Ministerio de Cultura y Educación **(Programa del año 2008)**
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia
Departamento: Quimica
Area: Quimica Tecnologica

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
DISEÑO DE REACTORES HOMOGENEOS	LIC. QUIMICA	4/02	5	1c

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
RUIZ SALADO, MARIA DEL CARMEN	Prof. Responsable	P.ADJ EXC	40 Hs
ARRUA, LUIS ALBERTO	Prof. Colaborador	P.TIT EXC	40 Hs
MENTASTY, LILIANA RAQUEL	Prof. Colaborador	P.ADJ EXC	40 Hs
BARROSO, MARIANA NOELIA	Auxiliar de Práctico	JTP SIM	10 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
Hs	70 Hs	85 Hs	30 Hs	13 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	1 Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
10/03/2008	20/06/2008	15	185

IV - Fundamentación

El presente curso se desarrolla en el primer cuatrimestre de quinto año de la Licenciatura en Química, e incorpora el concepto de reactor químico como el recinto dentro del cual se llevan a cabo la gran variedad de reacciones químicas vistas por los estudiantes hasta este nivel de sus carreras, atendiendo a los distintos tipos generales de geometrías (tanques y tubulares) y condiciones de operación (isotérmica y no isotérmica, adiabática y no adiabática). Esta introducción al análisis y diseño de reactores químicos se realiza en este curso mediante la definición de condiciones ideales de mezclado (mezcla completa y flujo en pistón) y el desarrollo para estos sistemas de los respectivos balances de materia y energía. También se desarrollan estudios comparativos entre los distintos sistemas y condiciones de operación para reacciones simples y complejas. En una segunda parte del curso se introduce el concepto de reactores reales y se aporta la metodología para el estudio de los mismos cuantificando su apartamiento de la conducta ideal por medio del uso de los modelos de tanques en serie y de flujo pistón con dispersión. Finalmente, se dán los elementos que permiten estimar el efecto de dicho apartamiento de la idealidad sobre la performance del reactor.

V - Objetivos

Los objetivos generales del curso son:
- Estudiar el comportamiento de los reactores químicos homogéneos ideales, haciendo uso de los conceptos aportados por la termodinámica, cinética química, mecánica de fluidos y fenómenos de transporte, tendiendo a desarrollar en los alumnos tres áreas de conocimiento de utilidad práctica, a saber:
- Habilidad para plantear, suponer y simplificar problemas.

- Capacidad para hacer análisis críticos de soluciones presentadas en la literatura.
- Razonar de acuerdo a los fenómenos que se desarrollan.
- Conocer métodos de caracterización de reactores reales y la utilización de modelos que interpretan el comportamiento de reactores químicos con mezclado no ideal.
- Realizar cálculos predictivos de conversión en reactores reales.

VI - Contenidos

TEMA 1: INTRODUCCION AL DISEÑO DE REACTORES

Reactores de mezcla completa, concepto. Reactores discontinuos isotérmicos. Balance de materia y ecuación de diseño. Representación gráfica. Reactores a volumen constante: diversos tipos de reacciones. Reactores a volumen variable. Reactores discontinuos no isotérmicos. Balance de energía. Acoplamiento de las ecuaciones de balance. Estudio de la isoterma y de la anisotermia en régimen adiabático y anadiabático.

TEMA 2: REACTORES DE MEZCLA COMPLETA CONTINUOS Y SEMICONTINUOS

Reactores de mezcla completa en estado estacionario. Balance de materia y ecuación de diseño. Tiempo espacial y velocidad espacial. Representación gráfica. Influencia de la relación de reactivos. Reactores de mezcla completa continuos en serie en estado estacionario. Reactores de mezcla completa semicontinuos. Reactores de mezcla completa no isotérmicos. Balance de energía. Acoplamiento de las ecuaciones de balance. Estudio de la isotermia y de la anisotermia en régimen adiabático y anadiabático.

TEMA 3: REACTORES DE FLUJO EN PISTON

Concepto de flujo en pistón. Balance de materia y ecuación de diseño. Representación gráfica. Sistemas de densidad constante y densidad variable. Reactores de flujo en pistón no isotérmicos. Balance de energía. Acoplamiento de las ecuaciones de balance. Operaciones isotérmicas y anisotérmicas en régimen adiabático y anadiabático. Reactores de flujo en pistón isotérmicos con recirculación. Balance de materia y ecuación de diseño. Representación gráfica.

TEMA 4: PROCEDIMIENTO GRAFICO GENERAL DE DISEÑO

Relaciones entre composición, temperatura y velocidad de reacción, para reacciones irreversibles, reversibles exotérmicas y reversibles endotérmicas. Metodología general y aplicación a distintos tipos de reactores: flujo en pistón con y sin reciclo, mezcla completa en estado estacionario y opciones en serie. Progresión óptima de temperatura. Efectos caloríficos: operaciones adiabáticas y no adiabáticas. Problema especial de reacciones exotérmicas en reactores de mezcla completa.

TEMA 5: ESTUDIO COMPARATIVO CON REACCIONES SIMPLES

Reactor discontínuo vs. reactor de flujo en pistón. Reactor de mezcla completa en estado estacionario vs. reactor de flujo en pistón. Reactor de mezcla completa en serie vs. reactor de flujo en pistón. Reactor de flujo en pistón con recirculación vs. reactor de flujo en pistón sin recirculación.

TEMA 6: ESTUDIO COMPARATIVO CON REACCIONES COMPLEJAS

Sistemas isotérmicos: reacciones en serie, paralelo y serie-paralelo. Estudio cualitativo y cuantitativo de la distribución de productos en reactores de flujo en pistón y mezcla completa, discontinuo y continuo en estado estacionario. Efecto de la temperatura sobre la distribución de productos para reacciones en paralelo, en serie y serie-paralelo. Distribución de productos en función del tiempo para distintas situaciones de reacciones reversibles en serie y en paralelo.

TEMA 7: EFECTO DE MEZCLADO NO IDEAL EN REACTORES QUIMICOS

Distribución de tiempos de residencia de un fluido a la salida de un recipiente. Curva E(t). Métodos experimentales estímulo-respuesta. Estímulo escalón: curva F(t). Estímulo impulso: curva C(t). Relación entre las curvas E(t), C(t) y F(t). Momentos estadísticos de una distribución. Momentos absolutos y momentos centrales. Revisión de la respuesta para reactores con mezclado ideal. Tiempo adimensional.

TEMA 8: MODELOS QUE INTERPRETAN EL COMPORTAMIENTO DE REACTORES QUIMICOS CON MEZCLADO NO IDEAL

Modelo de dispersión: deducción de la ecuación diferencial que lo representan y sus soluciones para grados de dispersión pequeño y grande. Relación entre los parámetros característicos de la curva C(tita) del recipiente y el módulo de dispersión.

Consideraciones sobre recipientes cerrados y abiertos. Modelos de tanques en serie: desarrollo en base al concepto de integral de convolución. Relación entre los parámetros característicos de la curva C(tita) del recipiente y el número de tanques N. Consideraciones sobre flujo segregado. Uso en el cálculo de conversión. Aplicación del modelo de dispersión a reacciones irreversibles de orden n. Aplicación del modelo de tanques en serie.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

TRABAJOS PRACTICOS DE AULA:
- Aproximadamente 84 horas de resolución de problemas sobre los distintos tópicos fundamentales del programa de la asignatura.

TRABAJOS PRACTICOS DE LABORATORIO
Aproximadamente 28 horas de tareas de laboratorio y procesamiento de información experimental en los siguientes temas:
1. Reactor Mezcla Completa Discontinuo, Sistema isotérmico, Hidrólisis de Anhídrido Acético.
2. Reactor Mezcla Completa Continuo, Hidrólisis de Anhídrido Acético.
3. Reactor de Flujo en Pistón, Hidrólisis de Anhídrido Acético.
4. Reactores reales. Estudio de la desviación del comportamiento ideal en un reactor tubular.
5. Reactores reales. Estudio de la desviación del comportamiento ideal en un reactor tanque agitado.

VIII - Regimen de Aprobación

Régimen de regularización: Según Ordenanza de Régimen Académico Nº 13/03 C.S..
Régimen de alumnos promocionales regulares, libres y vocacionales: Según Ordenanza de Régimen Académico Nº 13/03 C.S..

IX - Bibliografía Básica

[1] - INGENIERIA DE LAS REACCIONES QUIMICAS – 2da. Edición - Octave Levenspiel, Editorial Reverté S.A. (1979).
[2] - AICHEMI, MODULAR INTRUCTIONS- Serie E, Kinetics; American Institute of Chemical Engineering (1981).
[3] - FUNDAMENTOS DEL DISEÑO DE REACTORES - R.E. Cunningham y J.L. Lombardi. Editorial Eudeba, Tomos I y II (1979).

X - Bibliografia Complementaria

[1] - ELEMENTS OF CHEMICAL REACTION ENGINEERING - H. Scott Fogler; P.T.R. Prentice Hall, Inc. (1992).
[2] - INGENIERIA DE LA CINETICA QUIMICA - J.M. Smith. Compañía Editorial Continental S.A. 1977.
[3] - INTRODUCTION TO CHEMICAL ENGINEERING THERMODYNAMICS - J.M. Smith and H.C. van Ness 2th. Edition Mc Graw-Hill Book Company Inc. 1959.
[4] - CHEMICAL REACTOR ANALYSIS AND DESIGN. Gilbert Froment and Kenneth B. Bischoff, Editorial John Wiley and Sons (1979).
[5] - AN INTRODUCTION TO CHEMICAL ENGINEERING KINETICS AND REACTOR DESIGN - Charles G. Hill Jr. Editorial John Wiley and Sons (1977).
[6] - INTRODUCCION AL DISEÑO DE REACTORES QUIMICOS - J.H. Farina, O.A. Ferretti, G.F. Barreto, EUDEBA (1986).

XI - Resumen de Objetivos

- Estudiar el comportamiento de los reactores químicos homogéneos ideales, haciendo uso de los conceptos aportados por la termodinámica, cinética química, mecánica de fluidos y fenómenos de transporte, tendiendo a desarrollar en los alumnos tres áreas de conocimiento de utilidad práctica, a saber:
- Habilidad para plantear, suponer y simplificar problemas.
- Capacidad para hacer análisis críticos de soluciones presentadas en la literatura.

- Razonar de acuerdo a los fenómenos que se desarrollan.
- Conocer métodos de caracterización de reactores reales y la utilización de modelos que interpretan el comportamiento de reactores químicos con mezclado no ideal.
- Realizar cálculos predictivos de conversión en reactores reales.

XII - Resumen del Programa

Introducción general. La reacción química: estequiometría, cinética y termodinámica. El reactor químico: características y clasificaciones. Concepto de mezclado ideal. Reactores ideales. Reactores de mezcla completa, discontinuos, semicontinuos y continuos. Reactores de flujo en pistón. Sistemas isotérmicos y no isotérmicos. Adiabáticos y no adiabáticos. Balances de materia y energía. Acoplamiento de las ecuaciones de balance. Procedimiento gráfico general de diseño. Metodología y aplicación a distintos sistemas y tipos de reactores.
Estudio comparativo de reactores con mezclado ideal considerando reacciones simples y complejas. Efecto de la temperatura. Distribución de productos en función del tiempo para distintas situaciones de reacciones reversibles en serie y en paralelo. Efecto de mezclado no ideal en reactores químicos. Métodos de caracterización experimentales estímulo-respuesta. Modelos que interpretan el comportamiento de reactores químicos con mezclado no ideal. Modelo de dispersión y de tanques en serie. Cálculo de conversión en sistemas reales.

XIII - Imprevistos

No se esperan dificultades por imprevistos.