

Optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente de los procesos de tostación de minerales sulfurados a través del movimiento y simulación

Optimization of the sulfur dioxide conversion process from sulfarated minerals roasting processes through modeling and simulation

Recibido: setiembre 07 de 2022 | Revisado: setiembre 25 de 2022 | Aceptado: octubre 28 de 2022

ANA MARÍA REYNA SEGURA¹ RESUMEN

En esta investigación se realizó la optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre remanente de la tostación de minerales sulfurados, para lo cual se utilizó el modelamiento matemático del proceso de oxidación de SO₂ que ocurre en un reactor catalítico para lo cual se aplicó los balances de materia y energía, luego con la simulación del modelo matemático y aplicando una secuencia de optimización basada en la superficie de respuesta, se logró obtener los perfiles de temperatura y conversión de SO₂. Los resultados de este estudio revelan que para la presión de 1.98 atm, temperatura de alimentación de 420 °C, flujo másico de 1520 Kg/m²h, radio de 0.0229 m, y temperatura en la pared de 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%.

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

ABSTRACT

In this research the optimization of the conversion process of the sulfur dioxide remaining from the roasting of sulfide minerals was carried out, for which the mathematical modeling of the SO₂ oxidation process that occurs in a catalytic reactor was used, for which the material and energy balances were applied, then with the simulation of the mathematical model and applying an optimization sequence based on the response surface, it was possible to obtain the profiles of temperature and SO₂ conversion. The results of this study reveal that for a pressure of 1.98 atm, feed temperature of 420 °C, mass flow of 1520 Kg/m²h, radius of 0.0229 m, and wall temperature of 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%.

¹ Escuela Universitaria de Posgrado-UNFV, Programa de Doctorado en Ingeniería Ambiental, Prolongación Camaná N°1014, Lima-Perú.

Autor para correspondencia E-mail:

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

© Los autores. Este artículo es publicado por la Revista Campus de la Facultad de Ingeniería y Arquitectura de la Universidad de San Martín de Porres. Este artículo se distribuye en los términos de la Licencia Creative Commons Atribución No-comercial – Compartir-Igual 4.0 Internacional (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), que permite el uso no comercial, distribución y reproducción en cualquier medio siempre que la obra original sea debidamente citada. Para uso comercial contactar a: revistacampus@usmp.pe.

<https://doi.org/10.24265/campus.2022.v27n34.02>

Introducción

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 SO_2 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 R., 2009) (Plasencia & Cabrera, 2009) (Perú 1996, 2001 y 2008) (Organización Mundial de la Salud 2006).

En el diseño de la investigación 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 permitiendo así la optimización de esta etapa crítica en cuanto a la reducción del impacto por emisiones de SO_2 (Arteaga, L. et al., 2008) (Asensio, D. A. et al., 2017).

Se ha optimizado 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.

La optimización se llevó a cabo mediante la metodología basada en superficie de respuesta para la reacción del dióxido de azufre en el reactor catalítico de lecho fijo, a partir del modelado matemático del reactor y la simulación de su funcionamiento. (Carrasco, L. 2012 & 2018)

El modelado matemático se desarrolló a partir de las ecuaciones de conservación de materia y energía en el reactor, considerando una geometría cilíndrica y una cinética compleja para la transformación del dióxido de azufre a trióxido de azufre. El resultado de dicho planteamiento permite conformar un sistema de ecuaciones diferenciales parciales (EPD) en el cual las variables dependientes vienen a ser la conversión y la temperatura. La simulación se realizó haciendo uso del método de líneas y la programación en Matlab, lo cual resulta ventajoso al momento de evaluar las diferentes condiciones de operación para la optimización. Finalmente, la optimización se consiguió mediante simulaciones sistemáticas correspondientes al diseño factorial y al diseño de superficie de respuesta.

Método

El modelamiento, la simulación de sistemas químicos y la optimización es el uso de métodos específicos para determinar la solución más rentable y eficiente para el 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,

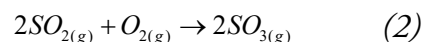
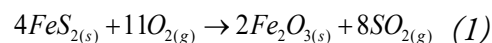
construcción, operación y análisis de plantas químicas (así como muchos otros procesos industriales) pueden ser resueltos por optimización (Edgar et al., 2001) (Martínez, V. et al. 2000).

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 de 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)

El modelado matemático para el reactor tubular de lecho fijo está basado en la teoría de Froment & Bischoff (1979) y Fogler (2001) donde se fundamentan los principios del balance de masa y energía del proceso. además, los fenómenos de transporte dentro del sólido solo se tienen en cuenta dentro del modelo de reactor, si se puede obtener una solución analítica del modelo de partícula (normalmente, solo en condiciones isotérmicas para el sólido y reacciones de primer orden) (Levenspiel O., 1999; Fogler H; 2001 y 2008).

El modelo cinético para la reacción de oxidación de dióxido de azufre fue obtenido de Froment & Bischoff (1979, p. 494), García (1992) y de Pernet (2016) junto con sus constantes cinéticas las cuales están función de la temperatura.

Ecuación de tostación del mineral sulfurado



La expresión de la velocidad de reacción está dada por:

$$r_A = \frac{K_1 P_{O_2} P_{SO_3} \left(1 - \frac{P_{SO_3}}{P_{SO_2} P_{O_2}^{0.5} K_p} \right)}{22.414 (1 + K_2 P_{SO_2} + K_3 P_{SO_3})} \quad (3)$$

Donde

$$K_1 = \exp(12.160 - 5473/T)$$

$$K_2 = \exp(-9.953 + 8619/T)$$

$$K_3 = \exp(-71.745 + 52596/T)$$

$$K_p = \exp(11300/T - 10.68)$$

Se utilizaron las ecuaciones variacionales de balance de materia y energía en condiciones no isotérmicas, las cuales fueron adaptadas al reactor catalítico de lecho fijo y los softwares Excel, Polymath, Matlab, así como el Minitab

$$\frac{\partial X}{\partial z} = \frac{\varepsilon d_p}{Pe_{Mr}} \left(\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right) + \frac{\rho_b}{U_s C_{A0}} r_{A(X,T)} \quad (4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{d_p}{Pe_{hr}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\rho_b (-\Delta H_r)}{\rho_f c_{p_f} U_s} r_{A(X,T)} \quad (5)$$

Donde:

$$U_s = \frac{G}{\rho_f} \quad Pe_{Mr} = \frac{dp U_s}{D_{er}} \quad Pe_{hr} = \frac{cp_f G dp}{k_{er}}$$

Las condiciones iniciales y de frontera para el sistema son:

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

$$r = R, \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{h}{k_{er}} (T - T_w) \quad \forall z$$

$$z = 0, \quad X = 0, \quad T = T_{ent} \quad \forall r$$

En la Tabla 1 se muestra la nomenclatura utilizada para el modelado matemático.

Tabla 1
Nomenclatura del modelado

Símbolo	Descripción
D_{er}	Coefficiente de difusión efectiva radial, m ² /s
U_S	Velocidad superficial de la fase gaseosa, m/s
r_A	Velocidad de reacción del componente A
K_{er}	Conductividad efectiva radial, W/m ² .°C
r	Coordenada radial, m
z	Coordenada axial, m
G	Velocidad másica de flujo, kg/m ² s
C_A	Concentración del componente A, kmol/m ³
T_w	Temperatura de la pared, °C
ρ_b	Densidad del lecho del catalizador kg/m ³
ρ_f	Densidad del fluido kg/m ³
ε	Porosidad de la partícula
T	Temperatura, K
X	Conversión variable del reactivo limitante
dp	Diámetro de la partícula del catalizador, m
ΔH	Entalpia de reacción J/mol
Pe_{Mr}	Número de Peclet de masa radial, $USdp/De_r$
Pe_{Hr}	Número de Peclet de calor radial, $dp.G.Cpg/Ker$
cp_f	Calor específico de la mezcla a presión constante, kJ/kg °C
h	Coefficiente de transmisión de calor en la pared del lecho, kJ/m ³ s ^c

Discretización

Para la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) los coeficientes de las ecuaciones (4) y (5) fueron agrupados utilizando las siguientes relaciones ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 y ϕ_4 .

$$\phi_1 = \frac{\rho_b}{C_{A0}U_S} \quad \phi_2 = \frac{\varepsilon dp}{Pe_{Mr}} \quad \phi_3 = \frac{-\Delta H \rho_b}{\rho_f cp_f U_S} \quad \phi_4 = \frac{dp}{Pe_{Hr}}$$

De tal manera que el sistema queda representado por ecuaciones (6) y (7)

$$\frac{\partial X}{\partial z} = \phi_2 \left(\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right) + \phi_1 r_{A(X,T)} \quad (6)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \phi_4 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \phi_3 r_{A(X,T)} \quad (7)$$

Se aplicó el método de líneas sobre las ecuaciones (6) y (7), que consiste en discretizar parcialmente la ecuación diferencial formando un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, tal como se muestra a continuación:

Para la ecuación de balance de materia en función de la conversión (X) (ecuación 6):

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 para salvar la indeterminación en $r=0$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right) = \left(\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} \right) \quad (8)$$

Reemplazando (8) en (6):

$$\frac{\partial X}{\partial z} = 2\phi_2 \left(\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} \right) + \phi_1 r_{A(X,T)} \quad (9)$$

Discretizando (9) en $r=0, i=0$:

$$\frac{\partial X_0}{\partial z} = 2\phi_2 \left(\frac{X_1 - 2X_0 + X_{-1}}{\Delta r^2} \right) + \phi_1 r_{A(X_i, T_i)}$$

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

Aplicando la diferencia regresiva en (6) se obtiene el sistema de ecuaciones diferenciales para $r>0, i=[1,2,3,4,5]$:

$$\frac{dX_1}{dz} = \phi_2 \left(\frac{X_2 - 2X_1 + X_0}{\Delta r^2} + \frac{1}{1\Delta r} \left(\frac{X_1 - X_0}{\Delta r} \right) \right) + \phi_1 r_{A(X_i, T_i)} \quad (11)$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial z} = \phi_2 \left(\frac{X_3 - 2X_2 + X_1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2\Delta r} \left(\frac{X_2 - X_1}{\Delta r} \right) \right) + \phi_1 r_{A(X_i, T_i)} \quad (12)$$

$$\frac{\partial X_3}{\partial z} = \phi_2 \left(\frac{X_4 - 2X_3 + X_2}{\Delta r^2} + \frac{1}{3\Delta r} \left(\frac{X_3 - X_2}{\Delta r} \right) \right) + \phi_1 r_{A(X_i, T_i)} \quad (13)$$

$$\frac{\partial X_4}{\partial z} = \phi_2 \left(\frac{X_5 - 2X_4 + X_3}{\Delta r^2} + \frac{1}{4\Delta r} \left(\frac{X_4 - X_3}{\Delta r} \right) \right) + \phi_1 r_{A(X_i, T_i)} \quad (14)$$

$$\frac{\partial X_5}{\partial z} = \phi_2 \left(\frac{X_6 - 2X_5 + X_4}{\Delta r^2} + \frac{1}{5\Delta r} \left(\frac{X_5 - X_4}{\Delta r} \right) \right) + \phi_1 r_{A(X_i, T_i)} \quad (15)$$

Análogamente se realiza la discretización sobre la ecuación de balance de energía en función de la temperatura (T) (ecuación 8)

$$\frac{\partial T_0}{\partial z} = 2\phi_4 \left(\frac{T_1 - 2T_0 + T_{-1}}{\Delta r^2} \right) + \phi_3 r_{A(X_i, T_i)} \quad (16)$$

$$\frac{\partial T_1}{\partial z} = \phi_4 \left(\frac{T_2 - 2T_1 + T_0}{\Delta r^2} + \frac{1}{1\Delta r} \left(\frac{T_1 - T_0}{\Delta r} \right) \right) + \phi_3 r_{A(X_i, T_i)} \quad (17)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial z} = \phi_4 \left(\frac{T_3 - 2T_2 + T_1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2\Delta r} \left(\frac{T_2 - T_1}{\Delta r} \right) \right) + \phi_3 r_{A(X_i, T_i)} \quad (18)$$

$$\frac{\partial T_3}{\partial z} = \phi_4 \left(\frac{T_4 - 2T_3 + T_2}{\Delta r^2} + \frac{1}{3\Delta r} \left(\frac{T_3 - T_2}{\Delta r} \right) \right) + \phi_3 r_{A(X_i, T_i)} \quad (19)$$

$$\frac{\partial T_4}{\partial z} = \phi_4 \left(\frac{T_5 - 2T_4 + T_3}{\Delta r^2} + \frac{1}{4\Delta r} \left(\frac{T_4 - T_3}{\Delta r} \right) \right) + \phi_3 r_{A(X_i, T_i)} \quad (20)$$

$$\frac{\partial T_5}{\partial z} = \phi_4 \left(\frac{T_6 - 2T_5 + T_4}{\Delta r^2} + \frac{1}{5\Delta r} \left(\frac{T_5 - T_4}{\Delta r} \right) \right) + \phi_3 r_{A(X_i, T_i)} \quad (21)$$

Para terminar la discretización se utiliza la condición de frontera.

La condición de frontera para la conversión, en $r=R, i=5$

$$\frac{\partial X}{\partial r} = 0$$

$$\frac{X_{i+1} - X_i}{\Delta r} = 0$$

$$X_6 = X_5$$

Reemplazando (22) en (15) se obtiene:

$$\frac{\partial X_5}{\partial z} = \phi_2 \left(\frac{-X_5 + X_4}{\Delta r^2} + \frac{1}{5\Delta r} \left(\frac{X_5 - X_4}{\Delta r} \right) \right) + \phi_1 r_{A(X_i, T_i)} \quad (23)$$

Y para el caso de la temperatura, la condición de frontera en $r=R, i=5$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{h}{k_{er}} (T - T_w)$$

$$\frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta r} = -\frac{h}{k_{er}} T_i + \frac{h}{k_{er}} T_w$$

$$T_6 = \left(1 - \frac{h\Delta r}{k_{er}} \right) T_5 + \frac{h\Delta r}{k_{er}} T_w \quad (24)$$

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

$$Bi_w = \frac{rh}{k_{er}}$$

$$Bi_w = \frac{i\Delta rh}{k_{er}} \quad (25)$$

Reemplazando (24) y (25) en (21) se obtiene:

$$\frac{\partial T_5}{\partial z} = \phi_4 \left(\frac{\left(1 - \frac{Bi_w}{5} \right) T_5 + \frac{Bi_w}{5} T_w - 2T_5 + T_4}{\Delta r^2} + \frac{1}{5\Delta r} \left(\frac{T_5 - T_4}{\Delta r} \right) \right) + \phi_3 r_{A(X_i, T_i)} \quad (26)$$

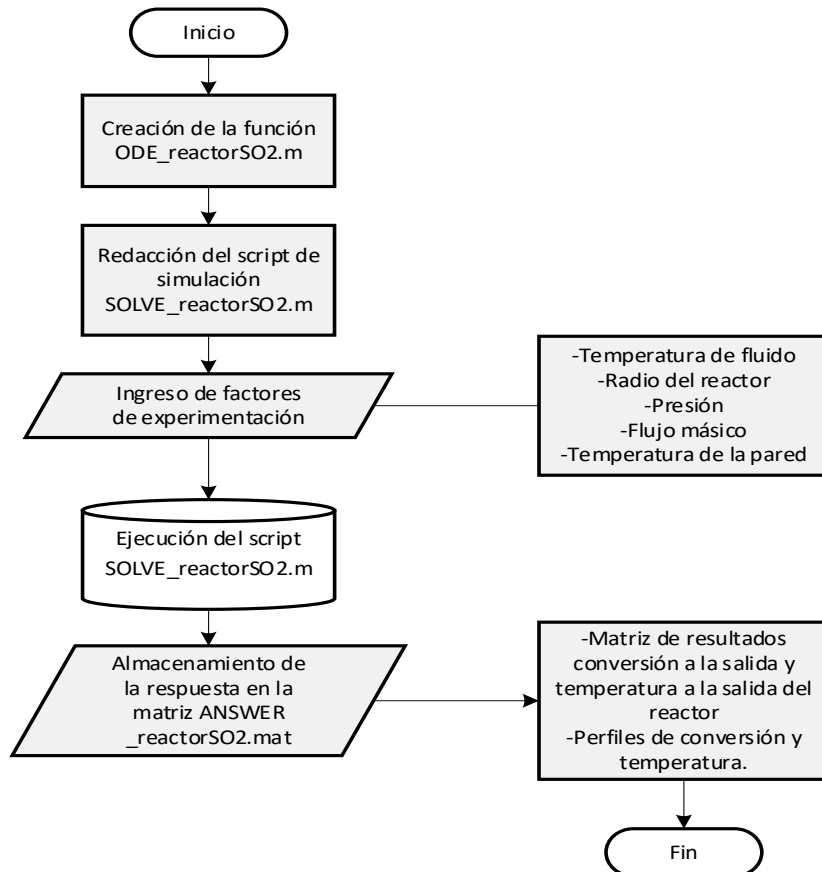
Referencia al Programa

Se redactó un programa para la resolución del sistema diferencial

utilizando el software Matlab, el flujo de la información utilizada se muestra en la Figura 1.

Figura 1

Flujograma para la simulación

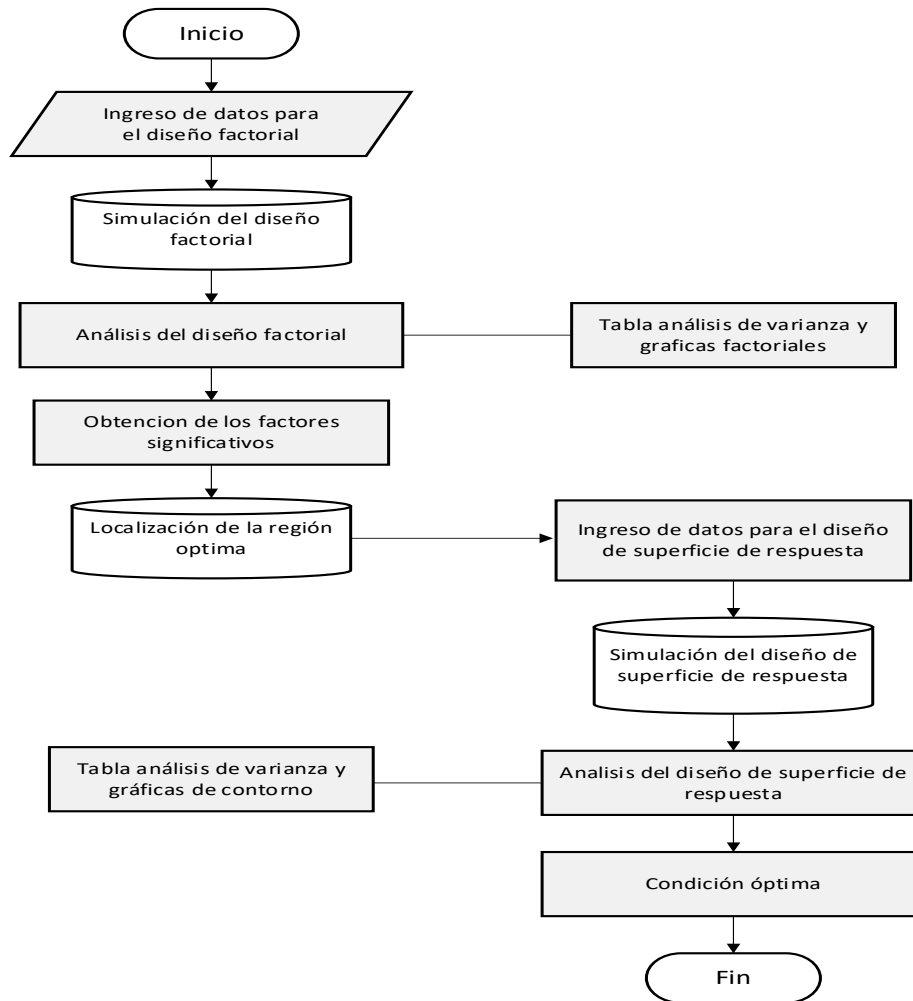


Referencia al diseño de experimentos

La información de la simulación del sistema diferencial fue recogida y analizada en función de la conversión a la salida del reactor, para lo cual se

realizaron simulaciones sistemáticas tomando en cuenta el diseño factorial 3K y posteriormente el diseño de superficie de respuesta en función a los factores significativos dados por el análisis estadístico.

Figura 2
Flujograma para la optimización

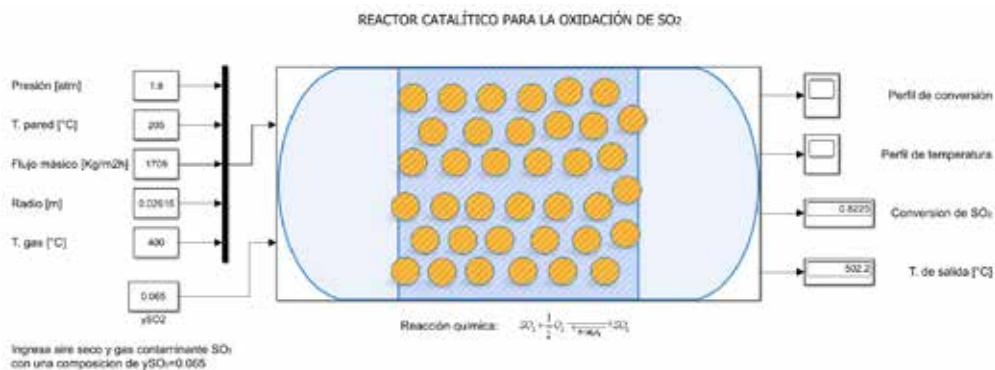


Resultados

Los resultados de la simulación fueron obtenidos mediante la programación en Matlab, el diagrama de la Figura 3

representa al reactor modelado donde las variables de entrada son presión, temperatura en la pared, Flujo másico, radio y temperatura del gas, así como la fracción de SO₂ que ingresa al reactor.

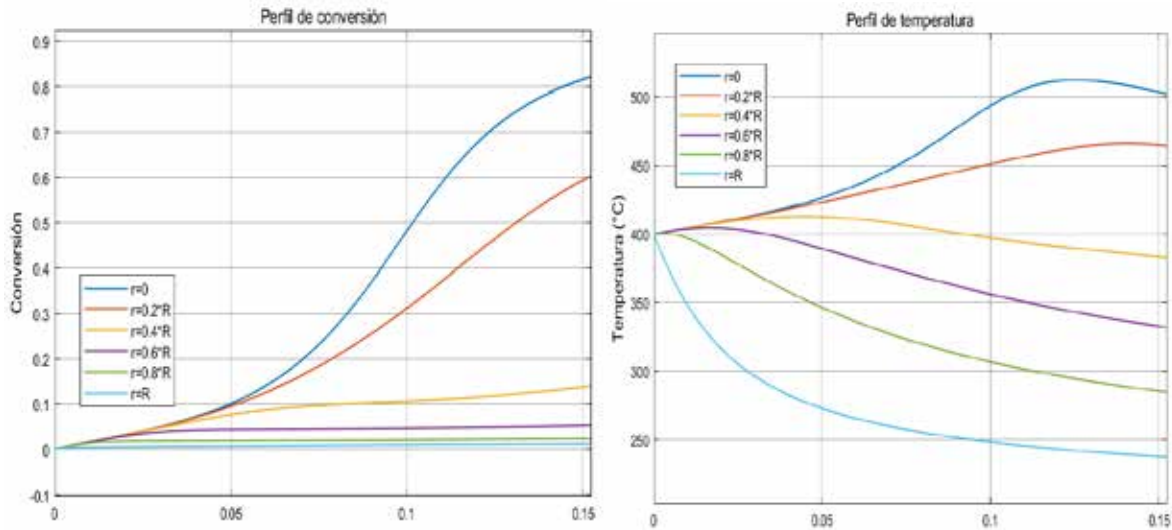
Figura 3
Modelado del reactor catalítico de lecho fijo



Los perfiles de conversión y temperatura se muestran en la Figura 4 y son los resultados de la simulación del reactor, con esta información se

monitorea el avance de la reacción química a determinadas condiciones de simulación.

Figura 4
Perfil de conversión y temperatura



Optimización

De acuerdo con la Figura 2, la optimización se inicia con la exploración de los factores que intervienen en el modelado del reactor catalítico de lecho

fijo, y para ello fue planteado el diseño factorial con cinco factores y tres niveles. La Tabla 2 muestra la disposición de los factores y niveles para la simulación, con el cual se obtuvieron 243 combinaciones diferentes.

Tabla 2
Factores y niveles del diseño factorial

Factor	Descripción	Niveles		
		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

De cada simulación se tomó el valor de la conversión máxima a la salida y se realizó el análisis del diseño factorial,

dando como resultado la información que se muestra en la Tabla 3.

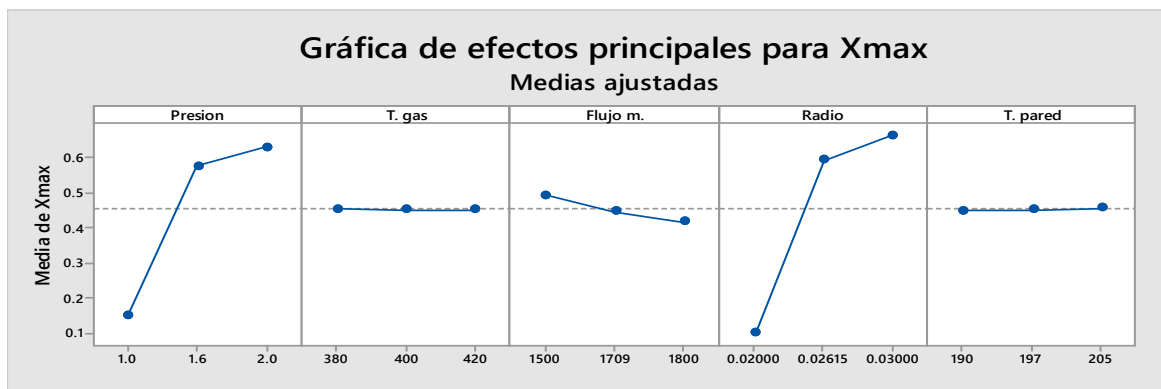
Tabla 3
Análisis de varianza del diseño factorial

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	-	-	-	-

Del análisis de varianza mostrado en la Tabla 3, los factores presión, radio y flujo másico resultan significativos para las simulaciones realizadas de acuerdo al diseño factorial y en la Figura 5 se muestra el gráfico de efectos principales, donde

puede observarse la notable influencia de la presión y el radio. El flujo másico tiene influencia en menor grado; sin embargo, la temperatura del gas y temperatura en la pared no ejercen una influencia significativa.

Figura 5
Gráfico de efectos principales para el diseño factorial



Localización de la región óptima

Del diseño factorial, los valores que favorecen la optimización de la

respuesta se muestran en la Tabla 4, el cual es considerado el punto 0 para la exploración.

Tabla 4
Configuración óptima del diseño factorial

Punto	Presión	T. gas	Flujo m.	Radio	T. pared	Conversión (X)
0	2	420	1500	0.02615	205	0.89307

El tamaño de paso para la exploración alrededor del punto 0 considera variación

únicamente en los factores significativos, tal como se muestra en la Tabla 5.

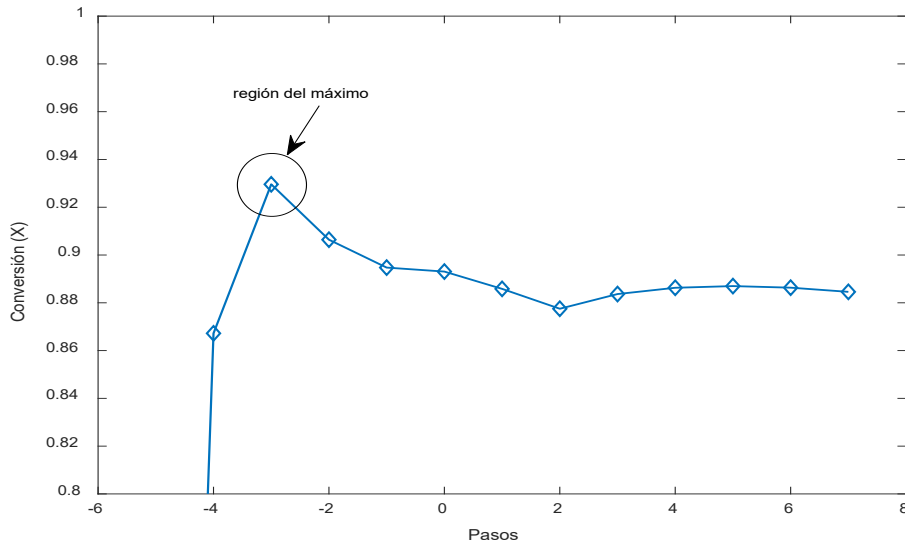
Tabla 5
Tamaño de paso para la exploración

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

En la Figura 6 se muestra la localización de la región óptima o región del posible

máximo, la cual se encuentra entre la posición -2 y -4 de la exploración.

Figura 6
Localización de la región del máximo



Las coordenadas que rodean a la región del máximo fueron tomadas para el diseño de superficie de respuesta, las cuales se convierten en los nuevos límites

para la exploración mediante la superficie de respuesta, en la Tabla 6 se muestra la disposición de los factores para el diseño de superficie de respuesta.

Tabla 6
Factores y niveles para el diseño de superficie de respuesta

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

El diseño de superficie de respuesta utilizado en el Minitab corresponde a un diseño de Box Benkhen (Gutiérrez & de la Vara 2008), el cual requirió 15 corridas, las cuales fueron simuladas en Matlab y posteriormente realizado el

análisis de varianza que se muestra en la Tabla 7, donde se observa la implicancia significativa del modelo de superficie de respuesta (P=0.004) y del término cuadrado (P=0.001).

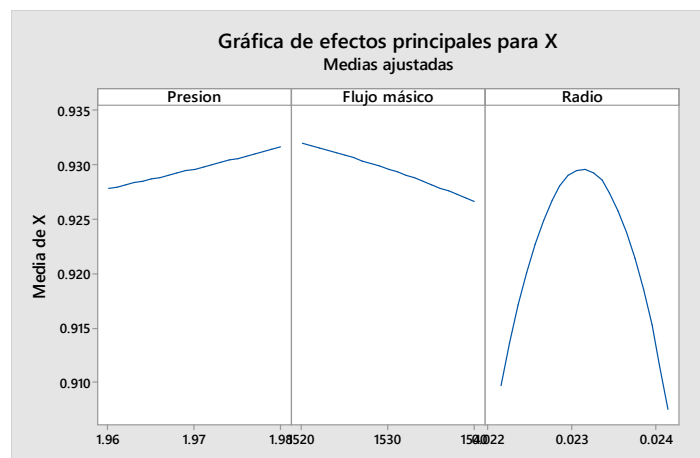
Tabla 7
Análisis de varianza del diseño de superficie de respuesta

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	F	P
Modelo	9	0.00192	0.000214	15.56	0.004
Lineal	3	0.00009	0.000032	2.36	0.188
Presión	1	0.00002	0.000029	2.12	0.205
Flujo másico	1	0.00005	0.000058	4.22	0.095
Radio	1	0.00001	0.00001	0.73	0.433
Cuadrado	3	0.00163	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	0.00019	0.000065	4.73	0.064
Presión*Flujo másico	1	0	0	0.01	0.927
Presión*Radio	1	0.00009	0.000091	6.63	0.05
Flujo másico*Radio	1	0.00010	0.000104	7.54	0.041
Error	5	0.00006	0.000014		
Falta de ajuste	3	0.00006	0.000023	*	*
Error puro	2	0	0		
Total	14	0.00199			

Así mismo, el gráfico de efectos principales dado en la Figura 7 muestra la posibilidad de optimización del radio, en cuanto a los otros factores, éstos no

presentan posibilidad de optimización; sin embargo, puede optarse por los valores más convenientes que favorecen a la conversión.

Figura 7
Gráfico de efectos principales para el diseño superficie de respuesta



La ecuación (27) fue obtenida durante el análisis de superficie de respuesta, representa la correlación entre los

factores significativos y la respuesta; fue simplificada considerando solo a los factores significativos.

$$X = -11 + 1130R - 478PR + 0.509FR - 20949R^2 \quad (27)$$

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

$$X = -11 + 957.24R - 20949R^2 \quad (28)$$

Derivando la expresión (28)

$$\frac{dX}{dR} = 957.24 - 41898R \quad (29)$$

Haciendo $\frac{dX}{dR} = 0$ se obtiene.

$$R = 0.0229$$

La condición óptima resulta:

$$\text{Etapa 1: } \begin{bmatrix} \text{Presión} \\ \text{Tgas} \\ \text{Flujo m.} \\ \text{Radio} \\ \text{Tpared} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.98 \\ 420 \\ 1520 \\ 0.0229 \\ 205 \end{bmatrix}$$

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.

Para aumentar la conversión se recomienda más de una etapa de operación en el reactor. Debido a ello se mantuvo constante el valor del radio optimizado y se realizó el diseño factorial 3⁴ para los demás factores, donde se determinó del análisis de varianza los valores de configuración óptima para las etapas subsiguientes.

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

Simulación en el punto óptimo

Con los valores obtenidos de la optimización se realizó la simulación en del reactor catalítico obteniendo un

Mediante el modelado y la simulación se logró determinar las condiciones de operación óptimas para el proceso de conversión de SO₂ en el reactor catalítico de lecho fijo, reduciendo una emisión hipotética de 65000 ppm a 429 ppm en cinco etapas de proceso.

Tabla 8

Simulación de cinco etapas de conversión

Etapa	Entrada SO2 (ppm)	Salida SO2 (ppm)	Conversión acumulada de SO2
1	65000	4498	93.08%
2	4498	2883	95.56%
3	2883	1724	97.35%
4	1724	929	98.57%
5	929	429	99.34%

Conclusiones

La optimización del proceso de conversión del dióxido de azufre proveniente de los procesos de tostación

de minerales sulfurados fue realizada mediante el modelado del reactor catalítico de lecho fijo y la simulación mediante software de cálculo, de acuerdo a la metodología de superficie de respuesta

que se aplicó para hallar la condición óptima que maximiza la conversión del dióxido de azufre en el reactor, la cual fue: 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%. El modelamiento del proceso de conversión de dióxido de azufre en un reactor catalítico de lecho fijo, 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. Las condiciones óptimas de operación del reactor catalítico que se determinaron fueron: (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%. 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 de dióxido de azufre para las cinco etapas del proceso de conversión catalítica, lo que se traduce una reducción de emisiones a la atmósfera.

Referencias

- Arteaga, L., & Zegada, S. (2008). MODELACIÓN DE UN CONVERTIDOR DE SO₂. *Revista Investigación & Desarrollo*, 1(8), 109–129. <http://www.upb.edu/revista-investigacion-desarrollo/index.php/id/article/view/90>
- 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. <https://doi.org/10.35537/10915/65182>
- Carrasco, L. (2012). Simulación del tratamiento de gases residuales que contienen dióxido de azufre. *The Biologist (Lima) Ene-Jun, Suplemento Especial*, 10.
- Carrasco, L. (2018). Modelamiento de los fenómenos de transporte (1.a ed.). Editorial Macro.
- Edgar, T. F., Himmelblau, D. M., & Lasdon, L. S. (2001). Optimization of chemical processes. (2^a ed) McGraw-Hill chemical engineering series
- Fogler, H. S. (2001). Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas.(3^a. Ed.) Pearson Educación.
- Fogler, H. S., & Gürmen, M. N. (2008). Professional Reference Shelf: Manufacture of Sulfuric Acid, Steady-State Nonisothermal Reactor Design. *Elements of Chemical Reaction Engineering*, 78(2), 166–168. www.umich.edu

- edu/~elements/08chap/html/sulfuricacid.pdf%0D
- Froment, G. F., Bischoff, K. B., & De Wilde, J. (1979). *Chemical Reactor Analysis and Design*. John Wiley & Sons.
- García, 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.
- Gutiérrez, H., & de la Vara, R. (2008). *Análisis y diseño de experimentos* (McGraw-Hill/Interamericana Editores. (2ª ed.).
- Jiménez, A. (2003). *Diseño de Procesos de Ingeniería Química* (Editorial Reverté S.A.).
- Levenspiel, O. (1999). *Chemical Reaction Engineering*. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 38(11), 4140–4143. <https://doi.org/10.1021/ie990488g>
- Martínez, V., Alonso, P., López, J., Salado, M., & Rocha, J. A. (2000). *Simulación De Procesos en Ingeniería Química* (1ª. Ed.) Plaza y Valdez S. A.
- 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. In *Guías de calidad del aire de la OMS relativas al material particulado, el ozono, el dióxido de nitrógeno y el dióxido de azufre Actualización* (Vol. 5, Issue 1, pp. 1–21).
- Pernett, L. D. C., Ochoa, I. A., Robledo, M. E., & Rueda Durán, C. A. (2016). Modelamiento y simulación de un reactor catalítico para la oxidación de SO₂ a SO₃, utilizando V₂O₅ como catalizador. *Prospectiva*, 14(1), 39–46. <https://doi.org/10.15665/RP.V14I1.647>
- Perú. (2001). Decreto Supremo N° 074-2001-PCM Reglamento de Estandares Nacionales de Calidad Ambiental del Aire. In *Ministerio de Salud - Dirección General de Salud Ambiental e Inocuidad Alimentaria*, (pp. 13–14).
- Perú. (2008). Decreto Supremo N°003-2008-MINAM Aprueban Estándares de Calidad Ambiental para Aire (p. 4). Ministerio del Ambiente.
- Perú. (1996). Resolución Ministerial N°315-96-EM/VMM Aprueban Niveles máximos permisibles de elementos y compuestos presentes en emisiones gaseosas provenientes de las Unidades Minero Metalúrgicas. Fondo Nacional Del Ambiente - Perú, 5–6. <https://sinia.minam.gob.pe/normas/niveles-maximos-permisibles-elementos-compuestos-presentes-emisiones>
- Plasencia, E., & Cabrera, C. (2009). Niveles de dióxido de azufre en la Oroya. *12, 24*, 64–68.
- Vargas, 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/revdu.v33i1.538>