

SOBRE LA SOLUCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO DEL PROCESO DE CALCINACIÓN DEL CARBONATO BÁSICO DE NÍQUEL (CBN)

About the solution of the mathematical model of the basic nickel carbonate calcination process

**Ángel Oscar Columbié Navarro
Daniel Guzmán del Río
Rafael Trujillo Codorneaux
José Antonio Fajardo Suárez**

**E-mail: acolumbie@ismm.edu.cu
Instituto Superior Minero Metalúrgico**

RESUMEN

Se presentan resultados acerca de la solución del modelo matemático del proceso de calcinación del carbonato básico de níquel en el horno tubular rotatorio. Se expone el algoritmo, obtenido a partir de la aplicación del método de la rejilla, para la solución de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que conforman el modelo matemático. La clasificación de las ecuaciones en parabólicas e hiperbólicas permite la selección del esquema tripuntual para la solución de las ecuaciones de primer orden y el esquema simétrico de seis puntos para las de segundo orden. La aplicación de los correspondientes operadores en diferencias conduce a la obtención del sistema de ecuaciones en diferencias, vinculadas entre sí mediante la matriz interferencia, la cual lleva implícita la realidad física de intercambio que ocurre en el horno, y refleja la interconexión térmica y la influencia sobre el proceso de algunos factores tales como la temperatura del medio, potencia calorífica del combustible, etc., así como la influencia de la temperatura del carbonato sobre la velocidad de las reacciones en las diferentes zonas tecnológicas.

PALABRAS CLAVE: Modelo Matemático, calcinación, níquel.

ABSTRACT

It's shown the results related with the solution of the mathematical model of the calcination process of the basic nickel carbonate in the rotary kiln. The algorithm, obtained by the application of the grid method, for the solution of the differential equations in partial derivatives, is exposed. The classification of the equations in parabolic and hyperbolic allows the selection of the scheme of three-points for the solution of the first order equations and the symmetrical scheme of six points for the second order one. The application of the corresponding operators in differences leads to the obtaining of the system of equations in differences, linked each other by the interference matrix, which includes the physical reality of the exchange that happens in the kiln and it reflects the thermal interconnection and the influence on the process of some factors such as the surrounding temperature, heating power of the fuel, etc., as well as the influence of the carbonate temperature on the speed of the reactions in the different technological zones.

KEY WORDS: Mathematical Model, calcination, nickel.

INTRODUCCIÓN

Desde hace varios años la modelación matemática ha sido un instrumento imprescindible en la investigación de los procesos, y llega en la actualidad a tratar complejos procesos físicos, químicos y biológicos (García-Rivera y otros, 1998; García-Rivera y Romero, 1998; Davydova-Belitskaya y otros, 1999; Davydova y otros, 2001; Hernández Cáceres, 2003; Valiño y otros, 2003). El auge actual de esta potente herramienta está, entre otras cosas, condicionado por el desarrollo de las técnicas de computación que permiten analizar los procesos con un mayor grado de objetividad física, pues llegan a considerarse mayor cantidad de parámetros que desde el punto de vista físico influyen sobre los procesos, lo cual, sin lugar a duda, conduce a modelos matemáticos cada más complejos, cuya solución requiere de métodos matemáticos complejos y herramientas computacionales potentes, razón por la que muchos autores han preferido en el pasado la simplificación del modelo en detrimento de la mayor objetividad física.

En el caso específico de los procesos en hornos tubulares rotatorios, la literatura recoge varios artículos, desde el punto de vista de la descripción matemática de procesos semejantes al de calcinación del carbonato básico de níquel (Davinson y otros, 1981; Tijonov, 1979), que tratan la modelación desde determinadas aristas, en general aisladas, y no tienen en cuenta la dependencia de los parámetros y variables del horno, tanto del tiempo como de la posición, lo que hipotéticamente puede responder con más acierto a la realidad de los hornos rotatorios, los cuales en su mayoría poseen altas relaciones largo/diámetro.

Presentaciones más acertadas del problema, que tratan la modelación mediante ecuaciones con parámetros distribuidos en un horno de producción de aluminio y en la calcinación de menas oxidadas de níquel, son dadas por Riffaud (1972) y Tijonov (1985), respectivamente. Investigaciones sobre la modelación del proceso de calcinación del carbonato básico de níquel (CBN) llevadas a cabo por los autores de este trabajo (Columbié Navarro y Guzmán del Río, 1992; Columbié Navarro y otros, 2000, y Columbié Navarro, 2001), consideran la coexistencia de las variables espacial y temporal, y por tanto llegan a sistemas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.

El modelo matemático del proceso de calcinación del CBN está formado por 9 ecuaciones diferenciales en derivadas parciales y varias ecuaciones de enlace (Columbié Navarro y otros, 2000; Columbié Navarro, 2001). La concepción del modelo tuvo en

cuenta la técnica de los parámetros distribuidos, lo que significa el análisis de las variables en el dominio del tiempo y a lo largo del horno. En el horno rotatorio los procesos físico-químicos se efectúan acorde con la variación del tiempo de sometimiento y en correspondencia con el avance del carbonato en el interior del mismo. Es precisamente esta cualidad específica la reflejada en el carácter parcial de las ecuaciones diferenciales que lo modelan.

Las ecuaciones diferenciales del proceso de calcinación (Columbié Navarro y otros, 2000) responden a dos tipos: las ecuaciones de primer orden:

$$\rho c S \frac{\delta \theta(x,t)}{\delta t} + c [Q(x,t) \frac{\delta \theta(x,t)}{\partial x} + \theta(x,t) \frac{\delta \theta(x,t)}{\partial x}] + K_3 \theta(x,t) = K_1 \theta_g(x,t) + K_2 \theta(x,t) \quad (1)$$

$$\rho_g c_g S' \frac{\delta \theta_g(x,t)}{\delta t} + c Q_g(x,t) \frac{\delta \theta_g(x,t)}{\delta x} + K_5 \theta_g(x,t) = -K_4 \theta_p(x,t) - K_1 \theta(x,t) - h^i Q_c \quad (2)$$

$$\frac{\partial \omega_{HH}}{\partial t} + v \frac{\partial \omega_{HH}}{\partial x} = K_I \quad (3)$$

$$K_I = A_I e^{-\frac{E_I}{R\theta}} Q_0 \left(1 - \frac{\omega_{HH}}{Q_0}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left(1 - \frac{\omega_{HH}}{Q_0}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right]^{-1} \quad (3a)$$

$$\frac{\partial \omega_{HH}^{NiS}}{\partial t} + v \frac{\partial \omega_{HH}^{NiS}}{\partial x} = K_V \quad (4)$$

$$K_V = A_V e^{-\frac{E_V}{R\theta}} Q_0^{NiS} \left(1 - \frac{\omega_{HH}^{NiS}}{Q_0^{NiS}}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left(1 - \frac{\omega_{HH}^{NiS}}{Q_0^{NiS}}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right]^{-1} \quad (4a)$$

$$\frac{\partial \omega_{a.c}}{\partial t} + v \frac{\partial \omega_{a.c}}{\partial x} = K_{II} \quad (5)$$

$$K_{II} = A_{II} e^{-\frac{E_{II}}{R\theta}} Q_0' \left(1 - \frac{\omega_{a.c}}{Q_0'}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left(1 - \frac{\omega_{a.c}}{Q_0'}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right]^{-1} \quad (5a)$$

$$\frac{\partial Q_{CO_2}}{\partial t} + V \frac{\partial Q_{CO_2}}{\partial x} = K_{III} \quad (6)$$

$$K_{III} = A_{III} e^{-\frac{E_{III}}{R\theta}} Q_0'' \left(1 - \frac{Q_{CO_2}}{Q_0''}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left(1 - \frac{Q_{CO_2}}{Q_0''}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right]^{-1} \quad (6a)$$

$$\frac{\partial Q_{SO_3}}{\partial t} + v \frac{\partial Q_{SO_3}}{\partial x} = K_{IV} \quad (7)$$

$$K_{IV} = A_{IV} e^{-\frac{E_{IV}}{R\theta}} Q_0'' \left(1 - \frac{Q_{SO_3}}{Q_0''}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left(1 - \frac{Q_{SO_3}}{Q_0''}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right]^{-1} \quad (7a)$$

$$\frac{\partial Q_{SO_3}^{NiS}}{\partial t} + v \frac{\partial Q_{SO_3}^{NiS}}{\partial x} = K_{VI} \quad (8)$$

$$K_{VI} = A_{VI} e^{-\frac{E_{VI}}{R\theta}} Q_{01}^{NiS} \left(1 - \frac{Q_{SO_3}^{NiS}}{Q_{01}^{NiS}}\right)^{\frac{4}{3}} \left[\left(1 - \frac{Q_{SO_3}^{NiS}}{Q_{01}^{NiS}}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right]^{-1} \quad (8a)$$

y la ecuación parabólica de segundo orden:

$$c_p M_p \frac{\partial \theta_p}{\partial t} + c_p M_p a \frac{\partial^2 \theta_p}{\partial x^2} + K_7 \theta_p = K_4 \theta_g + K_2 \theta + K_6 \theta_m \quad (9)$$

Éstas son ecuaciones diferenciales en derivadas parciales dependientes del tiempo y de la posición en el horno: $\theta(x,t)$, $\theta_g(x,t)$ y $\theta_p(x,t)$. En estos casos no se trata de la modelación de las variables en un punto, sino de la distribución de ésta a lo largo de todo el horno.

En las ecuaciones anteriores:

ρ - Densidad del sólido, kg/m³;

c - Calor específico del sólido, $\frac{J}{kg.K}$;

S - Sección transversal del sólido, m²;

θ , θ_g , θ_p - Temperatura del sólido, gas y pared, respectivamente, K;

K_I - Coeficiente superficial de transferencia de calor del gas al sólido por unidad de longitud;

K_2 - Coeficiente superficial de transferencia de calor de la pared al sólido por unidad de longitud, $\frac{W}{m.K}$;

Q - Flujo de material, kg/s.

ρ_g - Densidad de los gases, kg/m³;

c_g - Capacidad calorífica de los gases;

Q_g - Flujo de gas, kg/s;

S' - Sección transversal de espacio ocupado por el gas, m²;

K_4 - Coeficiente superficial de transferencia de calor del gas a la pared por unidad de longitud, $\frac{W}{m.K}$;

h^i - Potencia calorífica inferior del combustible, J/kg;

Q_c - Flujo de combustible, kg/s;

K_6 - Coeficiente integral de transmisión de calor a través de la pared del horno por unidad de longitud, $\frac{W}{m.K}$;

a - Coeficiente de temperatura, m²/s;

θ_m - Temperatura del medio, K;

c_p - Calor específico de la pared, $\frac{J}{kg.K}$;

M_p - Masa de la pared, kg/m;

K_I' - Término que tiene en cuenta la cinética de desprendimiento de la humedad hidrosférica;

ω_{HH} - Humedad hidrosférica, kg/s;

V - Velocidad del sólido, m/s;

Q_o - Flujo de sólido inicial, kg/s;

ω_{HH}^{NiS} - Humedad hidrosférica liberada del sulfuro, kg/s;

Q_0^{NiS} - Flujo inicial de sulfuro, kg/s;

ω_{ac} - Agua de constitución liberada, kg/s;

K_{II} - Término que tiene en cuenta la cinética de la liberación del agua de constitución.

Q_0' - Flujo inicial de sólido para la segunda etapa, kg/s;

Q_{CO_2} - Cantidad de CO₂ desprendido durante la descomposición de los carbonatos, kg/s;

K_{III} - Término que toma en consideración la cinética de descomposición de los carbonatos.

Q_0'' - Flujo inicial del sólido para la tercera etapa, kg/s;

Q_{SO_3} - Cantidad de SO₃ producto de la descomposición de los sulfatos, kg/s;

K_{IV} - Término representativo de la cinética de descomposición de los sulfatos;

Q_0''' - Flujo inicial de sólido para la cuarta etapa, kg/s;

$Q_{SO_3}^{NiS}$ - Cantidad de SO₃ desprendido producto de la descomposición de los sulfatos producidos a partir del NiS, kg/s;

Para resolver el sistema (1-9) es necesario disponer de un algoritmo particular adecuado para la solución de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, cuyo establecimiento constituye precisamente el objetivo de este trabajo.

SOLUCIÓN DE LAS ECUACIONES DE PRIMER ORDEN

Para la solución de este problema se aplica el método de las diferencias o de rejillas. Considérese una rejilla sobre el conjunto de valores que puede tomar la variable espacial $0 \leq x \leq L$ y la temporal $0 \leq t \leq T$, donde L es la longitud del horno y T es el tiempo final de muestreo. Sean h y τ los pasos correspondientes a la variable espacial y a la temporal, respectivamente; entonces las funciones de rejilla estarán definidas como (x_i, t_j) , donde $x_i = i \cdot h$; $t_j = j \cdot \tau$; $0 \leq i \leq m$; $0 \leq j \leq N$.

El enlace entre h y m , y así mismo entre τ y N , es obvio:

$$h = L/m$$

$$\tau = T/N$$

Se asume la notación siguiente:

$$\theta^{(i,j)} = \theta(x_i, t_j); 0 \leq i \leq m; 0 \leq j \leq N$$

La matriz definida por los elementos $\theta^{(i,j)}$ es el análogo discreto de la función $\theta(x,t)$.

$$\begin{bmatrix} \theta^{0,0} & \theta^{0,1} & \dots & \theta^{0,n} \\ \theta^{1,0} & \theta^{1,1} & \dots & \theta^{1,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \theta^{m,0} & \theta^{m,1} & \dots & \theta^{m,n} \end{bmatrix}$$

Cada fila de esta matriz (que se obtiene fijando el índice i) brinda el comportamiento de la temperatura del sólido a través del tiempo en un punto dado del horno. Si se fija el índice j entonces se analiza una columna de la matriz y se obtiene el perfil de temperatura del horno en un instante dado, o sea, se obtiene el vector (10) que se denomina en la literatura matemática especializada la capa j -ésima de la función de rejilla:

$$(\theta^{0,j}, \theta^{1,j}, \dots, \theta^{m,j}) \quad (10)$$

De forma análoga, pueden definirse las matrices relacionadas con la distribución de la temperatura del gas y de la pared respectivamente:

$$\begin{bmatrix} \theta_g^{0,0} & \theta_g^{0,1} & \dots & \theta_g^{0,n} \\ \theta_g^{1,0} & \theta_g^{1,1} & \dots & \theta_g^{1,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \theta_g^{m,0} & \theta_g^{m,1} & \dots & \theta_g^{m,n} \end{bmatrix} \quad y \quad \begin{bmatrix} \theta_p^{0,0} & \theta_p^{0,1} & \dots & \theta_p^{0,n} \\ \theta_p^{1,0} & \theta_p^{1,1} & \dots & \theta_p^{1,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \theta_p^{m,0} & \theta_p^{m,1} & \dots & \theta_p^{m,n} \end{bmatrix}$$

El empleo de los métodos de rejillas reduce el problema de la solución de las ecuaciones diferenciales a la solución de un sistema de ecuaciones algebraicas lineales (SEL). Éstas se obtienen al sustituir los operadores diferenciales mediante diferencias. Los SEL resultantes tienen por lo general matrices esparcidas,

es decir, con predominio de elementos nulos, ya que las ecuaciones diferenciales vinculan entre sí los valores de la función buscada en una proximidad infinitamente pequeña del punto dado en término de la rejilla, es por esto que cada ecuación enlaza los valores de la función en sólo algunos nodos contiguos.

Para la solución de las ecuaciones de primer orden se emplea el esquema que se muestra en la Figura 1.

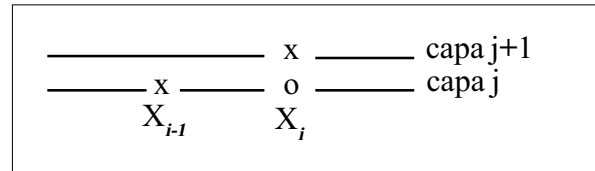


Figura 1. Esquema tripuntual para las ecuaciones de primer orden.

ra 1, en la cual el punto de cálculo está representado por un círculo.

De acuerdo con este esquema, los operadores diferenciales tendrán las aproximaciones siguientes:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t}(x_i, t_j) = \frac{\theta^{i,j+1} - \theta^{i,j}}{\tau}; 0 \leq j \leq n-1 \quad (11)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x}(x_i, t_j) = \frac{\theta^{i,j} - \theta^{i-1,j}}{h}; 0 \leq j \leq m \quad (12)$$

Sustituyendo las ecuaciones (11) y (12) en la ecuación (1) se obtiene:

$$\begin{aligned} & \rho C S \left(\frac{\theta^{i,j+1} - \theta^{i,j}}{\tau} \right) + \\ & + C \left[Q^{i,j} \frac{\theta^{i,j} - \theta^{i-1,j}}{h} + \theta^{i,j} \frac{Q^{i,j} - Q^{i-1,j}}{h} \right] + \\ & + K_3 \theta^{i,j} = f_M^{i,j} \end{aligned} \quad (13)$$

donde:

$$f_M^{i,j} = K_1 \theta_g^{i,j} + K_2 \theta_p^{i,j} \quad (14)$$

Luego de desarrollar en (13) los productos, agrupar términos semejantes y expresar la ecuación con respecto a $\theta^{i,j+1}$, resulta:

$$\theta^{i,j+1} = \theta^{i,j} + \frac{\tau}{\rho C S} \left[f_M^{i,j} - K_3 \theta^{i,j} - C \left(\frac{Q^{i,j} \theta^{i,j} - \theta^{i-1,j}}{h} + \theta^{i,j} \frac{Q^{i,j} - Q^{i-1,j}}{h} \right) \right] \quad (15)$$

La fórmula recurrente (15) es válida para $0 \leq j \leq n-1$; $1 \leq j \leq m$. A partir de ella el valor de $\theta^{i,j+1}$ puede ser obtenido mediante $\theta^{i,j}$ y $\theta^{i-1,j}$. Puesto que las condiciones iniciales $\theta(0,t)$ y $\theta(x,0)$ indispensables para la

solución unívoca de (1) son conocidas, entonces los valores de la función de malla θ^{ij} para $i=0$ y $j=0$ son conocidos y, por tanto, es fácil ver que organizando los cálculos capa a capa se pueden obtener a partir de (15) todos los valores de θ^{ij} si se calculan adecuadamente los valores de f_m^{ij} . Este último depende a través de (14) de otros parámetros del sistema.

De forma análoga pueden ser escritas las fórmulas recurrentes que se deducen de aplicar el esquema en diferencias a las ecuaciones (2-8); en efecto, se obtiene:

$$\theta_g^{i,j+1} = \theta_g^{i,j} + \frac{\tau}{\rho_g c_g S_g} \left[f_g^{i,j} - c_g Q_g^{i,j} \frac{\theta_g^{i,j} - \theta_g^{i-1,j}}{h} \right] \quad (16)$$

$$f_g^{i,j} = K_4 \mathcal{G}_g^{i,j} + K_1 \mathcal{G}^{i,j} + h^i Q_c \quad (16a)$$

$$\omega_{HH}^{i,j+1} = \omega_{HH}^{i,j} + \tau \left[K_I^{i,j} - \frac{v}{h} (\omega_{HH}^{i,j} - \omega_{HH}^{i-1,j}) \right] \quad (17)$$

$$\omega_{HH}^{NiS i,j+1} = \omega_{HH}^{NiS i,j} + \tau \left[K_V^{i,j} - \frac{v}{h} (\omega_{HH}^{NiS i,j} - \omega_{HH}^{NiS i-1,j}) \right] \quad (18)$$

$$[\omega_{ac}]^{i,j+1} = \omega_{ac}^{i,j} + \tau \left[[K_{II}]^{i,j} - \frac{v}{h} ([\omega_{ac}]^{i,j} - \omega_{ac}^{i-1,j}) \right] \quad (19)$$

$$[Q_{CO_2}]^{i,j+1} = Q_{CO_2}^{i,j} + \tau \left[[K_{III}]^{i,j} - \frac{v}{h} ([Q_{CO_2}]^{i,j} - Q_{CO_2}^{i-1,j}) \right] \quad (20)$$

$$[Q_{SO_3}]^{i,j+1} = Q_{SO_3}^{i,j} + \tau \left[[K_{IV}]^{i,j} - \frac{v}{h} ([Q_{SO_3}]^{i,j} - Q_{SO_3}^{i-1,j}) \right] \quad (21)$$

$$[Q_{SO_3}^{NiS}]^{i,j+1} = Q_{SO_3}^{NiS i,j} + \tau \left[[K_{VI}]^{i,j} - \frac{v}{h} ([Q_{SO_3}^{NiS}]^{i,j} - Q_{SO_3}^{NiS i-1,j}) \right] \quad (22)$$

SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN PARABÓLICA

Para la solución de la ecuación parabólica (9) pueden emplearse varios esquemas. Hay que señalar que la elección adecuada del esquema en diferencias es de gran importancia, pues diferencias a primera vista no substanciales pueden conducir a grandes variaciones en sus propiedades. El esquema que se

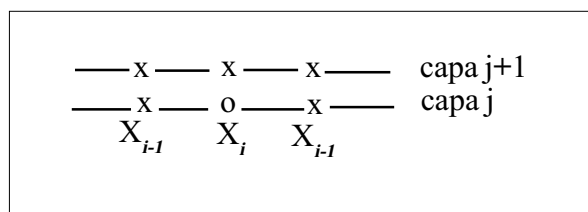


Figura 2. Esquema simétrico de seis puntos.

propone es el simétrico de seis puntos, según la Figura 2.

Para este caso se tendrán las siguientes aproximaciones a los operadores diferenciales:

$$\frac{\partial \theta_p}{\partial t}(x_i, t_j) = \frac{\theta_p^{i,j+1} - \theta_p^{i,j}}{\tau}; \quad 0 \leq j \leq n-1 \quad (23)$$

$$\frac{\partial^2 \theta_p}{\partial x^2}(x_i, t_j) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\theta_p^{i+1,j+1} - 2\theta_p^{i,j+1} + \theta_p^{i-1,j+1}}{h^2} \right\} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\theta_p^{i+1,j} - 2\theta_p^{i,j} + \theta_p^{i-1,j}}{h^2} \right\} \quad (24)$$

Aunque la aproximación (24) a las segundas derivadas resulta algo más complicada que otras posibles, ella garantiza una convergencia y estabilidad superior.

Aplicando (23 y 24) a la ecuación (9) se obtiene:

$$\theta_p^{i,j+1} - \theta_p^{i,j} + \frac{a\tau}{2h^2} (\theta_p^{i+1,j+1} - 2\theta_p^{i,j+1} + \theta_p^{i-1,j+1}) + \frac{a\tau}{2h^2} (\theta_p^{i+1,j} - 2\theta_p^{i,j} + \theta_p^{i-1,j}) + \tau K'_p \theta_p^{i,j} = \tau f_p^{i,j} \quad (25)$$

donde:

$$f_p^{i,j} = K_4 \mathcal{G}_g^{i,j} + K_2 \theta^{i,j} + K_6 \mathcal{G}_m^{i,j} \quad (26)$$

Separando en la expresión (25) los valores que corresponden a las distintas capas y agrupándose, resulta:

$$\frac{a\tau}{2h^2} \theta_p^{i+1,j+1} + \left(1 - \frac{a\tau}{h^2} \right) \theta_p^{i,j+1} + \frac{a\tau}{2h^2} \theta_p^{i-1,j+1} = -\frac{a\tau}{2h^2} (\theta_p^{i+1,j} - 2\theta_p^{i,j} + \theta_p^{i-1,j}) + (1 - \tau K'_p) \theta_p^{i,j} + \frac{\tau}{c_p M_p} f_p^{i,j} \quad (27)$$

Debe notarse que de la ecuación (27) no puede extraerse una expresión explícita para los componentes $\theta_p^{i,j+1}$ a través de $\theta_p^{i,j}$; es decir, no puede obtenerse ninguna fórmula recurrente que permita, una vez calculada la capa j , calcular directamente la capa siguiente:

Sin embargo, la ecuación (27) se cumple para $1 \leq i \leq m-1$, de modo que si se asume que los valores de la capa j se conocen, la ecuación (27) constituye un sistema de $m-1$ ecuaciones lineales para el cálculo de los valores de θ_p en la próxima capa.

Como el total de estos valores es $m+1$, se necesitan dos ecuaciones adicionales que se obtienen precisamente a partir de las condiciones de fronteras $\theta_p(0,t)$ y $\theta_p(l,t)$, que, dado el orden de la ecuación

ción (9), son necesarias para la solución unívoca de la misma.

Sean $\alpha(t)=\theta_p(0,t)$ y $\beta(t)=\theta_p(l,t)$, entonces:

$$\theta_p^{o,j+1} = \alpha(t_{j+1}) \quad y \quad \theta_p^{M,j+1} = \beta t_{j+1} \quad (28)$$

Las expresiones (27) y (28) constituyen un sistema tridiagonal de m+1 ecuaciones con m+1 incógnitas, cuya solución permitiría calcular el valor θ_p^{ij+1} .

INTERCONEXIÓN DE LAS ECUACIONES

Las ecuaciones en diferencias (15-22) y (27), (28) constituyen el sistema de ecuaciones por resolver para obtener el estado del objeto. Estas ecuaciones poseen diferentes características, pues como se apreció con anterioridad en (15), (16) y (17-22), la solución del sistema se reduce al cálculo mediante fórmulas recurrentes, mientras que para la (27) en cada capa se debe resolver un sistema tridiagonal de m+1 ecuaciones con m+1 incógnitas. Sin embargo, ninguna de estas ecuaciones puede ser resuelta por separado, los términos independientes garantizan la interconexión entre ellos y cualitativamente expresan las influencias mutuas, que, desde el punto de vista físico, ocurren en el proceso. Como puede apreciarse, estas interconexiones se definen por las funciones $f_g, f_m, f_p, K_p, K_{II}, K_{III}, K_{IV}, K_V, K_{VI}$. Los valores sobre la malla de estas funciones forman una matriz de "interferencias" que lleva implícita la realidad física de intercambio que ocurre en el horno.

$$\text{int erf}_j = \begin{bmatrix} f_g^{0,j} & \dots & f_g^{i,j} & \dots & f_g^{M,j} \\ f_M^{0,j} & \dots & f_M^{1,j} & \dots & f_M^{M,j} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ [K_{IV}^4]^{0,j} & \dots & K_{IV}^{1,j} & \dots & K_{IV}^{m,j} \end{bmatrix}$$

Cada una de las variaciones ocurridas en las capas anteriores tienen necesariamente que influir en el estado futuro del sistema, en específico las primeras tres filas representan la interconexión térmica y la influencia de algunos factores, como la temperatura del medio, potencia calorífica del combustible, etc. Mientras que las últimas filas expresan la influencia de la temperatura del carbonato sobre la velocidad de las reacciones en las diferentes zonas tecnológicas.

CONCLUSIONES

El algoritmo general de la solución del modelo puede formarse como sigue:

1. La capa $j=0$ se determina para las condiciones iniciales.

2. Una vez conocida la capa $j=k$, entonces con los valores de esa capa se calcula la matriz de interferencia, es decir, los valores de $f_g, f_m, f_p, K_I, K_{II}, K_{III}, K_{IV}, K_V$ y K_{VI} , a partir de las fórmulas (3a, 4a, 5a, 6a, 7a, 8a, 16a y 26). Una vez obtenida la matriz de interferencia, los valores de $\theta, \theta_g, \omega_{HP}, \omega_{ac}, Q_{co2}$ y Q_{so3} en la capa k+1 se calculan a partir de la fórmula recurrente (15), (16) y (17-22), y los valores de θ_p en la capa k+1 se obtienen resolviendo el sistema lineal tridiagonal conformado por las (m-1) ecuaciones (27) definidas para $1 \leq i \leq m-1$ y para las dos ecuaciones adicionales (28). El paso anterior se repite hasta que k+1 sea igual a n.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

COLUMBIÉ NAVARRO, A. (2001): "Modelación matemática del proceso de calcinación del carbonato básico de níquel en el horno tubular rotatorio", Tesis de Doctorado, ISMMM, Departamento de Eléctrica, 100 pp.

COLUMBIÉ NAVARRO, A. Y D. GUZMÁN DEL RÍO (1992): "Sobre la modelación matemática del proceso de calcinación del carbonato básico de níquel en el horno tubular rotatorio", *Minería y Geología*, 9 (1): 27-29

COLUMBIÉ NAVARRO, A., J. RODRÍGUEZ GAMBOA, D. GUZMÁN DEL RÍO Y J.L. SEVILA RODRÍGUEZ (2000): "Modelo matemático del proceso de calcinación del carbonato básico de níquel en el horno tubular rotatorio", *Minería y Geología*, 17 (2): 47-53.

DAVINSON, A. M., L. A. DAMILIN, A. L. RUTBOVOKIY, E. A. BLIEV (1981): "Modelación de las regularidades de la calcinación del coque en un horno rotatorio", *Revista Ts. Metalurgia*, 5: 44-46.

DAVYDOVA-BELTSKAYA V., N. SKIBA YU, S.N. BULGAKOV, A.Z. MARTÍNEZ (1999): "Modelación matemática de los niveles de contaminación en la ciudad de Guadalajara, Jalisco, México. Parte I: Microclima y monitoreo de la contaminación", *Revista Internacional Contaminación Ambiental*, 15(2): 103-111.

DAVYDOVA V.N., N. SKIBA YU, A.Z. MARTÍNEZ, S.N. BULGAKOV (2001): "Modelación matemática de los niveles de contaminación en la ciudad de Guadalajara, Jalisco, México. Parte 2: Experimentos numéricos del problema de transporte de contaminantes", *Revista Internacional Contaminación Ambiental*, 17(2): 67-74

GARCÍA-RIVERA, S., R. ARREDONDO Y M.A. ROMERO (1998): "Modelación, simulación y sintonización de parámetros de un reactor catalítico multitubular industrial", XXVIII Convención Nacional del IMIQ, Oaxaca, Oax.

GARCÍA-RIVERA, S. Y M. A. ROMERO (1998): "Modelación y simulación de un reactor catalítico multitubular industrial utilizado para la oxidación parcial de o-Xileno", Memorias del XXVII Congreso de Investigación y Extensión del Sistema ITESM, vol. 1, pp. 276-285.

HERNÁNDEZ CÁCERES, J.L. (2003): "Modelos matemáticos en biología y medicina: breve recuento histórico; estado actual y perspectivas", *Rev. Informedica Journal*, 11: 5-9.

RIFFAUD, B.J. (1972): "Modelling and simulation of an Alumine Kiln", *Chem. Ing. Proc. Tech.* May, 17 (5): 17-25.

TIJONOV, O.N. (1979): "Cinética de la tostación considerando la composición granulométrica de la fase sólida", *Revista Ts. Metalurgia*, 6: 91-94.

----- (1985): "Sistemas automatizados de dirección: automatización y control de la industria minera", en: *Memorias del Instituto de Minas de San Petersburgo*, t. 106, Leningrado.

VALIÑO, B., A. MARRERO SEVERO, J.A. GÓMEZ FERNÁNDEZ (2003): "Modelación matemática de la producción de glucosa oxidada.