

UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Metalúrgica

Profesor(es) Patrocinante(s)
Igor Wilkomirsky Fuica
Fernando Antonio Parada Luna

Ingeniero Supervisor
Pedro Jesús Sandoval Rojas

**"ESTUDIO PARA MAXIMIZAR LA EFICIENCIA DE CONVERSIÓN DEL REACTOR
DE LA PLANTA DE ÁCIDO SULFÚRICO N°1 DE LA FUNDICIÓN DE CALETONES"**

Valentina Isadora Parra Gallegos

Informe de Memoria de Título
para optar al Título de
Ingeniero Civil Metalúrgico



Junio 2017

RESUMEN

El trabajo desarrollado en la presente memoria, tiene como objetivo maximizar la conversión de SO_2 a SO_3 del reactor catalítico de la Planta de limpieza de gases N°1 de la fundición de Caletones, División El Teniente de Codelco.

Un análisis de los parámetros, condiciones y variables de operación del reactor catalítico permitió determinar que la única variable manipulable a lo largo del proceso, es la temperatura de entrada a cada uno de los lechos. Luego, se elaboraron metodologías matemáticas que permiten representar teórica y experimentalmente el comportamiento del convertidor catalítico de la planta de limpieza de gases N°1 para distintas condiciones de operación.

En lo que respecta, a la metodología teórica, se utilizó como base el modelo creado por Matthew Joseph King, el que permitió entender y desarrollar los balances de materia y energía, presentes en cada uno de los cuatro lechos del reactor. A su vez, la metodología experimental se basa en la operación del convertidor catalítico de la planta de limpieza de gases N°1 bajo distintas temperaturas de entrada para cada uno de los lechos, hasta encontrar las temperaturas óptimas de operación, denominadas "Set Point", utilizando para ello el método estadístico denominado "Bosques aleatorios".

Al comparar ambas metodologías, se logró deducir, que para maximizar la eficiencia en un lecho con catalizadores nuevos, se hace necesario disminuir la temperatura de entrada al lecho, tal como lo planteaba King, hecho demostrado en los lechos 1 y 2 que operan con catalizadores con menos de un año de uso. Sin embargo, el modelo no es aplicable a catalizadores antiguos, ya que, en este caso para maximizar la eficiencia del proceso, se debe aumentar la temperatura de entrada a cada lecho, tal como queda demostrado en los lechos 3 y 4 del reactor, lo cual a su vez es coincidente con lo informado por los proveedores de los catalizadores.

Por tanto, la correcta selección de las temperaturas de entrada en cada lecho y el buen funcionamiento de los damper, resultan ser factores fundamentales a la hora de maximizar la eficiencia del proceso. Lo que implico, que los arreglos realizados llevan a maximizar la conversión de SO_2 a SO_3 desde 96% a un 97,6%, lo que a su vez significa una disminución importante en las emisiones de azufre a la atmósfera.



DEDICATORIA

*A mis padres Lilian y Mario, que me dieron la vida
y me enseñaron como vivirla.*

*A mi hermano Mario Andrés, por su apoyo incondicional
y motivación para seguir adelante.*

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar quiero agradecer a Dios, por haberme dado una familia maravillosa y una magnífica oportunidad de desarrollo tanto humano como profesional.

Agradezco a mi madre Lilian, mi padre Mario y a mi Hermano Mario Andrés, que siempre han caminado junto a mí y me han entregado la seguridad, comprensión y fortaleza que he necesitado.

A Luciano Burgos, por su paciencia, compañía e incondicional apoyo durante estos últimos años de universidad llenos de cambios en mi vida.

A mis amigas del alma, Carolina Peña y Paulina Henry, por todo el tiempo que me han dado, por los buenos y malos momentos, por aguantarme y escucharme durante todos estos años.

A mis compañeros y amigos de universidad, Fernanda, Rodrigo y Michelle, que alegraron momentos desde el primer día e hicieron amenas todas esas largas noches de estudio.

A mi profesor guía Sr. Fernando Parada, por todo el apoyo, consejos y valiosas correcciones brindadas durante el desarrollo de esta memoria.

A CODELCO Chile- División El Teniente, a la gerencia de Fundición y a la Unidad Limpieza de gases quienes me dieron la oportunidad de realizar la presente memoria en sus dependencias. A los Jefes de Turno y sus respectivos grupos, David Lagos, Marcos López, José Castro y Domingo Zamorano, por su apoyo, consejos y enorme disposición a enseñar. A Don Osvaldo y Don Raúl por hacer de mis almuerzos en la planta, los momentos más alegres del día. A Francisco Molina y Héctor Soto, por compartir su alegría y animarme cuando más lo necesitaba. A Don Héctor, Don Luis y Don Víctor, por aquellos desayunos y conversaciones interminables.

Y finalmente agradecer a todos los que aportaron con un grano de arena para que esto fuera posible.

ÍNDICE GENERAL

CAPÍTULO I: INTRODUCCIÓN	1
1.1. Objetivos	2
1.1.1. Objetivo General	2
1.1.2. Objetivos Específicos	2
CAPÍTULO II: ANTECEDENTES DE LA EMPRESA	3
CAPÍTULO III: MARCO TEÓRICO.....	15
3.1. Catalizador	15
3.1.1. Composición de un catalizador	15
3.1.2. Mecanismo de catalización	16
3.1.3. Actividad del catalizador	17
3.1.4. Comportamiento en el medio ambiente	18
3.2. Bosques Aleatorios.....	19
3.2.1. Minería de datos	19
CAPÍTULO IV: APLICACIÓN DEL MODELO DE MATTHEW JOSEPH KING.....	23
4.1. Curva de Equilibrio.....	23
4.1.1. El porcentaje %SO ₂ oxidado	24
4.1.2. Ecuación de equilibrio	24
4.1.3. Constante de equilibrio en función de la temperatura	24
4.1.4. Constante de Equilibrio en términos del porcentaje de SO ₂ oxidado [5]. ...	25
4.1.5. Porcentaje de SO ₂ oxidado en función de la temperatura, en el equilibrio.	25
4.1.6. Representación gráfica de la curva de equilibrio	26
4.2. Balance de Materia y Energía en el Convertidor Catalítico.	27
4.2.1. Balance de energía	27
4.2.2. Balance de masa.	28
4.3. Modificación al Modelo de Matthew Joseph King.....	30
4.4. Simulación de Conversión de Anhídrido Sulfuroso	30
CAPÍTULO V: ANÁLISIS EN BASE AL REGISTRO DE DATOS DE OPERACIÓN DE LA PLANTA	32
5.1. Ubicación.....	32
5.2. Equipo Involucrado	32

5.3. Variables	33
5.4. Situación Actual de la Planta	33
5.5. Análisis de Datos Históricos	34
5.5.1. Variable dependiente	35
5.5.2. Variables Independientes	36
CAPÍTULO VI: RESULTADOS Y DISCUSIONES.....	42
6.1. Situación Actual de la Planta	42
6.2. Determinación de Condiciones Óptimas.....	42
6.2.1. Lecho 4.....	44
6.2.2. Lecho 3.....	53
6.2.3. Lecho 2.....	57
6.2.4. Lecho 1.....	60
6.3. Análisis de Resultados Operando Bajo Condiciones Óptimas	63
6.3.1. Variable dependiente	64
6.3.2. Variable Independiente	64
6.4. Validación de Valores Recomendados.....	67
CAPÍTULO VII: ANÁLISIS DEL IMPACTO AMBIENTAL	70
CAPÍTULO VIII: CONCLUSIONES	72
REFERENCIAS	74
ANEXOS	76
Anexo A: Descripción de catalizadores.....	77
Anexo B: Balances de materia y energía según modelo de Matthew Joseph King ...	80
Anexo C: Simulaciones en lecho 3,2 y 1	91
Anexo D: Códigos R utilizados en las pruebas.....	107

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1 Catalizadores reactor catalítico PLG 1.	13
Tabla 2 Parámetros de operación.	26
Tabla 3 Simulación del convertidor catalítico.	30
Tabla 4 Variables que influyen en la emisión de SO ₂ [5].	33
Tabla 5 Parámetros de operación del reactor catalítico (valores estándar).	35
Tabla 6 Ejemplo de variables de entrada y variable a predecir.	44
Tabla 7 Correlaciones entre variables en lecho 4, 430 [°C].	45
Tabla 8 Correlaciones entre variables en lecho 4, 435 [°C].	45
Tabla 9 Correlaciones entre variables en lecho 4, 440 [°C].	45
Tabla 10 Acierto de método estadístico "Bosques aleatorios" en lecho 4.	46
Tabla 11 Correlaciones entre variables en lecho 3, 425 [°C].	53
Tabla 12 Correlaciones entre variables en lecho 3, 430 [°C].	54
Tabla 13 Correlaciones entre variables en lecho 3, 435 [°C].	54
Tabla 14 Correlaciones entre variables en lecho 3, 440 [°C].	54
Tabla 15 Acierto de método estadístico "Bosques Aleatorios" en lecho 3.	55
Tabla 16 Correlaciones entre variables lecho 2, 425 [°C].	57
Tabla 17 Correlaciones entre variables lecho 2, 430 [°C].	57
Tabla 18 Correlaciones entre variables lecho 2, 435 [°C].	57
Tabla 19 Acierto de método estadístico "Bosques Aleatorios" en lecho 2.	58
Tabla 20 Correlaciones entre variables lecho 1, 415 [°C].	60
Tabla 21 Correlaciones entre variables lecho 1, 420 [°C].	60
Tabla 22 Acierto de método estadístico "Bosques Aleatorios" en lecho 1.	61
Tabla 23 Parámetros de operación del reactor catalítico.	63
Tabla 24 Temperaturas de reacción previo a cambios en "Set Point".	81
Tabla 25 Balances de Materia y energía en lecho 1 y 2.	82
Tabla 26 Balances de materia y energía en lecho 3 y 4.	83
Tabla 27 Balance de materia y energía del gas frio que ingresa al lecho 2.	84
Tabla 28 Ajuste de valores y % de conversión en cada lecho con sus respectivas temperaturas de reacción.	85
Tabla 29 Temperaturas de reacción posterior a cambios en "Set Point".	86
Tabla 30 Balances de materia y energía en lecho 1 y 2.	87
Tabla 31 Balances de materia y energía en lecho 3 y 4.	88
Tabla 32 Balance de materia y energía del gas frio que ingresa al lecho 2.	89
Tabla 33 Ajuste de valores y % de conversión en cada lecho con sus respectivas temperaturas de reacción.	90

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 Layout Fundición Caletones.	5
Figura 2 Limpieza y acondicionamiento de gases.	8
Figura 3 Zona de contacto, conversión a SO ₃	10
Figura 4 Layout zona de conversión.	13
Figura 5 Catalizador en forma de estrella.	16
Figura 6 Actividad en un catalizador nuevo.	18
Figura 7 Actividad de un catalizador antiguo.	18
Figura 8 Curva de equilibrio.	26
Figura 9 Esquema del convertidor catalítico	29
Figura 10 Gráfico de porcentaje de conversión v/s Temperatura en cada uno de los lechos.	31
Figura 11 Convertidor catalítico PLG N°1.	32
Figura 12 Layout convertidor catalítico.	34
Figura 13 Gráfico concentración de SO ₂ [ppm] versus Tiempo[h].	35
Figura 14 Gráfico porcentaje de SO ₂ versus Tiempo[h].	36
Figura 15 Gráfico flujo gas de entrada [Nm ³ /h] versus Tiempo [h].	37
Figura 16 Gráfico temperatura [°C] versus tiempo[h] en lecho 1.	37
Figura 17 Gráfico temperatura [°C] versus tiempo[h] con representación de las desviaciones estándar, lecho 1.	38
Figura 18 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 2.	38
Figura 19 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] con representación de las desviaciones estándar, lecho 2.	39
Figura 20 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 3.	39
Figura 21 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] con representación de las desviaciones estándar, lecho 3.	40
Figura 22 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 4.	41
Figura 23 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] con representación de las desviaciones estándar, lecho 4.	41
Figura 24 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 4, Set Point=430, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=9,015%; Flujo de entrada=175504,1[Nm ³ /h].	46
Figura 25 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 4, Set point=430, Valores promedios: flujo= 175504,1 [Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=433,7 [°C].	47
Figura 26 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 4, Set point=430, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=9,01%; Temperatura de entrada=433,7 [°C].	47
Figura 27 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 4, Set Point=435, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=8,88%; Flujo de entrada=174902[Nm ³ /h].	48

Figura 28 Efecto %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 4, Set point=435, Valores promedios: flujo= 174902[Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=430,36[°C].	49
Figura 29 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 4, Set point=435, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=8,88%; Temperatura de entrada=430,36[°C].	49
Figura 30 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 4, Set Point=440, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=9,66%; Flujo de entrada=175857,8[Nm ³ /h].	50
Figura 31 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 4, Set point=435, Valores promedios: flujo= 175857,8 [Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=435,44[°C].	51
Figura 32 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 4, Set point=440, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=9,66%; Temperatura de entrada=435,44[°C].	51
Figura 33 Gráfico concentración [ppm] por "Set point".	52
Figura 34 Gráfico concentración [ppm] versus variables involucradas en el proceso (%SO ₂ , flujo de entrada y temperatura de entrada).	53
Figura 35 Gráfico concentración [ppm] por "Set point".	56
Figura 36 Gráfico concentración [ppm] versus variables involucradas en el proceso (%SO ₂ , flujo de entrada y temperatura de entrada).	56
Figura 37 Gráfico concentración [ppm] por "Set Point".	59
Figura 38 Gráfico concentración [ppm] versus variables involucradas en el proceso (%SO ₂ , flujo de entrada y temperatura de entrada).	59
Figura 39 Gráfico concentración [ppm] por "Set point".	62
Figura 40 Gráfico concentración [ppm] versus variables involucradas en el proceso (%SO ₂ , flujo de entrada y temperatura de entrada).	63
Figura 41 Gráfico concentración de SO ₂ [ppm] versus Tiempo[h].	64
Figura 42 Gráfico temperatura de entrada [°C] versus Tiempo[h] en lecho 4, posterior al cambio de "Set Point".	65
Figura 43 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 3, posterior al cambio de "Set Point".	65
Figura 44 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 2, posterior al cambio de "Set Point".	66
Figura 45 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 1, posterior al cambio de "Set Point".	67
Figura 46 Gráfico concentración de SO ₂ [ppm] emitidos a la atmósfera versus % de SO ₂ en flujo de entrada durante 24 horas, previo a las modificaciones.	68
Figura 47 Gráfico concentración de SO ₂ [ppm] emitidos a la atmósfera versus % de SO ₂ en flujo de entrada durante 24 horas, posterior a las modificaciones.	69
Figura 48 Gráfico de resultados según modelo de Matthew Joseph King.	90

Figura 49 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set Point=425, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=8,96%; Flujo de entrada=174956,9[Nm ³ /h].	91
Figura 50 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set point=425, Valores promedios: flujo= 174956,9[Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=425,11[°C].	92
Figura 51 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set point=425, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=8,96%; Temperatura de entrada=425,11[°C].	92
Figura 52 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set Point=430, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=9,2%; Flujo de entrada=169669,2[Nm ³ /h].	93
Figura 53 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set point=430, Valores promedios: flujo= 169669,2[Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=428,38[°C].	93
Figura 54 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set point=430, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=9,2%; Temperatura de entrada=428,38[°C].	94
Figura 55 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set Point=435, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=9,2%; Flujo de entrada=172585,1[Nm ³ /h].	94
Figura 56 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set point=435, Valores promedios: flujo=172585,1[Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=435,2 [°C].	95
Figura 57 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set point=435, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=9,2%; Temperatura de entrada=435,2[°C].	95
Figura 58 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set Point=440, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=9,7%; Flujo de entrada=180499,7[Nm ³ /h].	96
Figura 59 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set point=440, Valores promedios: flujo=180499,7[Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=439,83 [°C].	96
Figura 60 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 3, Set point=440, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=9,7%; Temperatura de entrada=439,83[°C].	97
Figura 61 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 2, Set Point=425, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=9,55%; Flujo de entrada=175317[Nm ³ /h].	98
Figura 62 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 2, Set point=425, Valores promedios: flujo=175317[Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=440,26 [°C].	99

Figura 63 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 2, Set point=425, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=9,55%; Temperatura de entrada=440,26[°C].	99
Figura 64 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 2, Set Point=430, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=9,1%; Flujo de entrada=176351,2 [Nm ³ /h].	100
Figura 65 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 2, Set point=430, Valores promedios: flujo=176351,2[Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=439,83 [°C].	100
Figura 66 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 2, Set point=430, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=9,1%; Temperatura de entrada=449,83[°C].	101
Figura 67 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 2, Set Point=435, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=9,8%; Flujo de entrada=174241,3[Nm ³ /h].	101
Figura 68 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. [%]. Cama 2, Set point=435, Valores promedios: flujo=174241,3[Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=445,57[°C].	102
Figura 69 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 2, Set point=435, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=9,8%; Temperatura de entrada=445,57[°C].	102
Figura 70 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 1, Set Point=415, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=8,7%; Flujo de entrada=176452,9 [Nm ³ /h].	103
Figura 71 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 1, Set point=415, Valores promedios: flujo=176452,9 [Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=415,18[°C].	104
Figura 72 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 1, Set point=415, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=8,7%; Temperatura de entrada=415,18[°C].	104
Figura 73 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 1, Set Point=420, Valores promedios: %SO ₂ de entrada=9,1%; Flujo de entrada=176351,2[Nm ³ /h].	105
Figura 74 Efecto del %SO ₂ de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 1, Set point=420, Valores promedios: flujo=176351,2 [Nm ³ /h]; Temperatura de entrada=419,98[°C].	105
Figura 75 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO ₂ emitida. Cama 1, Set point=420, Valores promedio: %SO ₂ de entrada=9,1%; Temperatura de entrada=4159,98[°C].	106

NOMENCLATURA UTILIZADA EN EL MODELO DE MATTHEW JOSEPH KING [5]

$\phi_E = SO_2$ oxidado en el equilibrio

$\phi = SO_2$ oxidado

$K_E =$ Constante de equilibrio,

$P_{SO_3}^E, P_{SO_2}^E, P_{O_2}^E =$ Presiones parciales de equilibrio de SO_3, SO_2 y O_2

$X^E =$ Fracción molar de cada gas en el equilibrio

$P_t =$ Presión total del gas en el equilibrio

$R =$ Constante de gas, $0,008314 \text{ MJ}(\text{KgmolSO}_2^{-1} \text{ K}^{-1})$

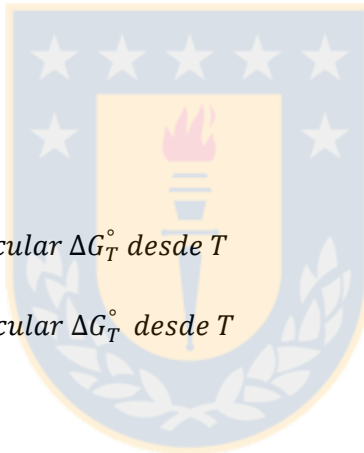
$T_E =$ temperatura de equilibrio

$e = \%SO_2$ en gas de alimentación

$f = \%O_2$ en gas de alimentación

$A =$ Constante empírica para calcular ΔG_T° desde T

$B =$ Constante empírica para calcular ΔG_T° desde T



CAPÍTULO I: INTRODUCCIÓN

Al realizar el análisis actual de la tendencia del cobre refinado dentro de los procesos metalúrgicos nacionales se puede deducir que éste enfrenta un gran desafío en términos de competitividad y productividad que afecta directamente la actividad minera considerando los recursos económicos disponibles en un mediano plazo. Como resultado de lo anterior, el desafío de producir mayor cantidad de cobre catódico y cumplir además con estrictas normas y certificaciones internacionales genera una constante búsqueda en la optimización de los procesos metalúrgicos.

En los yacimientos de cobre se encuentra generalmente la presencia de minerales sulfurados, de tal forma que el proceso adecuado para su tratamiento es a través de técnicas pirometalúrgicas. De acuerdo a la técnica mencionada, se obtiene como resultado el metal blanco y la escoria. Por otra parte, como consecuencia de la etapa de fundición se generan gases con una alta concentración de arsénico, anhídrido sulfuroso y anhídrido sulfúrico, los cuales deben ser limpiados y procesados en las Plantas de Ácido Sulfúrico.

En su totalidad, y de acuerdo a las normativas vigentes, las fundiciones nacionales que actualmente operan, cuentan con la existencia de plantas de Ácido Sulfúrico las cuales pueden ser de simple o doble absorción. La Fundición de Caletones, Codelco División El Teniente, posee dos plantas de ácido sulfúrico de simple absorción: Planta N° 1 y Planta N°2, capaces de producir 1500 y 2350 t/día, respectivamente.

A partir del año 2013, el gobierno de Chile, específicamente, La Comisión Chilena del Cobre, implementó la norma "Emisión para Fundiciones de Cobre y Fuentes Emisoras de Arsénico". El Decreto Supremo D.S N° 28 exige una regulación de las emisiones de dióxido de azufre (95% de la captura y tratamiento del SO₂), arsénico (mayor a 95%) y control en las chimeneas, estableciéndose un máximo anual de emisiones para las instalaciones existentes y un aumento estándar para las futuras fundiciones.

De acuerdo a lo anterior es necesaria la intervención inmediata para aumentar los indicadores de productividad y eficiencia, logrando así, la optimización y el correcto

control de los procesos con el fin de evitar un aumento significativo en la magnitud de los costos de los procesos metalúrgicos.

La presente investigación en estudio tiene por objetivo encontrar una solución que apunte en la dirección de la situación planteada en los párrafos precedentes; determinando las condiciones que permitan maximizar la eficiencia de la planta de ácido sulfúrico mediante la calibración de las temperaturas en el reactor de conversión de anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico de la planta, lo que permitirá contribuir a la disminución de las emisiones de anhídrido sulfuroso (SO_2) hacia la atmósfera.

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivo General

Maximizar la eficiencia de conversión de SO_2 a SO_3 del reactor catalítico de la planta de ácido sulfúrico N°1 de la Fundición Caletones.

1.1.2. Objetivos Específicos

- Recolectar datos de la Fundición Caletones, especialmente de la Planta de Ácido Sulfúrico, obteniendo así, el funcionamiento y diseño de los equipos, parámetros y condiciones de operación.
- Elaborar metodologías que permitan representar teórica y experimentalmente el comportamiento del convertidor catalítico de la planta N°1 para distintas condiciones de operación.
- Validar los resultados obtenidos entre la metodología teórica y la metodología experimental para describir la conversión de anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico en el reactor de catálisis.

CAPÍTULO II: ANTECEDENTES DE LA EMPRESA

Codelco

CODELCO-Chile, Corporación Nacional del Cobre, empresa autónoma propiedad del Estado chileno. Su objetivo principal es la exploración, desarrollo, explotación de recursos mineros cupríferos, siguiendo con su procesamiento hasta convertirlo en cobre refinado. Es el productor de cobre más grande del mundo.

Codelco-Chile cuenta con 7 divisiones: Radomiro Tomic, Chuquicamata, Gabriela Mistral, Ministro Hales, Salvador, Andina y El Teniente, a las que se suma la fundición y refinería Ventanas. Además, la corporación participa de un 49% de la Sociedad Contractual Minera El Abra.

División El Teniente

La División El Teniente está ubicada en la Región del Libertador Bernardo O'Higgins, a 54 kilómetros de la ciudad de Rancagua, en plena Cordillera de los Andes, entre 2.200 y 3.200, metros sobre el nivel del mar.

El Teniente es el yacimiento de cobre subterráneo más grande del planeta. Cuenta con más de 3.000 Km de túneles y comenzó a ser explotado en 1905. Posee reservas minerales hasta el año 2087, lo que lo hace uno de los yacimientos de cobre con mayor proyección y vida a nivel mundial.

Produce más de 400.000 toneladas anuales de cobre fino, aportando significativamente a la producción total de CODELCO que es el mayor productor de cobre a nivel mundial [1], generando sobre un 10% de la producción global.

Fundición Caletones [2]

La Fundición Caletones, procesa 1.400.000 toneladas anuales de concentrado de cobre seco. La componen 5 unidades: PRECA (unidad de preparación de carga), FUCO (unidad fusión conversión), REMO (unidad de Refinación y moldeo), POAN (planta de oxígeno, aire y nitrógeno), PLG (planta de limpieza de gases),

El proceso de la Fundición Caletones comienza con la recepción del concentrado de cobre, proveniente del complejo mina-concentradora de la División El Teniente.

Este concentrado posee un contenido de 30 a 32 % Cobre y una humedad aproximada a 8,5%. Es recepcionado y posteriormente enviado a dos hornos secadores de lecho fluidizado, donde es tratado con una corriente de aire a 250 [°C] de temperatura para disminuir la humedad y obtener un concentrado seco al 0,2% de humedad que se envía a los reactores de fusión.

El proceso de Fusión de concentrado se realiza en dos Convertidores Teniente. El concentrado seco es inyectado continuamente al baño fundido a través de toberas a razón de 80 a 120 [t/h] por convertidor, alcanzando una capacidad de fusión de concentrado del orden de 3400 a 3800 [t/d]. Durante el tiempo de soplado (20 a 23 [h/d]) se genera un eje de alta ley o metal blanco de 74 a 76% de Cobre, una escoria fayalítica líquida con 8 a 12% Cobre y una corriente continua de gases con 24 a 26% anhídrido sulfuroso, en la boca del reactor.

Cada Convertidor Teniente de la Fundición Caletones produce de 700 a 800 [t/d] de metal blanco, extraído de manera discontinua a través de un pasaje de sangría que opera con una placa de cobre refrigerada con agua. El producto obtenido es evacuado periódicamente y transferido, mediante tazas de 400 [pie³] de capacidad, a los convertidores Peirce Smith, donde ocurre el proceso de conversión a cobre blíster.

El reactor Peirce Smith, es un reactor semicontinuo de burbujeo en el que la transformación de matas a cobre blíster se realiza en dos etapas [3]. La primera de desulfuración del sulfuro ferroso con escorificación del hierro y la segunda de soplado hasta cobre blíster.

De acuerdo al proceso anterior se obtiene una escoria con un contenido de 4,5 a 7,0% de Cobre, que es evacuada y transferida a los hornos de limpieza de escoria. Allí, se lleva a cabo un proceso de reducción, sedimentación y recuperación de Cobre.

El metal blanco, producido en los Convertidores Teniente y Hornos de Limpieza de Escoria, es transportado a los convertidores Peirce Smith para realizar el proceso de conversión. El objetivo de la conversión es eliminar gran parte del azufre, fierro y demás impurezas mediante un proceso de oxidación continua. Para obtener este resultado se inyecta al baño fundido del reactor, aire de soplado (enriquecido al 33-

36% O₂) a través de toberas, obteniendo como resultado cobre blíster con 99,3% de Cobre.

Debido al alto nivel de impurezas presentes en el cobre blíster (oxígeno, níquel, plomo, arsénico, selenio, telurio, azufre, bismuto, plata, oro, etc.) es necesario someterlo a un proceso de refinación y generar cobre anódico con 99,6% de cobre. Durante el proceso de refinación el cobre blíster es cargado en los hornos anódicos. Luego, se inyecta aire y petróleo a través de las toberas, al baño fundido y se genera un ambiente oxidante. De esta forma se inicia la oxidación del azufre y de las demás impurezas contenidas en el cobre blíster. Posterior a la oxidación se realiza la reducción para la escorificación, eliminación de arsénico y disminución de oxígeno utilizando carbonato de calcio y carbonato de sodio como fundentes. Finalizado el proceso se extrae la escoria generada y comienza la etapa de moldeo.

Los gases generados durante los procesos de fusión y conversión del concentrado de cobre son enviados a las plantas de limpieza de gases, donde ocurre la conversión de anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico dentro de cada reactor. Posteriormente se produce ácido sulfúrico a través del proceso de absorción.

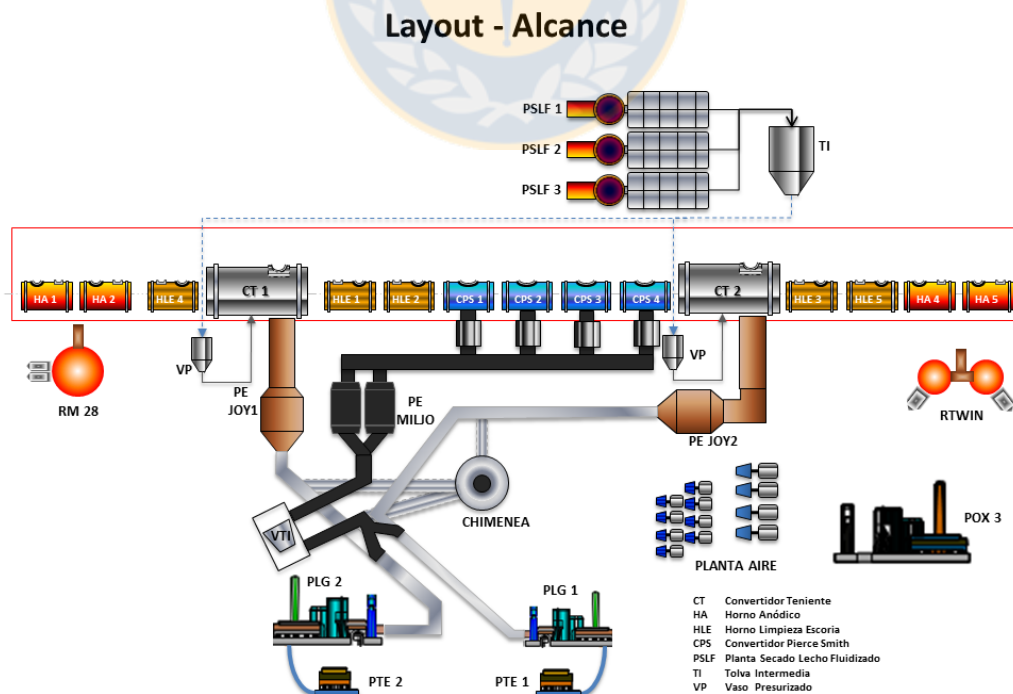


Figura 1 Layout Fundición Caletones.

Manejo de gases

El principal objetivo del manejo de Gases es conducir el total de los gases generados por la fundición a las plantas de limpieza de gases; dicho manejo implica las funciones de captación, enfriamiento, limpieza y acondicionamiento de los gases provenientes de los Convertidores Teniente y los Convertidores Peirce Smith.

El sistema de manejo de gases consta de campanas de captación de gases, enfriadores radiativos para Convertidores Peirce Smith y evaporativos para Convertidores Teniente y precipitadores electrostáticos, como equipos principales. Con estos se lleva a cabo un tratamiento que permite entregar una concentración de anhídrido sulfuroso adecuada y la eliminación de los polvos gruesos y finos que son arrastrados por los gases de fundición.

Planta de ácido sulfúrico

La Fundición Caletones cuenta con dos plantas de limpieza de gases (PLG N°1 y PLG N°2) las que tienen como objetivo la remoción de anhídrido sulfuroso y contaminantes metálicos contenidos en los gases provenientes del proceso de Fusión y conversión del concentrado de cobre.

La Planta de Limpieza de Gases N°1, del tipo contacto simple, es capaz de producir 1500 [t/d] de ácido sulfúrico. La planta mencionada tiene como objetivo tratar los gases provenientes del Convertidor Teniente N°2. En contraste, la Planta de Limpieza de Gases N°2, es capaz de producir 2350 [t/d] de ácido sulfúrico, procesando los gases provenientes del Convertidor Teniente N°1.

Ambas plantas poseen un proceso similar que consiste en las siguientes etapas:

- Enfriamiento y limpieza de gases
- Contacto (reacción de oxidación del SO_2 a SO_3)
- Absorción (generación de ácido sulfúrico)

Enfriamiento y Limpieza de gases

El gas proveniente de los Convertidores Teniente ingresa a la sección de purificación de gas a través de la succión realizada por los sopladores presentes en las zonas de contacto de cada planta.

Las plantas N°1 y N°2 poseen zona de limpieza, conversión y absorción. En la zona de limpieza es posible distinguir diferencias entre ambas plantas, tales como; la planta N° 1 posee un atrapa gotas y la planta N°2 posee, adicionalmente, 2 trenes de limpieza y enfriamiento y un enfriador Venturi. La función del atrapa gotas es atrapar gotas de mayor diámetro presente en el flujo de gas. El enfriador Venturi por su parte está encargado de reducir la temperatura por evaporación de agua en el gas, a través de un proceso denominado enfriamiento adiabático y por último la duplicación de trenes de limpieza y enfriamiento se debe al enorme de flujo que lleva la planta N°2 en comparación con la planta N°1.

Planta de Limpieza de Gases N°1 (PLG 1)

En el área de limpieza de gases de la PLG 1 se encuentran los siguientes equipos:

- Torre de lavado
- Lavador de flujo radial
- Atrapa gotas
- Torre de enfriamiento de gas
- Torre de desgasificación de ácido diluido
- 3 Precipitadores electrostáticos de 2 pasos cada uno

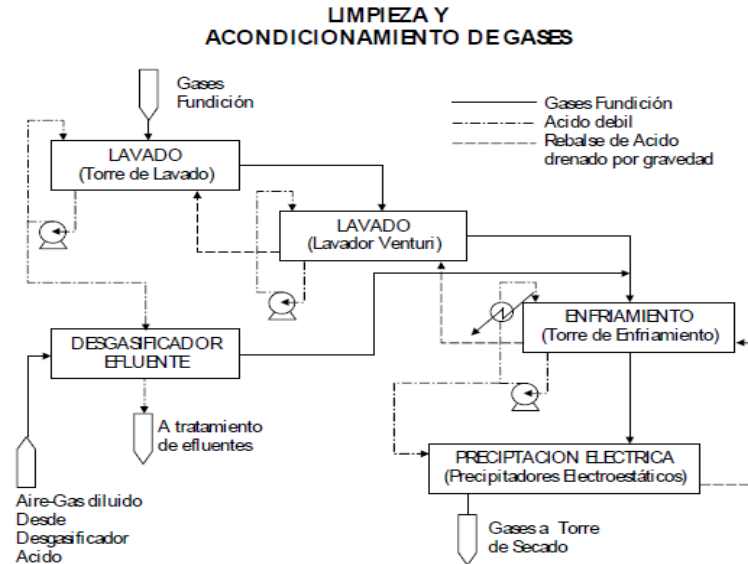


Figura 2 Limpieza y acondicionamiento de gases.

Torre de lavado

La torre de lavado es el primer equipo de limpieza y enfriamiento de gases. Opera con ácido diluido en contra-corriente con los gases que ingresan a una temperatura aproximada de 320-340 [°C], eliminando la mayor cantidad de partículas pesadas, tales como arsénico, selenio, plomo y polvos metalúrgicos, a través de su condensación y atrapamiento mecánico. Limpio el gas, es enfriado hasta una temperatura de 55-60 [°C] adiabáticamente, por evaporación del agua presente en el ácido de lavado hasta el punto de saturación de los gases con vapor de agua.

El líquido en exceso es direccionado al desgasificador de efluente para, posteriormente, ser enviado a la planta de tratamiento de efluentes.

Lavador de flujo radial

El gas que sale de la torre de lavado se dirige directamente al lavador de flujo radial, donde ocurre la mayor limpieza en cuanto a polvos metalúrgicos se refiere.

El funcionamiento del lavador de flujo radial ocurre en 2 etapas. En la primera etapa, a través de un atomizador central, se realiza un lavado que permite retirar parte de las impurezas. En la segunda etapa, se utiliza una garganta variable que permite controlar el diferencial de presión en la torre, convirtiendo el flujo de gas en

flujo radial, mediante un proceso denominado goteo variable. Así, gran parte de las partículas que contiene el gas impactan contra la pared del equipo y son capturadas por el líquido depurador (ácido débil). De esta manera mejora la eficiencia de captura de material particulado condensado y retirado en el lavado.

Atrapa gotas

Persiana destinada a atrapar gotas de mayor diámetro presente en el flujo de gas.

Torre de enfriamiento de gas

El gas proveniente del atrapa gotas ingresa directamente a la torre de enfriamiento de gas, conocida como torre empacada, la cual cuenta con un relleno de esferas de polipropileno, alcanzando un total de 183 [m³] de relleno y diseñadas con el objetivo de enfriar el gas.

Durante el funcionamiento de la torre de enfriamiento el gas es introducido a la torre por la parte inferior de esta; atraviesa todo el relleno y es contactado en contracorriente con el flujo de ácido débil que es agregado a través de las boquillas inyectoras ubicadas en la parte superior de la torre. De esta forma la temperatura del gas desciende desde 65 a 69 [°C] hasta aproximadamente 27 a 31 [°C], disminuyendo, en consecuencia, la cantidad de agua contenida en el gas por condensación.

Precipitadores electrostáticos

Posterior a la etapa de lavado y enfriamiento, el gas ingresa a los precipitadores electrostáticos húmedos de tubo. Hay tres módulos de precipitadores de dos componentes cada uno. La función de los precipitadores es captar partículas de polvo y líquido (neblina ácida) decantando por arrastre de la humedad. El gas ingresa al primer precipitador por su parte superior y es transportado a la parte inferior de este, donde se distribuye a los tubos colectores a través de placas de distribución. En el centro de cada tubo colector existe un electrodo. Este es capaz de esparcir una carga positiva a cada una de las partículas de la neblina de entrada. Al avanzar el gas ascendentemente las partículas ya cargadas son recolectadas en la superficie del

colector cargado negativamente. El gas parcialmente limpio sale a través del vestíbulo superior.

En el segundo precipitador ocurre el mismo proceso del primer precipitador, con la diferencia que se logra un gas totalmente limpio.

Contacto

El área de conversión y contacto en la PLG N°1 se encarga de secar los gases acondicionados en la zona de limpieza y convertir el anhídrido sulfuroso en anhídrido sulfúrico. Los equipos involucrados en esta área son:

- Torre de secado
- Soplador
- Convertidor catalítico

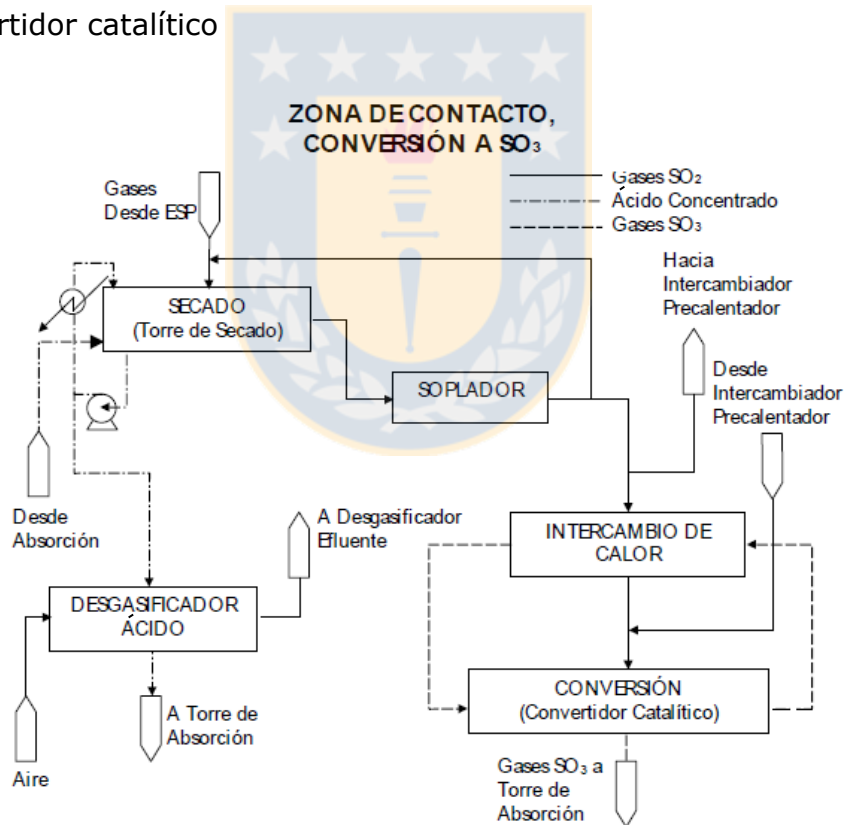


Figura 3 Zona de contacto, conversión a SO₃.

Torre de secado

El primer equipo perteneciente al área de contacto es la torre de secado de gases, encargada de remover la humedad del gas mediante la absorción en ácido sulfúrico. Dentro de esta torre, el gas húmedo es puesto a un intenso contacto en contracorriente con ácido sulfúrico concentrado al 96,5%. A través del relleno que posee la torre el ácido sulfúrico absorbe toda la humedad del gas, evitando posibles daños en la sección de contacto con los ácidos producidos por la condensación de ácidos que se forman. Para evitar que goteos de ácido (vapor ácido) sean acarreados por el gas, el gas que sale de la torre de secado pasa a través de un eliminador de neblina especialmente diseñado.

Debido a la reacción exotérmica existente entre el agua y el ácido sulfúrico, el calor debe ser retirado mediante intercambiadores de calor tipo placas de ácido/agua antes de regresar a la torre de secado, para enfriar el ácido y favorecer la condensación de la torre.

Soplador

Limpio y seco el gas, este es comprimido y forzado a fluir a través del resto de la planta por el soplador principal de gas. El soplador tiene un sistema de control de tiraje de succión y un sistema de desvío del gas recirculante, lo que permite manejar la tasa de flujo durante la operación del gas correspondiente a las operaciones del Convertidor Teniente.

Convertidor catalítico

El flujo de gas limpio y seco proveniente de la torre de secado, es impulsado por el soplador y llega al convertidor catalítico. La conversión de anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico toma lugar en el convertidor.

Los gases, impulsados por el soplador, son calentados a través de dos intercambiadores de calor tipo Gas/Gas (E.341 y E.321) y los flujos regulados por dos damper (TV-311 y TV-314). Se debe alcanzar una temperatura óptima de ingreso al primer lecho catalítico.

En el primer lecho del convertidor ocurre una reacción de oxidación del anhídrido sulfuroso convirtiéndolo a anhídrido sulfúrico bajo una reacción altamente exotérmica. El gas de salida del primer lecho debe ser enfriado para alcanzar una temperatura óptima de ingreso al segundo lecho. Se ingresa gas frío a través de un damper.



En el segundo lecho continúa la reacción de oxidación. El anhídrido sulfuroso es oxidado convirtiéndolo en anhídrido sulfúrico y liberando energía. Para disminuir la temperatura a la cual sale el gas de la cama 2, se envía el gas al intercambiador E.321 (gas/gas) y luego se mezcla con gas frío proveniente del soplador.

Los gases nuevamente enfriados vuelven a entrar al Convertidor catalítico, pero esta vez al tercer lecho, ocurriendo la misma reacción. Al retirarse el gas de la cama 3 es direccionado al intercambiador E.331 (gas/gas), donde el ventilador B.331 es el encargado de enviar aire frío desde el ambiente regulado a su vez por el damper tv-3004.

Posteriormente, el gas es enviado al lecho cuatro donde ocurre la última conversión de anhídrido sulfuroso.

El gas proveniente del lecho cuatro es utilizado para precalentar el gas frío que ingresa al primer lecho en el intercambiador E.341 (Gas/Gas). Posteriormente y antes de que los gases ingresen a la torre de absorción, se vuelven a enfriar con el intercambiador E.351 (Gas/Aire), utilizando para ello aire atmosférico.

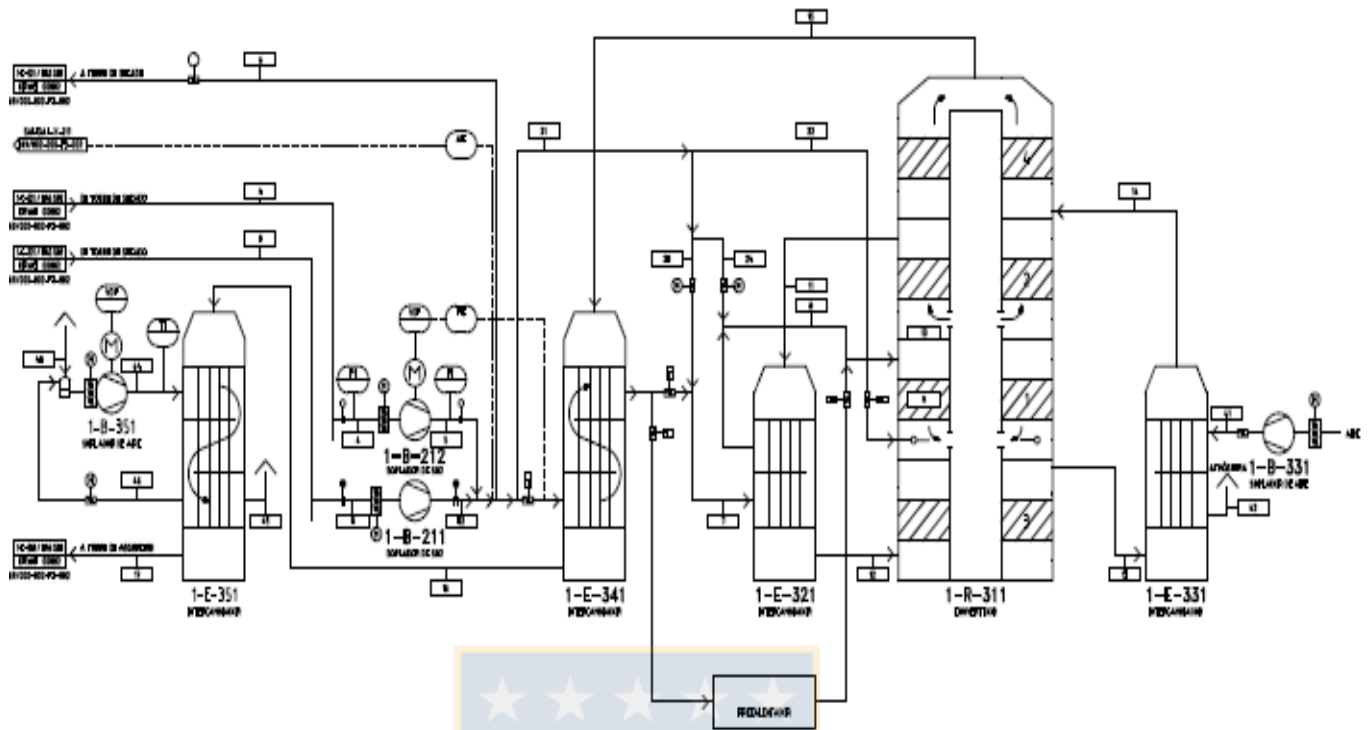


Figura 4 Layout zona de conversión.

La reacción de oxidación en cada uno de los lechos es promovida por variados catalizadores basados principalmente en el uso del pentóxido de vanadio. Este tiene como objetivo acelerar la reacción entre el anhídrido sulfuroso y el oxígeno para obtener como producto anhídrido sulfúrico.

En el caso de la planta de limpieza de gases N°1 se encuentran los siguientes catalizadores:

Tabla 1 Catalizadores reactor catalítico PLG 1.

	Catalizador
Cama 1	VK-59 y VK-38
Cama 2	VK-38
Cama 3	VK-48
Cama 4	VK-701

En el anexo A se presentan las características de cada uno de los catalizadores presentes dentro del reactor.

Absorción

Torre de Absorción

Posterior a la etapa de conversión catalítica el anhídrido sulfúrico ingresa a la torre de absorción. Es sistema de absorción está diseñado para absorber el 99% del SO_3 de los gases y para ello cuenta con una torre con relleno cerámico, en la cual los gases fluyen en contracorriente con ácido sulfúrico concentrado. De esta forma, el anhídrido sulfúrico en condiciones adecuadas de concentración y temperatura, es absorbido generando más ácido sulfúrico, aumentando así la concentración y temperatura del ácido. Los gases no absorbidos, en su mayoría nitrógeno y oxígeno, son enviados a la atmósfera a través de la chimenea que posee cada planta de ácido.

Planta de tratamiento de efluentes

Los efluentes generados por las plantas de ácido son captados por dos plantas de tratamiento de efluentes: ETP N°1 y ETP N°2. Ambas utilizan el mismo concepto fisicoquímico en el tratamiento de efluentes, la única diferencia entre una y otra son los equipos utilizados.

El propósito principal de la planta de efluentes es recibir los efluentes de desecho de ácido provenientes desde la planta de ácido con el objetivo de tratarlos obteniendo así residuos sólidos y líquidos que sean seguros desde el punto de vista de su manejo y que cumplan con los reglamentos medioambientales.

Los residuos líquidos (agua tratada o neutralizada) producto de tratamiento desarrollado en la planta de efluentes deben contener menos de 1 [mg/l] de arsénico, un máximo de 50 [ppm] de anhídrido sulfuroso y menos de 50 [ppm] de ácido sulfúrico. Por su parte los residuos sólidos calcinados estabilizados (Arseniato de Calcio encapsulado en una matriz de sulfato de calcio) no contendrán más de 5 [mg/l] de arsénico (soluble) al someterlo al test de lixiviación estándar de TCLP.

CAPÍTULO III: MARCO TEÓRICO

3.1. Catalizador

Uno de los pasos más importantes durante la fabricación de ácido sulfúrico es la oxidación de anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico. Esto se logra al pasar gases de dióxido de azufre y oxígeno a través de un lecho compuesto por catalizadores, de acuerdo a la mencionada ecuación:



Todas las oxidaciones industriales de anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico son cinéticamente inhibidas y virtualmente imposibles sin un catalizador a cualquier temperatura [4]. Esta reacción es extraordinariamente lenta a temperaturas menores que 650 [K], por tanto, sin un catalizador la temperatura requerida para la oxidación del anhídrido sulfuroso es extremadamente alta y la conversión en el equilibrio es baja.

De todas las sustancias probadas con actividad catalítica para la oxidación del dióxido de azufre, es el pentóxido de vanadio el de uso casi exclusivo, el cual se ubica en uno o más lechos en un equipo conocido como Convertidor Catalítico.

3.1.1. Composición de un catalizador

Los catalizadores presentes en el mercado están basados principalmente en el uso de pentóxido de vanadio, pero tienen distintas propiedades dependiendo de su tamaño, forma y composición química. Un típico catalizador basado en pentóxido de vanadio contiene; 5-10% V_2O_5 , 10-20% K_2SO_4 , 1-5% Na_2SO_4 y 55-70% SiO_2 [5].

En algunos casos el K_2SO_4 puede ser sustituido por sulfato de cesio (Cs_2SO_4) en la mezcla. Todos los componentes presentes en la mezcla son activos a excepción del SiO_2 , que actúa como soporte para los demás componentes.

Los componentes del catalizador son mezclados hasta formar una pasta que se hornea a 800 [K] en forma de pellets (cilindro sólido), anillos cilíndricos sólidos o estrellas. La primera forma es la más antigua y la menos eficiente, esto debido a la dificultad que tienen los reactantes de difundirse hasta el centro del catalizador y de

manera inversa, la dificultad de difusión de los productos hacia afuera. Por otra parte, los catalizadores en forma de anillo son pequeños cilindros con un espacio vacío en la parte intermedia, en contraste al catalizador anterior, proporcionan acceso a los reactantes a la parte central, dando como resultado una utilización completa. Por último, el catalizador en forma de estrella, es una mejora respecto a los modelos anteriores, posee canales en la parte externa que permiten una mayor y más rápida difusión de los reactantes y productos.

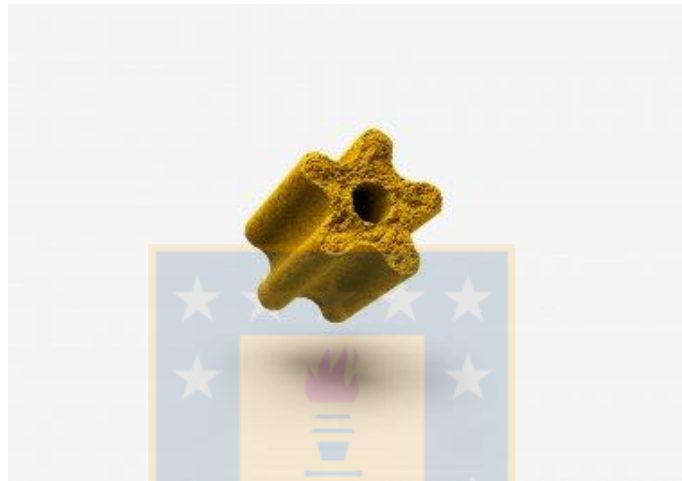


Figura 5 Catalizador en forma de estrella.

3.1.2. Mecanismo de catalización

El catalizador pentóxido de vanadio tiene por objetivo acelerar la reacción entre el anhídrido sulfuroso y el oxígeno para formar anhídrido sulfúrico. El catalizador utilizado en la fabricación de ácido sulfúrico es el pentóxido de vanadio (5-10%V en peso), el cual es considerado un catalizador relativamente pobre, en consecuencia, para alcanzar elevadas velocidades de conversión necesita aditivos denominados "activadores".

Dentro de los activadores utilizados en la empresa de los catalizadores de pentóxido de vanadio se encuentran, el sulfato de potasio y el sulfato de cesio, este último superior a los demás, debido a la propiedad que posee de reducir el punto de reacción del catalizador, pudiendo, por lo tanto, ser utilizado a menores temperaturas.

Numerosas investigaciones realizadas durante los últimos 30 años, han tratado de describir la cinética de oxidación del anhídrido sulfuroso en presencia de un catalizador. El modelo más conocido para el curso de la reacción es la de Mars y Maessen [6]. De acuerdo con esto, el equilibrio se expresa formalmente como:



El paso determinante de la reacción se cree que es la re-oxidación del V^{4+} con oxígeno molecular



3.1.3. Actividad del catalizador

La actividad es una medida de la capacidad del catalizador para convertir dióxido de azufre en trióxido de azufre. A mayor actividad como catalizador, se necesitará menor cantidad de catalizador para alcanzar la conversión requerida. La formulación química es el factor principal en la actividad del catalizador, aunque otros factores pueden también afectar su actividad como la forma del catalizador, estructura de los poros, manufactura y edad del mismo.

En términos de su edad, la actividad de un catalizador de pentóxido de vanadio, se representa a través de gráficos proporcionados por la empresa "Haldor Topsoe", proveedora de catalizadores de las plantas de ácido sulfúrico de la Fundación Caletones. La Figura 6 corresponde a las curvas de equilibrio y trabajo con catalizador nuevo y la Figura 7 con catalizador usado.

Tal y como se observa en la Figura 6, la curva de operación "Operation curve" tiene un máximo, para el cual la conversión es máxima. Este punto tiene definida una temperatura óptima, señalada con la recta rosa, la cual debería ser la de diseño del reactor.

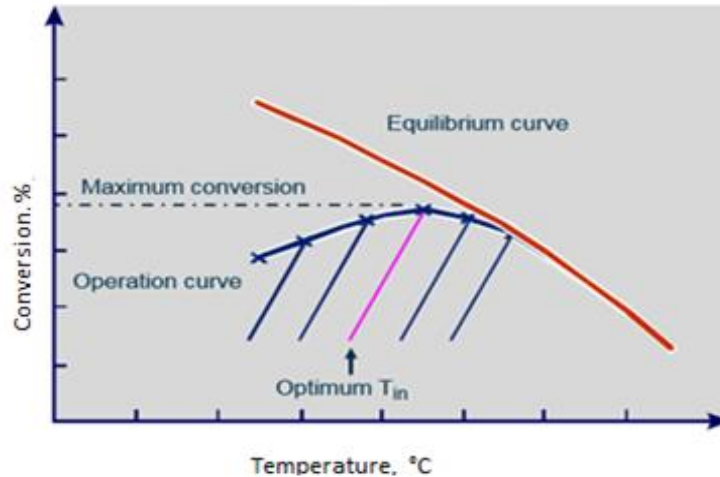


Figura 6 Actividad en un catalizador nuevo.

Por otro lado, la Figura 7 muestra lo que sucede con la curva de operación a medida que el catalizador pierde actividad. Se observan 4 curvas de operación: 100 (catalizador nuevo), 80, 60 y 40, en las que se aprecia que a medida que disminuye la actividad, el punto máximo de conversión se va desplazando hacia la derecha. Esto origina que la temperatura óptima de entrada al lecho sea cada vez mayor para lograr la mayor conversión.

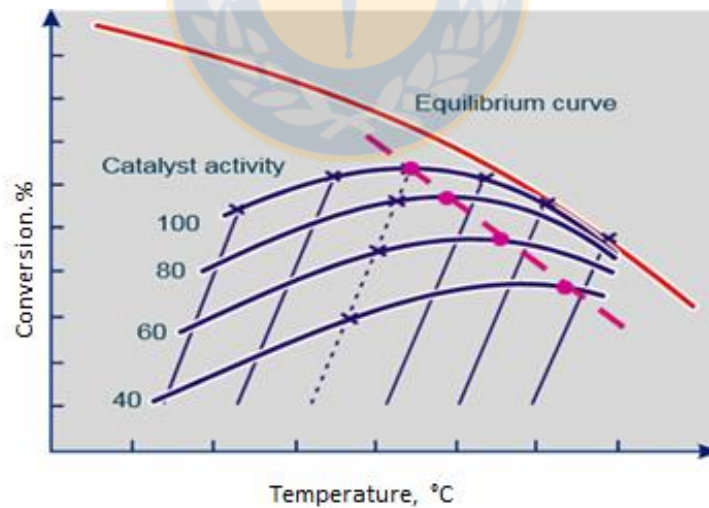


Figura 7 Actividad de un catalizador antiguo.

3.1.4. Comportamiento en el medio ambiente

Agua: los compuestos de vanadio poseen mayor densidad que el agua y se depositan en el fondo. El pentóxido de vanadio se disuelve lentamente en grandes volúmenes de agua generando mezclas tóxicas.

Aire: La atmósfera representa un medio de transporte. El pentóxido de vanadio es un reactivo sólido que favorece la combustión de otras sustancias combustibles.

Suelo: los compuestos de vanadio son geogénicos y se encuentran en todas partes. El vanadio es un oligoelemento esencial y sus compuestos son asimilados por las plantas e incorporados a sus procesos de crecimiento. Así, el vanadio es extraído del suelo e ingresa a la cadena alimentaria.

3.2. Bosques Aleatorios

3.2.1. Minería de datos

Minería de datos es una técnica que permite obtener patrones o modelos a partir de los datos recopilados [7], busca el procesamiento de información de forma clara, con tal de poder clasificar la información de acuerdo a los parámetros inicialmente establecidos y de acuerdo a las necesidades que se buscan, es decir, por medio de la minería de datos se dan acercamientos claros a resultados estadísticamente factibles a entendimiento y razón de una persona.

La minería de datos produce 5 tipos de algoritmos:

- Algoritmos de clasificación
 - Predice una o más variables discretas basándose en otros atributos del conjunto de datos.
- Algoritmos de regresión
 - Predice una o más variables continuas, como las pérdidas o los beneficios, basándose en otros atributos del conjunto de datos.
- Algoritmos de segmentación
 - Divide los datos en grupos, o clústeres, de elementos que tienen propiedades similares.
- Algoritmos de asociación
 - Busca correlaciones entre diferentes atributos de un conjunto de datos. La aplicación más común de esta clase de algoritmo es la creación de reglas de asociaciones.
- Algoritmos de Análisis de secuencias
 - Resume secuencias o episodios frecuentes en los datos.

3.2.1.1. Árboles de decisión

Dentro de las técnicas de clasificación se encuentra una herramienta de clasificación muy potente denominada "Árboles de decisión". Un modelo de árboles de decisión tiene un nodo primario único que representa el modelo y sus metadatos. Debajo del nodo primario aparecen árboles independientes que representan los atributos de predicción que se seleccionan [8]. Su uso en el manejo de datos la hace ganar en popularidad por las posibilidades que otorga y la facilidad con que son comprendidos sus resultados por cualquier usuario. El árbol en sí mismo, al ser obtenido, determina una regla de decisión. Esta técnica permite [9]:

- Segmentación: establecer que grupos son importantes para clasificar un cierto ítem.
- Clasificación: asignar ítems a uno de los grupos en que esta particionada una población.
- Predicción: establecer reglas para hacer predicciones de ciertos eventos.
- Reducción de la dimensión de los datos: identificar que datos son los importantes para hacer modelos de un fenómeno.
- identificación-interrelación: identificar que variables y relaciones son importantes para ciertos grupos identificados a partir de analizar los datos.
- Recodificación: discretizar variables o establecer criterios cualitativos perdiendo la menor cantidad posible de información relevante.

3.2.1.2. Los árboles de decisión y bosques aleatorios

Los árboles de decisión constituyen un método fácil de trabajar, con posibilidad de ser aleatorio y con posible complejidad variable, por ello constituyen un clasificador débil. A través de estrategias denominadas Bagging y Boosting es posible mejorar las cualidades del método árboles de decisión. Bagging es una estrategia capaz de entrenar muchos clasificadores débiles independientes y al final se combinan todos en un clasificador fuerte, por otra parte, Boosting es una estrategia capaz de entrenar una serie de clasificadores débiles, mejorando el clasificador anterior, terminando en un clasificador fuerte [10].

Bosques aleatorios o Random Forest son esencialmente bagging para árboles de decisión.

3.2.1.3. Random Forest

Random Forest [11] es un algoritmo para clasificación y regresión de amplio uso en la comunidad que tiene un rendimiento especialmente bueno para datos de alta dimensionalidad.

Random Forest trabaja de forma eficiente con bases de datos grandes y puede manejar cientos de variables sin excluir a ninguna [12]. Sin embargo, en los casos en los que la base de datos contiene variables categóricas con diferentes números de niveles, el random forest, se parcializa a favor de aquellos atributos con más categorías [13]. Por tanto, la posición que marca la variable no es fiable para este tipo de datos aunque existen soluciones que remedian esta situación. La forma de construir el clasificador final mediante este método puede resumirse en los pasos siguientes:

- Se crea aleatoriamente varios conjuntos de entrenamiento con el mismo tamaño que el conjunto original. Al seleccionarse de esta forma, no todos los datos de la muestra training estarán necesariamente en los subconjuntos de entrenamiento. En cada punto de división del árbol, búsqueda de la mejor variable para dividir los datos no se realiza sobre todas las variables de las que dispone el modelo, sino sobre un subconjunto de las mismas. Se busca la mejor división de los datos de entrenamiento teniendo en cuenta solo las variables seleccionadas
- Para cada uno de los diferentes subconjuntos construidos se obtiene el correspondiente subclasificador
- Una vez construidos todos los subclasificadores, la evaluación de cada nueva entrada se realiza con el conjunto de árboles generados por el Forest Random. La categoría final de cada individuo (clasificación) se lleva a cabo mediante el voto mayoritario del conjunto de árboles, y en caso de regresión, por el valor promedio de los resultados.

Su implementación es sencilla, directa y se puede realizar a través de la función random Forest de la propia librería random forest de R, en donde se tendrá que especificar el número de árboles que se desea construir así como el número de variables empleadas para cada una de ellos.

Dentro de las ventajas del método Random Forest se encuentra su rapidez de ejecución y la capacidad de análisis de datos desbalanceados y desaparecidos, además de ser uno de los algoritmos más certeros de aprendizaje disponible. Por otra parte, también posee debilidades, tales como, sobreajustes en ciertos sets de datos con tareas de clasificación ruidosa y difícil interpretación, entre otros [12].



CAPÍTULO IV: APLICACIÓN DEL MODELO DE MATTHEW JOSEPH KING

El modelo de Matthew Joseph King permite predecir el comportamiento de un catalizador para la reacción de oxidación de SO_2 a SO_3 mediante el empleo del equilibrio termodinámico en función de la temperatura. A través de la implementación de modelo de Matthew Joseph King [5] se pretende estudiar el comportamiento del sistema frente a la sensibilidad de parámetros de entrada en la planta y así analizar la influencia de las variaciones en la entrada y el efecto que provocan en la conversión catalítica de anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico.

Para la aplicación del modelo matemático se realizaron balances de materia y energía requeridos para cada uno de los lechos existentes dentro del reactor catalítico. Por tanto, se requiere entender y desarrollar la curva de equilibrio de oxidación del anhídrido sulfuroso.

Para el desarrollo del modelo matemático se asumió lo siguiente:

- La reacción que se lleva a cabo en cada lecho del Convertidor Catalítico ocurre de forma adiabática, debido al recubrimiento de ladrillos refractarios presentes en el equipo.
- Polvos, impurezas y neblina ácida dentro del gas de entrada al Convertidor Catalítico, son despreciables.
- El nitrógeno no reacciona pero consume calor dentro del balance de energía.
- Presión total constante durante todo el proceso.
- La Concentración de dióxido de carbono es despreciable. Esta podría afectar debido a su capacidad calorífica, en la conversión del anhídrido sulfuroso.

4.1. Curva de Equilibrio

La oxidación de anhídrido sulfuroso junto con oxígeno para producir anhídrido sulfúrico es una reacción exotérmica reversible [5].



Donde

$$\Delta H_{298K}^{\circ} = -99 \left[\frac{MJ}{Kg - mol \text{ de } SO_2} \right] \quad (6)$$

3.1.1. El porcentaje %SO₂ oxidado

Esta ecuación es utilizada en los primeros lechos del reactor catalítico. Se utiliza en el cálculo de la curva de equilibrio.

$$\begin{aligned} \%SO_2 \text{Oxidado} &= \phi & (7) \\ &= \frac{(Kg - mol SO_2 \text{ en gas de alim}) - (Kg - mol SO_2 \text{ en gas oxidado})}{(Kg - mol SO_2 \text{ en gas de alim})} * 100 \end{aligned}$$

Un caso especial de esta definición es:

$$\begin{aligned} \%SO_2 \text{Oxidado en el equilibrio} &= \phi^E & (8) \\ &= \frac{\left(Kg - mol SO_2 \text{ en gas de alimentacion} \right) - \left(Kg - mol SO_2 \text{ en gas oxidado cuando alcanzó el equilibrio} \right)}{\left(Kg - mol SO_2 \text{ en gas oxidado cuando alcanzó el equilibrio} \right)} * 100 \end{aligned}$$

4.1.2. Ecuación de equilibrio

La ecuación de equilibrio de oxidación de SO₂ a SO₃ es:

$$K_E = \frac{P_{SO_3}^E}{P_{SO_2}^E (P_{O_2}^E)^{\frac{1}{2}}} \quad (9)$$

El gas de alimentación que ingresa a la planta contiene SO₂, O₂, N₂, luego de la etapa de oxidación, el gas contiene SO₂, O₂, N₂ y SO₃

$$P_{SO_2}^E = X_{SO_2}^E * P_t \quad (10)$$

$$P_{O_2}^E = X_{O_2}^E * P_t \quad (11)$$

$$P_{SO_3}^E = X_{SO_3}^E * P_t \quad (12)$$

4.1.3. Constante de equilibrio en función de la temperatura

La constante de equilibrio representada en la ecuación anterior, se relaciona con la temperatura de equilibrio por:

$$\ln(K_E) = \frac{-\Delta G_T^\circ}{(R * T_E)} \quad (13)$$

ΔG_T° Es la energía libre de Gibbs para la conversión del anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico. Dada de la siguiente forma:

$$\Delta G_T^\circ = A * T + B \quad (14)$$

Donde A y B son constantes empíricas que relacionan la energía libre de Gibbs con la temperatura [5]:

$$A = 0,09357 \text{ MJ Kg}^{-1} \text{ mol SO}_2^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (15)$$

$$B = -98,41 \frac{\text{MJ}}{\text{Kg}^{-1} \text{ mol SO}_2} \quad (16)$$

Reescribiendo se tiene:

$$R * T * \ln(K_E) = A * T_E - B \quad (17)$$

Despejando la temperatura se tiene:

$$T_E = \frac{-B}{A + R * \ln(K_E)} \quad (18)$$

4.1.4. Constante de Equilibrio en términos del porcentaje de SO_2 oxidado [5].

$$K_E = \frac{\phi^E}{100 - \phi^E} * \left(\frac{100 - \frac{1}{2} * e * \frac{\phi^E}{100}}{f - \frac{1}{2} * e * \frac{\phi^E}{100}} \right)^{\frac{1}{2}} * P_t^{-\frac{1}{2}} \quad (19)$$

4.1.5. Porcentaje de SO_2 oxidado en función de la temperatura, en el equilibrio.

$$T_E = \frac{-B}{A + R * \ln \left[\left(\frac{\phi^E}{100 - \phi^E} \right) * \left(\frac{100 - \frac{1}{2} * e * \frac{\phi^E}{100}}{f - \frac{1}{2} * e * \frac{\phi^E}{100}} \right) * P_t^{-\frac{1}{2}} \right]} \quad (20)$$

4.1.6. Representación gráfica de la curva de equilibrio

Al graficar la curva de equilibrio con los valores estipulados de operación de oxígeno y anhídrido sulfuroso en el gas de alimentación, se tiene:

Tabla 2 Parámetros de operación.

Parámetros	
B [MJ/(Kg-mol)]	-98,41
A [1/Kg-mol*K]	0,09357
R [MJ/Kg-mol* K ⁻¹]	0,008314
e [%]	8,78
f [%]	13,93
p [bar]	0,20092379
T [K]	693,1235

Dónde B y A son constantes empíricas para calcular ΔG_T° desde T, R es constante de gas 0,008314 [MJ Kg- mol SO₂⁻¹ K⁻¹], es el %SO₂ en alimentación, f es el %O₂ en la alimentación.

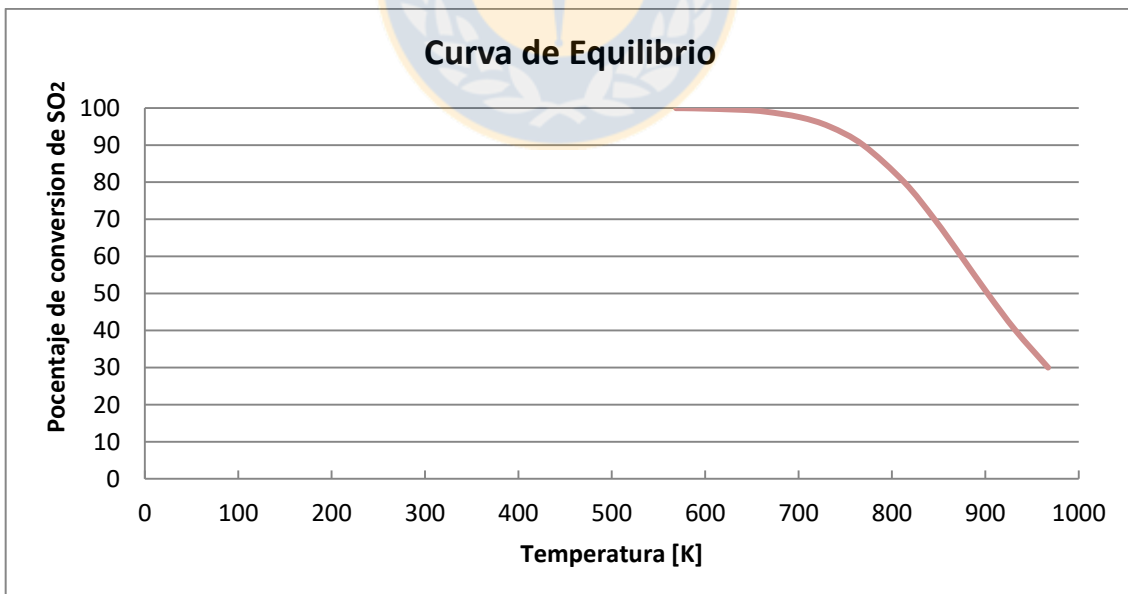


Figura 8 Curva de equilibrio.

4.2. Balance de Materia y Energía en el Convertidor Catalítico.

4.2.1. Balance de energía

$$\sum_{i=1}^n m_j H_{Ti}(\text{input}) = \sum_{j=1}^n m_j H_{Tj}(\text{outputs}) + \text{conductividad, convectividad} \quad (21)$$

y radiactividad perdida

Los términos de pérdida de calor conductivo, convectivo y radiativo representan la pérdida de calor desde el primer lecho del reactor. El calor es conducido a través de las paredes externas del primer lecho del reactor y se libera al entorno por convección y radiación [5].

Al considerar que la reacción se comporta de manera adiabática, se tiene que:

$$\sum_{i=1}^n m_j H_{Ti}(\text{input}) = \sum_{j=1}^n m_j H_{Tj}(\text{outputs}) \quad (22)$$

Entonces,

$$\Delta H_{in} = Kg - mol SO_2 (in) * H^{\circ}_T (in) + Kg - mol O_2 (in) * H^{\circ}_T (in) + Kg - mol N_2 (in) * H^{\circ}_T (in) \quad (23)$$

$$\Delta H_{out} = Kg - mol SO_2 (out) * H^{\circ}_T (out) + Kg - mol O_2 (out) * H^{\circ}_T (out) + Kg - mol N_2 (in) * H^{\circ}_T (out) + Kg - mol SO_3 (out) \quad (24)$$

Las entalpias se calculan a partir de la sumatoria de los calores de formación y la capacidad calorífica promedio.

$$\Delta H^{\circ} = \Delta H_f^{\circ}_{298} + Cp_n^p \quad (25)$$

Donde,

$$Cp_n^p = Cp_n * \Delta T \quad (26)$$

La capacidad promedio se calcula a partir de la integral:

$$Cp_n^p * \Delta T = \int_{T_1}^{T_2} Cp * dt \quad (27)$$

Donde

$$Cp = A + B * 10^{-3}T + C * 10^5 T^{-2} + D * 10^{-6} T^2 \quad (28)$$

4.2.2. Balance de masa.

Basado en una alimentación de 1 Kg-mol de gas seco a la primera cama del reactor catalítico de la planta de limpieza de gases N°1, en un sistema a régimen permanente. Los Kg-mol de cada componente de alimentación de gas son calculados en los siguientes ítems.

Cantidad de SO_2 , O_2 , N_2 en gas de entrada

$$Kg - mol SO_2 (in) = \frac{mol \%SO_2 \text{ en el gas de alim}}{100} * 1 Kg - mol \text{ de gas de alim} \quad (29)$$

Considerando que:

$$\%mol = \%volumen \quad (30)$$

Se tiene:

$$Kg - mol SO_2(in) = \frac{volumen \%SO_2 \text{ en gas de alim}}{100} * 1Kg - mol \text{ de gas de alim} \quad (31)$$

$$Kg - mol O_2(in) = \frac{volumen \%O_2 \text{ en gas de alim}}{100} * 1 Kg - mol \text{ de gas de alim} \quad (32)$$

$$Kg - mol N_2(in) = \frac{volumen \%N_2 \text{ en gas de alim}}{100} * 1 Kg - mol \text{ de gas de alim} \quad (33)$$

a) Balance Molar del Azufre

$$Kg - mol S_{in} = Kg - mol S_{out} \quad (34)$$

$$1 * Kg - mol SO_2 (in) = 1 * Kg - mol SO_3 (out) + 1 * Kg - mol SO_2 (out) \quad (35)$$

$$0 = -1 * Kg - mol SO_2 (in) + 1 * Kg - mol SO_3 (out) + 1 * Kg - mol SO_2 (out) \quad (36)$$

b) Balance Molar del Oxígeno

$$Kg - mol O_{in} = Kg - mol O_{out} \quad (37)$$

$$2 * Kg - mol SO_2 (in) + 2 * Kg - mol O_2 (in) = 3 * Kg - mol SO_3 (out) + 2 * Kg - mol SO_2 (out) + 2 * Kg - mol O_2 (out) \quad (38)$$

$$0 = -2 * Kg - mol SO_2 (in) - 2 * Kg - mol O_2 (in) + 3 * Kg - mol SO_3 (out) + 2 * Kg - mol SO_2 (out) + 2 * Kg - mol O_2 (out) \quad (39)$$

c) Balance Molar del Nitrógeno

$$Kg - mol N_{in} = Kg - mol N_{out} \quad (40)$$

$$2 * Kg - mol N_2 (in) = 2 * Kg - mol N_2 (out) \quad (41)$$

$$0 = -2 * Kg - mol N_2 (in) + 2 * Kg - mol N_2 (out) \quad (42)$$

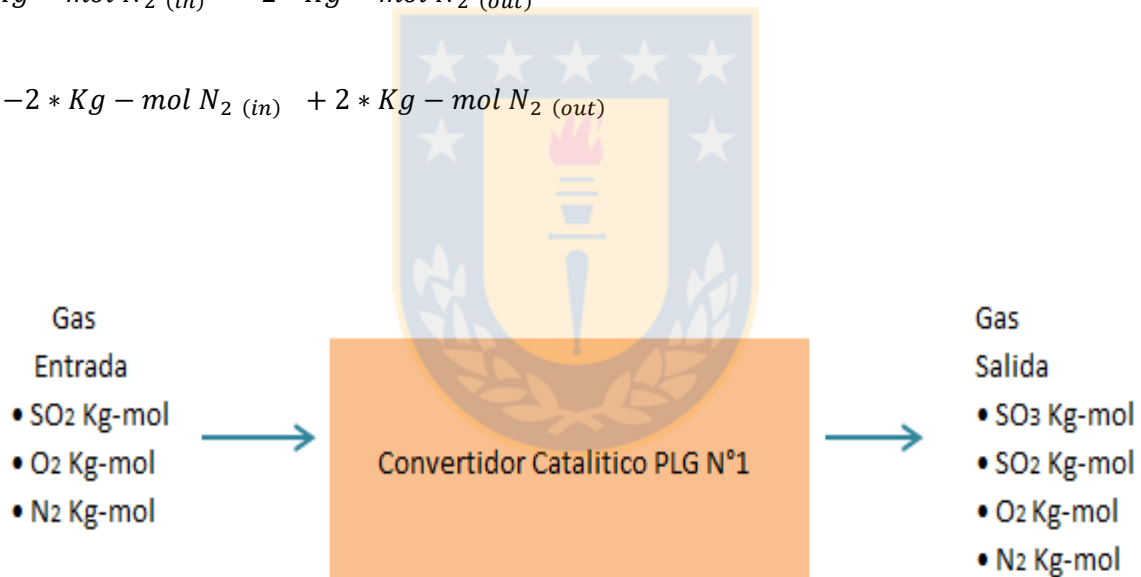


Figura 9 Esquema del convertidor catalítico

4.3. Modificación al Modelo de Matthew Joseph King

Al analizar la estructura del reactor catalítico de la planta N°1 de la fundición Caletones, es posible apreciar un ducto ubicado entre la cama uno y la cama dos, encargado de incorporar gas al reactor con el objetivo de enfriar el gas proveniente del lecho 1. Este ducto genera incongruencias en el modelo de Matthew Joseph King si es aplicado a la planta, por lo cual, es obligatorio realizar una modificación que incorpore la masa que ingresa a través del ducto. Para ello, se realizaron balances de masa y energía, que permitieron determinar la cantidad adicional de anhídrido sulfuroso que ingresaba al reactor.

4.4. Simulación de Conversión de Anhídrido Sulfuroso

Los datos requeridos para la simulación del convertidor catalítico de cuatro pasos y simple absorción, se presentan en la siguiente tabla, teniendo en cuenta que los parámetros en color azul, representan datos de diseño fijados y los parámetros de color rojo corresponden a las temperaturas de salida por paso calculadas en base a los parámetros de la tabla 2.

Tabla 3 Simulación del convertidor catalítico.

	T° [°C]	T° [K]	T°[°C] salida	T° [K] salida
Lecho 1	420	693	580,5	853,5
Lecho 2	435	708	526,2	799,2
Lecho 3	420	693	457,8	730,8
Lecho 4	415	688	436,5	697,3

De acuerdo a las fórmulas de cálculo aplicadas se realizaron los balances de masa y energía en el área de conversión catalítica, dando como resultado las temperaturas de reacción y la conversión que ocurre en cada uno de los lechos, representado en la figura N°9. En el anexo B se encuentran los gráficos y matrices del procedimiento de balance de masa

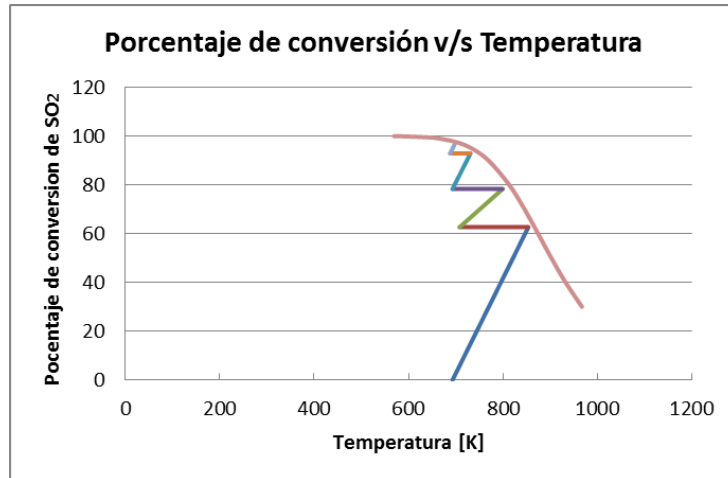


Figura 10 Gráfico de porcentaje de conversión v/s Temperatura en cada uno de los lechos.



CAPÍTULO V: ANÁLISIS EN BASE AL REGISTRO DE DATOS DE OPERACIÓN DE LA PLANTA

En base al análisis del registro histórico de datos de operación de la planta, se pretende encontrar las temperaturas óptimas de operación en cada uno de los lechos del convertidor catalítico, las cuales se emplearan en las pruebas a realizar en planta.

5.1. Ubicación

La presente investigación se realizó en la planta de limpieza de gases N° 1 de la Fundición Caletones, ubicada dentro de la División El Teniente en la región del Libertador Bernardo O'Higgins. Este complejo está distante 45 Km de la ciudad de Rancagua a una altura de 1550 metros sobre el nivel del mar, en la cordillera de los Andes.

5.2. Equipo Involucrado

Las pruebas experimentales se llevaran a cabo en el área de conversión, la cual incluye los siguientes equipos:

- Convertidor Catalítico de la PLG N°1 (1-R-331)

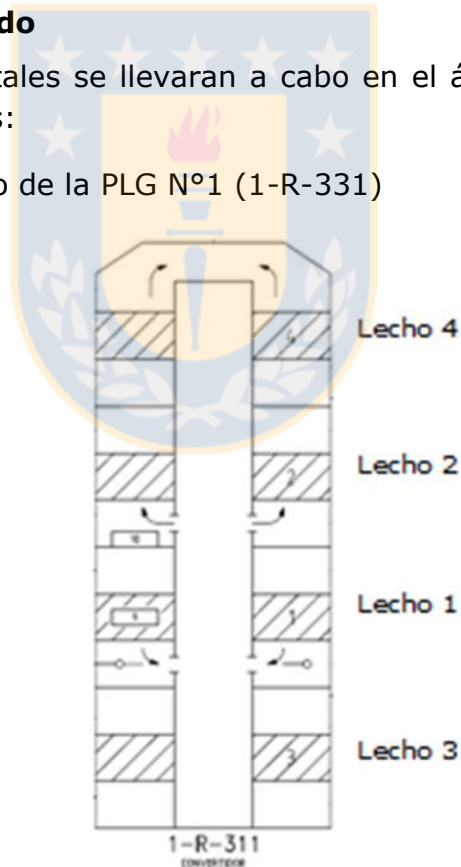


Figura 11 Convertidor catalítico PLG N°1.

- Intercambiadores de Calor (1-E-351, 1-E-341, 1-E-321, 1-E-331)
- Damper (TV-3011, TV-3014, TV-3016, TV-3004)

5.3. Variables

En la revisión bibliográfica se encontró un gran número de variables que influyen en la emisión de anhídrido sulfuroso a la atmósfera. Sin embargo, las variables que fueron consideradas en esta investigación son la concentración en partes por millón de SO₂ emitidas a la atmósfera como variable dependiente, mientras que la temperatura de entrada a cada lecho, porcentaje de anhídrido sulfúrico y flujo de gas fueron considerados como variables independientes.

Tabla 4 Variables que influyen en la emisión de SO₂ [5].

Variable	Tipo	Descripción
Ppm de SO ₂ emitidas a la atmósfera	Dependiente	Variable numérica, registrada mediante Sistema de Monitoreo CEMS [ppm]
Temperatura de entrada a cada lecho	Independiente	Variable numérica, registrada mediante Termocuplas [°C]
Porcentaje de anhídrido sulfuroso	Independiente	Variable numérica, registrada mediante analizador de Anhídrido sulfuroso [%]
Flujo de gas	Independiente	Variable numérica, registrada mediante Flujometro [Nm ³ /h]

5.4. Situación Actual de la Planta

Para obtener una propuesta de mejora en la sección de conversión fue necesario lograr determinar el estado inicial (caso base o diagnóstico) en que se encontraba esta sección de la planta de ácido, representación del área en la Figura 11. Para ello, se solicitó al área de instrumentación de la planta asesoramiento respecto al tema. Posterior al análisis de la planta se encontraron irregularidades en el funcionamiento de está, tales como:

- Baja actividad de los catalizadores del reactor.
- Deterioro en el funcionamiento del Damper TV-3004, provocando un enfriamiento excesivo del lecho 4 debido al descontrol del ventilador 1B331.

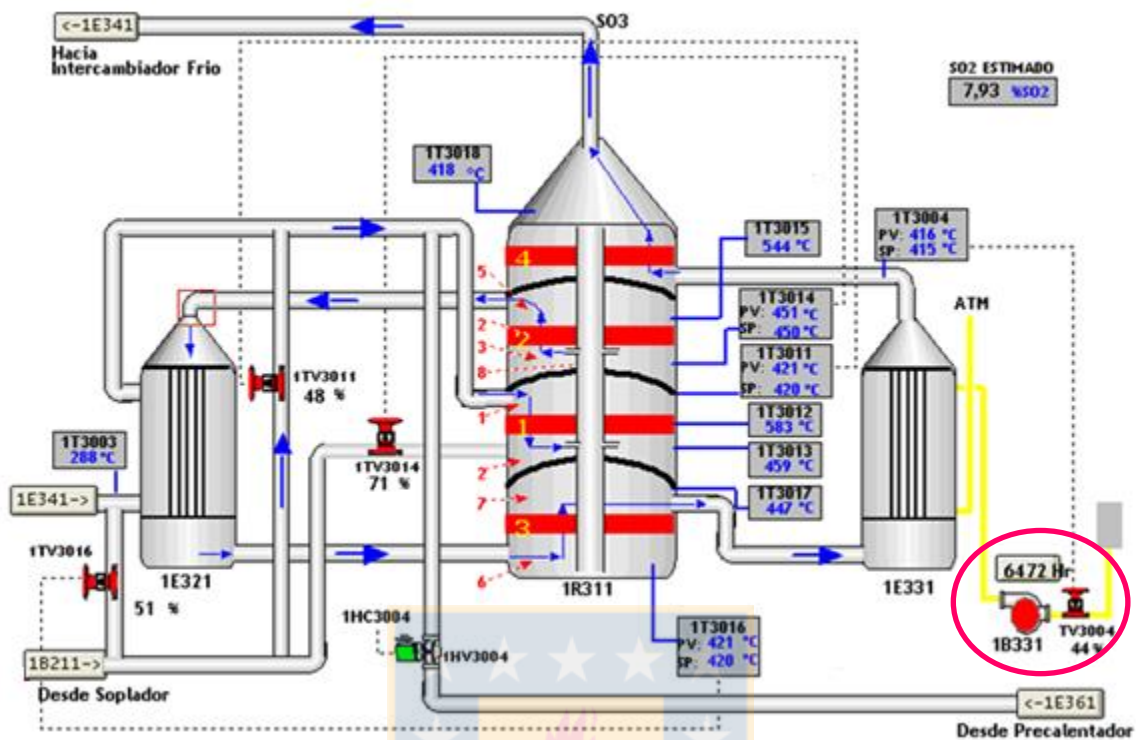


Figura 12 Layout convertidor catalítico.

5.5. Análisis de Datos Históricos

Se recopiló información histórica para elaborar gráficos y relaciones necesarias que permitieron visualizar los comportamientos operacionales de la planta de limpieza de gases con el fin de poder determinar de forma clara las condiciones actuales de operación, rendimientos obtenidos y puntos críticos. Para este efecto los datos se extrajeron del PI System y los cálculos se procesaron en Excel.

La información recopilada corresponde a datos operacionales con los que ha funcionado la planta, expuestos en la Tabla 5.

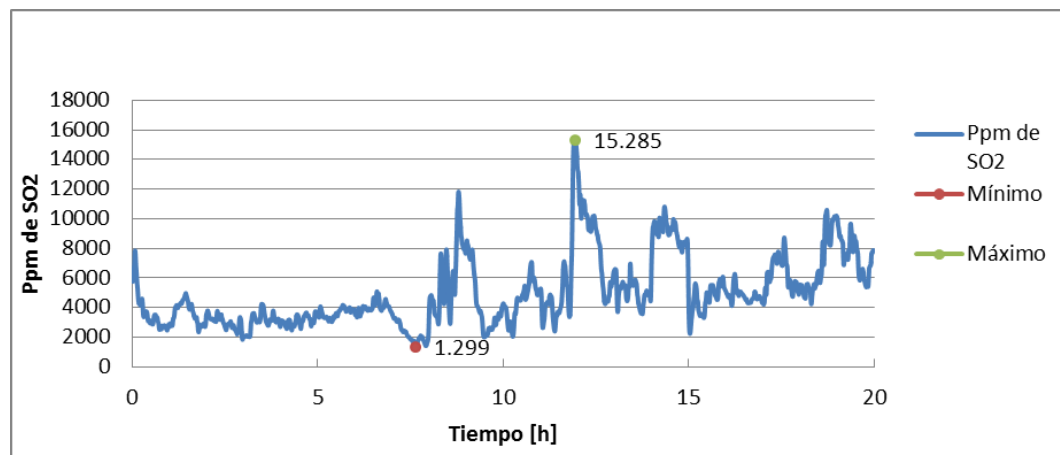
Tabla 5 Parámetros de operación del reactor catalítico (valores estándar).

Parámetros	PLG 1
Flujo [Nm^3/h]	172300
SO_2 [%]	8,78
T° entrada cama 1 [$^{\circ}\text{C}$]	420
T° entrada cama 2 [$^{\circ}\text{C}$]	435
T° entrada cama 3 [$^{\circ}\text{C}$]	420
T° entrada cama 4 [$^{\circ}\text{C}$]	415

5.5.1. Variable dependiente

- Partes por millón de anhídrido sulfuroso emitidas a la atmósfera

Al analizar la Figura 12, concentración de SO_2 [ppm] v/s Tiempo [h], es posible apreciar la gran dispersión que poseen los datos, comenzando en valores inferiores a 2000 [ppm] y terminando en cifras superiores a 14000 [ppm]. Esta respuesta se debe a un descontrol en el manejo de las variables independiente que determinan el aumento en la cantidad de partes por millón de SO_2 emitidas a la atmósfera (variable dependiente), debido a ello es necesario el análisis en cada una de las variables independientes.

**Figura 13 Gráfico concentración de SO_2 [ppm] versus Tiempo[h].**

5.5.2. Variables Independientes

- Porcentaje de SO₂ de entrada a la PLG N°1

Al observar la figura 13, porcentaje de SO₂ v/s tiempo, es posible apreciar la gran diversidad de valores que toma la variable %SO₂, fluctuando desde 5% hasta 12%. Esta variabilidad produce pérdida de eficiencia en el reactor debido a la inexactitud que poseen respecto a la cantidad de anhídrido sulfuroso estipulado como parámetro de operación. La inestabilidad en el parámetro porcentaje de SO₂, se debe a los flujos variables emitidos por el Convertidor Teniente y por los Convertidores Peirce Smith.

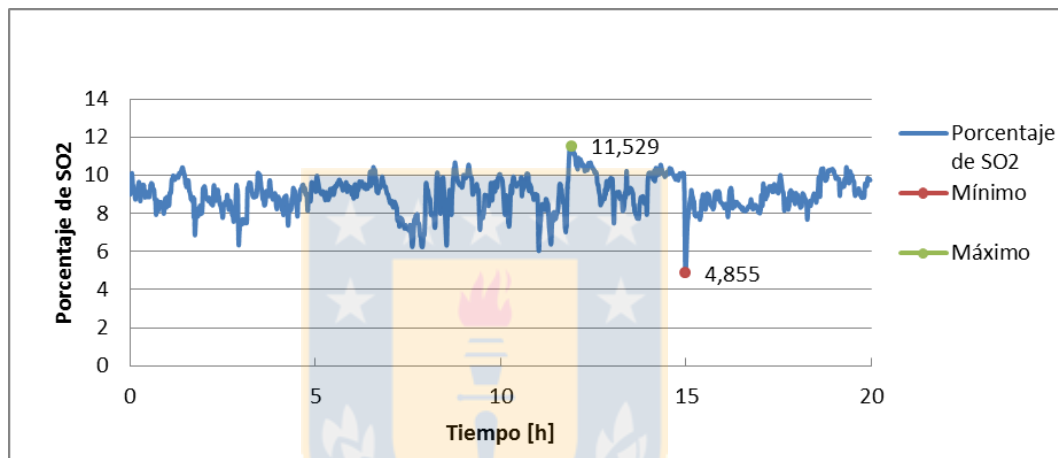


Figura 14 Gráfico porcentaje de SO₂ versus Tiempo[h].

- Flujo

A partir de la figura 14 es posible apreciar la gran variabilidad que tiene el flujo respecto al tiempo, alcanzando valores por sobre el estipulado en los parámetros de operación. Esto, se debe a la intensidad con la que debe operar el soplador para extraer la mayor cantidad de gas desde la zona de conversión, sin que el gas se desvíe hacia las infiltraciones presentes en los trenes de limpieza. Al aumentar el flujo que ingresa a la planta, la concentración de anhídrido sulfuroso disminuye, provocando un enfriamiento en el reactor, en caso contrario, al disminuir la cantidad de flujo que ingresa a la planta, la concentración de anhídrido sulfuroso aumenta, provocando disminución en la conversión del gas, generando mayor emisión.

El control absoluto del flujo es imposible, ya que, un exceso de manipulación podría ir en desmedro de la captación de gases.

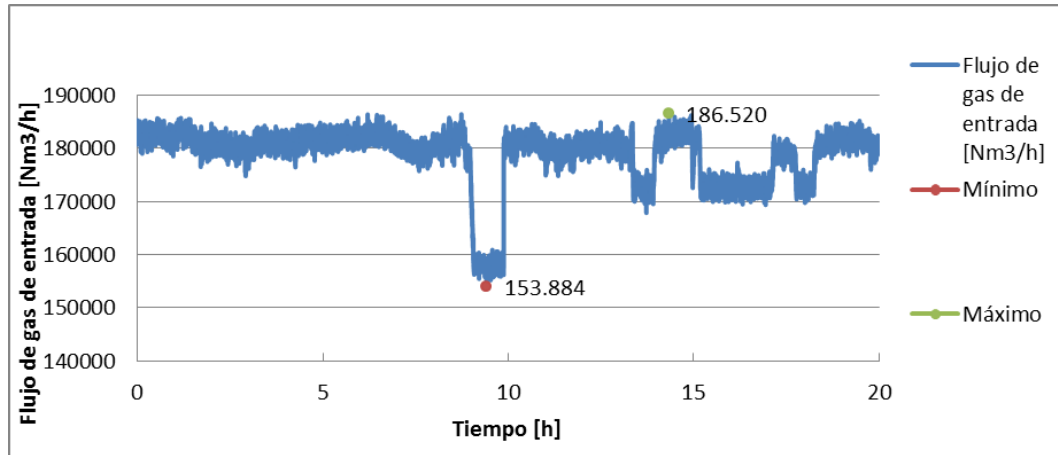


Figura 15 Gráfico flujo gas de entrada [Nm^3/h] versus Tiempo [h].

- Temperatura de entrada a cada lecho

Al analizar las temperaturas de entrada a cada lecho, es posible apreciar el control que mantienen los Damper, permitiendo o deteniendo el ingreso de aire o gas a cada lecho, para cumplir con las temperaturas denominadas como "Set Point".

En el caso del lecho 1, se aprecia claramente el control que ejerce el Damper TV-3011 sobre la temperatura de entrada, manteniéndose dentro de parámetros de proceso la temperatura de entrada y cercanos a los valores establecidos como "Set Point", tal y como se aprecia en la figura 14.

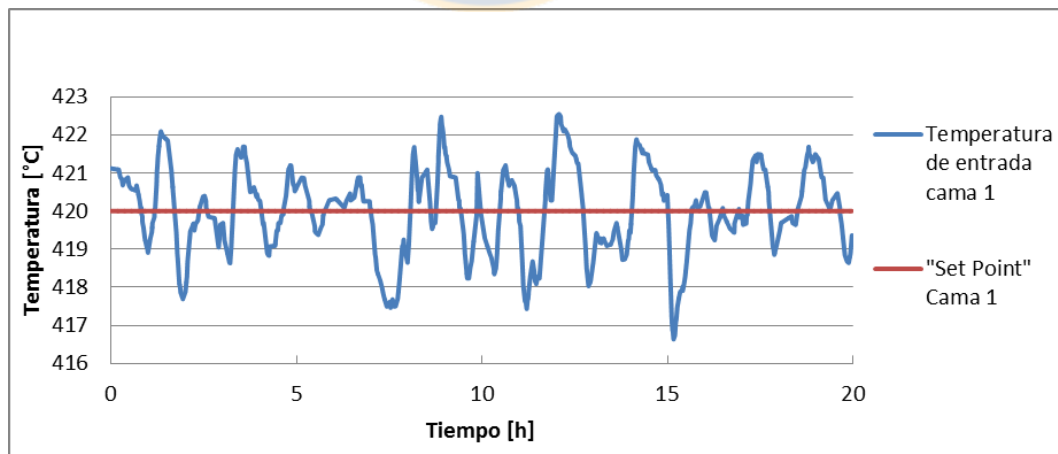


Figura 16 Gráfico temperatura [$^{\circ}\text{C}$] versus tiempo[h] en lecho 1.

En la figura 16 es posible apreciar el comportamiento de las temperaturas del gas presentes en el lecho 1, a través de un análisis de desviación estándar.

En el análisis de desviación estándar se identificó un promedio de $419,9 \pm 1,1$. En este caso el valor "Set Point" se superpone con la media aritmética.

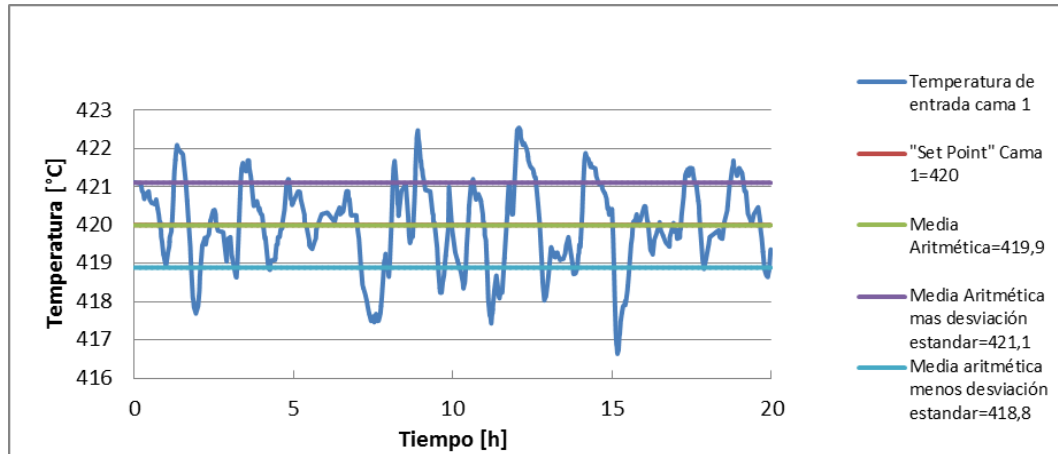


Figura 17 Gráfico temperatura [°C] versus tiempo[h] con representación de las desviaciones estándar, lecho 1.

El gas proveniente del lecho 1 es enfriado por una corriente de gas frío que ingresa directamente al reactor. Este gas genera inexactitudes en las termocuplas ubicadas dentro del reactor, debido a la gran cercanía que tienen con el orificio de entrada de éste. A causa de lo anterior, se generan perturbaciones en la medición de la temperatura de entrada al lecho dos, apreciadas en el siguiente gráfico.

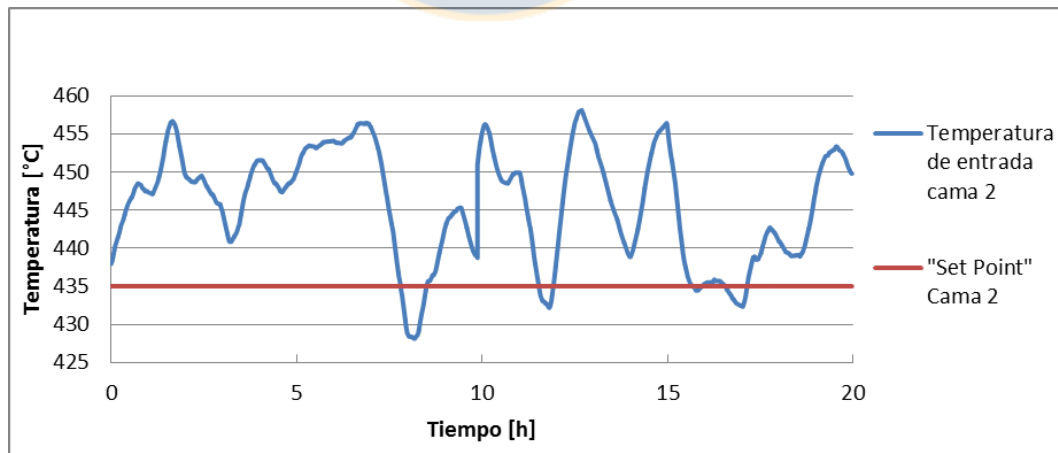


Figura 18 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 2.

En la figura 18 es posible apreciar el comportamiento de las temperaturas del gas presentes en el lecho 2, a través de un análisis de desviación estándar.

En el análisis de desviación estándar se identificó un promedio de $445,7 \pm 7,3$. En este caso el valor "Set Point" se ubica muy por debajo de valor de la media aritmética.

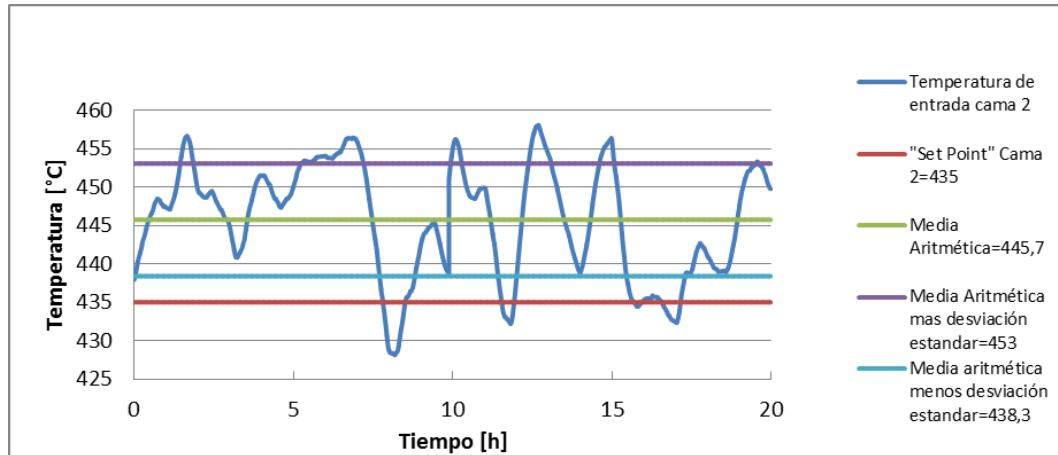


Figura 19 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] con representación de las desviaciones estándar, lecho 2.

El gas proveniente del lecho 2 es enviado al intercambiador E.321 (gas/gas), lugar donde ocurre la disminución de temperatura hasta el valor estipulado como "Set Point", ayudado por el Damper TV-3016. Este proceso genera una temperatura de entrada regulada y controlada respecto a los parámetros de operación, como se observa en la figura 19.

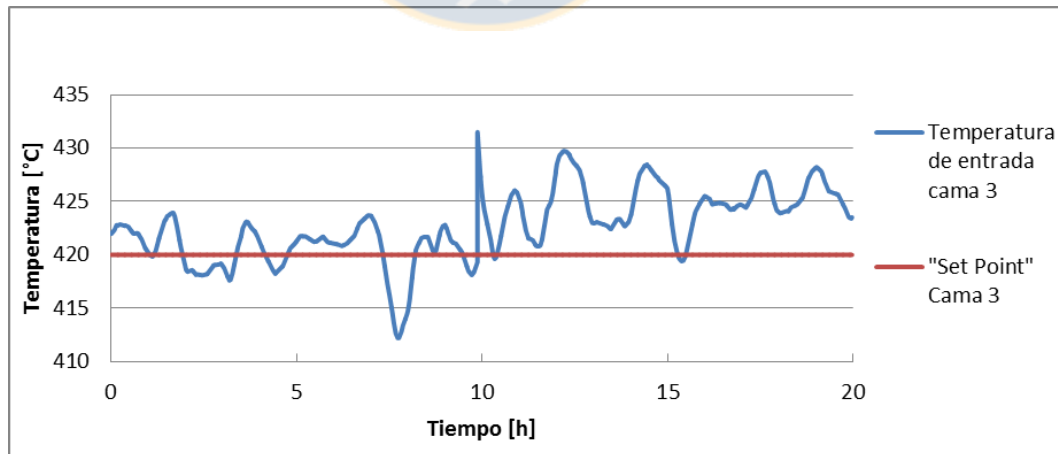


Figura 20 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 3.

En la figura 20 es posible apreciar el comportamiento de las temperaturas del gas presentes en el lecho 3, a través de un análisis de desviación estándar.

En el análisis de desviación estándar se identificó un promedio de $422,6 \pm 3,2$. En este caso el valor "Set Point" se ubica muy por debajo de valor de la media aritmética pero sobre el valor de media aritmética menos la desviación estándar.

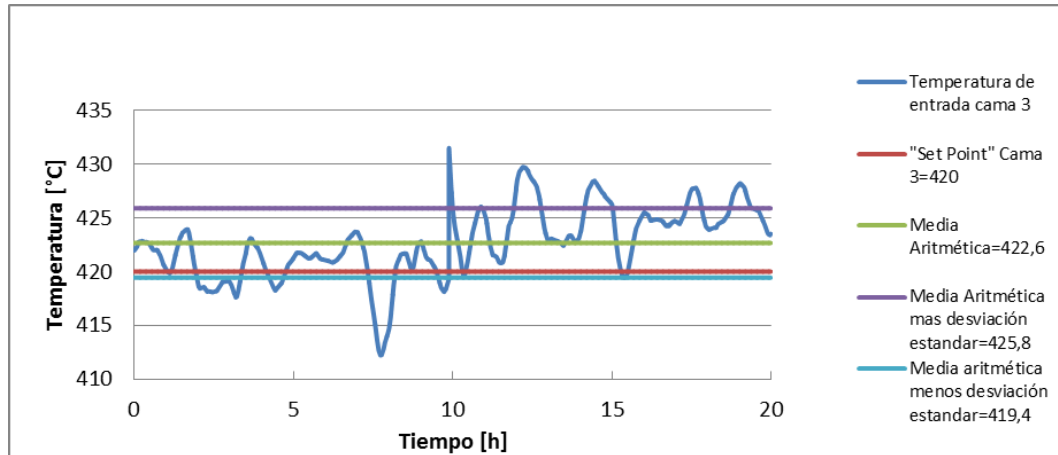


Figura 21 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] con representación de las desviaciones estándar, lecho 3.

El gas proveniente del lecho 3 ingresa al intercambiador E. 331 (gas/gas), donde el ventilador B.331 es el encargado de enviar aire frío desde el ambiente. El aire enviado por el ventilador, según los planos de diseño de la planta, debería estar regulado por el Damper TV-3004, acción que no ocurre debido al desperfecto que sufrió este Damper a mediados del año 2015.

Al momento de analizar las temperaturas de entrada al lecho 4, se aprecian claramente las consecuencias provocadas por la ausencia del Damper, notando disminuciones de temperaturas de 20 [°C] y aumentos de casi 35 [°C], con respecto a la temperatura estipulada.

Debido a la falla del Damper, los operadores expertos de la planta se han visto en la obligación de operar manualmente el ventilador, apagándolo cuando las temperaturas del lecho descienden de los 390 [°C] y encendiéndolo cuando superan los 430 [°C]. Esto ha generado un descontrol operacional, provocando variadas temperaturas lejanas al punto de reacción del anhídrido sulfuroso en presencia del catalizador VK-701 que impiden la conversión del anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico, consecuencia de aquello, ha aumentado la cantidad de partes por millón de dióxido de azufre emitidas a la atmósfera.

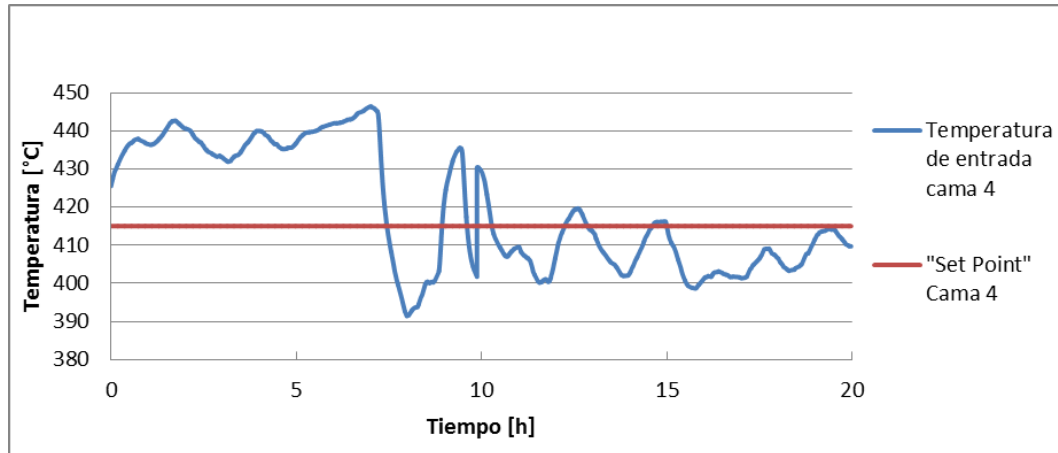


Figura 22 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 4.

En la figura 22 es posible apreciar el comportamiento de las temperaturas del gas presentes en el lecho 4, a través de un análisis de desviación estándar. En el análisis de desviación estándar se identificó un promedio de $419,3 \pm 16,0$. En este caso el valor "Set Point" se ubica por debajo de valor de la media aritmética pero sobre el valor de la media aritmética menos el valor de desviación estándar.

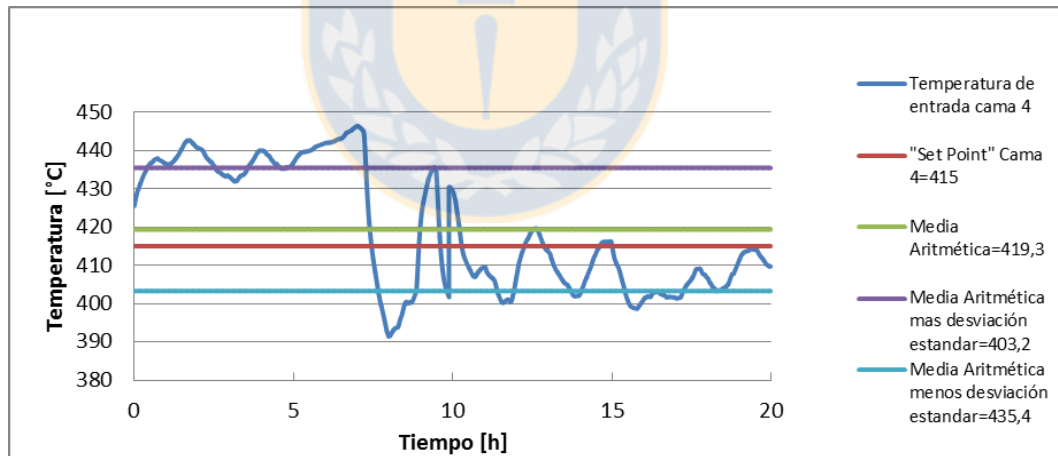


Figura 23 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] con representación de las desviaciones estándar, lecho 4.

CAPÍTULO VI: RESULTADOS Y DISCUSIONES

6.1. Situación Actual de la Planta

Se reparó el Damper TV-3004, cuya acción permitió apreciar la influencia que tiene el Damper sobre en el control de la temperatura del lecho 4. Además, los "Set Point" de cada uno de los lechos fueron modificados, con tal de obtener mayor eficiencia en el proceso.

6.2. Determinación de Condiciones Óptimas

Respecto a lo dicho en el capítulo anterior, es necesario encontrar las temperaturas óptimas de "Set Point" en la entrada a cada lecho, para así poder disminuir la contaminación por anhídrido sulfuroso al ambiente. Para ello, se identificaron las temperaturas que servían como alternativa para cada cama y a través de métodos estadísticos se seleccionó la mejor opción para cada uno de los lechos.

Considerando la teoría y el comportamiento correspondiente a un catalizador usado, según la empresa Haldor Topsoe (proveedora de catalizadores en PLG1, Fundición Caletones, División El Teniente) es posible afirmar que este ha perdido actividad con el pasar del tiempo. Esto, ocurre los lechos 3 y 4, debido a la antigüedad que poseen (4 años). Por tanto, realizar pruebas en dichos lechos es elemental para comprobar su comportamiento.

En el lecho 4 se evaluó la eficiencia con la temperatura actual de "Set Point", 415 [°C], y con temperaturas que demuestran una disminución en la cantidad de ppm de anhídrido sulfúrico emitidos a la atmósfera, estas serán; 440, 435, 430 y 425 [°C]. Al seleccionar la temperatura de operación en el lecho 4, y al comenzar su utilización, se prosiguió a realizar las pruebas experimentales en el lecho 3. En caso del lecho 3 las pruebas se realizaron de la misma forma que en lecho 4, es decir, se evaluó la temperatura existente como "Set Point" (420 [°C]), y temperaturas que según la teoría demuestran mayor eficiencia; 425, 430 y 435 [°C].

Al contrario de lo que ocurre los lechos 3 y 4, los lechos 1 y 2 al estar utilizando catalizadores relativamente nuevos (1 año de antigüedad), se realizaron pruebas experimentales con temperaturas menores a los "Set Point" estipulados. De esta forma

se comprobó la teoría expuesta por Matthew Joseph King, es decir, mientras disminuye la temperatura del lecho, aumenta la eficiencia de este.

En el lecho 2, se evaluó la eficiencia de la temperatura actual de "Set Point" (435 [°C]) además, se realizaron pruebas experimentales con las siguientes temperaturas; 430 y 425 [°C]. En el caso del lecho 1, el mismo proceso anteriormente expuesto, se evaluó la temperatura actual de "Set Point" (420 [°C]) y una temperatura propuesta; 415 [°C].

Para seleccionar las temperaturas óptimas de operación en cada uno de los lechos, fue necesaria la evaluación de cada una de las opciones posibles a través de un método estadístico que permitiera seleccionar la temperatura adecuada y así establecerla como "Set Point". En primer lugar se optó por el método denominado "Regresión Lineal", sin embargo, este método no fue del todo acertado, debido a que solo consideraba como variable el porcentaje de SO₂, excluyendo temperatura de entrada al lecho y flujo de entrada, a causa de la falta de normalidad que poseían las variables y los residuos, al considerar solo una variable el método se volvía inexacto y por tanto, poco viable. Posterior al fracaso del primer método estadístico, se utilizó el método denominado "Bosques aleatorios", método que permitió la evaluación de cada una de las temperaturas postulantes a "Set Point" en cada uno de los lechos, considerando todas las variables involucradas en este problema, además, con un porcentaje de error de 4% versus el 30% que ofrecía regresión lineal. Por tanto, las nuevas temperaturas "Set Point" para cada uno de los lechos fueron seleccionadas a través de pruebas realizadas en el modelo estadístico; Bosque aleatorio.

El método estadístico "bosques aleatorios" aplica de la siguiente forma al problema anteriormente nombrado; cada dato se define como el conjunto de las variables de entrada y aquella a predecir. En el caso de los árboles de decisión, las variables a predecir deben ser del tipo categórica (no numérica). Esto quiere decir que, debemos hacer una transformación de la variable ppm (numérica) en una variable categórica.

Tabla 6 Ejemplo de variables de entrada y variable a predecir.

	% SO ₂	Flujo [Nm ³ /h]	Entrada	Ppm	Set Point
1	10,95	186284	441,86	6812,31	440
2	10,94	186647	441,86	6817,74	440
3	10,94	187010	441,86	6823,18	440
4	10,94	187373	441,86	6828,58	440
5	10,93	187736	441,86	6833,2	440
6	10,93	188376	441,86	6837,81	440
7	10,93	187689	441,86	6842,43	440
8	10,93	187002	441,86	6847,04	440

Variables de entrada

Variable a predecir

Al pasar la variable numérica [ppm] a categórica se dividirán los valores de la variable ppm en 100 grupos equidistantes entre el valor mínimo y el máximo hallados en la tabla de datos de cada "Set Point". Por tanto, todos los números que estén en un intervalo [x1, x2], serán tomados como iguales.

6.2.1. Lecho 4

En el caso del lecho 4 del reactor catalítico, fueron evaluadas las siguientes temperaturas; 440, 435 y 430, cada una ellas fueron "seteadas" durante 2 días en el lecho del reactor, y posterior a la recolección de datos se excluyeron aquellos donde se levantó la campana de alguno de los convertidores.

En primer lugar se evaluó la influencia de cada variable sobre la emisión de ppm de SO₂ a la atmósfera, para cada una de las temperaturas propuestas.

T° [C]: 430

Tabla 7 Correlaciones entre variables en lecho 4, 430 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,374	0,838	0,411
Flujo[Nm ³ /h]	0,374	1	0,388	0,434
Ppm	0,838	0,388	1	0,449
Entrada	0,411	0,434	0,449	1

T° [C]: 435

Tabla 8 Correlaciones entre variables en lecho 4, 435 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,440	0,728	0,044
Flujo[Nm ³ /h]	0,440	1	0,455	-0,059
Ppm	0,728	0,455	1	-0,202
Entrada	0,044	-0,059	-0,202	1

T° [C]: 440

Tabla 9 Correlaciones entre variables en lecho 4, 440 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,295	0,850	0,555
Flujo[Nm ³ /h]	0,295	1	0,406	0,479
Ppm	0,850	0,406	1	0,668
Entrada	0,555	0,479	0,668	1

A partir de los resultados expuestos anteriormente se determinó que la variable que posee mayor influencia sobre la emisión de ppm a la atmósfera es la variable %SO₂.

Resultados de las simulaciones

Para verificar la exactitud del método en cada una de las temperaturas propuestas se calculó el porcentaje de acierto (bondad de los métodos), el cual en todos los casos, es superior al 93%.

Tabla 10 Acierto de método estadístico "Bosques aleatorios" en lecho 4.

Set Point	Acierto
430	0,980
435	0,936
440	0,963

A continuación, se trazaron gráficos en dos dimensiones (o ejes) de las distintas simulaciones, donde el eje de las ordenadas correspondió a la cantidad de ppm en función de todas las variables de entrada, donde solo aquellas que aparecieron en el eje de las abscisas se tomaron como variable; las demás tomaron el valor promedio de dicha variable. El número de datos analizados alcanzó el valor de 280000, los cuales están incluidos en cada gráfico.

T° [°C]:430

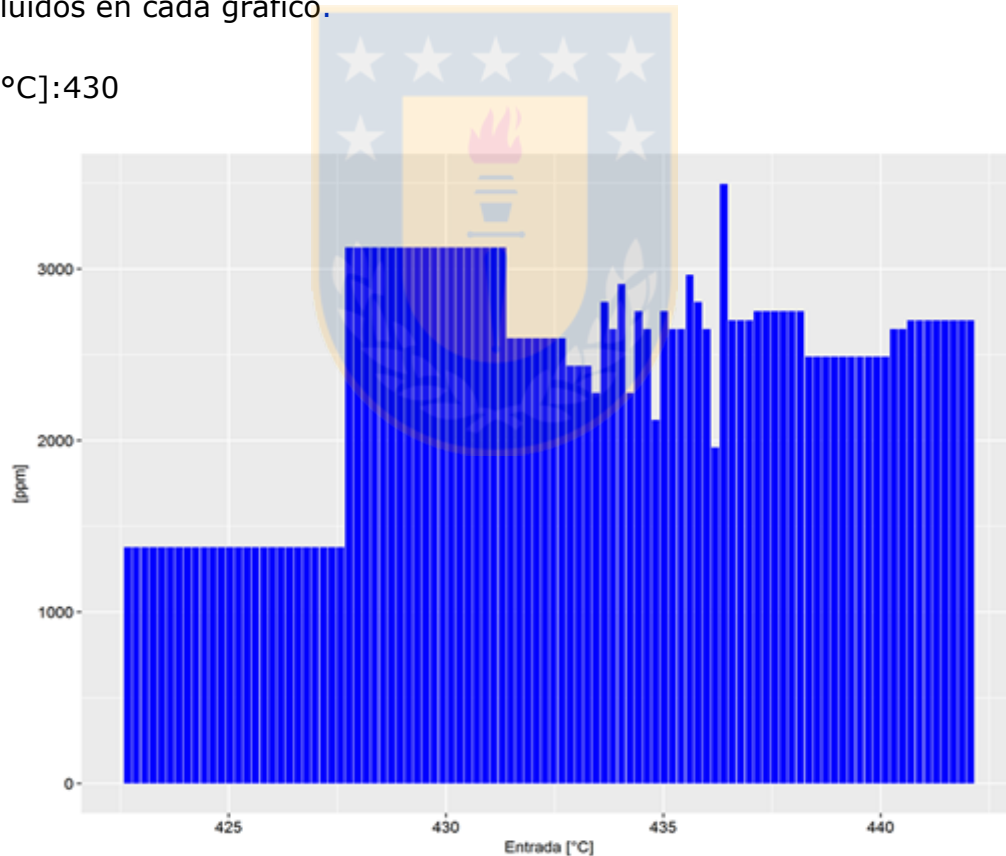


Figura 24 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 4, Set Point=430, Valores promedios:%SO₂ de entrada=9,015%; Flujo de entrada=175504,1[Nm³/h].

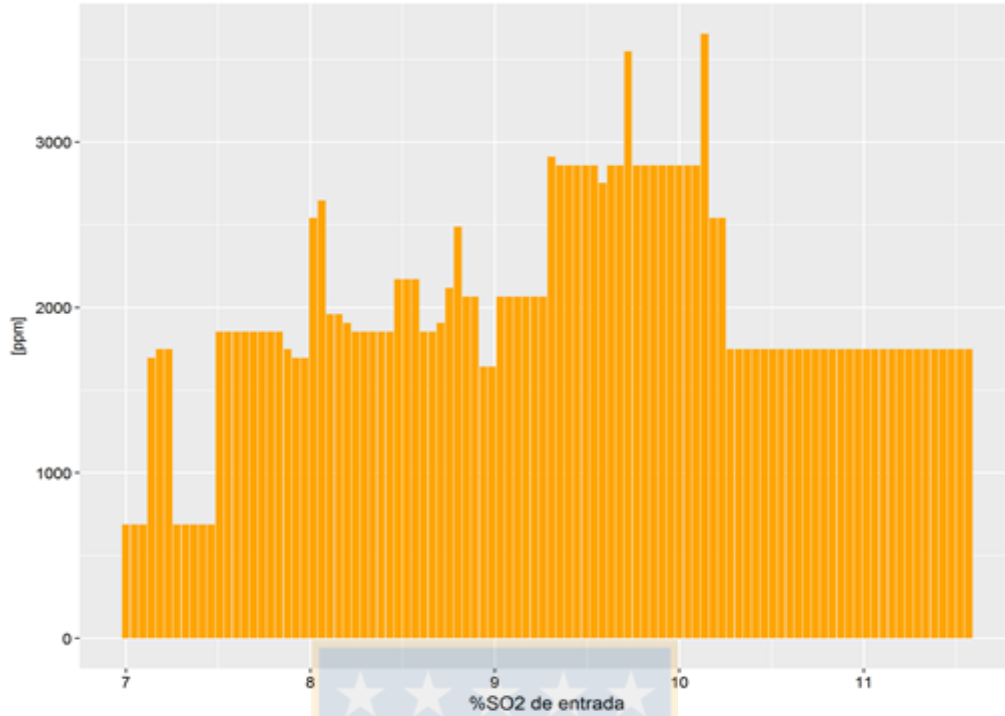


Figura 25 Efecto del %SO₂ de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 4, Set point=430, Valores promedios: flujo= 175504,1 [Nm³/h]; Temperatura de entrada=433,7 [°C].

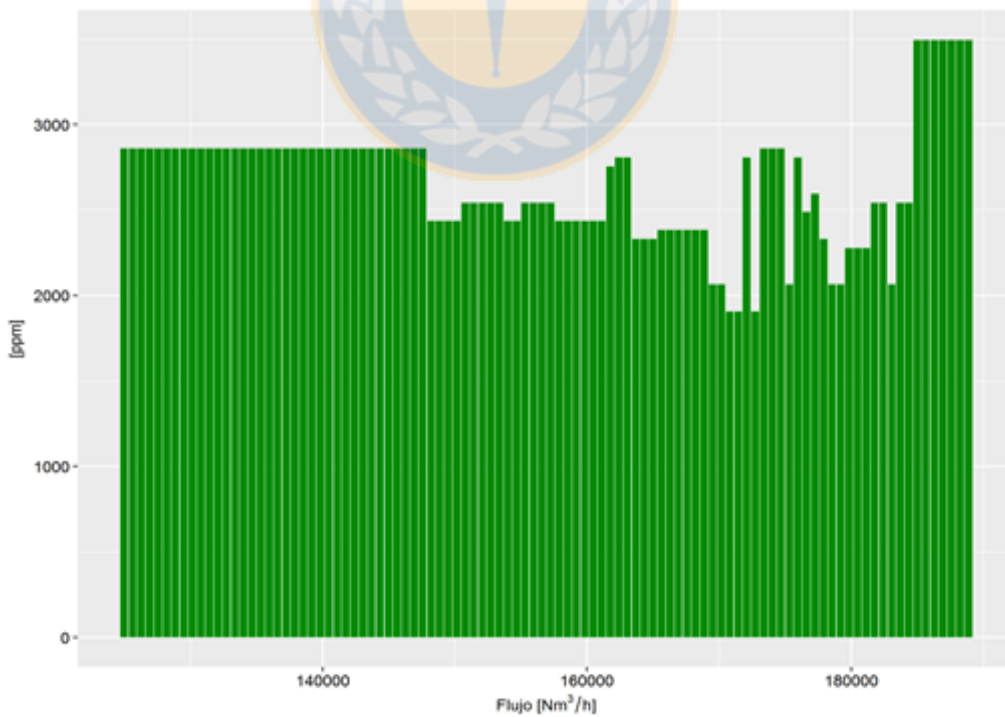


Figura 26 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 4, Set point=430, Valores promedio: %SO₂ de entrada=9,01%; Temperatura de entrada=433,7 [°C].

T° [°C]:435

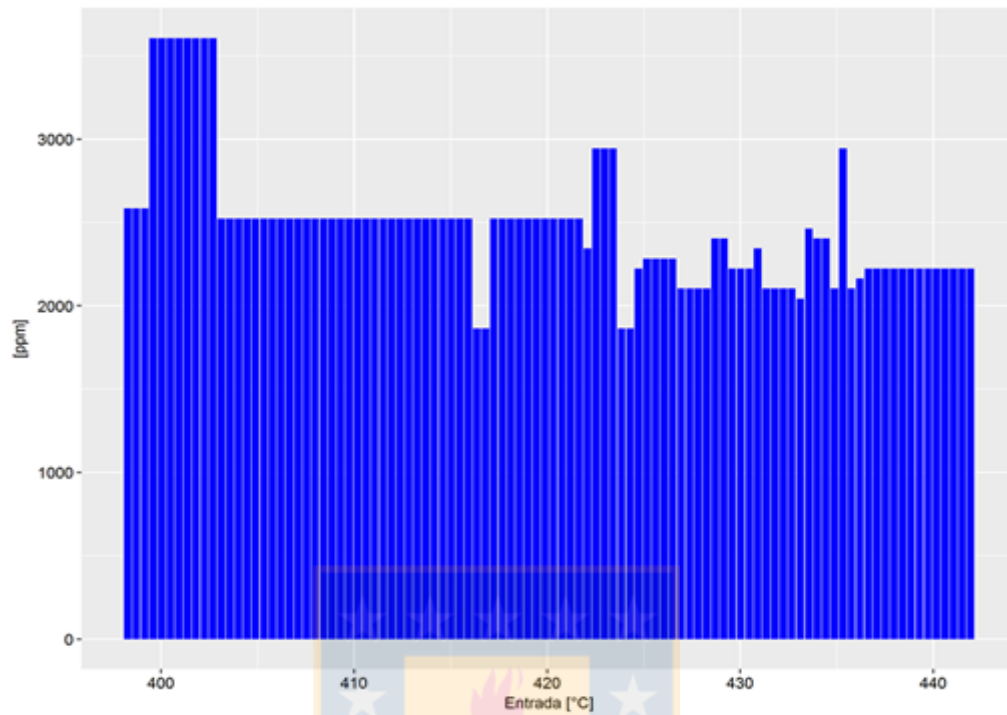


Figura 27 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 4, Set Point=435, Valores promedios: %SO₂ de entrada=8,88%; Flujo de entrada=174902[Nm³/h].

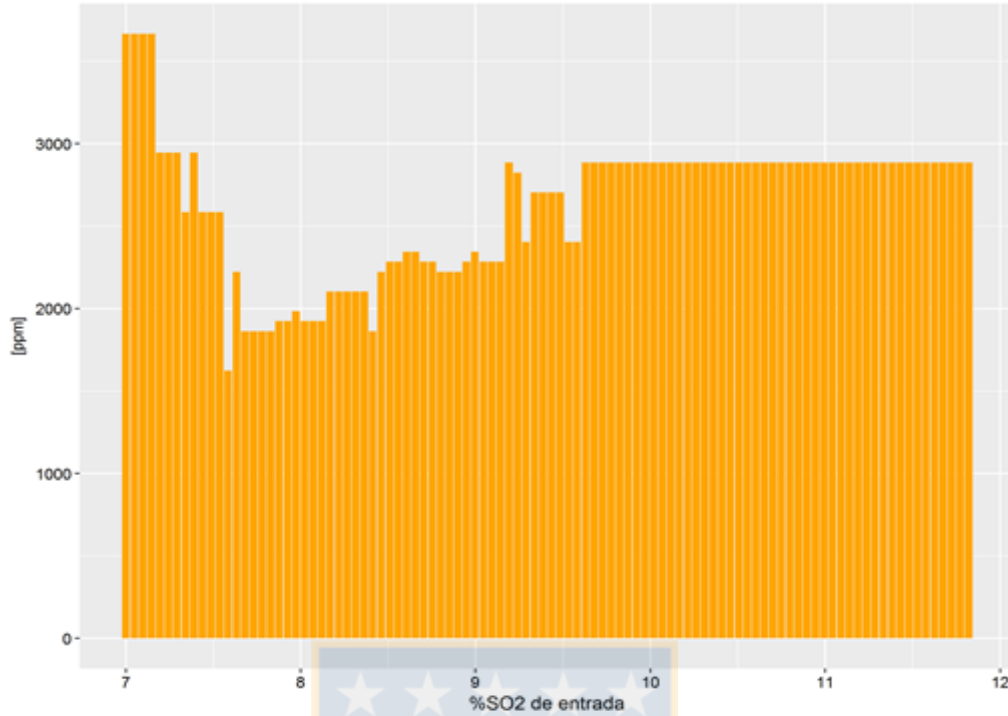


Figura 28 Efecto %SO₂ de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 4, Set point=435, Valores promedios: flujo= 174902[Nm³/h]; Temperatura de entrada=430,36[°C].

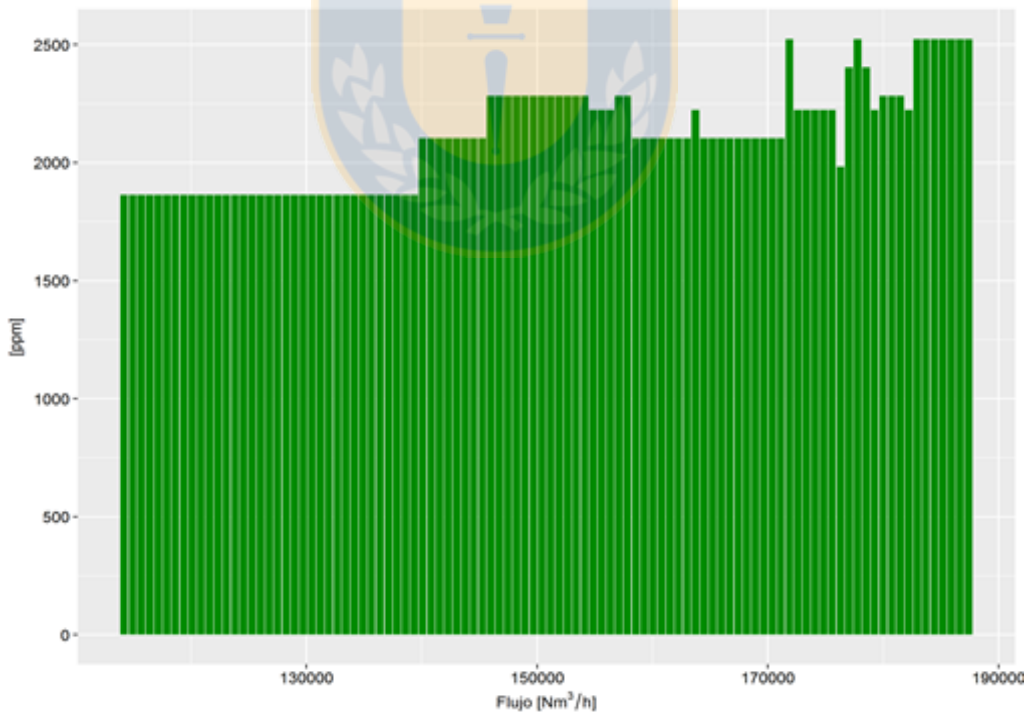


Figura 29 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 4, Set point=435, Valores promedio: %SO₂ de entrada=8,88%; Temperatura de entrada=430,36[°C].

T° [°C]:440

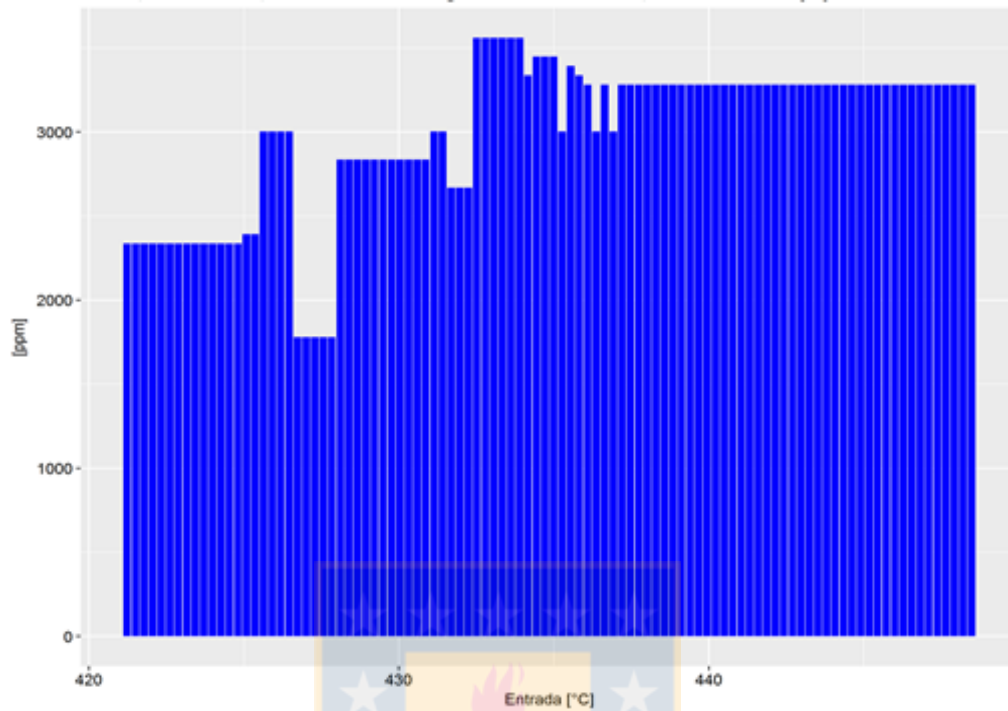


Figura 30 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 4, Set Point=440, Valores promedios: %SO₂ de entrada=9,66%; Flujo de entrada=175857,8[Nm³/h].

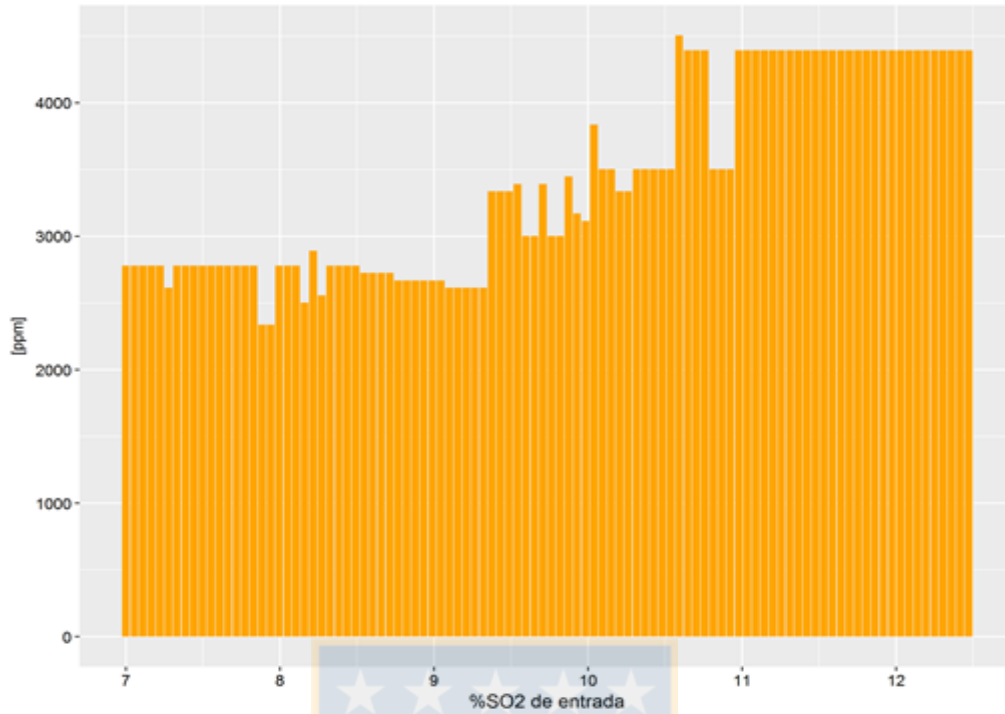


Figura 31 Efecto del %SO₂ de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 4, Set point=435, Valores promedios: flujo= 175857,8 [Nm³/h]; Temperatura de entrada=435,44[°C].

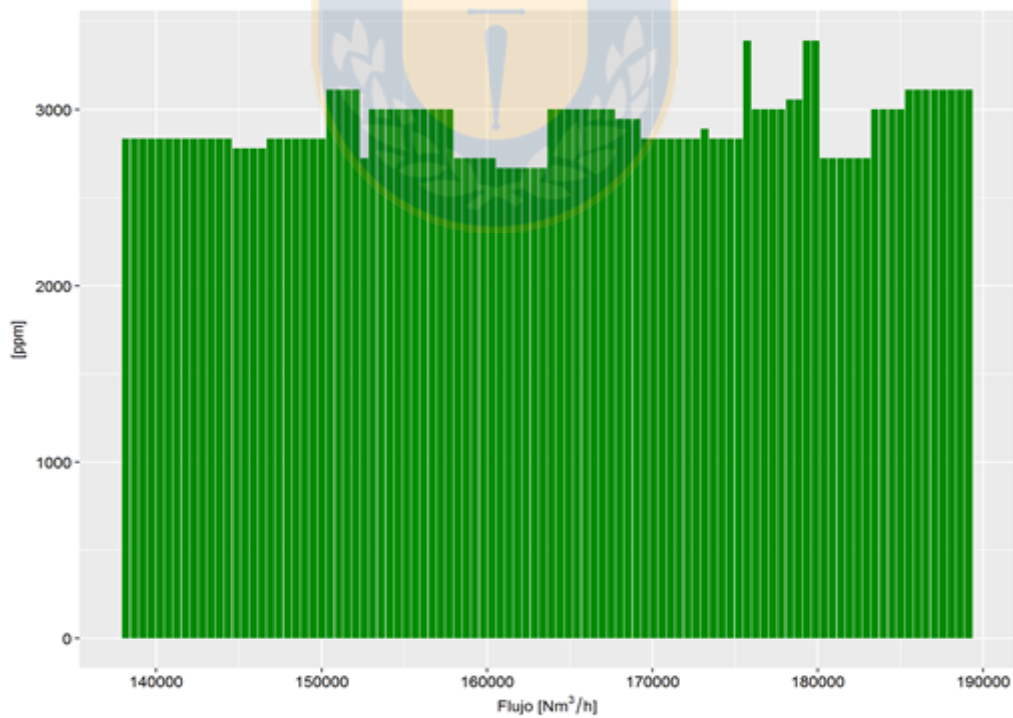


Figura 32 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 4, Set point=440, Valores promedio: %SO₂ de entrada=9,66%; Temperatura de entrada=435,44[°C].

Para comparar los gráficos anteriores para cada "Set Point", se presentaron gráficos resumen, donde el valor graficado corresponde al promedio de los valores en los gráficos anteriores, para los "Set Point" y las variables involucradas.

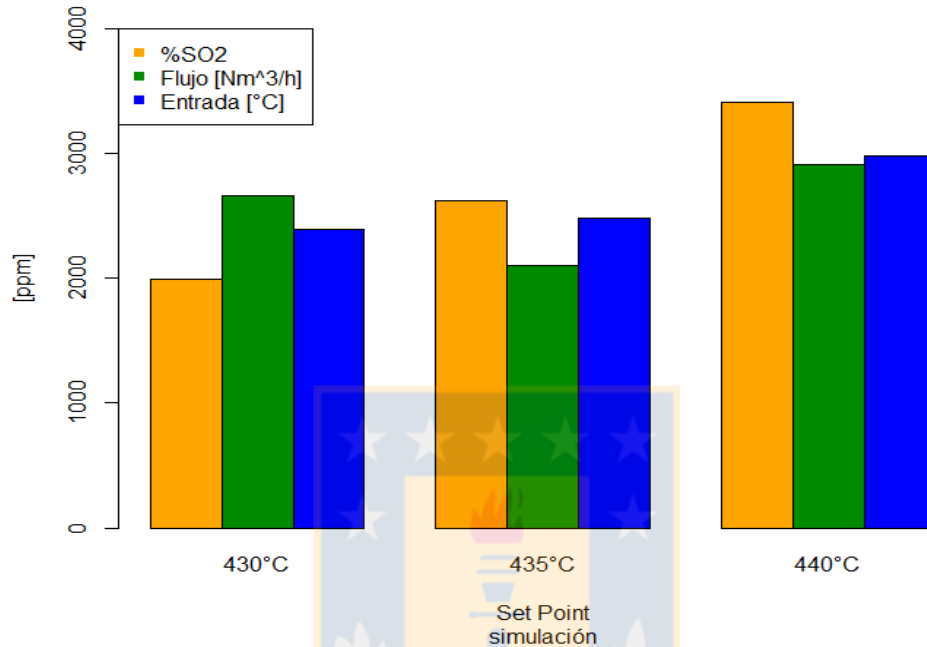


Figura 33 Gráfico concentración [ppm] por "Set point".

Al analizar la figura 32, se apreció una similitud en los resultados de las temperaturas 430 y 435, excluyendo la temperatura 440 [°C] por las altas emisiones que produce. Debido a esto fue necesario utilizar las correlación entre variables como método selectivo, el que indicó que la variable con mayor influencia sobre la emisión de ppm es %SO₂, por ello se comparó la emisión de ppm con %SO₂ en ambas temperaturas, tal y como indica la figura 33, y se seleccionó la que emitía menor cantidad de ppm a la atmosfera, es decir 430 [°C].

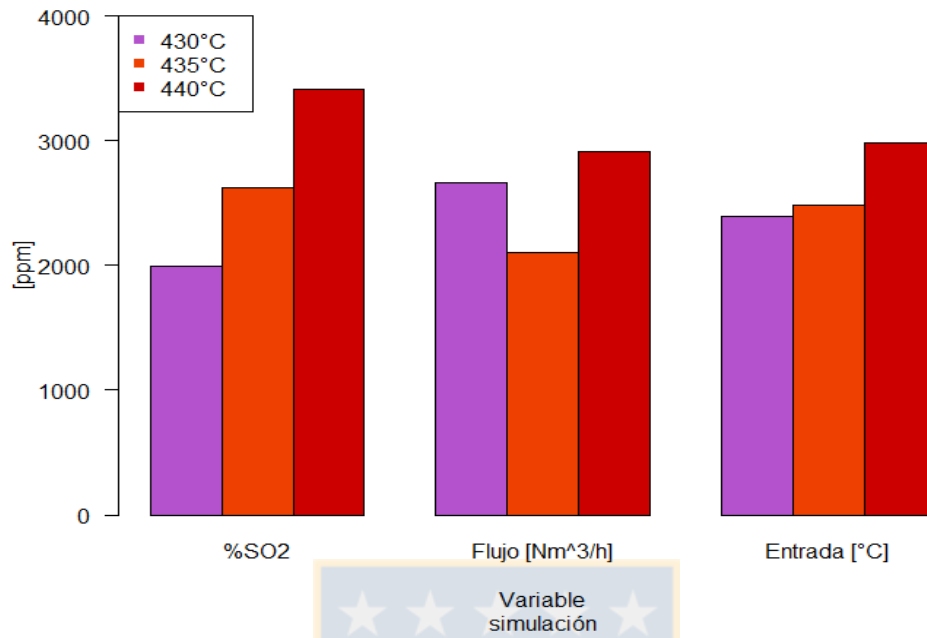


Figura 34 Gráfico concentración [ppm] versus variables involucradas en el proceso (%SO₂, flujo de entrada y temperatura de entrada).

6.2.2. Lecho 3

En el caso del lecho 3 del reactor catalítico, fueron evaluadas las siguientes temperaturas; 440, 435 y 430 y 425. En primer lugar se evaluó la influencia de cada variable sobre la emisión de ppm de SO₂ a la atmósfera, para cada una de las temperaturas propuestas.

T° [C]: 425

Tabla 11 Correlaciones entre variables en lecho 3, 425 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,557	0,825	0,519
Flujo[Nm ³ /h]	0,557	1	0,496	0,536
Ppm	0,825	0,496	1	0,523
Entrada	0,519	0,536	0,523	1

T° [C]: 430

Tabla 12 Correlaciones entre variables en lecho 3, 430 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,425	0,642	0,479
Flujo[Nm ³ /h]	0,425	1	0,453	0,285
Ppm	0,642	0,453	1	0,355
Entrada	0,479	0,285	0,355	1

T° [C]: 435

Tabla 13 Correlaciones entre variables en lecho 3, 435 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,66218	0,853	0,385
Flujo[Nm ³ /h]	0,662	1	0,547	0,270
Ppm	0,853	0,547	1	0,362
Entrada	0,385	0,270	0,362	1

T° [C]: 440

Tabla 14 Correlaciones entre variables en lecho 3, 440 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,582	0,908	0,494
Flujo[Nm ³ /h]	0,582	1	0,593	0,446
Ppm	0,908	0,593	1	0,449
Entrada	0,494	0,446	0,449	1

A partir de los resultados expuestos anteriormente, se determinó que la variable que posee mayor influencia sobre la emisión de ppm a la atmósfera es la variable %SO₂.

Resultados de las simulaciones

Para verificar la exactitud del método en cada una de las temperaturas propuestas se calculó el porcentaje de acierto (bondad de los métodos), el cual en todos los casos es superior al 87%

Tabla 15 Acierto de método estadístico "Bosques Aleatorios" en lecho 3.

Set Point	Acierto
425	0,877
430	0,944
435	0,949
440	0,944

A continuación, se trazaron gráficos en dos dimensiones (o ejes) de las distintas simulaciones, donde el eje de las ordenadas correspondió a la cantidad de ppm en función de todas las variables de entrada, donde solo aquellas que aparecieron en el eje de las abscisas se tomaron como variable; las demás tomaron el valor promedio de dicha variable en la tabla de datos facilitada. El número de datos analizados alcanzó el valor de 280000, los cuales están incluidos en cada gráfico. Estos gráficos fueron ubicados en el anexo C, siguiendo el mismo procedimiento realizado del lecho 4.

Para comparar los gráficos anteriores para cada "Set Point", se presentaron gráficos resumen, donde el valor graficado corresponde al promedio de los valores en los gráficos anteriores, para los "Set Point" y las variables involucradas.

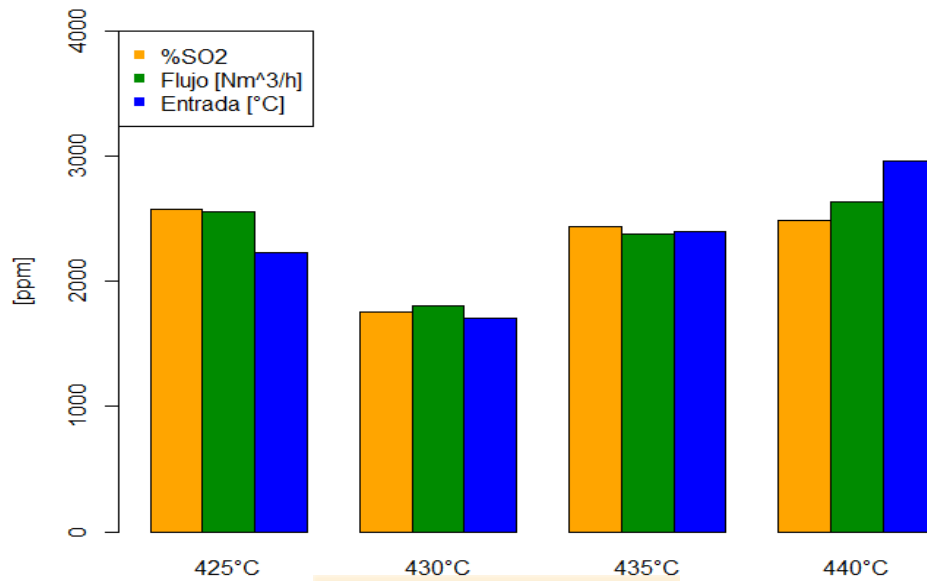


Figura 35 Gráfico concentración [ppm] por "Set point".

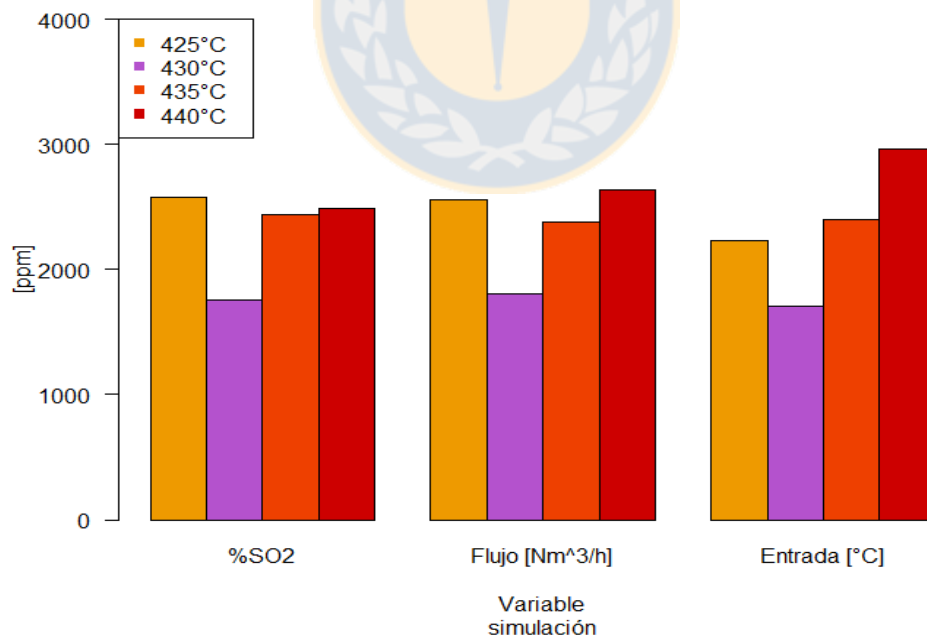


Figura 36 Gráfico concentración [ppm] versus variables involucradas en el proceso (%SO₂, flujo de entrada y temperatura de entrada).

Al analizar la figura 34, se estimó la superioridad de la temperatura propuesta 430 [°C], resaltando la mínima cantidad de ppm de SO₂ que emite a la atmosfera en comparación a las demás temperaturas.

6.2.3. Lecho 2

En el caso del lecho 2 del reactor catalítico, fueron evaluadas las siguientes temperaturas; 435 y 430 y 425. En primer lugar se evaluó la influencia de cada variable sobre la emisión de ppm de SO₂ a la atmósfera, para cada una de las temperaturas propuestas.

T° [C]: 425

Tabla 16 Correlaciones entre variables lecho 2, 425 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,209	0,569	0,473
Flujo[Nm ³ /h]	0,209	1	0,392	0,377
Ppm	0,569	0,392	1	0,585
Entrada	0,473	0,377	0,585	1

T° [C]: 430

Tabla 17 Correlaciones entre variables lecho 2, 430 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,524	0,726	0,529
Flujo[Nm ³ /h]	0,524	1	0,578	0,523
Ppm	0,726	0,578	1	0,651
Entrada	0,529	0,523	0,651	1

T° [C]: 435

Tabla 18 Correlaciones entre variables lecho 2, 435 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,253	0,878	0,520
Flujo[Nm ³ /h]	0,253	1	0,332	0,433
Ppm	0,878	0,332	1	0,602
Entrada	0,520	0,433	0,602	1

A partir de los resultados expuestos anteriormente, se determinó que la variable que posee mayor influencia sobre la emisión de ppm a la atmósfera es la variable %SO₂.

Resultados de las simulaciones

Para verificar la exactitud del método en cada una de las temperaturas propuestas se calculó el porcentaje de acierto (bondad de los métodos), el cual en todos los casos, es superior al 87%

Tabla 19 Acierto de método estadístico "Bosques Aleatorios" en lecho 2.

Set Point	Acierto
425	0,907
430	0,872
435	0,898

A continuación, se trazaron gráficos en dos dimensiones (o ejes) de las distintas simulaciones, donde el eje de las ordenadas correspondió a la cantidad de ppm en función de todas las variables de entrada; donde solo aquellas que aparecieron en el eje de las abscisas se tomaron como variable; las demás tomaron el valor promedio de dicha variable en la tabla de datos facilitada. El número de datos analizados alcanzó el valor de 280000, los cuales están incluidos en cada gráfico. Estos gráficos fueron ubicados en el anexo C, siguiendo el mismo procedimiento realizado del lecho 4.

Para comparar los gráficos anteriores para cada "Set Point", se presentaron gráficos resumen, donde el valor graficado corresponde al promedio de los valores en los gráficos anteriores, para los "Set Point" y las variables involucradas.

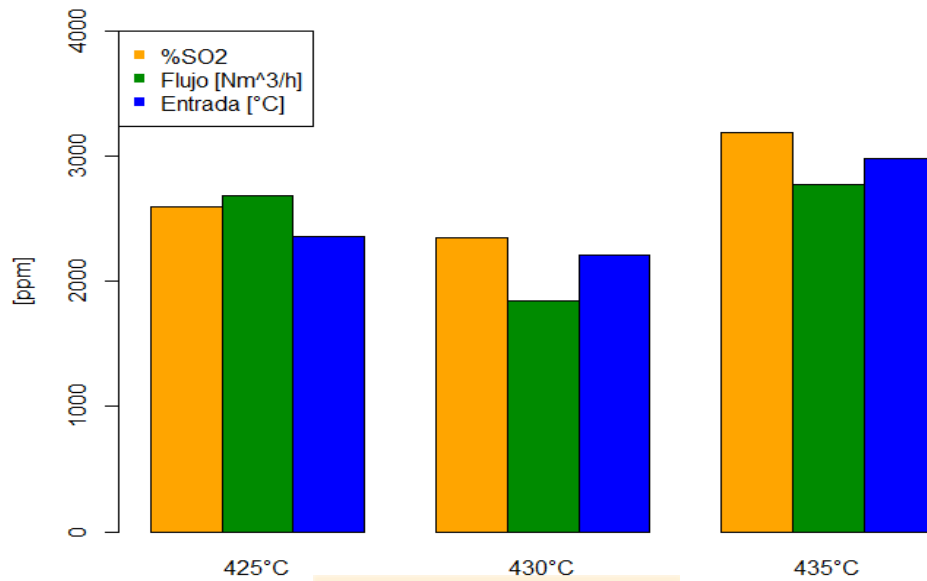


Figura 37 Gráfico concentración [ppm] por "Set Point".

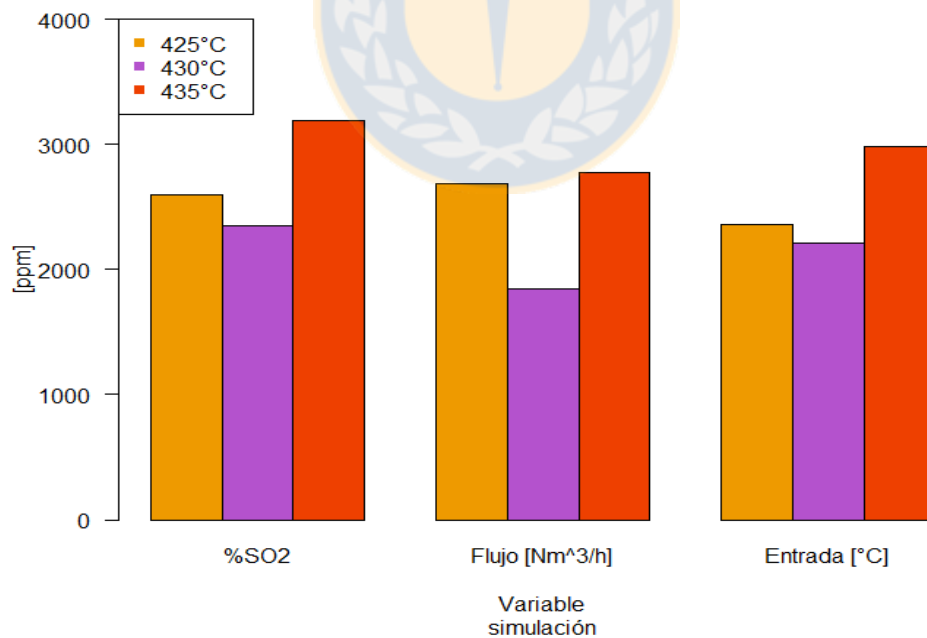


Figura 38 Gráfico concentración [ppm] versus variables involucradas en el proceso (%SO₂, flujo de entrada y temperatura de entrada).

Al analizar la Figura 36 se estimó la superioridad de la temperatura propuesta 430 [°C], resaltando la mínima cantidad de ppm de SO₂ que emite a la atmósfera en comparación a las demás temperaturas.

6.2.4. Lecho 1

En el caso del lecho 1 del reactor catalítico, fueron evaluadas las siguientes temperaturas; 420 y 415. En primer lugar se evaluó la influencia de cada variable sobre la emisión de ppm de SO₂ a la atmósfera, para cada una de las temperaturas propuestas.

T° [°C]: 415

Tabla 20 Correlaciones entre variables lecho 1, 415 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,45564	0,6043	0,56641
Flujo[Nm ³ /h]	0,45564	1	0,46454	-0,0189
Ppm	0,6043	0,46454	1	0,56594
Entrada	0,56641	-0,0189	0,56594	1

T° [°C]: 420

Tabla 21 Correlaciones entre variables lecho 1, 420 [°C].

	%SO ₂	Flujo[Nm ³ /h]	Ppm	Entrada
%SO ₂	1	0,52409	0,72652	0,47141
Flujo[Nm ³ /h]	0,52409	1	0,57884	0,29634
Ppm	0,72652	0,57884	1	0,60173
Entrada	0,47141	0,29634	0,60173	1

A partir de los resultados expuestos anteriormente, se determinó que la variable que posee mayor influencia sobre la emisión de ppm a la atmósfera es la variable %SO₂.

Resultados de las simulaciones

Para verificar la exactitud del método en cada una de las temperaturas propuestas se calculó el porcentaje de acierto (bondad de los métodos), el cual en todos los casos, es superior al 85%

Tabla 22 Acierto de método estadístico "Bosques Aleatorios" en lecho 1.

Set Point	Acierto
415	0,8985089
420	0,8511170

A continuación, se trazaron gráficos en dos dimensiones (o ejes) de las distintas simulaciones, donde el eje de las ordenadas correspondió a la cantidad de ppm en función de todas las variables de entrada, donde solo aquellas que aparecieron en el eje de las abscisas se tomaron como variable; las demás tomaron el valor promedio de dicha variable en la tabla de datos facilitada. El número de datos analizados alcanzó el valor de 30000, los cuales están incluidos en cada gráfico. Estos gráficos fueron ubicados en el anexo C, siguiendo el mismo procedimiento realizado del lecho 4.

Para comparar los gráficos anteriores para cada "Set Point", se presentaron gráficos resumen, donde el valor graficado corresponde al promedio de los valores en los gráficos anteriores, para los "Set Point" y las variables involucradas.

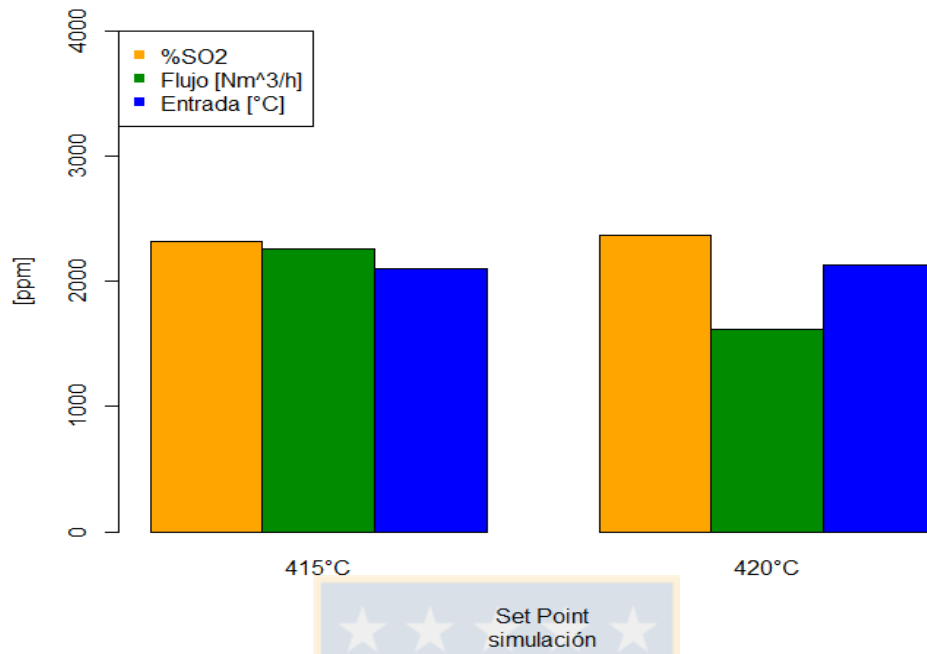


Figura 39 Gráfico concentración [ppm] por "Set point".

Al analizar la figura 38, se apreció una similitud en los resultados de las temperaturas 415 y 420. Debido a esto fue necesario utilizar la correlación entre variables como método selectivo, el que indicó que la variable con mayor influencia sobre la emisión de ppm es %SO₂, por ello se comparó la emisión de ppm con %SO₂ en ambas temperaturas, tal y como indica la figura 44, y se seleccionó la que emitía menor cantidad de ppm a la atmosfera, es decir 415 [°C].

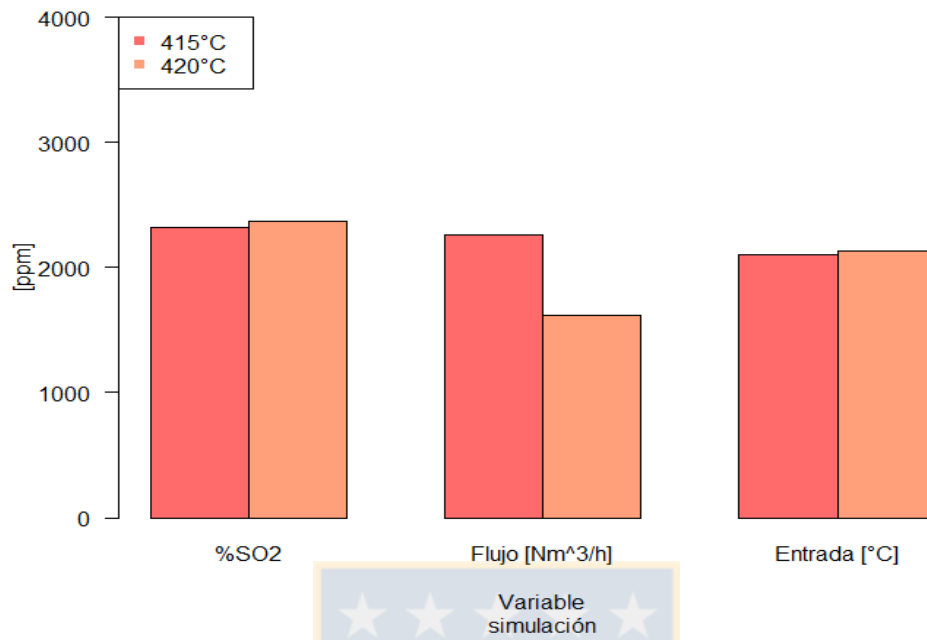


Figura 40 Gráfico concentración [ppm] versus variables involucradas en el proceso (%SO₂, flujo de entrada y temperatura de entrada).

6.3. Análisis de Resultados Operando Bajo Condiciones Óptimas

La Tabla 23 presenta las nuevas temperaturas seleccionadas como "Set Point", a partir de las pruebas realizadas en el reactor.

Tabla 23 Parámetros de operación del reactor catalítico

Parámetros	PLG 1
Flujo [Nm ³ /h]	172300
SO ₂ [%]	8,78
T° entrada cama 1 [°C]	415
T° entrada cama 2 [°C]	430
T° entrada cama 3 [°C]	430
T° entrada cama 4 [°C]	430

6.3.1. Variable dependiente

- Partes por millón de anhídrido sulfuroso emitidas a la atmósfera

Al analizar la Figura 40, de concentración de SO₂ [ppm] v/s Tiempo [h], es posible apreciar la disminución de la cantidad de ppm de SO₂ emitidos a la atmósfera, el valor máximo después de los ajustes en las temperaturas y el arreglo del Damper TV-3004 alcanza un valor 4420 [ppm], muy por debajo de los 16000 [ppm] emitidos antes de los arreglos.

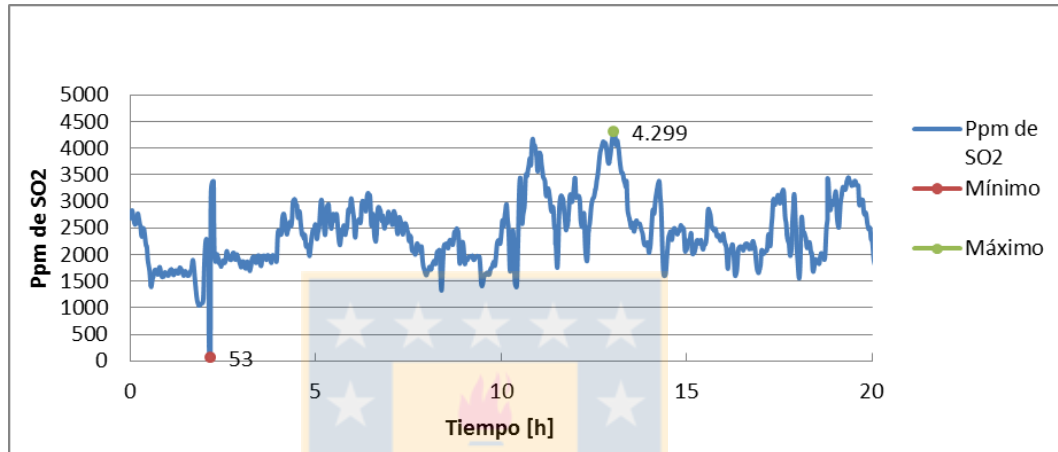


Figura 41 Gráfico concentración de SO₂ [ppm] versus Tiempo[h].

6.3.2. Variable Independiente

- Temperatura de entrada a cada lecho

Cama 4

Posterior al arreglo del Damper TV-3004, controlador de ingreso de aire proveniente del ventilador 1B331y en consecuencia regula la temperatura del gas de entrada al lecho 4, y del cambio de "Set Point" en este lecho, desde 415 [°C] a 430 [°C], es posible apreciar una disminución en la dispersión de los datos como se ve en la figura 41. En el análisis de desviación estándar se identificó un promedio de $429,9 \pm 1,5$ en la temperatura de ingreso a la cama 4, la cual se encuentra muy por debajo de los 16°C encontrados antes de las modificaciones (ver Figura 41).

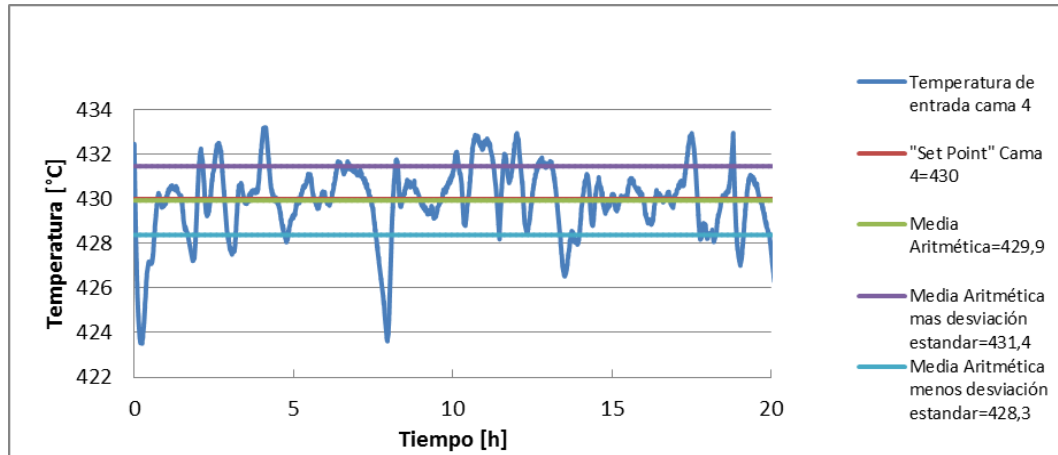


Figura 42 Gráfico temperatura de entrada [°C] versus Tiempo[h] en lecho 4, posterior al cambio de "Set Point".

Cama 3

Posterior al cambio de "Set Point" en este lecho, desde 425 [°C] a 430 [°C], es posible apreciar una disminución en la dispersión de los datos. En la figura 42 se muestra el comportamiento de la temperatura del gas presente en el lecho 3, posterior a la modificación del "Set Point", realizadas a través de un análisis de desviación estándar. En el análisis de desviación estándar se identificó un promedio de $429,9 \pm 2,1$, la desviación estándar presente en esta situación es inferior a los 3,2 encontrados antes de las modificaciones.

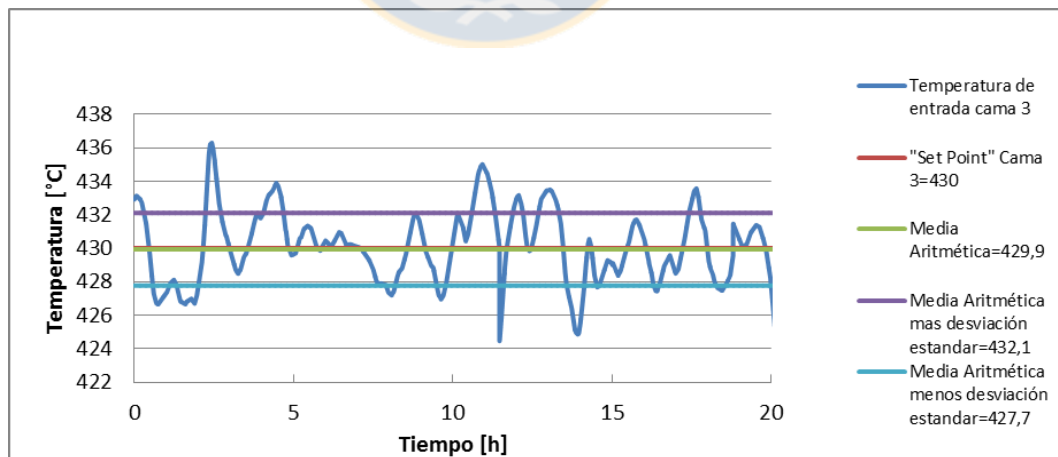


Figura 43 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 3, posterior al cambio de "Set Point".

Cama 2

Posterior al cambio de "Set Point" en este lecho, desde 435 [°C] a 430 [°C], es posible apreciar un leve aumento en la dispersión de los datos. En la figura 43 se presentan estos resultados, considerando un análisis de desviación estándar. En el análisis de desviación estándar se identificó un promedio de $431,1 \pm 9,4$, la desviación estándar presente en esta situación es superior a los 7,3 encontrados antes de las modificaciones. Referente al alto valor correspondiente a la desviación estándar, en este caso, se puede explicar por un problema de medición de temperatura debido a la cercanía de la termocupla con el ducto de ingreso de gas frío al lecho.

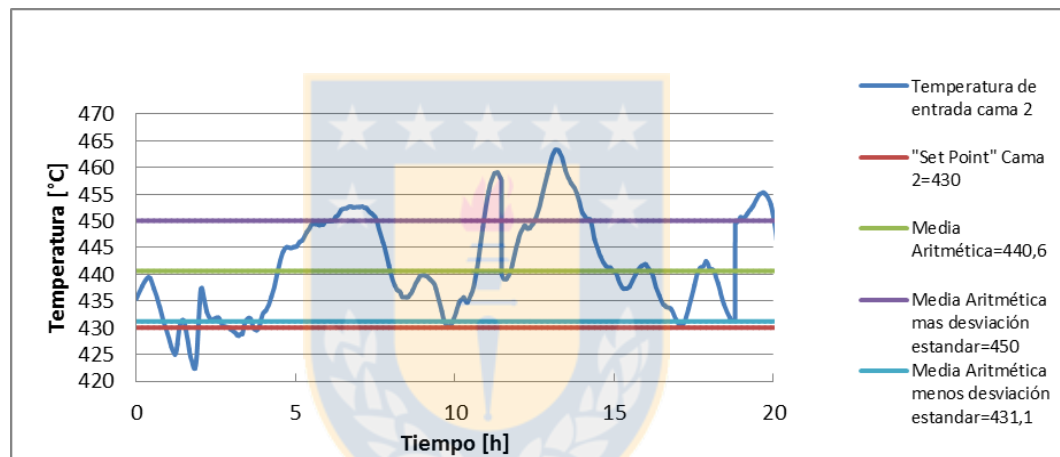


Figura 44 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 2, posterior al cambio de "Set Point".

Cama 1

En el transcurso de las pruebas realizadas en el lecho 1, hubo fallas en el Damper TV-3004, la empresa no permitió el desarrollo correcto de la prueba, por tanto, se debió llevar a cabo con los inconvenientes ya explicados.

Posterior al cambio de "Set Point" en este lecho, desde 420 [°C] a 415 [°C], es posible apreciar un leve aumento en la dispersión de los datos. En la figura 44 se muestra el comportamiento de la temperatura del gas presente en el lecho 1, a través de un análisis de desviación estándar. En el análisis de desviación estándar se identificó un promedio de $415,1 \pm 2,3$, la cual es superior a los 1,1 encontrados antes de las modificaciones. Una de las grandes variaciones en la

temperatura entre la hora 1 y 2 Coincidió con una disminución de flujo provocada por el levantamiento de la campana del CT o los CPS.

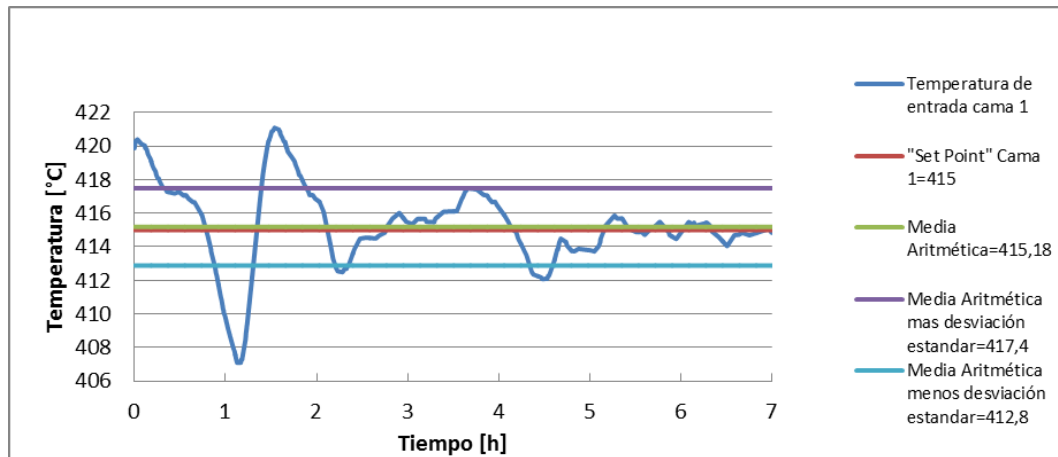


Figura 45 Gráfico temperatura [°C] versus Tiempo[h] en lecho 1, posterior al cambio de "Set Point".

6.4. Validación de Valores Recomendados

Posterior a la evaluación de cada una de las variables determinantes en el proceso (Temperatura de entrada a cada lecho, porcentaje de dióxido de azufre y flujo de entrada al reactor) se concluyó que la única variable manipulable a través del tiempo es la temperatura de entrada a cada uno de los cuatro lechos. Las temperaturas de entrada a los lechos fueron manipuladas con tal de obtener resultados favorables en cuanto a eficiencia, para esto se consideró el modelo expuesto por Matthew Joseph King, el cual expone que a medida que se disminuyen las temperaturas en los lechos aumenta la eficiencia, esto solo se cumplió en los lechos 1 y 2, sin embargo, en los lecho 3 y 4 ocurre lo contrario, es decir, es necesario aumentar temperatura para maximizar la eficiencia. Este resultado fue corroborado con la información entregada por la empresa proveedora de catalizadores "Haldor Topsoe", la cual indica que a medida que un catalizador envejece este va perdiendo eficiencia.

Además de las modificaciones realizadas en las temperaturas de entrada en cada uno de los lechos, fue necesario reparar el Damper TV-3004, el cual estaba dañado y fuera de servicio. El Damper TV-3004 es necesario en el control de la temperatura de entrada del lecho 4 y permite mantener constante la temperatura seleccionada como "Set Point". Este Damper, sufrió deterioros al momento de evaluar el lecho 1, lo cual

perjudicó las conclusiones en dicha cama. Sin embargo, a pesar de los desperfectos se pudo obtener un aumento de eficiencia al final del proceso, por tanto, se puede inferir que si el Damper TV-3004 hubiese estado en condiciones óptimas al momento de realizar la última prueba, la eficiencia hubiese aumentado aún más.

A continuación se presentan los resultados de emisiones de SO_2 previo y posterior a las mejoras propuestas.

En la figura 45 se aprecia la concentración de gas de SO_2 que es emitida por la chimenea, la cual aumenta a medida que aumenta el porcentaje de SO_2 que ingresa a la planta de ácido sulfúrico, durante 24 horas. En el gráfico se identifican valores superiores a 14000 [ppm].

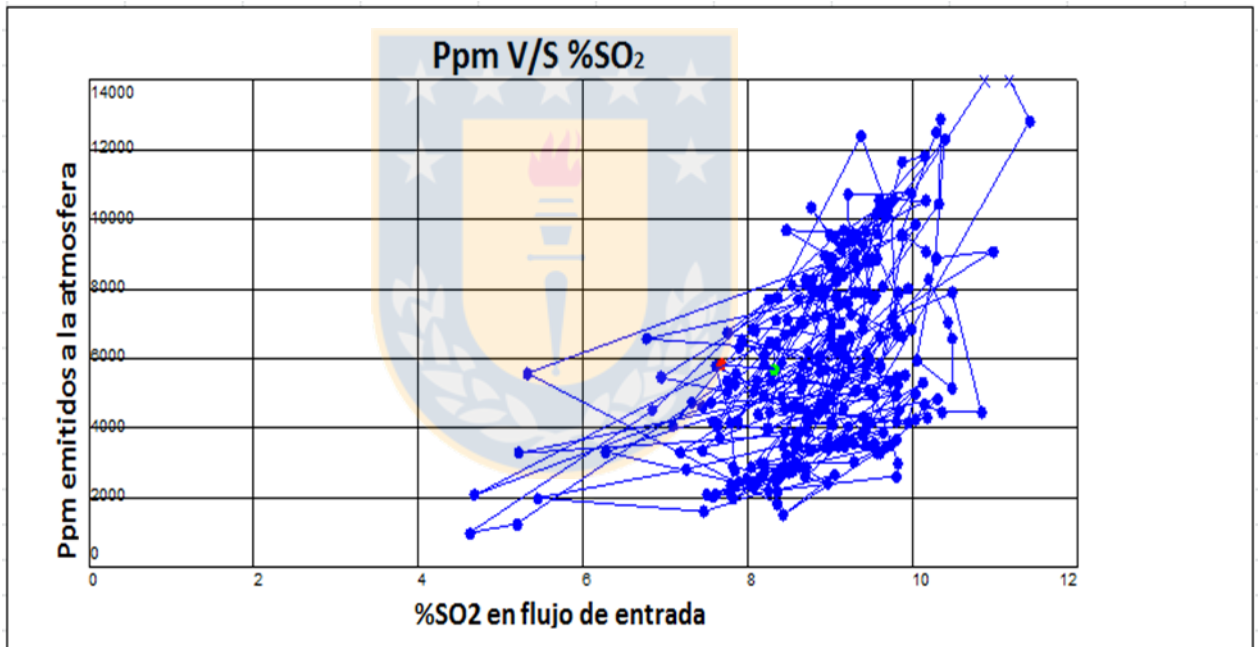


Figura 46 Gráfico concentración de SO_2 [ppm] emitidos a la atmósfera versus % de SO_2 en flujo de entrada durante 24 horas, previo a las modificaciones.

Posterior a las modificaciones realizadas dentro del reactor, se grafica en la Figura 46 el nuevo comportamiento de gas, más estable y con mejor tendencia, disminuyendo significativamente la concentración emitida a través de la chimenea, alcanzando valores inferiores a los 6000 [ppm].

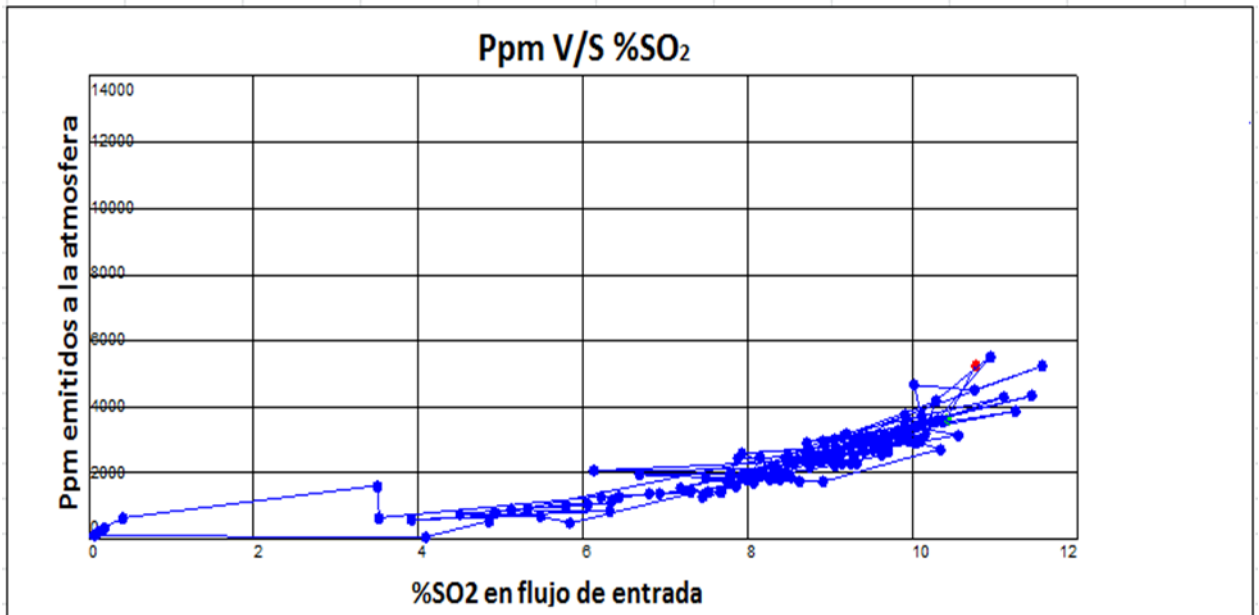


Figura 47 Gráfico concentración de SO₂ [ppm] emitidos a la atmósfera versus % de SO₂ en flujo de entrada durante 24 horas, posterior a las modificaciones.



CAPÍTULO VII: ANÁLISIS DEL IMPACTO AMBIENTAL

A lo largo de Chile existen 7 fundiciones de cobre. La primera en entrar en operación fue Caletones, perteneciente a la división Teniente de Codelco, mientras que la última en entrar en operación fue Altonorte. Cada una de las fundiciones existentes en el planeta posee una planta de ácido sulfúrico capaz de convertir los gases emitidos, como consecuencia del proceso pirometalúrgico del cobre, en ácido sulfúrico. Este proceso se centra principalmente en la conversión de dióxido de azufre en trióxido de azufre dentro de un convertidor catalítico.

Los convertidores catalíticos pueden ser del tipo simple absorción o doble absorción. En la fundición Caletones existen dos convertidores catalíticos del tipo simple absorción. Al comparar los convertidores catalíticos de simple y doble absorción se puede apreciar la superioridad del convertidor catalítico de doble absorción capaz de convertir 99,7% de dióxido de azufre, comparado con 96% de conversión de dióxido de azufre que convierte el convertidor catalítico de simple absorción. Con el de doble absorción se alcanzan contenidos residuales menores a 600 [ppm] de dióxido de azufre, con lo cual se dará cumplimiento a los literales a y b del artículo 4 de la nueva normativa ambiental, Decreto Supremo D.S N° 28, establecida para fundiciones existentes.

Los potenciales impactos negativos ambientales más relevantes identificados estarían asociados directamente a la calidad del aire, debiendo resaltar que estos impactos son de significancia mayor respecto a los ya comprometidos por las operaciones del complejo metalúrgico, es decir, afectación de la calidad del aire y de los ambientes de trabajo por emisiones de dióxido de azufre por la chimenea principal y por emisiones fugitivas.

De acuerdo a los monitoreos ambientales descritos, se evidenciaron impactos a la calidad del aire, anterior y posterior a las pruebas experimentales que excedían los límites máximos permisibles de emisión por chimenea y las concentraciones máximas de agentes químicos en ambientes de trabajo establecidos en la normativa chilena. A través de las modificaciones realizadas en la planta se logró aumentar la eficiencia de la conversión de dióxido de azufre en trióxido de azufre desde 96% a 97,6% lo cual significó una disminución en las emisiones a la atmósfera a través de la chimenea, sin

embargo, esta acción no logra alcanzar al valor máximo de emisión expuesto por el estado chileno para el año 2018, en el Decreto Supremo D.S N° 28, por ello la empresa se encuentra desarrollando un plan de implementación de una planta de tratamiento de gases de cola, operativa al año que comience a regir el decreto supremo.



CAPÍTULO VIII: CONCLUSIONES

A partir del banco de datos obtenido en la planta de ácido sulfúrico de la fundición Caletones se pudieron obtener los parámetros y condiciones de operación más recomendables para la planta. En este análisis se determinó que la única variable manipulable en el proceso de conversión de anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico, es la temperatura de entrada a cada lecho.

Los cambios realizados en las temperaturas de entrada del proceso de conversión catalítica se basaron en el modelo matemático de Matthew Joseph King y en el tiempo de uso del catalizador. A partir de lo anterior, se logró determinar que, para maximizar la eficiencia en un lecho con catalizadores nuevos, se hace necesario disminuir la temperatura de entrada al lecho, tal como plantea Matthew Joseph King; situación ocurrida en los lechos 1 y 2 del reactor catalítico de la planta de limpieza de gases N°1. Por otra parte, el modelo no aplica a catalizadores antiguos, debido a que, para maximizar la eficiencia del proceso, se debe aumentar la temperatura de entrada al lecho, situación ocurrida en los lechos 3 y 4, ya que se trata de catalizadores con 4 años de antigüedad, donde se hizo necesario el aumento de temperatura para maximizar la conversión durante el proceso.

A través del método estadístico denominado "Bosques aleatorios" se logró determinar la temperatura de operación en cada uno de los lechos, denominada "Set Point". La temperatura seleccionada para el primer lecho fue 415 [°C], para el segundo lecho 430 [°C], para el tercer lecho 430 [°C] y para el cuarto y último lecho 430 [°C]. Además, se concluyó que el sistema es sensible a 5 grados Celsius en cada uno de los lechos existentes en el reactor, para aumentar eficiencia.

La correcta selección de las temperaturas de entrada en cada lecho es un factor determinante a la hora de maximizar la eficiencia del proceso, aunque otros factores pueden también afectar aquello, como el buen funcionamiento de los Damper presentes en el área de conversión, como se vio reflejado en el análisis de los datos. Posterior a las calibraciones realizadas en las temperaturas y los arreglos llevados a cabo en el Damper TV-3004, se logró aumentar la conversión de anhídrido sulfuroso a anhídrido sulfúrico desde 96% a 97,6%.

Respecto a lo expuesto en los párrafos anteriores, es correcto afirmar que a través de un buen control de las variables del proceso, en este caso las temperaturas de entrada a cada uno de los lechos, es posible maximizar la eficiencia de un convertidor catalítico presente en una planta de ácido sulfúrico.



REFERENCIAS

- [1] Hernán Vargas. (2017). Freeport supera a Codelco como mayor productor de cobre. Miércoles, 8 de marzo 2017, de El Mercurio Sitio web: <http://www.elmercurio.com/Inversiones/Noticias/Fondos-Mutuos/2017/03/08/Freeport-supera-a-Codelco-como-mayor-productor-de-cobre.aspx>
- [2] Centro de investigación minero metalúrgico- CIMM E&G. (18 de Febrero de 2004). Manual de Operaciones Convertido Teniente. 3.
- [3] F. Carrillo, R. Hernández, J. Martínez y A. Roselló. Cinética del soplado a cobre en un convertidor Peirce-Smith. Información tecnológica, 15, 33-36, 2004.
- [4] Leda Pernet Bolaño, Iván A. Ochoa Martínez, Mauricio E. Robledo Barrios, César A. Rueda Durán. Modelamiento y simulación de un reactor catalítico para la oxidación de SO₂ a SO₃, utilizando V₂O₅ como catalizador. Prospect, 14, 39-46, Enero - Junio de 2016.
- [5] M. J. King, W. Davenport, M. S. Moats, Sulfuric acid manufacture; second Edition, Oxford: Elsevier, pp. 1-120, 2013.
- [6] P. Mars, J. Maessen, "The Mechanism and the Kinetics of Sulfur Dioxide Oxidation on Catalysts Containing Vanadium and Alkali Oxides", Journal of Catalysis, 10, 1-12, 1968.
- [7] Yadira Robles Aranda, Anthony R. Sotolongo. (May/Aug. 2013). Integración de los algoritmos de minería de datos 1R, PRISM e ID3 a PostgreSQL. JISTEM J.Inf.Syst. Technol. Manag, 10, 2, May/Aug. 2013.
- [8] Leo Breiman. Random forests. Machine Learning, 45, 5-32, 2001.
- [9] Carlos N. Bouza y Agustín Santiago. (2012). Modelación matemática de fenómenos del medio ambiente y la salud. Minería de datos: Arboles de decisión y aplicación en estudios médicos, 2, 64-78.
- [10] Hidalgo Ruiz-Capillas, S. (2014). Random Forests para detección de fraude en medios de pago. Magister. Universidad Autónoma de Madrid.

[11] Iván Menes Camejo, Gloria Arcos Medina, Katherine Gallegos Carrillo. Desempeño de algoritmos de minería en indicadores académicos: Árbol de Decisión y Regresión Logística. *Revista Cubana de Ciencias Informáticas*, 9, 4, oct.-dic. 2015.

[12] Monje Solá, R. (2015). *Análisis y Predicción de los Retrasos de Vuelo*. Gestión Aeronáutica. Universidad Autónoma de Barcelona.

[13] Arnejo Calviño, H. (2017). *Métodos para la mejora de predicciones en clases desbalanceadas en el estudio de bajas de clientes (CHURN)*. Magister. Universidad de Santiago de Compostela.



ANEXOS



Anexo A: Descripción de catalizadores

Catalizadores

Catalizador VK-701:

La empresa Haldor Topsoe desarrollo un nuevo catalizador para plantas de ácido sulfúrico denominado VK-701 LEAP5. Este nuevo catalizador está optimizado para operación dentro de los convertidores de las plantas de limpieza de gases. En estas condiciones VK-701 LEAPS muestra ventajas significativas frente a los catalizadores promovidos por potasio y cesio.

La alta actividad ofrecida por este catalizador presenta oportunidad de conversión para plantas de doble y simple absorción, en el caso de las plantas de ácido sulfúrico de simple absorción es capaz de reducir las emisiones de SO_2 hasta en un 40% en la etapa final.

Características:

La ventaja ofrecida en la actividad de VK-701 LEAP5 se debe principalmente a la alta fracción de vanadio en su estado activo de oxidación V^{5+} . Durante la operación varias especies de vanadio están presentes, pero solo el estado de oxidación V^{5+} está activo en el ciclo catalítico. El alto nivel V^{5+} en el presente catalizador se ha producido a través de cambios físicos como químicos en comparación con los demás catalizadores Topsoe.

Composición química:

VK-701 LEAP5 combina el aumento del contenido de vanadio con una combinación de la fase activa adaptada a altas concentración de SO_3 , es decir, gas fuerte convertido.

Beneficios:

El aumento en el contenido de vanadio en estado de oxidación V^{5+} resulta en una actividad superior para VK-701 LEAP5 en comparación con VK48 y VK 59 en todo el rango de temperatura. VK-701 LEAP5 es ofrecido en Topsoe con una medida estándar de 12 mm de diámetro para asegurar una baja caída de presión.

Catalizador VK-59

VK-59 es un catalizador promovido por cesio optimizado para gases de SO_2 de media a alta resistencia con funcionamiento continuo hasta 370°C . Una capa superior de VK-59 en la primera cama permite acomodar el gas de alimentación sin exceder la temperatura máxima de salida 630°C y aun así mantener una alta eficiencia de conversión en el lecho. El VK-59 instalado en el(los) los lecho(s) inferior(es) de plantas de simple absorción permite una mejora significativa de la conversión.

Beneficios

- Permite una alimentación de gas de SO_2 fuerte sin temperaturas excesivas de salida del primer lecho
- Flexibilidad operativa enormemente mejorada para la rápida variación de la composición de los gases de alimentación.
- Baja temperatura de encendido para arranques más rápidos y limpios
- Tiempo de inactividad considerablemente prolongado para los reinicios autotermicos
- Mejora de la conversión global en plantas de simple absorción
- Mayor eficiencia energética durante todo el ciclo de funcionamiento debido a la baja caída de presión inicial.
- Baja temperatura de ignición

VK-59 y VK-69 tienen temperaturas de ignición excepcionalmente bajas de $320\text{-}330^\circ\text{C}$ que ofrecen nuevas posibilidades para arranques más rápidos y más limpios. Los reinicios autotermicos pueden realizarse después de un tiempo de inactividad significativamente más largos sin el uso del pre-calentador VK-59 y VK-69

Catalizador VK-38

La composición de VK-38 proporciona una excelente actividad en una amplia gama de condiciones operacionales. VK-38 es el único catalizador en el mercado que puede ser utilizado eficazmente en todos los lechos de cualquier convertidor de SO_2 . Para una operación continua, VK-38 ofrece un amplio rango de temperatura de $400\text{-}630[^\circ\text{C}]$ y puede soportar alzas de temperatura hasta $650[^\circ\text{C}]$. VK-38 está diseñado para iniciar la reacción a una temperatura tan baja como $360[^\circ\text{C}]$, asegurando un arranque suave

de la planta, minimizando el tiempo de precalentamiento debido a su actividad catalítica superior.

12mm de tamaño en el catalizador mejora la eficiencia energética durante todo el ciclo de funcionamiento debido a una baja caída de presión inicial.

Catalizador VK-48

VK48 es una versión de vanadio alto del catalizador estándar VK38 todo terreno. La composición de catalizador se formula específicamente para un servicio de paso inferior, particularmente cuando el gas de proceso contiene grandes cantidades de SO_3 . La relación de conversión de SO_2 afecta el equilibrio entre las especies de vanadio activo en el catalizador. Una relación optimizada de los promotores de metal alcalino permite un aumento del contenido de vanadio en VK48, dando como resultado una actividad considerablemente mejorada. En entornos de alto SO_3 , como las pasadas inferiores de plantas de absorción única, o el tercer paso de una planta de doble absorción 3: 1, VK48 ofrece una ventaja de rendimiento significativa.

12 mm Daisy: mejora la eficiencia energética durante todo el ciclo de funcionamiento debido a la baja caída de presión inicial; Cilindro de 6 mm y anillo de 10 mm: garantiza una distribución de gas uniforme en aplicaciones con convertidores de baja velocidad de gas.

Anexo B: Balances de materia y energía según modelo de Matthew Joseph King

La conversión en el convertidor catalítico se consideró como adiabática, por lo que la energía que entra es igual a la que sale, dando un factor de conversión por lecho.

El resultado fue obtenido realizando operaciones de matrices. Dichas operaciones es la obtención de la matriz inversa de la energía que entra al lecho y multiplicando esta por la matriz de masa que entra al lecho.



Cálculos de conversión previo a cambio de Set Point

Tabla 24 Temperaturas de reacción previo a cambios en "Set Point".

	T° °C	T° K	T° °C salida	T° K solver sa	T° K salida
Cama 1	420	693	595,428027	868,428027	853,526262
Cama 2	435	708	524,36728	797,36728	799,23756
Cama 3	420	693	444,855776	717,855776	730,810053
Cama 4	415	688	417,26742	690,26742	697,35087

ϕ	T°
30	967,188146
40	932,348274
50	902,382258
60	874,237933
70	845,548437
80	813,171874
90	769,296849
95	733,213977
97,5	701,733949
99	664,892391
99,5	639,76461
99,9	588,424166
99,95	568,807279

B=	-98,41
A=	0,09357
R=	0,008314

ϕ =	62,638521
e=	8,78
f=	13,93
nitrogeno	77,29
p=	0,20092379
K	693

Tabla 25 Balances de Materia y energía en lecho 1 y 2.

Lecho 1												
Descripcion	%	Kg-mol SO2 in	Kg-mol O2 in	Kg-mol N2 in	Kg-mol SO3 out	Kg-mol SO2 out	Kg-mol O2 out	Kg-mol N2 out				
Alimentacion SO2 kg-mol	0,0878	1	0	0	0	0	0	0				
Alimentacion O2 kg-mol	0,1393	0	1	0	0	0	0	0				
Alimentacion N2 kg-mol	0,7729	0	0	1	0	0	0	0				
S balance	0	-1	0	0	1	0	1	0				
O balance	0	-2	-2	0	0	3	2	2				
N balance	0	0	0	-2	0	0	0	0				
balance de Entalpia	0	278,53427	-12,30769	-11,7553	-359,6240838	-270,2495096	17,65803032	16,83766675				
Kg-mole SO2 in	0,0878											
Kg-mole O2 in	0,1393											
Kg-mole N2 in	0,7729											
Kg-mole SO3 out	0,05499662											
Kg-mole SO2 out	0,03280338											
Kg-mole O2 out	0,11180169											
Kg-mole N2 out	0,7729											
693												
853,5262621												
% conversion en 1° cama												
62,63852101												
Lecho 2												
Descripcion	%	Kg-mol SO3 in	Kg-mol SO2 in	Kg-mol O2 in	Kg-mol N2 in	Kg-mol SO3 out	Kg-mol SO2 out	Kg-mol O2 out	Kg-mol N2 out			
Alimentacion SO3 kg-mol	0,05499662	1	0	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion SO2 kg-mol	0,07259315	0	1	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion O2 kg-mol	0,17493057	0	0	1	0	0	0	0	0			
Alimentacion N2 kg-mol	1,12316783	0	0	0	1	0	0	0	0			
S balance	0	-1	-1	0	0	1	1	0	0			
O balance	0	-3	-2	-2	0	3	2	2	0			
N balance	0	0	0	0	-2	0	0	0	0			
balance de Entalpia	0	370,02048	277,76012	-12,80764	-12,2218	-363,5024688	-273,0513496	15,84858782	15,05928807			
Kg-mol SO3 in	0,05499662											
Kg-mole SO2 in	0,07259315											
Kg-mole O2 in	0,17493057											
Kg-mole N2 in	1,12316783											
Kg-mole SO3 out	0,09991865											
Kg-mole SO2 out	0,02767112											
Kg-mole O2 out	0,15246955											
Kg-mole N2 out	1,12316783											
708												
799,2375585												
% conversion en 2° cama												
78,31242874												

Tabla 26 Balances de materia y energía en lecho 3 y 4.

Lecho 3												
Descripcion	%	Kg-mol SO3 in	Kg-mol SO2 in	Kg-mol O2 in	Kg-mol N2 in	Kg-mol SO3 out	Kg-mol SO2 out	Kg-mol O2 out	Kg-mol N2 out			
Alimentacion SO3 kg-mol	0,09991865	1	0	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion SO2 kg-mol	0,02767112	0	1	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion O2 kg-mol	0,15246955	0	0	1	0	0	0	0	0			
Alimentacion N2 kg-mol	1,12316783	0	0	0	1	0	0	0	0			
S balance	0	-1	-1	0	0	1	0	0	0			
O balance	0	-3	-2	0	0	3	2	2	0			
N balance	0	0	0	0	-2	0	0	0	2			
balance de Entalpia	0	371,09208	278,53427	-12,30769	-11,7553	-368,3909298	-276,5828932	13,56789907	12,93119265			
Kg-mol SO3 in	0,09991865											
Kg-mole SO2 in	0,02767112											
Kg-mole O2 in	0,15246955											
Kg-mole N2 in	1,12316783											
Kg-mole SO3 out	0,11854857											
Kg-mole SO2 out	0,00904121											
Kg-mole O2 out	0,14315459											
Kg-mole N2 out	1,12316783											
693												
730,8100531												
% conversion en 3° cama												
92,91384637												
Lecho 4												
Descripcion	%	Kg-mol SO3 in	Kg-mol SO2 in	Kg-mol O2 in	Kg-mol N2 in	Kg-mol SO3 out	Kg-mol SO2 out	Kg-mol O2 out	Kg-mol N2 out			
Alimentacion SO3 kg-mol	0,11854857	1	0	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion SO2 kg-mol	0,00904121	0	1	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion O2 kg-mol	0,14315459	0	0	1	0	0	0	0	0			
Alimentacion N2 kg-mol	1,12316783	0	0	0	1	0	0	0	0			
S balance	0	-1	-1	0	0	1	0	0	0			
O balance	0	-3	-2	0	0	3	2	2	0			
N balance	0	0	0	0	-2	0	0	0	2			
balance de Entalpia	0	371,44928	278,79232	-12,14104	-11,5998	-370,7812537	-278,3097215	12,45270457	11,89061212			
Kg-mol SO3 in	0,11854857											
Kg-mole SO2 in	0,00904121											
Kg-mole O2 in	0,14315459											
Kg-mole N2 in	1,12316783											
Kg-mole SO3 out	0,12315661											
Kg-mole SO2 out	0,00443317											
Kg-mole O2 out	0,14085057											
Kg-mole N2 out	1,12316783											
688												
697,3508721												
% conversion en 4° cama												
96,52545299												

Tabla 27 Balance de materia y energía del gas frío que ingresa al lecho 2.

Balance de masa que entra a primera cama			Balance de masa y energía para gas que sale de la primera cama				
Masa SO ₂ :	250,924292	Masa de SO ₂ :	93,7490266	Cp SO ₂ :	-4,22274524	H SO ₂ :	-395,878256
Masa O ₂ :	198,86683	Masa de SO ₃ :	196,285064	Cp SO ₃ :	-4,49272443	H SO ₃ :	-881,854704
Masa N ₂ :	965,823288	Masa de O ₂ :	159,609817	Cp O ₂ :	0,5516709	H O ₂ :	88,0520921
		Masa de N ₂ :	965,823288	Cp N ₂ :	0,59894297	H N ₂ :	578,473071
						Suma entalp:	-611,207797
Balance de masa y energía para gas que entra a segunda cama por ducto			T° [K] Entrada gas ducto			370,03155	
Masa SO ₂ :	0,25092429	Cp SO ₂ :	-4,590254921	H SO ₂ :	-1,15180647		
Masa O ₂ :	0,19886683	Cp O ₂ :	0,066088441	H O ₂ :	0,0131428		
Masa N ₂ :	0,96582329	Cp N ₂ :	0,074662686	H N ₂ :	0,07211096		
				suma entalp:	-1,06655271		
Balance de masa para gas que entra a segunda cama							
Masa de SO ₂ :	93,7490266	Masa SO ₂ :	0,250924292	Cp SO ₂ :	-4,33826985	H SO ₂ :	-406,708576
Masa de SO ₃ :	196,285064	Masa SO ₃ :	0	Cp SO ₃ :	-4,62005968	H SO ₃ :	-906,848711
Masa de O ₂ :	159,609817	Masa O ₂ :	0,19886683	Cp O ₂ :	0,44076023	H O ₂ :	63,9652669
Masa de N ₂ :	965,823288	Masa N ₂ :	0,965823288	Cp N ₂ :	0,4362224	H N ₂ :	421,313753
						suma entalp:	-828,278267
Ecuacion Final							
217,070471		453,18648					
0,47898708							
Resultados del balance de masa que ingresa :							
Masa SO ₂ :	113,715496	39,7897729	3,978977291	0,03978977	0,12758977		
Masa O ₂ :	90,1237587	63,1288766	6,312887661	0,06312888	0,20242888		
Masa N ₂ :	437,698056	350,26783	35,02678301	0,35026783	1,12316783		

Tabla 28 Ajuste de valores y % de conversión en cada lecho con sus respectivas temperaturas de reacción.

		0,05499662	
Cama 1	Q=	13,6984955	6,2855E-11
	K=	13,6984955	
		0,09991865	
Cama 2	Q=	35,1005265	-2,3997E-07
	K=	35,1005267	
		0,11854857	
Cama 3	Q=	140,589014	4,2633E-13
	K=	140,589014	
		0,12315661	
Cama 4	Q=	306,294177	-5,9397E-05
	K=	306,294237	

% ox	T°
0	693
62,638521	853,526262
62,638521	708
78,3124294	799,23756
78,3124294	693
92,9138471	730,810053
92,9138471	688
96,5254531	697,35087

Calculo posterior a cambios en Set Point

Tabla 29 Temperaturas de reacción posterior a cambios en "Set Point".

	T° °C	T° K	T° °C salida	T° K solver sa	T° K salida
Cama 1	415	688	595,428027	868,428027	850,933116
Cama 2	430	703	524,36728	797,36728	795,936928
Cama 3	430	703	444,855776	717,855776	736,367161
Cama 4	430	703	417,26742	690,26742	711,218264

ϕ	T°
30	967,188146
40	932,348274
50	902,382258
60	874,237933
70	845,548437
80	813,171874
90	769,296849
95	733,213977
97,5	701,733949
99	664,892391
99,5	639,76461
99,9	588,424166
99,95	568,807279

B=	-98,41
A=	0,09357
R=	0,008314

ϕ =	63,5602849
e=	8,78
f=	13,93
nitrogeno	77,29
p=	0,20092379
K	688

Tabla 30 Balances de materia y energía en lecho 1 y 2.

Lecho 1												
Descripcion	%	Kg-mol SO2 in	Kg-mol O2 in	Kg-mol N2 in	Kg-mol SO3 out	Kg-mol SO2 out	Kg-mol O2 out	Kg-mol N2 out				
Alimentacion SO2 kg-mol	0,0878	1	0	0	0	0	0	0				
Alimentacion O2 kg-mol	0,1393	0	1	0	0	0	0	0				
Alimentacion N2 kg-mol	0,7729	0	0	1	0	0	0	0				
S balance	0	-1	0	0	1	0	1	0				
O balance	0	-2	-2	0	0	3	2	2				
N balance	0	0	0	-2	0	0	0	0				
balance de Entalpia	0	278,79232	-12,14104	-11,5998	-359,8093382	-270,3833419	17,57160076	16,75701991				
Kg-mole SO2 in	0,0878											
Kg-mole O2 in	0,1393											
Kg-mole N2 in	0,7729											
Kg-mole SO3 out	0,05580593											
Kg-mole SO2 out	0,03199407											
Kg-mole O2 out	0,11139703											
Kg-mole N2 out	0,7729											
688												
850,9331161												
% conversion en 1° cama												
63,56028485												
Lecho 2												
Descripcion	%	Kg-mol SO3 in	Kg-mol SO2 in	Kg-mol O2 in	Kg-mol N2 in	Kg-mol SO3 out	Kg-mol SO2 out	Kg-mol O2 out	Kg-mol N2 out			
Alimentacion SO3 kg-mol	0,05580593	1	0	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion SO2 kg-mol	0,07106726	0	1	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion O2 kg-mol	0,173389	0	0	1	0	0	0	0	0			
Alimentacion N2 kg-mol	1,11685974	0	0	0	1	0	0	0	0			
S balance	0	-1	-1	0	0	1	1	0	0			
O balance	0	-3	-2	-2	0	3	2	2	0			
N balance	0	0	0	0	-2	0	0	0	0			
balance de Entalpia	0	370,02048	277,76012	-12,80764	-12,2218	-363,5922127	-273,1161827	15,80671825	15,02021985			
Kg-mol SO3 in	0,05580593											
Kg-mole SO2 in	0,07106726											
Kg-mole O2 in	0,173389											
Kg-mole N2 in	1,11685974											
Kg-mole SO3 out	0,09986208											
Kg-mole SO2 out	0,02701111											
Kg-mole O2 out	0,15136093											
Kg-mole N2 out	1,11685974											
708												
797,9813457												
% conversion en 2° cama												
78,71015292												

Tabla 31 Balances de materia y energía en lecho 3 y 4.

Lecho 3												
Descripcion	%	Kg-mol SO3 in	Kg-mol SO2 in	Kg-mol O2 in	Kg-mol N2 in	Kg-mol SO3 out	Kg-mol SO2 out	Kg-mol O2 out	Kg-mol N2 out			
Alimentacion SO3 Kg-mol	0,09986208	1	0	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion SO2 Kg-mol	0,02701111	0	1	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion O2 Kg-mol	0,15136093	0	0	1	0	0	0	0	0			
Alimentacion N2 Kg-mol	1,11685974	0	0	0	1	0	0	0	0			
S balance	0	-1	-1	0	0	1	0	1	0			
O balance	0	0	-2	-2	0	3	2	2	0			
N balance	0	0	0	0	-2	0	0	0	2			
balance de Entalpia	0	370,37768	278,01817	-12,64099	-12,0663	-367,9228191	-276,2447186	13,78629392	13,13497543			
Kg-mol SO3 in	0,09986208											
Kg-mole SO2 in	0,02701111											
Kg-mole O2 in	0,15136093											
Kg-mole N2 in	1,11685974											
Kg-mole SO3 out	0,11670234											
Kg-mole SO2 out	0,01017085											
Kg-mole O2 out	0,1429408											
Kg-mole N2 out	1,11685974											
703												
% conversion en 3° cama												
91,98345234												
Lecho 4												
Descripcion	%	Kg-mol SO3 in	Kg-mol SO2 in	Kg-mol O2 in	Kg-mol N2 in	Kg-mol SO3 out	Kg-mol SO2 out	Kg-mol O2 out	Kg-mol N2 out			
Alimentacion SO3 Kg-mol	0,11670234	1	0	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion SO2 Kg-mol	0,01017085	0	1	0	0	0	0	0	0			
Alimentacion O2 Kg-mol	0,1429408	0	0	1	0	0	0	0	0			
Alimentacion N2 Kg-mol	1,11685974	0	0	0	1	0	0	0	0			
S balance	0	-1	-1	0	0	1	0	1	0			
O balance	0	-3	-2	-2	0	3	2	2	0			
N balance	0	0	0	0	-2	0	0	0	2			
balance de Entalpia	0	370,37768	278,01817	-12,64099	-12,0663	-369,771834	-277,5804921	12,92364464	12,33004315			
Kg-mol SO3 in	0,11670234											
Kg-mole SO2 in	0,01017085											
Kg-mole O2 in	0,1429408											
Kg-mole N2 in	1,11685974											
Kg-mole SO3 out	0,12085955											
Kg-mole SO2 out	0,00601364											
Kg-mole O2 out	0,14086219											
Kg-mole N2 out	1,11685974											
703												
% conversion en 4° cama												
95,26012004												
711,4804872												

Tabla 32 Balance de materia y energía del gas frío que ingresa al lecho 2.

Balance de masa que entra a primera cama			Balance de masa y energía para gas que sale de la primera cama				
Masa SO ₂ :	250,924292	Masa de SO ₂ :	91,4360972	Cp SO ₂ :	-4,22484077	H SO ₂ :	-386,302951
Masa O ₂ :	198,86683	Masa de SO ₃ :	199,173518	Cp SO ₃ :	-4,49504161	H SO ₃ :	-895,293252
Masa N ₂ :	965,823288	Masa de O ₂ :	159,032127	Cp O ₂ :	0,54894597	H O ₂ :	87,300045
		Masa de N ₂ :	965,823288	Cp N ₂ :	0,59600637	H N ₂ :	575,636836
						Suma entalp:	-618,659322
Balance de masa y energía para gas que entra a segunda cama por ducto			Balance de masa y energía para gas que entra a segunda cama				
Masa SO ₂ :	0,25092429	Cp SO ₂ :	-4,590254921	H SO ₂ :	-1,15180647	T° [K] Entrada gas ducto	370,03155
Masa O ₂ :	0,19886683	Cp O ₂ :	0,066088441	H O ₂ :	0,0131428		
Masa N ₂ :	0,96582329	Cp N ₂ :	0,074662686	H N ₂ :	0,07211096		
				suma entalp:	-1,06655271		
Balance de masa para gas que entra a segunda cama			Balance de masa para gas que entra a segunda cama				
Masa de SO ₂ :	91,4360972	Masa SO ₂ :	0,250924292	Cp SO ₂ :	-4,34216394	H SO ₂ :	-397,030524
Masa de SO ₃ :	199,173518	Masa SO ₃ :	0	Cp SO ₃ :	-4,62433683	H SO ₃ :	-921,045435
Masa de O ₂ :	159,032127	Masa O ₂ :	0,19886683	Cp O ₂ :	0,39564801	H O ₂ :	62,9207445
Masa de N ₂ :	965,823288	Masa N ₂ :	0,965823288	Cp N ₂ :	0,4307069	H N ₂ :	415,986754
						suma entalp:	-839,168461
Ecuacion Final			Ecuacion Final				
	220,509138		467,51089				
	0,47166631						
Resultados del balance de masa que ingresa :			Resultados del balance de masa que ingresa :				
Masa SO ₂ :	117,309839	41,0474561	4,104745612	0,04104746	0,12884746		
Masa O ₂ :	92,9724087	65,1242669	6,512426694	0,06512427	0,20442427		
Masa N ₂ :	451,532905	361,339167	36,13391667	0,36133917	1,13423917		

Tabla 33 Ajuste de valores y % de conversión en cada lecho con sus respectivas temperaturas de reacción.

		0,05580593	
Cama 1	Q=	14,2886529	5,6614E-08
	K=	14,2886528	
		0,10201161	
Cama 2	Q=	37,3231392	-1,6308E-06
	K=	37,3231409	
		0,11861862	
Cama 3	Q=	124,390401	-2,0679E-05
	K=	124,390422	
		0,12270997	
Cama 4	Q=	219,825285	2,772E-05
	K=	219,825258	

% ox	T°
0	688
63,5602849	850,933116
63,5602849	703
79,1723922	795,936928
79,1723922	703
92,0612822	736,367161
92,0612822	703
95,2366266	711,218264

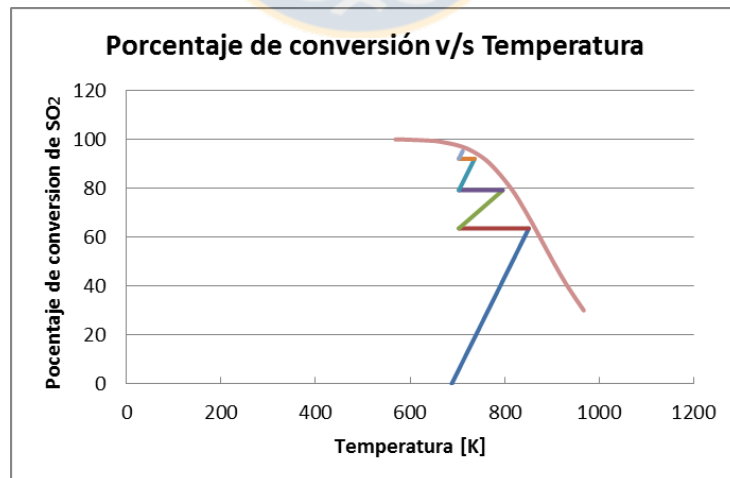


Figura 48 Gráfico de resultados según modelo de Matthew Joseph King.

Anexo C: Simulaciones en lecho 3,2 y 1

Lecho 3

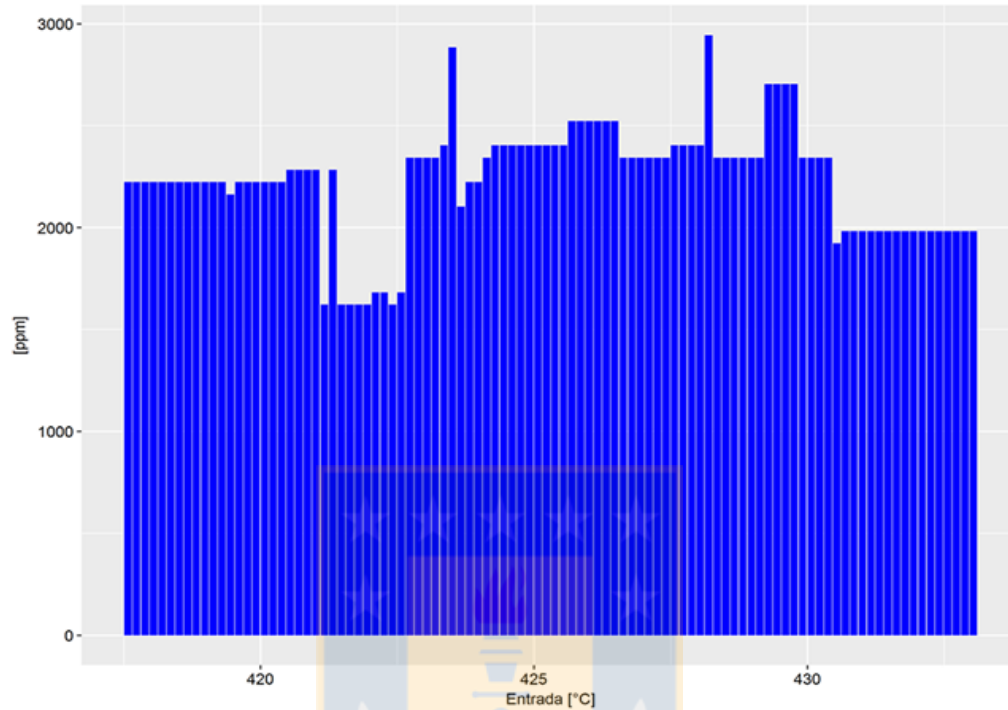
 $T^{\circ}=425[{}^{\circ}\text{C}]$ 

Figura 49 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 3, Set Point=425, Valores promedios: %SO₂ de entrada=8,96%; Flujo de entrada=174956,9[Nm³/h].

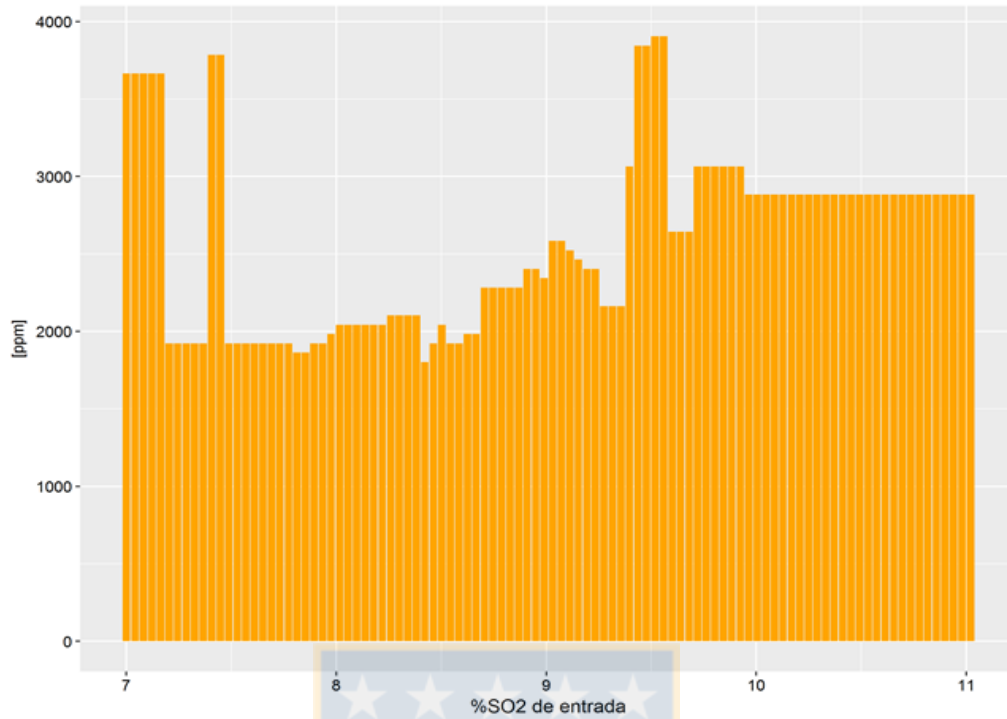


Figura 50 Efecto del %SO₂ de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 3, Set point=425, Valores promedios: flujo= 174956,9[Nm³/h]; Temperatura de entrada=425,11[°C].

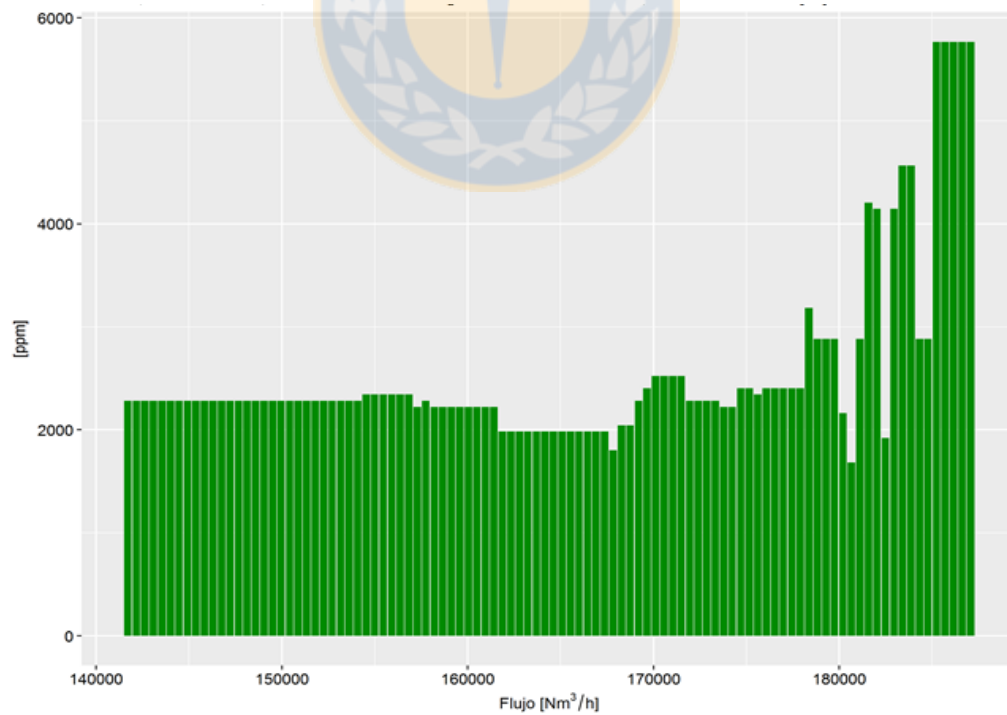


Figura 51 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 3, Set point=425, Valores promedio: %SO₂ de entrada=8,96%; Temperatura de entrada=425,11[°C].

$T^{\circ}=430[^{\circ}\text{C}]$

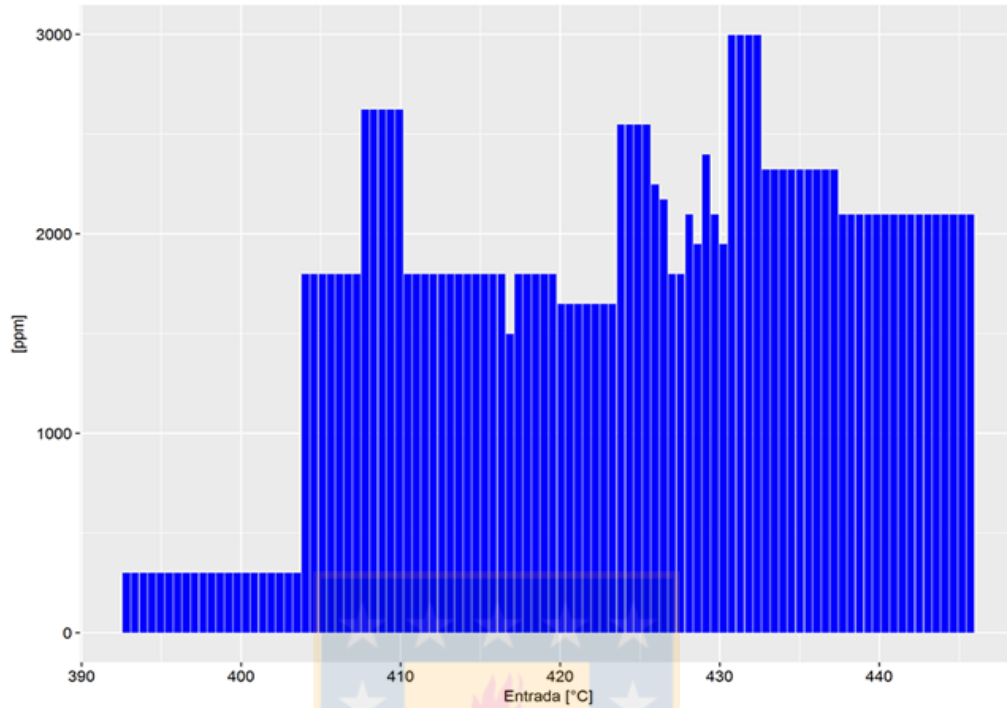


Figura 52 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 3, Set Point=430, Valores promedios: %SO₂ de entrada=9,2%; Flujo de entrada=169669,2[Nm³/h].

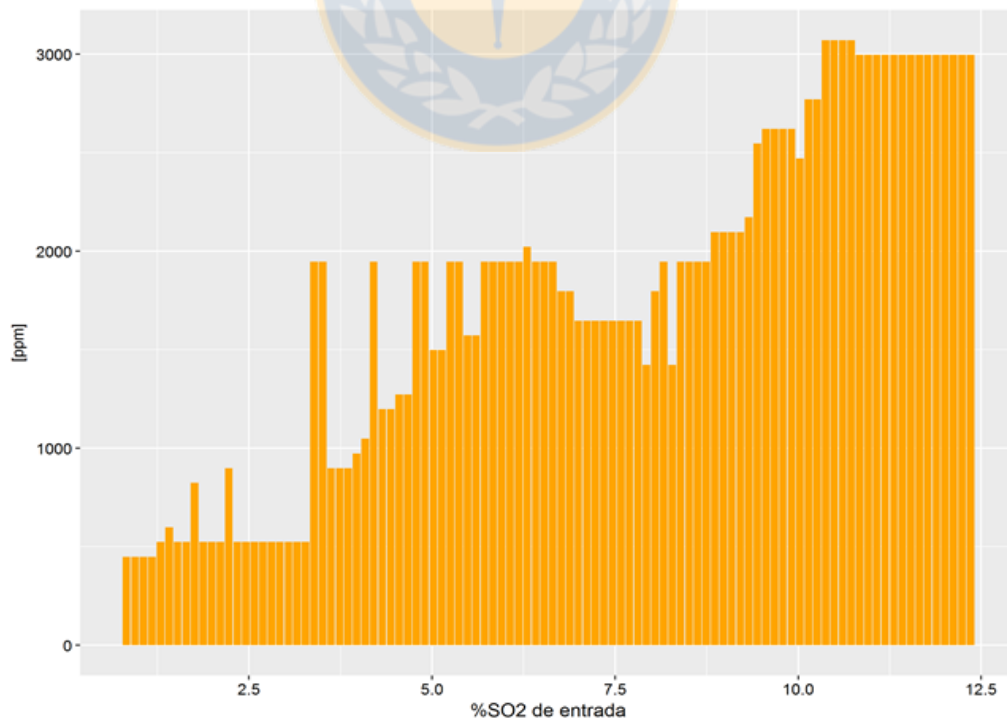


Figura 53 Efecto del %SO₂ de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 3, Set point=430, Valores promedios: flujo= 169669,2[Nm³/h]; Temperatura de entrada=428,38[°C].

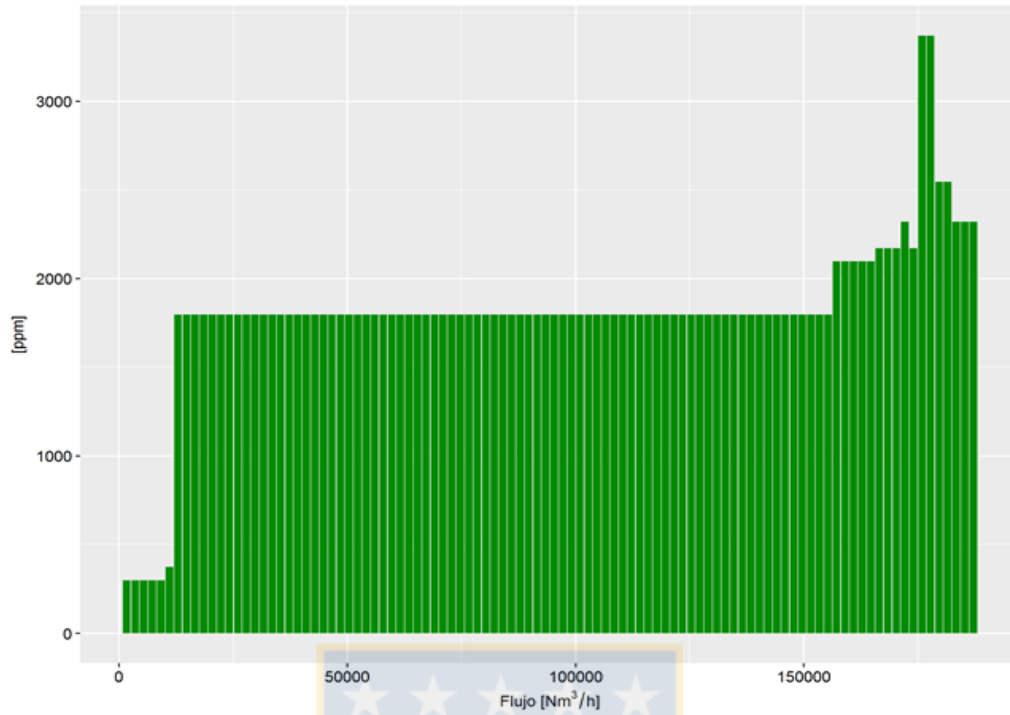


Figura 54 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 3, Set point=430, Valores promedio: % SO_2 de entrada=9,2%; Temperatura de entrada=428,38[°C].

$T^\circ=435$

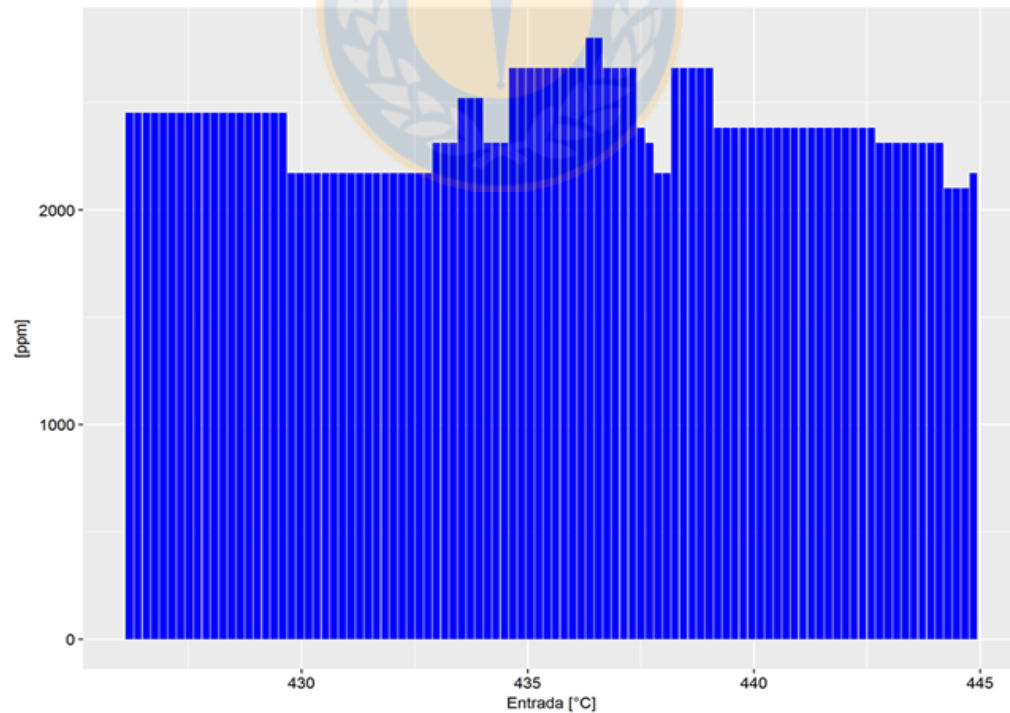


Figura 55 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 3, Set Point=435, Valores promedio: % SO_2 de entrada=9,2%; Flujo de entrada=172585,1[Nm³/h].

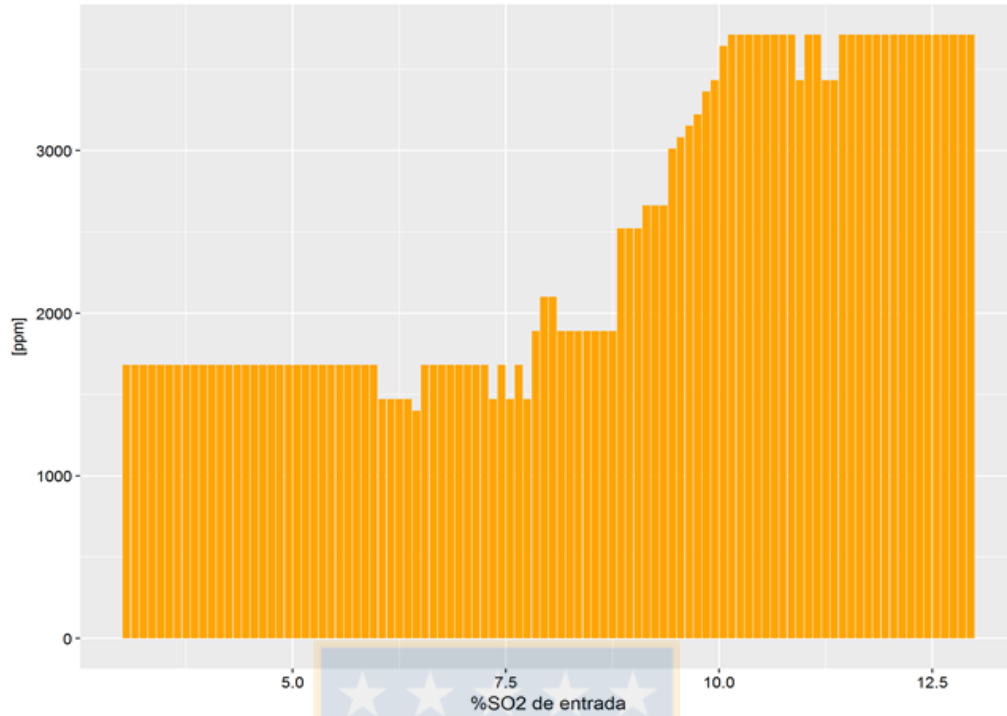


Figura 56 Efecto del %SO₂ de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 3, Set point=435, Valores promedios: flujo=172585,1[Nm³/h]; Temperatura de entrada=435,2 [°C].

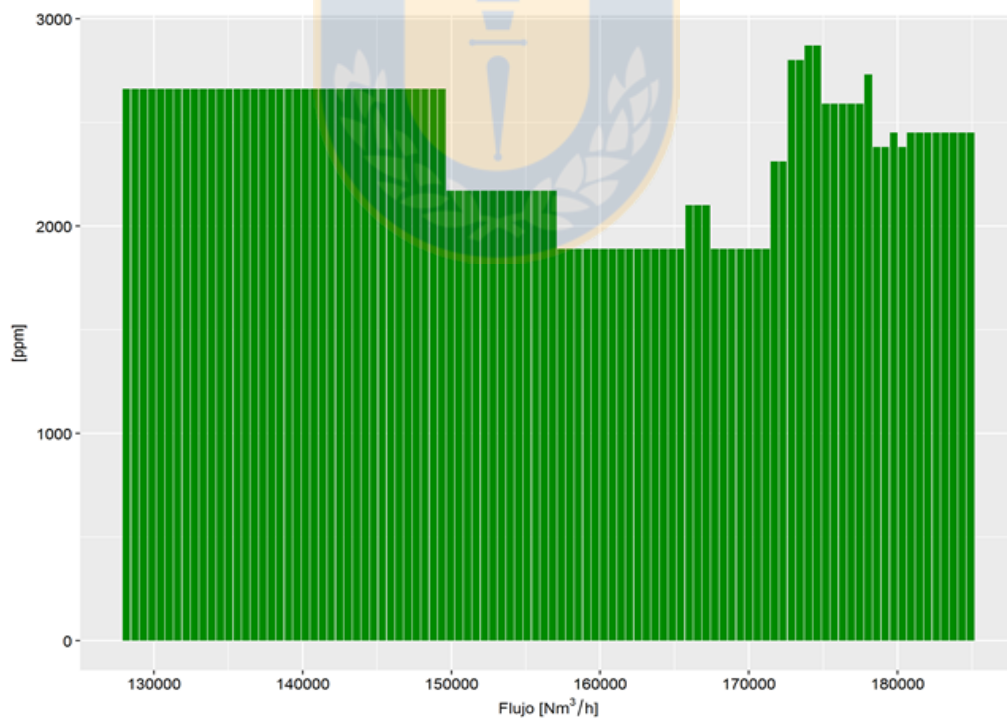


Figura 57 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 3, Set point=435, Valores promedio: %SO₂ de entrada=9,2%; Temperatura de entrada=435,2[°C].

$T^{\circ}=440$

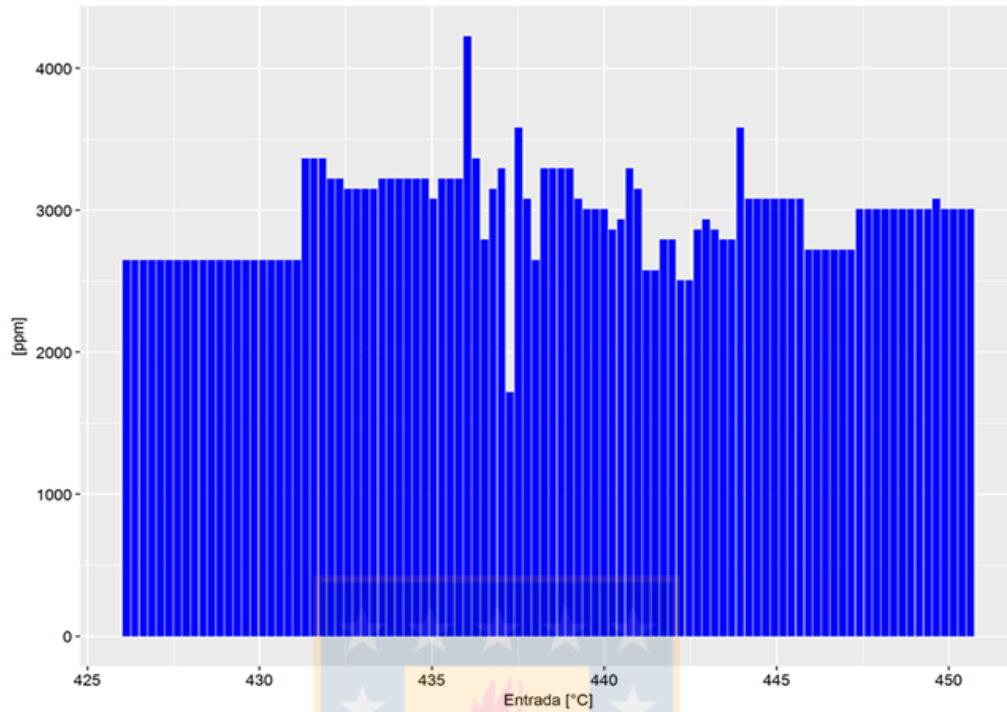


Figura 58 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 3, Set Point=440, Valores promedios: $\% \text{SO}_2$ de entrada=9,7%; Flujo de entrada=180499,7[Nm³/h].

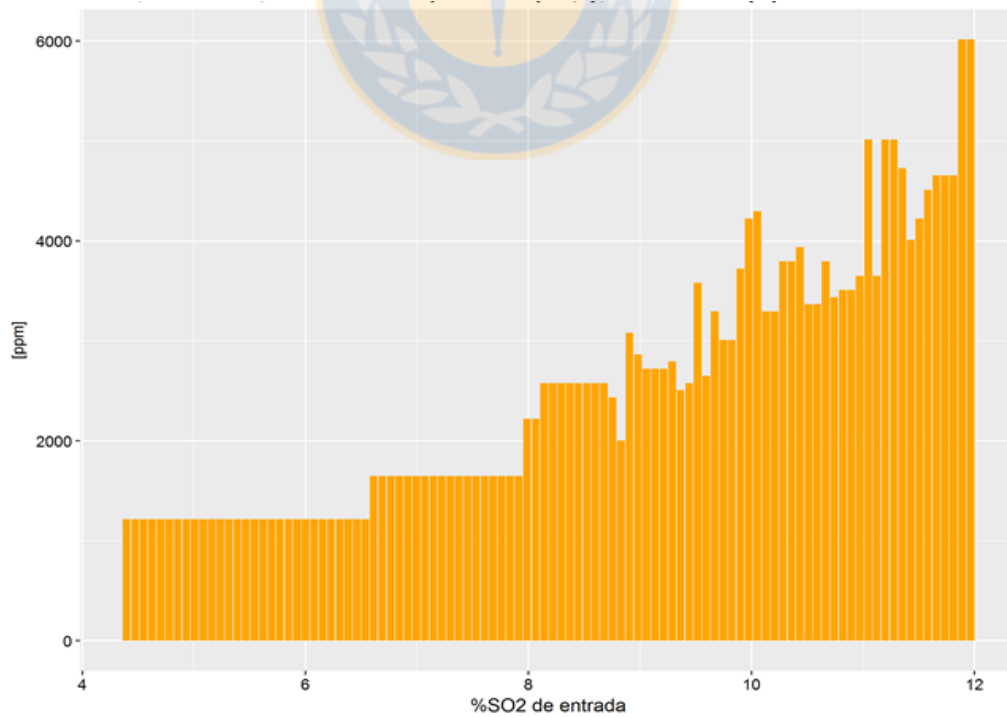


Figura 59 Efecto del $\% \text{SO}_2$ de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 3, Set point=440, Valores promedios: flujo=180499,7[Nm³/h]; Temperatura de entrada=439,83 [°C].

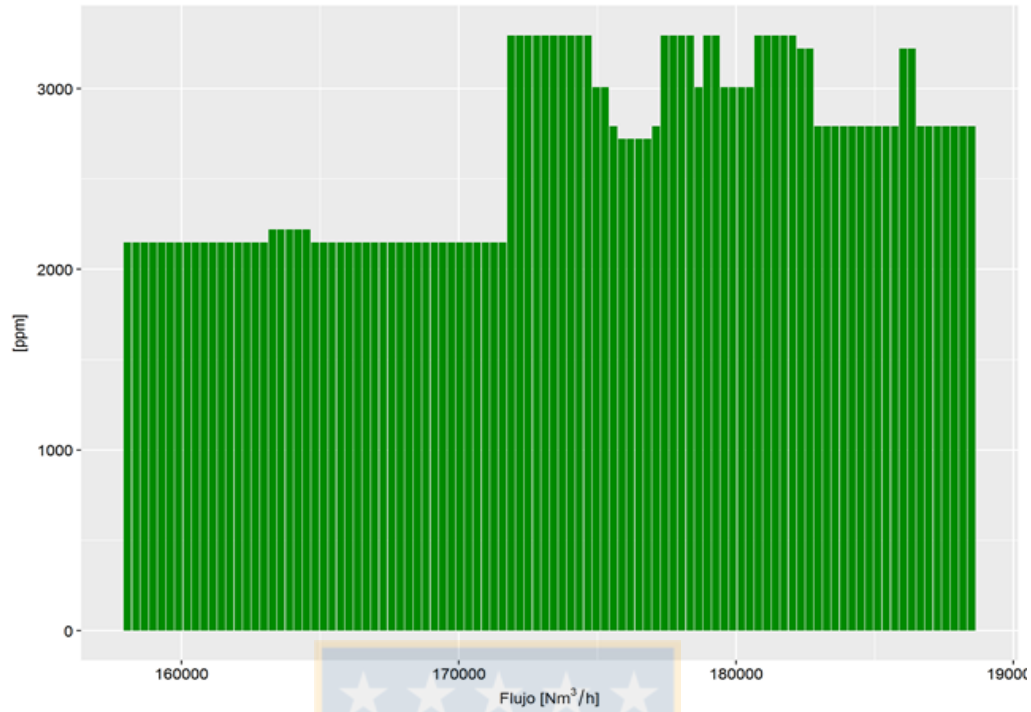


Figura 60 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 3, Set point=440, Valores promedio: %SO₂ de entrada=9,7%; Temperatura de entrada=439,83[°C].

Cama 2

$T^{\circ}=425[{}^{\circ}\text{C}]$

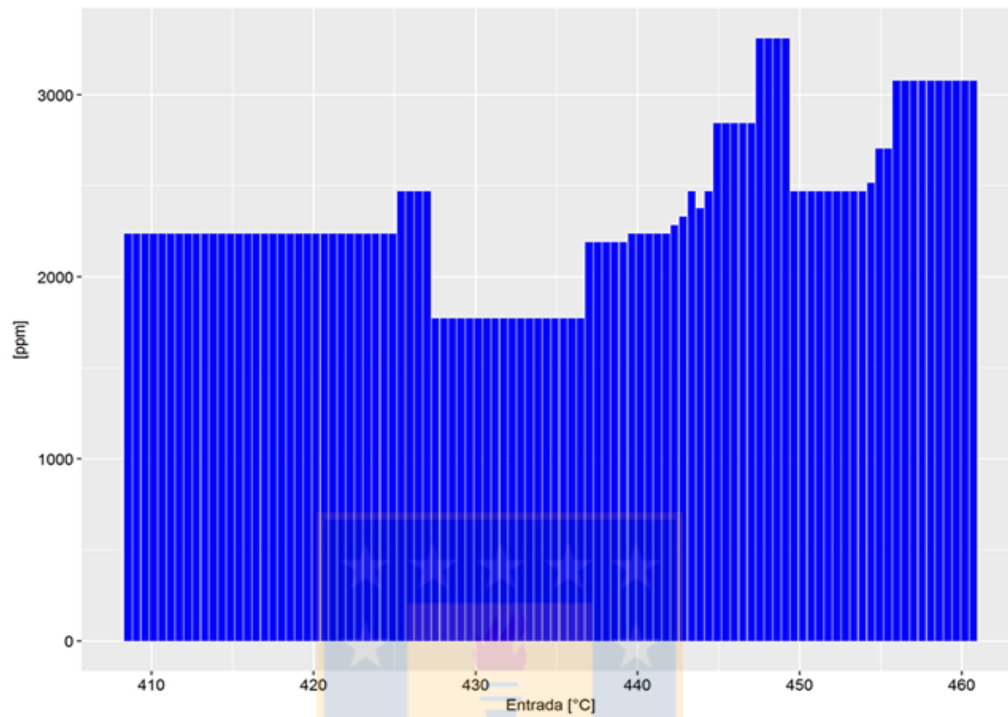


Figura 61 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 2, Set Point=425, Valores promedios: % SO_2 de entrada=9,55%; Flujo de entrada=175317[Nm^3/h].

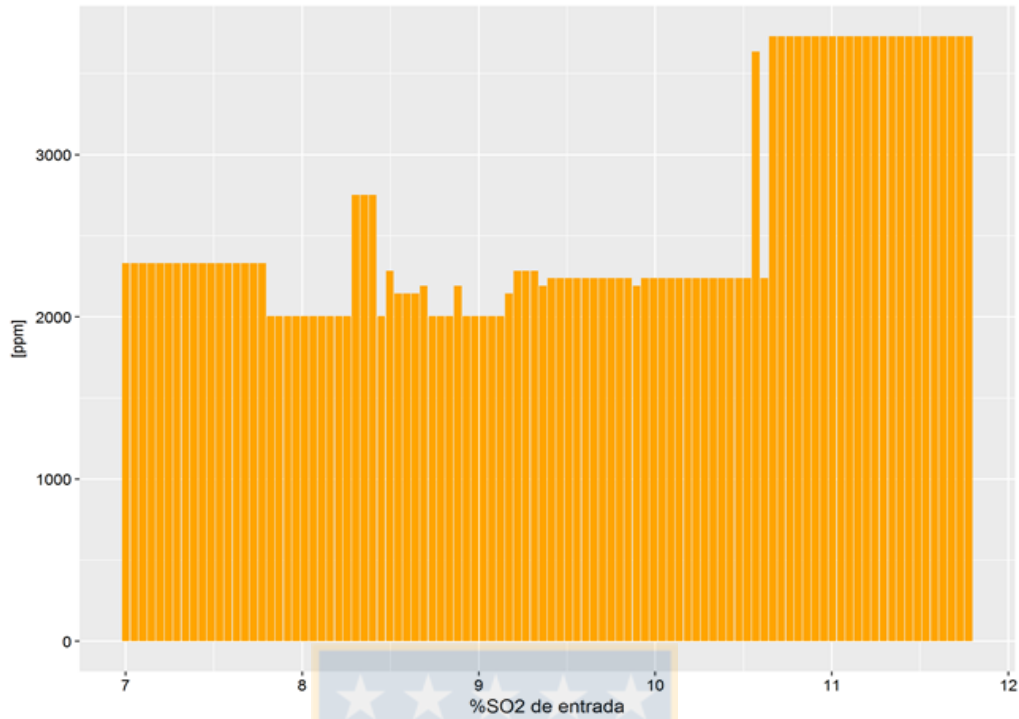


Figura 62 Efecto del %SO₂ de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 2, Set point=425, Valores promedios: flujo=175317[Nm³/h]; Temperatura de entrada=440,26 [°C].

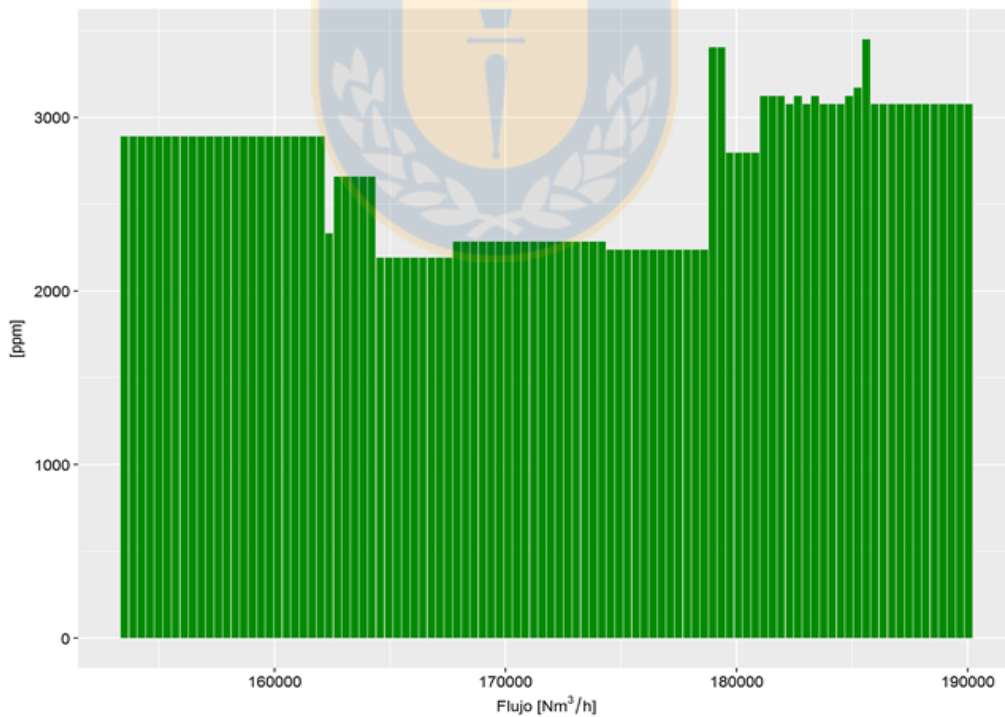


Figura 63 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 2, Set point=425, Valores promedio: %SO₂ de entrada=9,55%; Temperatura de entrada=440,26[°C].

$T^{\circ}=430$ [°C]

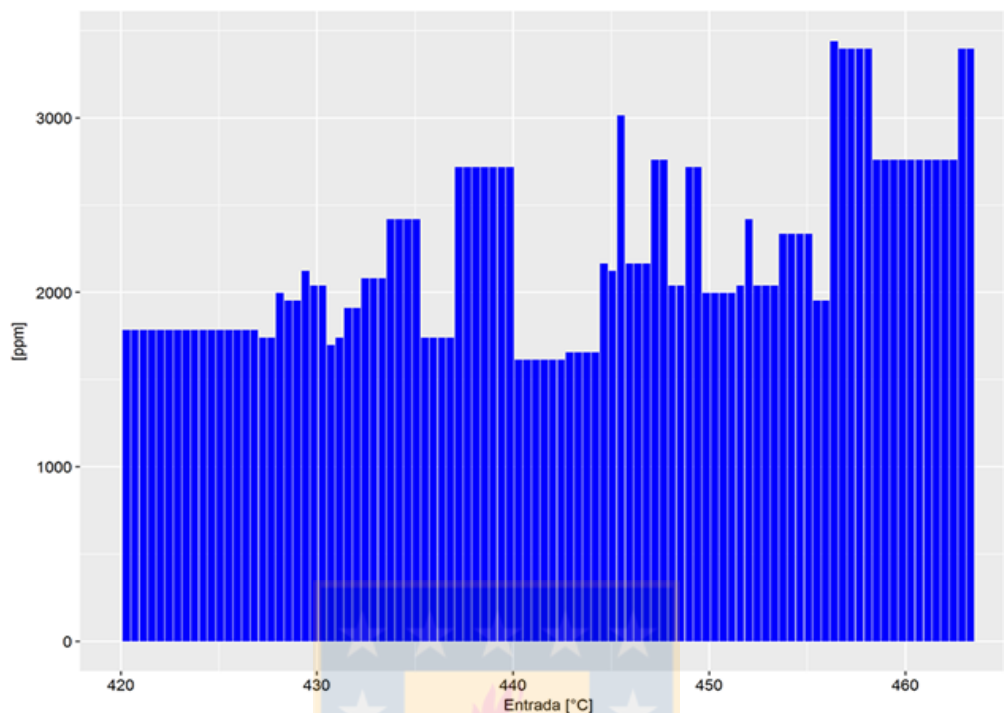


Figura 64 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 2, Set Point=430, Valores promedios: % SO_2 de entrada=9,1%; Flujo de entrada=176351,2 [Nm³/h].

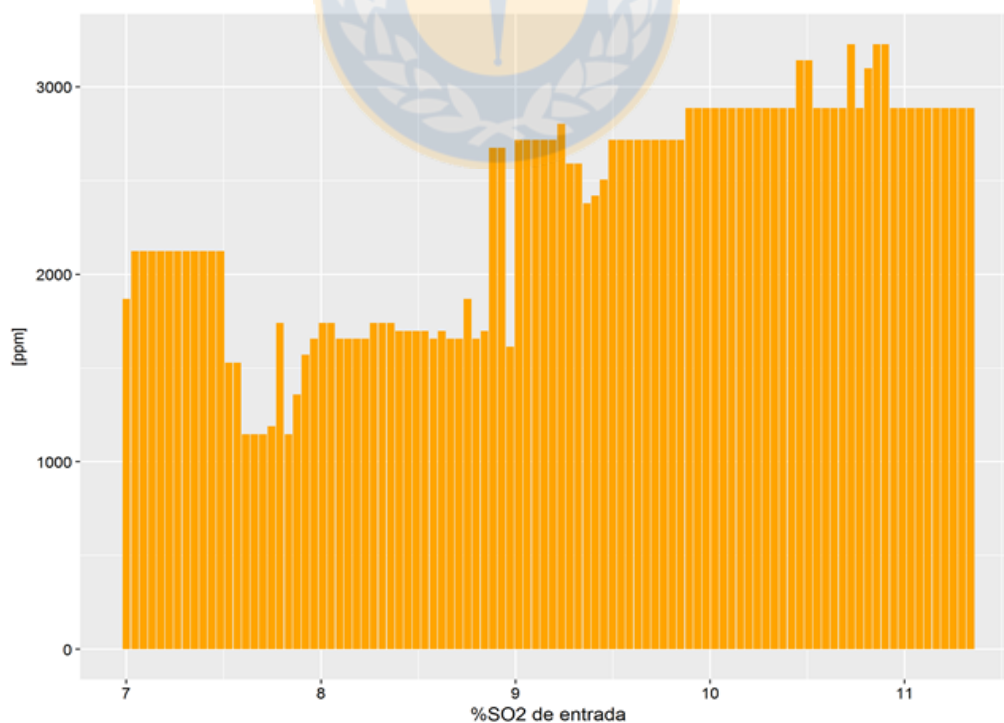


Figura 65 Efecto del % SO_2 de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 2, Set point=430, Valores promedios: flujo=176351,2[Nm³/h]; Temperatura de entrada=439,83 [°C].

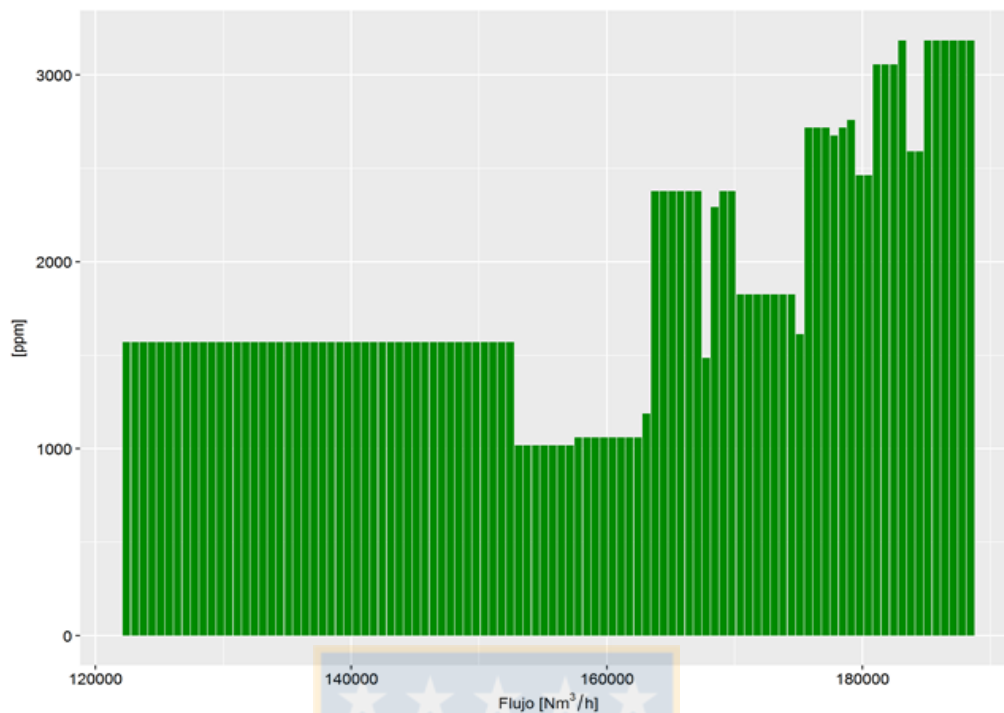


Figura 66 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 2, Set point=430, Valores promedio: % SO_2 de entrada=9,1%; Temperatura de entrada=449,83[°C].

$T^\circ=435$ [°C]

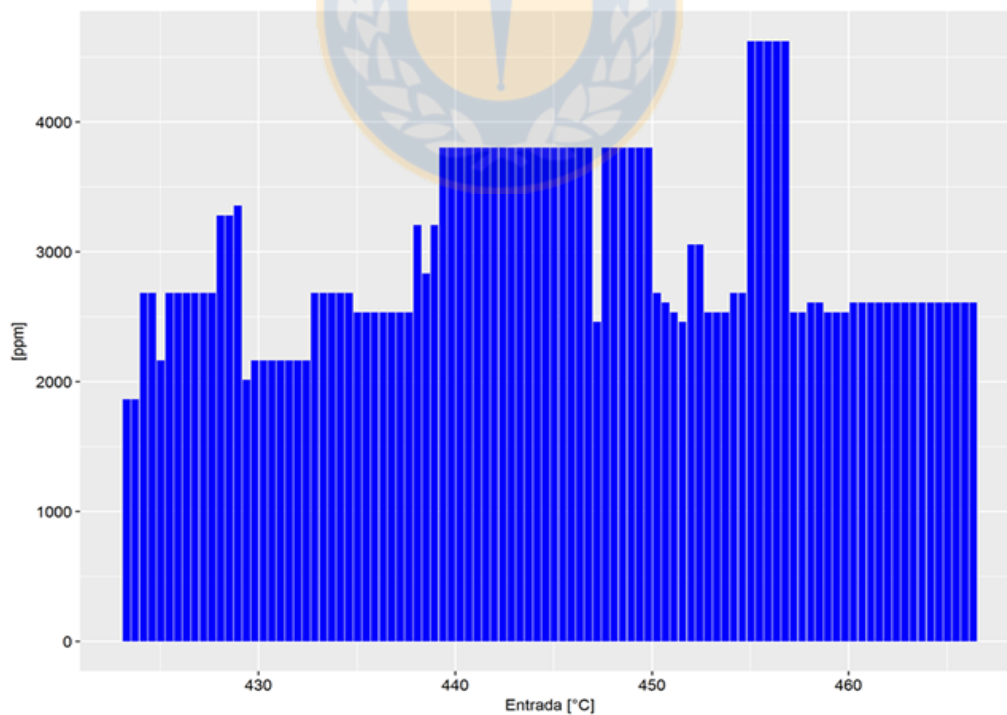


Figura 67 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 2, Set Point=435, Valores promedio: % SO_2 de entrada=9,8%; Flujo de entrada=174241,3[Nm^3/h].

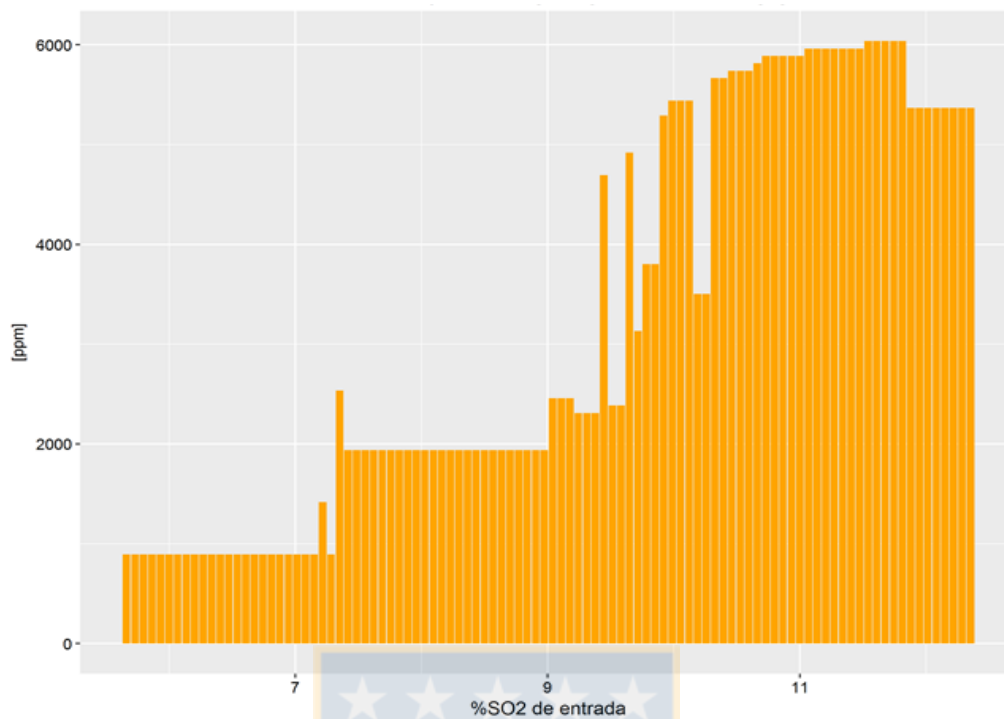


Figura 68 Efecto del %SO₂ de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. [%]. Cama 2, Set point=435, Valores promedios: flujo=174241,3[Nm³/h]; Temperatura de entrada=445,57[°C].

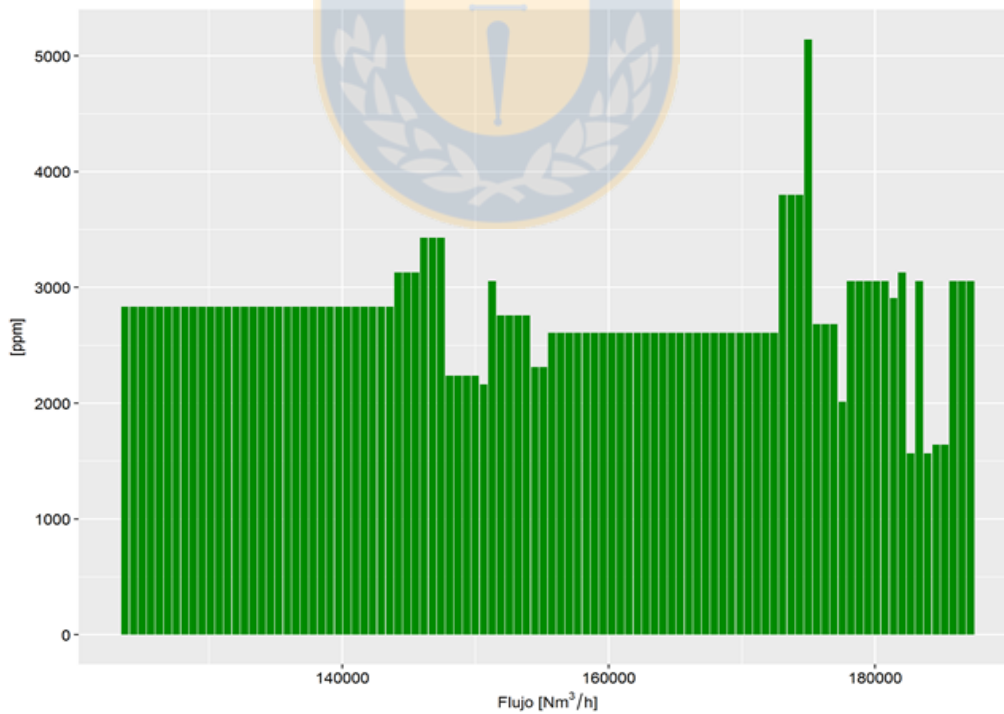


Figura 69 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 2, Set point=435, Valores promedio: %SO₂ de entrada=9,8%; Temperatura de entrada=445,57[°C].

Cama 1

$T^{\circ} = 415 [^{\circ}\text{C}]$

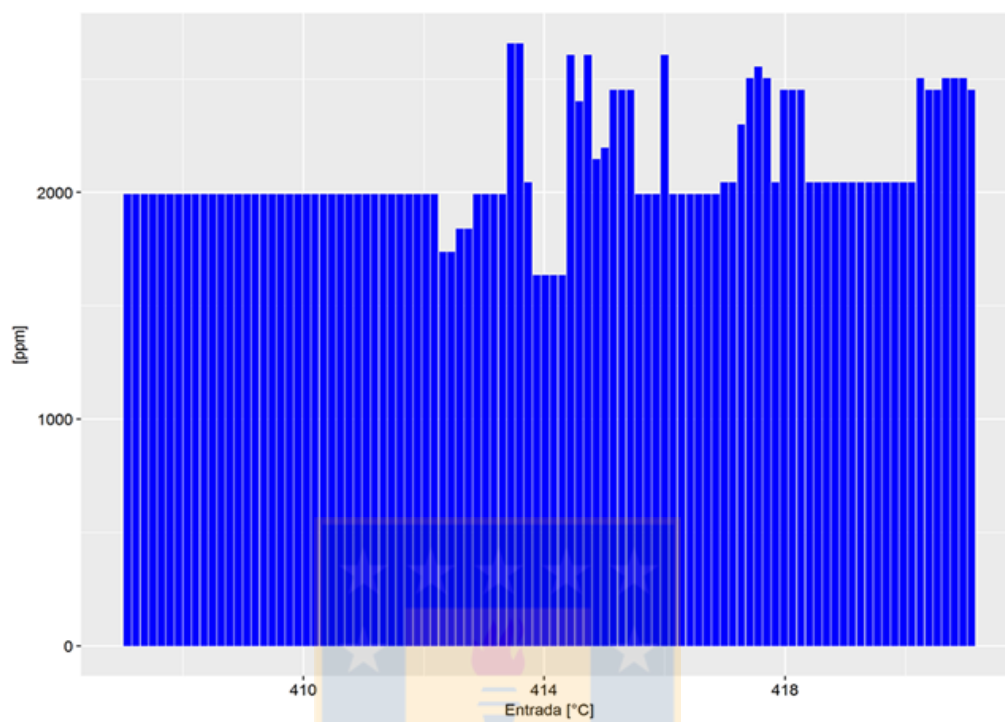


Figura 70 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 1, Set Point=415, Valores promedios: %SO₂ de entrada=8,7%; Flujo de entrada=176452,9 [Nm³/h].

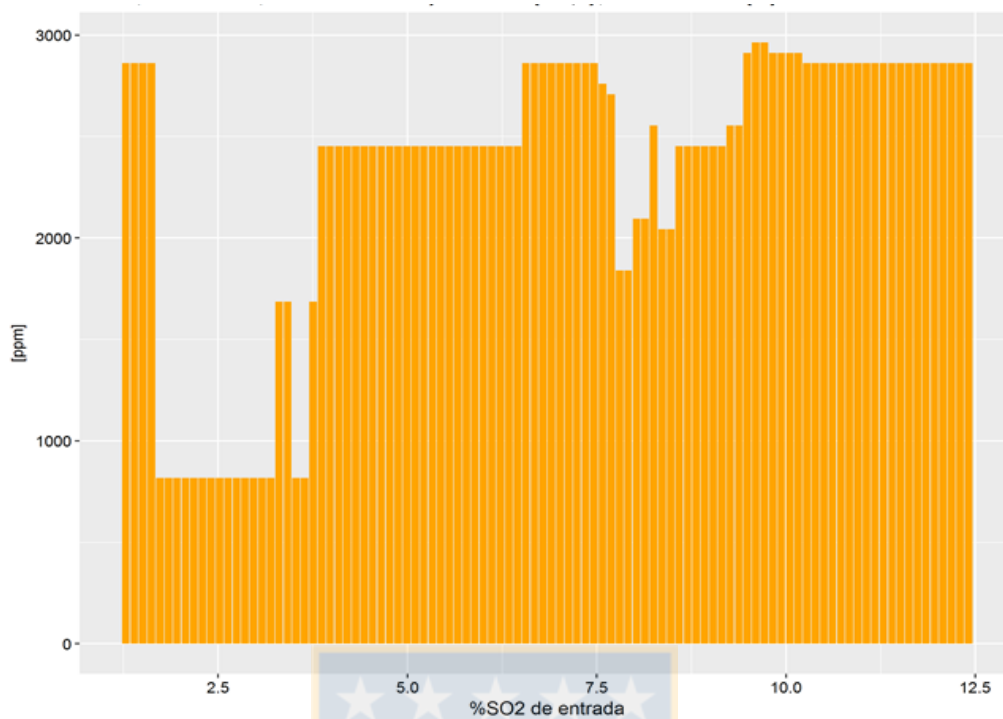


Figura 71 Efecto del %SO₂ de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 1, Set point=415, Valores promedios: flujo=176452,9 [Nm³/h]; Temperatura de entrada=415,18[°C].

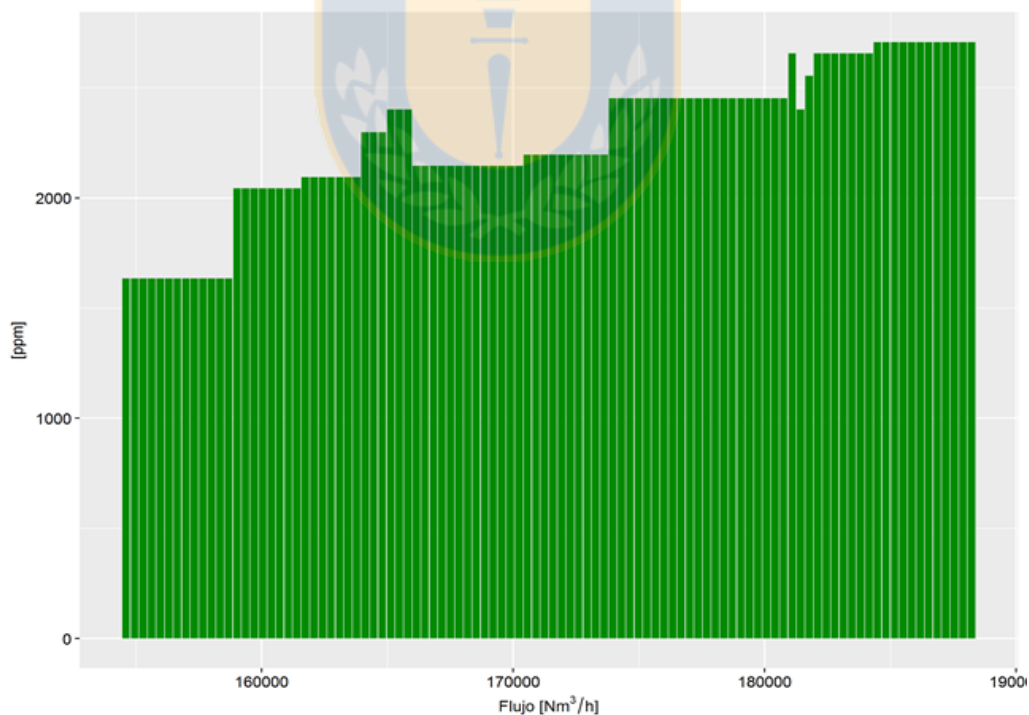


Figura 72 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 1, Set point=415, Valores promedio: %SO₂ de entrada=8,7%; Temperatura de entrada=415,18[°C].

$T^{\circ}=420[{}^{\circ}\text{C}]$

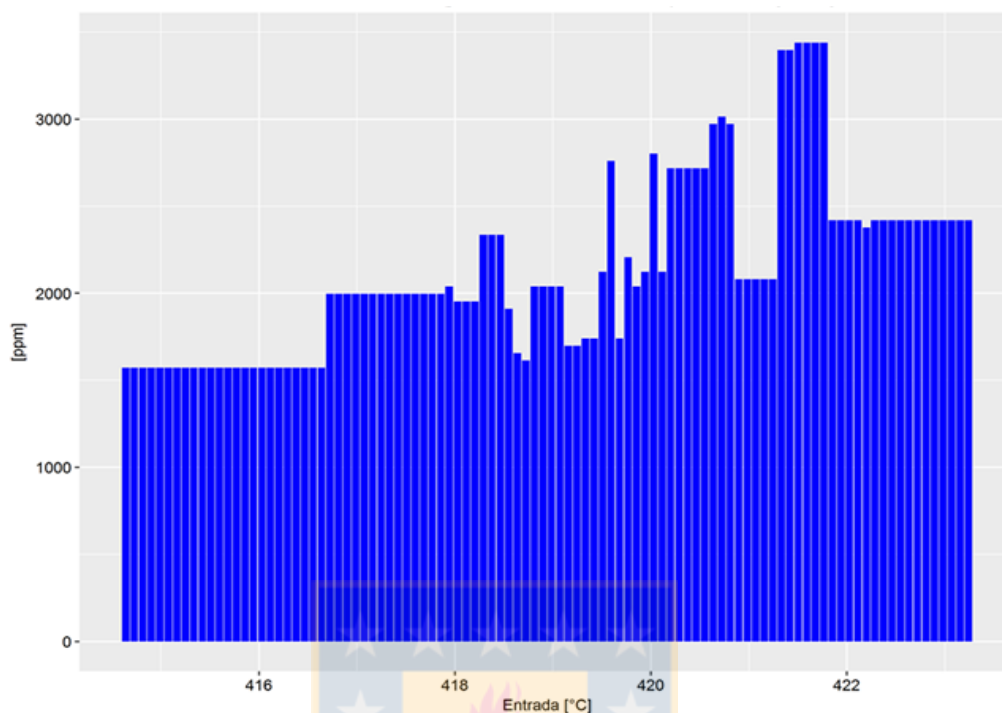


Figura 73 Efecto de la temperatura de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 1, Set Point=420, Valores promedio: $\% \text{SO}_2$ de entrada=9,1%; Flujo de entrada=176351,2 [Nm^3/h].

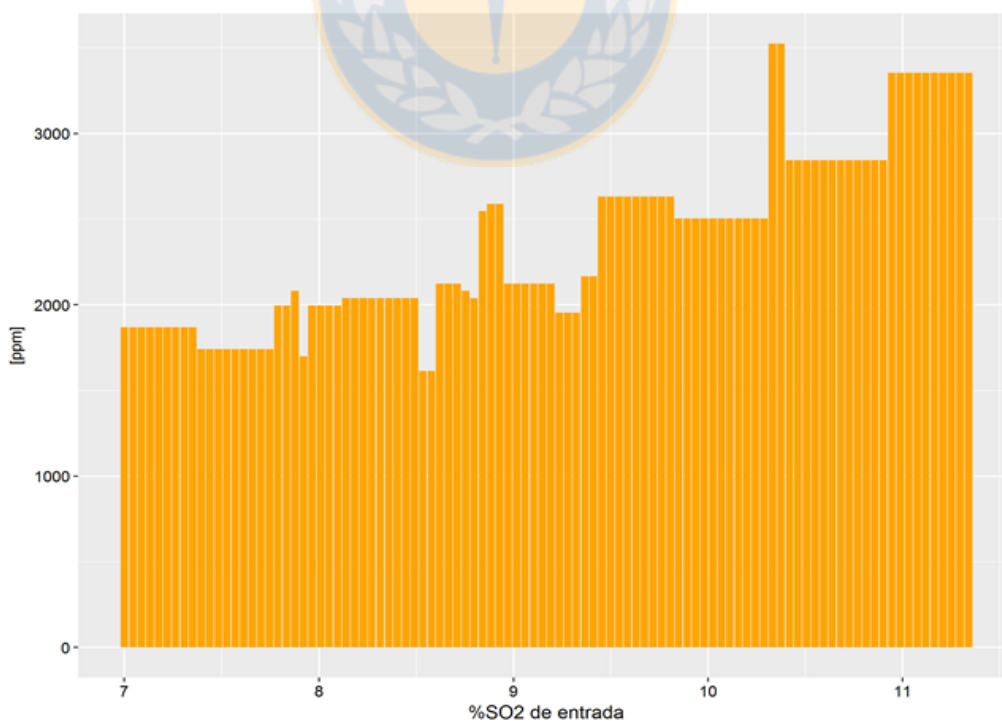


Figura 74 Efecto del $\% \text{SO}_2$ de entrada del gas en la concentración SO_2 emitida. Cama 1, Set point=420, Valores promedio: flujo=176351,2 [Nm^3/h]; Temperatura de entrada=419,98 [${}^{\circ}\text{C}$].

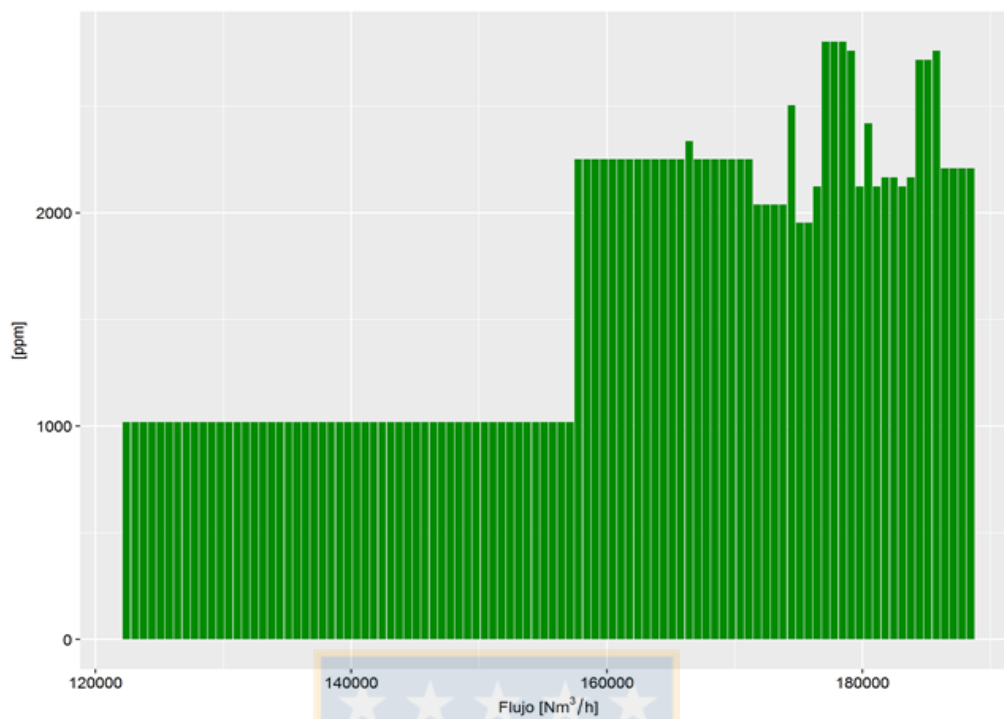


Figura 75 Efecto del flujo de entrada del gas en la concentración SO₂ emitida. Cama 1, Set point=420, Valores promedio: %SO₂ de entrada=9,1%; Temperatura de entrada=4159,98[°C].

Anexo D: Códigos R utilizados en las pruebas

Código R utilizado en cada uno de las pruebas, las temperaturas candidatas a set point varían según las posibilidades de cada lecho.

```
setwd("C:/Users/lelav/Desktop/cama 3")
```

```
#Funciones
```

```
#Crear "ncat" categorías para ppm
```

```
ppmcat <- function(ppm, ncat){
  diff <- (max(ppm) - min(ppm))/ncat
  category <- as.character(ppm%/%diff)
  return(list(category=category , diff = diff))
}
```

```
#Paquetes
```

```
if(require(randomForest)==F){install.packages("randomForest",dependencies=TRUE)
; library(randomForest) }else{library(randomForest)}
```

```
Resumen <- data.frame(SP = numeric() , SO2 = numeric() , Flujo = numeric() ,
Entrada = numeric() , Salida = numeric(),
```

```
          Acierto = numeric() )
```

```
set.point <- c("425","430","435","440")
```

```
m.cor <- list()
```

```
for(i in 1:length(set.point)){
```

```
  #Lectura de datos filtrados
```

```
  tabla <- read.csv(file = paste0(set.point[i],"_cama3.csv") , header = T , sep = ";" ,
  dec = "." )
```

```
  m.cor[[i]] <- cor(tabla[,1:4]) #Matriz de correlación
```

```
  nom.var <- c("X.SO2" , "Flujo" , "ENTRADA" , "ppm") #Variables numéricas
```

```
  num.cat <- 100 #Numero de categorías a considerar
```

```
  datos.bosque <- cbind(tabla[,nom.var] , ppm.cat = ppmcat(ppm = tabla$ppm , ncat
= num.cat)$category ) #Agregar la variable categórica de los ppm
```

```
  muestra <- sample(x = 1:dim(datos.bosque)[1] , size =
dim(datos.bosque)[1]%/(100/70)) #Muestra del 70% para entrenar
```

```
  tabla.test <- datos.bosque[-muestra,] #Tabla de testeo
```



```

tabla.train <- datos.bosque[muestra,] #Tabla de entrenamiento

#Entrenamiento

bosque <- randomForest(ppm.cat ~ X.SO2 + Flujo + ENTRADA , data = tabla.train ,
type = "class") #Modelo entrenado

prediccion <- predict(bosque , tabla.test , type = "class")

MC <- table(tabla.test$ppm.cat , prediccion) #Matriz de confusion

acierto <- (sum(diag(MC)))/sum(MC)

#Analizar los valores

medias <- apply(tabla[,nom.var], 2, mean)

media.ppm <- medias["ppm"]
media.SO2 <- medias["X.SO2"]
media.flujo <- medias["Flujo"]
media.salida <- medias["SALIDA"]
media.entrada <- medias["ENTRADA"]

par(mfrow=c(3,1))

#SO2 variable

sample.SO2 <- seq(from = min(tabla$X.SO2) , to = max(tabla$X.SO2) , length.out
= num.cat )

tabla.SO2 <- data.frame(X.SO2 = as.numeric(sample.SO2) , Flujo =
as.numeric(media.flujo) ,
                      ENTRADA = as.numeric(media.entrada) , SALIDA =
as.numeric(media.salida) ) #SO2 varía, todo lo demás constante

pred.SO2 <- predict(bosque , tabla.SO2 , type = "class") #Predicción variando SO2

barplot(as.numeric(as.character(pred.SO2))*ppmcat(ppm = tabla$ppm , ncat =
num.cat)$diff , main = "ppm vs %SO2" , ylim = c(0,4000), xlab = "%SO2" , ylab =
"ppm" , sub = set.point[i] )

prom.SO2 <- mean(as.numeric(as.character(pred.SO2))*ppmcat(ppm = tabla$ppm ,
ncat = num.cat)$diff)

# Flujo variable

sample.flujo <- seq(from = min(tabla$Flujo) , to = max(tabla$Flujo) , length.out =
num.cat )

```

```

tabla.flujo <- data.frame(X.SO2 = as.numeric(media.SO2) , Flujo =
as.numeric(sample.flujo) ,
                        ENTRADA = as.numeric(media.entrada) , SALIDA =
as.numeric(media.salida) ) #SO2 varía, todo lo demás constante

pred.flujo <- predict(bosque , tabla.flujo , type = "class") #Predicción variando Flujo

barplot(as.numeric(as.character(pred.flujo))*ppmcat(ppm = tabla$ppm , ncat =
num.cat)$diff , main = "ppm vs Flujo" , ylim = c(0,4000), xlab = "Flujo" , ylab =
"ppm" , sub = set.point[i] )

prom.flujo <- mean(as.numeric(as.character(pred.flujo))*ppmcat(ppm = tabla$ppm
, ncat = num.cat)$diff)

# ENTRADA variable

sample.entrada <- seq(from = min(tabla$ENTRADA) , to = max(tabla$ENTRADA) ,
length.out = num.cat )

tabla.entrada <- data.frame(X.SO2 = as.numeric(media.SO2) , Flujo =
as.numeric(media.flujo) ,
                        ENTRADA = as.numeric(sample.entrada) , SALIDA =
as.numeric(media.salida) ) #SO2 varía, todo lo demás constante

pred.entrada <- predict(bosque , tabla.entrada , type = "class") #Predicción
variando ENTRADA

barplot(as.numeric(as.character(pred.entrada))*ppmcat(ppm = tabla$ppm , ncat =
num.cat)$diff , main = "ppm vs ENTRADA" , ylim = c(0,4000), xlab = "ENTRADA" ,
ylab = "ppm" , sub = set.point[i])

prom.entrada <- mean(as.numeric(as.character(pred.entrada))*ppmcat(ppm =
tabla$ppm , ncat = num.cat)$diff)

# # SALIDA variable

# sample.salida <- seq(from = min(tabla$SALIDA) , to = max(tabla$SALIDA) ,
length.out = 100 )

# tabla.salida <- data.frame(X.SO2 = as.numeric(media.SO2) , Flujo =
as.numeric(media.flujo) ,

#                                ENTRADA = as.numeric(media.entrada) , SALIDA =
as.numeric(sample.salida) ) #SO2 varía, todo lo demás constante

# pred.salida <- predict(bosque , tabla.salida , type = "class") #Predicción variando
SALIDA

# barplot(as.numeric(as.character(pred.salida))*ppmcat(ppm = tabla$ppm , ncat =
num.cat)$diff , main = "ppm vs SALIDA" , ylim = c(0,4000), xlab = "SALIDA" , ylab =
"ppm" , sub = set.point[i])

```

```

prom.salida <- 0#mean(as.numeric(as.character(pred.salida))*ppmcat(ppm =
tabla$ppm , ncat = num.cat)$diff)

#Guardar el modelo de bosque entrenado

save(bosque , file = paste0("modelo2_",set.point[i],"_cama3.RData"))

Resumen <- rbind(Resumen, data.frame(SP = set.point[i] , SO2 = prom.SO2 , Flujo
= prom.flujo , Entrada = prom.entrada , Salida = prom.salida ,

                Acierto = acierto ))

}

Tabla.graficos <- as.matrix(Resumen[,2:4])
rownames(Tabla.graficos) <- Resumen[, "SP"]

barplot(Tabla.graficos , beside = T , col = 1:dim(Tabla.graficos)[1] , las = 2 , ylim =
c(0,4000) , main = "Promedio de ppm por variable y set point", sub = "simulación" ,
xlab = "variable" , ylab = "ppm")

legend("topleft" , legend = rownames(Tabla.graficos) , col = 1:dim(Tabla.graficos)[1]
, pch = 15)

barplot(t(Tabla.graficos) , beside = T , col = 1:dim(Tabla.graficos)[2] , ylim =
c(0,4000) , main = "Promedio de ppm por variable y set point" , sub = "simulación" ,
xlab = "set point" , ylab = "ppm")

legend("topleft" , legend = colnames(Tabla.graficos) , col = 1:dim(Tabla.graficos)[2] ,
pch = 15)

```