



ESCUELA UNIVERSITARIA DE POSGRADO

OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE CONVERSIÓN DEL DIÓXIDO DE AZUFRE
PROVENIENTE DE LOS PROCESOS DE TOSTACIÓN DE MINERALES
SULFURADOS A TRAVÉS DEL MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN

Línea de investigación:

Ingeniería de software, simulación y desarrollo de TICs

Sistemas de información y optimización

Tesis para optar el grado académico de doctora en Ingeniería Ambiental

Autora:

Reyna Segura, Ana Maria

Asesor:

Carrasco Venegas, Luis

(ORCID: 0000-0002-7832-3366)

Jurado:

Jave Nakayo, Jorge Leonardo

Ramos Vera, Juana Rosa

Coveñas Lalupú, José

Lima - Perú

2021



Referencia:

Reyna, A. (2021). *Optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente de los procesos de tostación de minerales sulfurados a través del modelamiento y simulación* [Tesis de doctorado, Universidad Nacional Federico Villarreal]. Repositorio Institucional UNFV. <http://repositorio.unfv.edu.pe/handle/UNFV/5280>



Reconocimiento - No comercial - Sin obra derivada (CC BY-NC-ND)

El autor sólo permite que se pueda descargar esta obra y compartirla con otras personas, siempre que se reconozca su autoría, pero no se puede generar obras derivadas ni se puede utilizar comercialmente.

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>



Universidad Nacional
Federico Villarreal

VICE RECTORADO DE
INVESTIGACIÓN

ESCUELA UNIVERSITARIA DE POSGRADO

**OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE CONVERSIÓN DEL DIÓXIDO DE AZUFRE
PROVENIENTE DE LOS PROCESOS DE TOSTACIÓN DE MINERALES
SULFURADOS A TRAVÉS DEL MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN**

Líneas de investigación:

**Ingeniería de software, simulación v desarrollo de TICs
Sistemas de información y optimización**

Tesis para optar el grado académico de Doctora en Ingeniería Ambiental

Autora:

Reyna Segura, Ana Maria

Asesor:

Carrasco Venegas, Luis

Jurado:

Jave Nakayo, Jorge Leonardo

Ramos Vera, Juana Rosa

Coveñas Lalupú, José

LIMA – PERU

2021

DEDICATORIA

A mi madre, mi hija Simoneth, mi esposo y a todos los que me apoyaron para concluir esta tesis.

AGRADECIMIENTO

Gracias a Dios por darme vida en esta pandemia del Covid-19, gracias por permitirme vida al lado de mi familia, gracias a todos por creer en mí.

INDICE

Resumen	viii
Abstract.....	ix
I. Introducción.....	1
1.1. Planteamiento del problema	2
1.2. Descripción del problema	4
1.3. Formulación del problema	10
Problema general	10
Problemas específicos.....	10
1.4. Antecedentes	11
1.5. Justificación de la investigación	16
1.6. Limitaciones de la investigación	17
1.7. Objetivos.....	17
Objetivo general	17
Objetivos específicos.....	18
1.8. Hipótesis.....	18
Hipótesis general.....	18
Hipótesis específicas	18
II. Marco teórico	19
2.1. Marco conceptual	19
III. Método	31
3.1. Tipo de investigación	31
3.2. Población y muestra	32
3.3. Operacionalización de variables	32
3.4. Instrumentos	34
3.5. Procedimientos	38
3.6. Análisis de datos	44

IV. Resultados	45
V. Discusión de resultados	76
VI. Conclusiones.....	79
VII. Recomendaciones.....	81
VIII. Referencias	82
IX. Anexos	86

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Emisión de SO ₂ por tonelada de Cu fino.....	5
Tabla 2: Concentración de azufre en zonas mineras 2013.....	8
Tabla 3: Operacionalización de variables	33
Tabla 4: Datos para la simulación	35
Tabla 5: Caracterización de los datos de operación	36
Tabla 6: Ecuaciones de conservación de masa y energía.....	36
Tabla 7: Datos Cinéticos y termodinámica de la reacción	37
Tabla 8: Regresión de mínimos cuadrados	43
Tabla 9: Constantes utilizadas en la simulación	51
Tabla 10: Parámetros para la simulación	51
Tabla 11: Factores y niveles de experimentación.....	54
Tabla 12: Tamaño de paso para la exploración.....	55
Tabla 13: Exploración del óptimo local de los parámetros del proceso de conversión	56
Tabla 14: Factores y niveles para el diseño de Box BehnKen.....	58
Tabla 15: Tabla de diseño de Box BehnKen	58
Tabla 16: Diseño de Box BehnKen desarrollado	59
Tabla 17: Resumen del diseño experimental factorial para el proceso de conversión	61
Tabla 18: Análisis de varianza del diseño factorial para el proceso de conversión .	62
Tabla 19: Análisis de varianza del diseño de superficie de respuesta.....	66
Tabla 20: Condición óptima Presión, Flujo m. y Radio para el proceso de conversión	71

Tabla 21: Intervalo de confianza para la condición óptima del proceso de conversión	
.....	71

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Producción de cobre, ácido sulfúrico y emisiones de SO ₂ 1990-2009	4
Figura 2: Generación del dióxido de azufre.....	9
Figura 3: Emisiones de SO ₂ generado en la producción de ácido sulfúrico	9
Figura 4: Diagrama del proceso de conversión en un reactor catalítico.....	24
Figura 5: Esquema de diseño factorial	29
Figura 6: Diagrama de Pareto de los efectos	30
Figura 7: Procedimiento para el modelamiento de un reactor de lecho fijo para el proceso de conversión	40
Figura 8: Procedimiento para la simulación del reactor de lecho fijo para el proceso de conversión	41
Figura 9: Diseño factorial de experimentos para el proceso de conversión	42
Figura 10: Diseño de superficie de respuesta para el proceso de conversión	43
Figura 11: Flujograma de experimentación	52
Figura 12: Simulación del reactor catalítico de SO ₂ para el proceso de conversión.	52
Figura 13: Perfil de conversión de SO ₂ para el proceso de conversión.....	53
Figura 14: Perfil de temperatura del reactor para el proceso de conversión	53
Figura 15: Exploración del óptimo local de los parámetros del proceso de conversión	57
Figura 16: Gráfico de efectos principales para la conversión máxima del proceso de conversión.....	62
Figura 17: Gráfico de interacciones entre los parámetros para la conversión máxima del proceso de conversión.	63

Figura 18: Perfil de conversión en las condiciones óptimas del proceso de conversión.....	65
Figura 19: Gráfica de Pareto de la superficie de respuesta para el proceso de conversión.....	66
Figura 20: Gráfica de efectos principales del diseño de superficie de respuesta para el proceso de conversión.	67
Figura 21: Gráfica de interacciones del diseño de superficie de respuesta para el proceso de conversión.	67
Figura 22: Gráfica de superficie para el proceso de conversión	69
Figura 23: Gráfica de contorno de los parámetros para el proceso de conversión .	69
Figura 24: Gráfica de optimización de los parámetros del proceso de conversión.	71
Figura 25: Simulación del convertidor de SO ₂ en las condiciones óptimas para el proceso de conversión.	72
Figura 26: Efectos principales de la segunda etapa del proceso de conversión	74
Figura 27: Efectos principales de la tercera etapa del proceso de conversión.....	74
Figura 28: Efectos principales de la cuarta etapa del proceso de conversión.....	74
Figura 29: Efectos principales de la quinta etapa del proceso de conversión.	75

ÍNDICE DE ANEXOS

Anexo A: Matriz de consistencia	86
Anexo B: Validación y confiabilidad de instrumentos	87
Anexo C: Nomenclatura del modelamiento	89
Anexo D: Programación en Matlab.....	91
Anexo E: Resultados de Minitab	95
Anexo F: Resultados de la experimentación virtual	102

Resumen

En esta investigación tuvo como objetivo modelar y simular el proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente del proceso de tostación de minerales sulfurados en el proceso de fabricación de ácido sulfúrico, es de tipo experimental se desarrolló una metodología que permite la optimización de un reactor catalítico que procesa dióxido de azufre (SO_2) proveniente de la tostación de minerales sulfurados basándose en el modelamiento matemático de procesos químicos y la estadística aplicada al diseño de experimentos. El modelamiento matemático del proceso de oxidación de SO_2 que ocurre en un reactor catalítico se realizó mediante los balances de materia y energía, luego con la simulación del modelo se logró obtener los perfiles de temperatura y conversión de SO_2 , los resultados de este estudio revelan que para la presión = 1.98 atm, temperatura de alimentación = 420 °C, flujo másico = 1520 Kg/m²h, radio = 0.0229 m, y temperatura en la pared = 205 °C, la conversión en el reactor alcanza el 93.08% en una etapa de proceso, la simulación llevada a cinco etapas de proceso logra una conversión máxima a la salida del reactor de 99.34%. Se logró determinar regiones de conversión alta de dióxido de azufre para las cinco etapas del proceso de conversión catalítica, usando la metodología de superficie de respuesta, logrando la reducción de la contaminación ambiental.

Palabras clave: Dióxido de azufre, reactor catalítico de lecho fijo, modelamiento, simulación

Abstract

The objective of this research was to model and simulate the conversion process of sulfur dioxide coming from the roasting process of sulfide minerals in the sulfuric acid manufacturing process, it is of experimental type, a methodology was developed that allows the optimization of a catalytic reactor that processes sulfur dioxide (SO₂) coming from the roasting of sulfide minerals based on the mathematical modeling of chemical processes and statistics applied to the design of experiments. The mathematical modeling of the SO₂ oxidation process that occurs in a catalytic reactor was performed by means of the material and energy balances, then with the simulation of the model it was possible to obtain the profiles of temperature and SO₂ conversion, the results of this study reveal that for pressure = 1.98 atm, feed temperature = 420 °C, mass flow = 1520 Kg/m²h, radius = 0.0229 m, and wall temperature = 205 °C, the conversion in the reactor reaches 93.08% in one process stage, the simulation taken to five process stages achieves a maximum conversion at the reactor outlet of 99.34%. It was possible to determine regions of high sulfur dioxide conversion for the five stages of the catalytic conversion process, using the response surface methodology, achieving the reduction of environmental pollution.

Keywords: Sulfur dioxide, fixed bed catalytic reactor, modeling, simulation.

I. Introducción

El origen del dióxido de azufre (SO_2) relacionado a las actividades de la industria minero-metalúrgica, que hasta hoy en día se viene realizando, se da en la fundición y tostación de minerales, los cuales en su composición presentan sulfuros metálicos que luego de ser procesados desprenden gases polvorientos con contenido de azufre en su forma oxidada. Éste compuesto gaseoso es aprovechado como materia prima en la producción de ácido sulfúrico, para ello el gas residual debe ser acondicionado previamente a fin evitar la contaminación del catalizador en el proceso catalítico.

El presente trabajo se propone optimizar el rendimiento de la conversión del SO_2 -emitido por la tostación de minerales- en un reactor catalítico de lecho fijo, a través del modelamiento matemático y la simulación del proceso; se describen los antecedentes de la investigación relacionados al proceso de tostación de minerales sulfurados, proceso de conversión del dióxido de azufre, emisiones de SO_2 a la atmosfera y su impacto al medio ambiente, normativa ambiental nacional para emisiones y la calidad del aire. Así mismo se describe el planteamiento del problema, los objetivos, la justificación, alcances y límites de la investigación, y la definición de variables.

Se pone de manifiesto el tipo de investigación que es aplicada, descriptiva y cuantitativa; la identificación y operacionalización de las variables, se explica la prueba de hipótesis que consiste en análisis de varianza (ANOVA) aplicado al diseño de experimentos; la descripción de la población que vienen a ser las plantas que procesan minerales sulfurados y la delimitación de la muestra, la cual se enfoca en el funcionamiento del reactor catalítico de lecho fijo.

Se presentan las pruebas de contraste de hipótesis derivadas del análisis de varianza en la que se demuestra los factores significativos del proceso, los gráficos factoriales y de superficie de respuesta de la que se obtiene la configuración del punto óptimo de conversión de SO_2 en el reactor catalítico, y el análisis de los resultados obtenidos de la simulación del proceso.

Por último, se expone la discusión de resultados y el beneficio que se obtiene de optimizar la conversión, la cual significa reducir la cantidad de contaminante SO_2 emitido a la atmósfera, se enuncia las conclusiones y recomendaciones finales y se citan las referencias bibliográficas que respaldan esta investigación.

1.1. Planteamiento del problema

El modelamiento y la simulación de sistemas químicos y la optimización es el uso de métodos específicos para determinar la solución más rentable y eficiente a un problema o diseño por un proceso. Esta técnica es una de las principales herramientas cuantitativas en la toma de decisiones industriales. Una amplia variedad de problemas en el diseño, construcción, operación y análisis de plantas químicas (así como muchos otros procesos industriales) pueden ser resueltos por optimización (Edgar-Himmelblau y Lasdon, 2001)

Las empresas del Estado realizan investigación y desarrollo en materias que también incluyen el control ambiental, todas las fundiciones cuentan con gerencias de sustentabilidad ambiental y lineamientos estratégicos de producción a largo plazo, a nivel internacional el mercado exige garantías ambientales, se han firmado acuerdos que atienden a programas como la huella de carbono, la huella del agua, consumo y eficiencia energética, entre otros (Contreras-Fierro et al., 2011).

Siendo la Organización Mundial de la Salud (OMS), un organismo de la Organización de las Naciones Unidas (ONU) especializado en gestionar políticas de prevención, promoción e intervención en salud a nivel mundial y como la autoridad directiva y coordinadora de la acción sanitaria en el sistema de las Naciones Unidas. Es la responsable de desempeñar una función de liderazgo en los asuntos sanitarios mundiales, configurar la agenda de las investigaciones en salud, establecer normas, articular opciones de política basadas en la evidencia, prestar apoyo técnico a los países y vigilar las tendencias sanitarias mundiales, emite Guías a nivel Mundial, con la finalidad de preservar la salud en las comunidades.

Así mismo el Ministerio del Ambiente, considerando la información sobre calidad de aire, los estándares de calidad de aire (ECA) y los niveles de estado de alerta, ha elaborado el Índice de Calidad del Aire (INCA), el cual se divide en 4 categorías: buena, moderada, mala y umbral de cuidado para calificar el estado de la calidad de aire. En lo referido al SO_2 , para concentraciones promedio (ug/m^3) en un intervalo de 24 horas, la calidad de aire se considera "buena" si está entre [0 - 12.5], "moderada" [12.6 - 25], "mala" [25.1 - 125] y si excede a $125 \text{ ug}/\text{m}^3$ se considera umbral de cuidado, en donde toda la población puede verse afectada gravemente en la salud por enfermedades respiratorias crónicas y cardiovasculares (Ministerio del Ambiente, 2014).

Debido a las altas emisiones de SO_2 , por encima de los estándares de calidad ambiental del aire: $20 \text{ ug}/\text{m}^3$, media de 24 horas, a partir de 01.01.2014, (Decreto Supremo N° 003-2008-MINAM) y $500 \text{ ug}/\text{m}^3$, media de 10 minutos, recomendado por la OMS (Organización Mundial de la Salud, 2006). Se propone en el presente proyecto de investigación a través del modelamiento y simulación del proceso de optimización de conversión de SO_2 a SO_3 , determinar las condiciones óptimas de este proceso de

transformación química; que implicaría por un lado la disminución de emisiones de SO_2 y por otro lado el incremento de la producción de ácido sulfúrico.

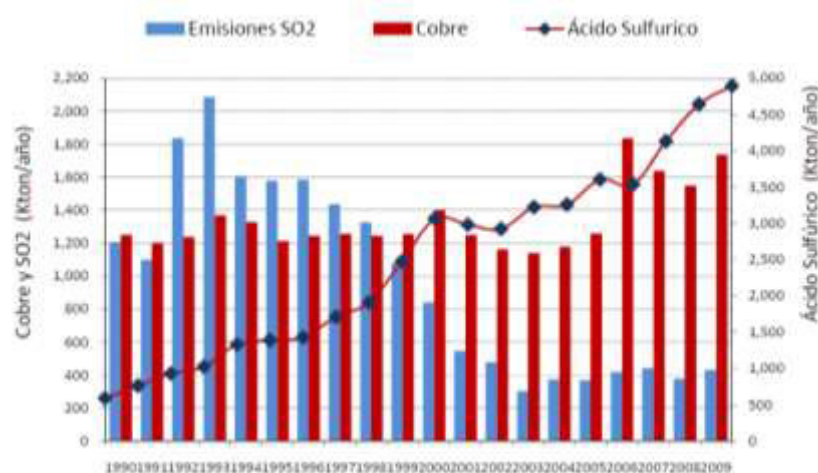
1.2. Descripción del problema

A nivel global

En Chile hay siete fundiciones de cobre (Cu), de las cuales cuatro pertenecen a CODELCO, una a ENAMI y dos son propiedad privada, de las empresas Anglo American y XSTRATA. El nivel de captura de SO_2 de las fundiciones está en el orden de 87 a un 98%. La siguiente figura 1, muestra durante el periodo 1990 al 2009, la producción de cobre, de ácido sulfúrico y las emisiones de SO_2 . Se observa que desde 1999 en adelante se registraron reducciones significativas de SO_2 en un factor de 5 (de 2.000 a 400 k ton/año). Reducciones que se materializan a través de mejores prácticas operacionales y cambios de algunos hornos, debido a exigencias de los Planes de Descontaminación.

Figura 1

Producción de cobre, ácido sulfúrico y emisiones de SO_2 1990-2009



Fuente: Tomado de Plasencia & Cabrera (2009).

Tabla 1*Emisión de SO₂ por tonelada de Cu fino*

Puesta en marcha	Fundición	Empresa	Localización	Concentrado (miles de ton)	Emisiones SO ₂ (Kg/ton Cu fino)
1927	Potrerrillos	CODELCO	Chañaral	680	454
1922	Caletones	CODELCO	Cachapoal	1600	413
1952	Hernán Videla Lira	ENAMI	Copiapó	357	244
1965	Ventanas	CODELCO	Puchuncaví	450	232
1952	Chuquicamata	CODELCO	El Loa	1650	171
1993	Altonorte	XSTRATA	La Negra	950	103
1960	Chagres	ANGLO AMERICAN	San Felipe	610	84

Fuente: Adaptado de Programa para el control de emisiones al aire del sector industrial 2010-2014. Ministerio del Ambiente. Chile.

Se puede concluir que: Las primeras cinco fundiciones del Estado presentan mayor nivel de emisión de SO₂ por tonelada de cobre producido y están localizada en zonas con Planes de Descontaminación; las plantas más antiguas presentan mayor tasa de emisión de SO₂ y no hay evidencia que relacione las emisiones con el nivel de producción o con la cantidad de concentrado procesado por fundición.

Algunos aspectos que se presentan como ventajas en términos de apertura a una posible regulación del sector: las empresas del Estado realizan investigación y desarrollo en materias que también incluyen el control ambiental, todas las fundiciones cuentan con gerencias de sustentabilidad ambiental y lineamientos estratégicos de producción a largo plazo, a nivel internacional el mercado exige garantías ambientales, se han firmado acuerdos que atienden a programas como la huella de carbono, la huella del agua, consumo y eficiencia energética, entre otros (Contreras-Fierro et al., 2011).

A nivel local

Durante el periodo enero 1998 a enero 2009, se analizaron los niveles de dióxido de azufre registrados, en la estación de monitoreo ambiental "Sindicato de Obreros" del Complejo Metalúrgico de La Oroya (CMLO). Esta estación cuenta con el registro histórico más extenso y presenta niveles de concentración de dióxido de azufre intermedios frente a las demás estaciones de la Red de Monitoreo del CMLO, aunque, las concentraciones que registra frecuentemente superan los valores máximos permitidos por las normas ambientales peruanas. Aun suponiendo que debido al reinicio de sus operaciones, el Complejo Metalúrgico de La Oroya produzca (y emita) a sus niveles mínimos históricos (1998-2009), se estima que durante el periodo Enero-Marzo 2010, los niveles de dióxido de azufre en la atmósfera serían todavía superiores a los niveles permitidos (Plasencia-Sánchez y Cabrera-Carranza, 2009)

La evolución de los Estándares de la calidad del aire (ECA) en el Perú, se dieron mediante:

- RM N° 315-96-EM/VMM: Concentración promedio SO₂ 24 horas=572 µg/m³ y anual=172 µg/m³ (Perú, 1996).
- DS N° 074-2001-PCM: Concentración promedio SO₂ 24 horas=365 µg/m³ y anual=80 µg/m³ (Perú, 2001).
- DS N° 003-2008-MINAM: Concentración promedio SO₂ 24 horas=80 µg/m³ y anual=20 µg/m³ (Perú, 2008).

En el PERUNIM 2013 - 31 Convención Minera, se expuso que no se cumple con 20 µg/m³ de concentración SO₂ diaria en las ciudades de Ilo, La Oroya y Arequipa. ¿Qué significaría para el Perú y sus ciudades el tener que cumplir con un ECA diario

=20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$? Se tendría que parar parte de la actividad económica y comercial: varias industrias tendrían que dejar de operar y gran parte del parque automotor tendría que ser paralizado. En el caso de Ilo implicaría que industrias como la fundición y la refinería estarían en riesgo de ser cerradas, lo que significaría que en Southern Perú, dejaría sin trabajo alrededor de 1500 trabajadores de la fundición y refinería y alrededor de 7500 puestos de trabajo conexos (empresas contratistas, proveedores de servicios y materias primas).

En el caso de Ilo, se estaría también cerrando la única fundición y refinería de cobre que queda en el Perú, con lo que se tendría un retroceso tecnológico ya que de ser un país exportador de cátodos de cobre (valor agregado), pasaríamos a ser un país exportador de materias primas (concentrado de cobre). Como referencia: Chile tiene 7 fundiciones de cobre y su ECA diario = 250 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Perú tiene 1 fundición de cobre y un ECA diario de 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Al cerrar la única fundición y refinería en operación, se estaría frenando el desarrollo industrial y tecnológico, se tendría que prohibir la instalación de nuevas industrias, como en el caso de Ilo el futuro complejo petroquímico, las plantas de nitratos, etc.

La Oroya muestra una tendencia creciente con relación al PM_{10} y $\text{PM}_{2,5}$, pero sus valores son bastante bajos, no exceden el ECA diario ni anual. Con respecto al SO_2 , parámetro crítico por la presencia de la Fundición de La Oroya, sus valores disminuyeron significativamente durante la suspensión de actividades y en la actualidad que se han reiniciado, sus valores promedio cumplen con el ECA de 80 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, sin embargo se aprecia una tendencia creciente en las concentraciones, además de un gran número de excedencias (Informe nacional de la calidad del aire 2013-2014, 2014)

En la tabla 2 se muestra el aporte en las emisiones de SO₂ de la industria minero-metalúrgica y el valor del límite máximo permisible.

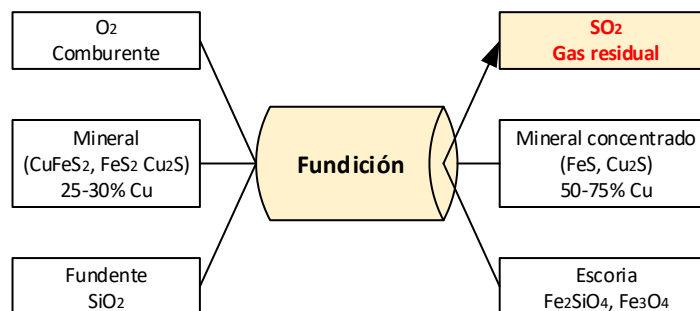
Tabla 2

Concentración de azufre en zonas mineras 2013

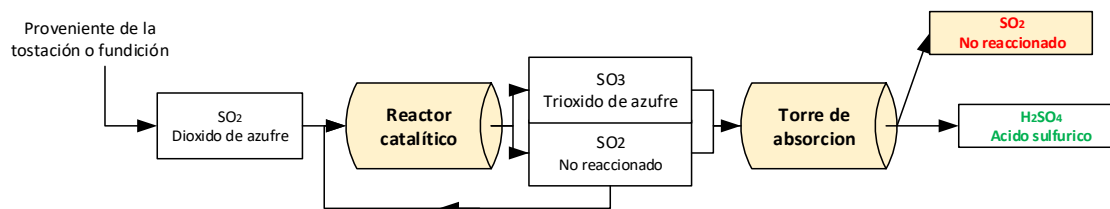
EMPRESA MINERA	PUNTO DE MONITOREO	SO ₂ (µg/ m ³)
BHP Tintaya S.A.	Campamento No.2	-
Compañía Minera Ares S.A.C.	Campamento Obrero	3.47
Compañía Minera Milpo S.A.	Local IPSS	2.88
Compañía Minera Poderosa S.A.	Costado Garita Control	15.2
Compañía Minera Raura S.A.	Superintendencia de Minas	12.46
Compañía Minera San Ignacio de Morococha S.A.	Posta médica San Vicente	2.89
Compañía Minera Santa Luisa S.A.	A 20 m al este de las oficinas	14.4
Compañía Minera Horizonte S.A.	Taller de mantenimiento, campamento poblado	1.5
Doe Run Perú S.R.L.	Hotel Inca	386.76
	Sindicato Obreros	416.24
	Cushurupampa	358.47
Empresa Minera Iscaycruz S.A.	Chancadora primaria	12.64
Lar Carbón S.A.	Garita polvorín	27
Minsur	Estación Calidad de Aire	-
Pan American Silver S.A.C.	A 100 m Barlovento de la cancha relaves	7.09
Shougan Hierro Perú S.A.	Marcota	3.62
Sociedad Refinería de Zinc Cajamarquilla S.A.	Radio observatorio Jicamarca	58.57
	Area administrativo	-
Southern Peru Limited	Fundición Ilo (Ross Siding)	89.59
	Refinería de Ilo (Town Site)	8.02
Nivel Máximo Permissible	µg/ m³	572

Fuente: Ministerio de Energía y Minas - Dirección General de Asuntos Ambientales

Pese a que el nivel máximo permisible establecido por RM N°315-96-EM/VMM para SO₂ de 572 ug/m³ y que las empresas participantes de la actividad minero-metalúrgica no superan el límite establecido; la emisión de dióxido de azufre es una constante durante dicha labor, generándose en una de las etapas básicas de la metalurgia como lo es la tostación y/o fundición de minerales, la figura 2 muestra el esquema de concentración de cobre y la generación de SO₂.

Figura 2**Generación del dióxido de azufre**

En una siguiente etapa, este gas residual es dirigido a un proceso de conversión en un reactor catalítico donde se genera el trióxido de azufre SO₃, compuesto que luego es llevado a una torre de absorción para la formación del ácido sulfúrico; sin embargo, la conversión de SO₂ a SO₃ no se logra por completo ya que se ve limitada por la termodinámica de la reacción química. Tal situación es desfavorable para el medio ambiente, pues el SO₂ que no logró reaccionar se convierte en una fuente de contaminante primario emitido a la atmosfera.

Figura 3**Emisiones de SO₂ generado en la producción de ácido sulfúrico**

Dentro de los subproductos de la empresa Doe Run Perú, el ácido sulfúrico destaca por su volumen y por la complejidad del tema logístico para su colocación en el mercado. Actualmente tiene dos plantas de ácido sulfúrico. Una planta con una

capacidad de producción de 60,000 TM en su planta de la fundición de zinc y otra de 120,000 TM en la planta de la fundición de plomo. En la ciudad de La Oroya cuenta con tres (3) tanques de almacenamiento de 10,000 TM cada uno. El transporte del ácido sulfúrico lo hace por carretera y por ferrocarril. En el puerto del Callao, cuenta con el servicio de la firma DQM para el almacenamiento del ácido sulfúrico. Esta firma actualmente le presta servicios con cuatro (4) tanques de 3,600 TM cada uno.

Según la Memoria Anual 2012 de Souther Copper Corporation, sucursal Perú, menciono que, entre sus principales activos en Ilo, cuenta con dos plantas de ácido sulfúrico con capacidad total de producción de 1.144.000 t/año. Los gases de la fundición son procesados en las plantas de ácido para producir ácido sulfúrico con una concentración 98.5% de H_2SO_4 y lograr una captura de azufre mayor a 92%. El proceso de producción de ácido se dividió en las siguientes etapas: enfriamiento y limpieza de gases de fundición, secado de los gases, conversión del SO_2 a SO_3 y absorción del SO_3 . El ácido sulfúrico es almacenado en tanques para su posterior transporte a los diversos consumidores.

1.3. Formulación del problema

Problema general

¿Cómo debe ser el modelo y la simulación para optimizar el proceso la conversión del dióxido de azufre proveniente del proceso de tostación de minerales sulfurados?

Problemas específicos

- a. ¿Cuáles son las condiciones de operación para controlar las emisiones de dióxido de azufre durante el proceso de conversión?

- b. ¿Cuál es la metodología más apropiada para optimizar el proceso de conversión de dióxido de azufre para evitar la contaminación ambiental?
- c. ¿Cuál es la metodología más apropiada para la optimización de la conversión del dióxido de azufre a fin evitar la contaminación ambiental?

1.4. Antecedentes

Los antecedentes mencionados a continuación guardan relación al tema de investigación referido a la simulación como una alternativa de solución para la optimización de procesos químicos que, a su vez de ser provechosos para el desarrollo industrial y la economía de un país, también involucran aspectos ambientales como las emisiones residuales propias del proceso, los cuales deben ser optimizados a fin de reducir la contribución de contaminantes a la atmósfera.

Antecedentes internacionales

Asensio (2017), en su investigación, trabajó con una metodología de modelamiento para un reactor de lecho fijo utilizando la técnica de fluido dinámica computacional (CFD), en la cual se considera la relación de aspecto (diámetro de la partícula de catalizador y el diámetro del tubo reactor) para el diseño. Utilizando un software de cálculo fue posible la experimentación virtual del funcionamiento del reactor, con la cual se determinó que el modelo propuesto “2R2D” heterogéneo de dos zonas presenta ventajas al considerar la geometría y la relación de aspecto favoreciendo la predicción del comportamiento de los reactores de lecho frente a lo obtenido con el modelo pseudohomogeneo (S2D). Además, con el modelo heterogéneo fue posible la obtención correlaciones que permiten la estimación de parámetros térmicos y fluidodinámicos característicos de un proceso químico.

Parra (2017), en su trabajo de investigación: realizó el estudio para maximizar la eficiencia de conversión del reactor de la planta de ácido sulfúrico n°1 de la Fundición de Caletones, tuvo como objetivo maximizar la conversión de anhídrido sulfuroso (SO_2). En tal sentido, la mejora del proceso de conversión provee de beneficios a la economía y al ambiente al reducir las emisiones de SO_2 generadas por la actividad pirometalúrgica. Realizó éste estudio a través del modelamiento y la simulación del proceso de conversión de SO_2 –específicamente del reactor– que se realizó en base al modelo de Matthew Josep King, clave para el desarrollo de los balances de materia y energía de los cuatro lechos del reactor catalítico. Así mismo utilizó el método estadístico llamado “bosques aleatorios” para encontrar las temperaturas óptimas de operación del reactor. Parra con éste trabajo logró determinar la distribución óptima de temperaturas de entrada al reactor que fueron: 415, 430, 430 y 430°C para los lechos del 1 al 4 respectivamente, obteniendo un aumento en la conversión del SO_2 desde 96% a 97.6%, lo que supone una reducción considerable en las emisiones de este contaminante.

Pernett-Bolaño et al. (2016), estudiaron el modelamiento del reactor catalítico de dióxido de azufre (SO_2) de una planta que utiliza el método de doble contacto para la producción de ácido sulfúrico con el objetivo de estudiar el proceso mediante la simulación. La conversión del dióxido de azufre es catalizada con pentóxido de vanadio (V_2O_5) con forma de anillos Raschig, la reacción es exotérmica y se lleva a cabo en un reactor de lecho empacado de cuatro etapas con enfriamiento; sin embargo, no se logra la conversión completa del reactante y se emiten pequeñas cantidades de SO_2 al ambiente, lo que indica que es necesario optimizar el proceso de conversión, lo cual significa la reducción de las emisiones de dióxido de azufre a la atmosfera. El modelado se realizó tomando en cuenta la geometría de un reactor

tubular de lecho empacado, la ley de velocidad de la reacción catalítica, los balances de moles, energía y cantidad de movimiento. Aplicando métodos numéricos, las ecuaciones del modelamiento fueron programadas para ser resueltas con Matlab® generándose los perfiles de conversión y temperatura del proceso. Esto permitió predecir el comportamiento del reactor, donde se comprobó: que la composición de entrada de SO₂ influye significativamente en la operación del reactor produciendo desviaciones en la temperatura de salida y que al ajustar la temperatura de entrada al reactor se obtiene una mayor conversión de SO₂. Los resultados de la simulación pueden ser aplicados para lograr el control de las emisiones de SO₂ y mantenerlas dentro de lo establecido por la normativa ambiental vigente. La simulación obtuvo un error de $0 \pm 4\%$ con respecto a los datos reales de planta.

Molina (2013), realizó un estudio sobre la simulación numérica de un problema de contaminación atmosférica, donde implementó la ley de conservación de la masa en la parte advectiva del modelo de transporte químico CHIMERE, “que simula el comportamiento de los contaminantes sometidos a diferentes procesos como la advección, difusión, reacciones químicas, deposición seca y húmeda; diseñado para la predicción de contaminantes primarios y secundarios en la atmósfera con escenario de emisiones controladas”, y se compararon los resultados obtenidos frente a otros esquemas, logrando un modelo de mejorada exactitud para las simulaciones de problemas ambientales. Se desarrolló un nuevo método de solución para los términos advectivo y difusivo del modelo, los cuales utilizan la técnica de volúmenes finitos y la técnica de diferencias finitas de alto orden respectivamente, demostrándose la estabilidad de la solución para intervalos de tiempo considerablemente extensos, lo que resulta ventajoso al momento de realizar predicciones de contaminación atmosférica. Del contraste de los resultados obtenidos de la simulación del modelo

CHIMERE frente a los datos reales de concentración de contaminantes dados por las redes de monitoreo ambiental en la Península Ibérica, se pudo concluir que el modelo cumplió con los criterios estadísticos proporcionados por la US Environmental Protection Agency para ser considerado un modelo preciso.

Arteaga-Weil y Zegada-Escóbar (2008), desarrollaron dos modelos matemáticos para simular el funcionamiento del convertidor de SO_2 de una planta de sulfonación, donde se resalta el manejo de la cinética de reacción del dióxido de azufre SO_2 a trióxido de azufre (SO_3); el modelamiento fue realizado a partir de los balances de materia y energía en el convertidor catalítico donde se produce la reacción química, caracterizado por las condiciones de operación de la planta, generando así los modelos bidimensional y unidimensional que pueden simularse variando la cinética de reacción pseudohomogenea y heterogénea. La simulación con el modelo bidimensional pseudohomogeneo dio como resultado perfiles axiales de conversión de SO_2 y temperatura del proceso, con gradientes relativamente bajas en la pared del reactor. Del mismo modo, con el modelo unidimensional pseudohomogeneo se reproduce satisfactoriamente la conversión final del SO_2 , haciendo que éste sea más conveniente para su aplicación. Según la cinética heterogénea, que considera mayor detalle en cuanto a la velocidad de transferencia de masa y los efectos de difusión en las partículas, el modelo adecuado debe considerar los efectos mencionados ya que se presentan gradientes de composición y temperatura en el interior y la superficie de las partículas catalíticas así como en la fase fluida; sin embargo la simulación de este modelo resulta ser muy costosa en cálculo y tiempo.

Ramírez-Serrano (2007), estudió el modelamiento de reactores catalíticos que incluyen en su configuración membranas y tubos de intercambio de calor. La

configuración del reactor en cuestión es similar a la de un intercambiador de calor, donde el catalizador se encuentra empaquetado por el lado de la coraza y donde algunos de los tubos son para transferencia de calor mientras que otros son para transferencia de masa (membranas). El planteamiento considera que la velocidad superficial puede variar como consecuencia del cambio de presión, temperatura y número de moles en la dirección axial. Este trabajo fue desarrollado con la intención de explorar y optimizar diferentes configuraciones de reactores con membranas e intercambio de calor para determinar su factibilidad técnica con diferentes sistemas de reacción; sin embargo, los alcances de este trabajo se delimitaron al desarrollo del simulador y a su aplicación en un caso de estudio para una configuración que cuenta con todos los elementos de interés.

García-Ochoa et al. (1991), desarrollaron un programa de cálculo para realizar la simulación de un reactor de lecho fijo por el modelo pseudo homogéneo bidimensional, es decir, considerando gradientes de propiedades- composición y temperatura- en ambas direcciones, axial y radial. Se aborda el caso de una sola reacción, utilizando la técnica de colocación ortogonal combinada con un método de resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales. Para este último se comparan diferentes métodos de Runge-Kutta con distintos números de puntos de colocación, para reacciones endotérmicas y exotérmicas des hidrogenación de ciclohexanol y oxidación de dióxido de azufre.

Antecedentes nacionales

Carrasco (2012), realizó una investigación sobre diversos procesos industriales que utilizan minerales como materia prima para su procesamiento y posterior refinación, contienen azufre en forma de sulfuros. En la industria del acero, por ejemplo, se utiliza carbón como fuente de energía y como reductor; este también contiene azufre. Cuando estos materiales combustionan, el azufre contenido en sus diversas formas se oxida a dióxido de azufre y sale del proceso junto con los otros gases producto de la combustión. El dióxido de azufre en el ambiente, por fotólisis se oxida produciendo trióxido de azufre, que en presencia de agua produce ácido sulfúrico, contribuyendo con la formación de la lluvia ácida. Se presenta la simulación del tratamiento de estos gases residuales en un reactor tubular catalítico de lecho fijo usando como catalizador pentóxido de vanadio. El objetivo es oxidar el dióxido de azufre a trióxido de azufre con aire, tratando de desplazar las condiciones de equilibrio hacia la formación de trióxido de azufre. Se calcula la longitud del reactor para una conversión dada. Además, se obtienen los perfiles de temperatura y conversión en el reactor y se hace un análisis de las condiciones más apropiadas para una alta conversión del dióxido de azufre.

1.5. Justificación de la investigación

El presente estudio se enfoca en el modelamiento y simulación para la optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre, un gas remanente de la tostación de minerales y contaminante de la atmósfera, a trióxido de azufre, un gas aprovechable para la fabricación de ácido sulfúrico y a su vez reduce las emisiones de SO_2 a la atmósfera y en contribuir al desarrollo de una metodología que indique las condiciones más apropiadas de operación para lograr una conversión alta y como consecuencia de ello evitar la contaminación del ambiente por dióxido de azufre

debido a que este gas es altamente tóxico cuando se vierte al ambiente sin un tratamiento adecuado. El dióxido de azufre producido -en muchos casos- en gran volumen mediante el proceso de tostación de minerales, puede ser aprovechado de una manera eficiente para su recuperación como ácido sulfúrico, lo cual resulta beneficioso tanto tecnológica y ecológicamente, y se evita la contaminación del ambiente por este gas, a fin de tomar las medidas preventivas y/o correctivas que mejoren la calidad de vida de los seres vivos, contribuyendo en la mejora de los procesos químicos, que permitan lograr el tratamiento efectivo de los desechos producidos contribuyendo así con la mejora del medioambiente.

1.6. Limitaciones de la investigación

Una de las limitaciones de la investigación está relacionada a la obtención de los datos cinéticos de la oxidación catalítica de dióxido de azufre para la simulación del proceso de conversión, en la literatura nacional no se encuentra dichos datos experimentales, se utilizaron datos cinéticos provenientes de autores extranjeros; y a los datos específicos de operación de los convertidores de SO₂ de las refinerías nacionales por ser información confidencial de las empresas del sector minero-metalúrgico nacional, se recurrió a la bibliografía.

1.7. Objetivos

Objetivo general

Optimizar el proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente del proceso de tostación de minerales sulfurados a través del modelamiento y simulación.

Objetivos específicos

- a. Determinar las condiciones de operación para controlar las emisiones de dióxido de azufre durante el proceso de conversión para la producción del ácido sulfúrico.
- b. Determinar la metodología más apropiada para simular el proceso de conversión del dióxido de azufre durante el proceso de conversión.
- c. Determinar la metodología más apropiada para la optimización de la conversión del dióxido de azufre a fin evitar la contaminación ambiental.

1.8. Hipótesis

Hipótesis general

El modelamiento matemático y la simulación del reactor de oxidación catalítica permitirán optimizar el rendimiento químico del proceso de conversión de dióxido de azufre, proveniente de la tostación de minerales sulfurados

Hipótesis específicas

- a. Las condiciones esenciales de operación: presión, temperatura de alimentación, flujo de reactantes, radio y temperatura en la pared del reactor permitirán la optimización del proceso de conversión de dióxido de azufre.
- b. El diseño factorial completo es la metodología que permitirá mediante la simulación obtener los valores máximos de conversión.
- c. El método de superficie de respuesta es la metodología más apropiada que permitirá a partir del modelo matemático la optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre.

II. Marco teórico

2.1. Marco conceptual

Modelamiento de procesos químicos

El modelo matemático de un proceso consiste en una serie de relaciones que se establecen para cada equipo que forma parte del sistema podemos establecer que en general para cada equipo un modelo consiste de una combinación de las siguientes expresiones:

- Balance de cantidad de movimiento
- Balance de materia
- Balance de energía
- Ecuaciones de diseño
- Relaciones termodinámicas y ecuaciones cinéticas
- Especificación de algunas variables o restricciones particulares

El primer tipo de balances no es de importancia para muchos equipos de proceso tales como sistemas de reacción y de separación. Por su parte las ecuaciones básicas de balance de materia y energía se establecen en estado estacionario para fines de diseño o en estado no estacionario para fines de estudios dinámicos y de control (Jiménez Gutiérrez, 2003).

El modelo resultante consiste típicamente de un sistema de ecuaciones acopladas y no lineales, cuya solución puede ser directa para un equipo simple, o bastante complicada para un proceso completo; este último hecho ha dado origen al desarrollo de simuladores de proceso por computadora, los cuales esencialmente se encargan de resolver las ecuaciones que modelan el sistema en estado estable mediante alguna técnica numérica, acoplada en ocasiones a

una estrategia de descomposición del sistema original de ecuaciones.(Jiménez Gutiérrez, 2003).

En muchas ocasiones, la solución numérica del modelo del proceso requiere de procedimientos iterativos para su solución; en estos casos es importante seleccionar adecuadamente las variables que deben suponerse(variables de diseño) con el fin de hacer más eficiente la solución del problema (Jiménez Gutiérrez, 2003, p.60).

Simulación de procesos químicos

La simulación de procesos puede ser definida como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. La solución de estos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento de dicho proceso. El número de variables que aparecen en la descripción matemática de una planta de proceso química puede ser tan grande como 100 000, y el número de ecuaciones no lineales que deben resolverse pueden ser del orden de miles, por lo tanto la única forma viable de resolver el problema por medio de una computadora.(Martínez et al., 2003)

En 1980 empezaron a surgir compañías elaboradoras de software, que desarrollaban paquetes de simulación para su comercialización, pero tenían la desventaja de que la entrada y salida de la información eran muy rígidas y se presentaban en forma de listados de difícil interpretación. En la actualidad, la simulación, potenciada por los ordenadores de última generación, se ha convertido en una herramienta imprescindible para conocer a fondo el

funcionamiento de los procesos industriales sin un coste de materia prima o generación de residuos. (Martínez et al., 2003, p. 35)

Optimización de procesos químicos

La optimización es el uso de métodos específicos para determinar la solución más rentable y eficiente a un problema o diseño por un proceso. Esta técnica es una de las principales herramientas cuantitativas en la toma de decisiones industriales. Una amplia variedad de problemas en el diseño, construcción, operación y análisis de plantas químicas (así como muchos otros procesos industriales) se pueden resolver por optimización. Examinaremos las características básicas de los problemas de optimización y sus técnicas de solución y describiremos algunos beneficios y aplicaciones típicos en las industrias química y petrolera (Edgar et al., 2001).

Optimización

Es el uso de métodos específicos para determinar la solución más rentable y eficiente para un problema o diseño de un proceso. Esta técnica es una de las principales herramientas cuantitativas en la toma de decisiones industriales. Una gran variedad de problemas en el diseño, construcción, operación y análisis de plantas químicas (así como muchos otros procesos industriales) se pueden resolver por optimización (Edgar et al., 2001).

Un enfoque bien conocido del principio de optimización se escribió por primera vez hace siglos en las paredes de una antigua casa de baños romana en relación con la elección entre dos aspirantes al emperador de Roma. Se leía “De dubus malis, minus est semper aligendum”, entre dos males, siempre elige el menor.

La optimización impregna los campos de la ciencia, de la ingeniería, y del negocio. En la física, se han enunciado muchos principios óptimos diferentes, que describen la naturaleza y la naturaleza de las cosas, en el campo de la estadística trata varios principios llamados "máxima verosimilitud", "pérdida mínima" y "mínimos cuadrados", y en los negocios utiliza el "beneficio máximo", el "costo mínimo", el "uso mínimo de recursos", "esfuerzo mínimo", en sus esfuerzos por aumentar los beneficios. Un problema de ingeniería típico puede plantearse de la siguiente manera: Un proceso puede ser representado por algunas ecuaciones o quizás únicamente por datos experimentales. Un criterio de desempeño único en mente como el costo mínimo. La meta de optimización es encontrar los valores de las variables en el proceso que producen el mejor valor del criterio de desempeño. Una compensación usualmente existe entre el capital y el funcionamiento, los factores descritos del proceso o modelo y el criterio de desempeño, constituyen el "problema" de la optimización (Edgar et al., 2001).

Los problemas típicos en el diseño del proceso de ingeniería química o en el funcionamiento de la planta tienen muchas soluciones (posiblemente infinitas). La optimización se ocupa de seleccionar el mejor entre el sistema entero por métodos cuantitativos eficientes. Los ordenadores y el software asociado hacen que los cálculos necesarios sean factibles y rentables. Sin embargo, para obtener información útil utilizando computadoras se requiere (1) un análisis crítico del proceso o diseño, (2) una idea sobre cuáles son los objetivos de desempeño apropiados (es decir, qué se debe lograr) y (3) el uso de experiencia pasada, a veces llamada juicio de ingeniería.

En las operaciones de la planta, los beneficios se derivan de la mejora del rendimiento de la planta, como el mejoramiento de los rendimientos de

productos valiosos (o menores rendimientos de contaminantes), la reducción del consumo de energía, mayores tasas de procesamiento y tiempos más largos entre paradas. (Edgar et al., 2001)

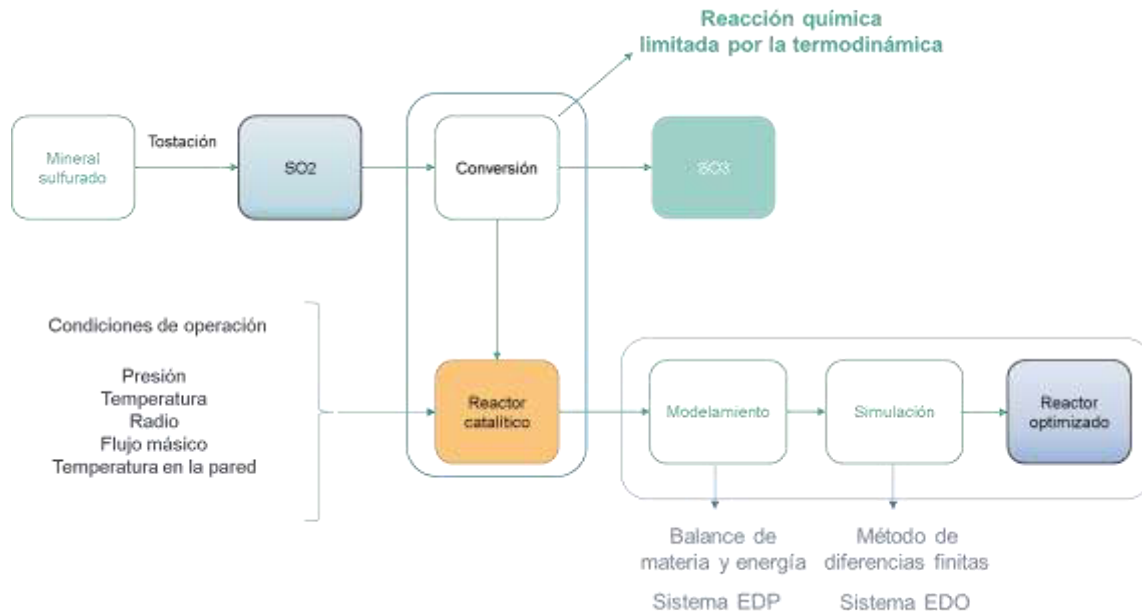
La optimización también puede conducir a costos de mantenimiento reducidos, menos desgaste del equipo y una mejor utilización de recursos. Además, los beneficios intangibles surgen de las interacciones entre los operadores de la planta, los ingenieros y la gestión. Es extremadamente útil identificar sistemáticamente el objetivo, las restricciones y los grados de libertad en un proceso o una planta, lo que da lugar a beneficios tales como una mejor calidad de diseño, una resolución de problemas más rápida y confiable y una toma de decisiones más rápida.

Método de contacto para la producción de ácido sulfúrico

El método de contacto se basa en la reacción del SO_2 sobre el catalizador sólido que puede ser platino (Pt) o pentóxido de vanadio (V_2O_5) para dar lugar a la formación de SO_3 . Esta reacción que ocurre en la fase gas y es de carácter exotérmico, donde la conversión más alta que se puede obtener es la conversión en el equilibrio (Fogler y Gürmen, 2008)

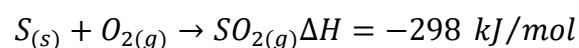
Figura 4

Diagrama del proceso de conversión en un reactor catalítico

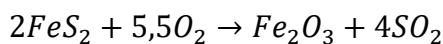


Etapas del proceso

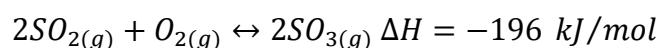
En una primera etapa se quema el azufre en presencia de oxígeno, el cual requiere un exceso de aire seco para asegurar la disponibilidad de oxígeno en la reacción, donde se generan los gases de combustión que contienen SO₂ se a una temperatura de 410 a 440^aC, con un porcentaje en de SO₂ en la mezcla gaseosa se encuentra alrededor de 6 al 10% en volumen. En esta etapa se desprenden partículas de mineral que se mezclan con el producto deseado siendo necesaria la limpieza de la corriente gaseosa para proceder con la siguiente etapa (King, Davenport, & Moats, 2013)



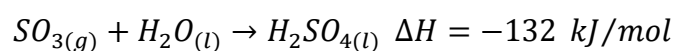
La tostación de minerales sulfurados, donde el principal objetivo es mineral sulfurado a mineral oxidado se convierte en una fuente de generación de SO₂, ya que ese gas se desprende en dicho proceso, donde ocupa el lugar de un subproducto o residuo, el cual es aprovechado en la siguiente etapa.



En una segunda etapa el SO₂ reacciona con el oxígeno de la corriente gaseosa en presencia del catalizador pentóxido de vanadio V₂O₅, esta es una reacción reversible donde se produce SO₃. El catalizador actúa en el sentido de aumentar la velocidad de la reacción, mas no genera aumentos en el grado de conversión del SO₂. Al ser la reacción de naturaleza exotérmica, si se disminuye la temperatura de los reactantes, se logra un desplazamiento del equilibrio hacia la formación de producto, lo que favorece en el rendimiento químico del proceso. Así mismo, una disminución de la temperatura en los reactantes conlleva a que la velocidad de reacción se ralentice, lo cual perjudica a la economía del proceso. Las condiciones para operar la reacción catalítica se pueden establecer entre los 400 a 450 °C y las presiones entre 1 a 2 atm. Cuando la reacción llega al equilibrio químico es desplazada hacia atrás (disminución de la temperatura de los reactantes) para volver a iniciar y seguir aumentando el rendimiento del proceso, a esta acción se le conoce como etapas de equilibrio (King et al., 2013).

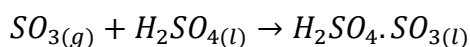


En una tercera etapa se puede hacer reaccionar el trióxido de azufre (SO₃) con el agua para formar el ácido sulfúrico, siendo esta reacción muy delicada por el carácter exotérmico, controlarlo es muy complicado debido a la evaporación del agua y la formación de neblina acida.

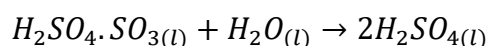


Frente a esto se aprovecha la solubilidad del SO₃, y se procede a disolver el gas SO₃ en una solución de ácido sulfúrico, aprovechando la afinidad que tiene

este gas al ácido, formándose una solución saturada de ácido sulfúrico conocida como óleum.



Este producto, el óleum, puede ser diluido para formarse nuevamente el ácido sulfúrico en mayor cantidad.



Fuentes del SO₂

Las fuentes de SO₂ pueden ser de tres tipos:

- La combustión de azufre elemental
- Tostación de minerales sulfurados
- Regeneración de ácido sulfúrico contaminado.

La producción de ácido sulfúrico a partir de la combustión de azufre elemental aprovecha mejor la energía del sistema pues el gas sale “limpio” y no tiene que atravesar por etapas rigurosas de limpieza del gas que reducen la energía con la que sale. Pese ello debe pasar necesariamente por un filtro de partículas finas para evitar la contaminación del catalizador (King et al., 2013).

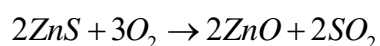
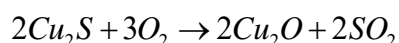
En el caso de la tostación, el gas sale en una mezcla polvorienta que contiene dióxido de azufre, el cual debe atravesar todo un circuito de limpieza que va reduciendo en cada etapa la energía que poseía; sin embargo, la limpieza de esta mezcla no siempre se logra a totalidad, quedan remanentes de arsénico y antimonio por lo general que tienen el potencial de envenenar al catalizador en la etapa de reacción. Por ello, se hace pasar la mezcla gaseosa por un lavado con ácido sulfúrico diluido al 5%, posteriormente se y luego pasa por la torre de

secado y se regula la temperatura antes de entrar a la etapa catalítica (King et al., 2013)

En el caso de ácido sulfúrico regenerado éste lleva a calentamiento para desprender todo el SO₂ de la fase líquida.

Tostación de minerales

El tostado o tostación es un proceso metalúrgico que implica reacciones sólido-gas a temperaturas elevadas con el fin de purificar el componente metálico. Consiste en reacciones térmicas de sólido-gas, que pueden incluir oxidación, reducción, cloración, sulfatación, y pirohidrólisis. En la tostación, el concentrado de mineral se trata con aire muy caliente. Este proceso se aplica generalmente a los minerales metálicos con azufre, como los sulfuros metálicos. Durante la tostación, el sulfuro metálico se convierte en un óxido, y el azufre se libera como dióxido de azufre en estado gaseoso. Para el mineral de Cu₂S (calcosina) y ZnS (esfalerita), las reacciones químicas para el tostado son:



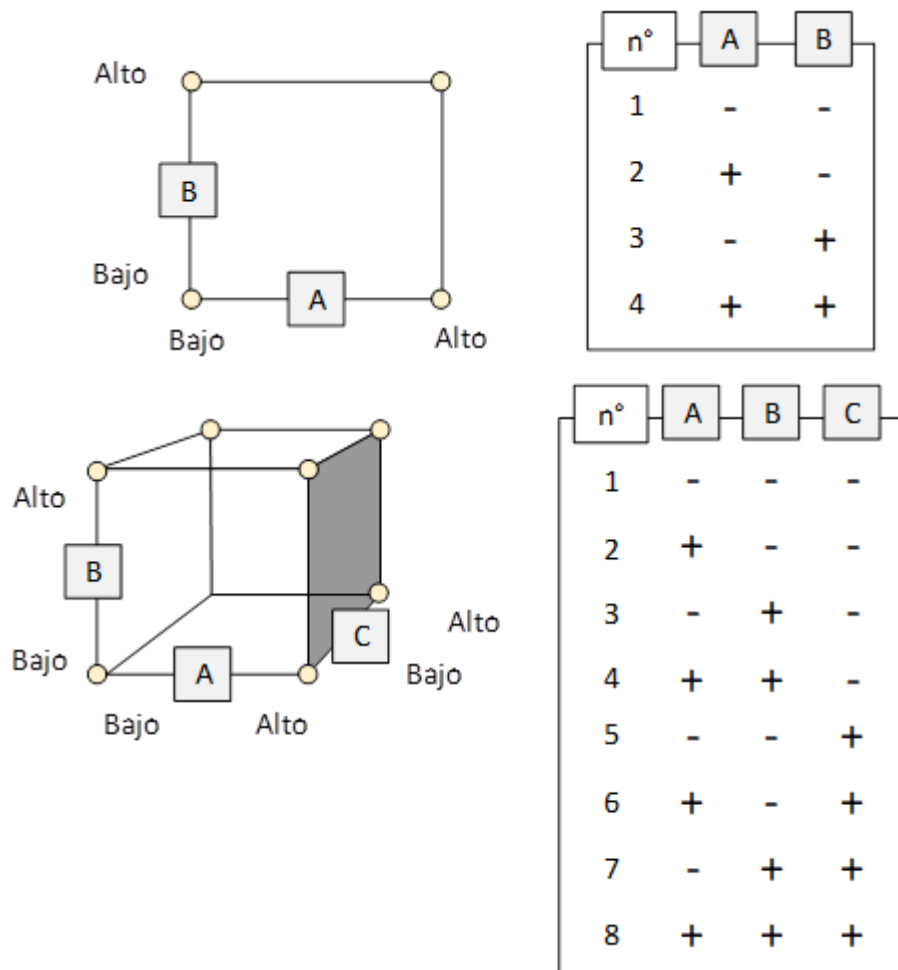
El producto gaseoso de la tostación de los sulfuros, el dióxido de azufre (SO₂) se utiliza a menudo para producir ácido sulfúrico. Muchos minerales de azufre contienen otros componentes tales como el arsénico que se liberan al medio ambiente. Esta tecnología resulta útil, pero a su vez se convierte en fuente de contaminación atmosférica. (Greenwood & Earnshaw, 1997)

Diseño de experimentos

Los modelos de diseño de experimentos son modelos estadísticos clásicos cuyo objetivo es averiguar si unos determinados factores influyen en una variable de interés y, si existe influencia de algún factor, cuantificar dicha influencia.

Mediante el diseño factorial se estudia el efecto varios factores de interés sobre una o más respuestas, donde uno de los objetivos específicos de éste diseño es encontrar la combinación de factores que favorece a la respuesta (Gutiérrez Pullido & de la Vara Salazar, 2008).

En la figura 4 se muestra un esquema típico de un diseño factorial, donde A y B representan los factores y (-) , (+) son los niveles bajo y alto de cada factor. El número de tratamientos para un diseño factorial está dado por n^k , donde k representa el número de factores y n el número de niveles que adopta cada factor. Por ejemplo, para un diseño de tres factores y dos niveles se tienen $2^3 = 8$ tratamientos.

Figura 5*Esquema de diseño factorial*

Estimación de los efectos de los factores:

$$Efecto_x = \frac{\sum Respuesta_{x+} - \sum Respuesta_{x-}}{2^{k-1}}$$

Determinación del error pseudo estándar:

- Se ordena de menor a mayor los efectos.
- Se determina la mediana.
- Se estima el “efecto del error estándar”: ESE = 1.5 x mediana {efectos}
- Se estima el “estimado preliminar”: PE = 2.5 x ESE

- Se identifica los efectos que son menores al PE y se determina la mediana de los efectos identificados (efecto*).
- Se estima el “error pseudo estándar”: $PSE = 1.5 \times \text{mediana \{efectos*\}}$

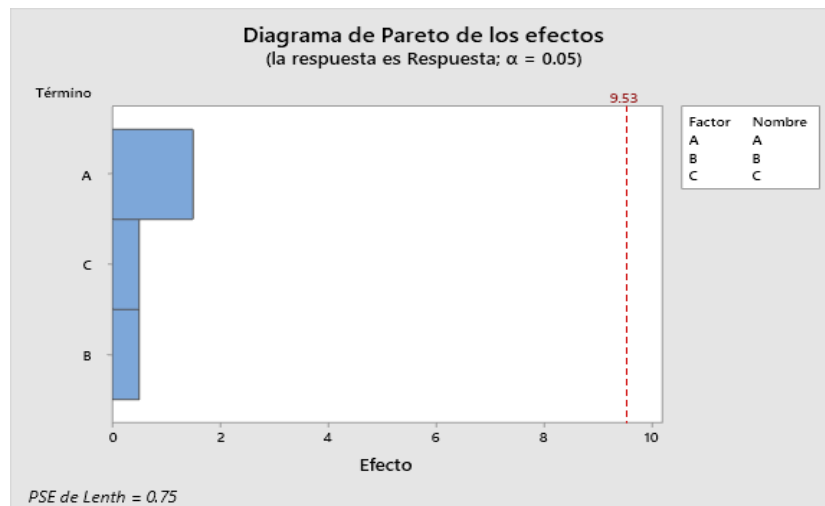
Determinación del valor crítico del efecto factorial de Lenth

- Se determina el grado de libertad como: $GL = \text{nro. de efectos} / 3$
- Se determina el Valor crítico de Lenth = $T(\alpha, GL) \times PSE$

Los factores analizados en el DOE – Factorial son significativos, a un nivel de confianza de $(1 - \alpha) \times 100\%$ si su efecto es mayor al valor crítico de Lenth. Se puede ver gráficamente por el MINITAB por la gráfica de Pareto de los efectos, como en el ejemplo siguiente:

Figura 6

Diagrama de Pareto de los efectos.



Fuente: Elaborado con Minitab

Se puede visualizar en el diagrama de Pareto los efectos de cada factor, y como estos efectos son menores a la cota punteada de rojo (Valor crítico), se evidencia gráficamente que los factores no son significativos en el experimento ejecutado.

III. Método

3.1. Tipo de investigación

El diseño empleado en la investigación es experimental (a nivel de laboratorio), donde se realizó la manipulación de variables del proceso: presión del sistema, temperatura de alimentación, diámetro del reactor, flujo másico de alimentación y temperatura de la pared del reactor, a través de la simulación del modelo matemático, el cual representa el proceso de conversión de dióxido de azufre. Los resultados obtenidos fueron validados y permitiendo así la optimización de esta *etapa crítica* en cuanto a la reducción del impacto por emisiones de SO₂ (Hernández-Sampieri, Fernández-Collado y Baptista Lucio, 2014).

En este trabajo se desarrolló el proceso de oxidación del anhídrido sulfuroso mediante el modelamiento y simulación con el objetivo de reducir el impacto de las emisiones de SO₂ a la atmosfera, considerándose como aplicada; ya que el propósito de la investigación es el de resolver o mejorar una situación particular, comprobando un modelo o método mediante una propuesta de intervención innovadora y creativa (Vargas-Cordero, 2009)

De acuerdo al grado de profundidad con el que se ha realizado la investigación es descriptiva, pues se ha tomado como base estudios anteriores y complementarios en relación al modelamiento y simulación del proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente de los procesos de tostación de minerales (Hernández Sampieri et al., 2014).

3.2. Población y muestra

Población

El universo de la investigación está conformado por todos los procesos de producción de ácido sulfúrico.

Muestra

El proceso de conversión del dióxido de azufre a trióxido de azufre dado en el reactor catalítico en la producción de ácido sulfúrico.

3.3. Operacionalización de variables

Identificación de variables

La optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre se estudió con las siguientes variables:

- Variables independientes

X1: Condiciones de operación del proceso de conversión del dióxido de azufre.

X2: Métodos matemáticos para la resolución de modelos físicos planteados.

- Variable dependiente

Y: Modelamiento y simulación del proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente de la tostación de minerales sulfurados.

Relación de variables

- Por su naturaleza, todas las variables son del tipo cuantitativa.
- Por su dependencia, la variable Y es dependiente de las variables X1 y X2, las cuales son independientes.

$$Y = f(X1, X2)$$

Operacionalización

Tabla 3

Operacionalización de variables

Variables	Dimensiones	Indicadores	Método
Variable independiente: Proceso de conversión de dióxido de azufre			
x1: Condiciones de operación del proceso de conversión del dióxido de azufre	a) Modelo matemático	x1: Valores de las variables dentro de los límites esperados	Asignación de diferentes condiciones de operación al programa desarrollado que permite obtener la mayor conversión del dióxido de azufre
x2: Métodos matemáticos para la resolución de modelos físicos planteados	b) Conversión de dióxido de azufre	x2: Rangos de los valores de las variables dentro de los límites esperados	Método de relación matemática
Variable dependiente: Modelamiento y simulación para la conversión de dióxido de azufre emitido de la tostación de minerales sulfurados			
y: Modelamiento y simulación del proceso de conversión de dióxido de azufre proveniente de la tostación de minerales sulfurados	a) Algoritmo b) Lenguajes de programación	Conversión de dióxido de azufre cercana a la unidad	El método de solución está basado en la delineación de las necesidades de operación

3.4. Instrumentos

Técnicas:

Las técnicas empleadas para el desarrollo de la investigación fueron:

- Modelamiento matemático de procesos químicos a partir del balance diferencial de materia y energía, lo cual es caracterizado con datos del proceso de conversión de dióxido de azufre de una planta de producción de ácido sulfúrico obtenidos de la literatura.
- Diseño factorial completo con el que se obtuvo 243 corridas experimentales las cuales fueron desarrolladas mediante la simulación de los modelos matemáticos del proceso de conversión del dióxido de azufre, donde la respuesta buscada fue la conversión máxima. Posteriormente se realizó el análisis de los efectos principales e interacción para hallar la combinación de niveles que optimiza el desempeño del proceso.
- Diseño de superficie de respuesta de Box Benkhen que permitió encontrar la región del óptimo y modelar la curvatura tomando en cuenta a los factores influyentes del proceso, esto se llevó a cabo con el uso del software Minitab®.
- Simulación de comprobación del proceso haciendo uso del software Simulink® de Matlab®, donde se realizó la programación de los balances diferenciales de materia y energía, en función de los factores objeto de estudio de la investigación, con el cual se comprueba los resultados de interés del proceso tales como perfiles de conversión y temperatura, así como los valores máximos de conversión

Tabla 4*Datos para la simulación*

Elementos	Descripción
Sistema reaccionante	Ecuación cinética $r(X,T)$ Datos termodinámicos: entalpía de reacción $-\Delta H_r$ Estequiometría
Reactor	Condiciones a la entrada: T, P, y_{SO_2} Dimensiones: Radio, Longitud Condiciones de transferencia de calor: T. pared
Modelo	Modelo pseudo homogéneo con dispersión radial Constantes agrupadas: C1, C2, C3, C4
Cálculo	Método de diferencias finitas Expresión ode45 para la resolución de ecuaciones diferenciales

Instrumentos

Los instrumentos de recolección de datos para este trabajo fueron:

- Los datos del reactor y la fase fluida del proceso de conversión de dióxido de azufre se tomaron de la investigación de Carrasco et al., (2013) los cuales fueron la base para la caracterización de los modelos matemáticos.

Tabla 5*Caracterización de los datos de operación*

Parámetro	Descripción
Alimentación	SO ₂ = 6.5%mol Aire= 93,5% mol
Lecho catalítico	Pt/Al ₂ O ₃ (esferas) dp= 0,3175cm ρ _b = 1025Kg cat/m ³ ε _L = 0,5
Flujo y fase fluida	C _p =1.09Kj/Kg°C ρ _b = 0.5864 Kg/m ³ G =1709 Kg/m ² h
T. de alimentación, T _o	400°C
T. de la pared, T _w	197°C
Diámetro del tubo, D _t	5.23 cm
Longitud del tubo, L	9.14 cm
Peclet radial de calor, Pe _{Hr}	4,4
Peclet radial de masa, Pe _{Mr}	9,6
Numero de Biot en la pared, Bi _w	6.67

Fuente: Adaptado de Carrasco et al.,(2013)

- El modelado matemático para el reactor tubular de lecho fijo está basado en la teoría de Froment & Bischoff (1979, p. 347-361) y Fogler (2001, p.426-443) donde se fundamentan los principios del balance de masa y energía del proceso.

Tabla 6*Ecuaciones de conservación de masa y energía*

Tipo	
Masa	$\frac{\partial C_A}{\partial t} + V_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] + R_A$

$$\text{Energía} \quad \frac{\partial T}{\partial t} + V_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + V_z \frac{\partial T}{\partial z} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \frac{G}{\rho C_p}$$

Fuente: Adaptado de Carrasco Venegas (2018)

- El modelo cinético para la reacción de oxidación de dióxido de azufre fue obtenida de Froment & Bischoff (1979, p. 494) junto con sus constantes cinéticas las cuales son función de la temperatura.

Tabla 7

Datos Cinéticos y termodinámica de la reacción

Modelo	Descripción
Reacción química	$SO_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightleftharpoons SO_3$
Expresión de la velocidad de reacción	$r = \frac{K_1 P_{O_2} P_{SO_3} \left(1 - \frac{P_{SO_3}}{P_{SO_2} P_{O_2}^{0.5} K_p} \right)}{22.414 (1 + K_2 P_{SO_2} + K_3 P_{SO_3})}, \frac{KmolSO_2}{Kgcat \times h}$
Constantes	$K_1 = \exp(12.160 - 5473/T)$ $K_2 = \exp(-9.953 + 8619/T)$ $K_3 = \exp(-71.745 + 52596/T)$ $K_p = \exp(11300/T - 10.68)$
Termodinámica	Reacción exotérmica $\Delta Hr = -94886 KJ / Kmol$
Estequiometría	$SO_2 : -1, O_2 : -1/2, SO_3 : 1$

Fuente: Adaptado de Carrasco et al.,(2013)

- Las tablas para el diseño factorial y para el diseño de superficie de respuesta fueron creadas con Minitab®, en el menú de Estadísticas>DOE>Factorial y Estadísticas>DOE>Superficie de respuesta.

3.5. Procedimientos

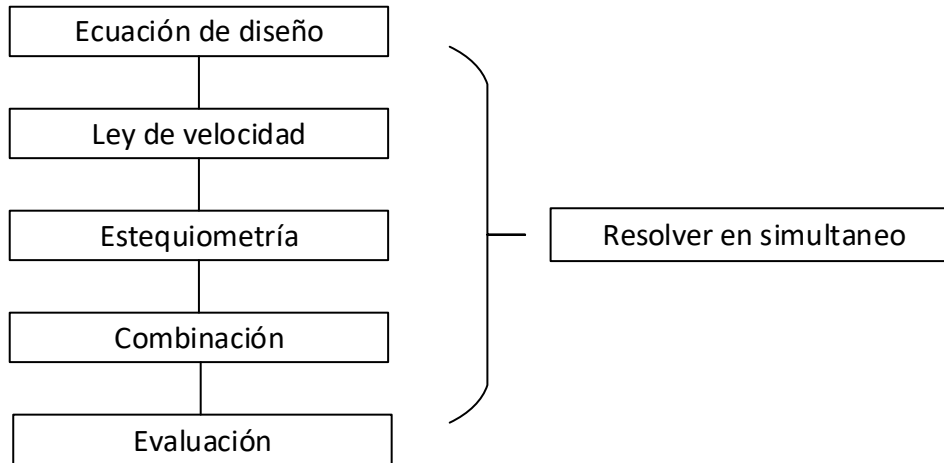
- Se realizó el estudio del proceso de conversión del dióxido de azufre que tiene lugar en un reactor catalítico de una planta de producción de ácido sulfúrico.
- Se planteó el balance de materia y energía para el reactor catalítico de dióxido de azufre, el cual consiste de un sistema de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) acopladas por el término de la velocidad de reacción, la cual es función de la conversión y temperatura.
- Para la resolución del sistema EDP se utilizó el método de diferencias finitas, que se basa en discretizar parcialmente la EDP para formar un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO), el cual puede resolverse como un problema de valor inicial.
- Se resolvió el sistema EDO con el software Matlab, el cual fue previamente programado con las ecuaciones diferenciales, las condiciones iniciales, los datos de operación, y las variables de proceso objeto de estudio: presión, temperatura de entrada de gases, flujo másico de alimentación, radio y temperatura de la pared. Los resultados fueron expresados como perfiles de conversión y temperatura en las direcciones axial y radial. Sobre todo, se asentó un especial interés en el valor de la conversión a la salida del reactor.
- Los parámetros del proceso (factores) fueron analizados mediante un diseño de experimentos factorial, que consistió en tres niveles de experimentación para cada factor, generándose $3^5=243$ combinaciones diferentes (tratamientos). Estos experimentos fueron simulados mediante la programación en Matlab, donde la respuesta objetivo fue la conversión a la salida del reactor catalítico de oxidación en cada tratamiento.

- Los resultados del diseño factorial se sometieron a un análisis estadístico donde se determinó la influencia de los factores sobre la respuesta (conversión a la salida), la interacción entre los factores y la combinación de niveles que dirigen al proceso hacia la región óptima.
- Para encontrar los valores óptimos del proceso, se realizó un diseño de experimentos de superficie de respuesta de Box Benkhen, que consistió en encontrar la región de curvatura con los factores influyentes del proceso, partiendo de la combinación óptima de niveles previamente encontrado, aumentando el tamaño de paso de los niveles hasta encontrar el punto de quiebre donde se aproxima la curvatura. Ya en las cercanías del óptimo se modeló la ecuación de la zona curva con la cual fue posible obtener los valores óptimos del proceso, estos tratamientos se realizaron con el software Minitab®.
- Finalmente, se redactó un programa en Simulink® de Matlab® para la simulación del proceso con una interfaz interactiva, donde los datos de entrada pueden ser modificados para comprobación de los perfiles y valores máximos de conversión en simultaneo.

A continuación, se muestra los esquemas operativos utilizados para el desarrollo de la investigación:

Figura 7

Procedimiento para el modelamiento de un reactor de lecho fijo para el proceso de conversión



Formulación de las ecuaciones de conservación de materia y energía

- Ecuación de conservación materia en coordenadas cilíndricas

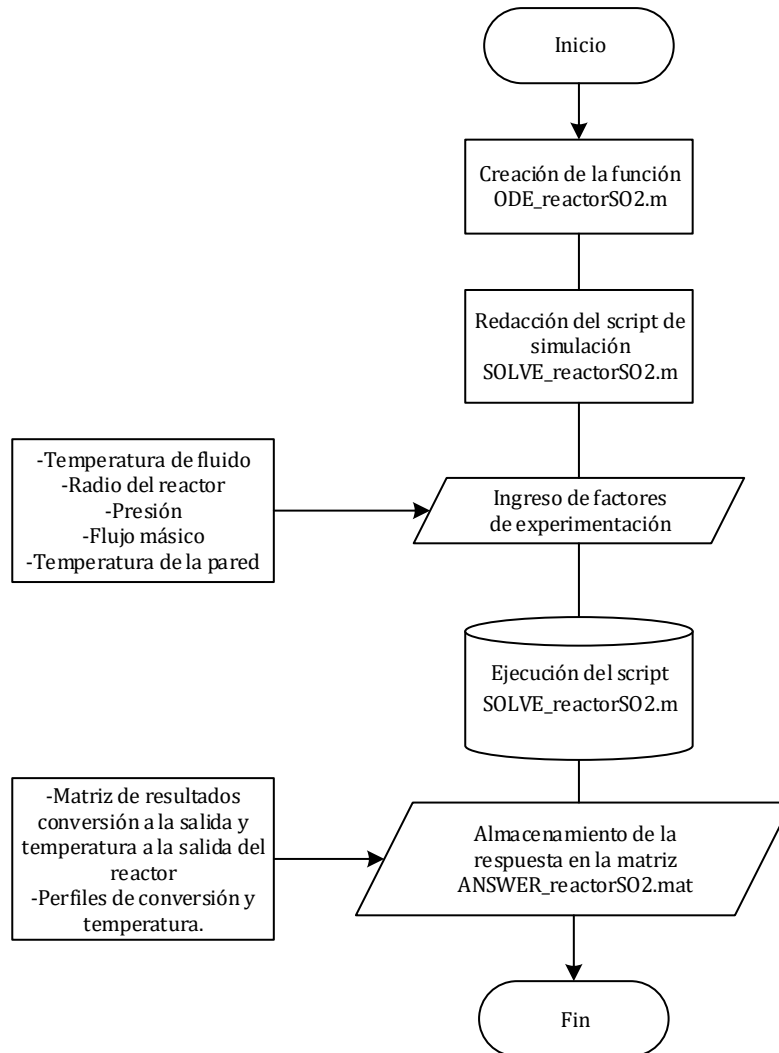
$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + V_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] + R_A$$

- Ecuación de conservación de energía en coordenadas cilíndricas

$$\frac{\partial T}{\partial t} + V_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + V_z \frac{\partial T}{\partial z} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \frac{G}{\rho C_p}$$

Figura 8

*Procedimiento para la simulación del reactor de lecho fijo
para el proceso de conversión*



- Procedimiento para la optimización

Figura 9

Diseño factorial de experimentos para el proceso de conversión

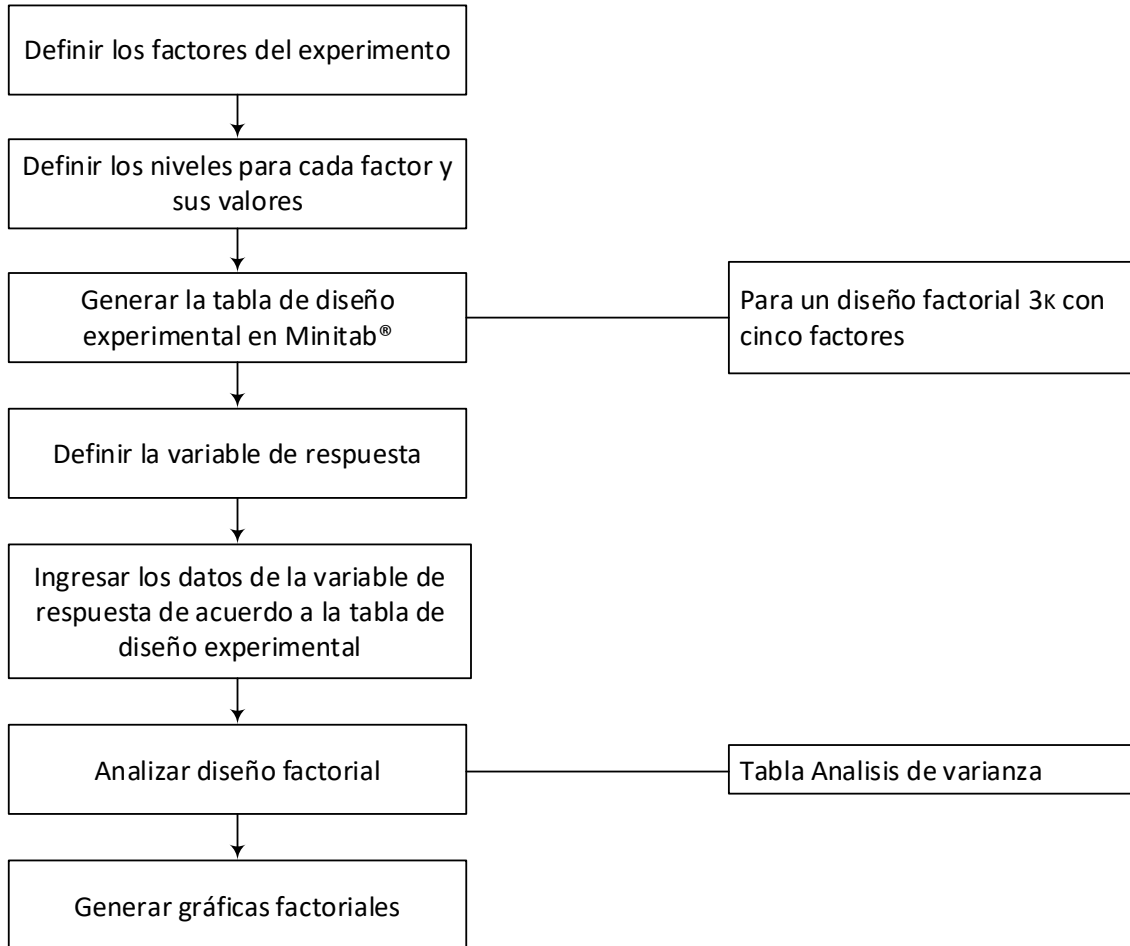
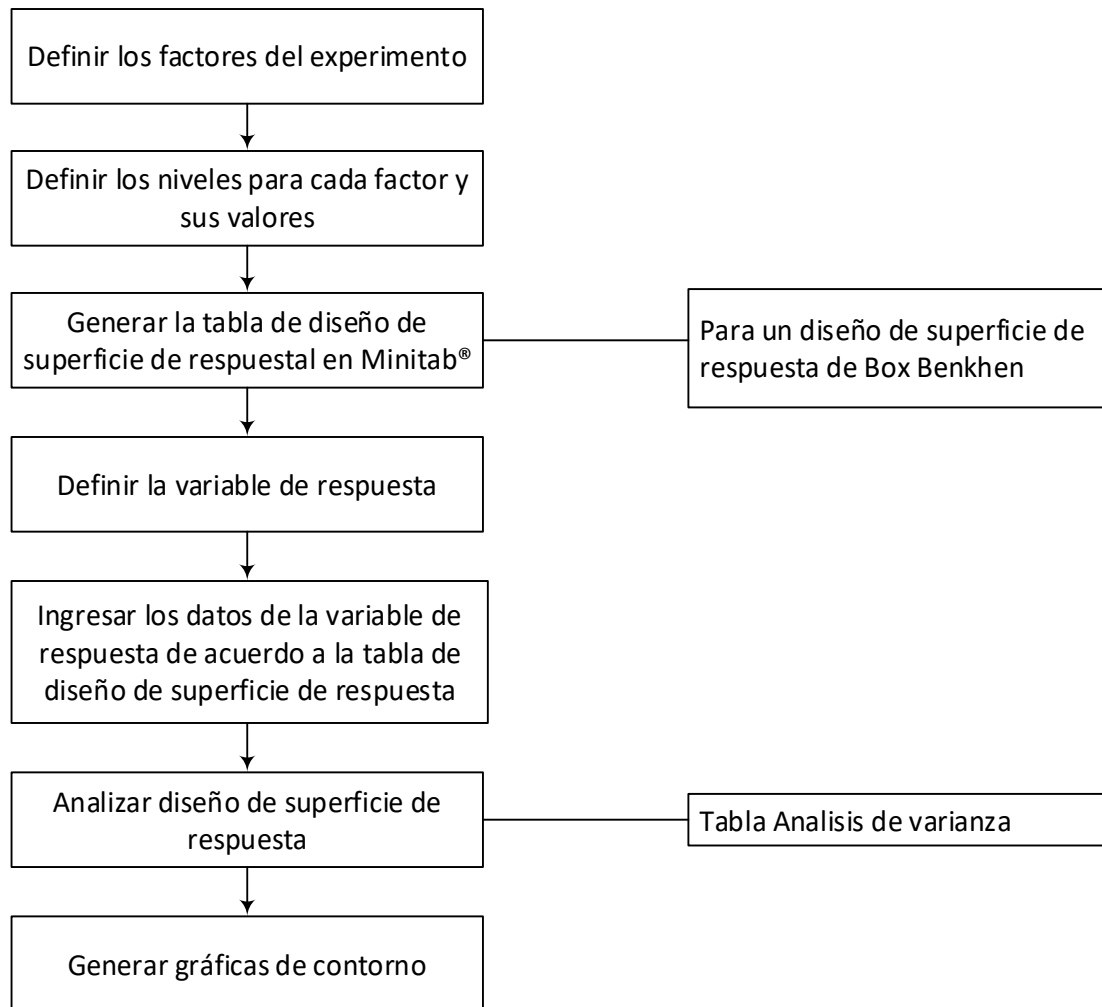


Figura 10

Diseño de superficie de respuesta para el proceso de conversión

**Tabla 8**

Regresión de mínimos cuadrados

Modelo	Solución	Componentes
$X \times B = Y$	$B = (X^T X)^{-1} X^T Y$	$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}$ $B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix}$ $Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$

Nota: Donde: X=predictores; B=coeficientes; Y= respuesta

3.6. Análisis de datos

Para el análisis de datos se utilizó la técnica ANOVA, donde se evaluó el valor de probabilidad (P_{value}) asociado al análisis del diseño factorial y al análisis de superficie de respuesta respectivamente, con el cual fue posible determinar la influencia de los factores presentes en el diseño,

Así mismo se utilizaron el diagrama de Pareto, gráficas factoriales de efectos principales y de interacciones para una mejor comprensión del proceso.

IV. Resultados

Generación del modelo matemático del reactor catalítico de oxidación de SO₂:

Partiendo de las ecuaciones de conservación de materia y energía se realizaron las simplificaciones de acuerdo al sistema estudiado, el reactor tubular de lecho fijo.

- Ecuación de conservación de masa

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + V_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] + R_A \quad (1)$$

Expresión del balance de materia para el reactor

$$\varepsilon D_{er} \left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right] - U_s \frac{\partial C}{\partial z} - \rho_b v_A r_{A(X,T)} = 0 \quad (2)$$

Se convierte la expresión de la concentración a términos de conversión

$$C = C_{A0} - C_{A0} X, \quad \rightarrow \quad \partial C = -C_{A0} \partial X$$

Se reemplaza la concentración por la conversión

$$\varepsilon D_{er} \left[-C_{A0} \frac{\partial^2 X}{\partial r^2} - C_{A0} \frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right] - U_s (-C_{A0}) \frac{\partial X}{\partial z} - \rho_b v_A r_{A(X,T)} = 0 \quad (3)$$

Se simplifica la constante $-C_{A0}$

$$\varepsilon D_{er} \left[\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right] - U_s \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{\rho_b v_A r_{A(X,T)}}{C_{A0}} = 0 \quad (4)$$

Despejando el término $\frac{\partial X}{\partial z}$ tenemos:

$$\frac{\partial X}{\partial z} = \frac{\varepsilon \cdot d_p}{P_{EMr}} \left(\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right) + \frac{\rho_b \cdot v_A \cdot r_A(X,T)}{C_{A0} \cdot U_s} \quad (5)$$

Agrupando constantes $C1 = \frac{\rho_b}{C_{Ao} U_s}$; $C2 = \frac{\varepsilon D_{er}}{U_s}$ y haciendo $v_A = 1$

$$\frac{\partial X}{\partial z} = C_2 \left[\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right] + C_1 r_{A(X,T)} \quad (6)$$

- Ecuación de conservación de energía

$$\frac{\partial T}{\partial t} + V_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + V_z \frac{\partial T}{\partial z} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \frac{G}{\rho C_p} \quad (7)$$

Expresión del balance de energía para el reactor

$$Ker \left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right] - U_s \rho_f C_{pf} \frac{\partial T}{\partial z} - \rho_b (-\Delta H r) r_{A(X,T)} = 0 \quad (8)$$

Despejando el término $\frac{\partial T}{\partial z}$:

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{Ker}{U_s \rho_f C_{pf}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{\rho_b \cdot (-\Delta H r) \cdot r_{A(X,T)}}{U_s \cdot \rho_f \cdot C_{pf}} \quad (9)$$

Agrupando constantes $C3 = \frac{\rho_b (-\Delta H r)}{\rho_f C_{pf} U_s}$; $C4 = \frac{Ker}{U_s \rho_f C_{pf}}$, se obtiene:

$$\frac{\partial T}{\partial z} = C_4 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + C_3 r_{A(X,T)} \quad (10)$$

- Condiciones de contorno

$$r = 0; \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \forall z$$

$$r = R; \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{h}{Ker}(T - Tw), \quad \forall z$$

$$z = 0; \quad X = 0, \quad T = Tent, \quad \forall r$$

Resolución del modelo matemático del reactor catalítico de oxidación de SO₂:

- El método de elementos finitos aplicado a sistemas PDEs

$$\frac{\partial X}{\partial z} = C2 \left[\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right] + C1 r_{A(X,T)} \quad (11)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = C4 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + C3 r_{A(X,T)} \quad (12)$$

Discretizando el radio

$$r_i = \Delta r i; \quad i = [0, 1, 2, 3, 4, 5],$$

Para $r=0$, $i=0$

Aplicando la regla L'Hospital

$$\lim_{\partial r \rightarrow 0} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right) = \left(\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} \right) \quad \lim_{\partial r \rightarrow 0} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right)$$

Reemplazando en el sistema, para $r=0$:

$$\frac{\partial X}{\partial z} = 2C2 \left(\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} \right) + C1 r_{A(X,T)} \quad (13)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 2C4 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + C3 r_{A(X,T)} \quad (14)$$

Discretizando el sistema en $r=0$

$$\frac{\partial X_0}{\partial z} = 2C2 \cdot \left(\frac{X_1 - 2X_0 + X_{-1}}{\Delta r^2} \right) + C1 \cdot r_{A(X_i, T_i)} \quad (15)$$

$$\frac{\partial T_0}{\partial z} = 2C4 \cdot \left(\frac{T_1 - 2T_0 + T_{-1}}{\Delta r^2} \right) + C3 \cdot r_{A(X_i, T_i)} \quad (16)$$

Para $r>0$, $i=[1,2,3,4,5]$

Aplicando la diferencia regresiva

$$\frac{\partial y_n}{\partial x} = \frac{y_n - y_{n-1}}{\Delta x}$$

Para el subsistema masa

$$\frac{\partial X_1}{\partial z} = C2 \cdot \left(\frac{X_2 - 2X_1 + X_0}{\Delta r^2} + \frac{1}{1\Delta r} \left(\frac{X_1 - X_0}{\Delta r} \right) \right) + C1 \cdot r_{A(X_i, T_i)} \quad (17)$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial z} = C2 \cdot \left(\frac{X_3 - 2X_2 + X_1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2\Delta r} \left(\frac{X_2 - X_1}{\Delta r} \right) \right) + C1 \cdot r_{A(X_i, T_i)} \quad (18)$$

$$\frac{\partial X_3}{\partial z} = C2 \cdot \left(\frac{X_4 - 2X_3 + X_2}{\Delta r^2} + \frac{1}{3\Delta r} \left(\frac{X_3 - X_2}{\Delta r} \right) \right) + C1 \cdot r_{A(X_i, T_i)} \quad (19)$$

$$\frac{\partial X_4}{\partial z} = C2 \cdot \left(\frac{X_5 - 2X_4 + X_3}{\Delta r^2} + \frac{1}{4\Delta r} \left(\frac{X_4 - X_3}{\Delta r} \right) \right) + C1 \cdot r_{A(X_i, T_i)} \quad (20)$$

$$\frac{\partial X_5}{\partial z} = C2 \cdot \left(\frac{X_6 - 2X_5 + X_4}{\Delta r^2} + \frac{1}{5\Delta r} \left(\frac{X_5 - X_4}{\Delta r} \right) \right) + C1 \cdot r_{A(X_i, T_i)} \quad (21)$$

Para el subsistema energía

$$\frac{\partial T_1}{\partial z} = C4 \cdot \left(\frac{T_2 - 2T_1 + T_0}{\Delta r^2} + \frac{1}{1\Delta r} \left(\frac{T_1 - T_0}{\Delta r} \right) \right) + C3 \cdot r_{A(X_1, T_1)} \quad (22)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial z} = C4 \cdot \left(\frac{T_3 - 2T_2 + T_1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2\Delta r} \left(\frac{T_2 - T_1}{\Delta r} \right) \right) + C3 \cdot r_{A(X_2, T_2)} \quad (23)$$

$$\frac{\partial T_3}{\partial z} = C4 \cdot \left(\frac{T_4 - 2T_3 + T_2}{\Delta r^2} + \frac{1}{3\Delta r} \left(\frac{T_3 - T_2}{\Delta r} \right) \right) + C3 \cdot r_{A(X_3, T_3)} \quad (24)$$

$$\frac{\partial T_4}{\partial z} = C4 \cdot \left(\frac{T_5 - 2T_4 + T_3}{\Delta r^2} + \frac{1}{4\Delta r} \left(\frac{T_4 - T_3}{\Delta r} \right) \right) + C3 \cdot r_{A(X_4, T_4)} \quad (25)$$

$$\frac{\partial T_5}{\partial z} = C4 \cdot \left(\frac{T_6 - 2T_5 + T_4}{\Delta r^2} + \frac{1}{5\Delta r} \left(\frac{T_5 - T_4}{\Delta r} \right) \right) + C3 \cdot r_{A(X_5, T_5)} \quad (26)$$

De las condiciones de frontera:

En $r=R$, $i=5$

$$\frac{\partial X}{\partial r} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{X_{i+1} - X_i}{\Delta r} = 0; \quad X_6 = X_5$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{h}{k}(T_i - T_w) \quad \rightarrow \quad \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta r} = -\frac{h}{k}T_i + \frac{h}{k}T_w; \quad T_6 = \left(1 - \frac{h\Delta r}{k}\right)T_5 + \frac{h\Delta r}{k}T_w$$

El número de Biot de transferencia de calor en la pared:

$$Bi_w = \frac{rh}{K} \quad \rightarrow \quad Bi_w = \frac{i\Delta rh}{K}$$

Reemplazando las restricciones de frontera en el sistema:

$$\frac{\partial X_0}{\partial z} = C_2 \cdot \left(\frac{X_1 - 2X_0 + X_{-1}}{\Delta r^2} \right) + C_1 \cdot r_{A(X_1, T_1)}$$

$$\frac{\partial X_1}{\partial z} = C_2 \cdot \left(\frac{X_2 - 2X_1 + X_0}{\Delta r^2} + \frac{1}{1\Delta r} \left(\frac{X_1 - X_0}{\Delta r} \right) \right) + C_1 \cdot r_{A(X_1, T_1)}$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial z} = C_2 \cdot \left(\frac{X_3 - 2X_2 + X_1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2\Delta r} \left(\frac{X_2 - X_1}{\Delta r} \right) \right) + C_1 \cdot r_{A(X_2, T_2)}$$

$$\frac{\partial X_3}{\partial z} = C_2 \cdot \left(\frac{X_4 - 2X_3 + X_2}{\Delta r^2} + \frac{1}{3\Delta r} \left(\frac{X_3 - X_2}{\Delta r} \right) \right) + C_1 \cdot r_{A(X_3, T_3)}$$

$$\frac{\partial X_4}{\partial z} = C_2 \cdot \left(\frac{X_5 - 2X_4 + X_3}{\Delta r^2} + \frac{1}{4\Delta r} \left(\frac{X_4 - X_3}{\Delta r} \right) \right) + C_1 \cdot r_{A(X_4, T_4)}$$

$$\frac{\partial X_5}{\partial z} = C_2 \cdot \left(\frac{X_6 - 2X_5 + X_4}{\Delta r^2} + \frac{1}{5\Delta r} \left(\frac{X_5 - X_4}{\Delta r} \right) \right) + C_1 \cdot r_{A(X_5, T_5)}$$

$$\frac{\partial T_0}{\partial z} = 2C_4 \cdot \left(\frac{T_1 - 2T_0 + T_{-1}}{\Delta r^2} \right) + C_1 \cdot r_{A(X, T)}$$

$$\frac{\partial T_1}{\partial z} = C_4 \cdot \left(\frac{T_2 - 2T_1 + T_0}{\Delta r^2} + \frac{1}{1\Delta r} \left(\frac{T_1 - T_0}{\Delta r} \right) \right) + C_3 \cdot r_{A(X_1, T_1)}$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial z} = C_4 \cdot \left(\frac{T_3 - 2T_2 + T_1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2\Delta r} \left(\frac{T_2 - T_1}{\Delta r} \right) \right) + C_3 \cdot r_{A(X_2, T_2)}$$

$$\frac{\partial T_3}{\partial z} = C_4 \cdot \left(\frac{T_4 - 2T_3 + T_2}{\Delta r^2} + \frac{1}{3\Delta r} \left(\frac{T_3 - T_2}{\Delta r} \right) \right) + C_3 \cdot r_{A(X_3, T_3)}$$

$$\frac{\partial T_4}{\partial z} = C_4 \cdot \left(\frac{T_5 - 2T_4 + T_3}{\Delta r^2} + \frac{1}{4\Delta r} \left(\frac{T_4 - T_3}{\Delta r} \right) \right) + C_3 \cdot r_{A(X_4, T_4)}$$

$$\frac{\partial T_5}{\partial z} = C_4 \cdot \left(\frac{\left(1 - \frac{Bi_w}{5}\right)T_5 - \frac{Bi_w}{5}T_w - 2T_5 + T_4}{\Delta r^2} + \frac{1}{4\Delta r} \left(\frac{T_5 - T_4}{\Delta r} \right) \right) + C_3 \cdot r_{A(X_5, T_5)}$$

De las condiciones de iniciales

$$[X] = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; [T] = \begin{bmatrix} 400 \\ 400 \\ 400 \\ 400 \\ 400 \\ 400 \end{bmatrix}$$

El proceso queda representado por el sistema de ecuaciones diferenciales, donde el término de la velocidad de reacción es una función de la conversión X y la temperatura del proceso T, por lo cual la resolución simultanea de las 12 expresiones diferenciales es necesaria.

Tabla 9*Constantes utilizadas en la simulación*

Constante	Descripción
$R = 0.082$	Constante Universal de los gases
$df = 0.5864$	Densidad del fluido
$Phr = 4.4$	Peclet Calor Radial
$Pmr = 9.6$	Peclet Masa Radial
$Bi = 6.67$	Numero de Biot de la pared
$dp = 0.003175$	Densidad del catalizador
$E = 0.5$	Porosidad del lecho catalítico
$db = 1025$	Densidad del lecho
$Us = G / df$	Velocidad
$dH = -94886$	Entalpia de reacción
$Cpf = 1.09$	Capacidad Calorífica del Fluido
$dr = (Rtubo) / 5$	Espaciamiento Radial $5*dr=Radio$
$z = 0.1524$	Longitud del reactor

Fuente: Adaptado de Carrasco et al., (2013)

Tabla 10*Parámetros para la simulación*

Parámetros	Descripción
$P = 1.6$	Presión
$Tent = 400$	Temperatura de alimentación
$G = 1709$	Flujo másico de alimentación
$Rtubo = 0.02615$	Radio del reactor
$Tw = 205$	Temperatura de la pared

Mediante la simulación del script en Matlab, se obtiene los perfiles de conversión y temperatura a la salida del reactor:

Figura 11

Flujograma de experimentación

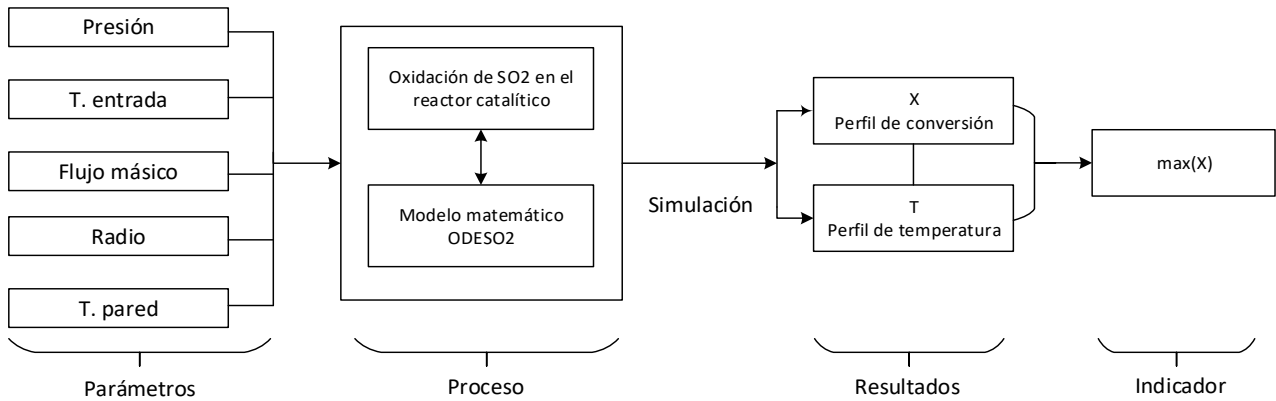
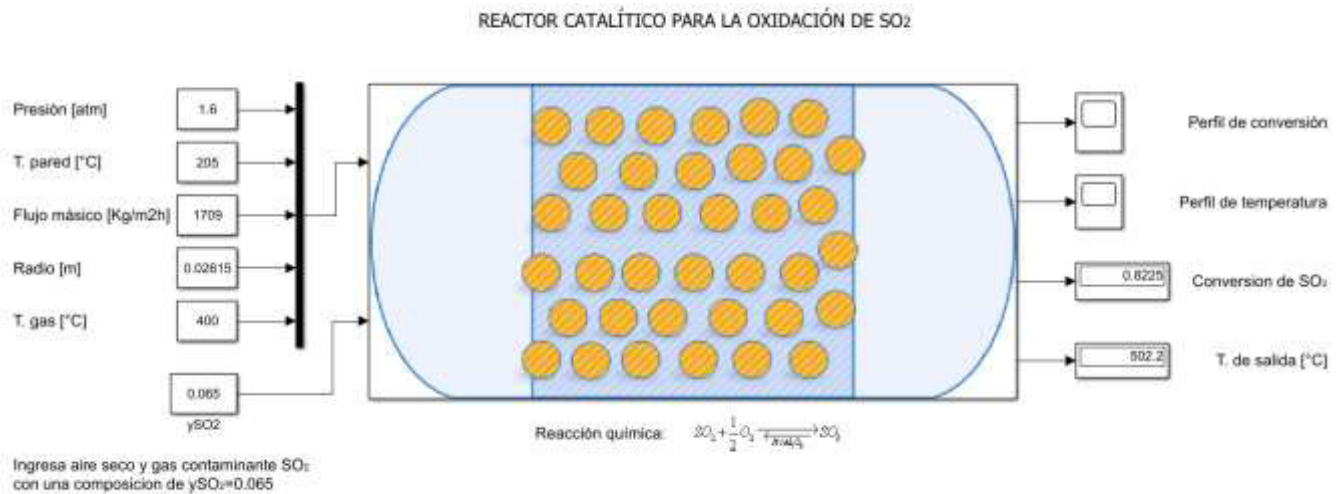


Figura 12

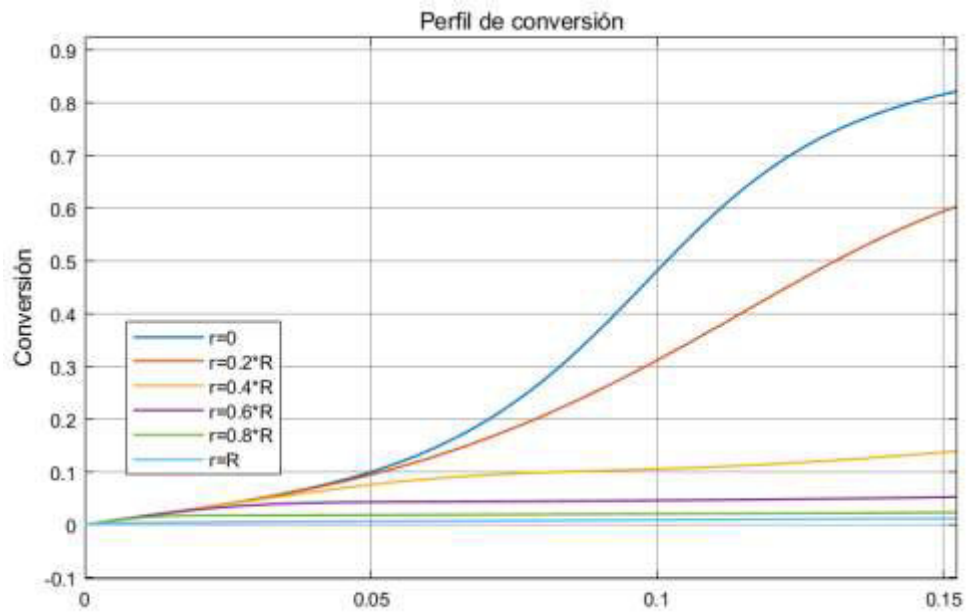
Simulación del reactor catalítico de SO₂ para el proceso de conversión.



Fuente: Elaborado con Matlab.

Figura 13

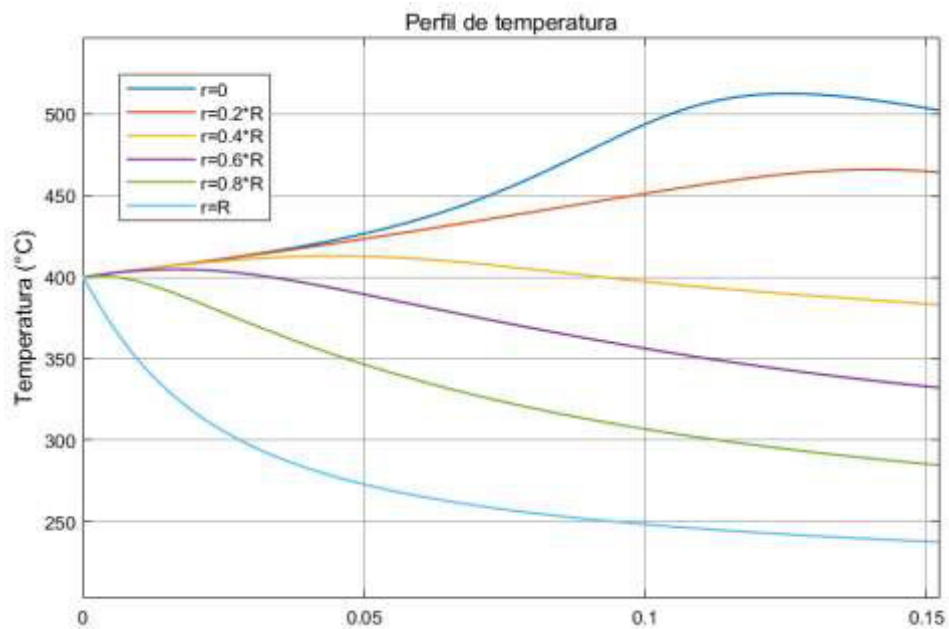
Perfil de conversión de SO₂ para el proceso de conversión



Fuente: Elaborado con Matlab

Figura 14

Perfil de temperatura del reactor para el proceso de conversión



Fuente: Elaborado con Matlab

De la hipótesis general:

El rendimiento químico del proceso de conversión de dióxido de azufre, proveniente de la tostación de minerales sulfurados, se puede optimizar mediante el modelamiento matemático y la simulación del reactor de oxidación catalítica.

- Diseño factorial de experimentos

El diseño de experimentos se aplicó para estudiar la interacción de los parámetros (factores) involucrados en el proceso de oxidación catalítica del dióxido de azufre para encontrar una configuración de parámetros que nos permite optimizar la conversión del SO₂ a la salida del reactor.

El proceso en estudio se desarrollará mediante la simulación con el programa “ODESO2.m”, los resultados del programa donde se enfocó el interés fueron en los perfiles de conversión. Para un manejo adecuado de la información se ha definido el indicador “valor máximo” como respuesta.

Los factores con los que se estudió el proceso se dispusieron en tres niveles tal como se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 11

Factores y niveles de experimentación

Factor	Nombre	Valores del nivel		
		1	2	3
A	Presión	1	1.6	2
B	Temperatura de entrada	380	400	420
C	Flujo másico	1500	1709	1800
D	Radio	0.02	0.02615	0.03
E	Temperatura en la pared	190	197	205

Fuente: Elaborado con Minitab

Para el desarrollo experimental se generó una tabla de diseño factorial utilizando el software Minitab®. El número de corridas experimentales corresponde a $3^5 = 243$ (cinco factores y tres niveles de experimentación).

La ejecución del programa “ODESO2” se realizó siguiendo la configuración de factores y niveles a lo largo de las 243 combinaciones dadas por el diseño factorial, en cada corrida experimental se registró el indicador “valor máximo” de conversión (X) (ver Anexo N°5).

- Diseño de superficie de respuesta

Se realizó la búsqueda de la región óptima tomando como base la configuración óptima, los factores significativos y la ecuación de regresión derivado del análisis factorial previo del proceso.

De acuerdo con la ecuación de regresión derivada del diseño factorial se tiene:

Ecuación de regresión para las variables significativas

$$X_{\max} = -1.37 + 0.4939P - 0.00025F + 58.41R$$

Donde P=presión, F=flujo másico, R=radio.

Se propuso el siguiente tamaño de paso considerando solo los signos de la ecuación:

Tabla 12

Tamaño de paso para la exploración

	Presión	T. gas	Flujo m.	Radio	T. pared
Tamaño de Paso	0.01	0	-10	0.001	0

Fuente: Elaborado con Minitab

Tomando incrementos alrededor del punto base:

Tabla 13

Exploración del óptimo local de los parámetros del proceso de conversión

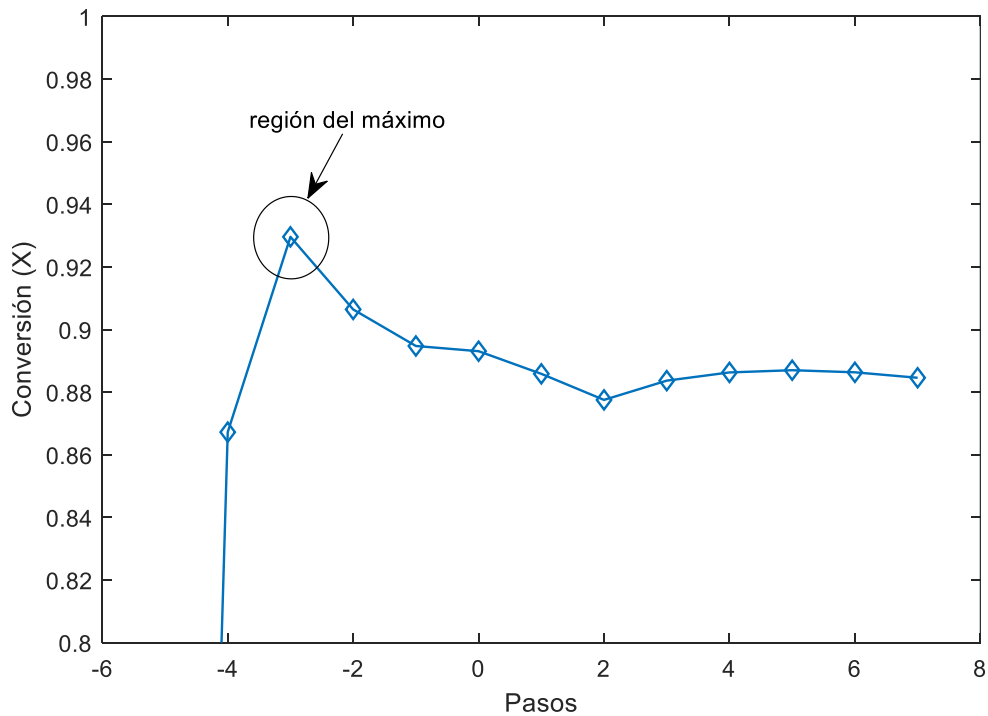
Tamaño de Paso	Presión	T. gas	Flujo m.	Radio	T. pared	Conversión (X)
-7	1.93	420	1570	0.01915	205	0.06969
-6	1.94	420	1560	0.02015	205	0.09866
-5	1.95	420	1550	0.02115	205	0.1859
-4	1.96	420	1540	0.02215	205	0.86722
-3	1.97	420	1530	0.02315	205	0.9296
-2	1.98	420	1520	0.02415	205	0.90642
-1	1.99	420	1510	0.02515	205	0.89474
0	2	420	1500	0.02615	205	0.89307
1	2.01	420	1490	0.02715	205	0.88583
2	2.02	420	1480	0.02815	205	0.87752
3	2.03	420	1470	0.02915	205	0.88366
4	2.04	420	1460	0.03015	205	0.88629
5	2.05	420	1450	0.03115	205	0.887
6	2.06	420	1440	0.03215	205	0.88633
7	2.07	420	1430	0.03315	205	0.88458

Fuente: Elaborado con Minitab

Los incrementos hacia adelante y atrás pueden visualizarse en la siguiente gráfica.

Figura 15

Exploración del óptimo local de los parámetros del proceso de conversión



Fuente: Elaborado con Matlab

La exploración hacia adelante muestra la disminución en la magnitud de la respuesta conversión $X_{\text{máx}}$. Sin embargo, la exploración hacia atrás revela información de una posible región del máximo.

Alrededor del paso -3 se puede ubicar una región de mayor incremento en la respuesta, en consecuencia, la configuración de los puntos -2 y -4 serán la nueva base para el diseño de superficie de respuesta de Box Benkhen.

Tabla 14*Factores y niveles para el diseño de Box BehnKen*

Factor	Nombre	Nivel	
		-1	1
A	Presión	1.96	1.98
B	Flujo másico	1520	1540
C	Radio	0.02215	0.02415

Fuente: Elaborado con Minitab

Del diseño de Box Benkhen, para tres factores continuos resultan 15 corridas experimentales, distribuidas de la siguiente forma:

Tabla 15*Tabla de diseño de Box BehnKen*

Corrida	Factores		
	A	B	C
1	-1	-1	0
2	1	-1	0
3	-1	1	0
4	1	1	0
5	-1	0	-1
6	1	0	-1
7	-1	0	1
8	1	0	1
9	0	-1	-1
10	0	1	-1
11	0	-1	1
12	0	1	1
13	b	0	0
14	0	0	0
15	0	0	0

Fuente: Elaborado con Minitab

La simulación de las corridas experimentales se ejecutó mediante la programación en Matlab, obteniendo la siguiente información en cuanto a la variable de respuesta conversión (X):

Tabla 16

Diseño de Box BehnKen desarrollado

N° Corrida	Factores			Respuesta
	Presión [Pa]	Flujo m. [kg/m ² h]	Radio [m]	Conversión (X)
1	1.96	1520	0.02315	0.93002
2	1.98	1520	0.02315	0.92973
3	1.96	1540	0.02315	0.92876
4	1.98	1540	0.02315	0.92918
5	1.96	1530	0.02215	0.90156
6	1.98	1530	0.02215	0.91869
7	1.96	1530	0.02415	0.90842
8	1.98	1530	0.02415	0.90645
9	1.97	1520	0.02215	0.91927
10	1.97	1540	0.02215	0.8992
11	1.97	1520	0.02415	0.9073
12	1.97	1540	0.02415	0.90761
13	1.97	1530	0.02315	0.9296
14	1.97	1530	0.02315	0.9296
15	1.97	1530	0.02315	0.9296

Fuente: Elaborado con Minitab

- Ecuación del modelo de superficie

La regresión para la superficie de respuesta del diseño de Box Benkhen se realizó mediante el método de mínimos cuadrados para el modelo:

$$X = b_0 + b_1P + b_2F + b_3R + b_4P^2 + b_5F^2 + b_6R^2 + b_7PF + b_8PR + b_9FR$$

Donde P=presión, F=flujo másico, R=radio, [b₀ - b₉]=coeficientes de la superficie de respuesta.

El cual fue resuelto haciendo uso de matrices

$$X = f(P, F, R)$$

$$X = M_{P,F,R} \times B$$

$$M_{P,F,R}^T \times X = M_{P,F,R}^T \times M_{P,F,R} \times B$$

$$\left(M_{P,F,R}^T \times M_{P,F,R}\right)^{-1} \times M_{P,F,R}^T \times X = \left(M_{P,F,R}^T \times M_{P,F,R}\right)^{-1} \times M_{P,F,R}^T \times M_{P,F,R} \times B$$

$$\left(M_{P,F,R}^T \times M_{P,F,R}\right)^{-1} \times M_{P,F,R}^T \times X = I \times B$$

$$B = \left(M_{P,F,R}^T \times M_{P,F,R}\right)^{-1} \times M_{P,F,R}^T \times X$$

$$B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_9 \end{bmatrix}; M_{P,F,R} = \begin{bmatrix} 1 & P_1 & F_1 & R_1 & P^2_1 & F^2_1 & R^2_1 & PF_1 & PR_1 & FR_1 \\ 1 & P_2 & F_2 & R_2 & P^2_2 & F^2_2 & R^2_2 & PF_2 & PR_2 & FR_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & P_{15} & F_{15} & R_{15} & P^2_{15} & F^2_{15} & R^2_{15} & PF_{15} & PR_{15} & FR_{15} \end{bmatrix}; X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{15} \end{bmatrix}$$

Cuyo resultado conduce a:

$$B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \\ b_6 \\ b_7 \\ b_8 \\ b_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -11 \\ 3.6 \\ -0.0061 \\ 1131 \\ 1.3 \\ -0.000003 \\ -20949 \\ 0.0018 \\ -478 \\ 0.509 \end{bmatrix}$$

La expresión de la superficie de respuesta resulta:

$$X = -11 + 3.6P - 0.0061F + 1131R + 1.3P^2 - 0.000003F^2 - 20949R^2 + 0.0018PF - 478PR + 0.509FR$$

Los estadísticos del modelo se calculan mediante:

$$\text{Índice de correlación: } R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \hat{X}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}$$

$$R^2 = 0.9655$$

$$\text{Desviación estándar: } S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \hat{X}_i)^2}{gl}}$$

$$gl = n - \#coef.$$

$$S = 0.00371$$

Análisis e Interpretación

- Análisis del diseño factorial

Esta etapa se realizó con el software Minitab®, en el cual se ingresaron los datos de respuesta de todas las corridas experimentales en el orden establecido por la tabla de diseño.

Los resultados del análisis del diseño factorial se muestran a continuación:

Tabla 17

Resumen del diseño experimental factorial para el proceso de conversión

Parámetro	Tipo	Niveles	Valores		
Presion	Fijo	3	1	1.6	2
T. entrada	Fijo	3	380	400	420
Flujo m.	Fijo	3	1500	1709	1800
Radio	Fijo	3	0.02	0.02615	0.03
T. pared	Fijo	3	190	197	205

Fuente: Elaborado con Minitab

Tabla 18

Análisis de varianza del diseño factorial para el proceso de conversión

Fuente	GL	SC Sec.	SC Ajust.	CM Ajust.	F	P
Presion	2	11.0238	11.0238	5.5119	256.97	0
T. entrada	2	0.0003	0.0003	0.0001	0.01	0.994
Flujo m.	2	0.2410	0.2410	0.1205	5.62	0.004
Radio	2	15.1916	15.1916	7.5958	354.13	0
T. pared	2	0.0026	0.0026	0.0013	0.06	0.941
Error	232	4.9762	4.9762	0.0214	-	-
Total	242	31.4356	-	-	-	-

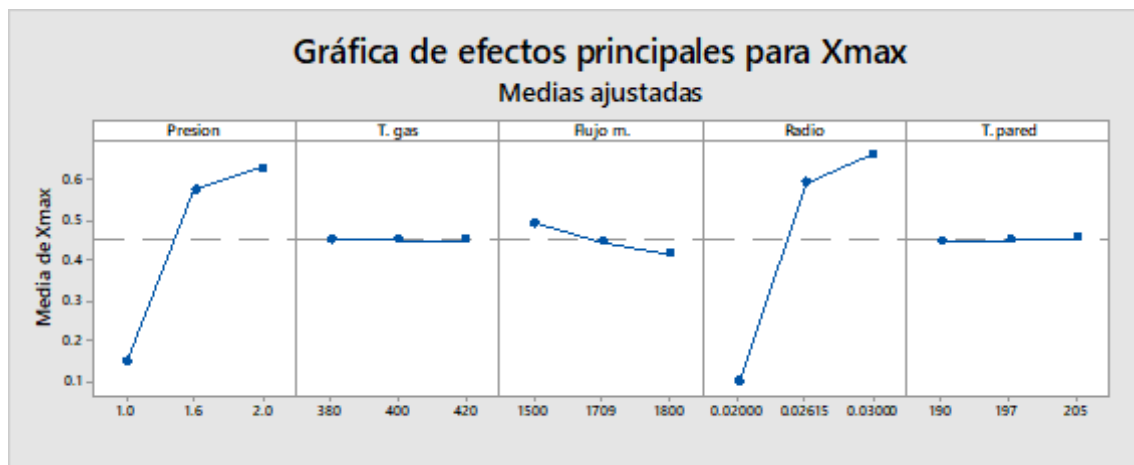
Fuente: Elaborado con Minitab

Estadísticos: S = 0.146456 R-cuad. = 84.17% R-cuad.(ajustado) = 83.49%

Para un mejor manejo de estos resultados se realizaron los gráficos de interacción y efectos principales con respecto a la respuesta “Xmax” (conversión).

Figura 16

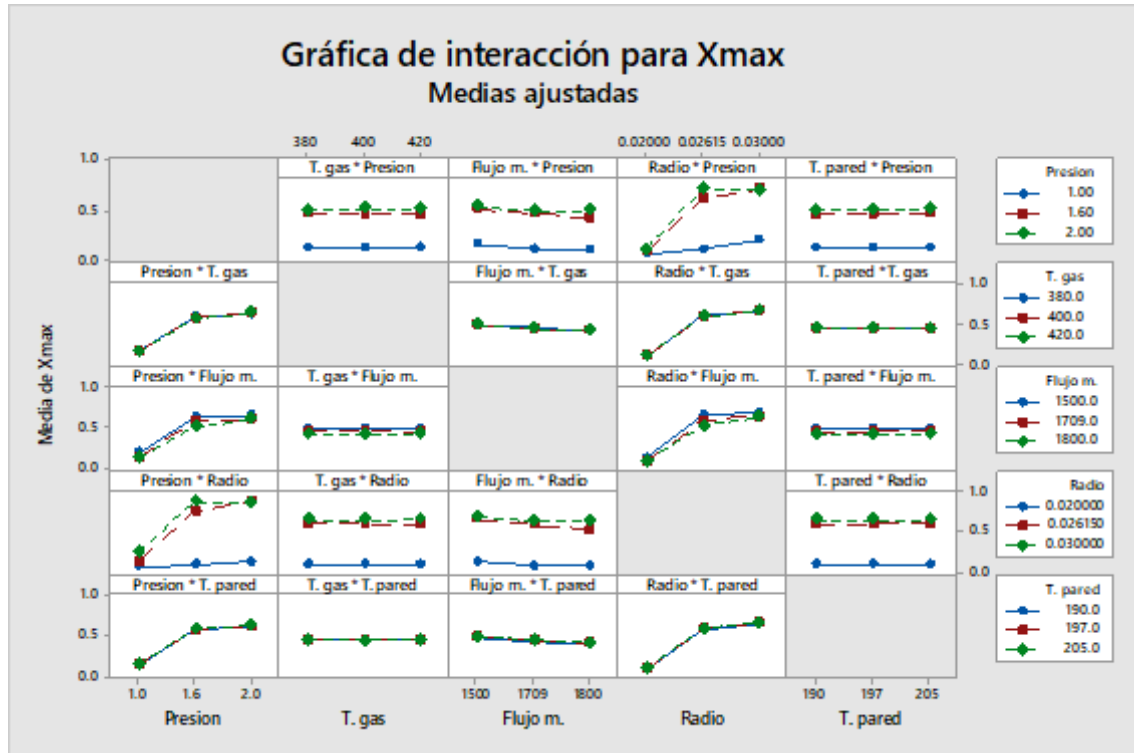
Gráfico de efectos principales para la conversión máxima del proceso de conversión.



Fuente: Elaborado con Minitab

Figura 17

Gráfico de interacciones entre los parámetros para la conversión máxima del proceso de conversión.



Fuente: Elaborado con Minitab

Del análisis del diseño experimental se concluye lo siguiente:

- Se realizó la simulación del proceso de oxidación de SO_2 mediante el diseño de experimentos (DOE) con cinco factores y tres niveles por cada factor y se determinó que las variables (factores): presión ($p=0$), flujo másico ($p=0.004$) y radio ($p=0$) presentan valores $p < 0.05$ (para un nivel de confianza de 95%) son variables significativas para el proceso en cuanto a la búsqueda del valor máximo de conversión.
- Del gráfico de efectos principales (Figura 15) se concluye que para la condición presión = 2, flujo másico = 1500 y radio = 0.030 se obtienen valores máximos en la respuesta; sin embargo, las variables T. entrada ($p=0.994$) y T. pared ($p=0.941$)

no representan una variación significativa en cuanto a los valores en la respuesta. De lo expuesto y con un valor $p > 0.05$ se determina que las variables T. entrada y T. pared son variables no significativas para el proceso en cuanto a la búsqueda del valor máximo de conversión.

- Al existir variables no significativas en el proceso, el valor de éstas puede manejarse con otros criterios, como el costo de enfriamiento de los gases provenientes de un proceso altamente exotérmico. Teniendo en cuenta esta premisa los valores asignados se fijan en T. entrada = 420 y T. pared = 205.

De la gráfica de interacciones (Figura 16) se concluye que:

- La interacción de la presión resulta significativa con respecto a las variables T.entrada, Flujo másico y T.pared puesto que para valores de presión = 2 se obtienen valores de respuesta altos. Frente al radio = 0.02, los valores de presión no generan diferencias significativas; sin embargo, frente al radio = 0.02615 (para los niveles de presión = 2) se generan valores altos en la respuesta.
- La interacción del flujo másico es significativa en cuanto a la variable presión; sin embargo, las diferencias entre los valores de respuesta no son muy pronunciados.
- La interacción del radio es significativa frente al flujo másico; sin embargo, las diferencias entre los valores de respuesta no son muy pronunciados. Frente a la presión = 2 (para los niveles del radio = 0.02615), se generan valores altos en la respuesta.
- La interacción de la T.entrada resulta no significativa en todos los casos.
- La interacción de la T.pared resulta no significativa en todos los casos.

Finalmente, teniendo en cuenta lo expuesto, la configuración óptima para el proceso de conversión de dióxido de azufre se logra en la condición: presión = 2, flujo

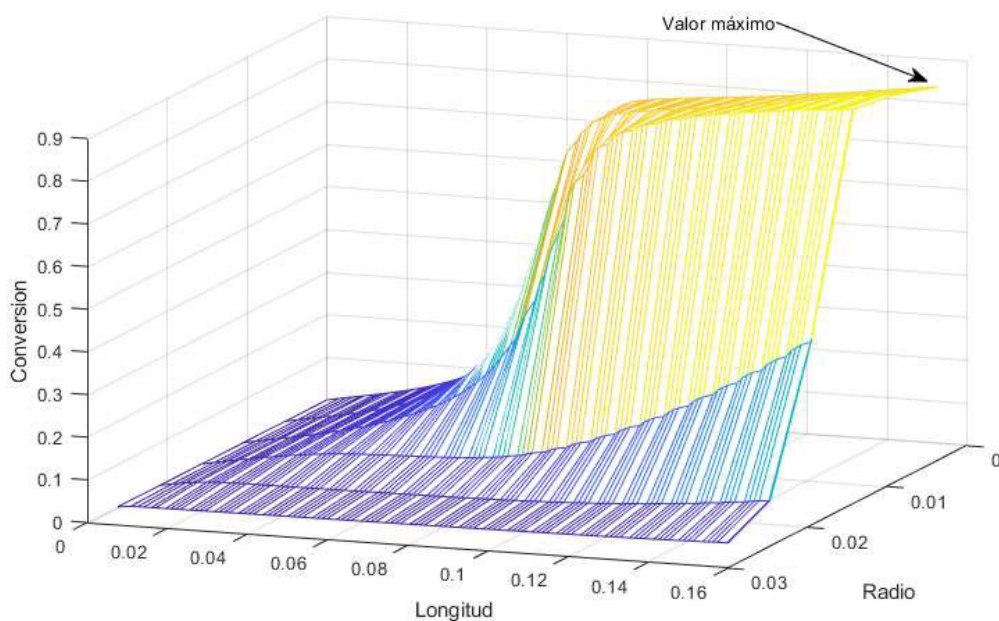
másico = 1500, deducidas del análisis de efectos principales, radio = 0.02615 el cual prevalece del análisis de interacciones, y T. entrada = 420 y T. pared = 205 tomado a criterio del experimentador en cuanto a la reducción del costo energético.

- Verificación

En esta etapa se desarrolla la experimentación virtual para la configuración óptimas obtenida, lo cual corresponde con la corrida experimenta n° 222, obteniendo un valor óptimo de conversión máxima $X = 0.89304$.

Figura 18

Perfil de conversión en las condiciones óptimas del proceso de conversión



Fuente: Elaborado con Matlab.

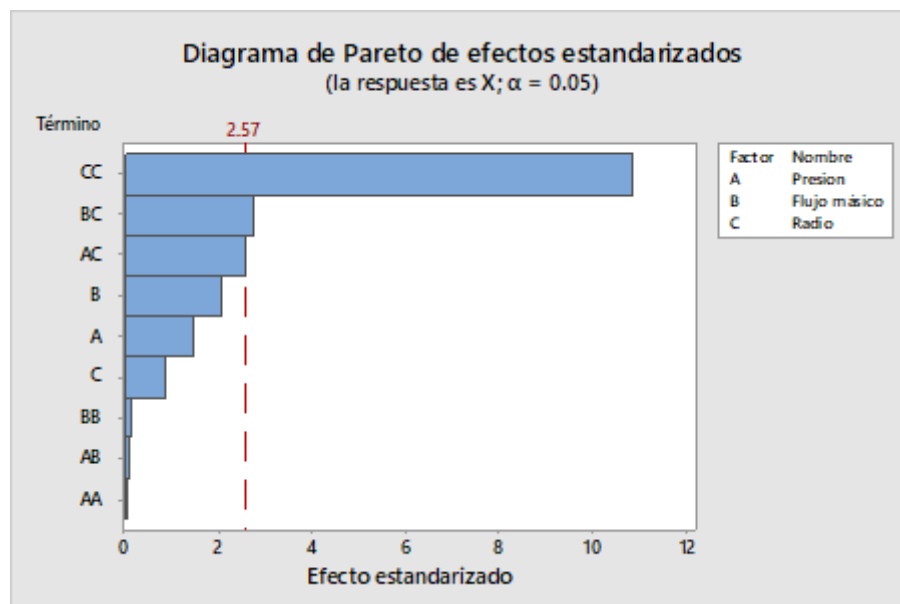
- Análisis del diseño de superficie de respuesta

El diseño de superficie de respuesta dio como resultado una región óptima para el proceso. Se realizó el análisis del diseño de superficie de respuesta haciendo uso del software Minitab, donde se obtuvo la siguiente información:

Tabla 19*Análisis de varianza del diseño de superficie de respuesta*

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	9	0.001929	0.000214	15.56	0.004
Lineal	3	0.000097	0.000032	2.36	0.188
Presión	1	0.000029	0.000029	2.12	0.205
Flujo másico	1	0.000058	0.000058	4.22	0.095
Radio	1	0.00001	0.00001	0.73	0.433
Cuadrado	3	0.001637	0.000546	39.61	0.001
Presión*Presión	1	0	0	0	0.95
Flujo másico*Flujo másico	1	0	0	0.03	0.879
Radio*Radio	1	0.00162	0.00162	117.65	0
Interacción de 2 factores	3	0.000195	0.000065	4.73	0.064
Presión*Flujo másico	1	0	0	0.01	0.927
Presión*Radio	1	0.000091	0.000091	6.63	0.05
Flujo másico*Radio	1	0.000104	0.000104	7.54	0.041
Error	5	0.000069	0.000014		
Falta de ajuste	3	0.000069	0.000023	*	*
Error puro	2	0	0		
Total	14	0.001998			

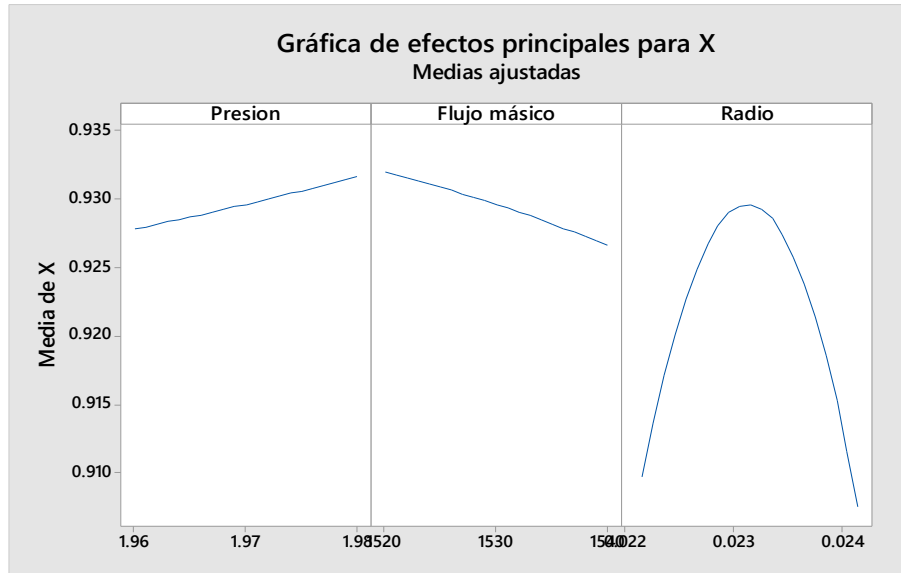
Fuente: Elaborado con Minitab

Figura 19*Gráfica de Pareto de la superficie de respuesta para el proceso de conversión.*

Fuente: Elaborado con Minitab

Figura 20

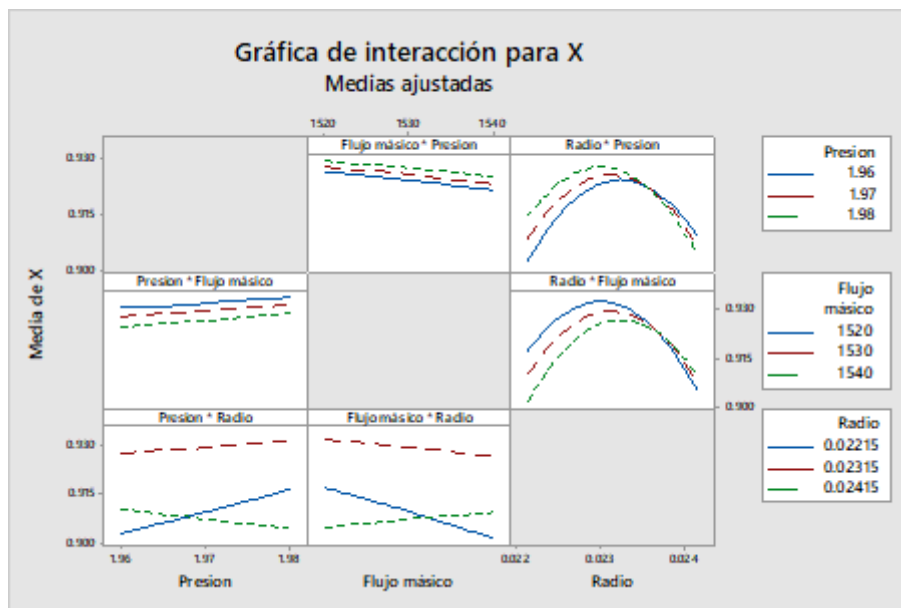
Gráfica de efectos principales del diseño de superficie de respuesta para el proceso de conversión.



Fuente: Elaborado con Minitab

Figura 21

Gráfica de interacciones del diseño de superficie de respuesta para el proceso de conversión.



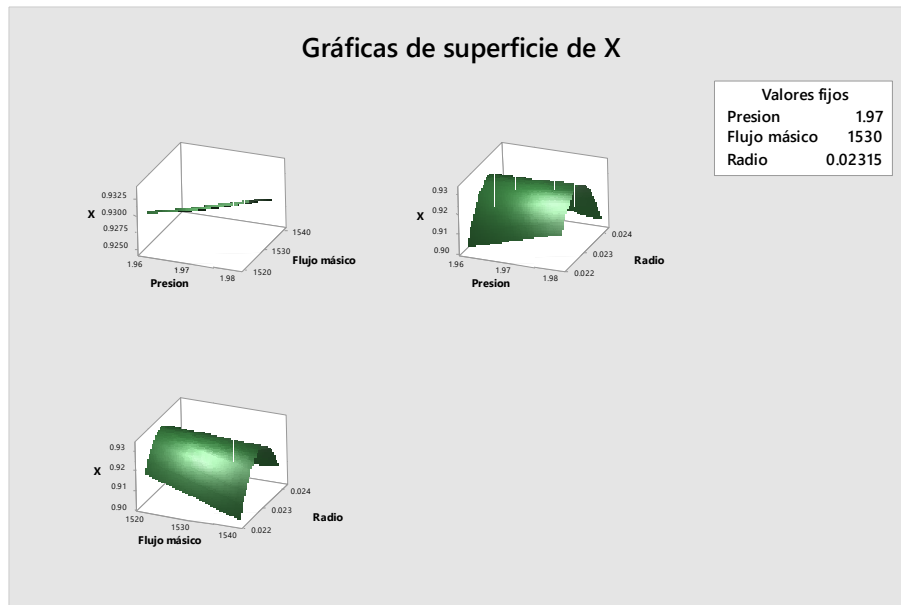
Fuente: Elaborado con Minitab

Del análisis de varianza para la superficie de respuesta se infiere:

- El modelo empleado en la superficie de respuesta, para un nivel de confianza del 95% con un valor $p=0.004 < 0.05$, es significativo para el experimento y por tanto se da validez a sus resultados.
- Los términos lineales del modelo resultan ser no significativos para el modelo de superficie de respuesta ($p>0.05$), esto se refleja en la gráfica de efectos principales. Para la presión, resulta conveniente trabajar con niveles altos cercanos a 1.98 atm y en lo referido al flujo másico con niveles bajos cercanos a 1520 Kg/m²h.
- De los términos cuadrados solamente el radio es significativo para el modelo ($p=0.00<0.05$), esta aseveración se puede confirmar también en la gráfica de Pareto, donde la variable CC equivalente a Radio² supera notablemente el límite 2.57; por consiguiente, se observa una marcada diferencia en la gráfica de efectos principales para este factor donde es posible avizorar un valor óptimo.
- La interacción del flujo másico y el radio es significativa para el modelo ($p=0.041<0.05$), de modo que los niveles del radio=0.02315 para un flujo másico=1520 Kg/m²h nos aproximan a la condición óptima del proceso.
- La interacción entre el radio y la presión puede considerarse significativa, de igual modo la gráfica de interacciones muestra que para los niveles del radio cercanos a 0.02315m es conveniente trabajar con la presión de 1.98Pa.

Figura 22

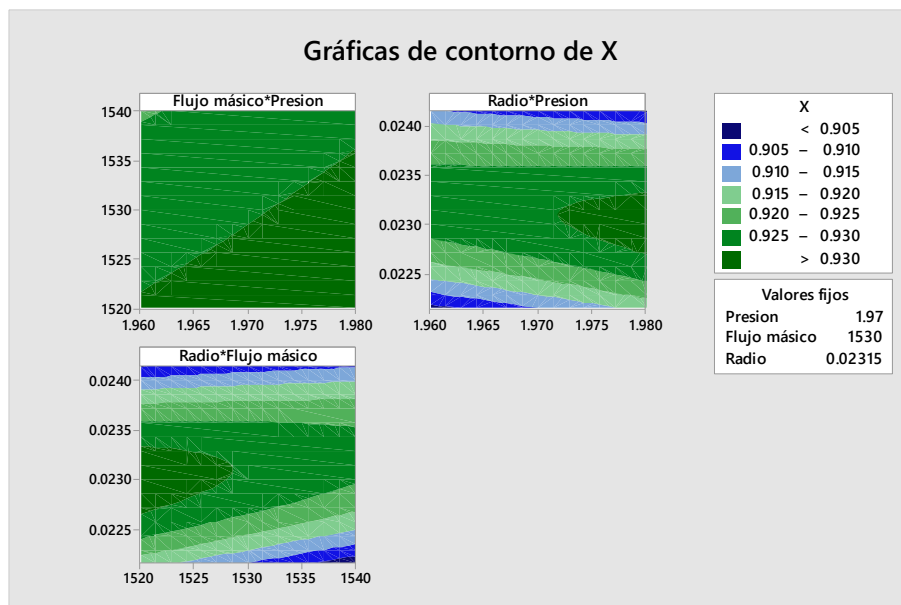
Gráfica de superficie para el proceso de conversión



Fuente: Elaborado con Minitab

Figura 23

Gráfica de contorno de los parámetros para el proceso de conversión



Fuente: Elaborado con Minitab

La región óptima para el proceso corresponde a una superficie de respuesta del tipo silla, esto se ve reflejado en las gráficas de contorno y en las de superficie, donde no es posible optimizar la respuesta (Gutiérrez Pullido & de la Vara Salazar, 2008). Sin embargo, frente a esta situación es válido realizar simplificaciones del modelo considerando solo las variables e interacciones significativas, lo que nos lleva a una expresión más reducida del problema, esto es:

Ecuación simplificada del modelo de superficie es:

$$X = -11 + 1130R - 478PR + 0.509FR - 20949R^2$$

Para el nivel de presión $P=1.98$ atm y flujo másico $F=1520$ Kg/m²h, la ecuación resulta en:

$$X = -11 + 957.24R - 20949R^2$$

Derivando la expresión

$$\frac{dX}{dR} = 957.24 - 41898R$$

$$\frac{dX}{dR} = 0; R = 0.0229$$

Al utilizar el software Minitab para optimizar el modelo se obtiene:

Optimización de respuesta: X

- Predicción de respuesta múltiple

Tabla 20*Condición óptima Presión, Flujo m. y Radio para el proceso de conversión*

Parámetro	Valor de configuración
Presión	1.98
Flujo másico	1520
Radio	0.0228975

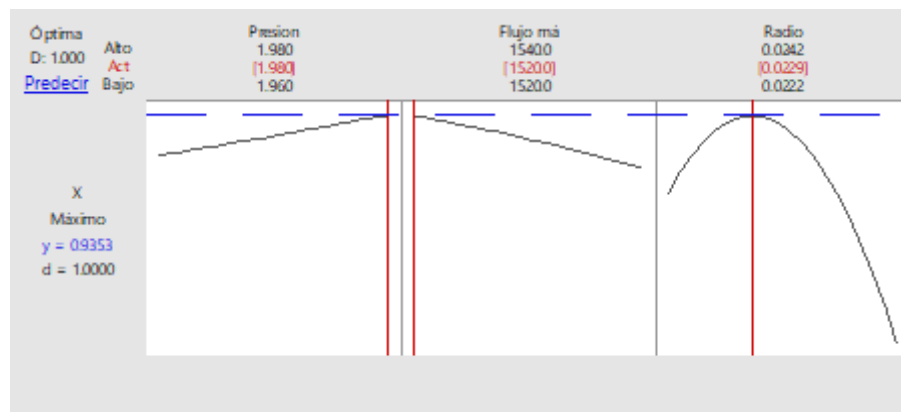
Fuente: Elaborado con Minitab

Tabla 21*Intervalo de confianza para la condición óptima del proceso de conversión*

Respuesta	Ajuste	EE de ajuste	IC de 95%	IP de 95%
X	0.93529	0.00327	(0.92689; 0.94369)	(0.92258; 0.94800)

Fuente: Elaborado con Minitab

- Gráfica de optimización

Figura 24*Gráfica de optimización de los parámetros del proceso de conversión.*

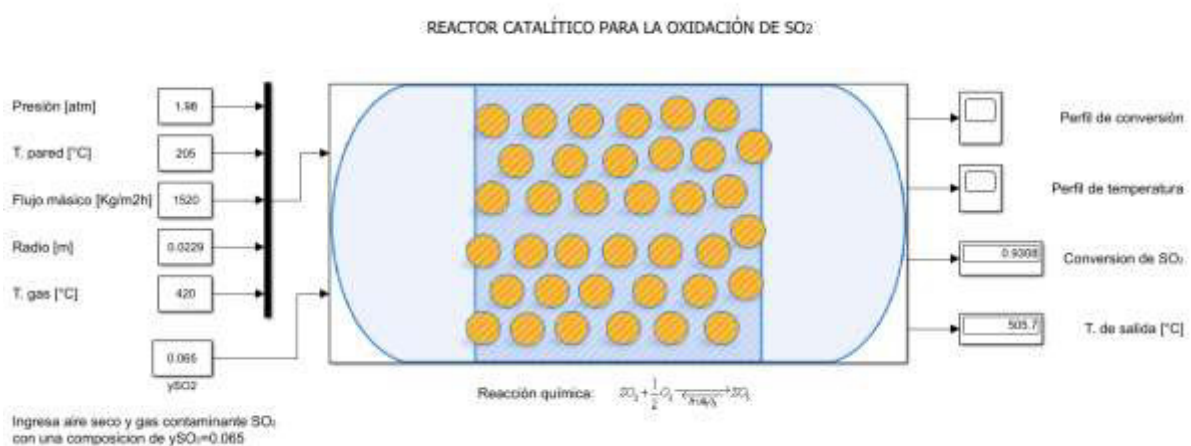
Fuente: Elaborado con Minitab

Verificación

Con los valores obtenidos de la optimización se realizó la simulación en del reactor catalítico obteniendo un nivel de conversión de $X=0.9308$, el cual pertenece al intervalo de predicción IP (0.92258; 0.94800) de 95% de confianza, determinado en la optimización con el diseño de superficie de respuesta

Figura 25

Simulación del convertidor de SO_2 en las condiciones óptimas para el proceso de conversión.



Fuente: Elaborado con Matlab

- Simulación de las etapas de proceso en el convertidor

Partiendo de la condición óptima, se desarrollaron las etapas posteriores de la conversión de SO_2 , donde se evaluó con un diseño factorial simulado cada etapa de proceso con la finalidad de obtener la mayor conversión a la salida del reactor.

- Condición óptima para la primera etapa del proceso de conversión

De los análisis del diseño factorial y diseño de superficie de respuesta simulados se obtuvo la condición óptima de:

$$Etapa\ 1: \begin{bmatrix} Presi\acute{o}n \\ T_{gas} \\ Flujo\ m. \\ Radio \\ T_{pared} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.98 \\ 420 \\ 1520 \\ 0.0229 \\ 205 \end{bmatrix}$$

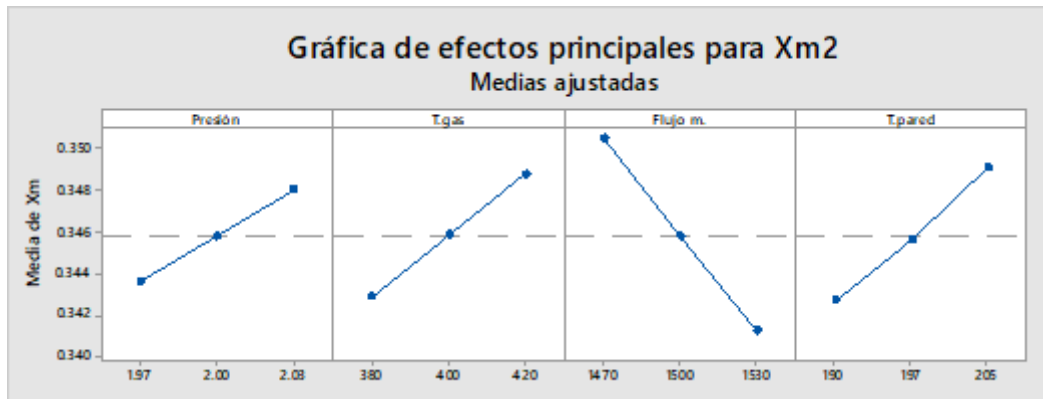
Para una composici3n de alimentaci3n de SO₂ igual a $y_{SO_2} = 0.065$ se alcanz3 una conversi3n de X=93.08% a la salida del reactor.

- Condici3n 3ptima para las etapas posteriores del proceso de conversi3n

Para la segunda etapa se dej3 constante el radio y se obtuvieron las combinaciones para los dem3s factores, resultando un dise1o factorial 3⁴, donde se determin3 del an3lisis de varianza los valores de configuraci3n 3ptima. Para las etapas posteriores se determin3 del mismo modo las condiciones 3ptimas. Las tablas de dise1o y de an3lisis de varianza reportados de Minitab se muestran en el anexo N°4 y N°5 respectivamente. En las siguientes figuras se presentan los resultados de las gr3ficas factoriales para las etapas 2, 3, 4 y 5 denotado como X_m.

Figura 26

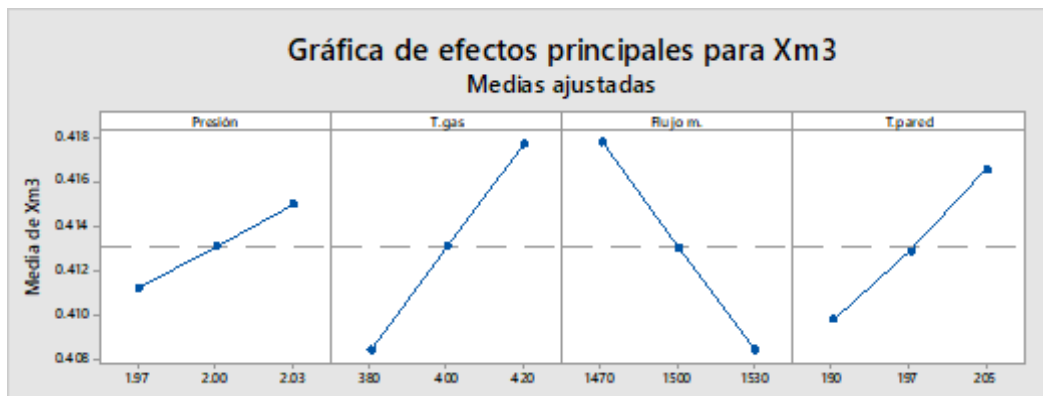
Efectos principales de la segunda etapa del proceso de conversión



Fuente: *Elaborado con Minitab*

Figura 27

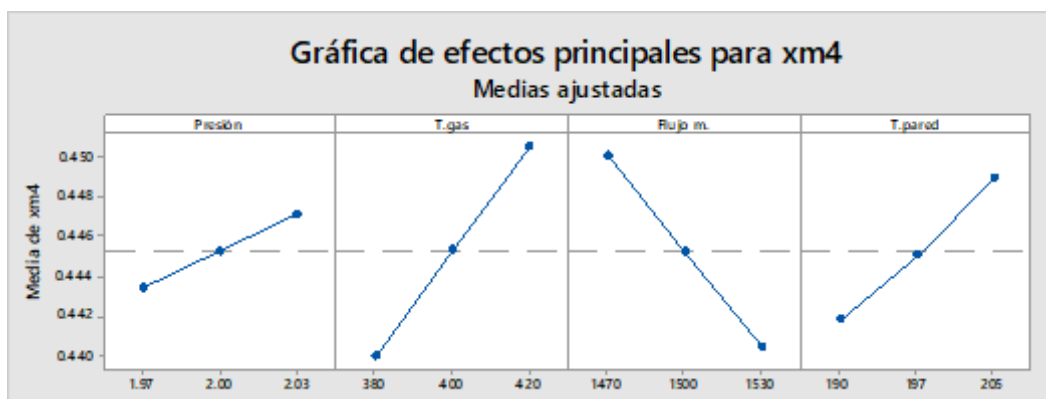
Efectos principales de la tercera etapa del proceso de conversión.



Fuente: *Elaborado con Minitab*

Figura 28

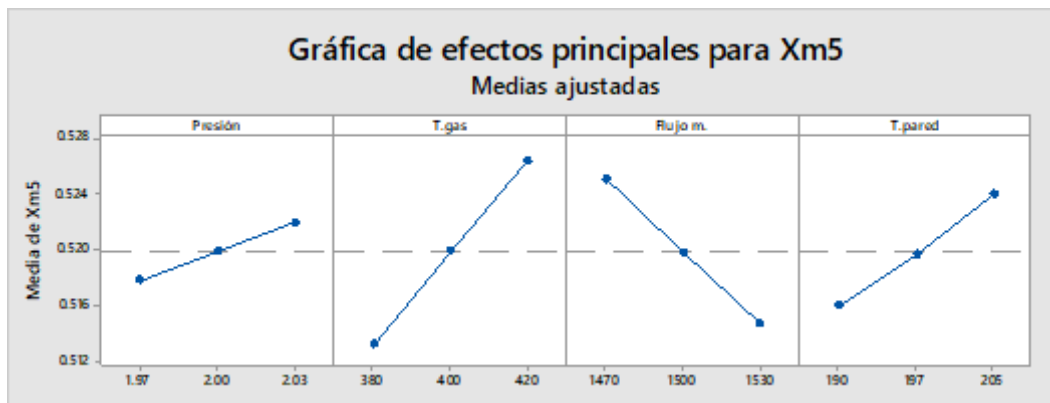
Efectos principales de la cuarta etapa del proceso de conversión



Fuente: *Elaborado con Minitab*

Figura 29

Efectos principales de la quinta etapa del proceso de conversión.



Fuente: Elaborado con Minitab

Se observa similitud en las tendencias por lo que las condiciones óptimas para cada etapa son:

$$Etapa\ 2,3,4,5:\begin{bmatrix} Presión \\ Tgas \\ Flujo\ m. \\ Radio \\ Tpared \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.03 \\ 420 \\ 1470 \\ 0.0229 \\ 205 \end{bmatrix}$$

V. Discusión de resultados

Discusión

Contrastación con la Hipótesis

A través del modelamiento matemático y la simulación del reactor de oxidación catalítica se ha logrado determinar las condiciones de operación óptimas para el proceso de conversión de SO_2 en el reactor catalítico de lecho fijo, reduciendo una emisión de 65000 ppm a 429 ppm en cinco etapas de proceso lo que permitió optimizar el rendimiento químico del proceso de conversión de dióxido de azufre, proveniente de la tostación de minerales sulfurados, obteniendo una conversión en la quinta corrida del 99.34%

Los resultados de la presente investigación fueron contrastados frente a los diferentes autores, donde se obtuvo:

Contraste con otros autores

Asensio (2017) Desarrolló la técnica de fluido dinámica computacional para la simulación de reactores de lecho fijo, centrado en la experimentación virtual con la cual determinó coeficientes de transferencia de calor y masa para un proceso químico.

En esta investigación se utilizó el método de diferencias finitas aplicado a un sistema EDP, que, mediante la programación en Matlab, fue posible la simulación del proceso, centrado en la optimización de la conversión química.

Parra (2017) Desarrolló el modelamiento de una planta de ácido sulfúrico basado en las ecuaciones de Josep Mathew King, determinando mediante la técnica de bosques aleatorios la configuración óptima para la temperatura en cuatro etapas de [415, 430, 430, 430] °C, obteniendo un grado de conversión de 97.6%.

En esta investigación se desarrolló el modelamiento del reactor de lecho fijo para la conversión de SO₂ basado en las ecuaciones de conservación de masa y energía, determinado la condición óptima para presión=1.98 atm, temperatura de alimentación=420 °C, flujo másico=1520 Kg/m²h, radio=0.0229 m, y temperatura en la pared = 205 °C, que en 4 etapas alcanzó una conversión de 98.57%.

Pernett-Bolaño et al., (2016) Desarrolló el modelamiento de un reactor catalítico de lecho fijo, determinando que la composición de SO₂ en la alimentación influye significativamente en la conversión, y que al ajustar la temperatura de alimentación se logra un aumento en la conversión, donde alcanzó el 70% de conversión para la primera etapa de proceso.

En esta investigación, de la experimentación virtual del reactor de lecho fijo, se determinó que la presión, flujo másico y el radio del reactor influyen significativamente en el proceso de conversión, alcanzando una conversión de 93.08% para la primera etapa.

Molina (2013) desarrolló una técnica de resolución de un modelo complejo de predicción de contaminantes en la atmosfera, en el cual aplico el método de volúmenes y diferencias finitos de alto orden, logrando una solución aceptable en cuanto a su precisión.

En esta investigación se utilizó la técnica de elementos finitos para la resolución de un modelo en derivadas parciales EDP. Logrando una solución estable que se evidencia en los perfiles de conversión y temperatura de la reacción del SO₂.

Arteaga-Weil y Zegada-Escóbar (2008) Desarrollaron dos modelos matemáticos para el proceso de conversión de SO₂, centrándose en el tipo de cinética: pseudohomogénea, heterogénea, y la geometría: unidimensional, bidimensional; determinando que el modelo unidimensional pseudohomogeneo es el más conveniente para su uso en cuestión de costos de cálculo y porque reproduce satisfactoriamente los resultados de conversión final.

En esta investigación se desarrolló un modelo bidimensional pseudohomogeneo para la conversión de SO₂ logrando la sistematización de la solución mediante la programación, y además permitiendo la optimización a diversas condiciones que se pudieran plantear, lo que lo convierte en una solución versátil, reproduciendo satisfactoriamente los resultados de conversión a la salida del reactor.

VI. Conclusiones

- Las condiciones óptimas de operación del reactor catalítico para controlar las emisiones de dióxido de azufre durante el proceso de conversión para la producción del ácido sulfúrico para la simulación se determinaron en: (a) para la primera etapa [Presión=1,98 atm; Temperatura en la alimentación=420°C; Flujo másico=1520 Kg/m²s; Radio=0.0229; Temperatura en la pared =205 °C] logrando una conversión por etapa de X=93.08%; y (b) para las etapas 2,3,4 y 5, la condición fue: [Presión=2,03 atm; Temperatura en la alimentación=420°C; Flujo másico=1470 Kg/m²s; Radio=0.0229; Temperatura en la pared =205 °C] logrando una conversión total de X=99.34%. Cambiando el tipo de catalizador, la geometría del reactor, etc. puede verse afectado el rendimiento de la conversión.
- El modelamiento del proceso de conversión de dióxido de azufre en un reactor catalítico de lecho fijo durante el proceso de conversión para la producción del ácido sulfúrico, se generó mediante el análisis de las ecuaciones de conservación de materia y energía que fue resuelto utilizando la técnica de diferencias finitas y se simuló por computadora; lo que lleva a aplicar el diseño factorial de experimentos.
- La metodología de superficie de respuesta utilizada en la optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre fue la más apropiada pues se logró determinar regiones de conversión alta hasta del 99.34% de dióxido de azufre para las cinco etapas del proceso de conversión catalítica, lo que se traduce en una reducción de emisiones a la atmosfera.

- El presente trabajo presenta una alternativa a las empresas responsables en el rubro de la minería al optimizar el proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente del proceso de tostación de minerales sulfurados aplicando la metodología estudiada y orientando al control de los aspectos ambientales.

VII. Recomendaciones

- Aplicar el método de superficie de respuesta (MSR) en casos específicos orientados a la optimización de procesos químicos, se puede apoyar en el modelamiento matemático para así poder aplicar las técnicas de simulación con la finalidad de obtener regiones optimas de operación.
- Basándose en las condiciones óptimas del reactor catalítico, se propone realizar la experimentación para nuevas variables que pueden afectar al rendimiento de la conversión, las cuales pueden ser: cambiar de tipo de catalizador, la geometría del reactor, etc.
- Se propone el estudio del proceso de conversión catalítica a diferentes escalas aplicando las metodologías estudiadas en la investigación orientado al control de los aspectos ambientales de las actividades de minería, petróleo y gas como una alternativa para la toma de decisiones y proyección de las operaciones.

VIII. Referencias

- Arteaga Weil, L., & Zegada Escóbar, S. (2008). Modelación de un convertidor de SO₂. *Investigación & Desarrollo*, 1(8), 109-129. <https://doi.org/10.23881/idupbo.008.1-8i>
- AN ENVIRONMENTAL LIFE CYCLE ASSESSMENT OF AN - ProQuest. (n.d.). Recuperado el 24 de agosto de 2021, de <https://www.proquest.com/docview/2439621516/A3D9798485654238PQ/88>
- Asensio, D. A. (2017). *Modelado de reactores de lecho fijo de baja relación de aspecto asistido por Fluidodinámica Computacional (CFD)* (Tesis doctoral). Universidad Nacional de la Plata, La Plata, Argentina. http://sedici.unlp.edu.ar/bitstream/handle/10915/65182/Documento_completo.pdf-PDFA.pdf?sequence=1&isAllowed=y
- Bolaño, L. P., Ochoa Martínez, I. A., Robledo Barrios, M. E., & Durán, C. A. R. (2016). *Modelamiento y simulación de un reactor catalítico para la oxidación de SO₂ a SO₃, utilizando V₂O₅ como catalizador Modeling and simulation of a catalytic reactor for the oxidation of SO₂ to SO₃, using V₂O₅ as catalyst*. 14(1), 39–46. <https://doi.org/10.15665/rp.v14i1.647>
- Brand, H. (1996). Thermal expansivity of sulfuric acid tetrahydrate. *Atmos. Chem. Phys*, 100, 7351–7358.
- Carrasco, L., Castañeda, L., & Candiotti, S. (2013). *Oxidación del dióxido de azufre con aire en un reactor tubular de lecho fijo no adiabático*. Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Callao, 30.
- Carrasco Venegas, L. (2012). *Simulación del tratamiento de gases residuales que contienen dióxido de azufre*. *The Biologist (Lima)*, 2012, vol. 10, ene-jun, suplemento especial.
- Carrasco Venegas, L. A. (2018). *Modelamiento de los fenómenos de transporte* (1.^a ed.). Lima, Perú: Editorial Macro.
- Contreras Fierro, C. G., Ulloa Menares, P., & Ibarra Fernández, C. (2011). *Programa para el control de las emisiones al aire del sector industrial 2010 – 2014*. Santiago, Chile.
- Choi, J. S., Shin, Y. J., Lee, K. Y., Yun, Y. S., & Choi, J. H. (2014). *Pump design and computational fluid dynamic analysis for high temperature sulfuric acid transfer system*. *Nuclear Engineering and Technology*, 46(3), 363–372. <https://doi.org/10.5516/NET.02.2014.011>
- Dada, L., Ylivinkka, I., Baalbaki, R., Li, C., Guo, Y., Yan, C., Yao, L., Sarnela, N., Jokinen, T., Daellenbach, K. R., Yin, R., Deng, C., Chu, B., Nieminen, T., Wang, Y., Lin, Z., Thakur, R. C., Kontkanen, J., Stolzenburg, D., ... Kulmala, M. (2020). Sources and sinks driving sulfuric acid concentrations in contrasting environments:

Implications on proxy calculations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 20(20), 11747–11766. <https://doi.org/10.5194/ACP-20-11747-2020>

- Durán, R. P. (n.d.). *Revista Metalúrgica N° 33, 2013, Carrera de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales, UTO Conversión de SO₂ a azufre elemental sin generación de contaminantes usando BaS-BaSO₄ Conversion of SO₂ to elemental sulfur without generating pollutants using BaS-BaSO₄*.
- Du, B., & Zhang, W. (n.d.). *molecules Theoretical Insight into the Reaction Mechanism and Kinetics for the Criegee Intermediate of anti-PhCHOO with SO₂*. <https://doi.org/10.3390/molecules25133041>
- Edgar, T. F., Himmelblau, D. M., & Lasdon, L. S. (2001). *Optimization of chemical processes* (2.^a ed.). Ney York: McGraw-Hill chemical engineering series.
- Fierro, C., Ulloa, P., & Ibarra, C. (2011). *Programa para el control de las emisiones al aire del sector industrial 2010 – 2014*. 1–14. <http://docplayer.es/17996732-Programa-para-el-control-de-las-emisiones-al-aire-del-sector-industrial-2010-2014-version-final-enero-2011.html>
- Fogler, H. S. (2001). *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas* (3.^a ed.). México: Pearson Educación.
- Fogler, H. S., & Gürmen, M. N. (2008). *Professional Reference Shelf: Manufacture of Sulfuric Acid, Steady-State Nonisothermal Reactor Design*. Recuperado de Elements of chemical reaction engineering website: www.umich.edu/~elements/08chap/html/sulfuricacid.pdf%0D
- Froment, G. F., & Bischoff, K. B. (1979). *Chemical Reactor Analysis and Design*. New York: John Wiley & Sons.
- García Ochoa, F., Borrachero, C. D., & Molina, G. (1992). *Simulación de reactores de lecho fijo por el modelo de dos dimensiones: I-Reacciones simples. Anales de Química, 88(2)*, 180-184.
- Greenwood, N. N., & Earnshaw, A. (1997). *Química de los Elementos* (2.^a ed.). Butterworth-Heinemann.
- Gmitro, J. I., & Vermeulen, T. (1963). *Vapor-Liquid Equilibria for Aqueous Sulfuric Acid*. <https://doi.org/10.2172/876220>
- Gutiérrez Pullido, H., & de la Vara Salazar, R. (2008). *Análisis y diseño de experimentos* (2.^a ed.). México: McGraw-Hill/Interamericana Editores
- Hanif, M. A., Ibrahim, N., Aishah, &, & Jalil, A. (n.d.). *Sulfur dioxide removal: An overview of regenerative flue gas desulfurization and factors affecting desulfurization capacity and sorbent regeneration*. <https://doi.org/10.1007/s11356-020-09191-4/Published>
- Hernández Sampieri, R., Fernández Collado, C., & Baptista Lucio, M. del P. (2014). *Metodología de la investigación* (6.^a ed.). México: McGraw-Hill/Interamericana Editores.

- Helesh, A., & Yavorskiy, V. (2016). MATHEMATICAL MODELING OF THE SULFURIC ACID DROPS EVAPORATION. *EUREKA: Physics and Engineering*, 1, 67–73. <https://doi.org/10.21303/2461-4262.2016.00028>
- Jiménez Gutiérrez, A. (2003). *Diseño de procesos en ingeniería química*. Celaya, Guanajuato. México: Editorial Reverté S.A.
- King, M. J., Davenport, W. G., & Moats, M. S. (2013). *Sulfuric Acid Manufacture Analysis, Control, and Optimization* (2.^a ed.). San Diego, California: Elsevier.
- Kiss, A. A., Bildea, C. S., & Verheijen, P. J. T. (2006). Optimization studies in sulfuric acid production. *Computer Aided Chemical Engineering*, 21(C), 737–742. [https://doi.org/10.1016/S1570-7946\(06\)80133-1](https://doi.org/10.1016/S1570-7946(06)80133-1)
- Lahmadi, A., & Jbili, A. (2016). Story of an HRS Sulfuric Acid Unit. *Procedia Engineering*, 138, 481–486. <https://doi.org/10.1016/J.PROENG.2016.02.107>
- Martínez Sifuentes, V. H., Alonso Dávila, P. A., López Toledo, J., Salado Carbajal, M., & Rocha Uribe, J. A. (2003). *Simulación de Procesos en Ingeniería Química* (1.^a ed.). México D.F.: Plaza y Valdés S.A.
- Ministerio del Ambiente. (2014). *Informe nacional de la calidad del aire 2013-2014*. Recuperado de minam.gob.pe/wp-content/uploads/2016/07/Informe-Nacional-de-Calidad-del-Aire-2013-2014.pdf
- Molina Jiménez, P. (2013). *Simulación numérica de un problema de contaminación atmosférica* (Tesis doctoral). Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España.
- Neitola, K., Brus, D., Makkonen, U., Sipilä, M., Mauldin, R. L., Sarnela, N., Jokinen, T., Lihavainen, H., & Kulmala, M. (2015). Total sulfate vs. sulfuric acid monomer concentrations in nucleation studies. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 15(6), 3429–3443. <https://doi.org/10.5194/ACP-15-3429-2015>
- Organización Mundial de la Salud. (2006). *Guías de calidad del aire de la OMS relativas al material particulado, el ozono, el dióxido de nitrógeno y el dióxido de azufre*. Ginebra, Suiza.
- Occupational exposures to mists and vapours from strong inorganic acids; and other industrial chemicals. (1992). *IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans*, 54, 1–310.
- Parra Gallegos, V. I. (2017). *Estudio para maximizar la eficiencia de conversión del reactor de la planta de ácido sulfúrico n°1 de la Fundición de Caletones* (Tesis de pregrado). Universidad de Concepción, Concepción, Chile.
- Pernett Bolaño, L., Ochoa Martínez, I., Robledo Barrios, M., & Rueda Durán, C. A. (2016). Modelamiento y simulación de un reactor catalítico para la oxidación de SO₂ a SO₃, utilizando V₂O₅ como catalizador. *Prospect.*, 14(1), 39-46. <https://doi.org/10.15665/rp.v14i1.647>
- Perú. (1996). RESOLUCION MINISTERIAL N° 315-96-EM/VMM APRUEBA NIVELES MAXIMOS PERMISIBLES DE ELEMENTOS Y COMPUESTOS PRESENTES

EN EMISIONES GASEOSAS PROVENIENTES DE LAS UNIDADES MINERO-METALURGICAS. *Fondo Nacional del Ambiente - Perú*, 5-6.

Perú. (2001). DECRETO SUPREMO N° 074-2001-PCM REGLAMENTO DE ESTANDARES NACIONALES DE CALIDAD AMBIENTAL DEL AIRE. *Ministerio de Salud - Dirección General de Salud Ambiental e Inocuidad Alimentaria*, 13-14.

Perú. (2008). DECRETO SUPREMO N°003 -2008-MINAM APRUEBAN ESTÁNDARES DE CALIDAD AMBIENTAL PARA AIRE. *Ministerio del Ambiente*, 4.

PERUMIN 31 Convención Minera. (2013). Minería oportunidad de inclusión y desarrollo social. Recuperado de <https://www.convencionminera.com/perumin31/news/23.html>

Plasencia Sánchez, E., & Cabrera Carranza, C. (2009). Niveles de dióxido de azufre en La Oroya . Análisis histórico y perspectivas. *Revista del Instituto de Investigaciones FIGMMG*, 12(24), 64-68.

Quintana-Solórzano, R., Neri-Gómez, · A A, Armendáriz-Herrera, · H, & Valente, J. S. (2013). Manufacture Process Scale-Up and Industrial Testing of Novel Catalysts for SO_x Emissions Control in FCC Units. *Catalysis Letters*, 149, 272–282. <https://doi.org/10.1007/s10562-018-2596-9>

Ramírez Serrano, A. (2007). *Modelamiento tridimensional de reactores catalíticos con membranas e intercambio de calor* (Tesis doctoral). Instituto Tecnológico de Celaya, Guanajuato, México.

Rosas, S., Luna, C., Sánchez, O., & Ortiz, E. (2007). Production of Sulphuric Acid by Treatment of Residual Gases Generated by Pyrite Roasting. *Información Tecnológica*, 18(4)

Telun, F. (2010). *Experimental study of preparing sulfuric acid from sulfur dioxide using catalytic photosynthesis method*.

Vargas Cordero, Z. R. (2009). La Investigación aplicada: Una forma de conocer las realidades con evidencia científica. *Revista Educación*, 33(1), 155-165. <https://doi.org/10.15517/revedu.v33i1.538>

Wahoud, A., Alouche, A., & Abdulbake, M. (2011). Sulfuric acid baking and leaching of spent sulfuric acid catalyst. *Periodica Polytechnica Chemical Engineering*, 55(1), 31–34. <https://doi.org/10.3311/PP.CH.2011-1.06>

IX. Anexos

Anexo A: Matriz de consistencia

“OPTIMIZACION DEL PROCESO DE CONVERSION DEL DIOXIDO DE AZUFRE PROVENIENTE DE LOS PROCESOS DE TOSTACION DE MINERALES SULFURADOS A TRAVES DEL MODELAMIENTO Y SIMULACION”

PROBLEMA	OBEJTIVO	HIPOTESIS	VARIABLES	INDICADORES	METODO
General	General	General	Dependiente		
¿Cómo debe ser el modelo y la simulación para optimizar el proceso la conversión del dióxido de azufre proveniente del proceso de tostación de minerales sulfurados?	Optimizar el proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente del proceso de tostación de minerales sulfurados a través del modelamiento y simulación.	El modelamiento matemático y la simulación del reactor de oxidación catalítica permitirán optimizar el rendimiento químico del proceso de conversión de dióxido de azufre, proveniente de la tostación de minerales sulfurados	X1: Condiciones de operación del proceso de conversión del dióxido de azufre. X2: Métodos matemáticos para la resolución de modelos físicos planteados.	x1: Valores de las variables dentro de los límites esperados x2: Rangos de los valores de las variables dentro de los límites esperados	Asignación de diferentes condiciones de operación al programa desarrollado que permite obtener la mayor conversión del dióxido de azufre Método de relación matemática
Específico	Específico	Específico	Independiente		
a. ¿Cuáles son las condiciones de operación para controlar las emisiones de dióxido de azufre durante el proceso de conversión? b. ¿Cuál es la metodología más apropiada para optimizar el proceso de conversión de dióxido de azufre para evitar la contaminación ambiental c. ¿Cuál es la metodología más apropiada para la optimización de la conversión del dióxido de azufre a fin evitar la contaminación ambiental?	a. Determinar las condiciones de operación para controlar las emisiones de dióxido de azufre durante el proceso de conversión del ácido sulfúrico. b. Determinar la metodología más apropiada para simular el proceso de conversión del dióxido de azufre durante el proceso de conversión. c. Determinar la metodología más apropiada para la optimización de la conversión del dióxido de azufre a fin evitar la contaminación ambiental.	a. Las condiciones esenciales de operación: presión, temperatura de alimentación, flujo de reactantes, radio y temperatura en la pared del reactor permitirán la optimización del proceso de conversión de dióxido de azufre. b. El diseño factorial completo es la metodología que permitirá mediante la simulación obtener los valores máximos de conversión. c. El método de superficie de respuesta es la metodología más apropiada que permitirá a partir del modelo matemático la optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre.	Y: Modelamiento y simulación del proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente de la tostación de minerales sulfurados.	Conversión de dióxido de azufre cercana a la unidad	El método de solución está basado en la delineación de las necesidades de operación

Anexo B: Validación y confiabilidad de instrumentos

Validación del instrumento

VALIDEZ

Una vez que los modelos sean desarrollados y se implementen los algoritmos necesarios para la resolución numérica de sus ecuaciones diferenciales, se llevaran a cabo una serie de experimentos para validar los resultados obtenidos de la simulación y analizar el grado de descripción del proceso que se obtienen mediante estos modelos.

Para Determinar la validez de los instrumentos se utilizará la prueba estadística apropiada.

En cuanto a los instrumentos usados se realizará la validación por expertos quienes consideraran que el instrumento contiene los reactivos suficientes y necesarios.

Como se construirá un modelo de simulación se recomienda validarlo para evaluar que tan bien está representando al sistema real, así como para identificar deficiencias en la formulación del modelo. Las formas más comunes de validar un modelo son:

- a) La opinión de los ingenieros en la planta respecto a los resultados de la simulación,
- b) La exactitud con que se predicen datos históricos.
- c) La comprobación de la falla del modelo de simulación al utilizar datos que hacen fallar al sistema real, y

d) ligado al punto (a) está la aceptación y confianza en el modelo de la persona que hará uso de los resultados que arroje el modelo de simulación (Kelto et al., 2002).

La validación de este modelo se llevará a cabo también mediante la comparación con datos históricos proporcionados por literatura bibliográfica y por las plantas de producción de ácido sulfúrico.

La validez de los instrumentos y para la generación de escenarios requiere un estudio estadístico de las variables, para determinación de sus valores y probabilidades de ocurrencia y se detallara siguiendo el siguiente esquema:

Si $p \leq 0.01$ (1%) \Rightarrow Altamente significativa

Si $p \leq 0.05$ (5%) \Rightarrow Significativa

Si $p > 0.05$ (5%) \Rightarrow No significativa

El instrumento es válido.

Anexo C: Nomenclatura del modelamiento

Der: Coeficiente de difusión efectiva radial, m^2/s

Dez: Coeficiente de difusión efectiva axial, m^2/s

US: Velocidad superficial de la fase gaseosa, m/s

ν_{ij} : Coeficiente estequiométrico del componente i en la reacción j

ν_A : Coeficiente estequiométrico del componente A

r_i : Velocidad de reacción

r_A : Velocidad de reacción del componente A

k_{er} : Conductividad efectiva radial, $W/m^2 \cdot ^\circ C$

k_{ez} : Conductividad efectiva axial, $W/m^2 \cdot ^\circ C$

G: Velocidad másica de flujo, kg/m^2s

r: Coordenada radial, m

z: Coordenada axial, m

CA: Concentración del componente A, $kmol/m^3$

T_w : Temperatura de la pared, $^\circ C$

T: Temperatura variable del sistema, $^\circ C$

PeMr: Número de Peclet de masa radial, $USdp/De_r$

PeHr: Número de Peclet de calor radial, $dp \cdot G \cdot C_{pg}/K_{er}$

PeMz: Número de Peclet de masa axial

PeHz: Número de Peclet de calor axial

x: Conversión variable del reactivo limitante

BiW: Número de Biot en la pared

C: Concentración, $kmol/m^3$

C_{pg} : Calor específico de la mezcla a presión constante, $kJ/kg \cdot ^\circ C$

DT: Diámetro del tubo, m.

Dp: Diámetro de la partícula del catalizador, m

hW: Coeficiente de transmisión de calor en la pared del lecho, $\text{kJ/m}^3\text{s}^\circ\text{C}$

ki: Constante cinética

LT: Longitud del tubo, m

n: número de puntos de colocación

P: Presión en bar o atm.

RT: Radio del tubo, m

Ri: Velocidad de reacción, kmol/kg cat s

r: Posición radial dimensional, m

T: Temperatura, K o $^\circ\text{C}$

Tini: Temperatura inicial de entrada, K o $^\circ\text{C}$

Tw: Temperatura del fluido de intercambio o de la pared, adimensional

t: Tiempo

y: Fracción molar

z: Posición axial

ε : Porosidad de partícula

μ : Viscosidad de la fase gaseosa,

kgm. spb : Densidad del lecho del catalizador, kg/m^3

ΔH_r : Entalpia de reacción,

ΔH : Calor de reacción, kJ/kmol

Anexo D: Programación en Matlab

Función Sistema de ecuaciones diferenciales

```
function dYfuncvecdz = ODES02(z,Yfuncvec,A1,A2,A3,A4,A5)
%ODES02:
%Esta función es el desarrollo del modelo matemático del reactor de
oxidación catalítica mediante el método de Lines, cuyo funcionamiento se
realiza con los scripts SIMULACION_BLOQUE y SIMULACION_PUNTO.
x0 = Yfuncvec(1);
x1 = Yfuncvec(2);
x2 = Yfuncvec(3);
x3 = Yfuncvec(4);
x4 = Yfuncvec(5);
x5 = Yfuncvec(6);
T0 = Yfuncvec(7);
T1 = Yfuncvec(8);
T2 = Yfuncvec(9);
T3 = Yfuncvec(10);
T4 = Yfuncvec(11);
T5 = Yfuncvec(12);
P = A1; %Presion del sistema A= 1.6 2
Tw = A2; %Temperatura de la pared B= 197 205
G = A3; %Flujo masico C = 1709 1800
Rtubo = A4; %Radio del tubo D= 0.02615 0.03
Tent = A5; %La temperatura de entrada E= 400 420

R = 0.082; %Constante Universl de los gases
df = 0.5864; %Densidad del fluido
Phr = 4.4; %Peclet Calor Radial
Pmr = 9.6; %Peclet Masa Radial
Bi = 6.67; %Numero de Biot de la pared
dp = 0.003175; %Densidad del Catalizador
E = 0.5; %Porosidad del Lecho catalitico
db = 1025; %Densidad del lecho
Us = G / df; %Velocidad
dH = -94886; %Entalpia
Cpf = 1.09; %Capacidad Calorifica del Fluido
dr = Rtubo / 5; %Espaciamiento Radial 5*dr=Radio,

ya = 0.065;
Tin = Tent + 273.15;
Pao = P * ya;
Cao = Pao / (R * Tin);
Pbo = (1 - ya) * P * 0.21;
pi1 = E * Us * dp / (Us * Pmr);
pi2 = db / (Us * Cao);
pi3 = dp / Phr;
pi4 = 0 - (dH * db / (Us * df * Cpf));
K10 = exp(12.16 - (5473 / (T0 + 273.15)));
K20 = exp(-9.953 + 8619 / (T0 + 273.15));
K30 = exp(-71.745 + 52596 / (T0 + 273.15));
Kp0 = exp(11300 / (T0 + 273.15) - 10.68);
Pa0 = Pao * (1 - x0);
Pb0 = Pbo - (0.5 * Pao * x0);
Pc0 = Pao * x0;
R0 = K10 * Pb0 * Pa0 * (1 - (Pc0 / (Pa0 * Kp0 * Pb0 ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K20 *
Pa0 + K30 * Pc0) ^ 2);
K11 = exp(12.16 - (5473 / (T1 + 273.15)));
K21 = exp(-9.953 + 8619 / (T1 + 273.15));
K31 = exp(-71.745 + 52596 / (T1 + 273.15));
Kp1 = exp(11300 / (T1 + 273.15) - 10.68);
```

```

Pa1 = Pao * (1 - x1);
Pb1 = Pbo - (0.5 * Pao * x1);
Pc1 = Pao * x1;
R1 = K11 * Pb1 * Pa1 * (1 - (Pc1 / (Pa1 * Kp1 * Pb1 ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K21 *
Pa1 + K31 * Pc1) ^ 2);
K12 = exp(12.16 - (5473 / (T2 + 273.15)));
K22 = exp(-9.953 + 8619 / (T2 + 273.15));
K32 = exp(-71.745 + 52596 / (T2 + 273.15));
Kp2 = exp(11300 / (T2 + 273.15) - 10.68);
Pa2 = Pao * (1 - x2);
Pb2 = Pbo - (0.5 * Pao * x2);
Pc2 = Pao * x2;
R2 = K12 * Pb2 * Pa2 * (1 - (Pc2 / (Pa2 * Kp2 * Pb2 ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K22 *
Pa2 + K32 * Pc2) ^ 2);
K13 = exp(12.16 - (5473 / (T3 + 273.15)));
K23 = exp(-9.953 + 8619 / (T3 + 273.15));
K33 = exp(-71.745 + 52596 / (T3 + 273.15));
Kp3 = exp(11300 / (T3 + 273.15) - 10.68);
Pa3 = Pao * (1 - x3);
Pb3 = Pbo - (0.5 * Pao * x3);
Pc3 = Pao * x3;
R3 = K13 * Pb3 * Pa3 * (1 - (Pc3 / (Pa3 * Kp3 * Pb3 ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K23 *
Pa3 + K33 * Pc3) ^ 2);
K14 = exp(12.16 - (5473 / (T4 + 273.15)));
K24 = exp(-9.953 + 8619 / (T4 + 273.15));
K34 = exp(-71.745 + 52596 / (T4 + 273.15));
Kp4 = exp(11300 / (T4 + 273.15) - 10.68);
Pa4 = Pao * (1 - x4);
Pb4 = Pbo - (0.5 * Pao * x4);
Pc4 = Pao * x4;
R4 = K14 * Pb4 * Pa4 * (1 - (Pc4 / (Pa4 * Kp4 * Pb4 ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K24 *
Pa4 + K34 * Pc4) ^ 2);
K15 = exp(12.16 - (5473 / (T5 + 273.15)));
K25 = exp(-9.953 + 8619 / (T5 + 273.15));
K35 = exp(-71.745 + 52596 / (T5 + 273.15));
Kp5 = exp(11300 / (T5 + 273.15) - 10.68);
Pa5 = Pao * (1 - x5);
Pb5 = Pbo - (0.5 * Pao * x5);
Pc5 = Pao * x5;
R5 = K15 * Pb5 * Pa5 * (1 - (Pc5 / (Pa5 * Kp5 * Pb5 ^ 0.5))) / (22.414 * (1 + K25 *
Pa5 + K35 * Pc5) ^ 2);
T6 = T5 - (Bi * (T5 - Tw) / 5);
x6 = x5;
dx0dz = 2 * pi1 * (x1 - (2 * x0) + x0) / (dr ^ 2) + pi2 * R0;
dx1dz = pi1 * (x2 - (2 * x1) + x0 + (x1 - x0) / 1) / (dr ^ 2) + pi2 * R1;
dx2dz = pi1 * (x3 - (2 * x2) + x1 + (x2 - x1) / 2) / (dr ^ 2) + pi2 * R2;
dx3dz = pi1 * (x4 - (2 * x3) + x2 + (x3 - x2) / 3) / (dr ^ 2) + pi2 * R3;
dx4dz = pi1 * (x5 - (2 * x4) + x3 + (x4 - x3) / 4) / (dr ^ 2) + pi2 * R4;
dx5dz = pi1 * (x6 - (2 * x5) + x4 + (x5 - x4) / 5) / (dr ^ 2) + pi2 * R5;
dT0dz = 2 * pi3 * (T1 - (2 * T0) + T0) / (dr ^ 2) + pi4 * R0;
dT1dz = pi3 * (T2 - (2 * T1) + T0 + (T1 - T0) / 1) / (dr ^ 2) + pi4 * R1;
dT2dz = pi3 * (T3 - (2 * T2) + T1 + (T2 - T1) / 2) / (dr ^ 2) + pi4 * R2;
dT3dz = pi3 * (T4 - (2 * T3) + T2 + (T3 - T2) / 3) / (dr ^ 2) + pi4 * R3;
dT4dz = pi3 * (T5 - (2 * T4) + T3 + (T4 - T3) / 4) / (dr ^ 2) + pi4 * R4;
dT5dz = pi3 * (T6 - (2 * T5) + T4 + (T5 - T4) / 5) / (dr ^ 2) + pi4 * R5;
dYfuncvecdz = [dx0dz; dx1dz; dx2dz; dx3dz; dx4dz; dx5dz; dT0dz; dT1dz; dT2dz; dT3dz;
dT4dz; dT5dz];

```

Script de simulación en bloque

```

%SIMULACION_BLOQUE:
%Este script realiza la simulación de un bloque de diseño experimental el
cual debe ser almacenado dentro del workspace DISEÑO ccn el nombre BLOQUE y
contener la tabla de diseño experimental en el siguiente orden:
%BLOQUE:
%[Presion, T. gas, Flujo m., Radio, T. pared]

load('DISEÑO.mat')
tspan = [0 0.1524]; % Distancia del reactor
y0 = [0; 0; 0; 0; 0; 0; 400.; 400.; 400.; 400.; 400.; 400.]; % Valores
iniciales
[a,b]=size(BLOQUE);
U=zeros(a,4);

for h=1:a

    variable=BLOQUE(h,:);
    A1=variable(1);
    A2=variable(2);
    A3=variable(3);
    A4=variable(4);
    A5=variable(5);

    [t,y]=ode45(@(t,y) ODES02(t,y,A1,A2,A3,A4,A5), tspan, y0);
    X=y(1:end,1:6);
    T=y(1:end,7:12);

    Xs=X(end,:);
    Ts=T(end,:);

    Xm=(5/288*(A4/5)*(19*Xs(1)+75*Xs(2)+50*Xs(3)+50*Xs(4)+75*Xs(5)+19*Xs(
6)))/A4;
    Tm=(5/288*(A4/5)*(19*Ts(1)+75*Ts(2)+50*Ts(3)+50*Ts(4)+75*Ts(5)+19*Ts(
6)))/A4;

    U(h)=max(max(X(end,:)));
    U(h,2)=max(max(T(end,:)));
    U(h,3)=Xm;
    U(h,4)=Tm;
    save(['sol',num2str(h)], 't', 'X', 'T')

end
save('RESPUESTA_BLOQUE', 'U')
clear

```

Script de simulación individual

```

%SIMULACION_PUNTO:
%Con este script se introduce la coordenada de un punto de verificación
PUNTO=[Presión, T.gas, Flujo m., Radio, T.pared] para la simulación
del modelo matemático del reactor de oxidación catalítica de SO2, el cual
debe estar almacenado en el workspace DISEÑO

```

```

load('DISEÑO.mat')
%PUNTO=[1.98,420,1520,0.0229,190]; % Punto de verificación
tspan = [0 0.1524]; % Distancia del reactor
y0 = [0; 0; 0; 0; 0; 0; 400.; 400.; 400.; 400.; 400.; 400.]; % Valores
iniciales
A1=PUNTO(1);
A2=PUNTO(2);
A3=PUNTO(3);
A4=PUNTO(4);
A5=PUNTO(5);

[t,y]= ode45(@(t,y) ODES02(t,y,A1,A2,A3,A4,A5), tspan, y0);
X=y(1:end,1:6);
T=y(1:end,7:12);

Xs=X(end,:);
Ts=T(end,:);

Xm=(5/288*(A4/5)*(19*Xs(1)+75*Xs(2)+50*Xs(3)+50*Xs(4)+75*Xs(5)+19*Xs(6)))/A
4;
Tm=(5/288*(A4/5)*(19*Ts(1)+75*Ts(2)+50*Ts(3)+50*Ts(4)+75*Ts(5)+19*Ts(6)))/A
4;

Xsmax=max(max(X(end,:)));
Tsmax=max(max(T(end,:)));

save('RESPUESTA_PUNTO','t','X','T','Xsmax','Tsmax','Xm','Tm','PUNTO')
clear

```


Diseño de superficie de respuesta

Regresión de superficie de respuesta: X vs. Presion; Flujo ... sico; Radio

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	9	0.001929	0.000214	15.56	0.004
Lineal	3	0.000097	0.000032	2.36	0.188
Presion	1	0.000029	0.000029	2.12	0.205
Flujo másico	1	0.000058	0.000058	4.22	0.095
Radio	1	0.000010	0.000010	0.73	0.433
Cuadrado	3	0.001637	0.000546	39.61	0.001
Presion*Presion	1	0.000000	0.000000	0.00	0.950
Flujo másico*Flujo másico	1	0.000000	0.000000	0.03	0.879
Radio*Radio	1	0.001620	0.001620	117.65	0.000
Interacción de 2 factores	3	0.000195	0.000065	4.73	0.064
Presion*Flujo másico	1	0.000000	0.000000	0.01	0.927
Presion*Radio	1	0.000091	0.000091	6.63	0.050
Flujo másico*Radio	1	0.000104	0.000104	7.54	0.041
Error	5	0.000069	0.000014		
Falta de ajuste	3	0.000069	0.000023	*	*
Error puro	2	0.000000	0.000000		
Total	14	0.001998			

Resumen del modelo

S	R-cuad.	R-cuad. (ajustado)	R-cuad. (pred)
0.0037113	96.55%	90.35%	44.86%

Coefficientes codificados

Término	Coef	EE del coef.	Valor T	Valor p	FIV
Constante	0.92960	0.00214	433.84	0.000	
Presion	0.00191	0.00131	1.46	0.205	1.00
Flujo másico	-0.00270	0.00131	-2.05	0.095	1.00
Radio	-0.00112	0.00131	-0.85	0.433	1.00
Presion*Presion	0.00013	0.00193	0.07	0.950	1.01
Flujo másico*Flujo másico	-0.00031	0.00193	-0.16	0.879	1.01
Radio*Radio	-0.02095	0.00193	-10.85	0.000	1.01
Presion*Flujo másico	0.00018	0.00186	0.10	0.927	1.00
Presion*Radio	-0.00478	0.00186	-2.57	0.050	1.00
Flujo másico*Radio	0.00509	0.00186	2.75	0.041	1.00

Ecuación de regresión en unidades no codificadas

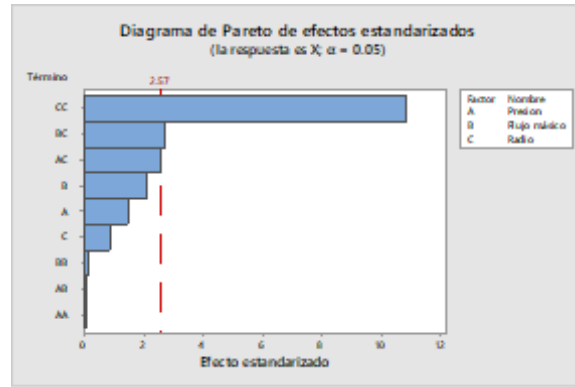
$$X = -11 + 3.6 \text{ Presion} - 0.0061 \text{ Flujo másico} + 1130 \text{ Radio} + 1.3 \text{ Presion*Presion} \\ - 0.000003 \text{ Flujo másico*Flujo másico} - 20949 \text{ Radio*Radio} + 0.0018 \text{ Presion*Flujo másico} \\ - 478 \text{ Presion*Radio} + 0.509 \text{ Flujo másico*Radio}$$

Ajustes y diagnósticos para observaciones poco comunes

Obs	X	Ajuste	Resid	Resid est.	R
2	0.92973	0.93385	-0.00412	-2.22	R
3	0.92876	0.92463	0.00412	2.22	R

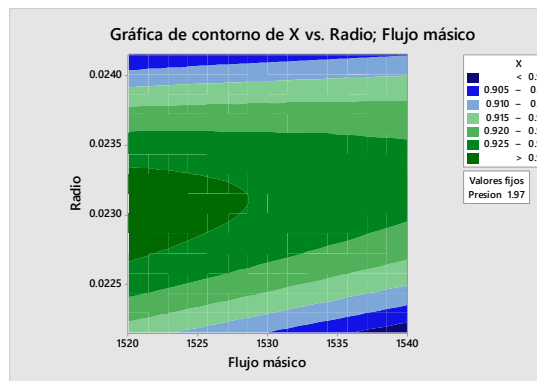
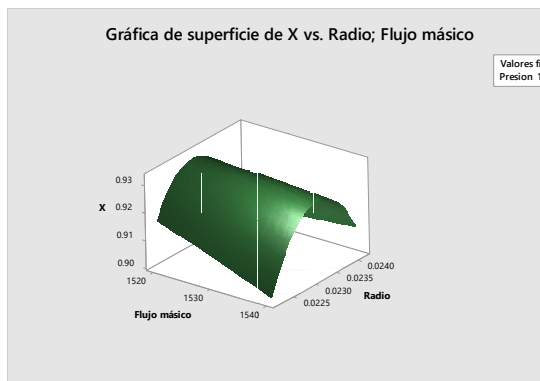
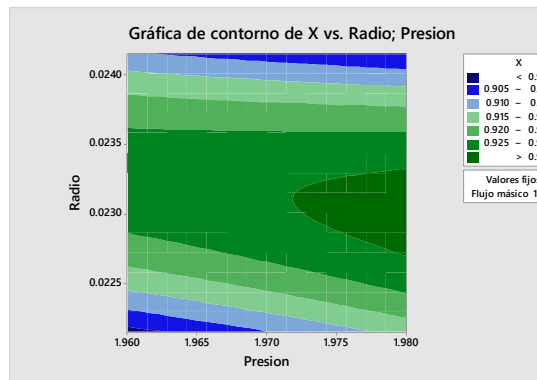
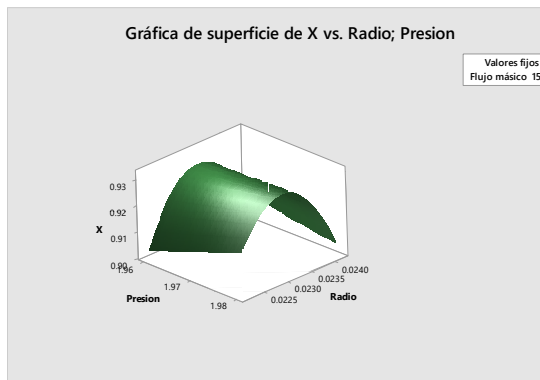
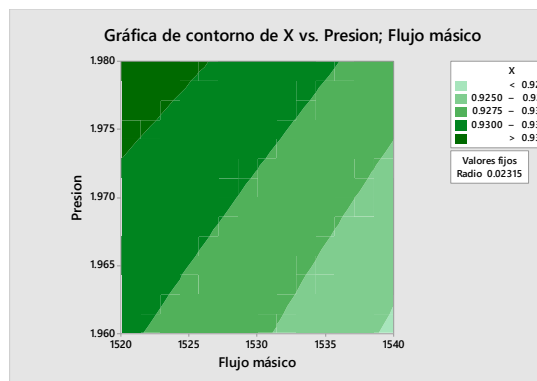
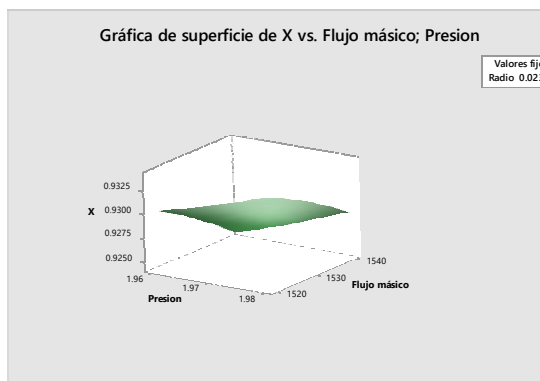
Residuo grande R

Pareto de los efectos para X



Gráficas de superficie

Gráficas de contorno



Resultados del análisis de varianza para la simulación de las etapas 2, 3, 4 y 5 de proceso en el reactor

Etapa 2

Regresión factorial general: Xm vs. Presión; T.gas; Flujo m.; T.pared

Información del factor

Factor	Niveles	Valores
Presión	3	1.97; 2.00; 2.03
T.gas	3	380; 400; 420
Flujo m.	3	1470; 1500; 1530
T.pared	3	190; 197; 205

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p.
Modelo	8	0.002462	0.000308	68244.66	0.000
Lineal	8	0.002462	0.000308	68244.66	0.000
Presión	2	0.000268	0.000134	29726.89	0.000
T.gas	2	0.000474	0.000237	52532.72	0.000
Flujo m.	2	0.001160	0.000580	128592.11	0.000
T.pared	2	0.000560	0.000280	62126.91	0.000
Error	72	0.000000	0.000000		
Total	80	0.002462			

Resumen del modelo

S	R-cuad.	R-cuad. (ajustado)	R-cuad. (pred)
0.0000672	99.99%	99.99%	99.98%

Coefficientes

Término	Coef	EE del coef.	Valor T	Valor p.	FIV
Constante	0.345825	0.000007	46349.42	0.000	
Presión					
1.97	-0.002224	0.000011	-210.79	0.000	1.33
2.00	-0.000008	0.000011	-0.75	0.454	1.33
T.gas					
380	-0.002973	0.000011	-281.76	0.000	1.33
400	0.000022	0.000011	2.11	0.038	1.33
Flujo m.					
1470	0.004660	0.000011	441.66	0.000	1.33
1500	-0.000053	0.000011	-4.98	0.000	1.33
T.pared					
190	-0.003117	0.000011	-295.43	0.000	1.33
197	-0.000198	0.000011	-18.81	0.000	1.33

Ecuación de regresión

$$\begin{aligned}
 X_m = & 0.345825 - 0.002224 \text{ Presión}_{1.97} - 0.000008 \text{ Presión}_{2.00} + 0.002232 \text{ Presión}_{2.03} \\
 & - 0.002973 \text{ T.gas}_{380} + 0.000022 \text{ T.gas}_{400} + 0.002951 \text{ T.gas}_{420} + 0.004660 \text{ Flujo m.}_{1470} \\
 & - 0.000053 \text{ Flujo m.}_{1500} - 0.004608 \text{ Flujo m.}_{1530} - 0.003117 \text{ T.pared}_{190} \\
 & - 0.000198 \text{ T.pared}_{197} + 0.003316 \text{ T.pared}_{205}
 \end{aligned}$$

Ajustes y diagnósticos para observaciones poco comunes

Obs	Xm	Ajuste	Resid	Resid est.
25	0.339026	0.338826	0.000200	3.16 R
57	0.353281	0.353060	0.000221	3.49 R
66	0.356187	0.356055	0.000132	2.08 R

Residuo grande R

Pareto de los efectos para Xm

Etapa 3

Regresión factorial general: Xm3 vs. Presión; T.gas; Flujo m.; T.pared

Información del factor

Factor	Niveles	Valores
Presión	3	1.97; 2.00; 2.03
T.gas	3	380; 400; 420
Flujo m.	3	1470; 1500; 1530
T.pared	3	190; 197; 205

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	8	0.003166	0.000396	318509.05	0.000
Lineal	8	0.003166	0.000396	318509.05	0.000
Presión	2	0.000188	0.000094	75739.09	0.000
T.gas	2	0.001166	0.000583	469117.07	0.000
Flujo m.	2	0.001184	0.000592	476596.75	0.000
T.pared	2	0.000628	0.000314	252583.29	0.000
Error	72	0.000000	0.000000		
Total	80	0.003166			

Resumen del modelo

S	R-cuad.	R-cuad. (ajustado)	R-cuad. (pred)
0.0000352	100.00%	100.00%	100.00%

Coefficientes

Término	Coef	EE del coef.	Valor T	Valor p	FIV
Constante	0.413082	0.000004	105473.19	0.000	
Presión					
1.97	-0.001868	0.000006	-337.30	0.000	1.33
2.00	0.000003	0.000006	0.47	0.636	1.33
T.gas					
380	-0.004665	0.000006	-842.31	0.000	1.33
400	0.000038	0.000006	6.95	0.000	1.33
Flujo m.					
1470	0.004705	0.000006	849.50	0.000	1.33
1500	-0.000044	0.000006	-8.03	0.000	1.33
T.pared					
190	-0.003301	0.000006	-595.96	0.000	1.33
197	-0.000207	0.000006	-37.43	0.000	1.33

Ecuación de regresión

$$\begin{aligned}
 \text{Xm3} = & 0.413082 - 0.001868 \text{ Presión}_{1.97} + 0.000003 \text{ Presión}_{2.00} + 0.001866 \text{ Presión}_{2.03} \\
 & - 0.004665 \text{ T.gas}_{380} + 0.000038 \text{ T.gas}_{400} + 0.004627 \text{ T.gas}_{420} + 0.004705 \text{ Flujo m.}_{1470} \\
 & - 0.000044 \text{ Flujo m.}_{1500} - 0.004661 \text{ Flujo m.}_{1530} - 0.003301 \text{ T.pared}_{190} \\
 & - 0.000207 \text{ T.pared}_{197} + 0.003508 \text{ T.pared}_{205}
 \end{aligned}$$

Ajustes y diagnósticos para observaciones poco comunes

Obs	Xm3	Ajuste	Resid	Resid est.	
1	0.407881	0.407953	-0.000072	-2.17	R
25	0.407962	0.407880	0.000082	2.48	R
57	0.418587	0.418496	0.000091	2.73	R
81	0.418351	0.418422	-0.000071	-2.14	R

Residuo grande R

Pareto de los efectos para Xm3

Etapa 4

Regresión factorial general: xm4 vs. Presión; T.gas; Flujo m.; T.pared

Información del factor

Factor	Niveles	Valores
Presión	3	1.97; 2.00; 2.03
T.gas	3	380; 400; 420
Flujo m.	3	1470; 1500; 1530
T.pared	3	190; 197; 205

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p.
Modelo	8	0.003645	0.000456	528693.10	0.000
Lineal	8	0.003645	0.000456	528693.10	0.000
Presión	2	0.000188	0.000094	109109.06	0.000
T.gas	2	0.001515	0.000758	879045.26	0.000
Flujo m.	2	0.001253	0.000627	727228.43	0.000
T.pared	2	0.000688	0.000344	399389.63	0.000
Error	72	0.000000	0.000000		
Total	80	0.003645			

Resumen del modelo

S	R-cuad.	R-cuad. (ajustado)	R-cuad. (pred)
0.0000294	100.00%	100.00%	100.00%

Coefficientes

Término	Coef	EE del coef.	Valor T	Valor p	FIV
Constante	0.445265	0.000003	136513.04	0.000	
Presión					
1.97	-0.001869	0.000005	-405.16	0.000	1.33
2.00	0.000006	0.000005	1.22	0.227	1.33
T.gas					
380	-0.005319	0.000005	-1153.09	0.000	1.33
400	0.000045	0.000005	9.67	0.000	1.33
Flujo m.					
1470	0.004839	0.000005	1049.09	0.000	1.33
1500	-0.000043	0.000005	-9.37	0.000	1.33
T.pared					
190	-0.003457	0.000005	-749.48	0.000	1.33
197	-0.000216	0.000005	-46.92	0.000	1.33

Ecuación de regresión

$$\begin{aligned}
 xm4 = & 0.445265 - 0.001869 \text{ Presión}_{1.97} + 0.000006 \text{ Presión}_{2.00} + 0.001863 \text{ Presión}_{2.03} \\
 & - 0.005319 \text{ T.gas}_{380} + 0.000045 \text{ T.gas}_{400} + 0.005274 \text{ T.gas}_{420} + 0.004839 \text{ Flujo m.}_{1470} \\
 & - 0.000043 \text{ Flujo m.}_{1500} - 0.004796 \text{ Flujo m.}_{1530} - 0.003457 \text{ T.pared}_{190} \\
 & - 0.000216 \text{ T.pared}_{197} + 0.003674 \text{ T.pared}_{205}
 \end{aligned}$$

Ajustes y diagnósticos para observaciones poco comunes

Obs	xm4	Ajuste	Resid	Resid est.	
1	0.439397	0.439459	-0.000063	-2.27	R
25	0.440474	0.440417	0.000057	2.05	R
57	0.450385	0.450322	0.000063	2.28	R
81	0.451219	0.451280	-0.000062	-2.23	R

Residuo grande R

Pareto de los efectos para xm4

Etapa 5

Regresión factorial general: Xm5 vs. Presión; T.gas; Flujo m.; T.pared

Información del factor

Factor	Niveles	Valores
Presión	3	1.97; 2.00; 2.03
T.gas	3	380; 400; 420
Flujo m.	3	1470; 1500; 1530
T.pared	3	190; 197; 205

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	8	0.004906	0.000613	1433490.36	0.000
Lineal	8	0.004906	0.000613	1433490.36	0.000
Presión	2	0.000230	0.000115	268227.99	0.000
T.gas	2	0.002351	0.001175	2747153.82	0.000
Flujo m.	2	0.001460	0.000730	1705691.13	0.000
T.pared	2	0.000867	0.000433	1012888.48	0.000
Error	72	0.000000	0.000000		
Total	80	0.004907			

Resumen del modelo

S	R-cuad.	R-cuad. (ajustado)	R-cuad. (pred)
0.0000207	100.00%	100.00%	100.00%

Coefficientes

Término	Coef	EE del coef.	Valor T	Valor p	FIV
Constante	0.519805	0.000002	226172.72	0.000	
Presión					
1.97	-0.002067	0.000003	-636.03	0.000	1.33
2.00	0.000011	0.000003	3.46	0.001	1.33
T.gas					
380	-0.006627	0.000003	-2038.92	0.000	1.33
400	0.000059	0.000003	18.04	0.000	1.33
Flujo m.					
1470	0.005220	0.000003	1605.90	0.000	1.33
1500	-0.000042	0.000003	-12.79	0.000	1.33
T.pared					
190	-0.003880	0.000003	-1193.85	0.000	1.33
197	-0.000241	0.000003	-74.18	0.000	1.33

Ecuación de regresión

$$\begin{aligned}
 Xm5 = & 0.519805 - 0.002067 \text{ Presión}_{1.97} + 0.000011 \text{ Presión}_{2.00} + 0.002056 \text{ Presión}_{2.03} \\
 & - 0.006627 \text{ T.gas}_{380} + 0.000059 \text{ T.gas}_{400} + 0.006568 \text{ T.gas}_{420} + 0.005220 \text{ Flujo m.}_{1470} \\
 & - 0.000042 \text{ Flujo m.}_{1500} - 0.005178 \text{ Flujo m.}_{1530} - 0.003880 \text{ T.pared}_{190} \\
 & - 0.000241 \text{ T.pared}_{197} + 0.004121 \text{ T.pared}_{205}
 \end{aligned}$$

Ajustes y diagnósticos para observaciones poco comunes

Obs	Xm5	Ajuste	Resid	Resid est.	
1	0.512403	0.512450	-0.000047	-2.39	R
21	0.533694	0.533647	0.000047	2.40	R
61	0.506222	0.506176	0.000046	2.36	R
81	0.527327	0.527373	-0.000045	-2.32	R

Residuo grande R

Pareto de los efectos para Xm5

Anexo F: Resultados de la experimentación virtual**Diseño Factorial 3⁵**

N° Corrida	Presion	Temperatura de entrada	Flujo másico	Radio	Temperatura en la pared	Conversión a la salida
1	1	380	1500	0.02	190	0.07711
2	1	380	1500	0.02	197	0.07786
3	1	380	1500	0.02	205	0.07876
4	1	380	1500	0.02615	190	0.16030
5	1	380	1500	0.02615	197	0.16295
6	1	380	1500	0.02615	205	0.16619
7	1	380	1500	0.03	190	0.33802
8	1	380	1500	0.03	197	0.34944
9	1	380	1500	0.03	205	0.36318
10	1	380	1709	0.02	190	0.06731
11	1	380	1709	0.02	197	0.06793
12	1	380	1709	0.02	205	0.06867
13	1	380	1709	0.02615	190	0.12856
14	1	380	1709	0.02615	197	0.13029
15	1	380	1709	0.02615	205	0.13240
16	1	380	1709	0.03	190	0.22063
17	1	380	1709	0.03	197	0.22569
18	1	380	1709	0.03	205	0.23203
19	1	380	1800	0.02	190	0.06391
20	1	380	1800	0.02	197	0.06449
21	1	380	1800	0.02	205	0.06518
22	1	380	1800	0.02615	190	0.11904
23	1	380	1800	0.02615	197	0.12054
24	1	380	1800	0.02615	205	0.12238
25	1	380	1800	0.03	190	0.19418
26	1	380	1800	0.03	197	0.19807
27	1	380	1800	0.03	205	0.20290
28	1	400	1500	0.02	190	0.07796
29	1	400	1500	0.02	197	0.07871
30	1	400	1500	0.02	205	0.07961
31	1	400	1500	0.02615	190	0.15960
32	1	400	1500	0.02615	197	0.16213
33	1	400	1500	0.02615	205	0.16526
34	1	400	1500	0.03	190	0.32503
35	1	400	1500	0.03	197	0.33577
36	1	400	1500	0.03	205	0.34894
37	1	400	1709	0.02	190	0.06816
38	1	400	1709	0.02	197	0.06878
39	1	400	1709	0.02	205	0.06953
40	1	400	1709	0.02615	190	0.12879

N° Corrida	Presion	Temperatura de entrada	Flujo másico	Radio	Temperatura en la pared	Conversión a la salida
41	1	400	1709	0.02615	197	0.13048
42	1	400	1709	0.02615	205	0.13254
43	1	400	1709	0.03	190	0.21692
44	1	400	1709	0.03	197	0.22165
45	1	400	1709	0.03	205	0.22756
46	1	400	1800	0.02	190	0.06476
47	1	400	1800	0.02	197	0.06534
48	1	400	1800	0.02	205	0.06603
49	1	400	1800	0.02615	190	0.11946
50	1	400	1800	0.02615	197	0.12094
51	1	400	1800	0.02615	205	0.12274
52	1	400	1800	0.03	190	0.19198
53	1	400	1800	0.03	197	0.19566
54	1	400	1800	0.03	205	0.20022
55	1	420	1500	0.02	190	0.07879
56	1	420	1500	0.02	197	0.07954
57	1	420	1500	0.02	205	0.08043
58	1	420	1500	0.02615	190	0.15896
59	1	420	1500	0.02615	197	0.16142
60	1	420	1500	0.02615	205	0.16442
61	1	420	1500	0.03	190	0.31342
62	1	420	1500	0.03	197	0.32322
63	1	420	1500	0.03	205	0.33560
64	1	420	1709	0.02	190	0.06900
65	1	420	1709	0.02	197	0.06962
66	1	420	1709	0.02	205	0.07036
67	1	420	1709	0.02615	190	0.12904
68	1	420	1709	0.02615	197	0.13069
69	1	420	1709	0.02615	205	0.13270
70	1	420	1709	0.03	190	0.21358
71	1	420	1709	0.03	197	0.21801
72	1	420	1709	0.03	205	0.22355
73	1	420	1800	0.02	190	0.06558
74	1	420	1800	0.02	197	0.06616
75	1	420	1800	0.02	205	0.06685
76	1	420	1800	0.02615	190	0.11989
77	1	420	1800	0.02615	197	0.12134
78	1	420	1800	0.02615	205	0.12311
79	1	420	1800	0.03	190	0.18998
80	1	420	1800	0.03	197	0.19347
81	1	420	1800	0.03	205	0.19780
82	1.6	380	1500	0.02	190	0.11024
83	1.6	380	1500	0.02	197	0.11234
84	1.6	380	1500	0.02	205	0.11504

N° Corrida	Presion	Temperatura de entrada	Flujo másico	Radio	Temperatura en la pared	Conversión a la salida
85	1.6	380	1500	0.02615	190	0.90842
86	1.6	380	1500	0.02615	197	0.90779
87	1.6	380	1500	0.02615	205	0.90638
88	1.6	380	1500	0.03	190	0.87220
89	1.6	380	1500	0.03	197	0.87109
90	1.6	380	1500	0.03	205	0.86976
91	1.6	380	1709	0.02	190	0.08581
92	1.6	380	1709	0.02	197	0.08711
93	1.6	380	1709	0.02	205	0.08868
94	1.6	380	1709	0.02615	190	0.80062
95	1.6	380	1709	0.02615	197	0.82065
96	1.6	380	1709	0.02615	205	0.83768
97	1.6	380	1709	0.03	190	0.86950
98	1.6	380	1709	0.03	197	0.86864
99	1.6	380	1709	0.03	205	0.86749
100	1.6	380	1800	0.02	190	0.07880
101	1.6	380	1800	0.02	197	0.07992
102	1.6	380	1800	0.02	205	0.08128
103	1.6	380	1800	0.02615	190	0.58674
104	1.6	380	1800	0.02615	197	0.62525
105	1.6	380	1800	0.02615	205	0.67210
106	1.6	380	1800	0.03	190	0.86311
107	1.6	380	1800	0.03	197	0.86134
108	1.6	380	1800	0.03	205	0.85921
109	1.6	400	1500	0.02	190	0.11000
110	1.6	400	1500	0.02	197	0.11208
111	1.6	400	1500	0.02	205	0.11464
112	1.6	400	1500	0.02615	190	0.91174
113	1.6	400	1500	0.02615	197	0.91160
114	1.6	400	1500	0.02615	205	0.91105
115	1.6	400	1500	0.03	190	0.87941
116	1.6	400	1500	0.03	197	0.87834
117	1.6	400	1500	0.03	205	0.87708
118	1.6	400	1709	0.02	190	0.08620
119	1.6	400	1709	0.02	197	0.08748
120	1.6	400	1709	0.02	205	0.08902
121	1.6	400	1709	0.02615	190	0.76849
122	1.6	400	1709	0.02615	197	0.79805
123	1.6	400	1709	0.02615	205	0.82250
124	1.6	400	1709	0.03	190	0.87488
125	1.6	400	1709	0.03	197	0.87442
126	1.6	400	1709	0.03	205	0.87363
127	1.6	400	1800	0.02	190	0.07930
128	1.6	400	1800	0.02	197	0.08040

N° Corrida	Presion	Temperatura de entrada	Flujo másico	Radio	Temperatura en la pared	Conversión a la salida
129	1.6	400	1800	0.02	205	0.08174
130	1.6	400	1800	0.02615	190	0.54655
131	1.6	400	1800	0.02615	197	0.58332
132	1.6	400	1800	0.02615	205	0.62870
133	1.6	400	1800	0.03	190	0.87053
134	1.6	400	1800	0.03	197	0.86900
135	1.6	400	1800	0.03	205	0.86712
136	1.6	420	1500	0.02	190	0.10979
137	1.6	420	1500	0.02	197	0.11182
138	1.6	420	1500	0.02	205	0.11427
139	1.6	420	1500	0.02615	190	0.91423
140	1.6	420	1500	0.02615	197	0.91448
141	1.6	420	1500	0.02615	205	0.91446
142	1.6	420	1500	0.03	190	0.88606
143	1.6	420	1500	0.03	197	0.88503
144	1.6	420	1500	0.03	205	0.88383
145	1.6	420	1709	0.02	190	0.08657
146	1.6	420	1709	0.02	197	0.08784
147	1.6	420	1709	0.02	205	0.08936
148	1.6	420	1709	0.02615	190	0.72598
149	1.6	420	1709	0.02615	197	0.76418
150	1.6	420	1709	0.02615	205	0.79986
151	1.6	420	1709	0.03	190	0.87897
152	1.6	420	1709	0.03	197	0.87906
153	1.6	420	1709	0.03	205	0.87878
154	1.6	420	1800	0.02	190	0.07979
155	1.6	420	1800	0.02	197	0.08088
156	1.6	420	1800	0.02	205	0.08219
157	1.6	420	1800	0.02615	190	0.50774
158	1.6	420	1800	0.02615	197	0.54316
159	1.6	420	1800	0.02615	205	0.58660
160	1.6	420	1800	0.03	190	0.87690
161	1.6	420	1800	0.03	197	0.87569
162	1.6	420	1800	0.03	205	0.87411
163	2	380	1500	0.02	190	0.20118
164	2	380	1500	0.02	197	0.21274
165	2	380	1500	0.02	205	0.22863
166	2	380	1500	0.02615	190	0.88406
167	2	380	1500	0.02615	197	0.88801
168	2	380	1500	0.02615	205	0.88581
169	2	380	1500	0.03	190	0.87372
170	2	380	1500	0.03	197	0.87367
171	2	380	1500	0.03	205	0.87344
172	2	380	1709	0.02	190	0.11542

N° Corrida	Presion	Temperatura de entrada	Flujo másico	Radio	Temperatura en la pared	Conversión a la salida
173	2	380	1709	0.02	197	0.11858
174	2	380	1709	0.02	205	0.12257
175	2	380	1709	0.02615	190	0.86721
176	2	380	1709	0.02615	197	0.86523
177	2	380	1709	0.02615	205	0.86302
178	2	380	1709	0.03	190	0.85424
179	2	380	1709	0.03	197	0.84937
180	2	380	1709	0.03	205	0.84425
181	2	380	1800	0.02	190	0.09990
182	2	380	1800	0.02	197	0.10215
183	2	380	1800	0.02	205	0.10507
184	2	380	1800	0.02615	190	0.87136
185	2	380	1800	0.02615	197	0.86788
186	2	380	1800	0.02615	205	0.86435
187	2	380	1800	0.03	190	0.85979
188	2	380	1800	0.03	197	0.85759
189	2	380	1800	0.03	205	0.85355
190	2	400	1500	0.02	190	0.19323
191	2	400	1500	0.02	197	0.20341
192	2	400	1500	0.02	205	0.21727
193	2	400	1500	0.02615	190	0.88412
194	2	400	1500	0.02615	197	0.88809
195	2	400	1500	0.02615	205	0.89233
196	2	400	1500	0.03	190	0.87738
197	2	400	1500	0.03	197	0.87753
198	2	400	1500	0.03	205	0.87750
199	2	400	1709	0.02	190	0.11449
200	2	400	1709	0.02	197	0.11746
201	2	400	1709	0.02	205	0.12125
202	2	400	1709	0.02615	190	0.87562
203	2	400	1709	0.02615	197	0.87356
204	2	400	1709	0.02615	205	0.87134
205	2	400	1709	0.03	190	0.86528
206	2	400	1709	0.03	197	0.86060
207	2	400	1709	0.03	205	0.85528
208	2	400	1800	0.02	190	0.09959
209	2	400	1800	0.02	197	0.10181
210	2	400	1800	0.02	205	0.10456
211	2	400	1800	0.02615	190	0.88093
212	2	400	1800	0.02615	197	0.87734
213	2	400	1800	0.02615	205	0.87354
214	2	400	1800	0.03	190	0.86587
215	2	400	1800	0.03	197	0.86506
216	2	400	1800	0.03	205	0.86273

N° Corrida	Presion	Temperatura de entrada	Flujo másico	Radio	Temperatura en la pared	Conversión a la salida
217	2	420	1500	0.02	190	0.18619
218	2	420	1500	0.02	197	0.19521
219	2	420	1500	0.02	205	0.20758
220	2	420	1500	0.02615	190	0.88603
221	2	420	1500	0.02615	197	0.88741
222	2	420	1500	0.02615	205	0.89304
223	2	420	1500	0.03	190	0.88049
224	2	420	1500	0.03	197	0.88089
225	2	420	1500	0.03	205	0.88109
226	2	420	1709	0.02	190	0.11362
227	2	420	1709	0.02	197	0.11646
228	2	420	1709	0.02	205	0.12006
229	2	420	1709	0.02615	190	0.88360
230	2	420	1709	0.02615	197	0.88141
231	2	420	1709	0.02615	205	0.87911
232	2	420	1709	0.03	190	0.87457
233	2	420	1709	0.03	197	0.87079
234	2	420	1709	0.03	205	0.86571
235	2	420	1800	0.02	190	0.09930
236	2	420	1800	0.02	197	0.10146
237	2	420	1800	0.02	205	0.10408
238	2	420	1800	0.02615	190	0.88913
239	2	420	1800	0.02615	197	0.88606
240	2	420	1800	0.02615	205	0.88225
241	2	420	1800	0.03	190	0.87046
242	2	420	1800	0.03	197	0.87056
243	2	420	1800	0.03	205	0.86978

Diseño factorial 3⁴

n°	Presion	T.gas	Flujo m.	Radio	T.pared	Xm2	Xm3	Xm4	Xm5
1	1.97	380	1470	0.0229	190	0.3421	0.4079	0.4394	0.5124
2	1.97	380	1470	0.0229	197	0.3450	0.4110	0.4426	0.5161
3	1.97	380	1470	0.0229	205	0.3485	0.4147	0.4465	0.5204
4	1.97	380	1500	0.0229	190	0.3374	0.4032	0.4346	0.5072
5	1.97	380	1500	0.0229	197	0.3403	0.4063	0.4378	0.5108
6	1.97	380	1500	0.0229	205	0.3438	0.4100	0.4417	0.5152
7	1.97	380	1530	0.0229	190	0.3330	0.3986	0.4299	0.5021
8	1.97	380	1530	0.0229	197	0.3358	0.4017	0.4331	0.5057
9	1.97	380	1530	0.0229	205	0.3393	0.4054	0.4369	0.5100
10	1.97	400	1470	0.0229	190	0.3451	0.4126	0.4448	0.5191
11	1.97	400	1470	0.0229	197	0.3480	0.4157	0.4480	0.5228
12	1.97	400	1470	0.0229	205	0.3516	0.4195	0.4520	0.5271
13	1.97	400	1500	0.0229	190	0.3405	0.4079	0.4399	0.5139
14	1.97	400	1500	0.0229	197	0.3434	0.4110	0.4432	0.5175
15	1.97	400	1500	0.0229	205	0.3469	0.4147	0.4471	0.5219
16	1.97	400	1530	0.0229	190	0.3360	0.4034	0.4352	0.5088
17	1.97	400	1530	0.0229	197	0.3389	0.4064	0.4384	0.5124
18	1.97	400	1530	0.0229	205	0.3423	0.4101	0.4423	0.5167
19	1.97	420	1470	0.0229	190	0.3481	0.4172	0.4501	0.5257
20	1.97	420	1470	0.0229	197	0.3510	0.4204	0.4533	0.5293
21	1.97	420	1470	0.0229	205	0.3545	0.4241	0.4572	0.5337
22	1.97	420	1500	0.0229	190	0.3435	0.4125	0.4452	0.5204
23	1.97	420	1500	0.0229	197	0.3464	0.4156	0.4484	0.5240
24	1.97	420	1500	0.0229	205	0.3498	0.4193	0.4523	0.5284
25	1.97	420	1530	0.0229	190	0.3390	0.4080	0.4405	0.5153
26	1.97	420	1530	0.0229	197	0.3419	0.4110	0.4437	0.5189
27	1.97	420	1530	0.0229	205	0.3453	0.4147	0.4476	0.5233
28	2	380	1470	0.0229	190	0.3444	0.4098	0.4413	0.5145
29	2	380	1470	0.0229	197	0.3473	0.4129	0.4446	0.5182
30	2	380	1470	0.0229	205	0.3509	0.4167	0.4485	0.5225
31	2	380	1500	0.0229	190	0.3397	0.4051	0.4365	0.5093
32	2	380	1500	0.0229	197	0.3426	0.4082	0.4397	0.5129
33	2	380	1500	0.0229	205	0.3461	0.4119	0.4436	0.5173
34	2	380	1530	0.0229	190	0.3351	0.4005	0.4317	0.5042
35	2	380	1530	0.0229	197	0.3380	0.4036	0.4350	0.5078
36	2	380	1530	0.0229	205	0.3415	0.4072	0.4388	0.5121
37	2	400	1470	0.0229	190	0.3473	0.4145	0.4467	0.5212
38	2	400	1470	0.0229	197	0.3503	0.4176	0.4499	0.5249
39	2	400	1470	0.0229	205	0.3539	0.4214	0.4539	0.5292
40	2	400	1500	0.0229	190	0.3427	0.4098	0.4418	0.5160
41	2	400	1500	0.0229	197	0.3456	0.4129	0.4451	0.5196
42	2	400	1500	0.0229	205	0.3491	0.4166	0.4489	0.5240
43	2	400	1530	0.0229	190	0.3382	0.4052	0.4371	0.5108

n°	Presion	T.gas	Flujo m.	Radio	T.pared	Xm2	Xm3	Xm4	Xm5
44	2	400	1530	0.0229	197	0.3410	0.4083	0.4403	0.5145
45	2	400	1530	0.0229	205	0.3445	0.4119	0.4442	0.5188
46	2	420	1470	0.0229	190	0.3503	0.4191	0.4519	0.5277
47	2	420	1470	0.0229	197	0.3532	0.4222	0.4552	0.5314
48	2	420	1470	0.0229	205	0.3568	0.4260	0.4591	0.5358
49	2	420	1500	0.0229	190	0.3456	0.4144	0.4470	0.5225
50	2	420	1500	0.0229	197	0.3485	0.4175	0.4503	0.5261
51	2	420	1500	0.0229	205	0.3520	0.4212	0.4542	0.5305
52	2	420	1530	0.0229	190	0.3411	0.4098	0.4423	0.5173
53	2	420	1530	0.0229	197	0.3440	0.4128	0.4455	0.5210
54	2	420	1530	0.0229	205	0.3474	0.4165	0.4494	0.5253
55	2.03	380	1470	0.0229	190	0.3467	0.4117	0.4432	0.5166
56	2.03	380	1470	0.0229	197	0.3497	0.4148	0.4465	0.5202
57	2.03	380	1470	0.0229	205	0.3533	0.4186	0.4504	0.5246
58	2.03	380	1500	0.0229	190	0.3419	0.4070	0.4383	0.5113
59	2.03	380	1500	0.0229	197	0.3449	0.4101	0.4416	0.5150
60	2.03	380	1500	0.0229	205	0.3484	0.4138	0.4455	0.5193
61	2.03	380	1530	0.0229	190	0.3373	0.4024	0.4336	0.5062
62	2.03	380	1530	0.0229	197	0.3403	0.4054	0.4368	0.5098
63	2.03	380	1530	0.0229	205	0.3438	0.4091	0.4407	0.5142
64	2.03	400	1470	0.0229	190	0.3496	0.4164	0.4485	0.5233
65	2.03	400	1470	0.0229	197	0.3526	0.4195	0.4518	0.5269
66	2.03	400	1470	0.0229	205	0.3562	0.4233	0.4557	0.5313
67	2.03	400	1500	0.0229	190	0.3449	0.4116	0.4437	0.5180
68	2.03	400	1500	0.0229	197	0.3478	0.4147	0.4469	0.5216
69	2.03	400	1500	0.0229	205	0.3514	0.4185	0.4508	0.5260
70	2.03	400	1530	0.0229	190	0.3403	0.4070	0.4389	0.5129
71	2.03	400	1530	0.0229	197	0.3432	0.4101	0.4421	0.5165
72	2.03	400	1530	0.0229	205	0.3467	0.4138	0.4460	0.5208
73	2.03	420	1470	0.0229	190	0.3525	0.4209	0.4537	0.5297
74	2.03	420	1470	0.0229	197	0.3554	0.4241	0.4570	0.5334
75	2.03	420	1470	0.0229	205	0.3590	0.4278	0.4610	0.5378
76	2.03	420	1500	0.0229	190	0.3478	0.4162	0.4489	0.5245
77	2.03	420	1500	0.0229	197	0.3507	0.4193	0.4521	0.5281
78	2.03	420	1500	0.0229	205	0.3542	0.4230	0.4560	0.5325
79	2.03	420	1530	0.0229	190	0.3432	0.4116	0.4441	0.5193
80	2.03	420	1530	0.0229	197	0.3461	0.4146	0.4473	0.5230
81	2.03	420	1530	0.0229	205	0.3496	0.4184	0.4512	0.5273

Donde: (Xm2) conversión determinada para $ySO_2=0.0045$; (Xm3) conversión para $ySO_2=0.00288$; (Xm4) conversión para $ySO_2=0.00172$; (Xm5) conversión para $ySO_2=0.00093$