



TECNOLÓGICO DE ESTUDIOS SUPERIORES DE COACALCO

TECNOLOGICO DE ESTUDIOS SUPERIORES DE COACALCO

**“Diseño Teórico de un reactor de lecho
empacado para la obtención del trióxido de azufre”**

Córdova Atílano Lesnie Itzel-201821279

Asesor Interno:

Dra. Biotecnología: María Teresa Torres Mancera

lesnie_cordova.igu@tesco.edu.mx

Julio 2024

AGRADECIMIENTOS.

El presente proyecto fue realizado bajo la supervisión de la Dra. María Teresa Torres Mancera a quién me gustaría expresar mi más profundo agradecimiento, por hacer posible la realización de este proyecto.

Además de agradecer su paciencia, tiempo y dedicación que tuvieron para que esto saliera de manera exitosa.

A mi familia en especial a mi madre Claudia I. Atilano Ortiz quien siempre me motiva a seguir adelante.

Resumen.

El modelo matemático y análisis teórico de reactor de lecho empacado ha sido estudiado por diferentes autores, quienes tuvieron en cuenta variedad de cinéticas de reacción, modelos unidimensionales, homogéneos, pseudo homogéneos y heterogéneos. Las ecuaciones resultantes del modelo fueron solucionadas, en su gran mayoría, por sistemas de métodos numéricos. Se ha analizado en estos el efecto de variables de proceso de importancia física con respecto a parámetros de diseño y operación, como tiempos de residencia, flujos de operación, conversiones de sustrato, área y superficie, entre otros.

Los experimentos han demostrado que el reactor de lecho empacado puede lograr conversiones superiores al 90% con tiempos de residencia de 1 minuto y superiores al 95% con tiempos de residencia de 4 minutos. Estos valores son comparables a los reportados en estudios previos con micro-reactores y significativamente superiores al desempeño de un reactor tipo tanque agitado, donde se requieren tiempos de residencia superiores a los 60 minutos para lograr conversiones similares.

El reactor de lecho empacado parece lograr efectos similares a los micro-reactores, con el potencial de manejar un mayor flujo de material. Esta justificación respalda su aplicación en la producción de biodiesel y otros procesos químicos.

En el presente documento se discute la importancia de los análisis cinéticos. Se habla del tipo de función matemática que conforma una expresión de rapidez de reacción, en especial en presencia del catalizador; se describe la funcionalidad de con la temperatura y concentración. Se abarca también el Modelo Velocidad de transporte como etapa controlante utilizando como catalizador en este caso esférico, aunque hay una gran variedad de catalizadores en cuanto a la forma, en este caso se optó por el mencionado.

Índice

AGRADECIMIENTOS.....	2
Resumen.....	3
Notación.....	8
Introducción.....	9
Requerimiento en el mercado.....	12
Antecedentes Generales.....	13
Objetivo General.....	19
Objetivos específicos.....	19
Alcances y limitaciones.....	19
Impactos esperados y viabilidad.....	20
Marco teórico.....	21
Estructura del sólido SO_3	21
Propiedades físicas.....	23
Propiedades químicas.....	24
Obtención.....	25
Usos.....	26
En reacciones químicas de sulfonación.....	26
Riesgos.....	27
Impacto medioambiental.....	28
Mecanismo de reacción del trióxido de azufre.....	31
Condiciones de reacción del trióxido de azufre.....	32
Algoritmo de la metodología.....	33
Actividades realizadas.....	34
Criterios de diseño del sistema experimental.....	35
Análisis de la cinética química.....	35
Ecuaciones de diseño.....	37
Velocidades de las reacciones químicas.....	37
Velocidad Global para un Proceso Lineal.....	38
Estado Estable.....	38
El proceso de difusión depende del ancho de la capa límite.....	39
Comportamiento externo.....	39
La Ecuación General de Velocidad.....	40
Metodología.....	41
Resultados.....	47

Parámetros y datos calculados del reactor de lecho empacado.	55
Diseño del reactor-Dimensiones e instrumentación	56
Instrumentación.....	57
Perspectivas	59
Experiencia Profesional Adquirida.....	60
Competencias Desarrolladas	61
Fuentes de Información	62

Índice de Figuras

ILUSTRACIÓN 1-DIAGRAMAS DE UN REACTOR DE FLUJO DE LECHO EMPACADO. FUENTE: BIORREACTORES.TRIPOD.	19
ILUSTRACIÓN 2:MOLÉCULA DE TRIÓXIDO DE AZUFRE SO_3 . AUTOR: BENJAH-BMM27. FUENTE: WIKIMEDIA COMMONS.	21
ILUSTRACIÓN 3:ESTRUCTURAS DE RESONANCIA DE LEWIS. LOS ELECTRONES SE REPARTEN EQUITATIVAMENTE EN EL SO_3 . AUTORA: MARILÚ STEA.	21
ILUSTRACIÓN 4:MOLÉCULA EN FORMA DE ANILLO DEL TRIÓXIDO DE AZUFRE SÓLIDO TIPO GAMMA. AUTORA: MARILÚ STEA.	22
ILUSTRACIÓN 5: ESTRUCTURA DE UNA CADENA DEL TRIÓXIDO DE AZUFRE SÓLIDO TIPO BETA. AUTORA: MARILÚ STEA	22
ILUSTRACIÓN 6:COMPLEJO ENTRE EL TRIÓXIDO DE AZUFRE Y LA PIRIDINA. BENJAH-BMM27 [PUBLIC DOMAIN]. FUENTE: WIKIMEDIA COMMONS.	25
ILUSTRACIÓN 7:ÓLEUM O ÁCIDO SULFÚRICO FUMANTE. SE PUEDE OBSERVAR EL HUMO BLANCO SALIENDO DEL FRASCO. W. OELEN [CC BY-SA 3.0 (HTTPS://CREATIVECOMMONS.ORG/LICENSES/BY-SA/3.0)]. FUENTE: WIKIMEDIA COMMONS.	26
ILUSTRACIÓN 8:SULFONACIÓN DEL BENCENO CON SO_3 . PEDRO8410 [CC BY-SA 3.0 (HTTPS://CREATIVECOMMONS.ORG/LICENSES/BY-SA/3.0)]. FUENTE: WIKIMEDIA COMMONS.	26
ILUSTRACIÓN 9: EL TRIÓXIDO DE AZUFRE SO_3 ES MUY CORROSIVO Y PELIGROSO. AUTOR: OPENICONS. FUENTE: PIXABAY.	27
ILUSTRACIÓN 10: BOSQUE DAÑADO POR LLUVIA ÁCIDA EN REPÚBLICA CHECA. LOVECZ [PUBLIC DOMAIN]. FUENTE: WIKIMEDIA COMMONS.	28
ILUSTRACIÓN 11: CAPITULO 1 LA INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS PÁG. NO. 5, FUENTE: INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, OCTAVE LEVENSPEIL	37
ILUSTRACIÓN 12:CAPITULO 17 INTRODUCCIÓN A LAS FRACCIONES HETEROGÉNEAS PÁG. NO. 372, FUENTE: INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, OCTAVE LEVENSPEIL	38
ILUSTRACIÓN 13:CAPITULO 18 REACCIONES CATALIZADAS POR SÓLIDOS PÁG. NO. 382, FUENTE: INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, OCTAVE LEVENSPEIL	38
ILUSTRACIÓN 14:CAPITULO 18.3 PARTÍCULAS POROSAS DE CATALIZADOR PÁG. NO. 387, FUENTE: INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, OCTAVE LEVENSPEIL	39
ILUSTRACIÓN 15:CAPITULO 18.4 EFECTOS CALORÍFICOS DURANTE LA REACCIÓN PÁG. NO. 391, FUENTE: INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, OCTAVE LEVENSPEIL	40
ILUSTRACIÓN 16: CAPITULO 22 REACCIONES G/L SOBRE CATALIZADORES SÓLIDOS: REACTORES DE GOTEO, REACTORES CON SÓLIDOS EN SUSPENSIÓN Y REACTORES FLUIDIZADOS DE 3 FASES PÁG. NO. 500, FUENTE: INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, OCTAVE LEVENSPEIL	40
ILUSTRACIÓN 17: CAPITULO 22.1 LA ECUACIÓN GENERAL DE VELOCIDAD PÁG. NO. 501, FUENTE: INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, OCTAVE LEVENSPEIL	40

ÍNDICE DE TABLAS

<i>Tabla 1: Notación de signos que se adoptan para expresar variables.....</i>	<i>8</i>
<i>Tabla 2: Ventajas y Desventajas del reactor de lecho empacado.</i>	<i>20</i>
<i>Tabla 3: Actividades Realizadas.....</i>	<i>34</i>
<i>Tabla 4: Parámetros y datos calculados del reactor de lecho empacado.</i>	<i>55</i>

Notación

d	Diámetro (m) (cm)
$\mathfrak{D}$	Coeficiente de difusión molecular (difusividad de la capa ceniza)
H	Altura de un rector de lecho empacado
m	Masa
n	Número de moles
R, r	Radio de una partícula
R	Constante de la ley de los gases ideales
t	Tiempo
T	Temperatura
V	Volumen
P	Presión
X_A	Fracción de A, B... convertida, la conversión
ρ	Densidad
π	Pi
τ	Tiempo para la conversión completa de una partícula de reactivo en producto (s)
kg	Coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa
k	Constante de velocidad de reacción
s	Segundos
N_A	Numero de moles del componente A, B...
F	Velocidad de alimentación
C	concentración
PM	Peso Molecular
r	Radio
h	Altura
kg	Kilogramos
HT	Altura total
DT	Diámetro total
L	Litros
Superíndices	
a, b...	Orden de reacción

Tabla 1: Notación de signos que se adoptan para expresar variables

Introducción

El azufre es uno de los recursos naturales más abundantes de la corteza terrestre se caracteriza por su olor penetrante y por su color amarillento, se lo halla en forma de sulfato o sulfuro, siendo un no metal ya que no tiene buena capacidad para la conducción del calor ni electricidad. Es empleado en diversas aplicaciones en la industria ya sea como materia prima, producto intermedio o aditivo catalizador de reacciones. Teniendo distintos procesos de producción como vulcanizado de caucho, ácido sulfúrico y teniendo usos en la fabricación de pigmentos, fertilizantes, alimentación animal y pirotecnia.

En su forma más pura, el oxígeno se usa en muchos químicos como óxido de etileno y bióxido de titanio. También se utiliza para aumentar la capacidad de producción de los procesos de oxidación. En cuanto a sus propiedades físicas del oxígeno se presenta en estado gaseoso y es incoloro, inodoro e insípido. El azufre se utiliza para fines muy diversos como agente reductor en metalurgia, como desinfectante y blanqueador, conservador de sustancias alimenticias y decolorante. Es uno de los compuestos más importantes de la industria química. Además, se emite espontáneamente en la naturaleza por vulcanismo y proceso de combustión.

El 98% del dióxido de azufre se utiliza para la producción de trióxido de azufre como precursor del ácido sulfúrico. Es un gas que se origina sobre todo durante la combustión de carburantes fósiles que contienen azufre (petróleo, combustibles sólidos), llevada a cabo sobre todo en los procesos industriales de alta temperatura y de generación eléctrica. Si bien todas estas aplicaciones contribuyen de alguna manera al bienestar general en los últimos años se ha producido un descenso acusado de las emisiones de SO_2 producidas por la combustión en industrias de producción de energía debido a diversos factores, como el Plan 2007 de Reducción de Emisiones de Grandes Instalaciones de Combustión (GICs), que obligó a la introducción de tecnologías de desulfuración. Dentro de esto se abordará el modelamiento de un reactor heterogéneo que se adapte a la reacción del trióxido de azufre, así como viendo la parte cinética que englobará dentro de este. (Bolívar, 2023)

¿Qué es un catalizador?

Si queremos crear un proceso, el primer paso es identificar un producto que tenga un alto valor, ya sea porque tiene un valor económico asociado o es un intermediario químico valioso. Cuando estamos interesados en producir algo, es evidente que sería mejor producirlo lo más rápido posible. Pues bien, un catalizador es la sustancia que reduce los tiempos de producción. Una definición actual y simple es: catalizador es una sustancia que aumenta la rapidez con que una reacción alcanza el equilibrio. Otro punto importante es que durante la reacción los sitios activos no se consumen. (Cuevas, 2020)

La mayoría de los catalizadores sólidos están constituidos por fases activas de dimensiones nanométricas.

Hablando de producción, se ha introducido al tiempo como una variable importante; así que ahora nos encontramos en los terrenos de la cinética, es decir, de aquellos cambios que ocurren a través del tiempo. Smith (1981) mencionan que la cinética química se define como el estudio de la rapidez y el mecanismo por medio de los cuales una especie química se transforma en otra. La rapidez de reacción se define como la masa en moles de producto formado o reactivo consumido por unidad de tiempo. El mecanismo es la secuencia de eventos químicos individuales (elementales) cuyo resultado global produce la reacción química observada.

¿Qué es un reactor de Lecho empacado?

Un reactor de lecho empacado es un tipo de reactor utilizado en procesos químicos e industriales. Está diseñado como un tubo lleno de partículas sólidas de catalizador, y se utiliza principalmente para catalizar reacciones gaseosas. Algunas aplicaciones comunes de los reactores de lecho empacado son:

- **Síntesis de amoníaco:** En la producción de amoníaco, se utiliza un reactor de lecho empacado con un catalizador de $\text{Fe-K}_2\text{O/Al}_2\text{O}_3$. Las condiciones operativas típicas son temperaturas de 450-550°C y una presión de 200 atm. (Ricardo, 2020)
- **Oxidación parcial de etileno:** Para esta reacción, se emplea un catalizador de $\text{Ag/Al}_2\text{O}_3$ en el reactor de lecho empacado. Las condiciones suelen ser temperaturas de 200-270°C y una presión de 10-20 atm. (Lechuga, 2020)
- **Deshidrogenación de etilbenceno:** En esta reacción, se convierte el etilbenceno en estireno utilizando un catalizador de $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-KOH}$. La temperatura de operación es de aproximadamente 600°C. (Lechuga, 2020)
- **Producción de ácido sulfúrico:** El proceso de producción de ácido sulfúrico utiliza un catalizador de V_2O_5 en el reactor de lecho empacado. Las condiciones típicas son temperaturas de 380-390°C. (Lechuga, 2020)
- **Hidrogenación de benceno:** En esta reacción, se convierte el benceno en ciclohexano utilizando un catalizador de $\text{Pt/Al}_2\text{O}_3$. La temperatura de operación es inferior a 300°C. (Lechuga, 2020)
- **Reformación de gas natural:** Para producir monóxido de carbono e hidrógeno a partir de metano, se utiliza un catalizador de $\text{Ni/Al}_2\text{O}_3$ en el reactor de lecho empacado. Las condiciones típicas son temperaturas de 500°C y una presión de 30 atm. (Lechuga, 2020)

En resumen, los reactores de lecho empacado son versátiles y se utilizan en una variedad de aplicaciones industriales para llevar a cabo reacciones químicas de manera eficiente. (Palacios, 2015)

Justificación

El trióxido de sodio es de gran importancia ya que una de sus principales aplicaciones consiste en la preparación de óleum o ácido sulfúrico fumante, llamado así porque emite vapores visibles a simple vista, y para obtenerlo se absorbe el SO_3 en ácido sulfúrico concentrado H_2SO_4 . Se ha demostrado la gran variedad de aplicaciones de los reactores de lecho empacado (PBR) en procesos biológicos, gracias a sus ventajas en tiempo en retención, reutilización del sistema biocatalítico, alta eficiencia y conversiones, fácil operación y bajos costos (Klessner, 1990). Los trabajos realizados en tratamiento de aguas residuales (Young y McCarty, 1969), remoción de amoníaco por Haug y McCarty, 1972, y más recientemente los estudios presentados por Beg y Hassan, 1985 y 1987, son algunos de los ejemplos exitosos de su aplicación.

A pesar del amplio uso que han tenido estos reactores en los procesos biológicos, son relativamente pocos los trabajos que se presentan en cuanto a desarrollo de modelos matemáticos que caractericen el comportamiento de estos.

El análisis matemático y los modelos de simulación ayudan a entender el comportamiento cuantitativo del sistema biológico y a predecir el desarrollo general del biorreactor. Adicionalmente, estos pueden ayudar en la puesta en marcha y finalización de la operación del reactor, a describir la dinámica y las características de control de este o estimar los tiempos requeridos para alcanzar nuevos estados estables cuando se presenta una perturbación (Hassam et al., 1995).

Los modelos pueden ser agrupados en "empíricos" (Rittman, 1982), "semi-empíricos" (modelos que incorporan aproximaciones empíricas a las ecuaciones fenomenológicas), o fenomenológicos, que se basan completamente en los fenómenos de transporte y leyes de conservación de masa y energía (Rittman et al., 1982).

El presente trabajo propone el modelo cinético de un reactor en forma de cilindro, la aplicación de modelos matemáticos permitirá entender y describir el comportamiento del proceso, y comprender las etapas por las que pasará el catalizador, teniendo un amplio panorama de cuanto se gastara de este, para producir cierta cantidad requerida propuesta en este caso de 2 toneladas; una mayor manipulación de las variables de operación y en trabajos futuros permitirá la implementación de un control en el sistema, donde se puedan cambiar los valores sin cambiar el modelo cinético.

Requerimiento en el mercado

En el mercado el trióxido de azufre puede utilizarse fundamentalmente para la preparación de ácidos sulfónicos y para ácido sulfúrico también llamado óleum. Es también junto al dióxido de azufre considerado de los más importantes en cuanto a la serie de óxidos de azufre.

En la extracción de metales el trióxido de azufre es requerido para tratamiento de minerales. Así mismo los sulfuros de níquel, hierro y cobre reaccionan con el trióxido de azufre a temperatura ambiente formando los sulfatos y así ser sometidos a otros procesos para la obtención del metal puro.

Otra de sus importantes aplicaciones es en la sulfonación ya que es un proceso clave en aplicaciones industriales a gran escala de compuestos orgánicos con la cual se pueden obtener sustancias como detergentes, colorantes, pesticidas o productos farmacéuticos.

Sin embargo, es importante tener en cuenta que el SO_3 es muy peligroso. Puede causar graves quemaduras, daños en los ojos y la piel. Tampoco debe ser inhalado ni ingerido, ya que puede causar la muerte por quemaduras internas en la boca, esófago, estómago, etc. Por estas razones, debe ser manipulado con mucha precaución. Nunca debe entrar en contacto con agua ni materiales combustibles como madera, papel o telas, ya que podría producir incendios. Además, no se debe desechar ni liberar SO_3 gaseoso al ambiente, ya que es uno de los responsables de la lluvia ácida que ha dañado grandes extensiones de bosques en el mundo.

En el mercado, el trióxido de azufre puede ofrecerse en dos calidades: estabilizado y no estabilizado. El trióxido estabilizado tiene una sustancia que ayuda a mantenerlo en ese estado y demora la formación de formas alfa y beta con un mayor punto de efusión, que son indeseables. (Stea, 2019)

Antecedentes Generales.

1. Bolaño, Martínez, Barrios, Duran, (2016), “Modelamiento y simulación de un reactor catalítico para la oxidación de SO₂ a SO₃, utilizando V₂O₅ como catalizador”

El H₂SO₄ es uno de los productos químicos de mayor importancia en la industria. Actualmente el H₂SO₄ se produce mediante el proceso de doble contacto, en donde el SO₃ precursor del H₂SO₄ se forma a partir de la oxidación del SO₂ en un reactor catalítico de lecho empacado, utilizando V₂O₅ como catalizador. Durante el proceso una pequeña cantidad de SO₂ se emite a la atmósfera. El modelamiento del reactor catalítico se realizó desde el punto de vista cinético y termodinámico. Además, un programa de simulación en MATLAB® se creó para estudiar el comportamiento del reactor en términos de conversión, temperatura y caída de presión, y realizar evaluaciones del cumplimiento ambiental de emisiones de SO₂. El modelo se validó comparando los resultados con datos reales. Posteriormente, se evaluaron dos hipótesis empleando simulaciones en Solid Works®, Aspen HYSYS® y herramientas estadísticas para determinar las causas de las desviaciones, y se realizó un ajuste en el modelo. Los resultados muestran que la distribución de los errores es normal, con una media cercana al 0% con una desviación del 4%, causado posiblemente a errores originados en la medición del SO₂ a la entrada del reactor y a la variabilidad inherente al proceso. (Bolaño Martínez, Barrio Duran, 2016)

2. Valentina Isadora Parra Gallegos (2017), “Estudio para maximizar la eficiencia de conversión de la planta de ácido sulfúrico No. 1 de la Fundición de Caletones”

El estudio analiza la viabilidad de crear un sensor virtual utilizando redes neuronales artificiales (RNA) para predecir la eficiencia de conversión de un reactor catalítico en una planta de ácido sulfúrico. El diseño del sensor virtual basado en RNA incluyó el desarrollo de un modelo neuronal para predecir la concentración de SO₂ en el lecho final del convertidor.

Con base en estos resultados, se calcularon las eficiencias de conversión de SO₂, lo que dio como resultado un sensor virtual con un error porcentual absoluto medio del 0,2%, un índice de concordancia refinado de 0,902 y un coeficiente de correlación de 1,00 para predecir la eficiencia de conversión. Además, se comparó el sensor virtual basado en ANN con otro derivado de leyes de estado estacionario y se encontró que el primero tenía mejor desempeño que el segundo, el cual mostró un pobre desempeño en la predicción de la eficiencia de conversión. (Valentina Isadora, Parra Gallegos, 2017)

3. Valero, Nilsson (2022), “Estudio del diseño del proceso de producción de ácido sulfúrico mediante el modelado”

Se produce a partir de trióxido de azufre (SO_3), que a su vez se obtiene en un horno en el que se quema azufre elemental (S) para producir dióxido de azufre (SO_2). Este dióxido de azufre se introduce en un reactor catalítico de 5 lechos donde se oxida a trióxido de azufre. Además, dado que el proceso genera una gran cantidad de energía, parte de la cual se consume en el propio proceso, también se debe tener en cuenta la integración energética entre corrientes.

El principal objetivo de este trabajo es utilizar una herramienta de simulación de procesos como ASPEN Plus para simular el proceso de producción de ácido sulfúrico, un proceso productivo muy importante en la industria, y explicar mediante el estudio detallado del proceso y la simulación de estas condiciones de operación.

- Cuando se realiza industrialmente.
- Explicar el proceso de producción considerado en el modelado.
- Obtenga el diagrama de equilibrio de temperatura de transición de la reacción para las condiciones de entrada del reactor o las condiciones de absorción post-intermedia o el efecto de los absorbentes.

Finalmente, se determina la relación entre la cantidad de catalizador y la conversión para diversos modelos cinéticos de oxidación de SO_2 y se compara la cantidad de catalizador necesaria teóricamente calculada para lograr la conversión deseada en la primera etapa con la cantidad realmente utilizada en las plantas industriales. (Valero, 2022)

4. Espinoza Quiroz (2022), “Diseño de un sensor virtual para la predicción de la eficiencia de conversión de SO_2 a SO_3 en un reactor catalítico multi-lechos mediante redes neuronales artificiales”

El estudio analiza la viabilidad de crear un sensor virtual utilizando Redes Neuronales Artificiales (RNA) para predecir la eficiencia de conversión de un reactor catalítico en una planta de ácido sulfúrico. Para esto, se emplearon datos de la planta que fueron preprocesados para seleccionar la información relevante. A través de un análisis de correlación, se identificaron las variables de entrada importantes para el modelo de predicción, como la concentración de dióxido de azufre (SO_2) en la entrada, las temperaturas de salida de los lechos, la concentración de oxígeno (O_2) en la entrada y el flujo de gas en la entrada. El diseño del sensor virtual basado en RNA implicó desarrollar un modelo neuronal para predecir la concentración de SO_2 en el último lecho del convertidor. Se realizaron entrenamientos y validaciones con diferentes estructuras de redes neuronales para encontrar la configuración óptima, que resultó en un modelo con nueve variables en la capa de entrada y nueve neuronas en la capa oculta.

Los resultados muestran que el modelo de predicción de la concentración de SO_2 tiene un error porcentual medio absoluto del 12%, un índice refinado de concordancia de 0,832 y un coeficiente de correlación de 0,945. Con base en estos resultados, se calcularon las eficiencias de conversión de SO_2 , lo que permitió obtener un sensor virtual con un error porcentual medio absoluto del 0,2%, un índice refinado de concordancia de 0,902 y un coeficiente de correlación de 1,00 para predecir la eficiencia de conversión. Además, se comparó el sensor virtual basado en RNA con otro derivado de leyes en estado estacionario y se encontró que el primero tuvo un mejor rendimiento en comparación con el segundo, que mostró un bajo desempeño en la predicción de la eficiencia de conversión. (Quiroz, Espinoza, 2022)

5. Arteaga, Zegada, (2009), “Modelación de un convertidor de SO_2 ”

Se han desarrollado dos modelos (bidimensional y unidimensional) para la simulación del convertidor de SO_2 de una planta de sulfonación. Ambos modelos pueden manejarse empleando tanto ecuaciones cinéticas pseudo-homogéneas globales, como ecuaciones heterogéneas, para incorporar limitaciones de la velocidad por transferencia de masa y difusión en el interior de las partículas catalíticas. Se ha encontrado que las gradientes radiales a lo largo de las columnas del convertidor pueden despreciarse. Sin embargo, las pérdidas de calor en las entradas y salidas no aisladas de las columnas hacen necesaria la corrección de las temperaturas registradas en planta. También se han calculado gradientes intraparticulares de temperatura y composición de la fase fluida, que hacen imprescindible el empleo de las ecuaciones heterogéneas. Los cálculos de simulación en este caso, se han posibilitado con la introducción de una matriz tridimensional pre-calculada del coeficiente total de eficiencia del catalizador, mediante la cual, las operaciones iterativas de integración de un sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias se han simplificado a una interpolación lineal directa. Los resultados constituyen la base para el posterior análisis dinámico del convertidor. (Arteaga, Zegada, 2009)

6. Gómez Mendoza Noel Andrés, (2013) “Modelamiento y simulación de un reactor industrial de película descendente para la producción de surfactantes aniónicos”

La tecnología más utilizada emplea los llamados reactores de película descendente: un diseño de intercambiador de calor de carcasa y tubos, dispuestos verticalmente, en el que una película del líquido orgánico a sulfonar (como el tridecibenceno) fluye a través de las paredes internas de los tubos. El agente sulfonante (SO_3 diluido en un gas inerte) fluye hacia el interior y el refrigerante fluye fuera de los tubos, hacia la carcasa. La fenomenología del proceso de sulfonación es bastante compleja y se caracteriza por: alta velocidad de reacción; alta exotermicidad (380 kJ/kg de SO_3 convertido) y grandes cambios en las condiciones hidrodinámicas. En colaboración con una empresa local, se reconoció la utilidad de disponer de una herramienta

informática de propósito general que pudiera analizar las condiciones de funcionamiento de un reactor de película descendente en sus instalaciones, así como su respuesta ante diversos eventos dentro del proceso. Por lo tanto, esta tesis estudia el modelado, simulación y operación de un reactor industrial de película descendente utilizando el ejemplo de la sulfonación de tridecibenceno. El primer capítulo proporciona información general sobre el proceso de sulfonación, el mercado y el impacto de los surfactantes en la industria, así como una descripción del proceso de sulfonación en estudio; Además, se determinan los objetivos y alcance del trabajo de tesis. Para resolver el modelo se utilizó el método de líneas con grilla adaptativa; esto es para tener en cuenta la variación en el espesor de la película líquida en todo el reactor. A continuación, el Capítulo 3 examina el comportamiento dinámico del reactor, analizando tanto la estabilidad del punto de funcionamiento normal del reactor, definido en el Capítulo 2, como el comportamiento de arranque del reactor. y procesos de parada, así como posibles interrupciones en el proceso. La herramienta computacional se desarrolló en MatLab® y se puede utilizar para una variedad de tipos de reactivos, condiciones de proceso y configuraciones de reactores de película descendente. (Gómez, 2013)

7. Porras Regalado Xavier, (s.f), "Diseño de un reactor tubular para la oxidación del dióxido de azufre a trióxido de azufre en un reactor catalítico con un catalizador de pentóxido de vanadio"

Se ha determinado que, para un catalizador de pentóxido de vanadio soportado en gel de sílice, los datos cinéticos pueden ser representados por una expresión de velocidad y con constantes dadas donde el análisis de la cinética se considera que la expresión anterior corresponde a la velocidad total o global de la reacción y se sabe que la reacción es muy exotérmica. El reactor se compone por un tubo de acero al carbón de cedula 40 de 0.5 m de diámetro interior el cual opera a una presión total de 1 atm y es alimentado con un flujo total de 1000 kg/h y con composición de alimentación del 8 % de SO₂, 13% de O₂ y 79% de N₂; a una temperatura de entrada de 473.15 K. Considerando un coeficiente de transferencia de calor de 10 J/m²sK. Programando la totalidad de las ecuaciones con todos los valores iniciales y ecuaciones auxiliares, para el diseño tubular del reactor empacado donde Polymath se fue variando la longitud (Z) para alcanzar la conversión del 40%. Donde se obtuvo una longitud de 60 m donde es posible alcanzar esa conversión. La dependencia de la conversión en función de temperatura y la longitud del reactor. Se observa que con las condiciones establecidas la conversión del componente A comienza a partir de la longitud de 20 m. logrando la conversión de 0.40 a la distancia de 60m. En el diseño para este tipo de reactor utilizando un catalizador de pentóxido de vanadio soportado en gel de sílice se encontró que la esta reacción puede considerarse irreversible. Se obtuvo que de acuerdo con nuestros grados de libertad planteados para alcanzar la conversión del 40% una longitud de 60m del reactor de acero al carbón con un diámetro de 0.5m. (Regalado, s.f.)

8. Javier Esteban del Solar Vento, (2016) “ELABORACIÓN DE UN MODELO PARA PREDECIR LA OPERACIÓN DEL CONVERTIDOR DE LA PLANTA DE ÁCIDO SULFÚRICO”

En este informe el objeto de estudio es una planta de recuperación de ácido sulfúrico (SAR) que abastece la unidad de alquilación de la refinería ENAP Aconcagua en Concon, Chile, en concreto a través de una optimización en la operación de convertidor D-1981 se busca reducir las emisiones de SO_2 la atmosfera que actualmente oscilan alrededor de las 360 ppm.

El principal aspecto que necesita mejorar está relacionado con la temperatura de entrada de cada capa del convertidor, especialmente en la segunda etapa. El software Hysys no cuenta con todas las herramientas de optimización, pero si con capacidades de modelado, por lo que se decidió seguir la metodología del licenciante y proponer un procedimiento empírico para mejorar las condiciones operativas del proceso. Se utilizaron simulaciones para evaluar diferentes casos con fines ilustrativos y así dar una idea de lo que se podría lograr una vez completada la optimización, arrojando 225 ppm de emisiones en el caso más débil y 147 en el caso más optimista. Se analizaron otras alternativas que podrían implementarse una vez finalizada la optimización. Se descartó operar la unidad a presiones más altas porque no era técnicamente posible, y se descartó agregar catalizador al espacio restante de cada lecho porque no proporcionaría un beneficio significativo. El funcionamiento de la planta con aire de dilución enriquecido con oxígeno da buenos resultados: por ejemplo, añadiendo un 5% de oxígeno se reducen las emisiones de SO_2 a 223 ppm, y otro 10% las reduce a 168 ppm. (Vento, 2016)

9. Estrada, Pacheco, Valdivia, Sotelo y García, (2013), “Degradación de Dióxido de Azufre empleando tecnología de plasma.”

El presente trabajo expone el estudio electroquímico realizado durante el tratamiento del dióxido de azufre (SO_2) empleando plasma no térmico acoplado a un lecho de nanoestructuras de carbono para mejorar el proceso de remoción y adsorber los ácidos generados durante la degradación; las eficiencias de degradación obtenidas son superiores al 80 %. El plasma no térmico es generado mediante una descarga de barrera dieléctrica (DBD). La investigación se desarrolló mediante un análisis de la cinética química del proceso y un estudio experimental de la degradación, monitoreando en cada experimento las señales eléctricas y la influencia de las nanoestructuras para establecer las condiciones óptimas de degradación. Se compararon los resultados teóricos y experimentales a fin de concluir si el modelo propuesto para la degradación es correcto. (ESTRADA, PACHECO, VALDIVIA, SOTELO y GARCÍA, 2013)

10. Alvira, (2013), “OPTIMIZACIÓN DE LA TEMPERATURA EN EL PROCESO DE RETENCIÓN DE SO₂ DURANTE LA OXICOMBUSTIÓN DE CARBÓN EN LECHO FLUIDIZADO BURBUJEANTE”

La oxidación está englobada dentro de las tecnologías de CAC. Consiste en la combustión, de carbón en este caso, con O₂ puro y una corriente rica en CO₂ recirculada de los gases de salida del propio combustor. Al no introducir N₂ (proveniente del aire) en el proceso, la corriente de salida del combustor está compuesta principalmente por CO₂ y H₂O, libre de N₂, y por lo tanto se hace más fácil la separación del CO₂ para su posterior almacenamiento. Además de CO₂, en la combustión del carbón se generan otros contaminantes, entre los que destaca el SO₂ que es uno de los principales contribuyentes a la formación de la lluvia ácida. En caso de que el SO₂ no vaya a ser emitido a la atmósfera, sino que esté siendo generado en un proceso con CAC (como es en el caso de la oxidación), también debe ser minimizado puesto que afectaría a la calidad del CO₂ obtenido. Hay que tener en cuenta que la concentración de SO₂ presente en la corriente a almacenar no puede ser muy elevada y dentro de la caldera puede producir la corrosión de los materiales de la instalación y ocasionar problemas de operación.

Existen principalmente dos tipos de calderas a nivel industrial donde poder llevar a cabo la oxidación de carbón, como son las calderas de carbón pulverizado y las calderas de lecho fluidizado. Éstas últimas tienen, entre otras, la ventaja de poder alimentar sorbentes cálcicos directamente al lecho, lo que permite la retención in situ del SO₂ generado durante la combustión del carbón, siendo éste el tema donde se enmarca la realización del presente trabajo se han estudiado y analizado las diferentes vías de sulfatación de los sorbentes cálcicos con el objetivo de optimizar la temperatura de operación de las calderas de lecho fluidizado operando en condiciones de oxidación con el fin de maximizar la retención del SO₂ mediante el uso de diferentes sorbentes cálcicos. (Alvira, 2013)

El presente trabajo se enfocara en el diseño teórico para la obtención del trióxido de azufre a través de un reactor de lecho empacado, determinando los parámetros para su diseño, seleccionado el medio y condiciones de operación del reactor, los antecedentes mencionados anteriormente entre los que más se destaca la factibilidad de un reactor de lecho empacado se encuentra la investigación realizada por **(Bolaño Martínez, Barrio Duran, 2016)** para la oxidación de SO₂ a SO₃ utilizando el V₂O₅ como catalizador donde el H₂SO₄ es el precursor, utilizando un programa de simulación MATLAB logrando validar el modelo comparando los resultados con datos reales, otro caso de igual forma evidencia que en la investigación de **(Valero, 2022)**, estudiando el diseño del proceso de producción de ácido sulfúrico mediante el modelado en un simulador llamado ASPEN PLUS, en el cual explican el proceso de producción considerando la relación entre la cantidad de catalizador y la conversión para diversos modelos cinéticos de oxidación de SO₂

comparando la cantidad de catalizador necesaria teóricamente calculada, en el caso de **(Regalado, s.f.)** donde se ha determinado que para un catalizador de pentóxido de vanadio, los datos cinéticos pueden ser representados por una expresión de velocidad y con constantes dadas donde el análisis de la cinética se considera que la expresión corresponde a la velocidad total o global de la reacción operando con una presión total de 1 atm, ya establecida al igual que el flujo alimentado de 1000 kg/h y con composición de alimentación del 8% de SO₂, 13% O₂ a una temperatura de entrada de 473.15 K, programando la totalidad de las ecuaciones con todos los valores iniciales y ecuaciones auxiliares para el diseño del reactor empacado.

Objetivo General.

Plantear la teoría de un reactor de lecho fluidizado para producir trióxido de sodio.

Objetivos específicos.

- Determinar los parámetros de diseño en un reactor de lecho empacado
- Seleccionar el medio, condiciones de operación del reactor, tamaño del equipo y efectos del funcionamiento a largo plazo

Alcances y limitaciones

Se realizó el modelamiento del reactor de lecho empacado donde se da la oxidación del SO₂. (Ilustración 1)



Ilustración 1-Diagramas de un reactor de flujo de lecho empacado. Fuente: Biorreactores.tripod.

El reactor de lecho empacado es la configuración de mayor importancia industrial y se usa principalmente para la producción a gran escala de reactivos primarios o intermedios. Un lecho empacado presenta la ventaja de que no requiere la separación del catalizador como en el caso de las reacciones catalíticas homogéneas. En un reactor empacado, los gránulos de catalizador se acomodan de manera que llenan una cámara de reacción. La cámara de reacción puede ser en el interior de un tubo, o la sección anular entre dos concéntricos o la chaqueta de un reactor con una configuración similar a un intercambiador de calor.

Características:

- o La reacción tiene lugar sobre la superficie del catalizador
- o Se emplea para catalizar reacciones en fase gas.
- o El régimen de flujo se ve afectado por la densidad del gas, viscosidad del líquido y las velocidades superficiales de ambas fases.
- o La caída de presión dependerá de la densidad del gas, viscosidad del líquido, de las velocidades superficiales y del flujo másico de ambas fases.

Ventajas	Desventajas
▪ Muy alta capacidad de tratamiento ▪ Bajo tiempo hidráulico de residencia ▪ Aplicable a diferentes aguas residuales ▪ Permite operaciones continuas controladas automáticamente y con gran facilidad de manejo	▪ Alto consumo energético ▪ Dificultad para controlar la expansión del lecho ▪ Elevado nivel de sólidos suspendidos en el efluente ▪ Poca experiencia a escala industrial ▪ Elevado coste de relleno

Tabla 2: Ventajas y Desventajas del reactor de lecho empacado.

Aplicaciones:

- o Síntesis de amoníaco
- o Hidrogenación de Benceno
- o Reformación de gas natural

Impactos esperados y viabilidad

El contar con una cinética para la reacción que se llevara a cabo dentro del reactor de lecho empacado, nos permitirá tener una mayor visibilidad de lo que está ocurriendo, tanto con la reacción y con el catalizador empleado, destacando que con este modelo cinético, se puede diseñar de manera más sencilla, en las condiciones limitadas o dentro de ciertos parámetros, con diferentes compuestos y se pueda diseñar de una forma que ya contemos con un modelo matemático que demuestre que se puede adaptar a ciertas variantes o condiciones impuestas para el diseño del reactor.

A pesar de que el trióxido es muy usado en la industria, es un compuesto inorgánico que genera mucha contaminación, cuando se produce a partir del $\text{SO}_2 + \text{O}_2$, ya que al entrar en contacto con el agua este reacciona rápidamente para formar ácido sulfúrico (H_2SO_4).

En resumen, el trióxido de sodio en conjunto con el vanadio se utiliza en aplicaciones específicas, y su disponibilidad en el mercado puede variar según la demanda y los proveedores. (Stea, 2019)

Marco teórico

El trióxido de azufre es un sólido cristalino (como la arena), incoloro a blanco que también puede existir en forma gaseosa o líquida. Llamado también óxido sulfúrico u óxido de azufre (VI), de fórmula SO_3 . Es una molécula de geometría plana trigonal. Reacciona violentamente con el agua para formar el ácido sulfúrico. Si esta reacción ocurre con el agua atmosférica, el ácido sulfúrico caerá a la tierra acompañado de precipitaciones, fenómeno conocido como lluvia ácida. Su producción por fuentes antropogénicas se da por la quema de combustibles fósiles. Industrialmente se obtiene por proceso de contacto. La mayoría SO_3 producido es transformado en ácido sulfúrico, pero también se utiliza principalmente como **agente sulfatante** en la fabricación de detergentes, como desinfectante y conservante, y en la fabricación de baterías textiles.

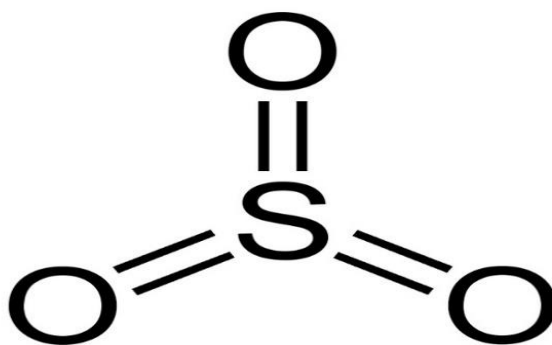


Ilustración 2: Molécula de trióxido de azufre SO_3 . Autor: Benjah-bmm27. Fuente: Wikimedia Commons.

Estructura del sólido SO_3

La molécula del trióxido de azufre SO_3 en estado gaseoso posee una estructura plana triangular. Esto quiere decir que tanto el azufre como los tres oxígenos se encuentran en un mismo plano. Además, la distribución de los oxígenos y de todos los electrones es simétrica, como se muestra en la Ilustración 3

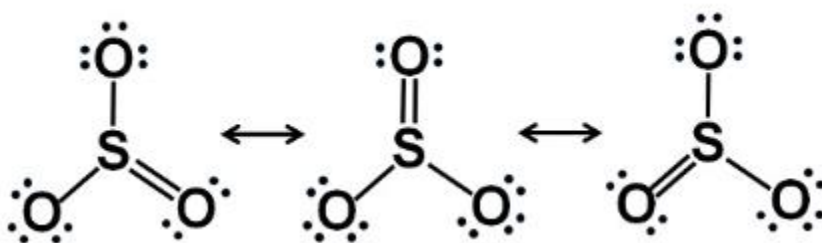


Ilustración 3: Estructuras de resonancia de Lewis. Los electrones se reparten equitativamente en el SO_3 . Autora: Marilú Stea.

En estado sólido se conocen tres tipos de estructura del SO_3 : alfa (α - SO_3), beta (β - SO_3) y gamma (γ - SO_3). La forma gamma γ - SO_3 contiene trímeros cíclicos, esto es, tres unidades de SO_3 juntas formando una molécula cíclica o en forma de anillo.

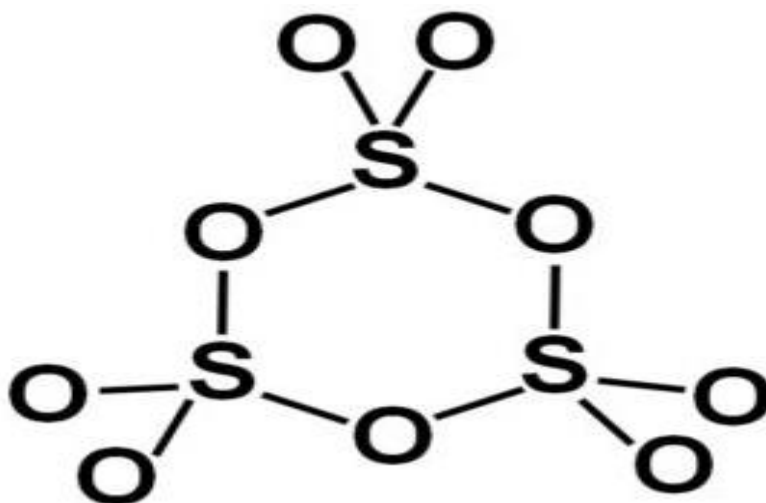


Ilustración 4: Molécula en forma de anillo del trióxido de azufre sólido tipo gamma. Autora: Marilú Stea.

La fase beta β -SO₃ posee cadenas infinitas helicoidales de tetraedros de composición SO₄ unidos entre sí.

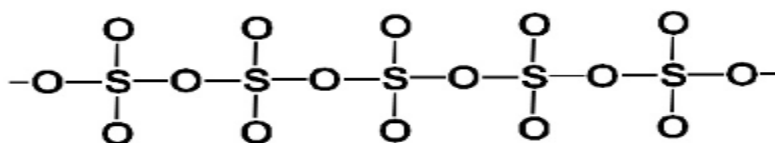


Ilustración 5: Estructura de una cadena del trióxido de azufre sólido tipo beta. Autora: Marilú Stea

La forma más estable es el alfa α -SO₃, similar a la beta, pero con una estructura en capas, con las cadenas unidas formando una red.

La naturaleza del sólido SO₃, es una sorprendente área compleja porque su estructura cambia debido a trazas de agua. En la condensación del gas absolutamente puro, el trióxido de azufre condensa en un trímero llamado γ -SO₃. Esta forma molecular es un sólido sin color con un punto de fusión de 16.8°C y adopta una estructura cíclica descrita como [S(=O)₂(μ -O)]₃.

Si el trióxido de azufre condensa alrededor de 27°C, se produce α -SO₃ de apariencia fibrosa, parecida a los asbestos (con los que no guarda relación química). Estructuralmente es el polímero [S(=O)₂(μ -O)]_n. La cadena termina por ambos extremos con grupos OH (de ahí que el α -SO₃ no es realmente una forma del SO₃). β -SO₃, al igual que la forma alfa, es de aspecto fibroso, pero tiene distinto peso molecular, consistente en un polímero hidroxilo que funde a 32.5°C. Las formas gamma y beta son metaestables, que finalmente pasan a la forma estable alfa si se deja el suficiente tiempo. Esta conversión está causada por trazas de agua.

Las presiones relativas del trióxido de azufre sólido son Alpha < beta < gamma, tal y como indica su peso molecular relativo. La forma líquida del trióxido de azufre coincide con la forma gamma. De modo que, calentando un cristal de α -SO₃ hasta su punto de fusión, causa un aumento repentino de la presión de vapor, que puede

ser tan potente como para hacer añicos el recipiente de cristal en el cual ha sido calentado. Este efecto se conoce como la “explosión alfa”

SO₃ es agresivamente higroscópico. De hecho, el calor de hidratación de las mezclas de trióxido de azufre y madera o algodón pueden arder, ya que el SO₃ deshidrata a los carbohidratos.

Nomenclatura

- Trióxido de azufre
- Anhídrido sulfúrico
- Óxido sulfúrico
- SO₃ gamma, γ- SO₃
- SO₃ beta, β- SO₃
- SO₃ alfa, α- SO₃

Propiedades físicas

➤ Estado físico

A temperatura ambiente (alrededor de 25 °C) y presión atmosférica, el SO₃ es un líquido incoloro que emite humos al aire.

Cuando el SO₃ líquido está puro a 25 °C es una mezcla de SO₃ monomérico (una sola molécula) y trimérico (3 moléculas unidas) de fórmula S₃O₉, también llamado SO₃ gamma γ- SO₃.

Al bajar la temperatura, si el SO₃ es puro al llegar a 16,86 °C, se solidifica o congela a γ- SO₃, también llamado “hielo de SO₃”.

Si contiene pequeñas cantidades de humedad (incluso trazas o cantidades extremadamente pequeñas) el SO₃ polimeriza a la forma beta β- SO₃ la cual forma cristales con un brillo sedoso. Luego se forman más uniones generando la estructura alfa α- SO₃, la cual es un sólido cristalino en forma de agujas que se asemeja al asbesto o amianto. Cuando la alfa y la beta se funden generan la gamma.

➤ **Peso molecular**

80,07 g/mol

➤ **Punto de fusión**

SO₃ gamma = 16,86 °C

➤ **Punto triple**

Es la temperatura a la cual están presentes los tres estados físicos: sólido, líquido y gaseoso. En la forma alfa el punto triple es a 62,2 °C y en la beta es a 32,5 °C.

Al calentar la forma alfa esta tiene mayor tendencia a sublimar que a fundirse. Sublimar significa pasar del estado sólido al gaseoso directamente, sin pasar por el estado líquido.

➤ **Punto de ebullición**

Todas las formas del SO_3 hierven a 44,8 °C.

➤ **Densidad**

El SO_3 líquido (gamma) posee una densidad de 1,9225 g/cm³ a 20 °C. El SO_3 gaseoso tiene una densidad de 2,76 relativa al aire (aire = 1), lo que indica que es más pesado que el aire.

➤ **Presión de vapor**

SO_3 alfa = 73 mm Hg a 25 °C

SO_3 beta = 344 mm Hg a 25 °C

SO_3 gamma = 433 mm Hg a 25 °C

Esto significa que la forma gamma tiende a evaporarse más fácilmente que la beta y esta que la alfa.

➤ **Estabilidad**

La forma alfa es la estructura más estable, las otras son metaestables, es decir, son menos estables.

Propiedades químicas

El SO_3 reacciona de forma enérgica con el agua para dar ácido sulfúrico H_2SO_4 . Al reaccionar se produce mucho calor por lo que se desprende rápidamente vapor de agua de la mezcla.

Al estar expuesto al aire el SO_3 absorbe humedad rápidamente, emitiendo vapores densos.

Es un agente deshidratante muy fuerte, esto significa que elimina agua fácilmente de otros materiales.

El azufre del SO_3 posee afinidad por los electrones libres (o sea, electrones que no están en un enlace entre dos átomos) por lo que tiende a formar complejos con compuestos que los poseen como la piridina, la trimetilamina o el dioxano, (Ilustración 6)

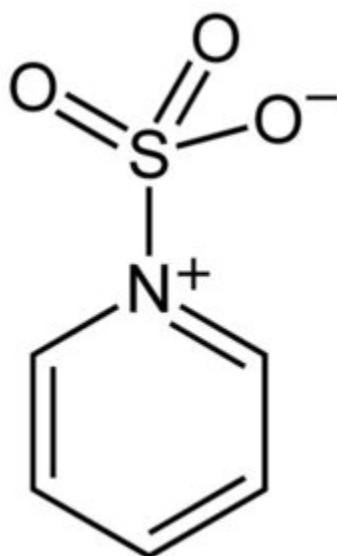


Ilustración 6: Complejo entre el trióxido de azufre y la piridina. Benjah-bmm27 [Public domain]. Fuente: Wikimedia Commons.

Al formar complejos, el azufre toma “prestados” los electrones del otro compuesto para satisfacer su carencia de estos. El trióxido de azufre sigue estando disponible en estos complejos, los cuales se utilizan en reacciones químicas para aportar SO_3 .

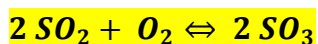
Es un poderoso reactivo sulfonante de compuestos orgánicos, lo que quiere decir que sirve para agregar con facilidad un grupo $-\text{SO}_3^-$ a las moléculas. Reacciona fácilmente con los óxidos de muchos metales para dar sulfatos de dichos metales. Es corrosivo hacia los metales, tejidos animales y vegetales.

El SO_3 es un material difícil de manejar por varias razones:

- ✓ Su punto de ebullición es relativamente bajo
- ✓ Tiene tendencia a formar polímeros sólidos a temperaturas menores a $30\text{ }^\circ\text{C}$
- ✓ Presenta una alta reactividad hacia casi todas las sustancias orgánicas y el agua.
- ✓ Puede polimerizar explosivamente si no contiene un estabilizador y hay presencia de humedad. Como estabilizadores se usan el dimetilsulfato o el óxido de boro.

Obtención

Se obtiene por la reacción a $400\text{ }^\circ\text{C}$ entre el dióxido de azufre SO_2 y el oxígeno molecular O_2 . Sin embargo, la reacción es muy lenta y se requieren catalizadores para aumentar la velocidad de esta.



Entre los compuestos que aceleran esta reacción están el metal platino Pt, el pentóxido de vanadio V_2O_5 , el óxido férrico Fe_2O_3 y el óxido nítrico NO.

Usos

En la preparación de óleum.

Una de sus principales aplicaciones consiste en la preparación de óleum o ácido sulfúrico fumante (Ilustración 7), llamado así porque emite vapores visibles a simple vista. Para obtenerlo se absorbe el SO_3 en ácido sulfúrico concentrado H_2SO_4 .



Ilustración 7: Óleum o ácido sulfúrico fumante. Se puede observar el humo blanco saliendo del frasco. W. Oelen [CC BY-SA 3.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0>)]. Fuente: Wikimedia Commons.

Esto se hace en unas torres especiales de **acero inoxidable** donde el ácido sulfúrico concentrado (el cual es líquido) va bajando y el SO_3 gaseoso va subiendo.

El líquido y el gas entran en contacto y se van uniendo, formando el óleum que es un líquido de apariencia aceitosa. Este posee una mezcla de H_2SO_4 y SO_3 , pero también tiene moléculas de ácido disulfúrico $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ y trisulfúrico $\text{H}_2\text{S}_3\text{O}_{10}$.

En reacciones químicas de sulfonación

La sulfonación es un proceso clave en aplicaciones industriales a gran escala para la fabricación de detergentes, surfactantes, colorantes, pesticidas y productos farmacéuticos.

El SO_3 sirve como agente sulfonante para preparar aceites sulfonados y detergentes alquil-aril-sulfonados, entre muchos otros compuestos. A continuación, se muestra la reacción de sulfonación de un compuesto aromático (Ilustración 8):

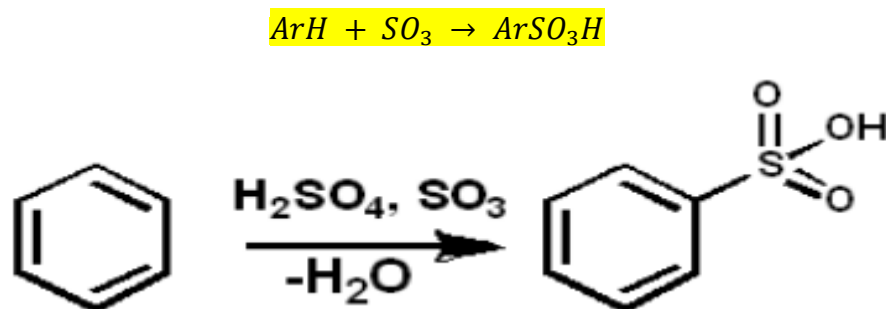


Ilustración 8: Sulfonación del benceno con SO_3 . Pedro8410 [CC BY-SA 3.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0>)]. Fuente: Wikimedia Commons.

Para las reacciones de sulfonación se puede utilizar óleum o SO_3 en forma de sus complejos con piridina o con trimetilamina, entre otros.

En la extracción de metales

El gas SO_3 se ha usado en el tratamiento de minerales. Los óxidos simples de los metales pueden convertirse en los sulfatos mucho más solubles al tratarlos con SO_3 a temperaturas relativamente bajas. (Stea, 2019)

Los minerales de sulfuros como la pirita (sulfuro de hierro), calcosina (sulfuro de cobre) y millerita (sulfuro de níquel) son las fuentes de metales no-ferrosos más económicas, por lo que el tratamiento con SO_3 permite obtener fácilmente estos metales y a bajo costo.

Los sulfuros de hierro, níquel y cobre reaccionan con el gas SO_3 aún a temperatura ambiente, formando los respectivos sulfatos, los cuales son muy solubles y pueden ser sometidos a otros procesos para obtener el metal puro.

En varios usos

El SO_3 sirve para preparar ácido cloro sulfúrico también llamado ácido cloro sulfónico HSO_3Cl .

El trióxido de azufre es un oxidante muy poderoso y se usa en la manufactura de explosivos.

Riesgos

- Para la salud

El SO_3 es un compuesto altamente tóxico por todas las rutas, esto es, inhalación, ingestión y contacto con la piel.

Irrita y corroe las membranas mucosas. Causa quemaduras en la piel y en los ojos. Sus vapores son muy tóxicos al ser inhalados. Se producen quemaduras internas, dificultad para respirar, dolor en el pecho y edema pulmonar. (Ilustración 9), (Stea, 2019)



Ilustración 9: El trióxido de azufre SO_3 es muy corrosivo y peligroso. Autor: OpenIcons. Fuente: Pixabay.

Es venenoso. Su ingestión genera severas quemaduras de boca, esófago y estómago. Además, se sospecha que es carcinógeno.

De incendio o explosión

Representa peligro de incendio al entrar en contacto con materiales de origen orgánico como madera, fibras, papel, aceite, algodón, entre otros, especialmente si están húmedos. También existe riesgo si entra en contacto con bases o agentes reductores. Se combina con agua de forma explosiva, formando ácido sulfúrico.

El contacto con los metales puede producir gas hidrógeno H_2 el cual es muy inflamable.

Debe evitarse calentarlo en vasijas de vidrio para prevenir posible ruptura violenta del recipiente.

Impacto medioambiental

El SO_3 es considerado uno de los mayores contaminantes presentes en la atmósfera terrestre. Esto se debe a su rol en la formación de aerosoles y su contribución a la lluvia ácida (debido a la formación de ácido sulfúrico H_2SO_4).



Ilustración 10: Bosque dañado por lluvia ácida en República Checa. Lovecz [Public domain]. Fuente: Wikimedia Commons.

El SO_3 se forma en la atmósfera por la oxidación del dióxido de azufre SO_2 . Al formarse el SO_3 este reacciona rápidamente con el agua para formar ácido sulfúrico H_2SO_4 . Según estudios recientes, hay otros mecanismos de transformación del SO_3 en la atmósfera, pero debido a la gran cantidad de agua presente en esta se sigue considerando mucho más probable que el SO_3 se convierta principalmente en H_2SO_4 .

El SO_3 gas o los desechos gaseosos industriales que lo contengan no deben ser descargados a la atmósfera debido a que es un contaminante peligroso. Es un gas sumamente reactivo y, como ya se ha dicho anteriormente, en presencia de humedad del aire el SO_3 se convierte en ácido sulfúrico H_2SO_4 . Por lo tanto, en el aire el SO_3 persiste en forma de ácido sulfúrico conformando pequeñas gotitas o aerosol.

Si las gotitas de ácido sulfúrico entran en el tracto respiratorio del ser humano o animales, crecen rápidamente de tamaño debido a la humedad presente allí, por lo que tienen la posibilidad de penetrar en los pulmones. Uno de los mecanismos por los que la niebla ácida de H_2SO_4 (es decir SO_3) puede producir fuerte toxicidad es porque cambia el pH extracelular e intracelular de los organismos vivos (plantas, animales y ser humano).

Según algunos investigadores, la niebla de SO_3 es la causante del aumento de los asmáticos en una zona de Japón. La niebla de SO_3 tiene un efecto muy corrosivo hacia los metales, por lo que las estructuras metálicas construidas por el ser humano como por ejemplo algunos puentes y construcciones se pueden ver muy afectadas.

El SO_3 líquido no debe ser desechado en el drenaje de aguas sucias o las cloacas. Si se vierte hacia las alcantarillas puede crear peligro de incendio o de explosión. Si es derramado por accidente, no debe dirigirse un chorro de agua hacia el producto. Nunca debe absorberse en aserrín u otro absorbente combustible, pues puede generar incendios.

Debe absorberse en arena seca, tierra seca u otro absorbente inerte totalmente seco. El SO_3 no debe ser vertido al ambiente y nunca debe dejarse entrar en contacto con este. Debe mantenerse lejos de fuentes de agua pues con esta produce ácido sulfúrico que es dañino para los organismos acuáticos y terrestres.

Azufre (S)

El azufre es un elemento químico, clasificado dentro del grupo de los no metales, que se encuentra de manera abundante en la naturaleza. Tiene un característico olor a huevo podrido, se presenta en color amarillo limón fuerte, amarronado o anaranjado. Es insoluble en agua, pero soluble en disulfuro de carbono (CS_2), y flamea con llama de color azul emitiendo dióxido de azufre (SO_2). (Dianelys Ondarse, Álvarez, 2022)

Su número atómico 16, su símbolo químico es S. Pertenece al grupo 16, período 3, bloque p de la Tabla Periódica. Su masa atómica es de 32,065(5) u, su configuración electrónica $[Ne] 3s^2 3p^4$, los electrones por nivel 2,8,6; es multivalente y los estados de oxidación comunes son -2, +2, +4, +6.

Características

- Como no metal, se caracteriza por no tener brillo o lustre.
- No refleja la luz y, en su estado natural, se presenta en color amarillo limón.
- Su consistencia es sólida pero blanda y quebradiza.
- Es mal conductor del calor y aislante de la electricidad.
- Su punto de fusión es relativamente bajo.

Propiedades Físicas:

- Estado ordinario: Sólido

- Densidad: 1960 kg/m³
- Punto de fusión: 388,36 K (115 °C)
- Punto de ebullición: 717,87 K (445 °C)
- Entalpía de vaporización: 5 kJ/mol
- Entalpía de fusión: 1,7175 kJ/mol
- Presión de vapor: $2,65 \times 10^{-20}$ Pa a 388 K
- Punto crítico: 1314 K (1041 °C) (20,7 MPa)

Oxígeno (O₂)

Elemento químico gaseoso, símbolo O, número atómico 8 y peso atómico 15.9994. Es de gran interés por ser el elemento esencial en los procesos de respiración de la mayor parte de las células vivas y en los procesos de combustión.

Propiedades Químicas:

El oxígeno es una sustancia química sumamente reactiva, capaz de formar compuestos con casi todos los elementos conocidos con excepción del helio (He) y el neón (Ne). Es el principal de los anfígenos (formadores de ácidos y bases) y sus estados de oxidación son de -2 y -1. (Rodríguez, 2023)

Es un elemento que forma compuestos inflamables y es muy reactivo. En contacto con metales, forma óxidos y corroe las superficies.

- Forma óxidos con los metales alcalinotérreos.
- El aluminio en polvo arde de manera violenta en presencia de oxígeno.
- Oxida al hierro formando el óxido de hierro (III).
- Forma óxidos cuando reacciona con carbono.
- Propiedades físicas del oxígeno

El oxígeno puede condensarse a -182,95 °C y congelarse a -218,79 °C. En condiciones normales de presión y temperatura, el oxígeno se manifiesta como un gas incoloro, inodoro e insípido. Es mucho más soluble en agua que el nitrógeno: el agua dulce contiene alrededor de 6,04 ml de oxígeno por litro, mientras que el agua marina contiene 4,95 ml por litro. Por otro lado, el oxígeno puede condensarse (pasar de gas a líquido) a -182,95 °C y congelarse a -218,79 °C, pasando a ser líquido y sólido respectivamente, con una coloración azul tenue.

Dióxido de Azufre (SO₂)

El dióxido de azufre es un gas incoloro, más pesado que el aire, de olor picante, muy irritante y perceptible desde 1,1 ppm, muy soluble en agua (11,3 g / 100 g de agua a 20°C) y soluble en un gran número de compuestos, como alcoholes, ácido acético, ácido sulfúrico, éter etílico, acetona, tolueno, etc.

A temperatura ambiente y en ausencia de humedad, el dióxido de azufre es un gas relativamente estable y poco reactivo. Su disociación en azufre y trióxido de azufre empieza a temperaturas superiores a 2.000°C. Reacciona violentamente con muchos oxidantes, como peróxidos, cromatos y dicromatos. Con nitratos reacciona formando peróxido de azufre y el sulfato metálico correspondiente. A temperatura

inferior a 60°C, los cloratos forman dióxido de cloro, ClO_2 , pero al aumentar la temperatura la reacción se vuelve explosiva con formación de cloro. No ataca al hierro, acero, plomo, aluminio, cobre, níquel y sus aleaciones, pero ataca fácilmente a los metales alcalinos y al cinc. En presencia de humedad o a temperatura inferior a la temperatura de rocío se convierte en un agente muy corrosivo. A alta temperatura se comporta de forma diferente con los metales, atacando al aluminio y sus aleaciones y al cobre y las suyas. (Ricardo, Estudiando, 2020)

- Factor de conversión: 1 ppm = 2,64 mg/m³
- (20°C y 101,3 kPa)
- Peso molecular: 64,06
- Fórmula molecular: SO_2
- Solubilidad: soluble en agua, soluble en alcohol, ácido acético, éter, ácido sulfúrico y cloroformo.
- Punto de fusión: de -72 a -75,5°C (punto triple)
- Punto de ebullición: -10°C
- Punto crítico: 157,6°C a 7.884 kPa
- Presión de vapor: 225 kPa a 10°C
- Densidad de vapor: 2,26 veces la del aire

Trióxido de Azufre (SO_3)

El trióxido de azufre es un sólido cristalino (como la rena), incoloro a blanco que también puede existir en forma gaseosa o líquida. Se utiliza principalmente como agente sulfatante en la fabricación de detergentes, como desinfectante y conservante, y en la fabricación de baterías y textiles. (Lab, 2023)

El valor del umbral de olor puede variar mucho. No dependa en el olor solamente para determinar una exposición potencialmente peligrosa.

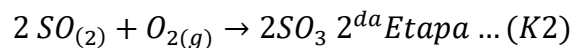
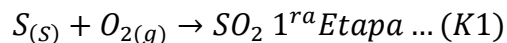
Propiedades Físicas:

- Umbral de olor: 1 ppm
- Punto de inflamación: No combustible
- Densidad de vapor: 2.8 (aire = 1)
- Presión de vapor: 73 mm Hg a 77°F (25°C)
- Densidad relativa: 1.9 (agua = 1)
- Solubilidad en agua: Reacciona
- Punto de ebullición: 113°F (45°C)
- Peso molecular: 80

Mecanismo de reacción del trióxido de azufre

El dióxido de azufre se puede producir quemando azufre fundido en presencia de oxígeno. Una molécula de azufre se combinará con las moléculas de oxígeno para formar el dióxido de azufre.

Si hay exceso de oxígeno, entonces dos moléculas de dióxido de azufre pueden reaccionar con una molécula de oxígeno para formar trióxido de azufre. (González, 2010)



Condiciones de reacción del trióxido de azufre

El trióxido de azufre es el resultado de una oxidación del dióxido de azufre. Esta reacción puede ir hacia atrás o hacia adelante (es una reacción reversible); de modo que el dióxido de azufre se puede oxidar en trióxido de azufre y viceversa. (Rolón, 2023)

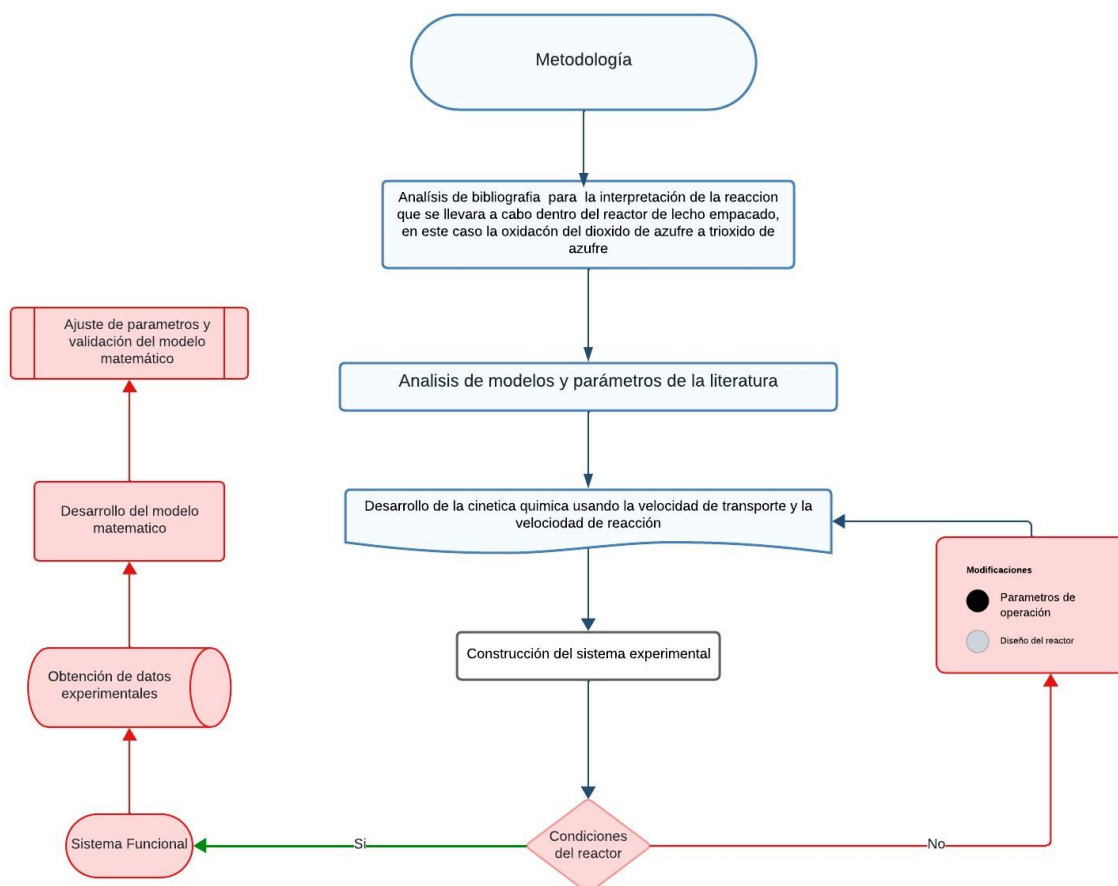
Hay tres condiciones importantes definidas por el proceso que se debe considerar para determinar la velocidad de la reacción:

- Temperatura
- Presión
- Catalizador

Algoritmo de la metodología

El algoritmo de la figura presenta de forma estructurada el orden en que se realizaron las actividades en este trabajo. Los cuadros en rojo representan la etapa de diseño y construcción, así mismo, los cuadros en azul corresponden a la etapa del desarrollo del modelo matemático.

Se inició con la idea de conceptualización del proceso de obtención de trióxido de azufre, partiendo de los modelos matemáticos previamente visto en el libro Ingeniería de las Reacciones Químicas por Levenspiel, posteriormente, implementar estos modelos para las condiciones descritas a lo largo de la metodología. Esta etapa permitió establecer los parámetros fundamentales del diseño del reactor para alcanzar la temperatura deseada. Una vez que se tuvo un sistema funcional, se inició la segunda parte del trabajo que consistió en el desarrollo de un modelo matemático para la determinación del balance del núcleo sin reaccionar utilizando como catalizador el pentóxido de vanadio en forma esférica. La idea fundamental es que dentro del reactor el comportamiento no es homogéneo y, en contraste, existen gradientes de temperatura y concentración de oxígeno. Una vez desarrollado el modelo se implementa en la computadora (EXCEL) y se ajustaron sus parámetros, que permiten al modelo matemático describir el comportamiento del fenómeno.



Actividades realizadas

No.	Actividad
1	Establecer las actividades a realizar durante el proyecto
2	Establecer la reacción que se llevara a cabo dentro del reactor de lecho empacado
3	Definir el volumen del reactor para el cálculo del diámetro y la altura totales del reactor
4	Investigar la importancia en la industria y peligros que representa el trióxido de sodio.
5	Establecer objetivos del “Diseño Teórico de un reactor de lecho empacado para la obtención del trióxido de azufre”
6	Determinar los alcances y limitaciones del reactor de lecho empacado
7	Identificar los impactos esperados y la viabilidad del diseño del reactor de lecho empacado
8	Calcular las dimensiones del reactor aplicando el volumen ya definido
9	Determinar la cinética química de la reacción que se llevara a cabo dentro del reactor de lecho empacado en este caso por la oxidación del dióxido de azufre a trióxido de azufre
10	Aplicar el balance del núcleo sin reaccionar abordando el modelo de velocidad de transporte como etapa controlante empleando un catalizador esférico.
11	Definir la cantidad de SO_3 que se quiere producir para calcular el kg <u>(coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa)</u> de la reacción
12	Despejar el kg <u>(coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa)</u> de la ecuación (2) y sustituir valores en la ecuación (3)
13	Calcular el tiempo de reacción completa del catalizador
14	Calcular r despejando de la siguiente ecuación. $1 - X_B = \left(\frac{r}{R}\right)^3$
15	Calcular la difusividad de la capa ceniza
16	Definir la presión que tendrá el reactor usando la $PV = nRT$
17	Calcular la concentración y masa del catalizador V_2O_5
18	Retomar cálculo de las dimensiones del reactor y definir radio y A_{Total}
19	Elaboración de la metodología aplicada
20	Elaboración del dibujo del diseño del reactor
21	Corrección de las observaciones realizadas al proyecto por parte de los asesores

Tabla 3: Actividades Realizadas.

Criterios de diseño del sistema experimental

Análisis de la cinética química

Para facilitar el análisis de la cinética química usando SO_2 en la reacción actúa como intermediario (Ce) una vez analizado esto aplicaremos un análisis, pero enfocado en la ecuación para velocidad de transporte, se repite el caso con la velocidad de reacción, una vez teniendo estas dos expresiones, sustituiremos $Q_g = Q_s$, despejando C_{SO_2} , una vez despejado sustituiremos C_{SO_2} en Q_{gO_2} , teniendo la siguiente expresión:

$$Q_{gO_2} = k_2 C_{O_2} \sqrt{\frac{k_1 C_s}{k_2}} \dots \dots \dots Ec. (1)$$

Se aplicará el mismo procedimiento, de analizar el modelo matemático y obtener la ecuación, utilizaremos para calcular el tiempo de reacción completo del catalizador, pero en este caso para el balance del núcleo sin reaccionar, usando el modelo velocidad de transporte como etapa controlante empleando un catalizador esférico.

$$= \frac{a * \rho_B}{3bkgC_{Ag}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right] \dots \dots \dots Ec. (2)$$

Como queremos producir 2 Toneladas de SO_3 partiremos de ese dato clave para poder calcular el kg (coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa) de la reacción. Como no contamos con el kg de la ecuación esta se determinará tomando en cuenta que se encuentra en la capa ceniza tomando un tiempo de 10 hrs.

Sacamos el kg (coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa) con los moles que calculamos de O_2 de la siguiente manera, utilizando la fórmula que previamente, sacamos de la cinética química:

$$t = \frac{\rho_B R}{6kgC_{Ag}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right] \dots Ec. 21$$

$$kg = \frac{\rho_B R \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right]}{C_{Ag} t} * \frac{1}{6} \text{ Ecuación final que ocuparemos ... (3)}$$

Ahora calcularemos el tiempo para que todo el catalizador reaccione:

$$\tau = \frac{\rho_B R}{6kgC_{Ag}} \dots \dots \dots Ec. (4)$$

Calcular r, de acuerdo con la siguiente ecuación despejando la variable mencionada:

$$1 - X_B = \left(\frac{r}{R} \right)^3 \dots \dots \dots Ec. (5)$$

$$r^3 = (1 - X_B)R^3$$

$$r = \sqrt[3]{(1 - X_B)R^3} \dots\dots\dots Ec. (6)$$

Sustituyendo

$$r = \sqrt[3]{(1 - 0.85)(0.05cm)^3} = 0.0266 \text{ cm} \dots\dots\dots Ec. (6)$$

Calculamos la difusividad de la capa ceniza, con la siguiente formula:

$$\mathfrak{D} = \frac{\rho_s R^2}{3b C_{O_2}} \left(1 - 3 \left(\frac{r}{R} \right)^2 + 2 \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right) \dots\dots\dots Ec. (7)$$

Calculamos la presión que tendrá el reactor de lecho empacado a las condiciones ya mencionadas. Usando la ley de gases ideales, despejando P para obtener el valor deseado.

$$PV = nRT \dots\dots\dots Ec. (8)$$

Despejamos P:

$$P = \frac{nRT}{V} \dots\dots\dots Ec. (9)$$

Rectificamos que el resultado sea correcto, calculando de la misma forma, pero el volumen

$$V = \frac{nRT}{P} \dots\dots\dots Ec. (10)$$

Regresando a la parte de dimensiones del reactor retomaremos los datos que ya teníamos:

En función de DT (Diámetro Total), despejamos:

$$V = \pi \frac{DT^2}{4} HT = \pi \frac{DT^3}{4}$$

$$DT = \sqrt[3]{\frac{4V}{\pi}} \dots\dots\dots Ec. 11$$

$$\therefore$$

$$r = \frac{d}{2} = \frac{2.34m}{2} = 1.17 \text{ m} \dots\dots\dots Ec. (12)$$

Calculamos la A_{Total} del reactor de acuerdo con la siguiente ecuación

$$A_{Total} = A_{Lateral} + 2 A_{base} \dots\dots\dots Ec. (13)$$

Ecuaciones de diseño.

Velocidades de las reacciones químicas.

Algunas reacciones ocurren muy rápidamente otras muy muy lentamente por ejemplo en la producción de polietileno uno de los plásticos más importantes o en la producción de gasolina a partir de petróleo crudo es deseable que la etapa de reacción se completa en menos de 1 segundo mientras que el tratamiento de aguas residuales la reacción puede durar días.

En la figura que muestran las velocidades relativas a las que ocurren las reacciones para darle una idea de las velocidades relativas o de los valores relativos que ocurren en las plantas de tratamientos de aguas residuales y en los motores de los cohetes esto es equivalente a la diferencia de

1 segundo frente a 3 años

Con tal diferencia por supuesto el diseño de reactores será muy distinto en ambos casos; un ejemplo de esto se puede ver en la Ilustración 11:

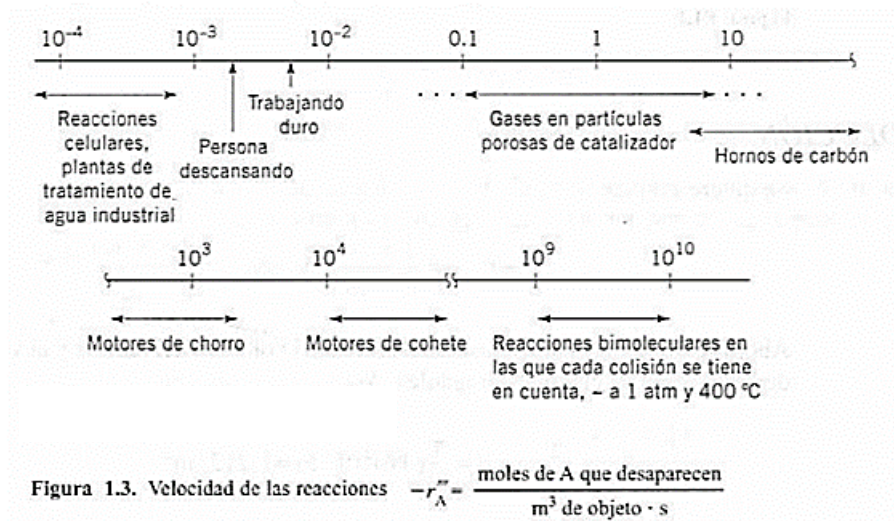


Ilustración 11: Capítulo 1 La ingeniería de las reacciones químicas pág. No. 5, Fuente: Ingeniería de las reacciones químicas, Octave Levenspeil

Complicaciones en la expresión de la velocidad. El sistema está presente más de una fase debe considerarse en la expresión de la velocidad del movimiento de materia de una fase a otra. Así la expresión de velocidad en general incorporará términos referidos a la transferencia además del término usual de reacción química estos términos de transferencia de masa son diferentes tanto en números como en forma para cada sistema heterogéneo por lo tanto no existe una expresión de velocidad que tenga aplicación general.

Velocidad Global para un Proceso Lineal.

El soluto diluido A se difunde a través de una película de líquido en reposo hacia una superficie plana formada por B; allí reacciona para producir R, el cual se contra difunde hacia la corriente principal, como se muestra en la ilustración 12.

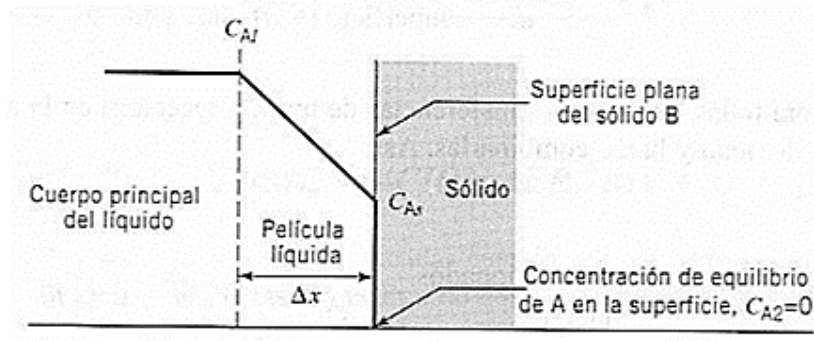
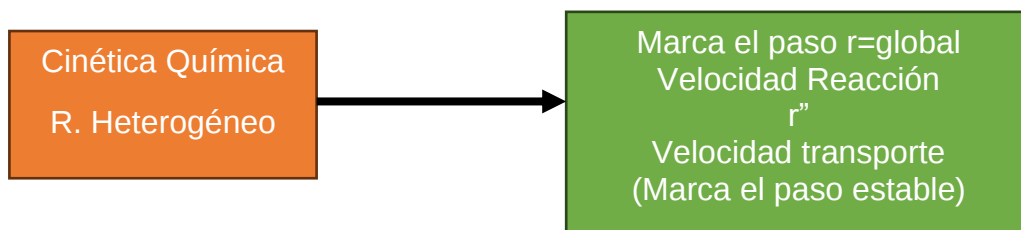


Ilustración 12: Capítulo 17 Introducción a las fracciones heterogéneas pág. No. 372, Fuente: Ingeniería de las reacciones químicas, Octave Levenspeil



$$r_{global} = r_1 + r_2 + \dots + r_n \dots \dots \dots Ec. (14)$$

Estado Estable

$$r_1 = r_2 = r_n \dots \dots \dots Ec. (15)$$

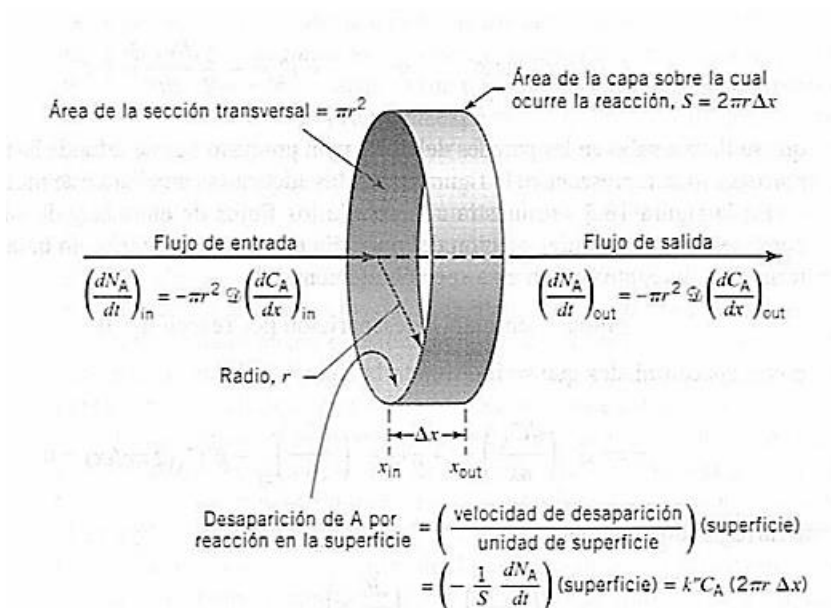


Ilustración 13: Capítulo 18 Reacciones catalizadas por sólidos pág. No. 382, Fuente: Ingeniería de las reacciones químicas, Octave Levenspeil

El proceso de difusión depende del ancho de la capa límite.

Velocidad de transporte/ Depende de la superficie

$$Q_g = \frac{1}{s} \frac{dN_A}{dt} = \frac{-\mathcal{D}}{\Delta x} \dots\dots\dots Ec. (16)$$

N = moles en reactores heterogeneos

$$NRT = PV$$

$$= K_{Cte\ transporte} \Delta C = kg(Cg - Cs) = kg \log(Cg - Cs) \\ kg e(Cg - Cs)$$

Comportamiento externo

$A \rightarrow R$
 $-r_A'' = k'' C_A \epsilon$
 mol/m³ cat · s

... donde ϵ

$\epsilon = \frac{1}{M_T} \cdot \tanh M_T$
 $\epsilon = \frac{1}{M_T} \cdot \frac{I_1(2M_T)}{I_0(2M_T)}$
 $\epsilon = \frac{1}{M_T} \cdot \left(\frac{1}{\tanh 3M_T} - \frac{1}{3M_T} \right)$

Función de Bessel

Ilustración 14: Capítulo 18.3 Partículas porosas de catalizador pág. No. 387, Fuente: Ingeniería de las reacciones químicas, Octave Levenspiel

Desaparición de reactivo

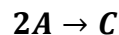
$$r_A = -k_1 C_A C_B \rightarrow \text{Generación de reactivos}$$

$$r_A = -k_1 C_c \rightarrow \text{Generación de productos}$$

Velocidad de reacción

$$Q_s = k_s C_s$$

$$Q_s = \frac{1}{s} \frac{dN_A}{dt} = r'' = k_s C_s^2 \dots\dots\dots Ec. (17)$$



Velocidad transporte

$$Q_g = \frac{1}{s} \frac{dN_A}{dt} = \frac{-\mathcal{D}}{\Delta x} \Delta c = kg(Cg - Cs) \dots\dots\dots Ec. (18)$$

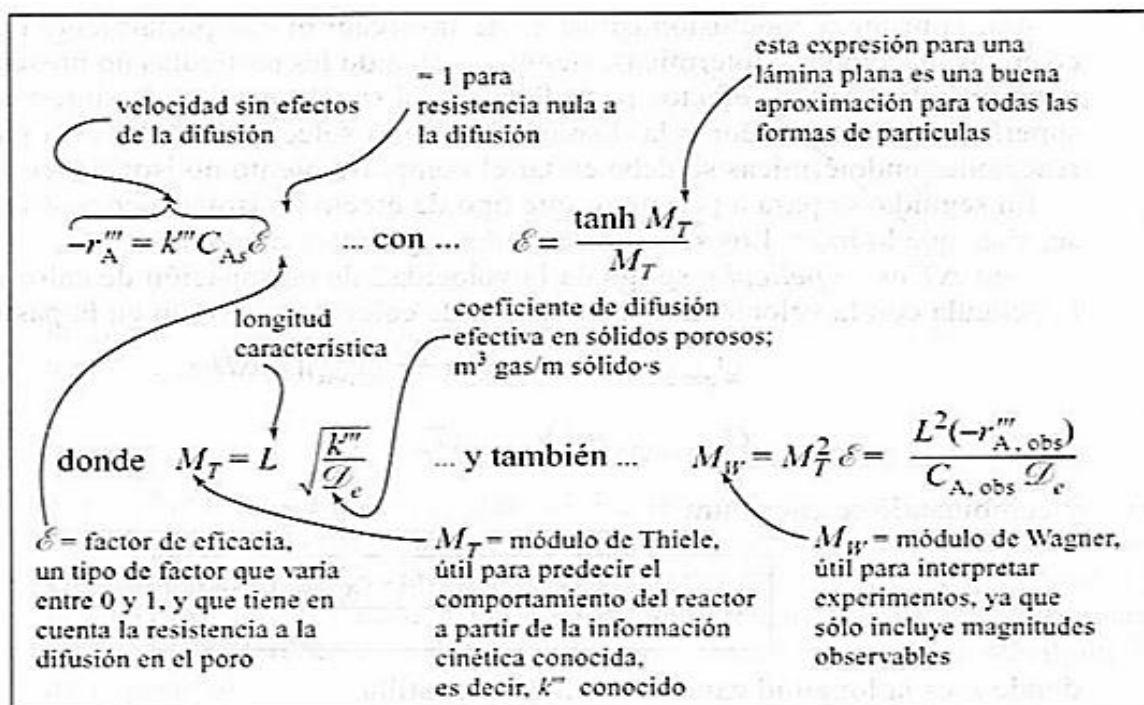


Ilustración 15: Capítulo 18.4 Efectos caloríficos durante la reacción pág. No. 391, Fuente: Ingeniería de las reacciones químicas, Octave Levenspeil

La Ecuación General de Velocidad

Considerar la reacción y la estequiometría como se muestra en la Ilustración 17:

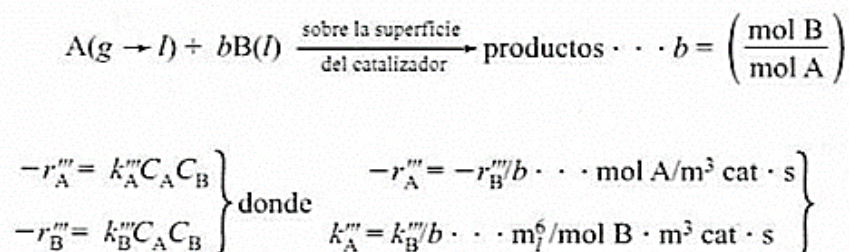


Ilustración 16: Capítulo 22 Reacciones G/L sobre catalizadores sólidos: reactores de goteo, reactores con sólidos en suspensión y reactores fluidizados de 3 fases pág. No. 500, Fuente: Ingeniería de las reacciones químicas, Octave Levenspeil

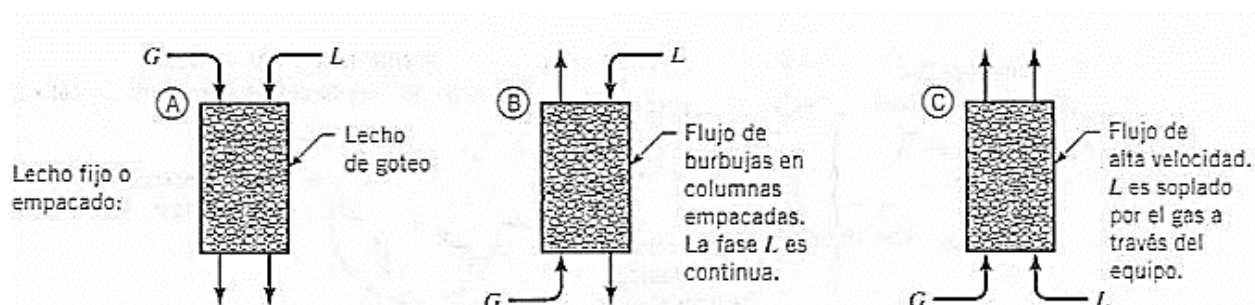
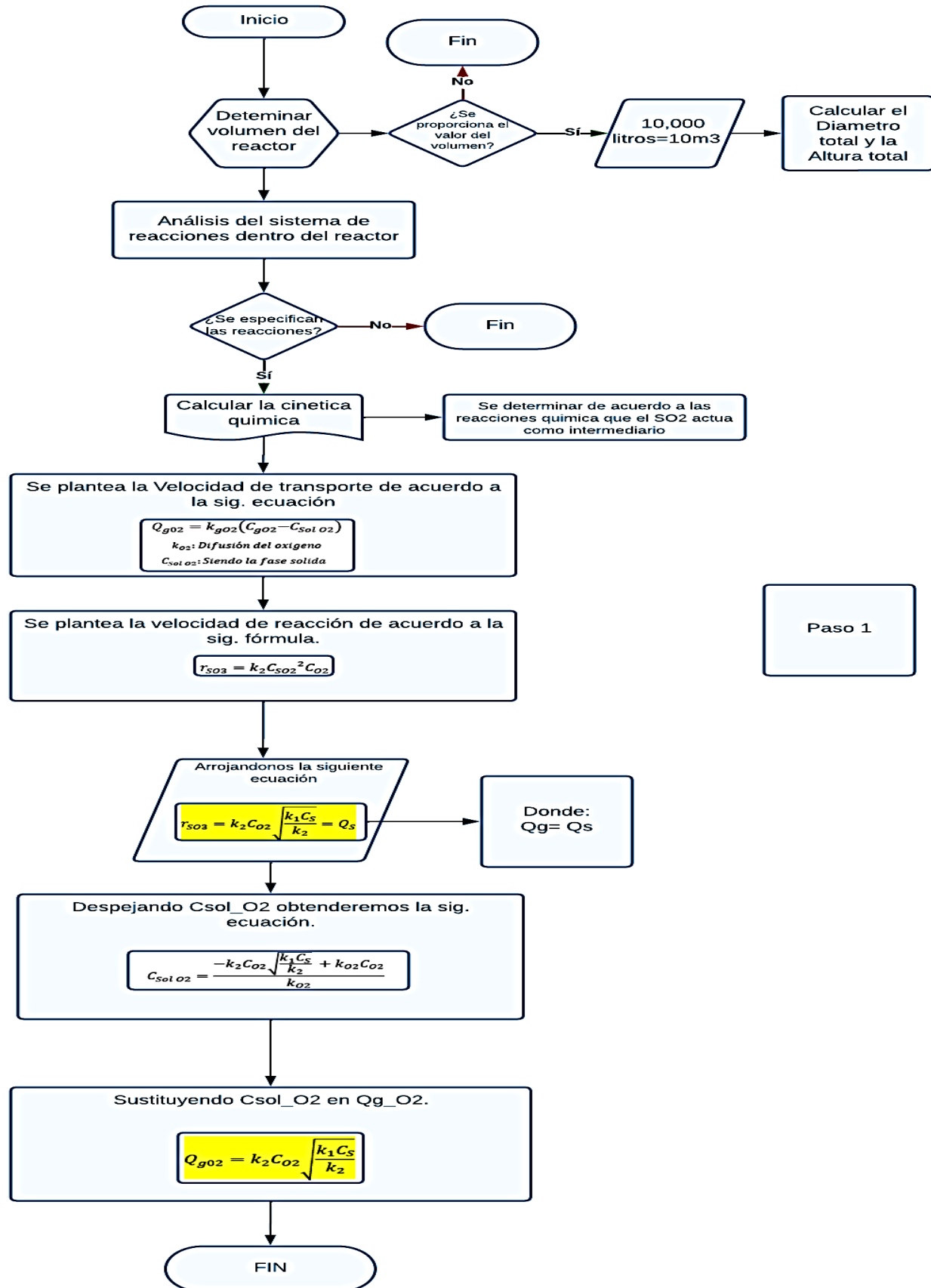
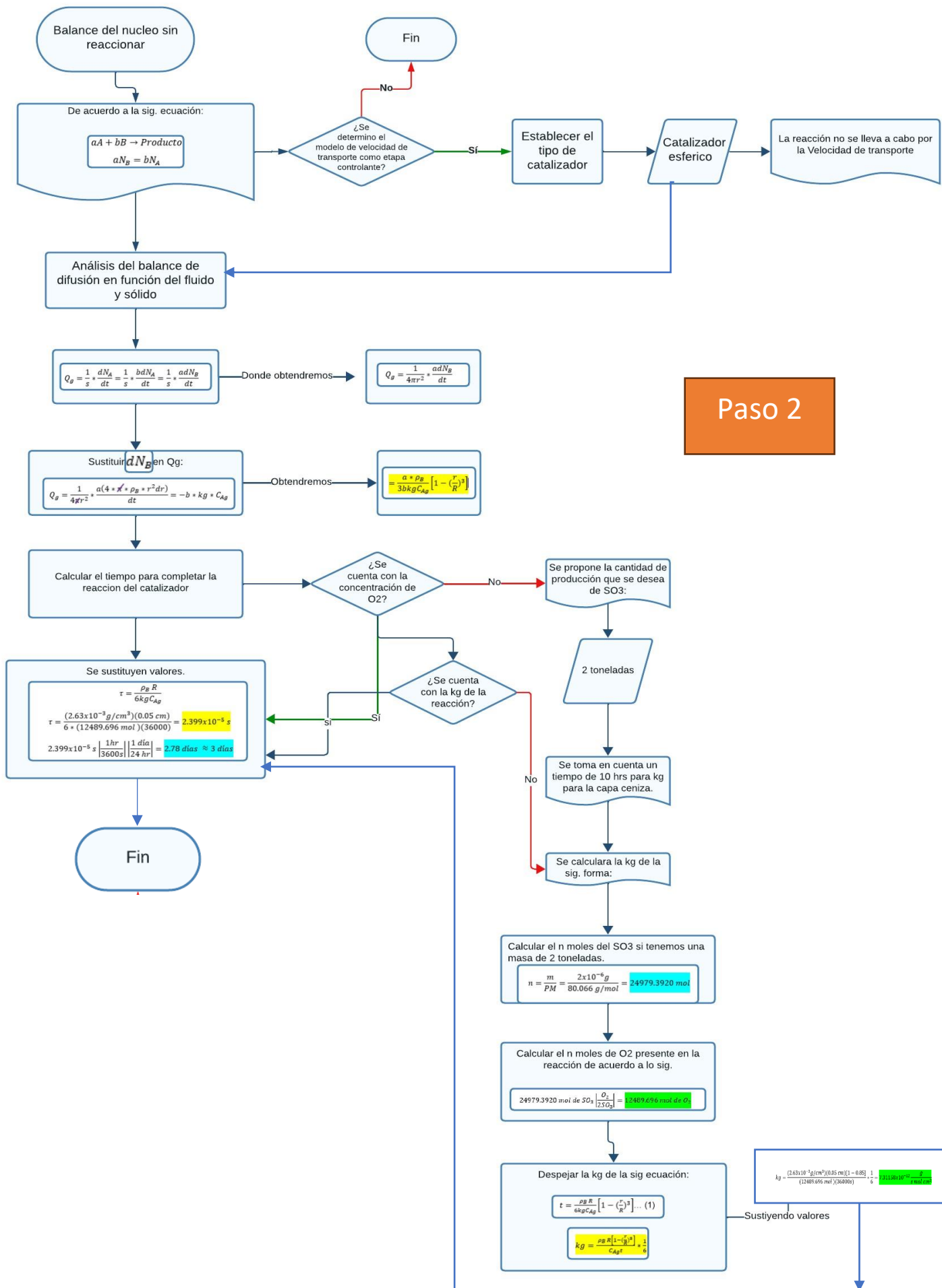


Ilustración 17: Capítulo 22.1 La ecuación general de velocidad pág. No. 501, Fuente: Ingeniería de las reacciones químicas, Octave Levenspeil

Reactor de Lecho empacado

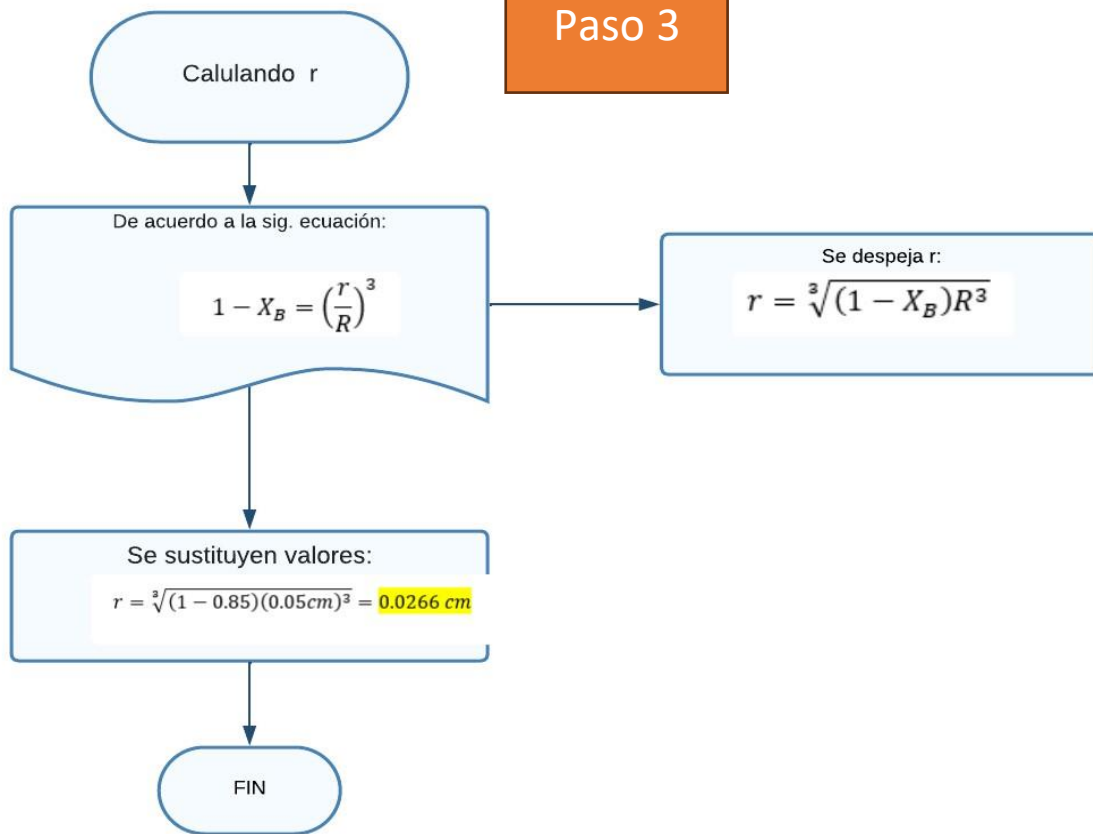
Metodología.



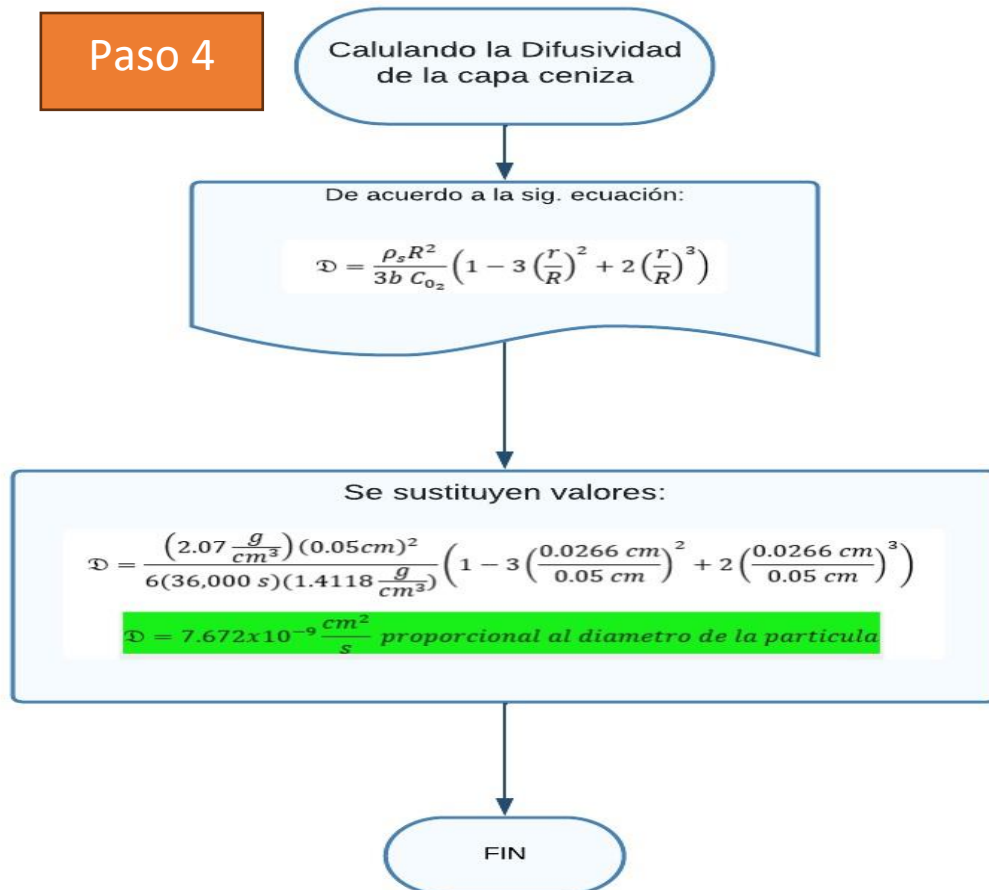


Paso 2

Paso 3



Paso 4



Calculando la presión del reactor

De acuerdo a la sig. ecuación:

$$PV = nRT$$

Paso 5

Despejamos P y sustituimos valores:

$$P = \frac{nRT}{V} = \frac{24.9794 \text{ kmol} \cdot 0.082057 \frac{\text{atm} \cdot \text{m}^3}{\text{kmolK}} \cdot 788.15 \text{ K}}{10 \text{ m}^3} = 161.55 \text{ atm}$$

Verificamos resultado empleando la misma formula

Despejando V

$$V = \frac{nRT}{P} = \frac{24.9794 \text{ kmol} \cdot 0.082057 \frac{\text{atm} \cdot \text{m}^3}{\text{kmolK}} \cdot 788.15 \text{ K}}{161.55 \text{ atm}} = 10 \text{ m}^3 = 10000 \text{ litros}$$

FIN

Paso 6

Calculo de CAg del catalizador y masa al 100% y al 85% de capacidad

Calculamos CAg de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$C_{AG} = \frac{2000 \text{ kg}}{10000 \text{ L}} = 0.20 \frac{\text{kg}}{\text{L}}$$

FIN

Calculando masa de acuerdo a la sig. ecuación despejamos m:

$$\rho = \frac{m}{V} \rightarrow m = \rho * V \text{ Catalizador}$$
$$3.36 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} = 3.36 \frac{\text{kg}}{\text{L}}$$

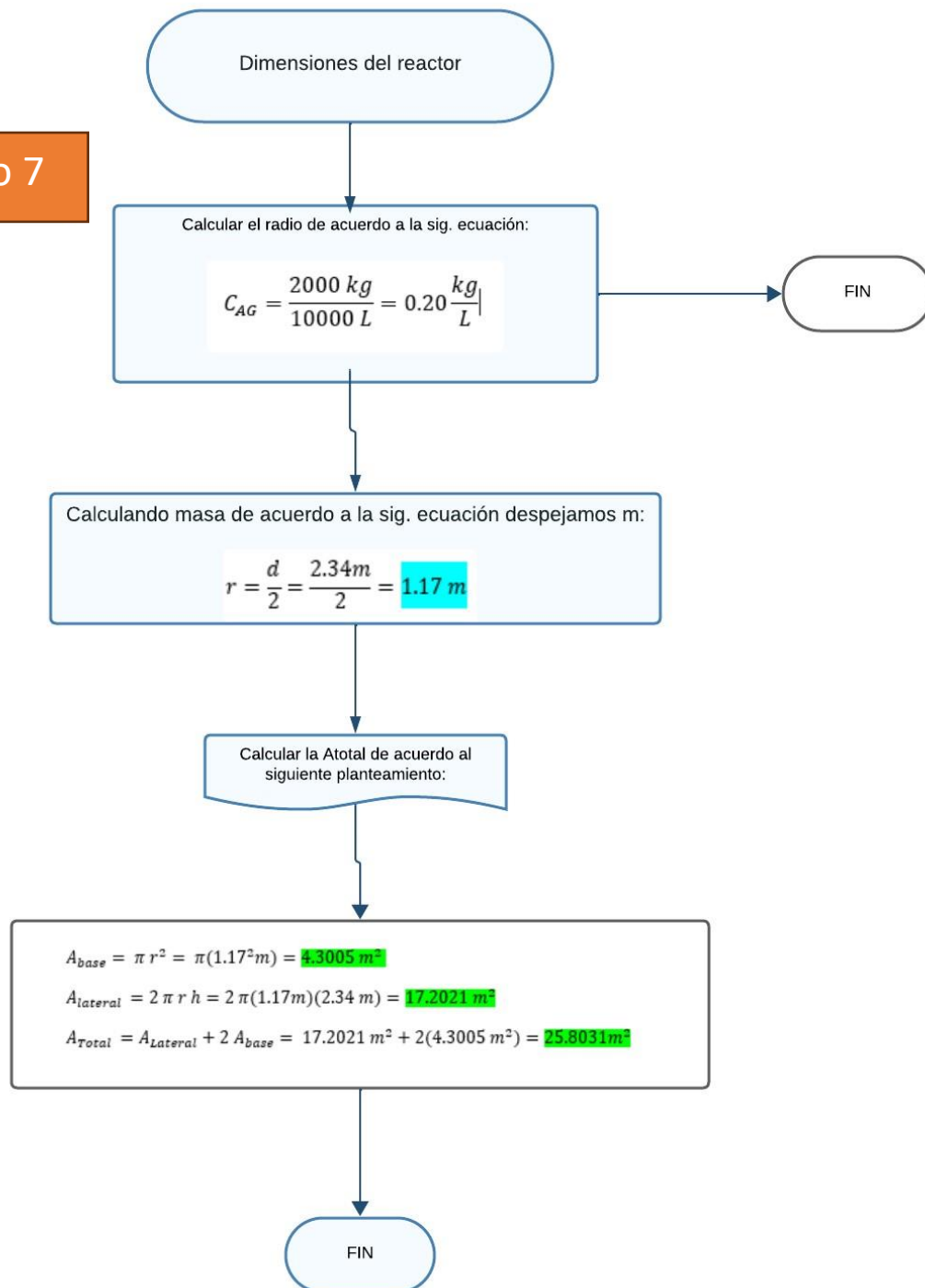
Sustituyendo valores:

$$m = 3.36 \frac{\text{kg}}{\text{L}} (10,000 \text{ L}) = 33600.0 \text{ kg al } 100\% \text{ de capacidad del reactor}$$

$$m = 3.36 \frac{\text{kg}}{\text{L}} (8,500 \text{ L}) = 28560.0 \text{ kg al } 85\% \text{ de capacidad del reactor}$$

FIN

Paso 7



Resultados.

Para calcular las dimensiones del reactor aplicaremos la siguiente relación:

Nota: En este caso solo se hará el cálculo de dimensiones, ya que el reactor que se necesita para lograr la reacción y la formación de productos no es necesario un agitador o propela.

$$V = 10,000 \text{ L} = 10\text{m}^3$$

$$V = \pi r^2 h$$

$$V = \pi \frac{d^2}{4} h = \pi \frac{DT^2}{4} HT$$

$$\frac{HT}{DT} = 1; HT = DT$$

En función de la Ec. 11

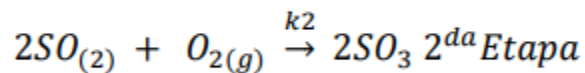
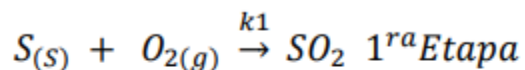
$$DT = \sqrt[2]{\frac{4V}{\pi}}$$

Sustituimos valores:

$$DT = \sqrt[2]{\frac{4(10\text{m}^3)}{\pi}} = 2.34 \text{ m de diametro total y altura total}$$

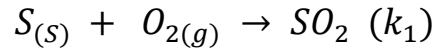
$$HT = DT$$

Reacción que se llevara a cabo dentro del reactor de lecho empacado.

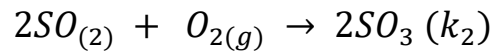


Oxidación del dióxido de azufre a trióxido de azufre

Cinética Química



SO_2 en la reacción actúa como intermediario (Ce)



Velocidad de Transporte

$$Q_{gO_2} = k_{gO_2} (C_{gO_2} - C_{sol O_2})$$

k_{O_2} : Difusión del oxígeno

$C_{sol O_2}$: Siendo la fase sólida

Velocidad de Reacción

$$r_{SO_3} = k_2 C_{SO_2}^2 C_{O_2}$$

$$r_{SO_2} = k_1 C_S C_{O_2} - k_2 C_{SO_2}^2 C_{O_2} = 0$$

$$C_{SO_2}^2 = \frac{k_1 C_S C_{O_2}}{k_2 C_{O_2}}$$

$$C_{SO_2} = \sqrt{\frac{k_1 C_S}{k_2}}$$

$$r_{SO_3} = k_2 C_{O_2} \sqrt{\frac{k_1 C_S}{k_2}} = Q_S$$

$$Q_g = Q_s$$

$$k_{O_2} C_{O_2} - k_{O_2} C_{sol O_2} = k_2 C_{O_2} \sqrt{\frac{k_1 C_S}{k_2}}$$

Despejando $C_{sol O_2}$

$$-k_{O_2} C_{sol O_2} = k_2 C_{O_2} \sqrt{\frac{k_1 C_S}{k_2}} - k_{O_2} C_{O_2} \quad (-)$$

$$k_{O_2} C_{Sol\ O_2} = -k_2 C_{O_2} \sqrt{\frac{k_1 C_S}{k_2}} + k_{O_2} C_{O_2}$$

$$C_{Sol\ O_2} = \frac{-k_2 C_{O_2} \sqrt{\frac{k_1 C_S}{k_2}} + k_{O_2} C_{O_2}}{k_{O_2}}$$

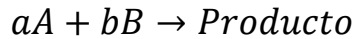
Sustituyendo $C_{Sol\ O_2}$ en Q_{gO_2}

$$Q_{gO_2} = k_{gO_2} \left(C_{O_2} - \left(\frac{-k_2 C_{O_2} \sqrt{\frac{k_1 C_S}{k_2}} + k_{O_2} C_{O_2}}{k_{O_2}} \right) \right)$$

$$Q_{gO_2} = \cancel{k_{gO_2}} \left(\frac{\cancel{C_{O_2} k_{O_2}} + k_2 C_{O_2} \sqrt{\frac{k_1 C_S}{k_2}} - \cancel{k_{O_2} C_{O_2}}}{\cancel{k_{O_2}}} \right)$$

$$Q_{gO_2} = k_2 C_{O_2} \sqrt{\frac{k_1 C_S}{k_2}} \dots\dots\dots Ec. (19)$$

Balance del núcleo sin reaccionar.



$$aN_B = bN_A$$

Modelo Velocidad de transporte como etapa controlante

Catalizador esférico

$$Q_g = \frac{1}{s} * \frac{dN_A}{dt} = \frac{1}{s} * \frac{bdN_A}{dt} = \frac{1}{s} * \frac{adN_B}{dt}$$

$$Q_g = \frac{1}{4\pi r^2} * \frac{adN_B}{dt}$$

$$Q_g = \frac{1}{4\pi r^2} * \frac{bdN_A}{dt} = -b * kg(C_{Ag} - C_{As}) = -b * kg * C_{Ag}$$

$$N_B = \rho_B V_B$$

$$N_B = \rho_B \frac{4}{3} \pi r^3$$

$$dN_B = \frac{4}{3} * \pi * \rho_B * dr^3 = \frac{4}{3} * \pi * \rho_B * 3r^2 dr$$

$$N_B = 4 * \pi * \rho_B * r^2 dr$$

$$Q_g = \frac{1}{4\pi r^2} * \frac{adN_B}{dt}$$

Sustituyendo dN_B en Q_g

$$Q_g = \frac{1}{4\pi r^2} * \frac{a(4 * \pi * \rho_B * r^2 dr)}{dt} = -b * kg * C_{Ag}$$

$$= \frac{a\rho_B r^2 dr}{R^2 dt} = -b * kg * C_{Ag}$$

$$= -\frac{a * \rho_B}{bkgC_{Ag}R^2} \int_R^r r dr = \int_0^t dt$$

$$= -\frac{a * \rho_B}{bkgC_{Ag}R^2} \left[\frac{r^3}{3} - \frac{R^3}{3} \right] = [t - 0]$$

$$= \frac{a * \rho_B}{3bkgC_{Ag}R^2} [R^3 - r^3]$$

$$= \frac{a * \rho_B}{3bkgC_{Ag}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right] \dots\dots\dots Ec. (20)$$

Cálculo del tiempo para la completa reacción del catalizador.

$$\tau = \frac{a \rho_B R}{3bk_g C_{Ag}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right] \dots\dots\dots Ec. (20)$$

Nota: Como en este caso no contamos con la concentración del O_2 se procederá a calcular de la siguiente manera:

Como queremos producir 2 Toneladas de SO_3 partiremos de ese dato clave para poder calcular el k_g (coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa) de la reacción

Datos:

$$V = 10,000 \text{ L al } 85\% \text{ de eficiencia del reactor} \rightarrow 8500 \text{ L} = 8.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^3$$

$$\rho_s = 2.07 \text{ g/cm}^3$$

$$\rho_{V_2O_5} = 3.36 \text{ g/cm}^3$$

$$R = 0.05 \text{ cm}$$

$$PM_{SO_3} = 80.066 \text{ g/mol}$$

$$\rho_{O_2} = 1.43 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{Flujo} = 20 \text{ L/h}$$

$$\rho_{SO_3} = 2.63 \text{ g/cm}^3$$

$$X_B = 0.85$$

$$T = 588.15 \text{ K}$$

$$t = 10 \text{ hrs}$$

$$2 \text{ ton} = 2000 \text{ kg} = 2 \times 10^{-6} \text{ g}$$

Como no contamos con el k_g (coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa) de la ecuación esta se determinará de la siguiente forma tomando en cuenta que se encuentra en la capa ceniza tomando un tiempo de 10 hrs

$$n = \frac{m}{PM} = \frac{2 \times 10^{-6} \text{ g}}{80.066 \text{ g/mol}} = 24979.3920 \text{ mol}$$

$\therefore$

$$24979.3920 \text{ mol de } SO_3 \left| \frac{O_2}{2SO_3} \right| = 12489.696 \text{ mol de } O_2$$

Ahora ya podemos sacar el k_g (coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa) con los moles que calculamos de O_2 de la siguiente manera, utilizando la fórmula que previamente, sacamos de la cinética química:

$$t = \frac{\rho_B R}{6k_g C_{Ag}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right] \dots\dots\dots Ec. (2)$$

Despejamos el kg (coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa) de la ecuación (2):

$$t = \frac{\rho_B R}{6kgC_{Ag}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right] \rightarrow \frac{t}{\left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right]} = \frac{\rho_B R}{6kgC_{Ag}}$$

$$\frac{t}{\left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right]} = \frac{\rho_B R}{6kgC_{Ag}} \rightarrow \frac{6kgC_{Ag}t}{\left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right]} = \rho_B R$$

$$kg = \frac{\rho_B R \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right]}{C_{Ag}t} * \frac{1}{6} \text{ Ecuación final que ocuparemos ... (3)}$$

$$kg = \frac{\rho_B R \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right]}{C_{Ag}t} * \frac{1}{6}$$

$$t = 10hrs \left| \frac{3600s}{1hrs} \right| = 36,000 s$$

$$kg = \frac{(2.63 \times 10^{-3} g/cm^3)(0.05 cm)[1 - 0.85]}{(12489.696 mol)(36000s)} * \frac{1}{6} = 7.31158 \times 10^{-12} \frac{g}{s mol cm^2}$$

Ahora calcularemos el tiempo para que todo el catalizador reaccione:

$$\tau = \frac{\rho_B R}{6kgC_{Ag}} \dots\dots\dots Ec. (4)$$

$$\tau = \frac{(2.63 \times 10^{-3} g/cm^3)(0.05 cm)}{6 * (12489.696 mol)(36000)} = 2.399 \times 10^{-5} s$$

$$2.399 \times 10^{-5} s \left| \frac{1hr}{3600s} \right| \left| \frac{1 día}{24 hr} \right| = 2.78 días \approx 3 días$$

Calculando r:

$$1 - X_B = \left(\frac{r}{R} \right)^3$$

$$r^3 = (1 - X_B)R^3$$

$$r = \sqrt[3]{(1 - X_B)R^3} \dots\dots\dots Ec. (6)$$

Sustituyendo

$$r = \sqrt[3]{(1 - 0.85)(0.05cm)^3} = 0.0266 cm$$

Para calcular la difusividad de la capa ceniza, con la siguiente formula:

$$D = \frac{\rho_s R^2}{3b C_{O_2}} \left(1 - 3 \left(\frac{r}{R} \right)^2 + 2 \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right) \dots\dots\dots Ec. (7)$$

Sustituyendo valores en la formula anterior para capa ceniza tenemos:

$$D = \frac{\left(2.07 \frac{g}{cm^3} \right) (0.05 cm)^2}{6(36,000 s)(1.4118 \frac{g}{cm^3})} \left(1 - 3 \left(\frac{0.0266 cm}{0.05 cm} \right)^2 + 2 \left(\frac{0.0266 cm}{0.05 cm} \right)^3 \right)$$

$$D = 7.672 \times 10^{-9} \frac{cm^2}{s} \text{ proporcional al diametro de la particula}$$

Ahora haremos lo siguiente para poder calcular la presión que tendría el reactor de lecho empacado a las condiciones ya mencionadas.

Datos:

$$V = 10,000 \text{ L al } 85\% \text{ de eficiencia del reactor} \rightarrow 8500 \text{ L} = 8.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^3 = 10 \text{ m}^3$$

$$T = 788.15 \text{ K}$$

$$\text{Flujo} = 20 \text{ L/h}$$

$$2 \text{ ton} = 2000 \text{ kg} = 2 \times 10^{-6} \text{ g}$$

$$24979.3920 \text{ mol} = 24.9794 \text{ kmol de } SO_3$$

$$\rho_{V_2O_5} = 3.36 \text{ g/cm}^3$$

$$X_B = 0.85$$

$$R = 0.082057 \frac{atm \cdot m^3}{kmol \cdot K}$$

$$t = 10 \text{ hrs}$$

Calculamos la presión de la siguiente forma:

$$PV = nRT \dots\dots\dots Ec. (8)$$

Sustituimos valores en Ec. (9)

$$P = \frac{nRT}{V} \dots\dots\dots Ec. (9)$$

$$P = \frac{nRT}{V} = \frac{24.9794 \text{ kmol} * 0.082057 \frac{atm \cdot m^3}{kmol \cdot K} * 788.15 \text{ K}}{10 \text{ m}^3} = 161.55 \text{ atm}$$

Rectificamos que el resultado sea correcto, sustituyendo valores en la Ec. (10):

$$V = \frac{nRT}{P} \dots\dots\dots Ec. (10)$$

$$V = \frac{nRT}{P} = \frac{24.9794 \text{ kmol} * 0.082057 \frac{atm \cdot m^3}{kmol \cdot K} * 788.15 \text{ K}}{161.55 \text{ atm}} = 10 \text{ m}^3 = 10000 \text{ litros}$$

$$\frac{n}{V} = \frac{24.9794 \text{ kmol}}{10000 \text{ litros}} = 0.0025 \frac{\text{kmol}}{L} \text{ de } SO_3$$

Para el catalizador del $V_2O_5=3.36 \text{ kg/l}$

$$C_{AG} = \frac{2000 \text{ kg}}{10000 L} = 0.20 \frac{\text{kg}}{L}$$

$$\rho = \frac{m}{V} \rightarrow m = \rho * V \text{ Catalizador}$$

$$3.36 \frac{g}{cm^3} = 3.36 \frac{kg}{L}$$

$$m = 3.36 \frac{kg}{L} (10,000 L) = 33600.0 \text{ kg al } 100\% \text{ de capacidad del reactor}$$

$$m = 3.36 \frac{kg}{L} (8,500 L) = 28560.0 \text{ kg al } 85\% \text{ de capacidad del reactor}$$

Regresando a la parte de dimensiones del reactor retomaremos los datos que ya teníamos:

$$V = 10,000 L = 10m^3$$

$$V = \pi r^2 h$$

$$V = \pi \frac{d^2}{4} h = \pi \frac{DT^2}{4} HT$$

$$\frac{HT}{DT} = 1; HT = DT$$

$$DT = 2.34 \text{ m de diametro total y altura total } HT = DT$$

∴

$$r = \frac{d}{2} = \frac{2.34m}{2} = 1.17 m \dots\dots\dots Ec. (12)$$

$$A_{base} = \pi r^2 = \pi(1.17^2 m) = 4.3005 m^2 \dots\dots\dots Ec. (22)$$

$$A_{lateral} = 2 \pi r h = 2 \pi(1.17m)(2.34 m) = 17.2021 m^2 \dots\dots\dots Ec. (23)$$

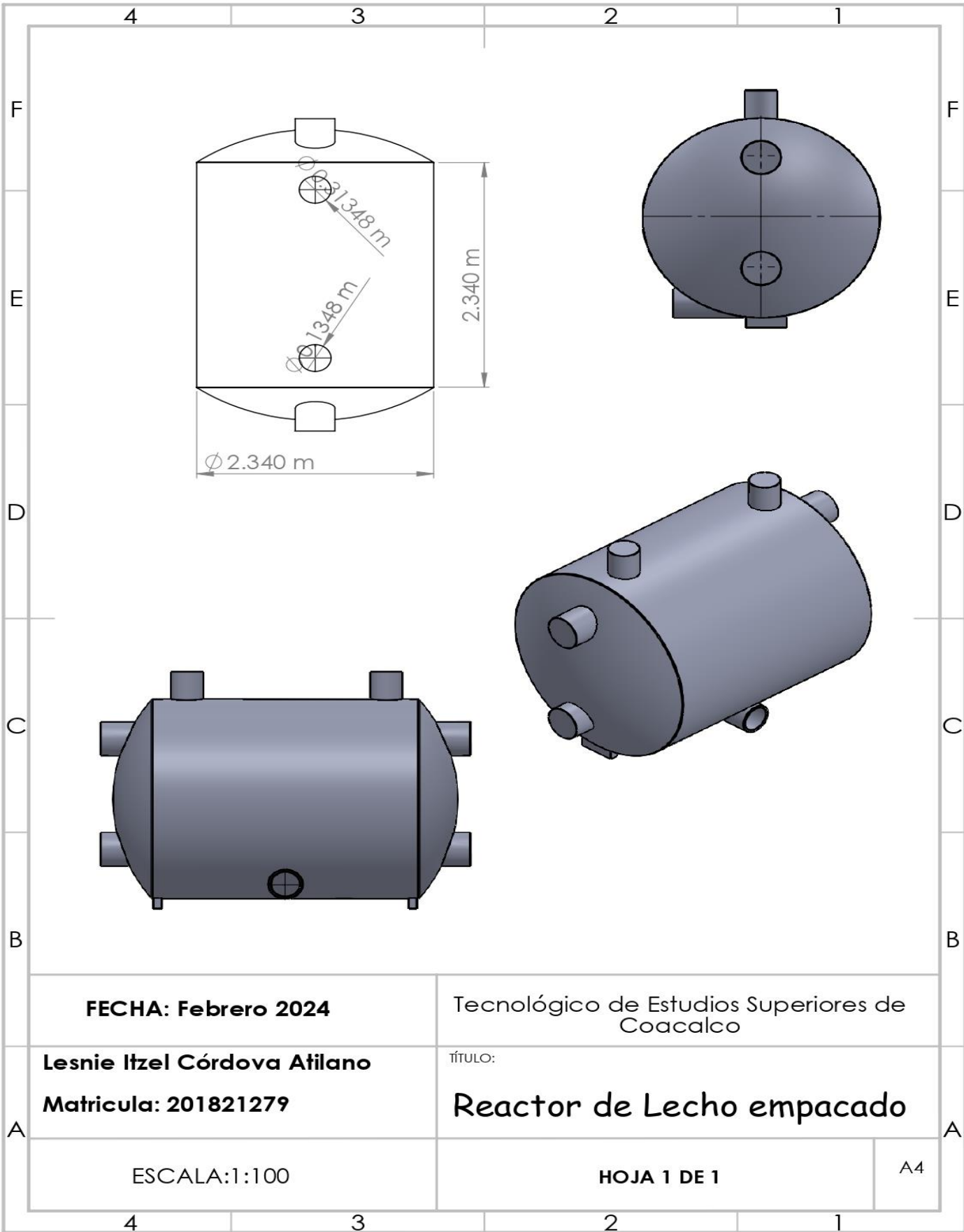
$$A_{Total} = A_{Lateral} + 2 A_{base} = 17.2021 m^2 + 2(4.3005 m^2) = 25.8031 m^2 \dots\dots\dots Ec. (13)$$

Parámetros y datos calculados del reactor de lecho empacado.

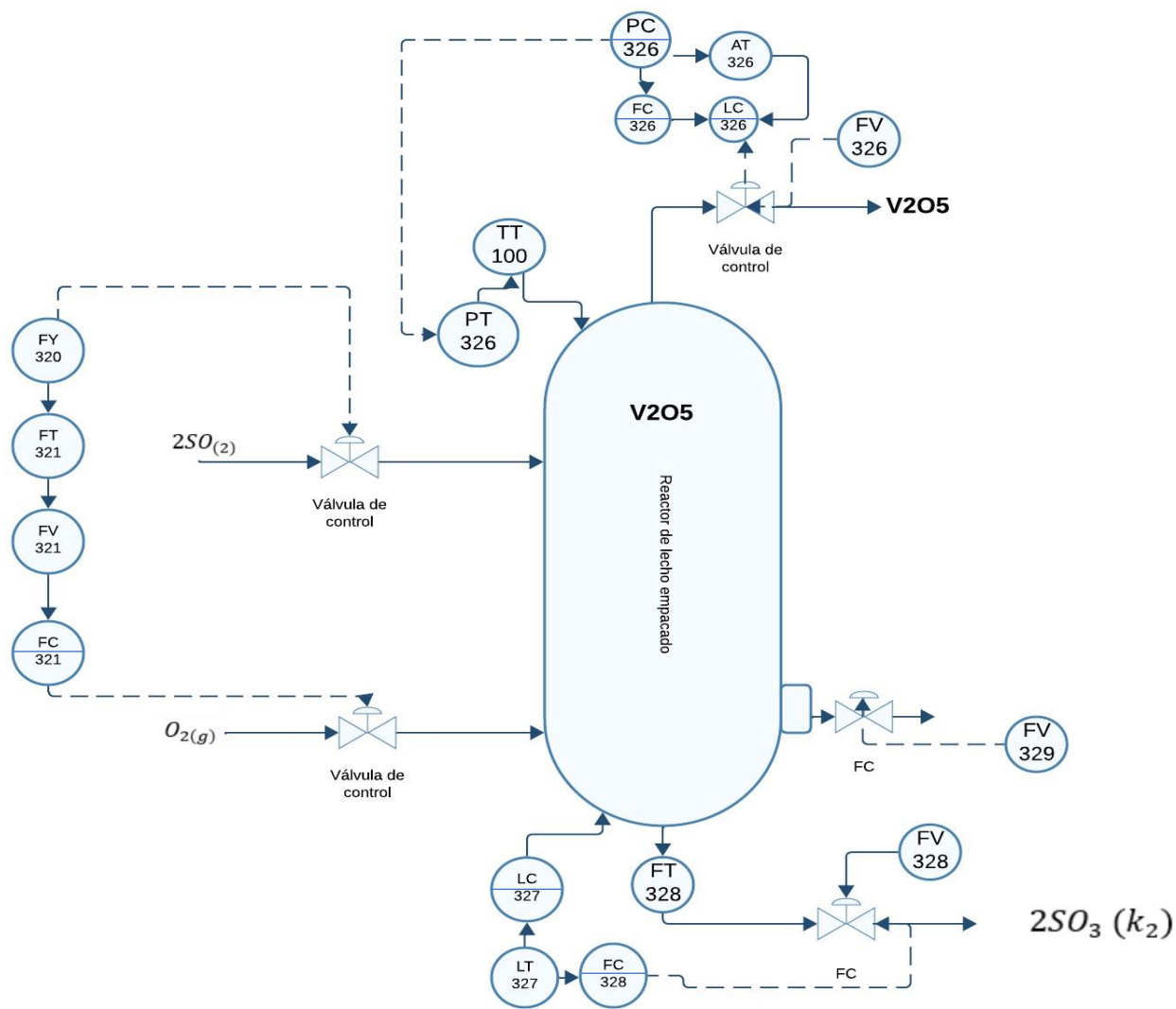
DT	2.34 m de diametro total y altura total
n	24979.3920 mol total de la reacción = 24.9794 kmol de SO ₃
n	12489.696 mol de O ₂
t	36,000 s = 10 hrs
kg	$7.31158 \times 10^{-12} \frac{g}{s \text{ mol cm}^2}$
τ	$2.399 \times 10^{-5} s = 2.78 \text{ días} \approx 3 \text{ días}$
r	0.0266 cm
$\mathfrak{D}$	$7.672 \times 10^{-9} \frac{\text{cm}^2}{s}$ proporcional al diametro de la particula
P	161.55 atm
V	10 m ³ = 10,000 litros
T	515 °C= 788.15 K
m	2 ton = 2000 kg = $2 \times 10^{-6} g$
V al 85% de eficiencia del reactor	8500 L = $8.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^3$
$\frac{n}{V}$	$0.0025 \frac{\text{kmol}}{L}$ de SO ₃
C_{AG}	$0.20 \frac{kg}{L}$
ρ	$3.36 \frac{kg}{L}$
$m_{100\%}$	33600.0 kg al 100% de capacidad del reactor
$m_{85\%}$	28560.0 kg al 85% de capacidad del reactor
r	1.17 m
A_{base}	4.3005 m ²
$A_{lateral}$	17.2021 m ²
A_{Total}	25.8031 m ²
ρ_s	2.07 g/cm ³
$\rho_{V_2O_5}$	3.36 g/cm ³
ρ_{O_2}	1.43 g/cm ³
ρ_{SO_3}	2.63 g/cm ³
PM _{so3}	80.066 g/mol
R	0.05 cm
R	$0.082057 \frac{\text{atm} * \text{m}^3}{\text{kmol K}}$
X _B	0.85
Flujo	20 L/h
π	3.1416

Tabla 4: Parámetros y datos calculados del reactor de lecho empacado.

Diseño del reactor-Dimensiones e instrumentación



Instrumentación.



TT
100

Sensor de Temperatura

FV
321

Válvula que mide el caudal

FT
321

Transmisor de Caudal

LC
327

Controlador de nivel

FC
321

Controlador de caudal

FY
320

Revelador de caudal

LT
327

Transmisor de nivel

AT
326

Transmisor de Análisis

PT
326

Transmisor de presión

PC
326

Controlador de presión

Conclusiones

En la literatura se presenta variedad de modelos matemáticos que intentan caracterizar la teoría de la cinética química para diferentes reacciones en reactores de lecho empacado.

Estos modelos han tenido en cuenta desde sus inicios, fenómenos tales como dispersión, difusión y convección, entre otros. Se han analizado biorreactores a través de modelos clásicos como son el de difusión de poro y el homogéneo, considerando reactor de flujo pistón, hasta más complicados, como son los modelos heterogéneos.

Todos ellos difieren entre sí, ya que dependen de la geometría del reactor a analizar, Es por esto por lo que se hace necesario para un diferente proceso o reactor a modelar, generar un nuevo modelo, dependiendo de la complejidad y acercamiento a la realidad que se requiera para la simulación del proceso, las variables de operación que se trabajen, la cinética y simplificaciones escogidas para el proceso en sí.

Se logro obtener la cinética química para el Diseño Teórico para el reactor de lecho empacado con el fin de obtener el trióxido de sodio, siendo esta la reacción propuesta para comenzar con la cinética de la reacción. El sistema de lecho fijo construido permite estudiar el comportamiento de la reacción de Oxidación del dióxido de azufre a trióxido de azufre, teniendo en cuenta que todo esto se parte de la cinética química, despejando variables que se necesitaran a lo largo del cálculo, de igual forma permite evaluar el pentóxido de vanadio como catalizador. En este sistema, el lecho tiene un efecto filtrante y atrapa los sólidos suspendidos del agua, debido al medio poroso. La teoría diseñada resulto ser un método de mediana complejidad con el que se resolvieron las variables faltantes para conocer el tiempo de reacción del catalizador que nos dio como resultado 3 días, así como la constante de velocidad de la etapa controlante (k) la cual era fundamental para poder continuar con el cálculo en la cinética química y poder despejar las variables y conocer el kg (coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa) de la reacción.

La cinética modificada en este trabajo con la adición del kg (coeficiente de transferencia de masa para la película gaseosa) de la reacción, y el coeficiente de difusión molecular del catalizador en forma esférica nos permitió describir de manera adecuada el comportamiento de la concentración de oxígeno y del trióxido de azufre al mismo tiempo.

Perspectivas

Con la aplicación del modelo desarrollado en este trabajo se pueden establecer condiciones de operación para un óptimo rendimiento del reactor en cuanto a la obtención del trióxido de sodio

- La aplicación del modelo desarrollado en este trabajo permitirá establecer condiciones de operación del proceso de obtención que permitan una óptima visión de todas las variables
- Es necesario continuar la investigación en cuanto al uso de lechos empacados como medios para proveer el micro-mezclado en este tipo de reacciones; específicamente, investigar a mayor detalle el efecto entre el tamaño de partícula y los niveles de micro mezclado que se logran, de tal forma que se pueda predecir el tiempo de residencia necesario para lograr un nivel de conversión dado, si se conoce el tipo y tamaño de partícula del empaque a utilizar.
- Para llevar a cabo lo anterior será necesario desarrollar nuevos experimentos, empleando los materiales que se deseen modificando la velocidad y la temperatura a la entrada del reactor.
- El modelo desarrollado puede disminuir las suposiciones y simplificaciones hechas.
- Esto llevaría a plantear un sistema de ecuaciones más complejo que podría representar otros aspectos fundamentales del proceso, como el cambio de densidad o el cambio de humedad.
- El modelo desarrollado en este trabajo puede emplearse para investigar la viabilidad de usar diversos materiales que permitan desarrollar un proceso de oxidación del dióxido de sodio adecuado.
- Al igual que en los planes de seguridad, la evaluación de riesgos debe disponer de información y datos que sirvan para planificar y organizar, y que por ende deban ser gestionados, para ser considerada como una herramienta de trabajo útil.

Una Evaluación de Riesgos, que exclusivamente contemple una valoración de los riesgos y unas normas preventivas de actuación meramente genéricas, sin atender las consideraciones particulares del centro de trabajo en el que se va a actuar, tiene un rol meramente informativo. Uno de los aspectos que puede contribuir a ello es precisamente la incorporación, como anexos, de procedimientos de trabajo que, basados en el proceso de ejecución (cronológicamente ordenado), establezcan las medidas preventivas a adoptar en cada momento, así como los criterios para el seguimiento y control de estos durante la ejecución de los trabajos.

- En este sentido, como recomendación, sería conveniente tener en consideración los siguientes aspectos:
- Identificar las actividades de la obra, el entorno en el que deben realizarse y la forma en que van a ejecutarse.
- Identificar si hay actividades críticas, (peligrosas reglamentariamente o que, debido a la simultaneidad, generen riesgos a otras actividades realizadas por otras empresas).

- Analizar, por técnico competente en materia preventiva, si la Evaluación de Riesgos da respuesta a estas actividades y, en su caso, proceder a su adaptación mediante anexos y/o procedimientos.
- Elaborar un Procedimiento de trabajo por cada una de las actividades identificadas anteriormente, y entendiendo como procedimiento, todo aquel documento de trabajo que establece un método o manera, secuencial y ordenada, de ejecutar algo.
- Cada procedimiento de trabajo debería ser validado antes de iniciar la ejecución de la actividad, por todos los participantes con funciones y responsabilidades en materia de ejecución y seguridad y salud

Experiencia Profesional Adquirida

Como todo proyecto de aplicación, este ha sido de gran ayuda para retomar la teoría aplicada en los reactores de lecho empacado, ya que son dispositivos utilizados en procesos químicos y otras aplicaciones para mejorar el contacto entre dos fases. Estos reactores están llenos de un material sólido, como un catalizador o enzimas inmovilizadas, que facilita las reacciones químicas o la transferencia de masa.

Mejorar la interacción entre dos fases como en este caso un gas y un sólido.

Englobar un gran aprendizaje en ciertas aptitudes y objetivos mencionados a continuación; que se deben de tener a la hora de transmitir la información de una manera clara y precisa, optimizando el rendimiento y productividad de diversos sectores.

En un reactor de lecho empacado, el material sólido (catalizador) se coloca dentro del reactor.

Aptitudes:

- Comunicación (verbal y no verbal).
- Versatilidad.
- Dinamismo.
- Creatividad / ser ingenioso (capacidad para transmitir información).
- Objetivos:

Los reactores de lecho empacado son herramientas versátiles utilizadas en una variedad de procesos químicos y de ingeniería para mejorar la eficiencia de las reacciones y la transferencia de masa.

Competencias Desarrolladas

- Utiliza las tecnologías de la información y comunicación como herramientas en la construcción de soluciones a problemas de ingeniería y difundir el conocimiento científico y tecnológico.
- Realiza innovación y adaptación de tecnología en procesos aplicando la metodología científica, con respeto a la propiedad intelectual.
- Demuestra actitudes de superación continua para lograr metas personales y profesionales con pertinencia y competitividad.
- Identificar y resolver problemas de diseño, operación, adaptación, optimización y administración en industrias químicas y de servicios, con calidad, seguridad, economía, usando racional y eficientemente los recursos naturales, conservando el medio ambiente, cumpliendo el código ético de la profesión y participando en el bienestar de la sociedad.

Fuentes de Información

1. Ortiz, Castellanos, (2011), "Uso de un reactor de lecho empacado para la producción de biodiesel", recuperado de; <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=48219771006>
2. Betancur, Suarez, (2019), "DISEÑO, MONTAJE Y PUESTA EN MARCHA DE UN SISTEMA DE REACCIÓN DE LECHO FIJO Y FLUJO CONTINUO PARA LA PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL", recuperado de; <https://expeditiorepositorio.utadeo.edu.co/bitstream/handle/20.500.12010/8167/Trabajo%20de%20grado.pdf?sequence=1>
3. López Karina, (2021), "REACTOR EXPERIMENTAL DE LECHO EMPACADO PARA EVALUAR LA CONCHA DE OSTIÓN DE DESECHO", recuperado de; https://villahermosa.tecnm.mx/docs/departamentos/tesis/repositorio_de_tesis_2014-2020/Tesis%20Sheila%20Karina%20Lopez%20Margalli.pdf
4. Corredor, Caicedo, (2005), "Modelos matemáticos para reactores biológicos de lecho empacado (PBR): una revisión bibliográfica", recuperado de; <https://www.redalyc.org/pdf/643/64325312.pdf>
5. Levenspiel, Octave, "Ingeniería de las reacciones químicas, México 2004, Tercera Redición, I. Reactores Químicos.
6. Raúl Rentería, (2013), "Diseño y modelado de un reactor tubular de lecho empacado para la desinfección de biosólidos durante el compostaje", recuperado de; <https://ipicyt.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1010/543/3/TMIPICYTR4D52013.pdf>
7. Porras Xavier, "Diseño de un reactor tubular para la oxidación del dióxido de azufre a trióxido de azufre en un reactor catalítico con un catalizador de pentóxido de vanadio" (s.f), recuperado de; https://www.academia.edu/35241256/Dise%C3%B1o_de_un_reactor_tubular_para_la_oxidaci%C3%B3n_del_di%C3%B3xido_de_azufre_docx
8. Arteaga, Zegada, (2009), "Modelación de un Convertidor de dióxido de azufre", recuperado de; https://www.researchgate.net/publication/315344025_MODELACION_DE_UN_CONVERTIDOR_DE_SO2
9. Bolaño, Martínez, Barrios, Duran, (2016), "Modelamiento y simulación de un reactor catalítico para la oxidación de SO₂ a SO₃, utilizando V₂O₅ como catalizador", recuperado de; https://www.researchgate.net/publication/298728457_Modelamiento_y_simulacion_de_un_reactor_catalitico_para_la_oxidacion_de_SO2_a_SO3_utilizando_V2O5_como_catalizador
10. Valentina Isadora Parra Gallegos (2017), "Estudio para maximizar la eficiencia de conversión de la planta de ácido sulfúrico No. 1 de la Fundición de Caletones", recuperado de; <http://repositorio.udec.cl/jspui/handle/11594/2532>
11. Valero, Nilsson (2022), "Estudio del diseño del proceso de producción de ácido sulfúrico mediante el modelado, recuperado de; <https://idus.us.es/handle/11441/136171>

12. Espinoza Quiroz (2022), "Diseño de un sensor virtual para la predicción de la eficiencia de conversión de SO_2 a SO_3 en un reactor catalítico multi-lechos mediante redes neuronales artificiales, recuperado de;
<https://cybertesis.unmsm.edu.pe/handle/20.500.12672/18425>
13. García, Fontalvo, (2013) "Modelamiento y simulación de un reactor industrial de película descendente para la producción de surfactantes aniónicos", recuperado de;
<https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/21077/4101005.2013.pdf?sequence=1>
14. Esteban del Solar, (2016) "ELABORACIÓN DE UN MODELO PARA PREDECIR LA OPERACIÓN DEL CONVERTIDOR DE LA PLANTA DE ÁCIDO SULFÚRICO", recuperado de;
<https://repositorio.usm.cl/server/api/core/bitstreams/1859d146-160e-4c5d-af77-9033a8053ba4/content>
15. Estrada, Pacheco, Valdivia, Sotelo y García, (2013), "Degradación de Dióxido de Azufre empleando tecnología de plasma, recuperado de;
<https://www.revistascca.unam.mx/rica/index.php/rica/article/view/36678>
16. Alvira, (2013), "OPTIMIZACIÓN DE LA TEMPERATURA EN EL PROCESO DE RETENCIÓN DE SO_2 DURANTE LA OXICOMBUSTIÓN DE CARBÓN EN LECHO FLUIDIZADO BURBUJEANTE, recuperado de;
<https://digital.csic.es/handle/10261/94536>
17. Almaguer V. (2011). Diseño y evaluación de un reactor en columna a escala Bench para la remoción de metales pesados utilizando la proteína quimérica Metalotioneína Tiorredoxina (Tesis doctoral). Facultad de Ciencia Biológicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Nuevo León, México.
18. Bendeck C., Orellana C. Y Schente H. (2010). Diseño, construcción y pruebas de funcionamiento de un lecho empacado para laboratorios de flujo de fluidos (Tesis de pregrado). Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Escuela de Ingeniería Química, Universidad De El Salvador, San Salvador, El Salvador.
19. Coulson, J.M., Richardson, J.F., Backhurst, J.R., & Harker, J.H. (1979). Ingeniería química: unidades SI. Barcelona: Reverté S.A.
20. Park, Y., Lee, D., Kim, D., Lee, J. and Lee, K. (2008). The heterogeneous catalyst system for the continuous conversion of free fatty acids in used vegetable oils for the production of biodiesel. *Catalysis Today*, 131(1-4), pp.238-243.