiertos en su totalidad los requisitos que permitan a esta División Académica liberar al alumno de los trámites académicos para tal efecto e iniciar el trámite de obtención de grado de maestría en la Unidad de Registro y Certificación de este Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec.

Observaciones:

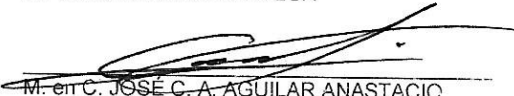
NINGUNA

Comité tutorial




  
M. en C. WENCESLAO C. BONILLA BLANCAS

  
Dr. AGUSTÍN MORA ORTEGA

  
Dr. MARTÍN SALAZAR PEREYRA

  
M. en C. JOSÉ C. A. AGUILAR ANASTASIO



Elaboró:  Dr. MARTÍN SALAZAR PEREYRA Coordinador de Posgrado	Revisó y Visto:  M. en C. HÉCTOR RODRÍGUEZ CARMONA Jefe de División	Enterado:  M. en C. ARMANDO ALCALDE MARTÍNEZ Director Académico
--	---	---

## Agradecimientos

*A mi padre y hermanos quienes siempre están para ayudarme y aconsejarme.*

*A mi esposa que me apoya incondicionalmente y a mi hijo que me regala una sonrisa cada día, quienes me alientan a seguir adelante.*

*A mi profesor, M. en C. Wenceslao Bonilla Blancas, por su guía y apoyo brindados y sobre todo los esfuerzos realizados para que este trabajo fuera posible.*

*Al Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec y al Consejo Mexiquense de Ciencia y Tecnología por el apoyo económico para realizar la estancia de investigación bajo el proyecto “Simulación de Reactores Biológicos para el Tratamiento de Gases Contaminados con Dióxido de Azufre y Recuperación de Azufre Elemental”.*

*Al grupo Genocov por recibirme en su equipo de trabajo, sobre todo al Dr. David Gabriel y la Dra. Mabel Mora por su amabilidad, conocimientos y apoyo brindados.*

*Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el apoyo otorgado a través de la beca No. 439523.*

# Índice

Lista de figuras .....	V
Lista de tablas .....	VII
Nomenclatura .....	VIII
Resumen .....	IX
Abstract .....	X
Introducción .....	XI
Objetivo general .....	XIII
Objetivos particulares .....	XIII
1    Métodos para el tratamiento de efluentes .....	1
1.1    Lavadores húmedos para el tratamiento de gases .....	1
1.2    Métodos de tratamiento de aguas residuales .....	5
1.3    Métodos biotecnológicos para el tratamiento de aguas residuales .....	6
1.4    Procesos anaerobios para el tratamiento de aguas residuales .....	8
2    Análisis Pinch para la optimización energética de procesos .....	12
2.1    Recuperación de calor e intercambio de calor .....	13
2.1.1    Conceptos básicos de intercambio de calor .....	13
2.1.2    El diagrama de temperatura-entalpía .....	15
2.1.3    Las curvas compuestas .....	17
2.1.4    Un procedimiento de focalización: la "Tabla de problema" .....	20
2.2    Diseño de la red de intercambiadores de calor .....	24
2.2.1    Diseño para una máxima recuperación de energía .....	25
3    Motivación .....	30
4    Antecedentes .....	34
5    Metodología .....	41
5.1    Configuración general de la simulación .....	41
5.2    Diagrama de la simulación .....	43
5.2.1    Lavado de gases .....	44
5.2.2    Tratamiento biológico del agua de lavado .....	44
5.2.3    Tratamiento de sólidos .....	45
5.2.4    Red de intercambiadores de calor .....	45
5.2.5    Proceso de cogeneración .....	47
6    Resultados .....	48

6.1	Resultados del proceso de cogeneración .....	49
7	Discusión de resultados .....	51
8	Conclusiones .....	53
	Referencias .....	54
<b>Anexo A</b>	<b>Descripción del software Aspen Plus .....</b>	<b>56</b>

## Lista de figuras

Figura 1.1 Clasificación de los diversos procesos de tratamiento de aguas residuales en función de la forma de agregación de la biomasa (microorganismos) y de la presencia o ausencia de oxígeno en el medio.....	7
Figura 1.2. Filtro anaerobio.....	9
Figura 1.3. Reactor UASB .....	10
Figura 1.4. Reactor de lecho granular expandido (EGSB).....	11
Figura 1.5. Reactor de lecho expandido o fluidificado .....	12
Figura 2.1. Diagrama de un proceso simple.....	13
Figura 2.2. Diagrama del proceso simple con intercambio de calor.....	14
Figura 2.3. Corrientes graficadas en un diagrama temperatura-entalpía (T-H) con $\Delta T_{\min} = 0$ .....	15
Figura 2.4. Diagrama T-H con $\Delta T_{\min} = 20$ °C.....	17
Figura 2.5. Formación de la curva compuesta caliente.....	18
Figura 2.6. Curva compuesta caliente formada.....	18
Figura 2.7. Curvas compuestas para el problema de cuatro corrientes.....	19
Figura 2.8. Intervalos de corriente y temperaturas.....	21
Figura 2.9. Uso del calor excedente de un intervalo.....	22
Figura 2.10. Cascadas de calor no factible y factible.....	23
Figura 2.11. Diagrama de rejilla inicial para el problema de cuatro corrientes.....	24
Figura 2.12. Consecuencias de realizar un intercambio de calor entre corrientes con diferentes $m c_p$ .....	26
Figura 2.13. Diseño de la red por encima del pinch del problema de cuatro corrientes.....	27
Figura 2.14. Diseño de la red de intercambiadores por debajo del pinch para el problema de cuatro corrientes.....	29
Figura 2.15. Diseño de la red de intercambiadores alcanzando los objetivos de energía.....	29
Figura 3.1. Esquema propuesto para el tratamiento de gases conteniendo $SO_2$ y aguas residuales conteniendo sulfato para la recuperación de azufre elemental.....	30
Figura 4.1. Diagrama esquemático del lecho de lodos del UASB.....	35
Figura 4.2. Diagrama del diseño de la sulfato reducción.....	37
Figura 4.3. Proceso de remoción de $SO_2$ utilizando $CaCO_3$ .....	39
Figura 4.4. Proceso para la eliminación de $SO_2$ utilizando polvo de horno de cemento.....	39
Figura 5.1. Proceso de tratamiento de gases residuales con reactores biológicos: (1) lavado de gases; (2) tratamiento biológico de aguas de lavado; (3) tratamiento de sólidos; (4) red de intercambiadores de calor y (5) proceso de cogeneración.....	43

Figura 5.2. Corriente de energía calorífica obtenida del enfriador (COOLER) e insertada en el reactor R-SRB. ....	46
Figura 6.1. Red de intercambiadores de calor diseñada en un diagrama de rejilla.....	49
Figura A-1. Elección del método de cálculo de propiedades. ....	56
Figura A-2. Lista de componentes en Aspen Plus.....	59
Figura A-3. Asistente Electrolyte Wizard: (a) selección de componentes; (b) selección de reacciones de equilibrio deseadas. ....	61
Figura A-4. Corrientes que se utilizan para la simulación en Aspen Plus: (a) de materiales, (b) de calor y (c) de trabajo.....	62
Figura A-5. Paleta de bloques de unidades de operación en Aspen Plus. ....	62
Figura A-6. Modelos de la sección “Separators” de la paleta de modelos de Aspen Plus. ....	63
Figura A-7. Modelos de la sección “Exchangers” de la paleta de modelos. ....	64
Figura A-8. Modelos de la sección “Columns” de la paleta de modelos. ....	65
Figura A-9. Modelos de la sección “Reactors” de la paleta de modelos.....	66
Figura A-10. Modelos de la sección “Pressure Changers” de la paleta de modelos. ....	66
Figura A-11. Modelos de la sección “Manipulators” de la paleta de modelos.....	67
Figura A-12. Modelos de la sección “Solids” de la paleta de modelos.....	67
Figura A-13. Modelos de la sección Separadores de Sólidos de la Paleta de Modelos. ....	69
Figura A-14. Modelos de la sección Modelos de Usuario de la Paleta de Modelos. ....	69

## Lista de tablas

Tabla 1.1. Ventajas y desventajas de los lavadores húmedos. ....	4
Tabla 2.1. Datos para el ejemplo simple de dos corrientes. ....	14
Tabla 2.2. Datos para el ejemplo de cuatro corrientes.....	20
Tabla 2.3. Intervalos de temperatura y cargas de calor para el problema de cuatro corrientes. ....	21
Tabla 4.1. Condiciones examinadas durante el tiempo de operación del UASB. ....	37
Tabla 4.2. Resumen de las eficiencias de eliminación de sulfato y COT (S-EE y C-EE respectivamente) obtenidas del reactor UASB.....	38
Tabla 5.1. Lista de las reacciones de equilibrio creadas con Electrolyte Wizard.....	42
Tabla 5.2. Datos utilizados en Aspen Energy Analyzer para realizar el análisis Pinch. ....	47
Tabla 6.1. Resultados de los flujos másicos y volumétricos de los insumos y productos del proceso.....	48
Tabla 6.2. Potencia requerida para cada bomba y compresor del proceso y la potencia total requerida. ...	50
Tabla A-1. Contenido y usos de principales bancos de datos de componentes de Aspen Plus.....	60
Tabla A-2. Modelos que se encuentran en la pestaña “Solids” de la paleta de modelos.....	68
Tabla A-3. Modelos de la pestaña Separadores de “Solids” de la paleta de modelos.....	68
Tabla A-4. Modelos de usuario y su descripción. ....	69



## Nomenclatura

BPM	Bacterias productoras de metano
BSO	Biomasa sulfuro oxidante
BSR	Biomasa sulfato reductora
C-EE	Eficiencia de eliminación de carbono.
CKD	Polvo de horno de cemento húmedo. Método para la remoción de SO <sub>2</sub> de gases de escape de hornos.
CO <sub>2</sub>	Dióxido de carbono
COS	Compuestos oxidados de azufre
COT	Carbono orgánico total.
c <sub>p</sub>	Calor específico a presión constante.
DQO	Demanda química de oxígeno. Parámetro que se utiliza principalmente para medir la concentración de materia orgánica en una muestra líquida.
H	Entalpía.
H <sub>2</sub> S	Sulfuro de hidrógeno
HS <sup>-</sup>	Ion bisulfuro
L	Litro(s)
ṁ	Flujo másico.
NaOH	Hidróxido de sodio
NO <sub>x</sub>	Óxidos de nitrógeno
pH	Coefficiente que indica el grado de acidez o basicidad de una solución acuosa.
Q	Calor.
RCTA	Reactor Continuo de tanque agitado
S	Azufre.
S-EE	Eficiencia de eliminación de azufre.
SO <sub>2</sub>	Dióxido de azufre
SO <sub>3</sub>	Trióxido de azufre
SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	Ion sulfito
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	Ion sulfato
SO <sub>x</sub>	Óxidos de azufre
T	Temperatura.
T <sub>o</sub>	Temperatura objetivo.
TRH	Tiempo de retención hidráulica. Tiempo de permanencia del agua residual en el reactor.
T <sub>s</sub>	Temperatura de suministro.
ΔT	Diferencia de temperaturas.
ΔT <sub>min</sub>	Diferencia de temperaturas mínima.
UASB	Lecho de lodos de flujo ascendente
VCO	Velocidad de carga orgánica. Cantidad de materia orgánica introducida por unidad de volumen y tiempo.

## Resumen

El azul ultramar es un pigmento natural inorgánico con una estructura de aluminosilicato de sodio que contiene una relación molar azufre-pigmento de 2-1 en su fórmula química. La estequiometría del azul ultramar sintético no está definida con exactitud, pero en general se trata de una mezcla de caolín de grano fino y azufre en forma de sulfato de sodio bien calcinado o con carbonato de sodio. Sin embargo, como en muchos procesos industriales, se obtienen subproductos o residuos durante el proceso que pueden ser peligrosos para los seres vivos y el medio ambiente, por lo que deben ser tratados antes de ser desechados. Tal es el caso de los gases de combustión generados en los hornos de este proceso de producción. Estos gases tienen una alta carga de dióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ) debido a la gran cantidad de azufre utilizado para sintetizar el pigmento. En el presente trabajo se realizó la simulación de un proceso a escala industrial de valorización de efluentes residuales generados en el proceso de producción del pigmento azul ultramar con el objetivo de recuperar subproductos con valor comercial. Para ello se utilizó el software de simulación Aspen Plus que permitió obtener una visión general de los insumos requeridos, los subproductos generados y las características termodinámicas de los efluentes. Además, se realizó un análisis Pinch con los datos obtenidos del proceso para mejorar la eficiencia energética, creando una red de intercambiadores de calor contenido en los efluentes residuales y procesos secundarios no aprovechados. La simulación del proceso se desarrolló exitosamente y se mostró como una herramienta muy útil para ayudar a la implementación de este proceso a escala industrial utilizando como referencia los datos obtenidos en la simulación, como son los caudales, la temperatura, los compuestos presentes durante el proceso, entre otros, para el diseño y dimensionamiento de los equipos a utilizar. Como resultado se obtuvo un proceso con una eficiencia de recuperación de azufre elemental del 91 % a partir de los sulfatos presentes en los efluentes tratados y se calculó una producción de biometano de  $8.65 \text{ m}^3/\text{h}$ , el cual se puede considerar para proporcionar energía a procesos secundarios como es la calefacción o calentar agua de servicios.

## Abstract

Blue pigment overseas is an inorganic natural pigment with a structure of sodium aluminosilicate containing a sulfur-pigment molar ratio of 2-1 in its chemical formula. The stoichiometry of synthetic blue pigment overseas is not precisely defined, but is generally a mixture of fine-grained kaolin and sulfur in the form of well-calcined sodium sulphate or with sodium carbonate. However, as in many industrial processes, by-products or wastes are obtained during the process that can be hazardous to living beings and the environment, so they must be treated before being discarded. Such is the case of the combustion gases generated in the furnaces of this production process. These gases have a high load of sulfur dioxide (SO<sub>2</sub>) due to the large amount of sulfur used to synthesize the pigment. In this work, a process simulation was carried out on an industrial scale recovery of waste effluents generated in the production process of the blue pigment overseas with the aim of recovering products with commercial value. For this, the Aspen Plus simulation software that allowed an overview of the required inputs, the products generated and thermodynamic characteristics of the effluent was used. In addition, a Pinch analysis was performed with data from the process to improve energy efficiency, creating a network of heat exchangers in the waste effluents and untapped secondary processes. The simulation process is successfully developed and shown as a very useful tool to help the implementation of this process on an industrial scale using reference data obtained in the simulation, such as flow, temperature, the compounds present during the process, etc., for the design and sizing of equipment to use. As a result, a process with an elemental sulfur recovery efficiency of 91% was obtained from the sulfates present in the treated effluents and a biomethane output of 8.65 m<sup>3</sup>/h was calculated, which can be considered to provide energy to secondary processes such as heating or heating services water

## Introducción

El azul ultramar es un pigmento natural inorgánico con una estructura de aluminosilicato de sodio que contiene una relación molar azufre-pigmento de 2-1 en su fórmula química. La síntesis de este pigmento a escala industrial se inició a finales de 1820 y desde entonces su uso se ha extendido a una gran variedad de campos. Actualmente la estequiometría del azul ultramar sintético no está definida con exactitud, pero en general se trata de una mezcla de caolín de grano fino y azufre en forma de sulfato de sodio bien calcinado o con carbonato de sodio. En algunas ocasiones se le agrega algo de sílice además de carbón o brea que actúan como agentes de reducción para convertirlos a polisulfuros [1].

La mezcla de las materias primas antes mencionadas se carga en crisoles y se introduce en hornos que inicialmente se calientan en ausencia de oxígeno hasta alcanzar la temperatura de reacción, alrededor de 800 °C, a la cual el azufre necesario para sintetizar el pigmento se consume y el azufre que queda en exceso se oxida para formar dióxido de azufre. Posteriormente la mezcla se deja madurar con aire a una temperatura constante hasta lograr el pigmento bruto. Este ciclo de cocción toma aproximadamente 15 días en completarse y ocurre a temperaturas medias de 400°C. El pigmento bruto se lleva a unos tanques con agua donde primero se remueven las impurezas y las materias primas que no reaccionaron. Después la pulpa se pasa a una serie de tanques sedimentadores para separarla en varias fracciones de acuerdo a los diferentes tamaños de partícula que se pueden encontrar en ella. A continuación, la pasta se recupera de los tanques de sedimentación y se seca en estufas para luego ser pulverizada en micromolinos.

Sin embargo, como en muchos procesos industriales, se obtienen subproductos o residuos durante el proceso que pueden ser peligrosos para los seres vivos y el medio ambiente, por lo que deben ser tratados antes de ser desechados. Tal es el caso de los gases de combustión generados en los hornos de este proceso de producción. Estos gases tienen una alta carga de dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>) debido a la gran cantidad de azufre utilizado para sintetizar el pigmento.

La eliminación del SO<sub>2</sub> es de suma importancia debido a que éste reacciona con el oxígeno del aire produciéndose SO<sub>3</sub>. El pH del agua de lluvia cuando no está contaminada con óxidos de azufre es alrededor de 5.6 (debido al CO<sub>2</sub>), pero al haber óxidos de azufre estos disminuyen el pH de la lluvia hasta 2 o incluso menos produciéndose así la lluvia ácida. Esta ocasiona graves problemas ya que

acidifica la tierra y los mantos acuíferos ocasionando daños a la flora y fauna hasta tal punto de dejar lagos enteros sin vida marina, excepto algunas especies de algas que toleran medios ácidos [2]. Es por esto que existen diversos métodos fisicoquímicos para el tratamiento de gases de combustión antes de ser liberados a la atmósfera. El lavado húmedo es uno de los métodos habituales para el tratamiento de gases contaminantes debido a su eficiencia y su bajo costo económico de inversión. Este método hace entrar en contacto los gases con un medio acuoso, el cual depende del gas contaminante a tratar, para que el gas contaminante sea absorbido por el medio acuoso. De esta forma los gases de combustión se “lavan” y pueden ser emitidos a la atmósfera, por otro lado, el contaminante es transferido al medio líquido del cual tienen que ser tratado posteriormente. Es por este motivo que se han buscado alternativas económicas que no generen subproductos contaminantes para el tratamiento de estos efluentes. Es así que se ha recurrido a los procesos biológicos donde los efluentes contaminados son tratados con microorganismos que degradan los contaminantes a subproductos no dañinos para el medio ambiente y que pueden tener un valor económico.

## Objetivo general

Proponer un proceso con reactores biológicos para el tratamiento de efluentes residuales, provenientes de la producción industrial del pigmento azul ultramar, para obtener productos con valor comercial y aplicar estrategias de optimización energética al proceso para recuperar la energía contenida en dichos efluentes.

## Objetivos particulares

- Definir las reacciones principales que ocurren en el proceso.
- Determinar las unidades de operaciones unitarias ideales para el proceso.
- Simular el proceso con la ayuda del software de simulación de procesos químicos Aspen Plus.
- Realizar un Análisis Pinch para optimizar el proceso energéticamente.
- Proponer un caso de cogeneración con los subproductos obtenidos.

# 1 Métodos para el tratamiento de efluentes.

El tratamiento de corrientes residuales contaminantes de los procesos industriales es algo común en la actualidad. Estas corrientes residuales pueden ser gases o líquidos. Existen diversos métodos físico-químicos para su tratamiento antes de ser desechados al medio ambiente, pero suelen ser costosos. En este apartado se presentan distintos dispositivos para el tratamiento tanto de gases como de líquidos, referente al tratamiento de gases, se hablará sobre los lavadores húmedos, los cuales son de los métodos para tratamiento de gases contaminantes más eficaces y económicos, pero tienen el inconveniente de que el efluente generado por los lavadores suele necesitar un postratamiento antes de ser desechado al medio ambiente y es por esto que se presentan tecnologías para el tratamiento de efluentes líquidos. Además se describirán los procesos biológicos como alternativa económica, así como amigable con el medio ambiente para el tratamiento de efluentes contaminantes.

## 1.1 Lavadores húmedos para el tratamiento de gases

El lavado húmedo o absorción [3] se basa en la transferencia de materia desde un gas soluble a un disolvente que se encuentran en contacto entre sí. El disolvente utilizado generalmente es agua. Las principales aplicaciones de los lavadores para el tratamiento de gases residuales son:

- Eliminación de contaminantes gaseosos, como haluros de hidrógeno (HF, HCL, HBr, HI), SO<sub>2</sub>, amoníaco, sulfuro de hidrógeno o disolventes orgánicos volátiles.
- Eliminación de polvo.

Existen distintos tipos de lavadores que se pueden elegir dependiendo de la eficacia requerida, el consumo de energía, los reactivos a utilizar o las características del gas residual a tratar. A continuación se hablará sobre ellos.

- Lavador de relleno fibroso.

Este lavador consiste en una cámara con entrada y salida para el gas a tratar, el cual contiene planchas de material de relleno fibroso las cuales se rocían con líquido. Se puede diseñar para que el flujo de gas sea horizontal o vertical. Las fibras pueden ser de vidrio, plástico o acero. Se utiliza

para eliminar componentes ácidos y compuestos orgánicos/inorgánicos de las corrientes de gas efluentes. Algunos problemas que pueden surgir en este tipo de lavador es la obturación de las boquillas, saturación de lechos de fibras y una irrigación insuficiente de las planchas fibrosas. El caudal de gas a tratar puede ir desde 1,800 hasta 170,000 m<sup>3</sup>/h.

➤ Lavador de lecho fluidizado

En este tipo de lavador el recipiente contiene rejillas de soporte en las que se coloca el material de relleno, normalmente esferas de plástico, posee entradas y salidas para la fase líquida de lavado de gas y un eliminador de neblinas. Este tipo de lavadores se aplican para eliminar dióxido de azufre, fluoruro de hidrógeno y olores. También se utilizan para tratar gases residuales que contienen polvo y cuando pueden formarse depósitos.

Las esferas de plástico de relleno son de baja densidad y tienen libertad de movimiento dentro de las rejillas de soporte, lo que hace a estos lavadores menos susceptibles a obstrucciones debido a que se mantienen en estado constante de agitación y fluidización. Además de este movimiento constante la superficie lisa de las esferas evita que se adhieran incrustaciones al relleno. Puede trabajar con caudales de gas de 50 a 500,000 m<sup>3</sup>/h, temperaturas desde 5 hasta 80 °C y a presión atmosférica.

➤ Lavador de lecho empacado

Este lavador se compone de una carcasa exterior con rejillas de soporte internas en las que se aloja el relleno, el cual puede ser de distintas formas. Posee distribuidores de líquido, entradas y salidas de gas y de líquido y un eliminador de neblina. En diseños verticales (columnas rellenas), la corriente de gas fluye ascendentemente por la cámara (a contracorriente del líquido). Son los absorbedores de uso más común para el tratamiento de gases. Los lavadores de lecho empacado se pueden utilizar para absorber compuestos de distinta naturaleza como dióxido de azufre, ácido crómico, sulfuro de hidrógeno, amoníaco, cloruros, fluoruros y compuestos orgánicos volátiles (COV) siempre y cuando se utilicen los reactivos adecuados para la absorción.

El lavador de lecho empacado está limitado a aplicaciones en las que el contenido de partículas es inferior a 0.5 g/m<sup>3</sup> debido a que el lecho relleno se obstruye. Las obstrucciones e incrustaciones



son un gran problema para los lavadores de lecho empacado ya que es más complicado acceder al relleno y limpiarlo que en otros tipos de lavadores. En los lavadores de lecho empacado se pueden tratar caudales de gas a partir de 900 hasta 130,000 m<sup>3</sup>/h, a temperaturas entre 4 y 38 °C para el tratamiento de contaminantes gaseosos.

➤ Lavador de columna de platos

Consiste en una columna vertical en cuyo interior se apilan horizontalmente varios platos perforados. Se utiliza comúnmente para la absorción de ácidos, dióxido de azufre y olores[3].

Los lavadores de platos se utilizan normalmente por su alta eficacia y facilidad de mantenimiento. Estos están diseñados normalmente para un fácil acceso a cada plato para el operario, lo que permite que sean relativamente fáciles de limpiar y mantener. Puede conseguirse la absorción química de contaminantes gaseosos como el dióxido de azufre, cloro y sulfuro de hidrógeno haciendo entrar en contacto la corriente de aire con agentes químicos adecuados en los platos para el tipo de contaminante a tratar. Sin embargo, se prefieren las columnas rellenas a las columnas de platos cuando se deben de tratar ácidos u otras sustancias corrosivas, porque de esta forma las columnas pueden construirse con fibra de vidrio, PVC u otros materiales resistentes a la corrosión y de menor costo. Puede diseñarse para trabajar con caudales de entre 1700 a 130,000 m<sup>3</sup>/h, temperaturas desde 4 hasta 38 °C y a presión atmosférica.

➤ Torres de rociado

Estos lavadores consisten en una columna con boquillas de rociado en la parte superior, por donde entra el líquido de lavado, y una entrada de gas cerca del fondo. Pueden operar en contracorriente o cocorriente [3]. Se utilizan para la eliminación de gases ácidos y olores.

Las torres de rociado tienen una menor capacidad de transferencia de materia, por lo que se limitan a tratar gases altamente solubles. Las concentraciones de contaminantes habituales son del orden de 100 a 10,000 mg/m<sup>3</sup>. Estos lavadores no tienden a ensuciarse tanto como los lavadores de relleno, pero para capturar partículas finas se requieren relaciones líquidos-gas altas (> 3 l/m<sup>3</sup>). Los límites y restricciones de las torres de rociado son el caudal de gas entre 2,500 y 170,000 m<sup>3</sup>/h, a una temperatura desde 4 hasta 38 °C y a presión atmosférica.

En la Tabla 1.1 se muestran las ventajas y desventajas tanto generales como particulares de los lavadores. En cuanto a la economía de los lavadores húmedos, mostrada en la Tabla 1.2, podemos observar costos de inversión, costos operativos y rentabilidad anuales aproximados.

**Tabla 1.1.** Ventajas y desventajas de los lavadores húmedos.

<b>Ventajas</b>	<b>Desventajas</b>
<b><u>Generales</u></b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Amplia gama de usos.</li> <li>• Eficacia muy alta.</li> <li>• Instalación compacta gracias a una relación favorable entre capacidad y volumen del dispositivo.</li> <li>• Tecnología simple y robusta.</li> <li>• Mantenimiento simple.</li> <li>• Solo algunos componentes sensibles al desgaste.</li> <li>• Puede manejar gas/polvo inflamable y explosivo con poco riesgo.</li> <li>• Puede enfriar corriente de gas caliente.</li> <li>• Puede manejar neblinas.</li> <li>• Permite neutralizar gases y polvos corrosivos.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se requiere agua o agentes químicos diluidos para la restitución del agua purgada y de las pérdidas por evaporación.</li> <li>• El agua residual generada por la sustitución del líquido de lavado requiere tratamiento.</li> <li>• Se requieren agentes acondicionadores (ácidos, bases, oxidantes, ablandadores) para muchas aplicaciones.</li> <li>• El polvo, separado como lodo, debe ser tratado para su reutilización o desecho debido a que las partículas recogidas pueden estar contaminadas y/o no ser reciclables.</li> <li>• Material de relleno sensible a obstrucción por polvo o grasa.</li> <li>• Potencial de corrosión.</li> </ul>
<b><u>Lavadores de lecho empacado</u></b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Caída de presión de baja a media.</li> <li>• Los lavadores de plástico y de plástico reforzado con fibra de vidrio (FRP) pueden operar en atmosferas altamente corrosivas.</li> <li>• Alta transferencia de materia.</li> <li>• Permite recoger gases y partículas.</li> <li>• Bajo coste de inversión.</li> <li>• Bajos requisitos de espacio.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tendencia a taponamiento del lecho.</li> <li>• Costes de mantenimiento relativamente altos, en comparación con otras técnicas de lavado.</li> <li>• Si se utiliza una construcción de Fibras de Refuerzo con Polímeros (FRP), es sensible a la temperatura.</li> <li>• Costes de mantenimiento relativamente altos.</li> </ul>

**Tabla 1.1.** Ventajas y desventajas de los lavadores húmedos. (Continuación)

<b>Ventajas</b>	<b>Desventajas</b>
<i>Lavador de columna de platos</i>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Flexibilidad de condiciones operativas (variación de caudal).</li> <li>• Alta versatilidad en caso de bajo caudal de gas, ya que también puede operar con bajo caudal de líquido.</li> <li>• Ofrece absorción de gas y recogida de polvo en una sola unidad.</li> <li>• Mejora el contacto entre las fases gas y líquido para eliminación de SO<sub>2</sub>.</li> <li>• Fácil mantenimiento y operación.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Acumulación de polvo alrededor de las válvulas y/o en los platos</li> <li>• Mayores costes que otros lavadores húmedos.</li> </ul>
<i>Torres de rociado</i>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Baja caída de presión.</li> <li>• Las construcciones de FRP pueden operar en atmósferas muy corrosivas.</li> <li>• Bajo consumo de energía</li> <li>• Bajos costes de inversión.</li> <li>• Relativamente libre de obstrucciones.</li> <li>• Requisitos de espacio relativamente pequeños.</li> <li>• Permite recoger gases y partículas.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Baja eficacia de transferencia de masa.</li> <li>• Baja eficacia de eliminación de partículas finas.</li> <li>• Si se utiliza una construcción de FRP, es sensible a la temperatura.</li> <li>• Altos costes operativos.</li> </ul>

## 1.2 Métodos de tratamiento de aguas residuales

El agua residual, incorpora diversas sustancias en suspensión, coloidal o disuelta que contaminan y degradan su calidad o pureza. Un agua contaminada necesariamente tendrá restricciones en cuanto a sus posibles usos y podrá implicar riesgos a la salud y cambios en el equilibrio ecológico del cuerpo receptor. Por ello, es necesario eliminar, por medio de un proceso de tratamiento, las sustancias que la contaminan y la hacen inadecuada para su descarga en el ambiente o para su reutilización. Para el tratamiento de aguas residuales o contaminadas existen diversos procesos químicos y operaciones unitarias que con una adecuada selección y combinación, pueden resolver la mayoría de las necesidades de disposición final o reaprovechamiento.

En términos muy generales, existen procesos fisicoquímicos y procesos biológicos. Los primeros hacen uso de las diferencias en ciertas propiedades entre el contaminante y el agua (operaciones de sedimentación y flotación, por ejemplo) o, mediante la adición de reactivos, cambian la forma del contaminante a una más fácil de separar del agua, o bien inofensiva. Los segundos utilizan microorganismos que se alimentan de la materia orgánica contaminante y con ello, la eliminan del agua en forma de nuevas células o de gases, que pueden separarse fácilmente del agua en tratamiento. Se puede considerar que las reacciones bioquímicas que se llevan a cabo en estos procesos son las mismas que se realizan en el medio natural (río, lago, suelo, etc.), sólo que en forma controlada dentro de tanques o reactores y a velocidades de reacción mayores.

### **1.3 Métodos biotecnológicos para el tratamiento de aguas residuales.**

Por cuestiones técnicas y económicas, los procesos fisicoquímicos se aplican predominantemente en el tratamiento de aguas con contaminantes inorgánicos, materia orgánica no biodegradable o compuestos tóxicos para los microorganismos. Los procesos biológicos se emplean cuando los principales contaminantes son orgánicos biodegradables, así como algunos aniones inorgánicos (nitratos, nitritos, sulfatos, sulfuros, fosfatos). De esta manera, salvo muy contadas excepciones, los desechos líquidos de la industria alimentaria, la agroindustria, algún tipo de petroquímica y farmacéutica, así como las aguas negras municipales, son tratados por vía biológica. El hecho de utilizar una herramienta disponible en la naturaleza, los microorganismos hace que técnica, económica y ecológicamente, los procesos biotecnológicos sean más adecuados para manejar este tipo de desechos.

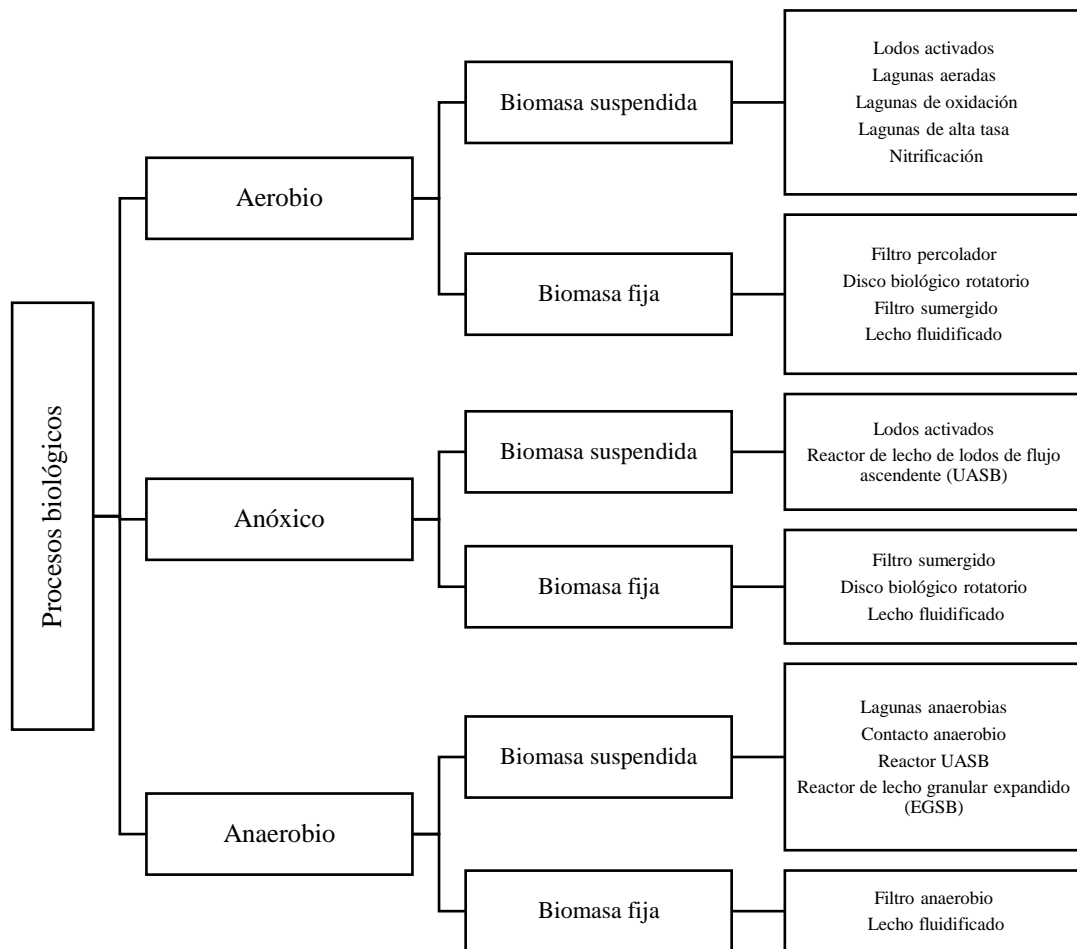


Figura 1.1 Clasificación de los diversos procesos de tratamiento de aguas residuales en función de la forma de agregación de la biomasa (microorganismos) y de la presencia o ausencia de oxígeno en el medio.

La biotecnología ambiental aplicada al tratamiento de agua cuenta con un número importante de procesos, que pueden clasificarse en dos grandes grupos: aerobios y anaerobios. Esto se traduce en sistemas muy diferentes entre sí, tanto en su microbiología, como en sus aplicaciones, su ingeniería su control. En la Figura 1.1 se clasifican los diversos procesos biológicos existentes en función de la presencia o ausencia del oxígeno disuelto, así como de la forma en que se encuentran los microorganismos en el reactor biológico. El medio aerobio tiene oxígeno disuelto y el medio anaerobio no lo tiene.

## 1.4 Procesos anaerobios para el tratamiento de aguas residuales

Se conoce como digestión anaerobia a la transformación bacteriana, en ausencia de oxígeno, de residuos orgánicos, líquidos o semisólidos, a metano. Esta transformación se lleva a cabo mediante la hidrólisis y la conversión de sustancias de naturaleza orgánica en productos intermedios para llegar finalmente a la mezcla gaseosa llamada biogás, compuesta por metano y dióxido de carbono, principalmente [4]. Los procesos anaerobios tienen bajos requerimientos energéticos e inclusive pueden generar energía por medio del aprovechamiento del biogás, producen pocos lodos de purga y estabilizan la materia orgánica manteniendo los nutrientes fertilizantes, lo que la transforma en un mejorador de suelos. La digestión anaerobia se ha aplicado básicamente en el manejo de residuos orgánicos rurales (animales y agrícolas), lodos de purga de plantas de tratamiento de aguas residuales, y más recientemente, en el tratamiento de aguas residuales, tanto industriales como domésticas. Las ventajas de la digestión anaerobia frente a procesos aerobios convencionales se hacen más claras conforme la concentración de materia orgánica aumenta, y las desventajas tradicionales han sido limitadas por los avances tecnológicos en estos reactores, hechos que explican su aplicación actual y crecimiento futuro. Hoy en día, la selección más adecuada para tratar un agua residual biodegradable mediana o altamente concentrada es la unión del proceso anaerobio seguido de un depurado aerobio.

Los sistemas anaerobios han sido clasificados en tres generaciones. La primera, son los procesos de baja tasa, engloba aquellos caracterizados por tener la biomasa mayormente sedimentada y sin contacto con el agua residual en tratamiento —fosa séptica, tanque imhoff, laguna anaerobia— así como reactores más avanzados, con mezcla y biomasa en suspensión. El sistema conocido como contacto anaerobio —versión anaerobia de los lodos activados— constituye un proceso de transición entre la primera y segunda generaciones, al incorporar un reactor mezclador, un sedimentador y la recirculación de lodos. En los de segunda generación, los microorganismos son retenidos en el reactor por medio de una biopelícula adherida a un soporte (empaquetado), o bien, por medio de su sedimentación en forma de agregados (flóculos o granos) densos. En estos sistemas se ha separado el tiempo de retención hidráulica del celular y se ha mejorado considerablemente el sistema de distribución de agua en su interior. Por último, los reactores de tercera generación también poseen los microorganismos en biopelícula o grano compacto y denso, con la particularidad que el soporte se expande o fluidifica con altas velocidades de flujo. Los resultados

más importantes obtenidos durante el desarrollo tecnológico a través de las generaciones de reactores son la disminución del tiempo de retención hidráulica de días a horas, la creación de instalaciones compactas así como el incremento de su estabilidad y de las eficiencias del tratamiento del agua residual a temperaturas por abajo de la óptima (35°C).

A continuación se hace una breve descripción de los reactores más destacados, pertenecientes a las últimas generaciones:

- Filtro anaerobio. Este sistema (Figura 1.2) consiste en un reactor de flujo ascendente o descendente empacado con soportes plásticos o piedras de tres a cinco cm de diámetro promedio. La biomasa se desarrolla en forma de biopelícula adherida al soporte, además de retenerse en los intersticios del empaque. Con este arreglo, se aumenta en forma importante el tiempo de retención celular (TRC) sobre el tiempo de retención hidráulica (TRH) lo que hace posible operar el sistema con reducidos TRH y volúmenes de reactor limitados, conservando buenas eficiencias en la remoción de materia orgánica, además de una mayor estabilidad en su operación. El coeficiente de vacío del material de empaque debe ser grande para evitar el taponamiento, lo que en caso de utilizar piedra, se traduce en un área específica inferior a  $100 \text{ m}^2/\text{m}^3$ . Este sistema puede soportar en la práctica cargas hasta  $15 \text{ kg DQO}/\text{m}^3\text{d}$ .



Figura 1.2. Filtro anaerobio

- Reactor anaerobio de lecho de lodos con flujo ascendente. El reactor anaerobio de lecho de lodos (upflow anaerobic sludge blanket - UASB) está constituido por un lecho de lodos localizado en el fondo del reactor con un volumen aproximado de  $1/4$  a  $1/3$  del volumen

total de éste (Figura 1.3). La particularidad de un reactor UASB radica en el hecho de retener dentro del reactor los microorganismos en forma de partículas o agregados densos, ya sea en forma de gránulos o floculos. Con esto, se inmoviliza la biomasa dentro del reactor y se logran las ventajas mencionadas arriba, pero con el ahorro que representa el no requerir medio de empaque.

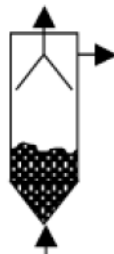


Figura 1.3. Reactor UASB

El UASB al tener flujo ascendente permite una selección de microorganismos, y favorece la formación de un lodo con buenas propiedades de floculación y sedimentación, conocido como fenómeno de granulación si da como resultado la generación de un lecho de lodo en forma granular. En el reactor UASB se procura eliminar la agitación mecánica y la formación de zonas muertas y caminos preferenciales mediante una adecuada distribución de las entradas de agua en la base del reactor. Por otro lado, posee en la parte superior un colector de gas y un separador que asegura una buena separación líquido-gas-sólido. La zona ubicada entre el lecho de lodos y las campanas colectoras de biogás contiene lodos en suspensión que han sido arrastrados por la acción turbulenta del biogás y que sedimentarán de nuevo hasta depositarse en el lecho.

El aspecto fundamental del proceso UASB lo constituyen los lodos granulares, necesarios para un correcto funcionamiento. Al arrancar un reactor UASB, lo ideal es inocularlo con un volumen suficiente de este tipo de material. En ciertos casos, un arranque sin inóculo es también posible desarrollarlo dada la capacidad de algunas aguas residuales, pero el tiempo para alcanzar los niveles de operación deseados sería alrededor de seis meses. Un reactor de UASB puede recibir cargas orgánicas hasta alrededor de 15 kg DQO/m<sup>3</sup>d. A



continuación se describen brevemente los reactores de tercera generación que buscan mejorar aún más la eficacia de operación de los reactores UASB.

- Reactor de lecho granular expandido (EGSB). Este reactor (Figura 1.4) puede considerarse una evolución a partir del reactor UASB y se encuentra entre este último y los reactores de lecho fluidificado. El concepto EGSB (expanded granular sludge bed) aprovecha las características únicas del grano anaerobio, en lo que respecta a su alta sedimentabilidad y actividad metanogénica, para llegar a un reactor esbelto (8 a 16 m) y compacto, capaz de tratar altas cargas orgánicas. Su principio se basa en la expansión del lecho de lodos granular, por medio de un flujo de recirculación y la propia ascensión del biogás. La velocidad ascendente en estos reactores varía entre 5 y 15 m/h, en función de la carga orgánica aplicada, lo que provoca una expansión del lecho del orden de 50% a 100% de su volumen sin expandir. La producción de gas por unidad de superficie del reactor (flux) contribuye en forma importante a esta expansión, pudiendo ser una limitante del sistema en caso de aplicársele altas cargas orgánicas. Este tipo de reactor puede llegar a tratar una carga orgánica de 25 kg DQO/m<sup>3</sup>d.

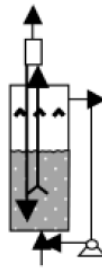


Figura 1.4. Reactor de lecho granular expandido (EGSB)

- Reactores de lecho expandido o fluidificado. Estos reactores se encuentran en la fase inicial de su aplicación comercial. Son también reactores de película fija pero el soporte utilizado es lo suficientemente pequeño y ligero para que pueda ser fluidificado con una recirculación del efluente (Figura 1.5). Los dos tipos de reactores, el reactor de lecho expandido y el reactor de lecho fluidificado, son semejantes entre sí, diferenciándose en el grado de expansión del soporte (20% para el lecho expandido, superior a 50% para el lecho

fluidificado). Su avance consiste en tiempos de retención aún menores, inferiores a doce horas, ya que la superficie de soporte disponible es muy elevada (superior a  $200 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ) y la agitación en el lecho es vigorosa, lo que reduce los problemas de transferencia de sustrato. Otra ventaja es que no presentan problemas de taponamiento. Sin embargo, requieren energía para la recirculación y la fluidización del lecho; además, su operación y arranque son en extremo delicados. Las cargas aplicadas pueden sobrepasar los  $40 \text{ kg DQO}/\text{m}^3\text{d}$ .

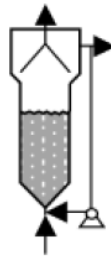


Figura 1.5. Reactor de lecho expandido o fluidificado

## 2 Análisis Pinch para la optimización energética de procesos

El Análisis Pinch se puede definir como una herramienta para la optimización de redes de transferencia de calor, el cual se basa en la aplicación de la primera y segunda leyes de la termodinámica. El análisis pinch busca minimizar el requerimiento energético de una planta de proceso, mediante la organización del sistema en una red, donde la energía disponible es aprovechada en una topología donde las corrientes calientes y las corrientes frías alcanzan el objetivo de máximo aprovechamiento energético [5]. El análisis pinch permite entender un proceso como un sistema en el cual hay corrientes con suficiente carga energética y otras con necesidad de dicha carga energética; de manera que el objetivo radica en organizar el sistema de transferencia en una red, siguiendo el patrón de organización del método que bifurca el sistema en dos regiones claramente definidas, como se verá más adelante.

En esta sección se presentan los conceptos clave del análisis pinch de forma práctica utilizando dos procesos simples como ejemplo para mostrar cómo es posible determinar objetivos de energía y alcanzarlos con una red de intercambiadores de calor.

## 2.1 Recuperación de calor e intercambio de calor

### 2.1.1 Conceptos básicos de intercambio de calor

Consideremos el proceso simple mostrado en la Figura 2.1 [6]. Se muestra un reactor químico que puede ser tratado como una caja negra. Un líquido es suministrado al reactor el cual debe ser calentado desde la temperatura ambiente a la temperatura de operación del reactor.

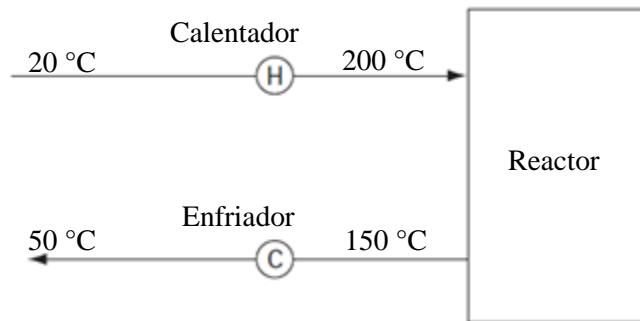


Figura 2.1. Diagrama de un proceso simple.

De forma contraria, un producto líquido caliente proveniente del sistema de separación necesita ser enfriado a una temperatura más baja. Cualquier flujo que requiera ser calentado o enfriado, pero que no cambia en composición, se define como una *corriente*. La alimentación al reactor, la cual inicia fría y necesita ser calentada, se conoce como *corriente fría*. De esta forma, el producto caliente que debe ser enfriado es llamado *corriente caliente*. Es necesario mencionar que el proceso que ocurre dentro del reactor no es una corriente porque este ocurre un cambio en la composición química.

Para llevar a cabo el calentamiento y el enfriamiento, un calentador de vapor debe colocarse en la corriente fría y un enfriador de agua en la corriente caliente. Los datos para un ejemplo de este proceso se muestran en la Tabla 2.1, los cuales son el flujo másico ( $\dot{m}$ ), el calor específico a presión constante ( $c_p$ ), el caudal de capacidad calorífica a presión constante (es el producto del  $\dot{m}$  por el  $c_p$ ), las temperaturas de suministro ( $T_s$ ) y objetivo ( $T_o$ ) y el calor contenido en la corriente ( $Q$ , es el

producto del  $\dot{m}c_p$  por la diferencia de temperaturas  $\Delta T$ ). Claramente podemos observar que se necesitan 180 kW de calentamiento con vapor y 180 kW de enfriamiento con agua para operar el pequeño sistema de la Figura 2.1.

**Tabla 2.1.** Datos para el ejemplo simple de dos corrientes.

	$\dot{m}$ (kg/s)	$c_p$ (kJ/kgK)	$\dot{m}c_p$ (kW/K)	$T_s$ (°C)	$T_o$ (°C)	$Q_{\text{contenido}}$ (kW)
Corriente Fría	0.25	4	1.0	20	200	-180
Corriente caliente	0.4	4.5	1.8	150	50	+180

Se puede reducir el consumo de energía si se recupera calor de la corriente caliente y se usa para calentar la corriente fría en un intercambiador de calor, de esta forma se necesitará menos vapor y agua para satisfacer las demandas restantes. El esquema resultante sería el mostrado en la Figura 2.2 [6]. Lo ideal sería recuperar totalmente los 180 kW disponibles en la corriente caliente para calentar la corriente fría. Sin embargo, esto no es posible debido a las limitaciones de temperatura. Por la Segunda Ley de la Termodinámica, no podemos usar una corriente caliente de 150 °C para calentar una corriente fría hasta 200 °C. Por lo que la cuestión es ¿cuánto calor se puede recuperar realmente, qué tan grande debería ser el intercambiador y cuáles serían las temperaturas alrededor de él?

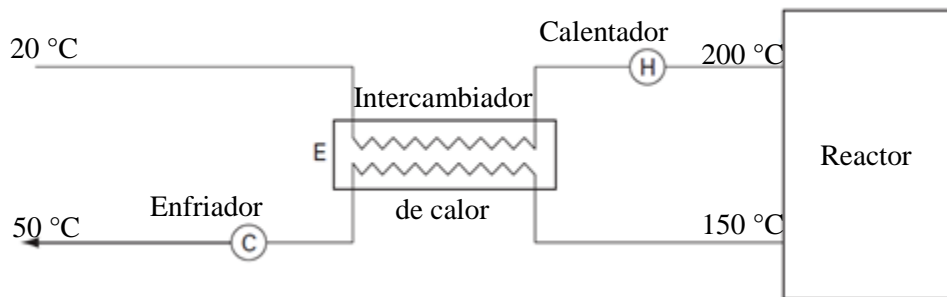


Figura 2.2. Diagrama del proceso simple con intercambio de calor.

### 2.1.2 El diagrama de temperatura-entalpía

Un método útil de visualización es el diagrama de temperatura-calor contenido, que se muestra en la Figura 2.3[6]. El calor contenido (H) de una corriente (kW) es frecuentemente llamada su entalpía; ésta no debe ser confundida con el término termodinámico, entalpía específica (kJ/kg). El flujo de calor diferencial  $dQ$ , cuando es agregado a una corriente de proceso, incrementará su entalpía de la siguiente forma:

$$\Delta H = \dot{m}c_p dT = \dot{m}c_p (T_o - T_s) \quad (2.1)$$

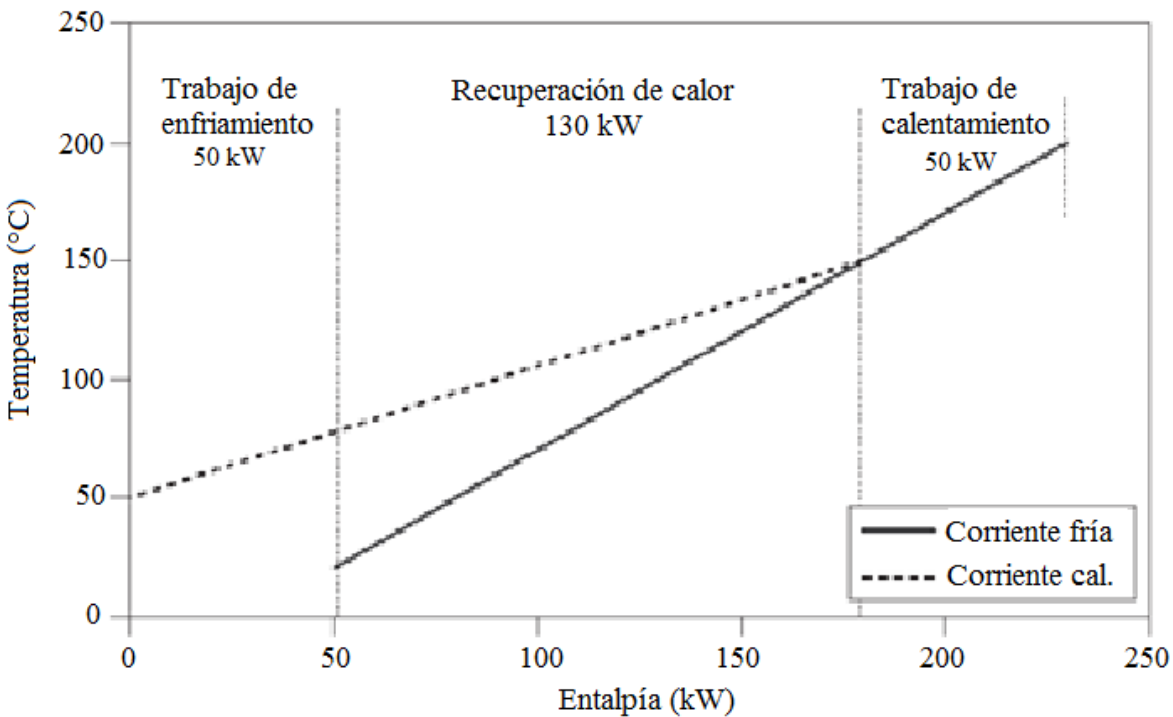


Figura 2.3. Corrientes graficadas en un diagrama temperatura-entalpía (T-H) con  $\Delta T_{\min} = 0$ .

Por lo tanto, con el  $\dot{m}c_p$  asumido constante, para una corriente que requiere calor (corriente fría), desde una temperatura suministrada ( $T_s$ ) hasta la temperatura objetivo ( $T_o$ ) el calor total agregado será igual al cambio en la entalpía de la corriente:

$$Q = \int_{T_s}^{T_o} \dot{m}c_p dT = \dot{m}c_p (T_o - T_s) = \Delta H \quad (2.2)$$

y la pendiente de la línea representando la corriente es:

$$\frac{dT}{dQ} = \frac{1}{\dot{m}c_p} \quad (2.3)$$

El diagrama T-H puede utilizarse para representar intercambio de calor, debido a una característica muy útil. Es decir, que debido a que lo importante son los cambios de entalpía de las corrientes, una corriente dada puede ser graficada en cualquier lugar del eje de la entalpía. Siempre que esta tenga la misma pendiente y se encuentre entre las mismas temperaturas de suministro y objetivo, donde sea que esta sea dibujada en el eje H, representa la misma corriente. La Figura 2.3 muestra las corrientes caliente y fría, del ejemplo que se ha estado trabajando, graficadas en el diagrama T-H. Para un intercambio factible entre las dos corrientes, la corriente caliente debe tener una temperatura más alta en todos los puntos que la corriente fría, por lo que esta debería estar arriba de la corriente fría en la gráfica. En la Figura 2.3 se observa un caso limitante: la corriente caliente no puede ser movida más hacia la derecha para obtener una recuperación de calor mayor, debido a que la diferencia de temperatura entre la corriente caliente y fría en la salida fría del intercambiador ya es cero. Esto quiere decir que el calor requerido arriba de 150 °C (es decir, 50 kW) tiene que ser obtenido de vapor de calentamiento. De forma contraria, aunque 130 kW pueden ser usados para el intercambio de calor, 50 kW de los disponibles en la corriente caliente deben ser rechazados a agua de enfriamiento. Sin embargo esta situación no se puede realizar en la práctica, ya que una diferencia de temperaturas de cero podría requerir un intercambiador de calor infinitamente grande.

En la Figura 2.4 [6] se muestra que la corriente fría se movió en el eje H en relación a la corriente caliente por lo que la diferencia de temperatura mínima,  $\Delta T_{\min}$  ya no es cero, pero es positiva y finita (20 °C en este caso). El efecto de este cambio es el incremento en los servicios de calentamiento y enfriamiento en cantidades iguales y la reducción de la carga en el intercambiador por la misma cantidad (20 kW) por lo que 70 kW de calentamiento y enfriamiento externo son requeridos. Este arreglo es ahora factible debido a que  $\Delta T_{\min}$  ya no es cero. Claramente un cambio más allá de este implica valores de  $\Delta T_{\min}$  más grandes y consumos de corrientes de servicio calientes y frías mayores. Los valores típicos que se le dan a  $\Delta T_{\min}$  son entre 5°C y 20 °C, pero no es una regla [7].

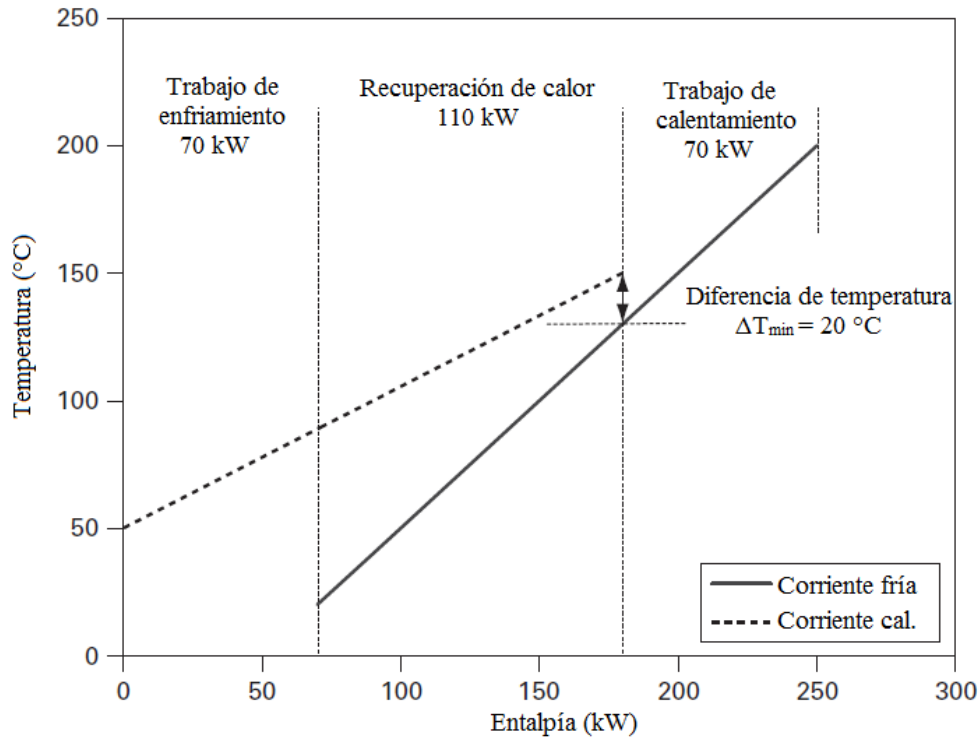


Figura 2.4. Diagrama T-H con  $\Delta T_{\min} = 20 \text{ }^{\circ}\text{C}$ .

### 2.1.3 Las curvas compuestas

Para manipular corrientes múltiples agregamos juntas las cargas de calor o los flujos de capacidad calorífica de todas las corrientes existentes sobre cualquier rango de temperaturas. De esta forma una composición de todas las corrientes calientes y otra de todas las corrientes frías puede ser producida en el diagrama T-H y manejadas de la misma forma que el problema de las dos corrientes. En la Figura 2.5 [6] tres corrientes calientes son graficadas individualmente, cada una con sus temperaturas de suministro y objetivo, definiendo una serie de intervalos de temperatura  $T_1$ - $T_5$ . Entre  $T_1$  y  $T_2$ , sólo la corriente B existe, por lo que el calor disponible en este intervalo está dado por  $(\dot{m}c_p)_B(T_1 - T_2)$ . Sin embargo, entre  $T_2$  y  $T_3$  existen tres corrientes por lo que el calor disponible en este intervalo es  $[(\dot{m}c_p)_A + (\dot{m}c_p)_B + (\dot{m}c_p)_C][T_2 - T_3]$ . Una serie de valores pueden ser obtenidos de esta forma y los resultados graficados nuevamente contra los intervalos de temperatura como se muestra en la Figura 2.6 [6]. La gráfica resultante T-H es una única curva representando todas las corrientes calientes, conocida como *curva de composición caliente*. Un

procedimiento similar da como resultado una *curva de composición fría* de todas las corrientes frías en un problema.

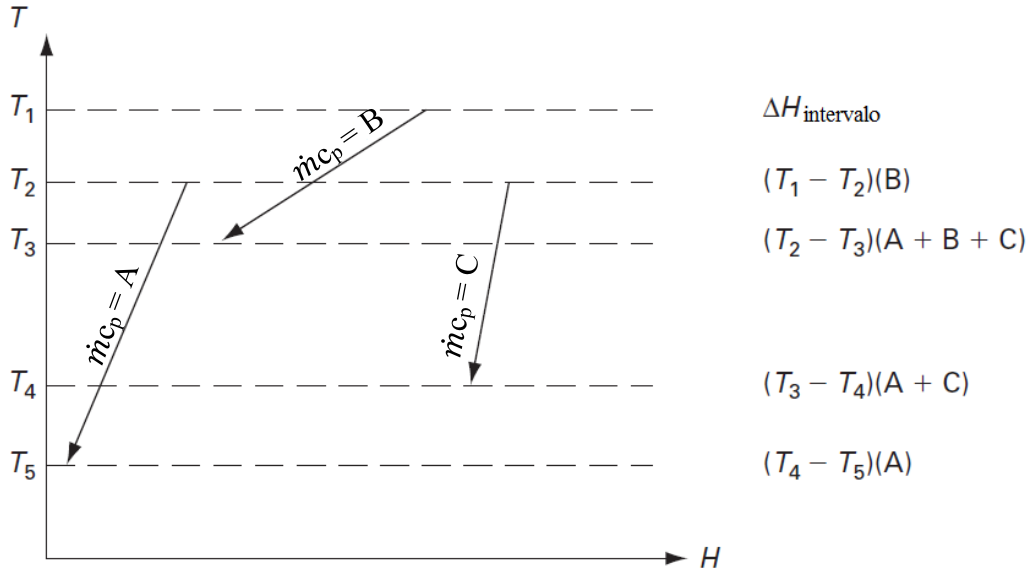


Figura 2.5. Formación de la curva compuesta caliente.

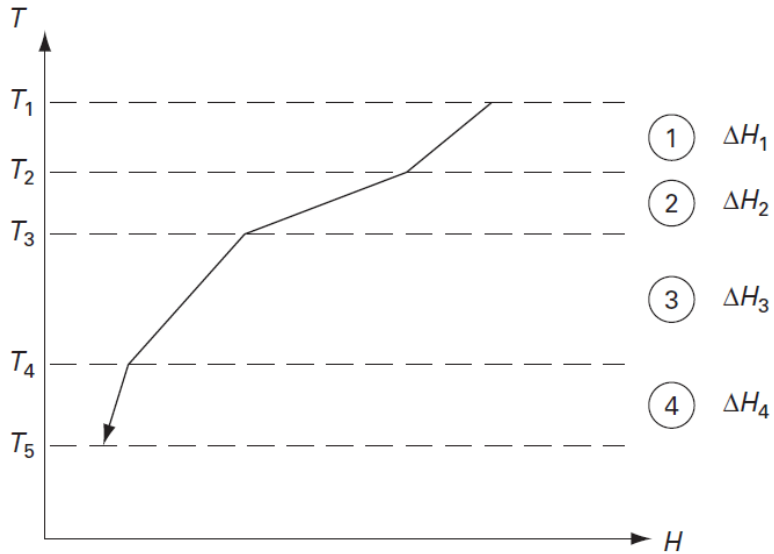


Figura 2.6. Curva compuesta caliente formada.

La superposición entre las curvas compuestas (Figura 2.7) representa la cantidad máxima de calor posible que se puede recuperar dentro del proceso. El excedente en la parte inferior de la curva de composición caliente representa la cantidad mínima de enfriamiento externo requerido y el



excedente en la parte superior de la curva de composición fría representa la cantidad mínima de calentamiento externo necesario. La Figura 2.7 muestra un par típico de curvas de compuestas para un problema de cuatro corrientes cuyos datos se pueden ver en la Tabla 2.2. El cambio en las curvas lleva a un comportamiento similar al mostrado en el problema de dos corrientes. Ahora la naturaleza “retorcida” de las curvas compuestas significa que  $\Delta T_{\min}$  puede ocurrir en cualquier lugar de la región intermedia y no justo al final de una.

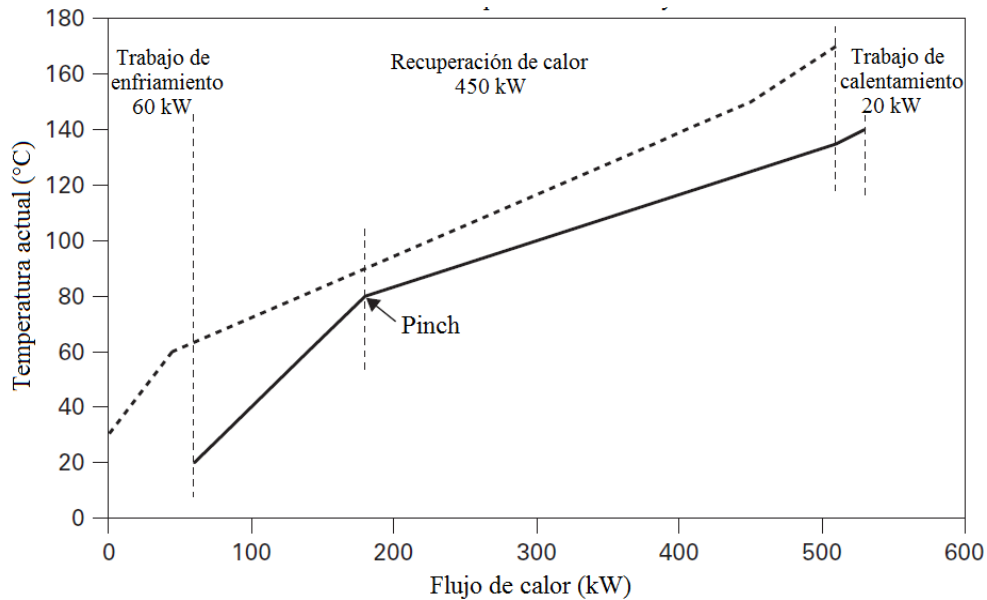


Figura 2.7. Curvas compuestas para el problema de cuatro corrientes.

Para un valor dado de  $\Delta T_{\min}$  las cantidades de calor predichas, proveniente de corrientes de servicios, son las mínimas requeridas para resolver el problema de recuperación de calor. Hay que notar que aunque existen varias corrientes en el problema, en general  $\Delta T_{\min}$  sólo ocurre una vez en el punto de enfoque más estrecho, el cual es llamado *pinch* o “pellizco”. Esto significa que es posible diseñar una red la cual usa los mínimos requerimientos de corrientes de servicios, donde solamente los intercambiadores de calor en el pinch necesitan operar a valores de  $\Delta T$  por debajo de  $\Delta T_{\min}$ .

**Tabla 2.2.** Datos para el ejemplo de cuatro corrientes.

Numero de corriente y tipo	$\dot{m}c_p$ (kW/K)	Temperatura real		Temperatura desplazada	
		$T_s$ (°C)	$T_o$ (°C)	$T_s'$ (°C)	$T_o'$ (°C)
1. Fría	2	20	135	25	140
2. Caliente	3	170	60	165	55
3. Fría	4	80	140	85	145
4. Caliente	1.5	150	30	145	25

#### 2.1.4 Un procedimiento de focalización: la "Tabla de problema"

En principio, las "curvas" de composición descritas en la subsección anterior se utiliza un algoritmo para establecer los objetivos algebraicamente, el método "Tabla de problema".

En la descripción de la construcción de curvas compuestas (Figura 2.5) [6], se mostró cómo los intervalos de balance de entalpía se establecieron en base a las temperaturas de suministro y objetivo de las corrientes. Lo mismo se puede hacer para los flujos fríos y calientes, para permitir la máxima cantidad posible de intercambio de calor dentro de cada intervalo de temperatura. La única modificación necesaria es asegurar que dentro de cualquier intervalo las corrientes calientes y corrientes frías están apartadas al menos  $\Delta T_{\min}$ . Esto se hace mediante el uso de *temperaturas desplazadas*, las cuales se establecen en  $1/2\Delta T_{\min}$  (5 °C en este ejemplo) por debajo en las temperaturas de las corrientes calientes y  $1/2\Delta T_{\min}$  por encima de las temperaturas de las corrientes frías.

En la Tabla 2.2 se muestran las temperaturas desplazadas para el problema de ejemplo con cuatro corrientes. La Figura 2.8 muestra las corrientes en una representación esquemática con una escala vertical de temperatura, con límites de intervalos sobrepuestos (como temperaturas desplazadas). Así, por ejemplo, en el intervalo número 2 de la Figura 2.8, entre las temperaturas desplazadas 145 °C y 140 °C, las corrientes 2 y 4 (las corrientes calientes) van desde 150 °C a 145 °C, y la corriente 3 (la corriente fría) a partir de 135 °C a 140 °C.

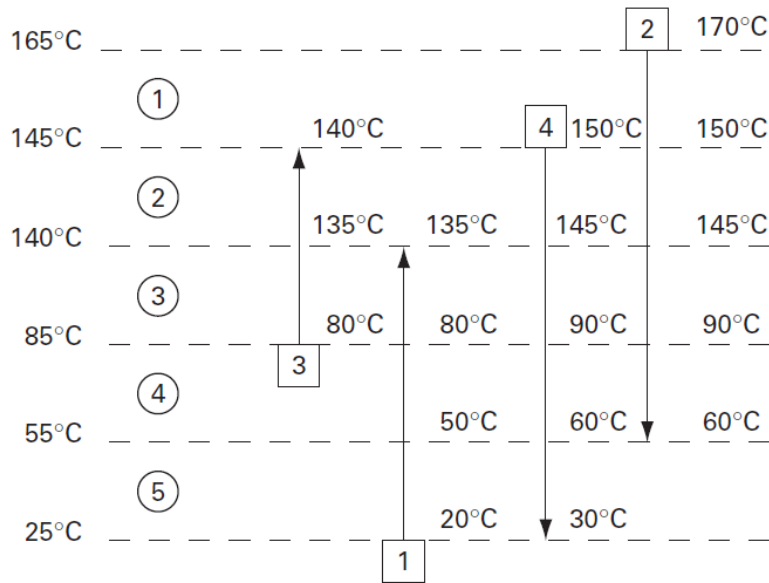


Figura 2.8. Intervalos de corriente y temperaturas.

La configuración de los intervalos de esta manera garantiza que sea posible un intercambio de calor completo dentro de cualquier intervalo. Por lo tanto, cada intervalo tendrá ya sea un superávit o déficit neto de calor según lo dictado por el balance de entalpía, pero nunca ambos. Conociendo la población de corrientes en cada intervalo (de la Figura 2.8) [6], los balances de entalpía pueden ser fácilmente calculados para cada uno de acuerdo a:

$$\Delta H_i = (T'_i - T'_{i+1})(\sum CP_F - \sum CP_C)_i \quad (2.4)$$

Para cualquier intervalo  $i$ . Los resultados se muestran en la Tabla 3.3 y la última columna indica si un intervalo tiene superávit o déficit de calor. Por tanto, sería posible producir un diseño de red factible basada en la suposición de que todos los intervalos con "superávit" rechazan calor hacia una corriente externa fría, y todos los intervalos con "déficit" toman calor de una corriente externa caliente. Sin embargo, esto no sería muy sensible porque implicaría rechazar y aceptar calor a temperaturas inapropiadas.

**Tabla 2.3.** Intervalos de temperatura y cargas de calor para el problema de cuatro corrientes.

	Número de intervalo i	$T'_i - T'_{i+1}$ (°C)	$\Sigma \dot{m}c_p$ CALIENTE - $\Sigma \dot{m}c_p$ FRIO (kW/°C)	$\Delta H_i$ (kW)	Superávit o déficit
$T'_1 = 165$ °C	1	20	+3.0	+60	Superávit
$T'_2 = 145$ °C	2	5	+0.5	+2.5	Superávit
$T'_3 = 140$ °C	3	55	-1.5	-82.5	Déficit
$T'_4 = 85$ °C	4	30	+2.5	+75	Superávit
$T'_5 = 45$ °C	5	30	-0.5	-15	Déficit
$T'_6 = 25$ °C					

Ahora, sin embargo, aprovecharemos una característica clave de los intervalos de temperatura. Es decir, cualquier cantidad de calor disponible en el intervalo i es lo suficientemente caliente como para suministrar cualquier servicio en el intervalo i + 1. Esto se muestra en la Figura 2.9 [6], donde los intervalos 1 y 2 de la Figura 2.8 se utilizan como una ilustración. En lugar de enviar los 60 kW de calor excedente del intervalo 1 a una corriente de servicio fría, puede ser enviado hacia abajo al intervalo 2.

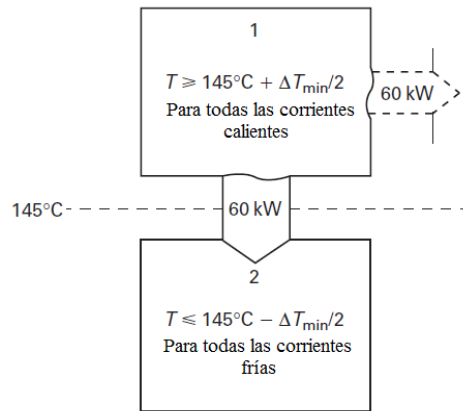


Figura 2.9. Uso del calor excedente de un intervalo.

Por consiguiente, es posible establecer una "cascada" de calor, como se muestra en la Figura 2.10 (a) [6]. Suponiendo que no se suministra calor extra al intervalo 1 desde una corriente de servicio

caliente, a continuación, el excedente de 60 kW del intervalo 1 se conecta en cascada al intervalo 2.

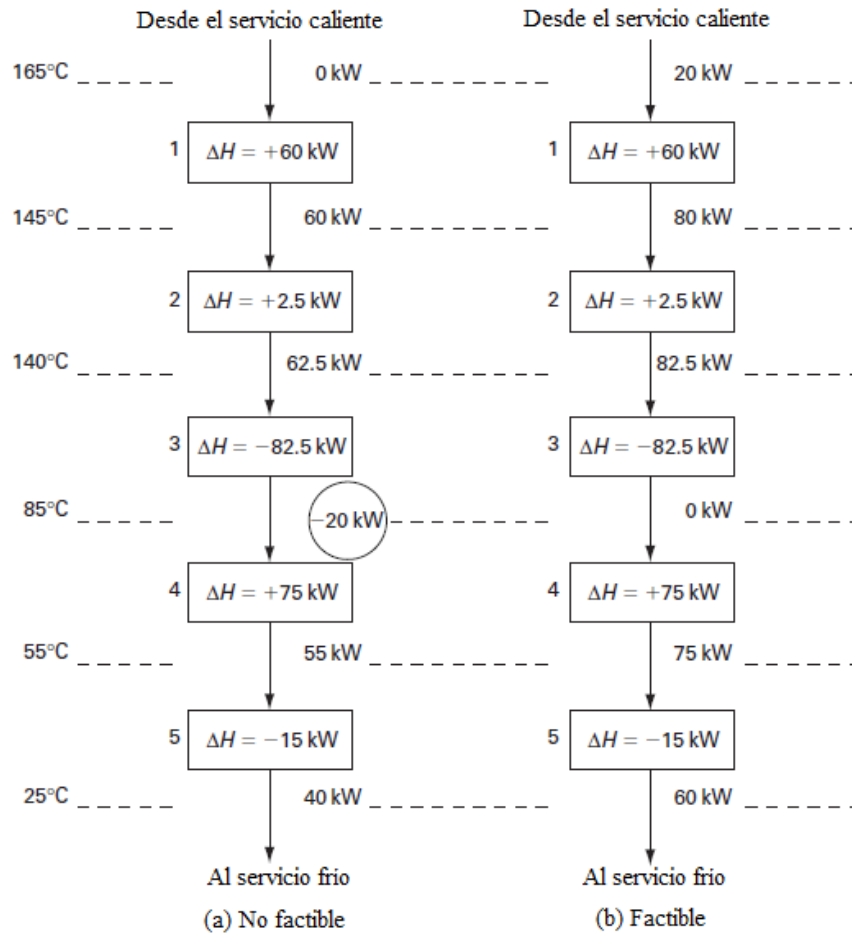


Figura 2.10. Cascadas de calor no factible y factible.

Allí se une el excedente de 2.5 kW del intervalo 2, por lo que 62.5 kW en cascada llegan al intervalo 3. El intervalo 3 tiene un déficit de 82.5 kW, por lo tanto, después de aceptar los 62.5 kW que puede ser considerado como la transmisión de un déficit de 20 kW al intervalo 4. El intervalo 4 tiene un superávit de 75 kW y así pasa un superávit de 55 kW al intervalo 5. Por último, el déficit de 15 kW en el intervalo 5 significa que 40 kW es la energía en cascada final que llega a una corriente de servicio fría. Esto, de hecho, es el saldo neto de entalpía en todo el problema. Mirando hacia atrás en los flujos de calor entre los intervalos en la Figura 2.10 (a), claramente el flujo negativo de 20 kW entre los intervalos 3 y 4 no es termodinámicamente factible. Para que sea

factible (es decir, igual a cero), 20 kW de calor deben ser añadidos de una corriente de servicio externa y en cascada a través del sistema, como se muestra en la Figura 2.10 (b) [6]. Esto significa que todos los flujos se incrementan en 20 kW. El resultado neto de esta operación es que los requisitos de corrientes de servicios mínimos han sido predichos (es decir, 20 kW de corriente caliente y 60 kW de corriente fría). Además, la posición del pinch ha sido localizada. Esto es en el límite del intervalo con una temperatura desplazada de 85 °C en el que el flujo de calor es cero. Comparando los resultados obtenidos por este enfoque con los resultados de las curvas de composición, como se observó en la Figura 2.7, se obtiene la misma información, pero la tabla de problemas proporciona un marco sencillo para el análisis numérico. Para problemas sencillos se puede evaluar rápidamente a mano. Para los problemas más grandes, se implementa fácilmente como una hoja de cálculo u otro software de ordenador.

## 2.2 Diseño de la red de intercambiadores de calor

Para el diseño de una red de intercambiadores de calor, la representación más útil es el "diagrama de rejilla" (Figura 2.11) [6]. Las corrientes se dibujan como líneas horizontales, con las temperaturas altas en la izquierda y las corrientes calientes en la parte superior; los intercambiadores de calor están representados por dos círculos unidos por una línea vertical. La rejilla es más fácil de dibujar que un diagrama de flujo, especialmente porque los intercambiadores de calor se pueden colocar en cualquier orden sin tener que volver a dibujar el sistema de corriente. Además, la rejilla representa la naturaleza contracorriente del intercambio de calor, por lo que es fácil comprobar la viabilidad de temperatura del intercambiador. Por último, el pinch se representa con facilidad en la red (como se muestra en la Figura 2.11), mientras que no se puede representar en un diagrama de flujo.

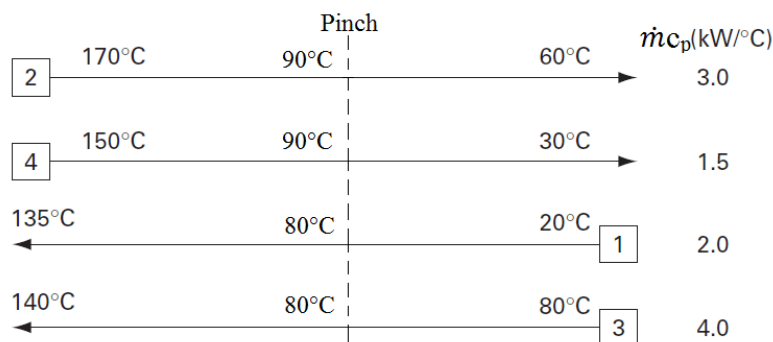


Figura 2.11. Diagrama de rejilla inicial para el problema de cuatro corrientes.

### 2.2.1 Diseño para una máxima recuperación de energía

Si observamos el diagrama de rejilla anterior podemos notar que el pinch se encuentra a la temperatura desplazada de 85 °C correspondiendo a 90 °C para las corrientes calientes y 80 °C para las corrientes frías. Observe que la corriente 3 inicia a la temperatura del pinch. De hecho, en problemas donde todas las corrientes tienen un flujo de capacidad calorífica ( $\dot{m}c_p$ ) constante, el pinch siempre es causado por la entrada de una corriente, ya sea caliente o fría.

Por encima del pinch no se debe usar ninguna corriente de servicio de enfriamiento. Esto significa que, por encima, todas las corrientes calientes deben ser llevadas a la temperatura del pinch por intercambio de calor con corrientes frías. Por lo tanto, debemos iniciar el diseño en el pinch buscando los intercambios que cumplen esta condición. En este ejemplo, por encima del pinch hay dos corrientes calientes, por lo tanto, se requieren dos intercambios al pinch. En la Figura 2.12 (a) [6] se muestra un intercambio entre las corrientes 2 y 1, con un gráfico T-H del intercambio que se muestra en el recuadro. Se debe tener en cuenta que las direcciones de las corrientes se han invertido a fin de reflejar las direcciones en la representación del diagrama de rejilla.

Debido a que el  $\dot{m}c_p$  de la corriente 2 es mayor que el de la corriente 1, tan pronto como cualquier carga se coloca en el intercambiador, el  $\Delta T$  en el intercambiador se convierte en menos del  $\Delta T_{\min}$  en su extremo caliente. El intercambiador es claramente inviable y por lo tanto hay que buscar otro punto de intercambio. En la figura 2.12 (b) [6], las corrientes 2 y 3 se emparejan, y ahora los gradientes relativos del gráfico T-H quieren decir que poniendo una carga en el intercambiador se abre el  $\Delta T$ .

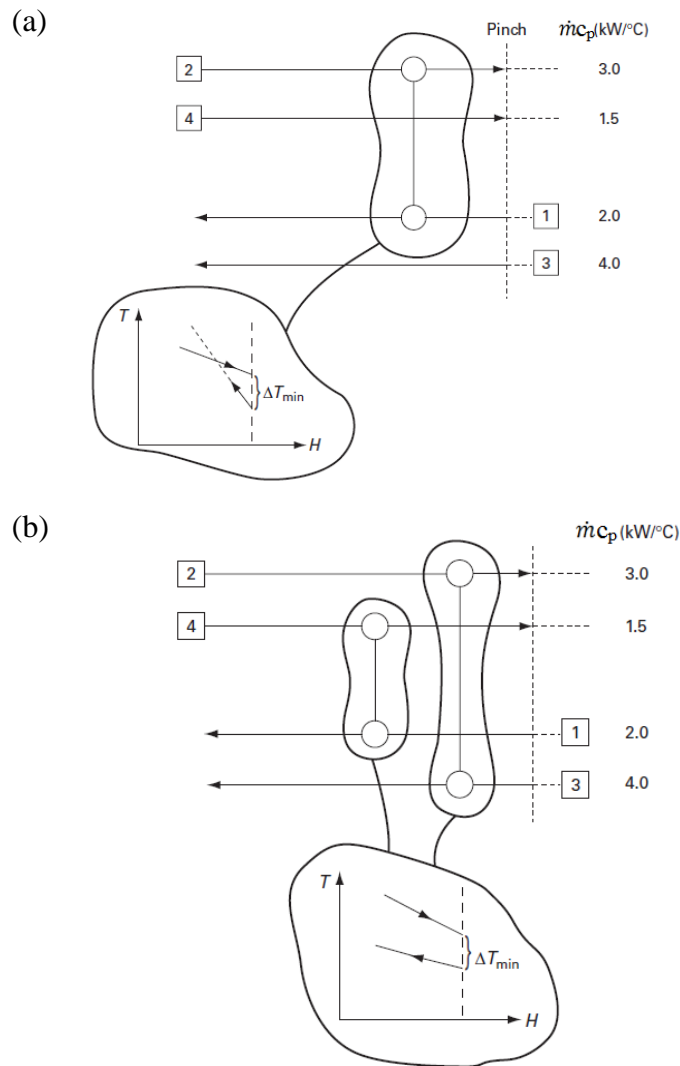


Figura 2.12. Consecuencias de realizar un intercambio de calor entre corrientes con diferentes  $\dot{m}c_p$ .

Este intercambio es por lo tanto aceptable. Si se pone en una decisión de diseño firme, a continuación, la corriente 4 debe ser llevada a la temperatura del pinch emparejándola con la corriente 1 (es decir, esta es la única opción que queda para la corriente 4. Tomando en cuenta los tamaños relativos de los  $\dot{m}c_p$  para las corrientes 4 y 1, el intercambio es factible ya que  $(\dot{m}c_p)_4 < (\dot{m}c_p)_1$ . No hay más corrientes que requieran refrigeración para alcanzar la temperatura del pinch y por lo tanto se ha encontrado un diseño factible en el pinch. Es el único diseño de pinch factible porque sólo se requieren dos intercambios al pinch. En resumen, en el diseño inmediatamente por encima del pinch, se debe cumplir con el criterio:



$$\dot{m}(c_p)_{CAL} \leq \dot{m}(c_p)_{FRIO}$$

Después de haber encontrado un diseño pinch viable es necesario decidir sobre las cargas de calor en los intercambios. La recomendación es "maximizar la carga de calor a fin de satisfacer por completo una de las corrientes". Esto asegura que se emplee el número mínimo de unidades de intercambio de calor. Por lo tanto, desde que la corriente 2 por encima del pinch requiere 240 kW de refrigeración y la corriente 3 por encima del pinch requiere 240 kW de calefacción, coincidentemente el intercambio entre estas dos es capaz de satisfacer ambas corrientes. Sin embargo, el intercambio entre las corrientes 4 y 1 sólo puede satisfacer a la corriente 4, que tiene una carga de 90 kW y por lo tanto el calentamiento de la corriente 1 sólo puede llegar hasta 125 °C. Dado que ambas corrientes calientes han sido completamente agotadas por estos dos pasos de diseño, la corriente 1 se debe calentar de 125 °C a la temperatura objetivo de 135 °C por una corriente de servicio caliente como se muestra en la Figura 2.13 [6] . Esto equivale a 20 kW, según lo predicho por el análisis de Tabla de Problema. Esto no es casualidad, el diseño ha sido elaborado obedeciendo a la restricción de no transferencia de calor a través del pinch (la sección "encima del pinch" ha sido diseñado de forma totalmente independiente de la sección "debajo del pinch") y sin utilizar corrientes de servicio de enfriamiento por encima del pinch.

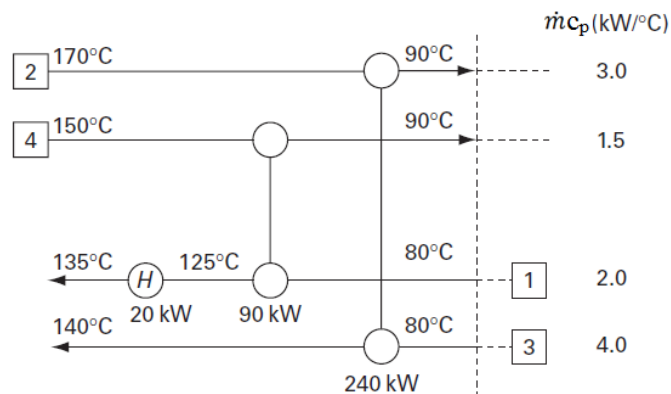


Figura 2.13. Diseño de la red por encima del pinch del problema de cuatro corrientes.

Por debajo del pinch, los pasos de diseño siguen la misma filosofía, únicamente con criterios de diseño que reflejan los del diseño "por encima del pinch". Ahora, se requiere llevar las corrientes

frías a la temperatura del pinch por intercambio de calor con corrientes calientes, ya que no queremos utilizar corrientes de servicio para calentar debajo del pinch. En este ejemplo, sólo la corriente fría 1 existe debajo del pinch, la cual debe ser emparejada con una de las dos corrientes calientes disponibles (2 o 4). El intercambio entre las corrientes 1 y 2 es factible debido a que el  $\dot{m}c_p$  de la corriente caliente es mayor que la de la corriente fría, y la diferencia de temperatura aumenta a medida que nos alejamos del pinch a temperaturas más bajas. El otro posible intercambio (la corriente 1 con la corriente 4) no es factible. Debajo del pinch, el criterio necesario es:

$$\dot{m}(c_p)_{CAL} \geq \dot{m}(c_p)_{FRIO}$$

que es el inverso del criterio para el diseño por encima del pinch. Maximizar la carga en este intercambio satisface la corriente 2, siendo la carga 90kW. El calentamiento requerido por la corriente 1 es de 120 kW y, por tanto, se requiere de 30 kW de calefacción residual, para llevar la corriente 1 desde su temperatura de suministro de 20°C a 35 °C. De nuevo, esto debe venir de un intercambio con una corriente caliente (no una corriente de servicio de calentamiento), la única disponible es la corriente 4. Aunque el criterio del  $\dot{m}c_p$  no se cumple para este intercambio, es factible, ya que está lejos del pinch. Es decir, no es un intercambio que tiene que llevar la corriente fría hasta la temperatura del pinch. Por lo que el intercambio es factible (aunque se debe hacer una verificación de la temperatura para asegurarse de esto). Poniendo una carga de 30 kW en este intercambio deja un enfriamiento residual de 60 kW en la corriente 4 que debe ser tomada por una corriente de servicio fría. De nuevo, esto es como se predijo por el análisis de Tabla de Problemas.

El diseño por debajo del pinch incluyendo los criterios de  $\dot{m}c_p$  se muestra en la Figura 2.14 [6]. Poniendo los diseños del "extremo caliente" y el "extremo frío" en conjunto se obtiene el diseño completo que se muestra en la Figura 2.15 [6]. Se logra un mejor rendimiento de energía posible para un  $\Delta T_{min}$  de 10 °C que incorpora cuatro intercambiadores, un calentador y un enfriador. En otras palabras, seis unidades de equipo de transferencia de calor en absoluto. Se conoce como una red MER (por sus siglas en inglés), porque logra el requisito mínimo de energía y la recuperación de energía máxima.

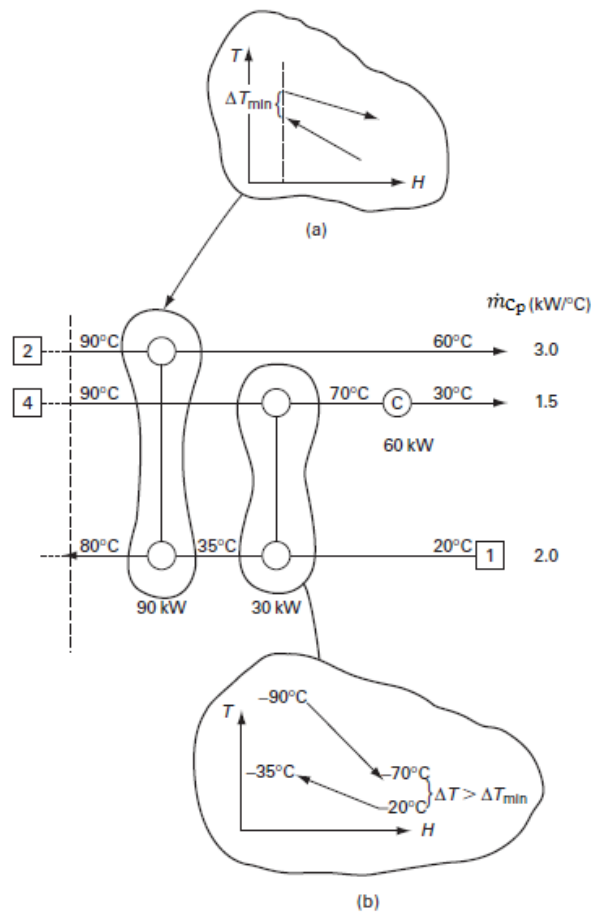


Figura 2.14. Diseño de la red de intercambiadores por debajo del pinch para el problema de cuatro corrientes.

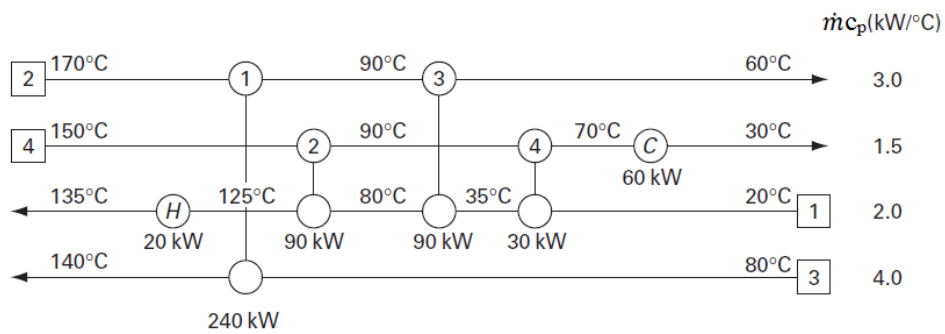


Figura 2.15. Diseño de la red de intercambiadores alcanzando los objetivos de energía.

### 3 Motivación

Para alcanzar el objetivo general y los objetivos específicos de este trabajo se utilizó información proporcionada por una empresa dedicada a la producción industrial del pigmento azul ultramar. Los datos reales de fabricación y producción permitieron plantear de forma preliminar un proceso adecuado para recuperar azufre elemental a partir de las emisiones de  $\text{SO}_2$  que se generan durante el proceso productivo. Este proceso se propone en el marco de un proyecto de investigación del Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad, en el marco del Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2013-2016 del Gobierno de España concedido al grupo de investigación dirigido por el Dr. David Gabriel Buguña de la Universidad Autónoma de Barcelona. Dicho proyecto se titula “Desarrollo de un proceso integral de tratamiento de  $\text{SO}_x$  y  $\text{NO}_x$  procedentes de gases de combustión orientado a su valorización” con referencia CTQ2015-69802-C2-1-R. En la Figura 3.1 se presenta el esquema del proceso propuesto.

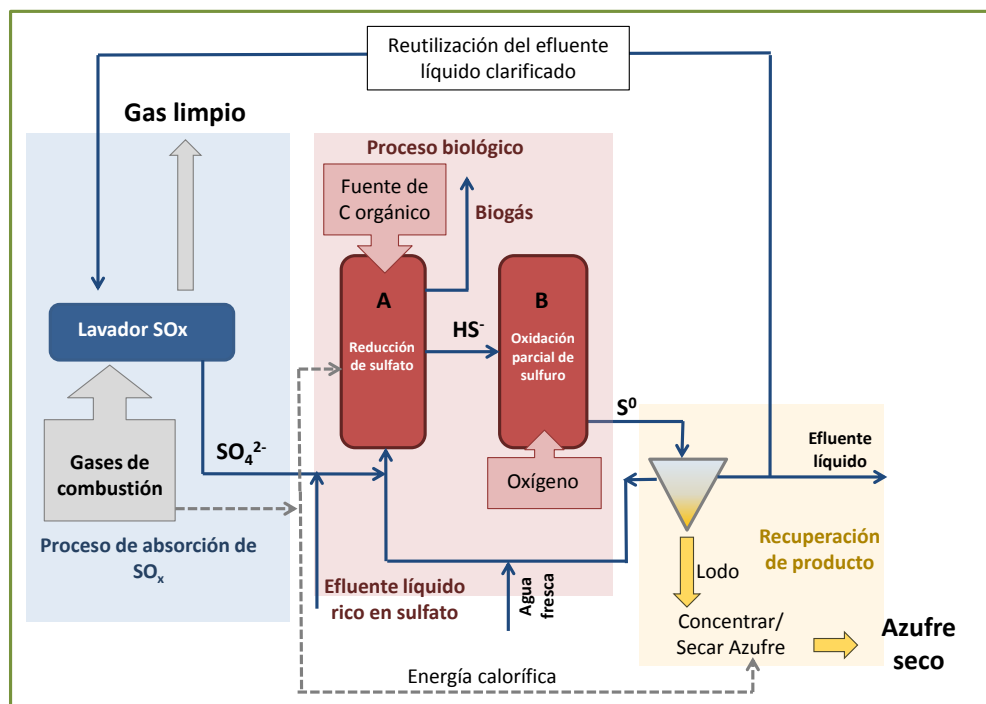


Figura 3.1. Esquema propuesto para el tratamiento de gases conteniendo  $\text{SO}_2$  y aguas residuales conteniendo sulfato para la recuperación de azufre elemental.

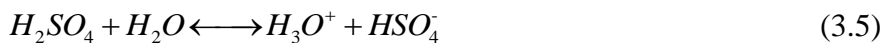
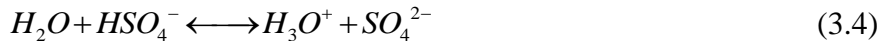
El proceso consiste en una primera etapa de tratamiento fisicoquímico de absorción a pH=7-8 con una disolución alcalina de NaOH para favorecer la absorción de SO<sub>2</sub> que presenta pH ácido en disolución. En esta etapa la siguiente reacción se produce en la fase acuosa:



Una desasociación posterior del HSO<sub>3</sub><sup>-</sup> a SO<sub>3</sub><sup>2-</sup>, debido al alto pH que se maneja en el absorbedor y la alta concentración de SO<sub>2</sub> en el gas residual [8], ocurre como se muestra en la siguiente reacción:

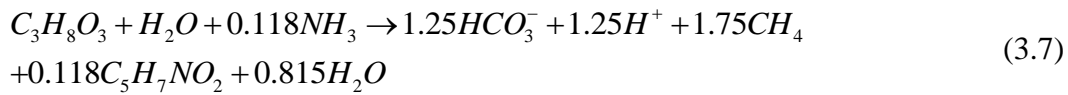
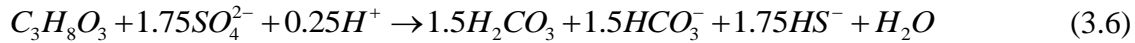


Los sulfitos (SO<sub>3</sub><sup>2-</sup>) reaccionan con el oxígeno disuelto en el agua a un pH superior a 8 y pasan a sulfatos (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>). Debido a que el absorbedor se propone trabajar a un pH de 8 esta reacción tiene lugar, por lo que la reacción de oxidación del sulfito [9] y las reacciones de equilibrio del sulfato también se incluyen en esta etapa del proceso:

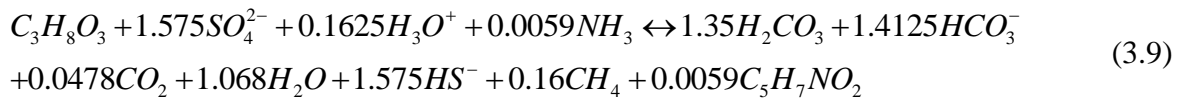


Debido a las reacciones anteriores se genera un efluente líquido con pH ligeramente ácido y alta concentración de sulfito/sulfato (SO<sub>3</sub><sup>2-</sup>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>). Este efluente líquido se mezcla con el efluente generado en el lavado del pigmento azul ultramar que también es rico en SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> con el objetivo de segregar una corriente única a tratar. Esta corriente segregada, rica en compuestos oxidados de azufre (COS), se lleva a una segunda etapa donde se produce un tratamiento biológico para transformar los COS en azufre elemental. El primer paso en este proceso biológico somete la corriente rica en COS a un primer proceso anaerobio en un reactor de lecho tipo UASB (ver Figura 3.1, reactor A) con biomasa sulfato reductora (BSR) y utilizando como fuente de carbono glicerol

crudo u otro residuo orgánico compatible con el proceso biológico. De la energía obtenida de la fuente de carbono los microorganismos anaerobios utilizan una pequeña parte para crecimiento y el resto para realizar las reacciones de sulfato reducción que dan como resultado la producción de metano, sulfuro y alcalinidad principalmente. Las reacciones que ocurren catalizadas por estos microorganismos son complejas, por lo que se trató de simplificar a las reacciones más significativas y con base en ensayos previos realizados en un reactor de laboratorio. Se adaptaron tres reacciones, obtenidas de [10] y [11], que se muestran a continuación:



Si a partir de los resultados de los ensayos de laboratorio se considera que un 10% de la materia orgánica consumida se convierte en metano mientras que el 90% se destina a fermentación y reducción de sulfato, luego se suman estas reacciones con las consideraciones anteriores, y se balancea por cargas y masa la reacción resultante, se puede obtener una reacción global que se muestra a continuación:



El reactor opera a un pH alrededor de 7-8 y la dificultad de esta operación reside en tratar la máxima concentración y carga de COS que tolere la BSR debido a que las concentraciones de esta corriente pueden contener más de 50 g  $SO_4^{2-} L^{-1}$ , siendo esta concentración tan alta que las hace imposibles de tratar biológicamente sin una dilución previa de la corriente con agua de proceso. Además, es necesario mantener una elevada densidad celular y una correcta sedimentabilidad de los lodos que componen el lecho anaerobio a la vez que alcanzar la completa degradación de glicerol crudo, que es una fuente de carbono compleja y difícil de biodegradar.

También se consideran las siguientes reacciones de equilibrio para el CO<sub>2</sub> [16], que a pesar de su poca solubilidad en agua pueden llegar a reaccionar en el proceso de absorción del SO<sub>2</sub> o en el reactor A, debido a que uno de los productos que se obtiene es CO<sub>2</sub>.



El efluente líquido del reactor UASB se utiliza como alimento del segundo reactor (ver Figura 3.1, reactor B), en este caso un reactor continuo de tanque agitado (RCTA). Este efluente tiene un alto contenido en bisulfuro (HS<sup>-</sup>) disuelto y el proceso que se lleva a cabo en el RCTA es la oxidación parcial de bisulfuro a azufre elemental utilizando biomasa sulfuro-oxidante (BSO). Este proceso puede realizarse en un alto rango de pH (1.5 a 10). La reacción que se produce en este reactor es la siguiente (en este trabajo se utilizó el ion hidronio H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> para representar un protón) [12]



El azufre generado se puede separar del líquido completamente por centrifugación o sedimentación-decantación. La separación completa de la mezcla sólida azufre-biomasa no es posible ya que el azufre se encuentra en parte adherido a la biomasa. Aun así, la relación biomasa-azufre es tan baja que se puede conseguir separar azufre con alrededor de un 90-95% de pureza si se realiza una etapa de centrifugación.

El efluente resultante del reactor B se conduce a una tercera etapa que consiste en una centrífuga para separar el azufre elemental de la biomasa y el agua ya que el azufre es el compuesto más denso. Una parte de la corriente de agua resultante de esta centrífuga se reutiliza para el lavador de gases de la primera etapa del proceso. De esta forma se disminuye la cantidad de agua fresca suministrada al proceso. El lodo de azufre elemental obtenido de la centrífuga es llevado a un secador, que se plantea que sea un secador de cinta donde el material se seca mediante una corriente gaseosa caliente (por lo general aire), para obtener finalmente un azufre elemental seco con alrededor de un 5-10% de impurezas, esencialmente biomasa y sales inorgánicas.

En este proceso no es importante únicamente el balance de materia y la valorización de los  $\text{SO}_x$  si no que una de las características más importantes es el potencial que ofrece el proceso en cuanto a la energía calorífica que se genera. En este trabajo se propone aprovechar la energía calorífica contenida en los gases de combustión mediante intercambiadores de calor para calentar la corriente de aire utilizada en el secado del azufre. También se ha considerado el aprovechamiento de energía calorífica para calentar el efluente de la etapa de absorción hasta una temperatura de  $35\text{ }^\circ\text{C}$  ya que esta temperatura es óptima para el proceso biológico, alcanzándose así las máximas velocidades de reacción y obteniendo rendimientos óptimos en los reactores.

## 4 Antecedentes

En este apartado se presentan las investigaciones que se han realizado y que sirven de fundamento para la realización del este trabajo. Es importante mencionar que no existen antecedentes directos del tratamiento de gases de combustión del proceso de producción del pigmento azul ultramar utilizando reactores biológicos. La primera investigación [13] describe un estudio en el que se analizó un reactor UASB que se operó durante 180 días para determinar un método apropiado para el tratamiento de aguas residuales con alto contenido de sulfatos. La segunda investigación se realizó para determinar la fuente de carbono óptima y donadora de electrones para alimentar bacterias sulfato reductoras. Esto con el fin de operar y monitorear un reactor UASB durante cuatro meses para determinar la capacidad de sulfato reducción. Y, por último, en el tercer trabajo se realiza una comparación entre dos tecnologías comerciales para la remoción de  $\text{SO}_2$  de gases residuales de los hornos de una cementera que opera con el proceso de Clinker húmedo. Se utilizó el simulador de procesos Aspen Plus para simular estos procesos y ayudar a las cementeras a elegir el más adecuado para cumplir con las regulaciones ambientales.

En el trabajo presentado por Jing y col. (2013) se realizaron una investigación con un reactor UASB para determinar la viabilidad de un proceso de tratamiento de aguas residuales de una planta industrial química mediante digestión anaerobia. El motivo fue que la digestión anaerobia es altamente eficiente en la remoción de materia orgánica y en la producción de metano cuando se tiene bajas concentraciones de sulfatos. Sin embargo, la presencia de altas concentraciones de sulfatos en las aguas residuales puede ocasionar problemas debido a la sulfato reducción. En el



proceso de tratamiento anaerobio las bacterias sulfato reductoras (BSR) siempre compiten con las bacterias productoras de metano (BPM) por la fuente de carbono. En las aguas residuales con alto contenido de sulfatos las BSR por lo general superan a las BMP y producen sulfuro. El sulfuro es tóxico para ambos tipos de bacteria y su acumulación en los reactores anaerobios provoca inhibición en el proceso de eliminación de materia orgánica y en la producción de metano.

Jing y col. pusieron en marcha un reactor UASB por más de 180 días donde estudiaron la eliminación de la demanda química de oxígeno (DQO) y de sulfato, la formación de sulfuro y la producción de biogás bajo diferentes tiempos de retención hidráulica (TRH) y velocidades de carga orgánica (VCO). El esquema del reactor utilizado para el proceso se muestra en la Figura 4.1. Este reactor se fabricó con cristal con un diámetro interno de 100 mm. Tenía una zona de reacción con altura de 0.8 m y un volumen de 6 litros. El agua residual se bombeó desde un depósito de influente con el volumen efectivo de 70 litros. Agua caliente se suministró con un calentador de circulación de agua a la capa exterior del reactor para mantener este reactor con temperatura relativamente estable de  $35 \pm 1$  °C. De acuerdo a la composición real del agua residual de la industria química un agua residual sintética se creó en el laboratorio. Esta agua contenía alrededor de 1000 mg/L de acetato, 1000 mg/L de etanol, 3000 mg/L de sulfato y una relación de DQO/sulfato de 1.

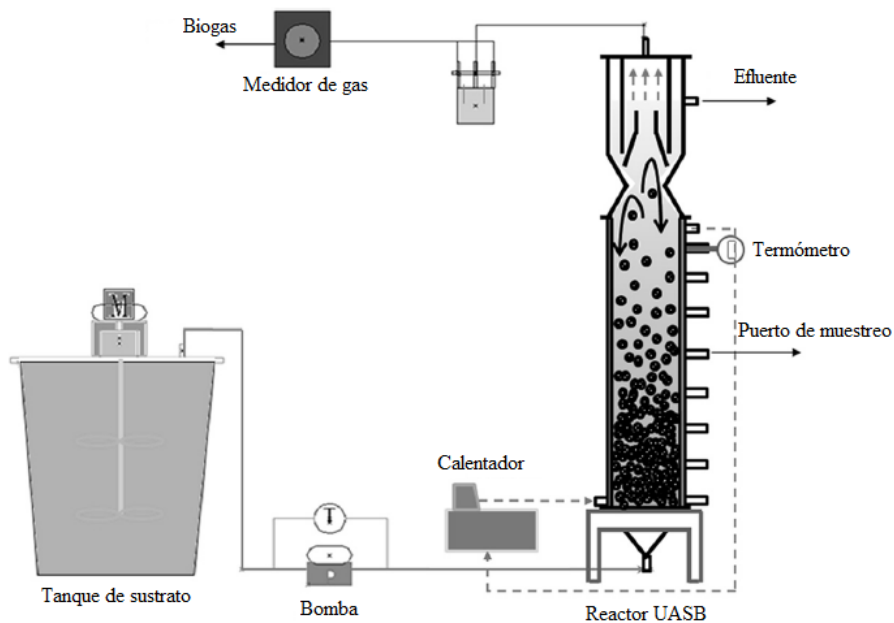


Figura 4.1. Diagrama esquemático del lecho de lodos del UASB.

Con el afluente de DQO mantenida en 3000 mg/L, el TRH del reactor se disminuyó gradualmente desde 48 a 2 horas y la VCO aumentada de 1.4 a 37.8 gDQO/L d. Esto dio como resultado que con el TRH arriba de 6 horas y la VCO debajo de 12.3 gDQO/L d, la tasa de eliminación de la DQO se mantuvo en el rango de 86.5-90.9 %. Cuando la VCO fue incrementada más allá y el TRH reducido, la eliminación de DQO disminuyó enormemente. Sin embargo, con la reducción del TRH y el incremento en la VCO la tasa de eliminación de sulfato se mantuvo relativamente estable, entre el rango de 28.2-42.5 %. La tasa de producción de gas se vio afectada notablemente por la variación en el TRH y la VCO. La producción media de gas fue de 0.37 L/L d en un TRH de 40 horas. Esta incrementó a 5.92 L/L d con un TRH de 3 horas.

En el siguiente trabajo [14], Mora y col. propusieron un proceso de tratamiento biológico para reducir sulfato en un reactor UASB como primer paso para recuperar azufre de efluentes residuales con alto contenido de sulfatos. Lo que hace viable la propuesta es el uso de desperdicios orgánicos como la vinaza, suero de queso, purines o glicerol crudo como fuente de carbono para reducir el sulfato. Además, que se enfoca en la minimización de la producción de metano para aumentar la sulfato reducción.

Se realizaron pruebas para determinar la fuente de carbono que tuviera mayor actividad con la menor producción de metano para mejor la reducción de sulfato. Las pruebas realizadas determinaron que el glicerol crudo era la mejor opción. Después se utilizó un reactor UASB para llevar a cabo la etapa de sulfato reducción. Este estaba hecho de vidrio, con un volumen de reacción de 1 L y un volumen total de 2 L. Un medio mineral, que representaba la corriente rica en sulfatos fue bombeado desde la parte inferior del reactor junto con la fuente de carbono. Un flujo total de 0.5 L/h fue bombeado al sistema. La temperatura y el pH no fueron controlados, pero sí monitoreados. El gas fue recolectado en una bolsa Tedlar de 5 L para analizar la concentración de H<sub>2</sub>S, la concentración de metano y la tasa de flujo de metano. Los flujos de entrada y salida fueron muestreados cada dos días para analizar el carbono orgánico total (COT) y los compuestos de azufre (sulfato, tiosulfato y sulfuro). El diagrama del reactor puede verse en la Figura 4.2.

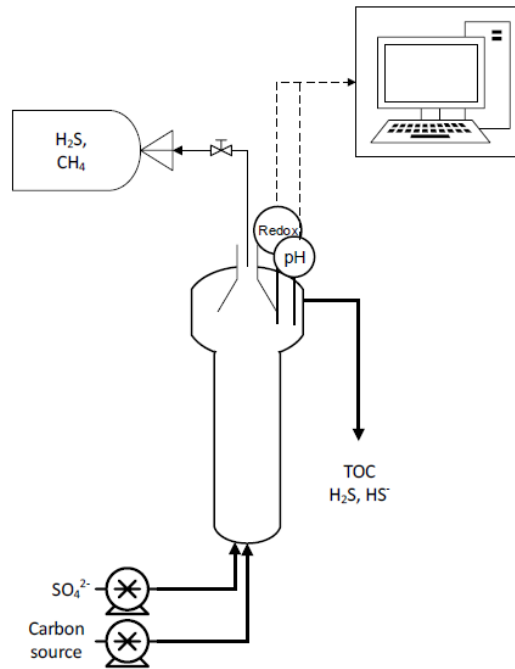


Figura 4.2. Diagrama del diseño de la sulfato reducción.

El UASB se inoculó con lodo anaeróbico granular de un UASB para la producción de biogás de una industria de papel y celulosa. La operación del reactor duró 4 meses. La concentración de entrada del sulfato y el TRH fue de 220 mg S-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>/L y 2 horas respectivamente. La fuente de carbono, glicerol crudo, fue alimentado a diferentes VCO. Se establecieron cuatro periodos de operación, como se puede observar en la Tabla 1, con diferentes condiciones a lo largo del estudio.

**Tabla 4.1.** Condiciones examinadas durante el tiempo de operación del UASB.

Tiempo (días)	COT (mg C/ L)	DQO (mg O <sub>2</sub> /L)	VCO (mg C/L h)
0 – 50	176	548	90.0
50 – 90	503	1567	258
90 – 110	607	1891	311
110 – 140	329	1026	168

Al finalizar el estudio se obtuvieron los porcentajes de eficiencia de eliminación de COT y sulfato, los cuales se resumen en la Tabla 4.2.

**Tabla 4.2.** Resumen de las eficiencias de eliminación de sulfato y COT (S-EE y C-EE respectivamente) obtenidas del reactor UASB.

Eficiencia de eliminación (EE)	Periodos de operación			
	0 – 50 días	50 – 90 días	90 – 110 días	110 – 140 días
S-EE (%)	30.5±8.0	83.0±12.8	97.1±2.9	57.6±13.5
C-EE (%)	73.6±17.0	80.8±5.2	43.0±8.1	35.3±6.6

De esta forma se concluyó que se alcanza mayor eficiencia con tasas de alimentación de COT por arriba de 2.3 g C/g SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, cuando la fuente de carbono no limita el proceso.

En el tercer trabajo de investigación [15], Duque y col.(2010) realizaron la simulación, con la ayuda de Aspen plus, de dos alternativas para la remoción de SO<sub>2</sub> de los gases de escape de hornos de una cementera que opera con el proceso de Clinker húmedo y de esta forma apoyar a las cementeras en la selección de la tecnología más adecuada para cumplir las regulaciones ambientales. Las tecnologías comerciales seleccionadas para la remoción de SO<sub>2</sub> fueron la de caliza húmeda (wet limestone) y la de polvo de horno de cemento húmedo (wet cement kiln dust, CKD). El proceso de remoción por caliza (carbonato de calcio, CaCO<sub>3</sub>) húmeda es una elección interesante por varias razones: tiene una eficiencia de remoción alta; la materia prima requerida puede ser obtenida directamente de la planta ya que la caliza es un material necesario para la producción de Clinker; el yeso (sulfato de calcio dihidrato, CaSO<sub>4</sub>.2H<sub>2</sub>O) generado como subproducto puede ser utilizado como aditivo para la producción de cemento reduciendo los costos de producción y evitando la disposición de sólidos finales. En la Figura 4.3 [15] se puede observar el esquema de este proceso.

De igual forma existen varias razones para el uso de CKD húmedo: es un subproducto del proceso del Clinker el cual no tiene valor comercial: el sulfato de potasio (K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), un subproducto del proceso de remoción, tiene aplicaciones como fertilizante y puede ser vendido; además un compuesto sólido conformado principalmente de carbonato de calcio se obtiene en el proceso, este tiene características similares a la materia prima para el proceso del Clinker y por la tanto puede ser reutilizado como materia prima. El diagrama de este proceso se muestra en la Figura 4.4 [15].

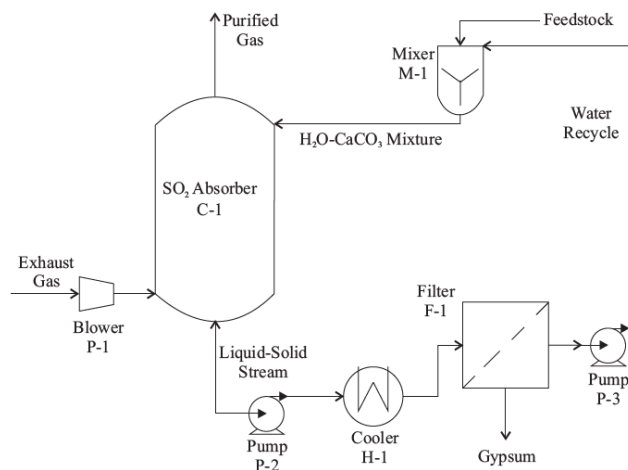


Figura 4.3. Proceso de remoción de SO<sub>2</sub> utilizando CaCO<sub>3</sub>.

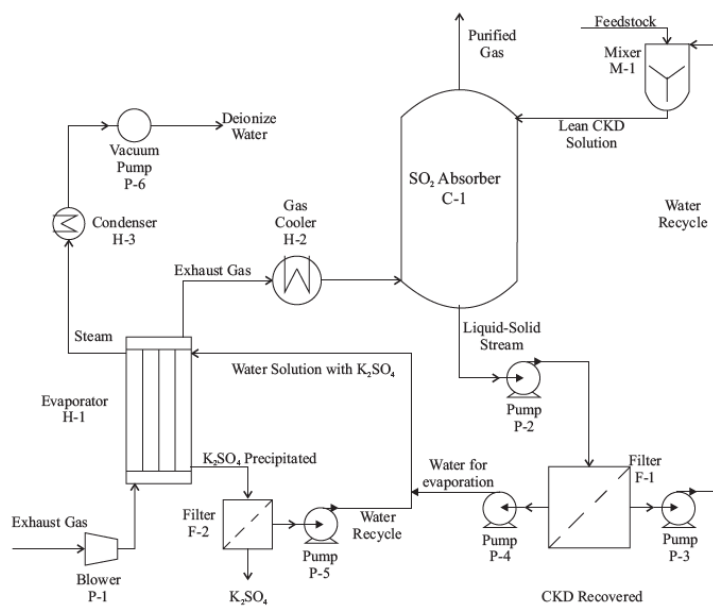


Figura 4.4. Proceso para la eliminación de SO<sub>2</sub> utilizando polvo de horno de cemento.

Con la ayuda de Aspen plus se obtuvieron los flujos de agua y materia prima necesarios para la eliminación del SO<sub>2</sub> de los gases de combustión en ambas tecnologías, se obtuvo un dimensionamiento aproximado del lavador calculado por el programa de acuerdo a las condiciones establecidas y también se determinó la composición de los gases purificados.

Con los resultados obtenidos se concluyó que el proceso de remoción de  $\text{SO}_2$  con CKD húmedo era menos eficiente con las condiciones utilizadas para el estudio, debido a que el óxido de potasio presente en el CKD era posible remover sólo el 50% de  $\text{SO}_2$ . Además, que el flujo de la solución de CKD es más grande que el del proceso con caliza, lo que conlleva equipos más grandes y costos de operación mayores. Por lo que se determinó que la tecnología más adecuada para su uso en cementeras es el proceso de remoción de  $\text{SO}_2$  con caliza húmeda porque, aunque es menos rentable que el de CKD bajo las condiciones estudiadas, es mucho más simple, es ampliamente conocido y produce yeso que puede ser utilizado directamente en el proceso de producción del cemento.

Como podemos darnos cuenta el uso de softwares de simulación son de gran utilidad, ya que nos ahorran tiempo de estudio experimental, si las condiciones del proceso cambian es rápido y fácil modificar el modelo, nos permite comparar entre dos o más procesos diferentes de forma rápida o nos permite corroborar la eficiencia de un proceso ya establecido, o como lo es en el presente trabajo, simular un proceso que aún no se ha implementado físicamente para ayudar en el desarrollo de este.

## 5 Metodología

El proceso propuesto se simuló en el software de simulación de procesos químicos Aspen Plus para verificar su correcto funcionamiento a escala industrial. Además, se realizó un análisis Pinch para optimizar energéticamente el proceso. Las configuraciones generales de la simulación se describen a continuación.

### 5.1 Configuración general de la simulación

Para esta simulación se utilizó el método de cálculo de propiedades ELECNRTL ya que permite trabajar con electrolitos y en este proceso están presentes algunos de ellos. Un método de cálculo de propiedades es un conjunto de modelos matemáticos que Aspen Plus utiliza para calcular las propiedades termodinámicas y de transporte de los componentes [16].

Se creó una lista de componentes a partir de las sustancias y compuestos presentes en las reacciones consideradas en cada parte del proceso, de la composición de los gases residuales y los insumos y productos del proceso. Aspen Plus tiene en sus bancos de datos las propiedades físicas y químicas de los elementos y compuestos, pero a pesar de la gran información contenida en los bancos de datos de Aspen Plus hay datos que no se encuentran para algunos componentes, por lo que hay que investigarlos o hacer alguna suposición, como las que se mencionan a continuación.

- Para simular la biomasa producida en los biorreactores se utilizó el compuesto Etilcianoacetato que posee la misma fórmula ( $C_5H_7NO_2$ ) [17], esto debido a que no se tienen datos de la biomasa para crear un compuesto en Aspen plus. Los datos que faltan en los bancos de datos de este elemento se llenaron con los datos del agua para evitar mayores alteraciones a la simulación.
- DHFORM (calor de formación de gas ideal) no se encuentra para el ácido carbónico ( $H_2CO_3$ ), por lo que se tomó el valor del  $CO_2$  para este elemento. Se espera que esta medida no influya en la simulación.
- CPDIEC (constante dieléctrica) no se tiene para el AZUFRE y por lo que se tomó el valor encontrado en [18].

Después se creó una lista de reacciones de equilibrio con la ayuda del asistente Electrolyte Wizard las cuales se presentan en la Tabla 5.1. En esta se incluyen las reacciones de equilibrio (3.1), (3.2), (3.4) y (3.5) mencionadas anteriormente y las reacciones de disociación del agua y del NaOH, así como otras reacciones de equilibrio posibles propuestas por el asistente, que corresponden a componentes que participan en el proceso.

**Tabla 5.1.** Lista de las reacciones de equilibrio creadas con Electrolyte Wizard.

Reacción	Tipo	Estequiometría
1	Equilibrio	$H_2SO_4 + H_2O \longleftrightarrow H_3O^+ + HSO_4^-$
2	Equilibrio	$H_2O + HSO_3^- \longleftrightarrow H_3O^+ + SO_3^{2-}$
3	Equilibrio	$2H_2O + SO_2 \longleftrightarrow H_3O^+ + HSO_3^-$
4	Equilibrio	$HCl + H_2O \longleftrightarrow Cl^- + H_3O^+$
5	Equilibrio	$H_2O + HSO_4^- \longleftrightarrow H_3O^+ + SO_4^{2-}$
6	Equilibrio	$NH_3 + HCO_3^- \longleftrightarrow H_2O + NH_2COO^-$
7	Equilibrio	$NH_3 + H_2O \longleftrightarrow OH^- + NH_4^+$
8	Equilibrio	$H_2O + HCO_3^- \longleftrightarrow CO_3^{2-} + H_3O^+$
9	Equilibrio	$2H_2O + CO_2 \longleftrightarrow HCO_3^- + H_3O^+$
10	Equilibrio	$H_2O + HS^- \longleftrightarrow H_3O^+ + S^{2-}$
11	Equilibrio	$H_2O + H_2S \longleftrightarrow H_3O^+ + HS^-$
12	Equilibrio	$2H_2O \longleftrightarrow OH^- + H_3O^+$
NaOH	Disociación	$NaOH \longrightarrow OH^- + Na^+$



## 5.2 Diagrama de la simulación

Después de realizar las configuraciones generales en el programa se procedió a crear el diagrama del proceso propuesto de tratamiento de gases residuales con alto contenido de  $\text{SO}_2$  con reactores biológicos para su simulación. La simulación del proceso se realizó con los datos disponibles proporcionados por una empresa que se dedica a la producción de azul ultramar como son el flujo volumétrico, la temperatura y la composición de los gases de combustión que se desean tratar; y datos obtenidos experimentalmente de un proceso a escala laboratorio ya en marcha [14]. El diagrama del proceso creado se muestra en la Figura 5.1, el cual se divide en 5 subprocesos: el lavado de gases, tratamiento biológico, tratamiento de sólidos, red de intercambiadores de calor y por último un proceso de cogeneración. A continuación, se describirá cada parte del diagrama creado.

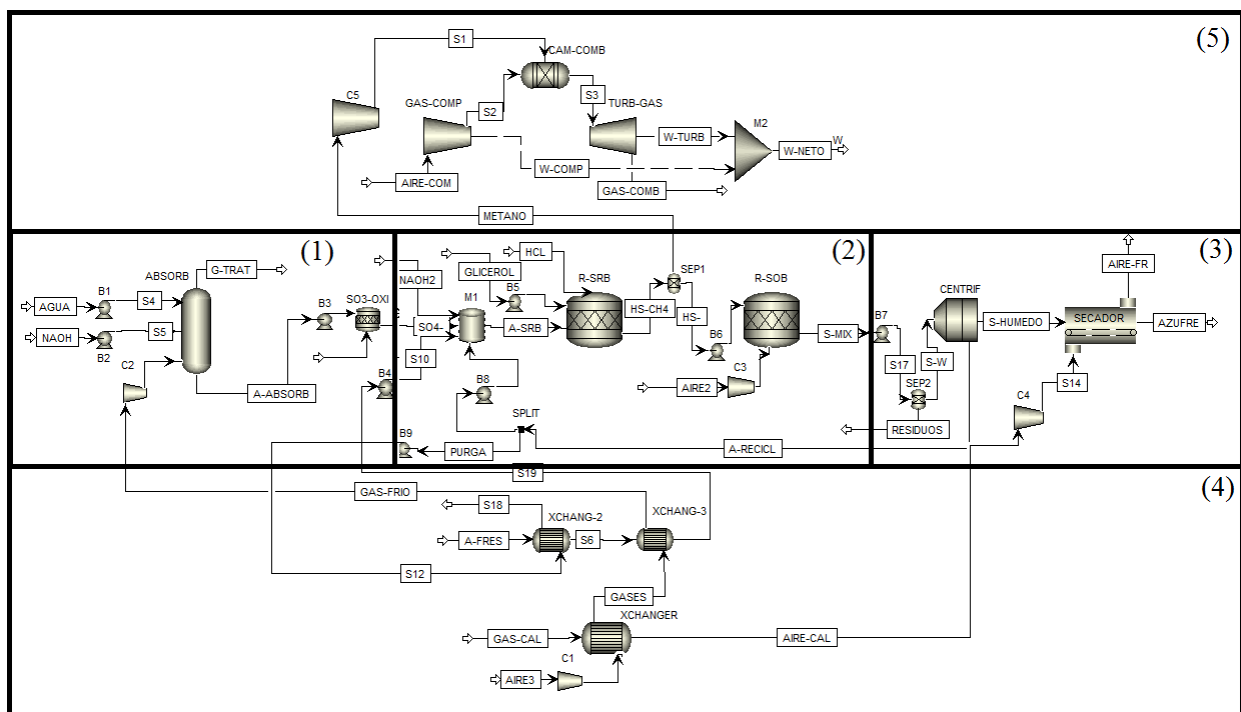


Figura 5.1. Proceso de tratamiento de gases residuales con reactores biológicos: (1) lavado de gases; (2) tratamiento biológico de aguas de lavado; (3) tratamiento de sólidos; (4) red de intercambiadores de calor y (5) proceso de cogeneración.

### 5.2.1 Lavado de gases

La primera etapa (*ver Figura 5.1, (1)*), que consiste en el proceso de absorción de  $\text{SO}_2$  mediante una solución con NaOH se simuló utilizando un bloque RadFrac (ABSORB en la Figura 5.1). A este bloque entran tres corrientes: gases de combustión, NaOH diluido al 50% y agua. Los gases de combustión presentan una concentración de 6000 ppm y una temperatura de 600 °C, por lo que se debe colocar un enfriador antes del absorbedor para disminuir la temperatura de 600 °C a una menor a 60 °C porque el absorbedor no debe trabajar a una temperatura mayor. La temperatura de trabajo del absorbedor se estableció en 20 °C y a presión atmosférica. En esta parte del proceso se llevan a cabo las reacciones de equilibrio 2, 3, 12 (*ver tabla 5.1*) y la de disociación del NaOH. El pH en el absorbedor se controla con el flujo de NaOH, el cual se mantiene en 8. Luego se introdujo un reactor estequiométrico (SO3-OXI en la Figura 5.1) donde se implementó la reacción (3.3) para oxidar el sulfito a sulfato. Esto se implementó para poder simular esta reacción que debe ocurrir por sí sola en el medio acuoso, por lo que físicamente este reactor no existiría.

### 5.2.2 Tratamiento biológico del agua de lavado

En esta etapa (*ver Figura 5.1, (2)*) se colocó un tanque pulmón, simulado por un bloque Mixer (M1 en la Figura 5.1), donde se mezcla el efluente rico en sulfatos con agua fresca para reducir la concentración de sulfato, y se agrega otra corriente de NaOH para mantener el pH en 8. El simular este proceso en Aspen Plus se centró en el desarrollo de la etapa de tratamiento biológico (reactores R-SRB y R-SOB, *ver Figura 5.1*). El problema a resolver fue encontrar la manera de simular el reactor biológico de sulfato reducción en Aspen Plus. La primera opción fue utilizar un reactor de rendimientos (un bloque RYield) el cual es un reactor que no necesita una reacción estequiométrica ni mayores requerimientos, simplemente se le especifica la temperatura y presión de trabajo y los rendimientos máxicos o molares de los productos obtenidos. De forma más simple a un reactor de rendimientos se le especifica cuanto porcentaje de toda la masa que entra se convierte en uno u otro producto. A este reactor se le introdujo la corriente rica en sulfatos y una corriente de glicerol, que es la fuente de energía que necesitan las bacterias para realizar sus funciones metabólicas. Los rendimientos utilizados se tomaron de la media de datos de muestras obtenidas del reactor de laboratorio.

El uso de este reactor en la simulación provocó un desbalance de cargas en la corriente de productos por lo que se tuvo que buscar otro reactor. Se optó entonces por usar un reactor estequiométrico (bloque RStoic) el cual necesita sólo la reacción o reacciones que se llevan a cabo dentro del reactor, pero sin la necesidad de introducir las cinéticas de reacción. En este reactor (R-SRB) se introdujo la reacción (3.9). Además, se le estableció una temperatura de trabajo de 35 °C a presión atmosférica.

Después se colocó un separador (bloque Sep) para separar el metano del efluente líquido producido, esto debido a que el reactor estequiométrico no cuenta con una salida de productos gaseosos, y el reactor UASB que se pretende simular si la tiene. Se utilizó otro reactor estequiométrico para simular el reactor R-SOB donde se lleva a cabo la oxidación del sulfuro producido en el reactor R-SRB y cuya reacción estequiométrica es la ecuación (3.12). De igual forma se le estableció una temperatura de trabajo de 35 °C a presión atmosférica.

### 5.2.3 Tratamiento de sólidos

Para la tercera etapa (*ver Figura 5.1, (3)*), el tratamiento de sólidos, se puso otro bloque Sep para separar el agua y el azufre del resto de componentes, ya que por la gran cantidad de estos el bloque Cfuge (CENTRIF en la Figura 5.1) que se utilizó para simular una centrífuga presentaba problemas. A la centrífuga se le especificó que el azufre obtenido tuviera un 30% de humedad en base seca. Para el secado se utilizó un secador de tipo convectivo para simular un secador de cinta utilizando un bloque Dryer (SECADOR en la Figura 5.1), al cual se le especificó una longitud de 5 metros y un tiempo de residencia de 2 minutos. El gas de secado que se utilizó fue aire caliente a una temperatura de 50 °C, el cual alcanza esa temperatura mediante un calentador.

Al finalizar esta etapa se simuló el proceso para observar su comportamiento. Los resultados se muestran en la sección correspondiente.

### 5.2.4 Red de intercambiadores de calor

Con esta etapa (*ver Figura 5.1, (4)*) se pretendió optimizar energéticamente el proceso. Para esto se decidió aprovechar la energía disipada de los gases de combustión antes del absorbedor para calentar el reactor R-SRB y disminuir la energía necesaria para mantener el reactor a 35 °C. Aspen Plus nos permite crear una corriente de energía con la energía disipada en el enfriador, el que disminuye la temperatura de los gases de combustión, e introducir esta corriente de energía en el

reactor R-SRB, de esta forma Aspen Plus calcula la temperatura que alcanzaría el reactor si le proporcionáramos dicha energía (ver Figura 5.2). Así podemos determinar si la energía contenida en los gases de combustión podría suplir la necesaria para mantener el reactor a 35 °C o no.

La simulación mostró que no se alcanza la temperatura óptima en el reactor R-SRB con la energía de los gases de combustión, pero se obtiene una temperatura cercana, por lo cual se realizó un análisis Pinch para crear una red de intercambiadores de calor que nos permita acercarnos a la temperatura objetivo.

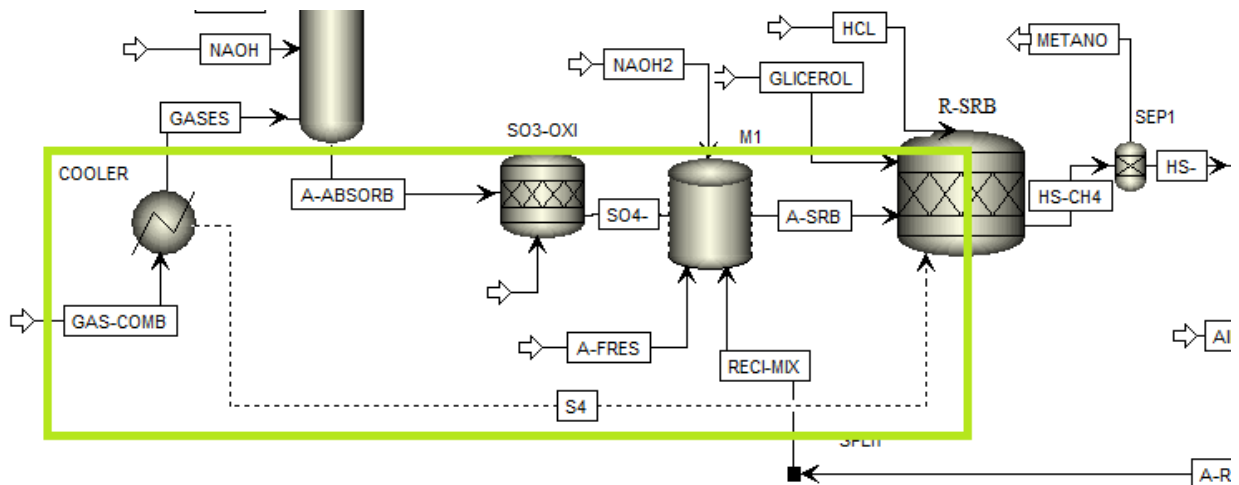


Figura 5.2. Corriente de energía calorífica obtenida del enfriador (COOLER) e insertada en el reactor R-SRB.

Este análisis nos ayuda a encontrar la diferencia de temperatura mínima entre las corrientes calientes y frías del sistema y así construir una red de intercambiadores de calor óptima para aprovechar al máximo la energía contenida en las corrientes del sistema y disminuir la cantidad de corrientes de servicio, como lo son el vapor de agua o refrigerantes.

El análisis pinch se realizó con Aspen Energy Analyzer que es un módulo de Aspen que facilita este análisis ya que le ahorra al usuario el tener que hacer los cálculos y gráficas de las curvas de composición a mano, además de que permite diseñar la red de intercambiadores de calor en el diagrama de rejilla de manera práctica. En este módulo se introdujeron las corrientes frías y calientes y sus datos termodinámicos necesarios (Tabla 5.2) para diseñar una red de intercambiadores de calor y aprovechar la energía contenida en los gases de combustión. Esta energía se utilizó principalmente para el secado del azufre y para calentar indirectamente la

corriente de entrada al reactor R-SRB a través del calentamiento del agua fresca con la que se mezcla el efluente del absorbedor. Esta última corriente se puede calentar además utilizando la purga del sistema ya que estará a una temperatura cercana a la de operación de los reactores. La red de intercambiadores de calor que se diseñó en el diagrama de rejilla e implementó en la simulación con los datos introducidos se muestra en la sección de resultados.

**Tabla 5.2.** Datos utilizados en Aspen Energy Analyzer para realizar el análisis Pinch.

Nombre de la corriente	Temperatura de entrada [°C]	Temperatura de salida [°C]	Flujo másico [kg/h]	Cp [kJ/kgK]
GAS-CAL	400	20	1.948x10 <sup>4</sup>	1.014
AIRE3	20	50	8652	1.005
A-FRES	20	35	1.472x10 <sup>5</sup>	4.18
PURGA	35	20	1.325x10 <sup>5</sup>	4.18

### 5.2.5 Proceso de cogeneración

Después de la implementación de la red de intercambiadores de calor en el proceso (*ver Figura 5.1, (5)*), se propuso analizar la viabilidad de utilizar el biogás generado en el reactor UASB para alimentar un ciclo Brayton, es decir, la generación de electricidad mediante una turbina de gas para cubrir la demanda eléctrica del proceso. Para esto se introdujeron bombas y compresores en partes del proceso donde son necesarias, por ejemplo, en las corrientes de agua, NaOH y el efluente del lavador, antes de cada reactor y en las corrientes de recirculación, de purga y de agua fresca. Los compresores se colocaron en las corrientes de aire y en la corriente de gases de combustión. De esta manera se obtuvo un valor aproximado del consumo eléctrico del proceso.

Luego se diseñó un ciclo de turbina de gas utilizando un compresor, una turbina y un reactor de Gibbs para simular una cámara de combustión. El compresor eleva la presión de una corriente de aire 11 veces la presión atmosférica y luego es introducida a la cámara de combustión junto con la corriente de biogás donde al producirse la combustión se alcanza una temperatura de 1150 °C. Finalmente, los gases de combustión producidos se dejan expandir a la presión atmosférica en una turbina isentrópica.

## 6 Resultados

En la Tabla 6.1 se muestran los resultados obtenidos de la simulación del proceso sobre flujos másicos y volumétricos de los insumos y productos significativos a lo largo del proceso. Los insumos importantes son el hidróxido de sodio necesario para mantener el pH=8, el caudal de aire necesario para el secado del azufre, el caudal de agua fresca necesaria para el proceso y el glicerol necesario para la sulfato reducción en el reactor UASB. Los productos considerados son la cantidad de sulfato en el efluente del lavador, la cantidad de metano y el bisulfuro producido en el reactor UASB y el azufre obtenido al final del proceso. Si dividimos el flujo másico de azufre producido entre el flujo de azufre que se encuentra en forma de sulfato (es decir, un tercio de la masa total de SO<sub>4</sub>) obtendríamos que la eficiencia general del proceso para la recuperación de azufre es del 91%.

**Tabla 6.1.** Resultados de los flujos másicos y volumétricos de los insumos y productos del proceso.

Insumos				Productos			
NAOH [m <sup>3</sup> /h]	AIRE3 [m <sup>3</sup> /h]	Agua Fresca [m <sup>3</sup> /h]	Glicerol [m <sup>3</sup> /h]	SO <sub>4</sub> [kg/h]	Metano [m <sup>3</sup> /h]	HS- [kg/h]	Azufre [kg/h]
0.418	6722.05	698.65	0.1883	383.17	8.65	122.66	117.49

La energía requerida para mantener el reactor UASB a 35 °C que se calculó utilizando el reactor estequiométrico es de 11.02 GJ/h, mientras que la energía disponible en los gases de combustión es de 5.56 GJ/h. Con esa energía se obtendría una temperatura en el reactor UASB de 33.47 °C. Con el análisis Pinch se pretendió aumentar dicha temperatura. El  $\Delta T_{\min}$  que se calculó con Aspen Energy Analyzer fue de 10 °C, la temperatura en el Pinch encontrado fue de 25 °C, 30 °C para las corrientes calientes y de 20 °C para las corrientes frías debido a las temperaturas desplazadas para asegurar el intercambio de calor. La red de intercambiadores de calor que se diseñó se muestra en la Figura 6.1. Arriba de la temperatura del Pinch, para calentar la corriente de aire a la temperatura necesaria se utilizó un intercambiador con la corriente de gases de combustión. Para la corriente de agua fresca se utilizó un intercambiador con la corriente de purga y otro con la corriente de gases de combustión. A pesar de estos intercambios no se alcanza la temperatura deseada en la corriente

de agua fresca por lo que es necesario complementarlo con una corriente de servicio caliente. Debajo del Pinch se utilizó una corriente de servicio fría para finalizar el diseño.

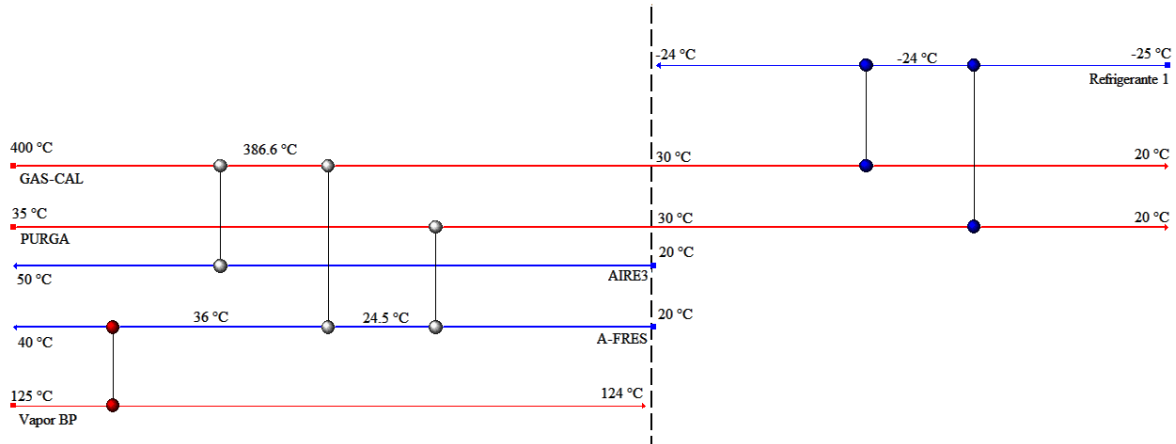


Figura 6.1. Red de intercambiadores de calor diseñada en un diagrama de rejilla.

La red de intercambiadores se implementó en la simulación de Aspen Plus sin incluir las corrientes de servicio fría (Refrigerante 1) y caliente (Vapor BP) incluidas en el diagrama de rejilla, estos sólo se introdujeron en el diagrama de Aspen Energy Analyzer para diseñar la red satisfactoriamente. Con la implementación de la red de intercambiadores de calor se logró obtener una temperatura de 34.8 °C en el reactor A del proceso, y el bloque RStoic que simula el reactor UASB muestra en los resultados de la simulación que sólo son necesarios 973 MJ/h adicionales para alcanzar los 35 °C, como ya se mencionó anteriormente esta es la temperatura óptima de trabajo para el reactor UASB para obtener un mayor rendimiento, lo que equivale a tan sólo el 8% de la energía total que sería necesaria si se suministrara con una corriente externa.

## 6.1 Resultados del proceso de cogeneración

Los resultados del proceso de cogeneración mostraron que la potencia eléctrica producida en la turbina sería de 57 kW, a la cual se le resta la potencia consumida por el compresor que fue de 29 kW, por lo que la potencia neta sería 28 kW.

Utilizando un bloque de Sensibilidad se tabuló la potencia necesaria para cada bomba y compresor del proceso y se sumaron para comparar el valor total con la potencia neta producida por el ciclo de turbina de gas. Estos valores se pueden observar en la Tabla 6.2.

**Tabla 6.2.** Potencia requerida para cada bomba y compresor del proceso y la potencia total requerida.

<b>Equipo</b>	<b>Potencia (kW)</b>	<b>Equipo</b>	<b>Potencia (kW)</b>	<b>Equipo</b>	<b>Potencia (kW)</b>
B1	0.0592	B6	20.8362	C2	64.7103
B2	0.0012	B7	20.8661	C3	0.6794
B3	0.6022	B8	17.4458	C4	2.6232
B4	4.4452	B9	0.3948	C5	1.0160
B5	0.0018	C1	2.3791	<b>TOTAL</b>	<b>136.0607</b>



## 7 Discusión de resultados

Los gases de combustión deben entrar al absorbedor a una temperatura menor a 60 °C debido a que la solubilidad del SO<sub>2</sub> disminuye considerablemente conforme la temperatura aumenta en una solución acuosa de NaOH [19]. Es por esto, que en lugar de simplemente desechar este calor, sería más provechoso utilizarlo para optimizar el proceso. En la Tabla 6.1 podemos notar que se requiere un caudal considerable de agua para el proceso, la razón de esto es que el reactor R-SRB no debe trabajar con una concentración de sulfato mayor a 0.575 kg/m<sup>3</sup>. Este límite de concentración se debe a que en el proceso anaerobio que se lleva a cabo en el reactor R-SRB se reduce el sulfato a sulfuro, altas concentraciones de sulfuro pueden inhibir el proceso anaerobio provocando que este falle. Este valor permite que la concentración de sulfuro se mantenga en un valor adecuado para evitar la inhibición del proceso [13]. Es debido a esto que no se cuenta con suficiente energía calorífica en los gases de combustión para alcanzar fácilmente los 35 °C en el reactor R-SRB, la cual es la temperatura óptima de operación para procesos anaerobios. Como se mencionó en los resultados, si utilizáramos esa energía para calentar el reactor S-SRB se alcanzaría una temperatura de 33.47 °C. Esta temperatura no es la ideal, pero tampoco se encuentran muy apartados de ésta, por lo que se podría operar en condiciones cercanas a la temperatura de operación óptima. Además, el suplir la energía necesaria restante para alcanzar la temperatura óptima sería mínima comparada a la que se necesitaría sin el aprovechamiento de la energía calorífica de los gases de combustión.

Los resultados de la optimización para el proceso con una concentración de 6000 ppm y una temperatura de los gases de combustión de 400 °C nos arrojan que la temperatura alcanzada en la corriente a la entrada del reactor es de 34.8 °C. En el diagrama de rejillas se utilizó una corriente de servicio caliente y una fría, esto con el fin de que el diagrama quedara completo, pero que en la práctica se puede prescindir de ellas porque no es necesario enfriar las corrientes calientes hasta 20 °C ya que mientras los gases de combustión se encuentren a una temperatura menor a 60 °C el lavador puede funcionar correctamente; además la temperatura alcanzada es de 34.8 °C por lo que podría trabajarse a esta temperatura tan próxima a la óptima sin la necesidad de añadir más energía y evitar más gastos por utilizar una corriente de servicio caliente para llegar a los 35 °C en el reactor UASB.

En el proceso de sulfato reducción en el reactor UASB se produce biogás, formado principalmente por metano y algunas impurezas como CO<sub>2</sub> o H<sub>2</sub>S. Este puede aprovecharse y utilizarse en diversas aplicaciones [20] como por ejemplo :

- La producción de calor y/o vapor en una caldera (la aplicación de valor más bajo)
- La producción de electricidad en un proceso de cogeneración con recuperación de calor residual como fuente de energía industrial para calentar agua, producir vapor o refrigeración con una microturbina.
- La generación de electricidad mediante el uso directo de metano o la reforma de hidrógeno en celdas de combustible.

Considerando los datos experimentales obtenidos en laboratorio este biogás es prácticamente biometano. Si consideráramos utilizar el biometano generado en el reactor UASB para aumentar la temperatura en el mismo, podemos tomar el poder calorífico inferior (PCI) del metano, 49, 900 kJ/kg, y el flujo másico de metano producido, 6.19 kg/h, y obtendríamos un flujo de energía de 308.88 MJ/h. Esta energía no es suficiente para terminar de suplir la energía faltante de 0.973 Gcal/h para alcanzar la temperatura óptima. En el caso de utilizar el biometano producido para alimentar una turbina de gas, al comparar la potencia producida por el ciclo de turbina de gas y el total requerido por el proceso es evidente que solamente supliría alrededor de una quinta parte de la demanda, por lo que sería poco viable implementar una planta de generación de energía eléctrica basada en un ciclo de turbina de gas debido al aumento en el coste de inversión para la implementación del proceso además del aumento en el espacio requerido para el proceso. La opción más viable sería introducir esta corriente de biometano en el gas natural utilizado en el proceso de elaboración del pigmento azul ultramar. La producción de biogás, compuesto prácticamente por metano, es de 8.651 m<sup>3</sup>/h. Al mes esto representaría un ahorro de 6228.79 m<sup>3</sup> de combustible. Si tomamos en cuenta que el costo de gas natural tiene un valor de 150 €/Tn (2015) en España y la producción de biometano al mes es de 4,456.8 kg/mes el ahorro sería de 668.52 € aproximadamente. Esta simulación se basó en las condiciones de operación en las que se minimiza la producción de metano, pero es posible modificar estas condiciones (pH, temperatura, concentraciones de sulfato a tratar) en la realidad para obtener una producción de metano mayor y por lo tanto más cantidad de energía que puede ser aprovechada.

## 8 Conclusiones

La simulación del proceso de tratamiento de gases de combustión para obtener azufre elemental se ha desarrollado exitosamente y, aunque se desarrolló de forma simplificada y en condiciones ideales, se puede utilizar como una herramienta para ayudar a la implementación de este proceso a escala industrial utilizando como referencia los datos obtenidos en la simulación, como lo son los caudales, la temperatura, los compuestos presentes durante el proceso, etc., para el diseño y dimensionamiento de los equipos a utilizar. Además, que facilita la experimentación en escenarios con diferentes condiciones de trabajo o el utilizar equipos diferentes.

Se demostró también que el análisis pinch es una poderosa herramienta para la optimización energética, la cual no es complicada y es rápida de aplicar con la ayuda del módulo Aspen Energy Analyzer. Aplicando este análisis se optimizó el proceso simulado creando una red de intercambiadores de calor que nos permitieron prescindir de corrientes de servicio para enfriamiento o calentamiento. Esto se traduce como un aumento en el costo de inversión, pero se compensaría después de un tiempo con la disminución en los costos de operación, ya que no se gastaría en corrientes de servicio. Aunque el proyecto no incluye un análisis de viabilidad económica la simulación muestra que si se aprovechan los recursos que se disponen en este proceso su viabilidad aumenta y por lo tanto podría ser llevado a la escala industrial.

## Referencias

- [1] O. J. Restrepo Baena, “Pigmento azul ultramar: caracterización del proceso y producto,” Universidad de Oviedo, 1996.
- [2] P. A. Vesilind, S. M. Morgan, and L. G. Heine, *Introduction to Environmental Engineering*, Third Edit. Cengage Learning, 2010.
- [3] Comisión Europea, *Mejores Técnicas Disponibles de referencia europea. Sistemas de Gestión y Tratamiento de Aguas y Gases Residuales en el Sector Químico*. Solana e hijos, A.G., S. A., 2009.
- [4] F. G. Bolívar Zapata, Ed., *Fundamentos y casos exitosos de la biotecnología moderna*, 2da ed. México: El Colegio Nacional, 2007.
- [5] A. Palomino Infante, “Análisis Pinch y su contribución a la integración de procesos,” *Rev. la Soc. Química del Perú*, vol. 70, no. 3, pp. 167–174, 2004.
- [6] I. C. Kemp, *Pinch Analysis and Process Integration*, 2nd ed. Butterworth-Heinemann, 2007.
- [7] R. Turton, R. C. Bailie, W. B. Whiting, J. A. Shaeiwitz, and D. Bhattacharyya, *Analysis , Synthesis , and Design of Chemical Processes*, 4th ed. Prentice Hall, 2012.
- [8] W. van den Broeke and J. Lefers, “Absorption and Desorption of SO<sub>2</sub> into/from Aqueous Solutions,” *Chemie Ing. Tech.*, vol. 56, no. 10, pp. 792–793, 1984.
- [9] B. Maier, C. Dietrich, and J. Büchs, “Correct Application of the Sulphite Oxidation Methodology of Measuring the Volumetric Mass Transfer Coefficient k<sub>La</sub> Under Non-Pressurized and Pressurized Conditions,” *Food Bioprod. Process.*, vol. 79, no. 2, pp. 107–113, 2001.
- [10] S. M. Bertolino, L. A. Melgaço, R. G. Sá, and V. A. Leão, “Comparing lactate and glycerol as a single-electron donor for sulfate reduction in fluidized bed reactors,” *Biodegradation*, vol. 25, no. 5, pp. 719–733, 2014.
- [11] K. Rajendran, H. R. Kankanala, M. Lundin, and M. J. Taherzadeh, “A novel process simulation model (PSM) for anaerobic digestion using Aspen Plus,” *Bioresour. Technol.*, vol. 168, pp. 7–13, 2014.
- [12] K. Y. Chen and J. C. Morris, “Kinetics of Oxidation of Aqueous Sulfide by Oxygen,”

- Environ. Sci. Technol.*, vol. 6, no. 6, pp. 529–537, 1972.
- [13] Z. Jing, Y. Hu, Q. Niu, Y. Liu, Y. Y. Li, and X. C. Wang, “UASB performance and electron competition between methane-producing archaea and sulfate-reducing bacteria in treating sulfate-rich wastewater containing ethanol and acetate,” *Bioresour. Technol.*, vol. 137, pp. 349–357, 2013.
- [14] M. Mora, J. Lafuente, J. Fernández, R. March, and D. Gabriel, “Crude glycerol use as carbon source in a sulfate-reducing UASB for sulfur recovery from S-rich effluents,” in *1st International Conference on Bioenergy & Climate Change: Towards a Sustainable Development*, 2016.
- [15] C. Duque, C. Montes, F. Bustamante, and A. Ortiz, “Simulation of two alternatives for SO<sub>2</sub> removal from wet cement kiln exhaust gases,” *Rev. Fac. Ing. Univ. Antioquia*, vol. 56, pp. 49–57, 2010.
- [16] Aspen Technology Inc, “Aspen Plus User Guide.” p. 936, 2000.
- [17] R. Peris Serrano, “Biogas Process Simulation using Aspen Plus,” Syddansk Universitet, 2011.
- [18] J. M. Fernández and C. Uriel, Eds., *Sistemas químicos*. Reverté, 1965.
- [19] G. Vazquez, G. Antorrena, F. Chenlo, and F. Paleo, “Absorption of SO<sub>2</sub> by Aqueous NaOH Solutions in the Presence of a Surfactant,” *Chem. Eng. Technol.*, vol. 11, no. 1, pp. 156–162, 1988.
- [20] A. Wellinger, J. Murphy, and D. Baxter, Eds., *The biogas handbook Science, production and applications*. Woodhead Publishing Limited, 2013.

# Anexo A Descripción del software Aspen Plus

## Métodos para el cálculo de propiedades.

La configuración de la simulación como se muestra en la Figura A-1, exige definir un método para el cálculo de propiedades, el cual es un conjunto de modelos matemáticos que Aspen Plus utiliza para calcular las propiedades termodinámicas y de transporte de los componentes. Las propiedades termodinámicas son:

- Coeficiente de fugacidad (valores K)
- Entalpía
- Entropía
- Energía libre de Gibbs
- Volumen

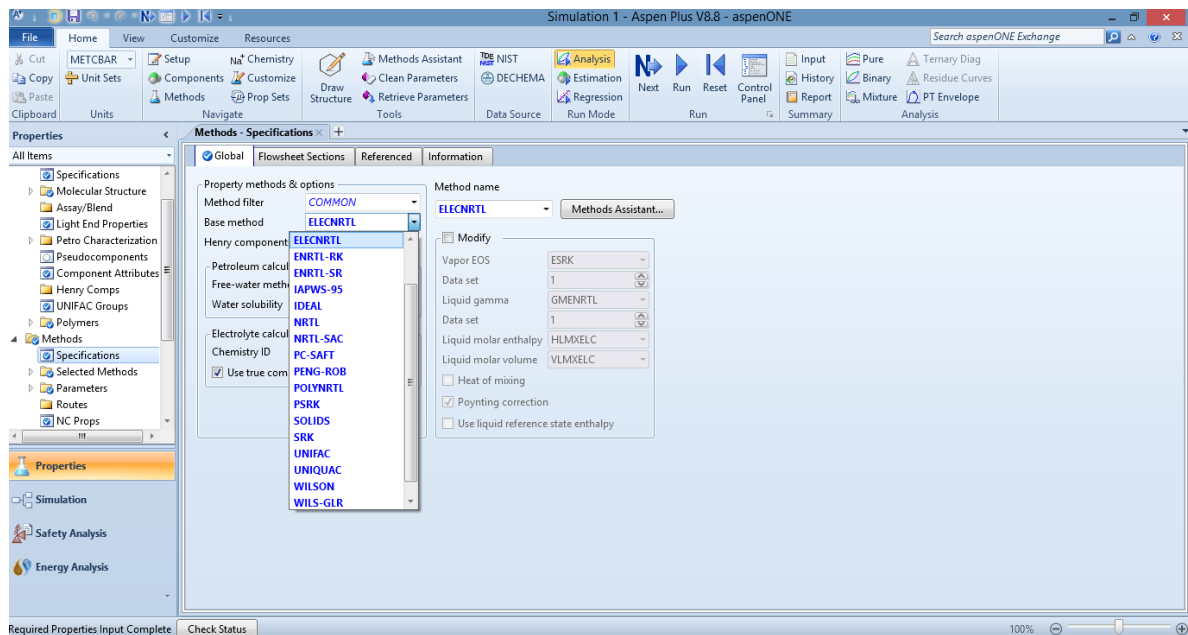


Figura A-1. Elección del método de cálculo de propiedades.

Las propiedades de transporte son:

- Viscosidad
- Conductividad térmica
- Coeficiente de difusión
- Tensión superficial

Aspen Plus tiene incorporados una gran variedad de métodos que son suficientes para la mayoría de aplicaciones. Pero de ser necesario se pueden modificar los existentes o crear uno nuevo para satisfacer las necesidades del usuario. Algunos métodos de cálculo de propiedades se mencionan a continuación:

-IDEAL. El método de cálculo de propiedades IDEAL incluye la Ley de Raoult y la Ley de Henry. Este método utiliza:

- El modelo de coeficiente de actividad ideal para la fase líquida ( $\gamma = 1$ ).
- La ecuación de estado del gas ideal  $PV = nRT$  durante la fase de vapor.
- El modelo Rackett para el volumen molar líquido.

El método IDEAL se recomienda para sistemas en los cuales puede ser asumido un comportamiento ideal, como sistemas a presiones de vacío o sistemas isoméricos a baja presión.

-NRTL. Este método utiliza el modelo de coeficiente de actividad NRTL (Non Random Two Liquid). Se recomienda para sistemas químicos altamente no ideales, y se puede utilizar para aplicaciones de Equilibrio Vapor-Líquido (VLE) y Equilibrio Líquido-Líquido (LLE).

El modelo requiere parámetros binarios. Muchos de los parámetros binarios para VLE y LLE, de la literatura y de la regresión de los datos experimentales, se incluyen en los bancos de datos del Sistema de Propiedades Físicas de Aspen. Además, en estos bancos de datos están disponibles coeficientes de Henry para varios solutos con agua y otros solventes para poder simular la solubilidad de gases supercríticos usando la Ley de Henry.

-PENG-ROB. Este método de cálculo de propiedades usa:

La ecuación de estado cúbica de Peng-Robinson estándar para todas las propiedades termodinámicas excepto el volumen molar líquido.

- El método del Instituto del Petróleo Americano (API) para el volumen molar líquido de los pseudo componentes y el modelo Rackett para los componentes reales.
- Se recomienda para aplicaciones de procesamiento de gas, refinería y petroquímica. Algunos ejemplos de aplicaciones incluyen plantas de gas, torres de crudo y plantas de etileno.

Este método es particularmente adecuado en las regiones de alta temperatura y alta presión, tales como en aplicaciones de procesamiento de hidrocarburos o extracciones supercríticas.

Este método de propiedad se puede utilizar para mezclas químicas polares, no ideales, si se utilizan las funciones alfa apropiados y reglas de mezcla.

-SOLIDS: Este método está diseñado para muchos tipos de procesamiento de sólidos:

- Procesamiento de carbón.
- Procesos pirometalúrgicos.
- Varios procesamientos de otros sólidos (tales como almidón y polímeros).

Las propiedades de los sólidos y las fases de líquido no se pueden calcular con el mismo tipo de modelos. Por lo tanto, los componentes se distribuyen en las subcorrientes de tipo mixto, sólida y no convencionales y sus propiedades se calculan con modelos apropiados.

-ELECNRTL: es el método de cálculo de propiedades de electrolitos más versátil. Puede manejar concentraciones bajas y altas. Puede manejar sistemas de disolventes acuosos y mixtos.

Muchos de los parámetros binarios y de par y las constantes de equilibrio químico de la regresión de datos experimentales se incluyen en los bancos de datos de Aspen. La solubilidad de gases supercríticos puede ser modelada usando la Ley de Henry y usando coeficientes de Henry disponibles en los bancos de datos.



## Componentes

Aspen Plus almacena parámetros de propiedades físicas para un gran número de componentes en varios bancos de datos. La Tabla A-1 muestra el contenido y el uso de bancos de datos de componentes incluidos en Aspen Plus.

Para crear la lista de componentes que participarán en un proceso de simulación es suficiente con introducir el nombre del componente o su fórmula en la celda de Nombre de Componente en la sección de Componentes de Aspen Plus en la hoja de configuración, como se puede observar en la Figura A-2.

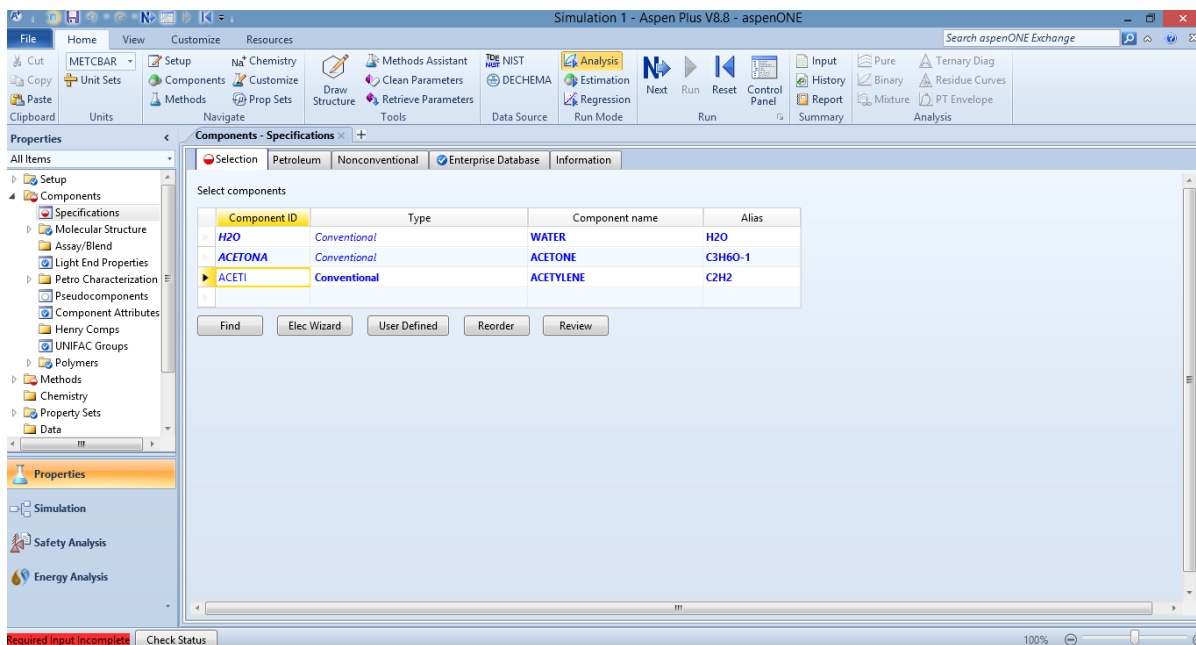


Figura A-2. Lista de componentes en Aspen Plus.

Si el componente se encuentra en los bancos de datos se agregará a la lista de componentes y se le podrá asignar un ID al componente, en caso contrario el programa sugiere una búsqueda avanzada con la opción Buscar (Find). Aspen Plus automáticamente vincula las propiedades de los componentes de la lista con los de sus bancos de datos de componentes. A pesar de toda la información contenida en las bases de datos de Aspen Plus hay datos que no se encuentran para algunos Analysis componentes, por lo que hay que investigarlos o hacer alguna suposición. Incluso es

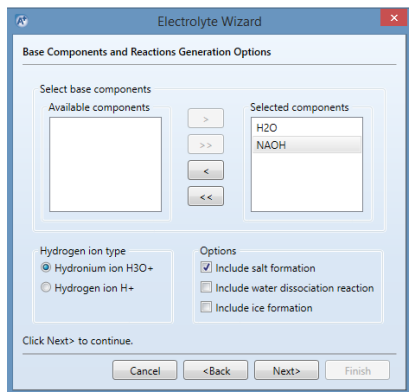
posible crear un componente si se cuenta con la estructura molecular o con las propiedades físicas obtenidas experimentalmente.

**Tabla A-1.** Contenido y usos de principales bancos de datos de componentes de Aspen Plus.

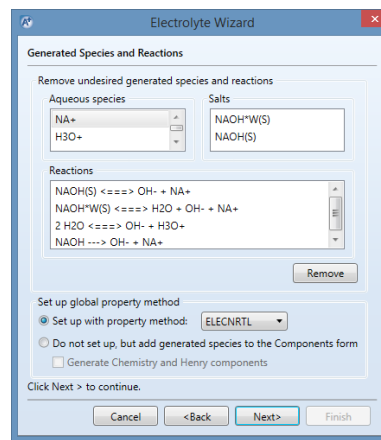
<b>Banco de datos</b>	<b>Contenido</b>	<b>Usos</b>
PURE10	Parámetros de componentes puros para la mayoría de componentes orgánicos.	Banco de datos de componentes primarios en Aspen Plus.
AQUEOUS	Parámetros de componentes puros de especies iónicas y moleculares en solución acuosa.	Simulaciones que contienen electrolitos.
SOLIDS	Parámetros de componentes puros para electrolitos fuertes, sales y otros sólidos	Simulaciones que contienen electrolitos y sólidos.
INORGANIC	Parámetros de componentes puros para componentes inorgánicos y orgánicos.	Sólidos, electrolitos y aplicaciones de metalurgia.
COMBUST	Parámetros de componentes puros para los productos de combustión, incluyendo radicales libres.	Para cálculos de fase gas a alta temperatura.

## Reacciones de equilibrio

Al trabajar con electrolitos se pueden definir las reacciones de equilibrio que tendrán lugar en el proceso. Para esto Aspen Plus tiene el asistente Electrolyte Wizard (botón Elec Wizard) debajo de la lista de componentes que se crea. Al utilizar esta opción se abre una ventana de diálogo como la que se puede ver en la Figura A-3 (a), donde podremos elegir elementos, de la lista creada anteriormente, para que Aspen Plus nos genere las reacciones de equilibrio posibles con los elementos seleccionados. Podemos remover las reacciones que no participan dentro del proceso como se ve en la Figura A-3 (b). Se pueden crear conjuntos de reacciones para poder utilizarse en partes específicas del proceso.



(a)



(b)

Figura A-3. Asistente Electrolyte Wizard: (a) selección de componentes; (b) selección de reacciones de equilibrio deseadas.

## Entorno de la hoja de simulación

La hoja de simulación es el entorno donde se crea y diseña el proceso a simular. El diagrama de simulación se crea utilizando corrientes y bloques comúnmente presentes en los procesos químicos. Existen tres tipos de corrientes que se pueden crear en Aspen Plus (Figura A-4): Materiales, Trabajo y Calor. Las corrientes de materiales se utilizan para representar las corrientes de alimentación y de productos de las unidades del proceso. A estas se les deben especificar: la tasa de flujo, la composición y las condiciones termodinámicas. Las corrientes de calor se utilizan para representar ya sea una corriente de calor externa proporcionada a un bloque de operación de nuestro proceso o una corriente de calor que sale de un bloque del proceso, como un reactor o un intercambiador de calor. Las corrientes de trabajo se utilizan para representar una corriente de trabajo proporcionada a un bloque de operación o creada por este, como un compresor o una bomba.

## Modelos de unidades de operación

Aspen Plus cuenta con un catálogo de unidades de operación (Figura A-5) que nos permiten simular una gran variedad de procesos. Estos están clasificados en diferentes pestañas de acuerdo a su función y se hablará sobre ellas a continuación.

➤ Mezcladores/divisores

En esta pestaña se encuentran los modelos que se pueden utilizar para mezclar o dividir corrientes en la hoja de simulación. Podemos encontrar los bloques Mixer, FSplit y SSplit.

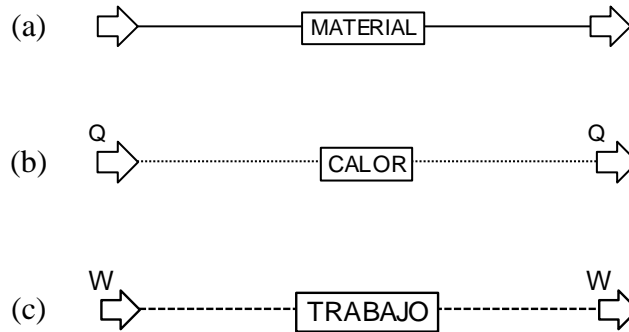


Figura A-4. Corrientes que se utilizan para la simulación en Aspen Plus: (a) de materiales, (b) de calor y (c) de trabajo.

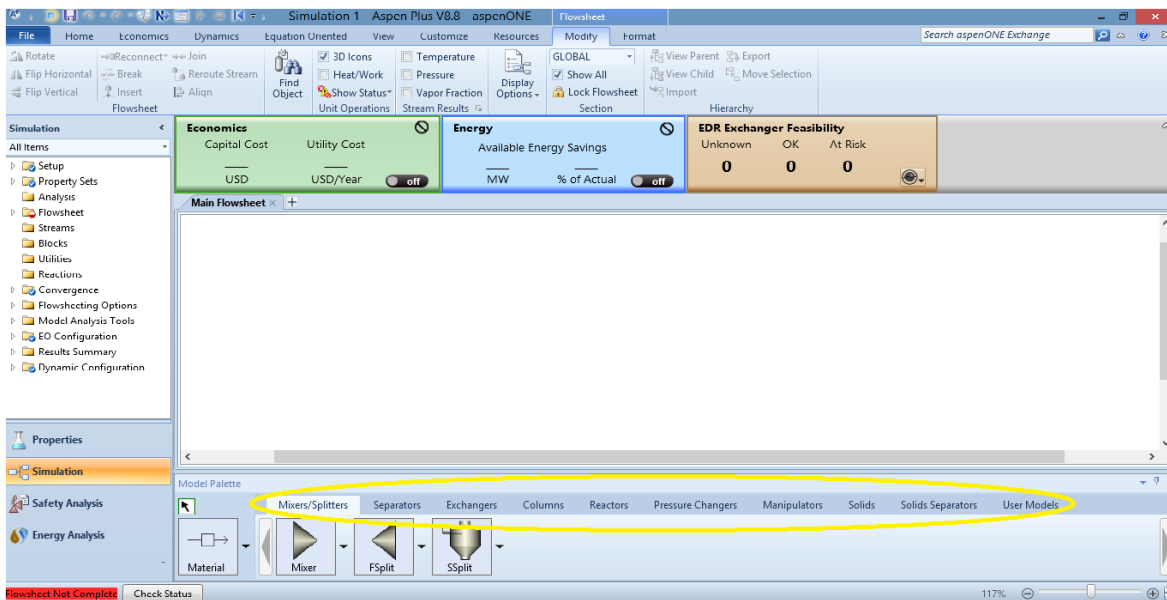


Figura A-5. Paleta de bloques de unidades de operación en Aspen Plus.

### ➤ Separadores

En esta sección se encuentran los modelos que se pueden utilizar para separar corrientes de entrada o sus componentes en dos o más corrientes de salida (Figura A-6). Aquí podemos encontrar los bloques Flash2, Flash3, Decanter, Sep y Sep2. Los bloques Flash2 y Flash3 realizan cálculos de equilibrio rigurosos de 2 fases (vapor-líquido) y 3 fases (vapor-líquido-líquido) para producir una salida de vapor y una o dos de líquido. El bloque Decanter se puede utilizar para separar dos fases líquidas, pero sin una fase de vapor. Los bloques Sep y Sep2 combinan todas las corrientes de entrada y separan la corriente resultante en dos o más corrientes de acuerdo a las divisiones especificadas por el usuario.

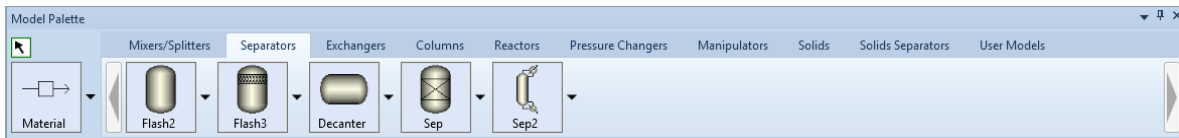


Figura A-6. Modelos de la sección “Separators” de la paleta de modelos de Aspen Plus.

### ➤ Intercambiadores

Los modelos de intercambiadores (Figura A-7) simulan el funcionamiento de los calentadores o intercambiadores de calor de dos o más flujos. Aquí podemos encontrar los bloques Heater, HeatX, MHeatX y HXFlux. El bloque Heater se utiliza para simular calentadores o enfriadores, válvulas cuando se conoce la caída de presión e incluso bombas y compresores cuando no se necesitan resultados relacionados con energía de trabajo. También se puede utilizar para establecer o cambiar las condiciones termodinámicas de una corriente. El bloque HeatX puede simular intercambiadores de calor de dos corrientes. Para realizar los cálculos puede hacerlo de manera simple o detallada, donde la principal diferencia entre los dos métodos de cálculo es el procedimiento para el cálculo del coeficiente de transferencia de calor general. El método simple siempre utiliza un valor especificado por el usuario para el coeficiente de transferencia de calor general. Es necesario conocer la geometría para utilizar el método detallado. El bloque MHeatX representa la transferencia de calor entre múltiples corrientes calientes y frías, pero a diferencia del HeatX no usa ni calcula coeficientes de transferencia de calor, en cambio puede calcular el UA general (producto del coeficiente de transferencia de calor  $U$  y el área  $A$ ) para el intercambiador y

desarrollar un análisis de zona detallado. El bloque HXFlux se utiliza para realizar cálculos de transferencia de calor entre un disipador de calor y una fuente de calor, usando transferencia de calor por convección.



Figura A-7. Modelos de la sección “Exchangers” de la paleta de modelos.

### ➤ Columnas

Aquí podemos encontrar todo tipo de columnas para simular desde simples destilaciones hasta operaciones de fraccionamiento líquido-vapor complejas de la industria de la refinación de petróleo (Figura A-8). Podemos encontrar en esta pestaña los bloques DSTWU, Distl, RadFrac, Extract, MultiFrac, SCFrac, PetroFrac, BatchSep y ConSep. Los bloques DSTWU, Distl y SCFrac se pueden utilizar para simular destilaciones de una manera corta. Los bloques DSTWU y Distl son para simular columnas individuales, pueden realizar cálculos de agua libre en el condensador y permiten utilizar las corrientes de decantación de agua para trasvasar agua libre procedente del condensador. El bloque SCFrac lleva a cabo cálculos de destilación de una manera corta para unidades de refinación de petróleo, como las unidades de crudo y las torres de vacío. Los modelos RadFrac, MultiFrac y PetroFrac proveen modelos de separación de múltiples etapas rigurosos. El RadFrac lleva a cabo separaciones de múltiples etapas de vapor-líquido general. El bloque MultiFrac se puede utilizar para simular sistemas generales de unidades de destilación de varias etapas interrelacionadas. Y el PetroFrac se desempeña como una unidad de fraccionamiento de refinado de petróleo. Extract es un modelo riguroso para la simulación de extractores líquido-líquido. Es apropiado sólo para los cálculos de calificación, mientras que BatchFrac es el modelo de operación unitaria de destilación por lotes. Es un modelo riguroso para la simulación de columnas de destilación por lotes de varias etapas.

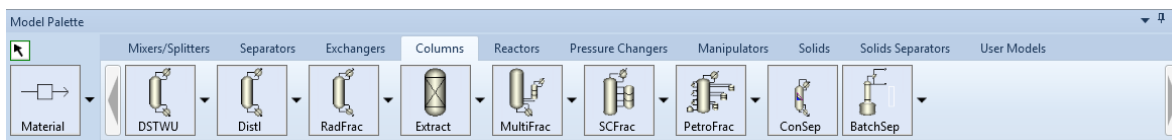


Figura A-8. Modelos de la sección “Columns” de la paleta de modelos.

### ➤ Reactores

Esta sección, Figura A-9, contiene diferente tipos de reactores para simular reacciones químicas bajo condiciones diversas. En esta sección podemos encontrar los bloques RStoic, RYield, REquil, RGibbs, RCSTR, RPlug y RBatch. El modelo RStoic puede modelar un reactor cuando las cinéticas de reacción son desconocidas o no son importantes, cuando la estequiometría es conocida y cuando se puede especificar la extensión de la reacción o conversión. El bloque RStoic puede manejar las reacciones que se producen de forma independiente en una serie de reactores y también puede realizar la selectividad del producto y el calor de los cálculos de reacción. RYield puede modelar un reactor mediante los rendimientos de reacción especificados para cada componente. Este modelo es útil cuando la estequiometría y las cinéticas de reacción son desconocidas, pero los datos de distribución de rendimientos o correlaciones están disponibles. REquil puede modelar un reactor cuando una o todas las reacciones alcanzan el equilibrio. REquil puede calcular el equilibrio de una sola fase química, o fase simultánea y equilibrios químicos. También calcula el equilibrio mediante la resolución de ecuaciones químicas estequiométricas y de equilibrio de fase. El bloque RGibbs puede modelar el equilibrio químico de una sola fase, o una fase simultánea y equilibrio químico. Este modelo minimiza la energía libre de Gibbs sujeta a las restricciones de balance de átomo. No es necesario especificarle la estequiometría de la reacción. El bloque RGibbs puede determinar el equilibrio de fase sin una reacción química, particularmente para fases líquidas múltiples. El modelo RCSTR se utiliza rigurosamente para modelar reactores de tanque con agitación continua. Se puede utilizar cuando las cinéticas de reacción son conocidas y el contenido del reactor tiene las mismas propiedades que la corriente de salida. RPlug modela rigurosamente reactores de flujo pistón. Puede tener una corriente de enfriamiento opcional alrededor del reactor. También se puede utilizar para modelar reactores con corrientes de enfriamiento a favor de la corriente o contracorriente. Este bloque sólo maneja reacciones cinéticas basadas en la frecuencia. El RBatch

modela rigurosamente reactores de lotes o semi lotes. Tanques de retención se utilizan para interconectar el reactor por lotes con las corrientes en estado estacionario de una simulación de Aspen Plus. Para los reactores de semi lotes, se puede especificar un orificio de ventilación continua y cualquier número de alimentaciones continuas o retardadas. Maneja sólo reacciones cinéticas basadas en la frecuencia.

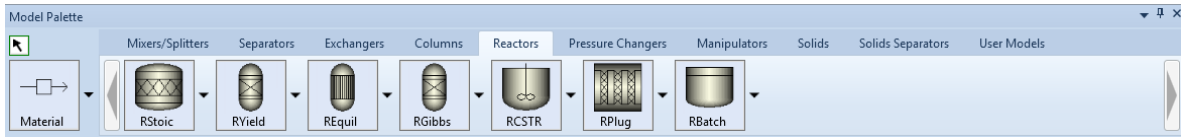


Figura A-9. Modelos de la sección “Reactors” de la paleta de modelos.

#### ➤ Cambiadores de presión

Contiene modelos que cambian la presión simplemente y también algunos que son capaces de calcular información relacionada a la energía (Figura A-10), como el requerimiento de potencia. Podemos encontrar aquí los modelos Pump, Compr, MCompr, Valve, Pipe y Pipeline. Los modelos Pump y Compr cambian las presiones de las corrientes de materiales cuando se necesita o se conoce información relacionada con la energía, como el requerimiento de potencia. MCompr puede simular un compresor o turbina de múltiples etapas con interenfriadores entre cada etapa. Pipeline calcula la caída de presión y la transferencia de calor en un segmento de tubo o una tubería. Pipeline puede modelar cualquier número de segmentos para describir la geometría de la tubería. Pipe calcula la caída de presión y la transferencia de calor para un segmento de tubería individual con accesorios. Valve modela rigurosamente la caída de presión en las válvulas de control.

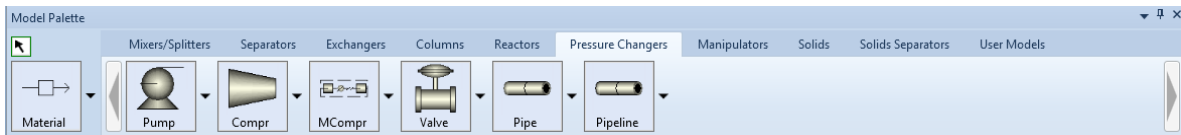


Figura A-10. Modelos de la sección “Pressure Changers” de la paleta de modelos.



### ➤ Manipuladores

Los manipuladores de flujo modifican o cambian variables de la corriente para mayor comodidad (Figura A-11). Ellos no representan unidades de operaciones reales. Aquí podemos encontrar los modelos Mult, Dupl, ClChng, Selector, entre otros. Mult multiplica las corrientes por un factor que el usuario especifica. Los balances de calor y materiales no se mantienen. La corriente de salida tiene la misma composición y propiedades como la entrada. DUPL copia la corriente de entrada a cualquier número de corrientes de salida. Este modelo no satisface los balances de materiales y energía. Dupl es útil para procesar simultáneamente una corriente dada en diferentes tipos de unidades. ClChng cambia la clase de las corrientes entre los bloques y las secciones del diagrama de flujo. Copia las corrientes parciales de la corriente de entrada a las correspondientes corrientes parciales de la corriente de salida. Selector realiza un cambio entre diferentes corrientes de entrada. Cualquier número de corrientes puede entrar en el bloque y un flujo designado entre éstos se copia en la corriente de salida. El bloque Selector se puede utilizar con flujos de materiales, energía térmica o de trabajo.

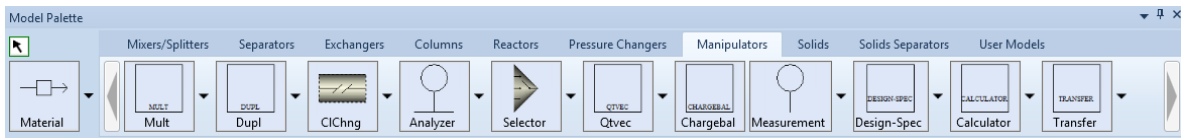


Figura A-11. Modelos de la sección “Manipulators” de la paleta de modelos.

### ➤ Sólidos

Se trata de diferentes modelos relacionados con el tratamiento de sólidos como secado, triturado y separación sólido-sólido (Figura A-12). En la Tabla A-2 podemos observar los modelos disponibles en esta sección y las operaciones unitarias o procesos que pueden modelar.

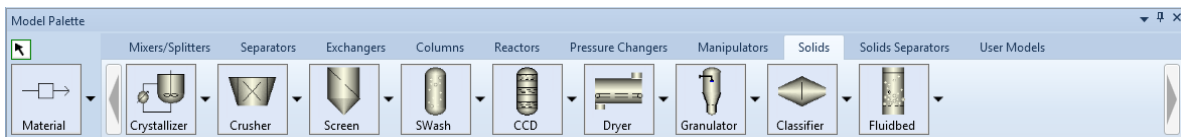


Figura A-12. Modelos de la sección “Solids” de la paleta de modelos.

**Tabla A-2.** Modelos que se encuentran en la pestaña “Solids” de la paleta de modelos.

<b>Bloque</b>	<b>Modela</b>
CCD	Lavadores de sólidos de múltiples etapas que recuperan componentes disueltos de un líquido arrastrado de una corriente de sólidos
Classifier	Separación de sólido-sólido basado en la gravedad como los tamices
Crusher	El rompimiento de partículas sólidas en una trituradora
Crystallizer	Un cristalizador de eliminación de producto mixto de una suspensión mixta.
Dryer	La eliminación de componentes de humedad de subflujos de sólidos.
Granulator	Granuladores, aglomeradores y otros equipos diseñados para aumentar el tamaño de las partículas sólidas.
Screen	Separación sólido-sólido utilizando pantallas de separación
SWash	Lavador de sólidos de una única etapa

➤ Separadores de sólidos

En esta sección, Figura A-13, se localizan modelos de procesamiento de sólidos para separaciones gas-sólido y líquido-sólido. En la Tabla A-3 se muestran los modelos disponibles y el proceso que pueden simular.

**Tabla A-3.** Modelos de la pestaña Separadores de “Solids” de la paleta de modelos.

<b>Bloque</b>	<b>Modela</b>
Cyclone	Separación de gas y sólidos usando ciclones
VScrub	Separación de gas y sólidos usando lavadores Venturi
CFuge	Separación de líquidos y sólidos utilizando filtros de centrífuga
Filter	Separación de líquidos-sólidos utilizando filtros rotativos de vacío continuas
HyCyc	Separación de líquidos-sólidos utilizando hidrociclones
ESP	Separación de gas y sólidos utilizando precipitadores electrostáticos secos
FabFl	Separación de gas y sólidos utilizando filtros de tela
Cyclone	Separación de gas-sólidos utilizando ciclones

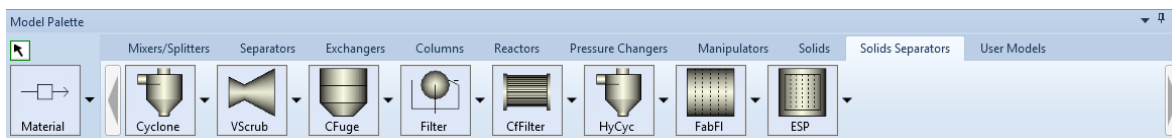


Figura A-13. Modelos de la sección Separadores de Sólidos de la Paleta de Modelos.

➤ Modelos de usuario

Estos modelos, Figura A-14, pueden simular cualquier modelo de operación unitaria. Para cada tipo de modelo, el usuario escribe su propio programa u hoja de cálculo para calcular los valores de las corrientes de salida, con base en los flujos de entrada y los parámetros especificados. En la Tabla A-4 se muestran los modelos de usuario disponibles y su descripción.

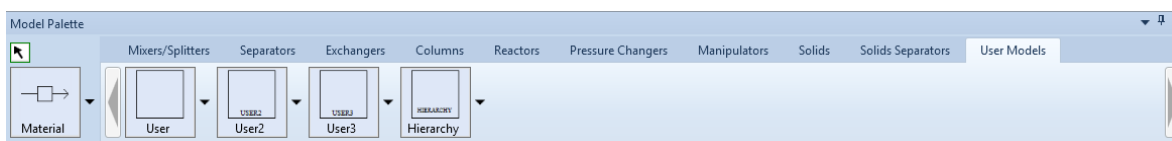


Figura A-14. Modelos de la sección Modelos de Usuario de la Paleta de Modelos.

**Tabla A-4.** Modelos de usuario y su descripción.

Modelo	Descripción
User	Modelo de operación unitaria definido por una subrutina Fortran suministrada por el usuario. Se puede usar para operaciones unitarias con hasta cuatro flujos de entrada y salida.
User2	Modelo de operación unitaria definido por una subrutina Fortran suministrada por el usuario o una hoja de cálculo de Excel. Se puede usar para operaciones unitarias con cualquier número de flujos de entrada y salida.
User3	Modelo de operación unitaria orientada a la ecuación definida por una subrutina Fortran suministrada por el usuario o un modelo pre-compilado a partir de la biblioteca de la PML (Librería de Modelos de Procesos).
Hierarchy	Bloque contenedor de modelos de operaciones unitarias, corrientes y objetos que no sean diagramas de flujo. Se usa para proporcionar estructura jerárquica a los diagramas de flujo complejos.