

## CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO

### INFORME CIENTÍFICO<sup>1</sup> PERÍODO<sup>2</sup>: 1º Enero/2012 – 31 Diciembre/2013

Legajo N°: 342017

#### 1. DATOS PERSONALES

Apellido: *BRESSA*

Nombres: *Sergio Patricio*

Dirección Particular: *Calle:*

Localidad: *La Plata CP: 1900* Tel:

Dirección electrónica (donde desea recibir información): *bressa@quimica.unlp.edu.ar*

#### 2. TEMAS DE INVESTIGACIÓN

MODELADO Y SIMULACIÓN MATEMÁTICA DE REACTORES QUÍMICOS MULTIFÁSICOS:  
APLICACIÓN AL HIDROREFINADO CATALÍTICO DE CORTES DE C<sub>4</sub>'S INSATURADOS

y

ESTUDIO DE AGENTES PRECIPITANTES DE FÓSFORO Y SU POSIBLE APLICACIÓN TECNOLÓGICA PARA LA  
MITIGACIÓN DE FLORECIMIENTOS CIANOBACTERIANOS Y RECUPERACIÓN DE CUERPOS DE AGUA EUTROFIZADOS

#### 3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA

Ingreso: *Categoría: Investigador Adjunto con Director desde 13-Julio/2006*

Actual: *Categoría: Investigador Adjunto desde 12-Diciembre/2012*

#### 4. INSTITUCIÓN DONDE DESARROLLA LA TAREA

Universidad y/o Centro: *Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas ( CINDECA )*

Facultad: *Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata*

Departamento: *Química*

Dirección: *Calle: 47 N° 257 entre 1 y 115*

Localidad: *La Plata CP: B1900AJK* Tel: *421 1353*

Otros: *Programa de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Reactores ( PROIRQ )*

Facultad: *Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata*

Departamento: *Departamento de Ingeniería Química*

Cargo que ocupa: *Investigador Adjunto y Profesor Adjunto con Dedicación Exclusiva*

#### 5. DIRECTOR DE TRABAJOS ( en el caso que corresponda )

.....  
Firma del Investigador

<sup>1</sup> Art. 11; Inc. "e" ; Ley 9688 (Carrera del Investigador Científico y Tecnológico).

<sup>2</sup> El informe deberá referenciar a años calendarios completos.

**6. EXPOSICIÓN SINTÉTICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERÍODO.** *Debe exponerse, en no más de una página, la orientación de los trabajos, técnicas y métodos empleados, principales resultados obtenidos y dificultades encontradas en el plano científico y material. Si corresponde, explicita la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.*

### **Investigación Cinética Experimental del Sistema de Hidrogenación Selectiva de un Corte de C<sub>4</sub>'s Insaturados**

Se realizó la investigación cinética experimental de la hidrogenación catalítica selectiva de 1-butino y 1,3-butadieno integrantes, como compuestos indeseables, de un refinado de C<sub>4</sub>'s insaturados rico en *n*-butenos.

Los objetivos fueron: el desarrollo de modelos mecanísticos del conjunto de las 10 reacciones globales serie-paralelo involucradas en el sistema de hidrorefinado bajo estudio • “ validar ” y “ discriminar ” las expresiones cinéticas, derivadas de las alternativas mecanísticas desarrolladas, mediante el análisis de regresión de datos experimentales propios, obtenidos en períodos previos, y el contraste estadístico de los modelos cinéticos.

En esta línea de investigación, la labor se centró en finalizar el análisis de resultados para las publicaciones que se detallan en el título siguiente.

### **Modelado y Simulación Matemática de Reactores Químicos Multifásicos**

Se avanzó en la revisión crítica de modelos de reactores de lecho fijo con flujo bifásico de gas y líquido y de las correlaciones, modelos y criterios propuestos en la literatura para predecir y caracterizar: la variación de presión • la proporción relativa de fases • las áreas interfaciales • la estructura de flujo • las condiciones críticas de fluidización • la influencia del fenómeno de dispersión axial. En principio, la revisión se enfocó sobre sistemas con flujo bifásico en co-corriente ascendente.

Al presente se están analizando 80 correlaciones, criterios y formulaciones en general. La conclusión consolidada al presente es que la dispersión de las predicciones de las correlaciones publicadas es significativa, y en algunos casos desconcertante. Descripciones experimentales incompletas y análisis estadísticos ausentes cierran una conclusión negativa respecto de la confiabilidad del uso de las herramientas predictivas publicadas, de extender su aplicación a una diversidad de sistemas y de sus posibilidades de dar realidad a la tarea de simulación proyectada.

Esta conclusión motivó el objetivo de desarrollar una herramienta estadística para juzgar la confiabilidad, y por lo tanto la utilidad, de las formulaciones predictivas y la significación estadística de las diferencias entre ellas.

La herramienta ideada consiste en construir polinomios en las variables independientes como modelos para la regresión de los datos experimentales. La hipótesis residente es que para un determinado orden del polinomio se obtendría una matriz de residuos gaussianas representante de la matriz de errores experimentales “ puros ”.

Se decidió desarrollar esta idea empleando, en principio, datos experimentales publicados sobre retención de fases en los reactores objeto de estudio.

Avanzando en el objetivo declarado se sucedieron las siguientes tareas: se colectaron 517 datos experimentales de retención de fases de 15 fuentes diferentes • mediante gráficos de diagnóstico se redujo la base de datos a un conjunto seleccionado de 398 datos experimentales • se construyeron los polinomios de simulación de errores y se emplearon como modelos para la regresión de los datos experimentales de cada fuente individual por separado • se verificó que, para cada base de datos correspondiente a una única fuente existe un orden del polinomio para el cual la distribución de residuos satisface criterios de “ normalidad ” y puede aceptarse como representación del error experimental “ puro ”.

### **Ensayos para Evaluar el Comportamiento Mecánico Durable de Muestras de Hormigón**

Se colaboró con la Unidad de Investigación y Desarrollo en Ingeniería Civil de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata en un Servicio Técnico solicitado por la empresa Skanska S. A.

El servicio consistió en caracterizar muestras de hormigón mediante ensayos de: penetración de agua a presión • absorción de agua • resistencia a la compresión • determinación del contenido de cemento • penetración de cloruros • reactividad alcalina • determinación de la densidad.

### **Estudio de Agentes Precipitantes de Fósforo y su Posible Aplicación Tecnológica para la Mitigación de Florecimientos Cianobacterianos y Recuperación de Cuerpos de Agua Eutrofizados**

Este estudio constituye el tema de Tesis Doctoral que se realiza en el marco de una Beca de Estudio, en la cual me desempeño como co-director, otorgada por la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires.

El objetivo es desarrollar tecnologías para la disminución del contenido de fósforo en sistemas lacustres bonaerenses para minimizar la presencia de florecimientos algales nocivos.

Al presente esta tarea se encuentra en la etapa de revisión bibliográfica y experiencias preliminares.

Las experiencias preliminares consistieron en evaluar el desempeño del cloruro férrico como agente precipitante de fósforo disuelto como anión fosfato en soluciones sintetizadas en laboratorio. Al presente se exploraron las siguientes variables: pH, dosis de cloruro férrico, cantidad inicial de fosfato y relación entre la dosis de agente precipitante y fosfato. Los ensayos preliminares también se orientaron a la definición del protocolo experimental.

**7. TRABAJOS DE INVESTIGACIÓN REALIZADOS O PUBLICADOS EN ESTE PERÍODO.** Debe hacer referencia exclusivamente a aquellas publicaciones en las que haya hecho explícita mención de su calidad de Investigador de la CIC ( ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc. ). Toda publicación donde no figure dicha mención no debe ser adjuntada porque no será tomada en consideración. A cada publicación, asignarle un número e indicar el nombre de los autores en el mismo orden que figuran en ella, lugar donde fue publicada, volumen, página y año. A continuación, transcribir el resumen ( abstract ) tal como aparece en la publicación. La copia en papel de cada publicación se presentará por separado. Para cada publicación, el investigador deberá, además, aclarar el tipo o grado de participación que le cupo en el desarrollo del trabajo y, para aquellas en las que considere que ha hecho una contribución de importancia, deberá escribir una breve justificación.

## 7.1 Publicaciones

*En revistas internacionales periódicas arbitradas*

### 7.1.1

Título: “ *Kinetic Study of the Selective Catalytic Hydrogenation of 1,3-Butadiene in a Mixture of Butenes* ”

Autores: Javier A. Alves, Sergio P. Bressa, Osvaldo M. Martínez y Guillermo F. Barreto

Revista: Journal of Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 18, N°4, 1335–1365 ( 2012 )

ISSN: 1226-086X

Homepage: [www.elsevier.com/locate/jiec](http://www.elsevier.com/locate/jiec)

#### ABSTRACT

The selective hydrogenation in liquid phase of 1,3-butadiene in the presence of *n*-butenes, over a commercial Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst of the egg-shell type was studied.

Experiments were carried out in a batch reactor at 44 °C. Initial concentration were in the range of 1%–2% of 1,3-butadiene, up to 10% of 1-butene, *trans*-2-butene and *cis*-2-butene. Partial hydrogen pressures ( $p_{H_2}$ ) were between 1 and 8 atm.

Two kinetic models were proposed to fit the experimental data. Both models give an adequate representation of the experimental data.

© 2012 The Korean Society of Industrial and Engineering Chemistry. Published by Elsevier B.V. All rights reserved.

Mis contribución para la realización de esta publicación involucró las siguientes tareas: participación en los ensayos experimentales • revisión bibliográfica • modelado mecanístico y cinético • codificación computacional de los algoritmos numéricos • discusión de resultados.

### 7.1.2

Título: “ *Kinetic Evaluation of the Set of Reactions in the Selective Hydrogenation of 1-Butyne and 1,3-Butadiene in Presence of n-Butenes* ”

Autores: Javier A. Alves, Sergio P. Bressa, Osvaldo M. Martínez y Guillermo F. Barreto

Revista: Industrial & Engineering Chemistry Research, Vol. 52, N°17, 5849–5861 ( 2013 )

ISSN: 0263-8762

Homepage: [www.journals.elsevier.com/chemical-engineering-research-and-design](http://www.journals.elsevier.com/chemical-engineering-research-and-design)

**ABSTRACT:** The selective hydrogenation in the liquid phase of 1-butyne and 1,3-butadiene in the presence of *n*-butenes over a commercial Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> egg-shell catalyst has been studied. Although hydrogenation of the *n*-butenes and their isomerization are normally undesirable, kinetics of these reactions should also be evaluated in order to carry out the process at efficient operating conditions. Here, the effect of temperature, in the range 25–65 °C, on the specific rate coefficients of 1,3-butadiene hydrogenation reactions and 1-butene, *cis*-2-butene, and *trans*-2-butene hydrogenation and isomerization reactions was evaluated from measurements in a batch reactor system. Further experiments were conducted for the evaluation of selectivity between 1-butyne and 1,3-butadiene hydrogenations at 44 °C. The present results and previous kinetic characterization allow evaluating the most relevant parameters of a set of kinetic expressions for the 10 overall reactions that govern the system transformation.

Mis contribución esencial para la realización de esta publicación involucró las siguientes tareas: colaboración en la obtención de los datos experimentales • revisión bibliográfica • modelado mecanístico y cinético • codificación de los programas para el análisis de los datos experimentales • discusión de resultados.

## 7.2 Trabajos en prensa y/o aceptados para su publicación

### 7.3 Trabajos enviados y aún no aceptados para su publicación

### 7.4 Trabajos terminados y aún no enviados para su publicación

### 7.5 Comunicaciones

**7.6 Informes y Memorias Técnicas.** *Incluir un listado y acompañar copia en papel de cada uno o referencia de la labor y del lugar de consulta cuando corresponda.*

#### 7.6.1.

Título: “ *Ensayos para Evaluar el Comportamiento Mecánico Durable de Muestras de Hormigón* ”

Autores: Colaboración con el personal de la Unidad de Investigación y Desarrollo en Ingeniería Civil de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata

Comitente: Informe Técnico transferido a Skanska S. A. ( 2013 )

Mis contribución esencial en este servicio se centró en los ensayos para evaluar la penetración de Cl<sup>-</sup> en el hormigón. Las tareas fueron: la discusión de resultados • la codificación de los programas de regresión • la realización del análisis de regresión de los datos experimentales.

## 8. TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍA

**8.1 Desarrollos tecnológicos.** *Describir la naturaleza de la innovación o mejora alcanzada, si se trata de una innovación a nivel regional, nacional o internacional, con qué financiamiento se ha realizado, su utilización potencial o actual por parte de empresas u otras entidades, incidencia en el mercado y niveles de facturación del respectivo producto o servicio y toda otra información conducente a demostrar la relevancia de la tecnología desarrollada.*

**8.2 Patentes o equivalentes.** *Indicar los datos del registro, si han sido vendidos o licenciados los derechos y todo otro dato que permita evaluar su relevancia.*

**8.3 Proyectos potencialmente transferibles, no concluidos y que están en desarrollo.** *Describir objetivos perseguidos, breve reseña de la labor realizada y grado de avance. Detallar instituciones, empresas y/o organismos solicitantes.*

**8.4 Otras actividades tecnológicas cuyos resultados no sean transferibles** ( *desarrollo de equipamientos, montajes de laboratorios, etc.* )

**8.5** Sugiera nombres ( e informe las direcciones ) de las personas de la actividad privada y/o pública que conocen su trabajo y que pueden opinar sobre la relevancia y el impacto económico y/o social de la/s tecnología/s desarrollada/s.

**9. SERVICIOS TECNOLÓGICOS.** *Indicar qué tipo de servicios ha realizado, el grado de complejidad de los mismos, qué porcentaje aproximado de su tiempo le demandan y los montos de facturación.*

## 10. PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN:

### 10.1 Docencia

### 10.2 Divulgación

**11. DIRECCIÓN DE BECARIOS Y/O INVESTIGADORES.** *Indicar nombres de los dirigidos, Instituciones de dependencia, temas de investigación y períodos.*

Becario: Santiago Elisio

Beca: Beca de Estudio de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires  
 Lugar de trabajo: Laboratorio del Programa Ambiental de Extensión Universitaria ( PAEU ) de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata  
 Tema: Estudio de agentes precipitantes de fósforo y su posible aplicación tecnológica para la mitigación de florecimientos cianobacterianos y recuperación de cuerpos de agua eutrofizados  
 Período: 2013 – Presente

**12. DIRECCIÓN DE TESIS.** *Indicar nombres de los dirigidos y temas desarrollados y aclarar si las tesis son de maestría o de doctorado y si están en ejecución o han sido defendidas; en este último caso citar fecha.*

Tesista: Santiago Elisio  
 Tema de tesis: Estudio de agentes precipitantes de fósforo y su posible aplicación tecnológica para la mitigación de florecimientos cianobacterianos y recuperación de cuerpos de agua eutrofizados  
 Grado académico: Doctor  
 Institución: Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata  
 Lugar de trabajo: Laboratorio del Programa Ambiental de Extensión Universitaria ( PAEU ) de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata  
 Período: En ejecución

**13. PARTICIPACIÓN EN REUNIONES CIENTÍFICAS.** *Indicar la denominación, lugar y fecha de realización, tipo de participación que le cupo, títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas y autores de los mismos.*

**14. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC.** *Señalar características del curso o motivo del viaje, período, instituciones visitadas, etc.*

“ *Caracterización Textural de Sólidos Mediante Adsorción de Gases* ”.  
 Curso de Perfeccionamiento dictado en el Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata, 11 – 15 marzo de 2013.  
 Docente: Dr. K. Sapag. Profesor de la Universidad Nacional de San Luis - Argentina.  
 Duración: 30 horas.  
 Nota: Aprobado.

**15. SUBSIDIOS RECIBIDOS EN EL PERÍODO.** *Indicar institución otorgante, fines de los mismos y montos recibidos.*

- *Subsidio Institucional para Miembros de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico*, otorgado por la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires ( 2012, 2013 ).

**16. OTRAS FUENTES DE FINANCIAMIENTO.** *Describir la naturaleza de los contratos con empresas y/o organismos públicos.*

Otras fuentes de financiamiento de las tareas de investigación realizadas en el período que se informa, fueron los proyectos que se mencionan a continuación.

- “ *Análisis y Simulación de Reactores Catalíticos* ”; Proyecto 11/I136 acreditado ante la Universidad Nacional de La Plata;
- “ *Análisis y Simulación de Reactores Catalíticos* ”, PIP’ 11220090100304 CONICET.

**17. DISTINCIONES O PREMIOS RECIBIDOS EN EL PERÍODO.** *Indicar Institución otorgante, fines los mismos y montos recibidos.*

**18. ACTUACIÓN EN ORGANISMOS DE PLANEAMIENTO, PROMOCIÓN O EJECUCIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA.** *Indicar las principales gestiones realizadas durante el período y porcentaje aproximado de su tiempo que ha utilizado.*

Durante el período que se informa actué como miembro del Consejo Directivo del Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas, CINDECA, dependiente de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata y del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CONICET. Esta tarea requiere la eventual presencia en reuniones mensuales.

**19. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERÍODO.** *Indicar el porcentaje aproximado de su tiempo que le han demandado.*

Durante el período que se informa desempeñé el cargo de Profesor Adjunto Ordinario con Dedicación Exclusiva en el Área Ingeniería de las Reacciones Químicas del Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata. Las obligaciones del cargo se cumplieron en las Asignaturas del Área: Ingeniería de las Reacciones Químicas I, durante el primer cuatrimestre, e Ingeniería de las Reacciones Químicas II, durante el segundo cuatrimestre.

En adición, se colaboró en la Asignatura Laboratorio de Ingeniería Química del Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata. Mi participación consistió colaborar con realización de las experiencias correspondientes al Área Ingeniería de las Reacciones Químicas.

Las tareas docentes descriptas involucran una dedicación aproximada de 9 horas semanales.

**20. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TÍTULOS ANTERIORES.** *Bajo este punto se indicará todo lo que se considere de interés para la evaluación de la tarea cumplida en el período.*

**21. TÍTULO Y PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PRÓXIMO PERÍODO.** *Desarrollar en no más de 3 páginas. Si corresponde, explicita la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.*

### **Título del Plan de Trabajo**

El presente Plan de Trabajo involucra las siguientes dos líneas de investigación:

**SIMULACIÓN MATEMÁTICA DE REACTORES QUÍMICOS INDUSTRIALES DE LECHO FIJO CON FLUJO BIFÁSICO DE GAS Y LÍQUIDO**

y

**ESTUDIO DE AGENTES PRECIPITANTES DE FÓSFORO Y SU POSIBLE APLICACION TECNOLÓGICA PARA LA MITIGACIÓN DE FLORECIMIENTOS CIANOBACTERIANOS Y RECUPERACIÓN DE CUERPOS DE AGUA EUTROFIZADOS**

La primer línea de investigación da continuidad a Planes de Trabajo previamente propuestos y aceptados. La segunda línea de investigación involucra mi participación como co-director en una Beca de Estudio otorgada por la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires en el año 2013.

### **SIMULACIÓN MATEMÁTICA DE REACTORES QUÍMICOS INDUSTRIALES DE LECHO FIJO CON FLUJO BIFÁSICO DE GAS Y LÍQUIDO**

#### **Información y relevancia tecnológica**

La difusión tecnológica de los reactores químicos multifásicos se extiende desde la industria de commodities hasta la industria de la “ química fina ”. Los propósitos tecnológicos son de producción, de purificación y ambientales. Los reactores multifásicos han probado ser una opción conveniente para realizar reacciones de acilación, aminación, carbonilación, hidroformilación, halogenación, hidrogenación, hidrodesulfurización, hidroxilación, isomerización, nitración, oxidación y ozonólisis<sup>[1,2]</sup>.

#### **Definición del objeto de estudio**

La performance de los reactores multifásicos es el resultado de la compleja interacción entre las reacciones químicas, la fluidodinámica, el equilibrio de fases y los fenómenos de transporte de materia y transferencia de energía<sup>[3]</sup>. En su marco de trabajo más amplio, el modelado de estos sistemas involucra la formulación de los balances de materia, de energía y de cantidad de movimiento para cada fase<sup>[3]</sup>.

Independientemente de las especificidades de cada reactor multifásico en particular, la tarea de modelado requiere definir cualitativamente y evaluar cuantitativamente características presentes en la mayoría de las aplicaciones industriales de los reactores multifásico. Estas características son: la retención de fases • el modelo de flujo • la estructura de flujo • las áreas interfaciales • la pérdida de carga • los coeficientes de transporte de materia y de transferencia de energía entre fases • eventuales condiciones de fluidización del relleno. Se concluye sobre la conveniencia de que el estudio de una aplicación tecnológica en particular de los reactores multifásicos se plantee sin aislarlo del contexto más general de los reactores multifásicos.

En consecuencia, se propone como objeto general de estudio el modelado y la simulación matemática de reactores industriales multifásicos.

Para dar continuidad a las tareas realizadas durante el período que se informa, se definirá como objeto particular de estudio el modelado y la simulación matemática de reactores de lecho fijo con flujo bifásico de gas y líquido en co-corriente ascendente y descendente.

Se piensa desarrollar el objeto particular de estudio en dos niveles: definir un modelo “ marco ” y aplicarlo a sistemas industriales específicos • seleccionar las correlaciones, criterios y formulaciones que provean predicciones confiables de las características previamente mencionadas.

#### **Antecedentes**

Los antecedentes propios<sup>[4,5]</sup> más relevantes sobre simulación de reactores industriales de lecho fijo con



flujo bifásico de gas y líquido tratan el ejemplo tecnológico del hidrotrefinado catalítico de cortes de  $C_3$ 's y  $C_4$ 's insaturados<sup>[6]</sup>. Los modelos definidos involucraron hipótesis y simplificaciones como: esquemas de reacciones reducidos • información cinética parcial • reactor isotérmico • ausencia de gradientes de concentración en el interior del catalizador • fase líquida no volátil.

Se prevé dar continuidad al trabajo previo prosiguiendo con el mismo ejemplo tecnológico. No obstante, modelos “ marco ” publicados<sup>[3]</sup> alertan sobre la necesidad de remover las hipótesis previas para obtener una representación comprensible del funcionamiento de los reactores de hidrotrefinado bajo estudio.

En la definición del objeto de estudio, se estableció que los modelos de reactores multifásicos en general, y los estudiados previamente<sup>[4,5]</sup> en particular, requieren ser dotados de valores de áreas interfaciales, retención de fases, pérdida de carga, coeficientes de transporte de materia y de transferencia de energía que, a su vez, son específicos de la estructura de flujo y del modelo de flujo. Para su evaluación, puede recurrirse a correlaciones, criterios y formulaciones predictivas publicados en la literatura.

No obstante, durante el período que se informa se concluyó que las herramientas predictivas para calcular dichos integrantes de los modelos evidencian una significativa dispersión de predicciones y, en algunos casos, tendencias cualitativas de difícil interpretación. En adición, la escasa información estadística sobre los resultados experimentales en los cuales se basan las herramientas predictivas impide juzgar la significación de las discrepancias respecto a los datos experimentales o entre sí.

A los fines de adoptar un conjunto de correlaciones que provean de realidad a los ejercicios de simulación propuestos se propone desarrollar una metodología que permita juzgar con significado estadístico la incertidumbre y, entonces, la utilidad de las formulaciones predictivas.

Dicha metodología consiste en el empleo de polinomios de alto orden para la construcción de la matriz de errores experimentales; ausente en las publicaciones. El empleo de polinomios de alto orden para la simulación del error experimental ha sido reportado en la literatura<sup>[7,8]</sup> junto con otra metodología basada en la aditividad de varianzas<sup>[8]</sup>. Sin embargo, se observa que estas metodologías se aplicaron<sup>[7,8]</sup> de forma tal que condujeron a una evidente subestimación de los errores experimentales. Es propuesta de este Plan modificar la forma de aplicación dichos polinomios de alto orden a los fines de corregir la deficiencia anotada. La modificación se basa en la hipótesis en que para un determinado orden del polinomio se obtendría una matriz errores experimentales que acepte, mediante criterios y estadísticos, ser considerada como “ normal ”.

## Objetivos y tareas

Los objetivos se diferenciarán en particulares y generales. Los objetivos particulares corresponden a la contribución factible en el próximo período bienal. Los objetivos generales involucran resultados posibles de obtener en períodos más extensos mediante tareas no incluidas en los objetivos particulares.

El objetivo general del Plan de Trabajo consiste en desarrollar herramientas experimentales y teóricas para la investigación de sistemas de reacción multifásicos de interés tecnológico.

El objetivo particular del próximo período se centrará en el trabajo de modelado y simulación matemática de reactores industriales de lecho fijo con flujo bifásico de gas y líquido. Se prevé continuar con el proceso específico de reactores de hidrotrefinado catalítico de cortes de  $C_4$ 's insaturados.

Para el próximo período bienal se prevé la siguiente planificación de tareas:

- desarrollar la metodología propuesta para el caso específico de datos experimentales publicados sobre retención de fases reactores de lecho fijo con flujo bifásico de gas y líquido en cocorriente ascendente;
- continuar con la revisión bibliográfica a los fines de incrementar la base de 517 datos experimentales colectados de la literatura y actualmente disponible;
- trabajar sobre modelos teóricos publicados de predicción de retención de fases para, en conjunto con el análisis de gráficos de diagnóstico, sustentar el rechazo de datos experimentales;
- aplicar la metodología propuesta al conjunto global de datos experimentales y analizar los resultados;
- evaluación y discriminación estadística de las predicciones correspondientes a las correlaciones y formulaciones publicadas.

## Recursos disponibles para la ejecución del Plan de Trabajo

El Plan de Trabajo se desarrollará en el marco del Proyecto: “ *Fundamentos y Aplicaciones de Procesos*

con *Transferencia de Calor Materia y Reacción Química*”, proyecto 11-I177 acreditado ante la Universidad Nacional de La Plata. Se dispone también como fuente de financiamiento del Subsidio Institucional para Miembros de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico otorgado por la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires.

Para realizar las tareas propuestas, el informante dispone de una computadora personal de 3.0GHz y 3 GBytes de memoria RAM con disco rígido de 80 GBytes y sistema operativo Windows XP 2. Además, se cuenta con acceso a Internet, impresora, escáner y “ software ” actualizado para realizar las tareas numéricas involucradas en este Plan.

Para la actualización bibliográfica se cuenta con: el servicio del ISTECC-PrEBI dependiente de la Universidad Nacional de La Plata, el acceso a la Biblioteca Electrónica de la Secretaría de Ciencia y Técnica de la Nación y con las colecciones de revistas periódicas y libros del Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas y de las bibliotecas de las Facultades de Ingeniería y Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata.

#### Referencias

- [1] “ *Multiphase Catalytic Reactors: a Perspective on Current Knowledge and Future Trends* ”; M. P. Duduković, F. Larachi & P. Mills. *Catalysis Reviews*; **44** ( 1 ), 123–246 ( 2002 ).
- [2] “ *Multiphase Reaction Engineering for Fine Chemicals and Pharmaceuticals* ”; P. L. Mills, P. A. Ramachandran & R. V. Chaudhari. *Reviews in Chemical Engineering*; **8** ( 1–2 ), 1–176 ( 1992 ).
- [3] “ *Trickle-bed Reactor Models for Systems with a Volatile Liquid Phase* ”; M. R. Khadilkar, P. L. Mills & M. P. Duduković. *Chemical Engineering Science*; **54** ( 13–14 ), 2421–2431 ( 1999 ).
- [4] “ *Analysis of Operating Variables in the Catalytic Purification of Butene-1 in a Trickle Bed* ”; S. P. Bressa, N. O. Ardiaca, O. M. Martínez & G. F. Barreto. *Chinese Journal of Chemical Engineering*; **6** ( 2 ), 103–115 ( 1998 ).
- [5] “ *Analysis of Operating Variables on the Performance of a Reactor for Total Hydrogenation of Olefins in a C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub> Cut* ”; S. P. Bressa, J. A. Alves, N. J. Mariani, O. M. Martínez & G. F. Barreto. *Chemical Engineering Journal*; **92** ( 1–3 ), 41–54 ( 2003 ).
- [6] “ *Selective Hydrogenation Applied to the Refining of Petrochemical Raw Materials Produced by Steam Cracking* ”; M. L. Derrien. *Studies in Surface Science and Catalysis*; **27**, 613–666 ( 1986 ).
- [7] “ *Frictional Pressure Drop in Two-Phase Flow: A. A Comparison of Existing Correlations for Pressure Loss and Holdup* ”; A. E. Duckler, Moye Wicks III & R. G. Cleveland. *A.I.Ch.E. Journal*; **10**, ( 1 ), 38–43 ( 1964 ).
- [8] “ *Computer-Aided Modelling of Reactive Systems* ”; W. E. Stewart & M. Caractosios. Wiley-Interscience, John Wiley & Sons Inc. ( 2008 ).

### **ESTUDIO DE AGENTES PRECIPITANTES DE FÓSFORO Y SU POSIBLE APLICACIÓN TECNOLÓGICA PARA LA MITIGACIÓN DE FLORECIMIENTOS CIANOBACTERIANOS Y RECUPERACIÓN DE CUERPOS DE AGUA EUTROFIZADOS**

El objetivo general del Plan es desarrollar tecnologías compatibles con el medio ambiente cuya finalidad es minimizar los florecimientos algales tóxicos tomando como objeto de estudio la Laguna de Los Patos situada en el Municipio de Ensenada de la Provincia de Buenos Aires.

El objetivo particular para el próximo período bienal consiste en analizar la efectividad de compuestos químicos, e.g. cloruro férrico, sulfato de aluminio y policloruro de aluminio, activos en la precipitación de fósforo promotor del florecimiento de algas tóxicas.

El plan de trabajo se desarrollará en las instalaciones y con el equipamiento del Programa Ambiental de Extensión Universitaria ( PAEU ) y la Cátedra de Toxicología de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata.

Esta línea de investigación dispone del financiamiento provisto por los siguientes proyectos: “*Estudio de Cianobacterias y Cianotoxinas Presentes en el Río de La Plata. Evaluación Toxicología e Impacto en el Agua Potable*”, proyecto X520 acreditado ante la Universidad Nacional de la Plata; y “*Estudio de las Cianobacterias Nocivas Presentes en los Ríos Paraná, Uruguay y Río de la Plata. Evaluación Toxicológica e Impacto en el Agua Potable*”, PIP N°112200801 02617 del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas. Además la línea estará co-financiada por el Programa Ambiental de Extensión Universitaria, PAEU, de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata.

---

**Condiciones de la presentación:**

A. El Informe Científico deberá presentarse dentro de una carpeta, con la documentación abrochada y en cuyo rótulo figure el Apellido y Nombre del Investigador, la que deberá incluir:

- a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 21).
- b. Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, en otra carpeta o caja, en cuyo rótulo se consignará el apellido y nombres del investigador y la leyenda "Informe Científico Período .....".
- c. Informe del Director de tareas (en los casos que corresponda), en sobre cerrado.

B. Envío por correo electrónico:

- a. Se deberá remitir por correo electrónico a la siguiente dirección: [infinvest@cic.gba.gov.ar](mailto:infinvest@cic.gba.gov.ar) (puntos 1 al 21), en formato .doc zipeado, configurado para papel A-4 y libre de virus.
- b. En el mismo correo electrónico referido en el punto a), se deberá incluir como un segundo documento un currículum resumido (no más de dos páginas A4), consignando apellido y nombres, disciplina de investigación, trabajos publicados en el período informado (con las direcciones de Internet de las respectivas revistas) y un resumen del proyecto de investigación en no más de 250 palabras, incluyendo palabras clave.

**Nota:** El Investigador que desee ser considerado a los fines de una promoción, deberá solicitarlo en el formulario correspondiente, en los períodos que se establezcan en los cronogramas anuales.