

1. IDENTIFICACION.

Materia:	CALCULO DE REACTORES
Códigos:	SIRE: 6017 EIQ: IQ-5057
Prelación:	IQ-5026, IQ-5015, IQ-5016
Ubicación:	Séptimo Semestre
TPLU:	3-2-0-4
Condición:	Obligatoria
Departamento:	Operaciones Unitarias y Proyectos

2. JUSTIFICACION

El Ingeniero Químico es un profesional que diseña y supervisa la operación de Plantas donde ocurren los cambios físicos y químicos de los materiales. Las reacciones químicas ocupan un lugar preponderante dentro de la carrera, y el diseño y control de los reactores químicos es un conocimiento imprescindible del curriculum.

3. REQUERIMIENTOS.

La Ingeniería de las Reacciones Químicas requieren una base importante de conocimientos en tópicos relacionados con la fisicoquímica, Termodinámica y los Principios de la Ingeniería Química.

4. OBJETIVOS.

GENERALES

- *Presentar una introducción sobre el modelamiento y el diseño de los reactores homogéneos y algunos conceptos de cinética heterogénea.*

ESPECIFICOS

- *Desarrollar y aplicar las ecuaciones de dimensionamiento de las unidades de reacción.*
- *Estudiar el efecto de la temperatura y de la presión sobre el diseño de los reactores químicos.*
- *Presentar algunas aplicaciones sencillas de la computación en el diseño de reactores químicos y en el análisis de sensibilidad de su operación, así como en el arranque y parada de la unidad.*
- *Evaluar las variables involucradas en el diseño de reactores para reacciones múltiples.*
-

5. CONTENIDO PROGRAMATICO

CAPITULO 1. INTRODUCCION

Termodinámica. Cinética. Clasificación de las reacciones. Variables que afectan la velocidad de reacción. Definición de velocidad de reacción. Conversión.

CAPITULO 2. VELOCIDAD DE REACCION Y ESTEQUIOMETRIA

Tabla estequiométrica. Sistemas discontinuos y de flujo. Reacciones con cambio de fase.

CAPITULO 3. RECOLECCION Y ANALISIS DE DATOS DE VELOCIDAD DE REACCION

Método diferencial. Método integral. Método de las velocidades iniciales. Método de la vida media. Reactor diferencial. Reactor integral. Tratamiento estadístico de datos de velocidad (Mínimos cuadrados).

CAPITULO 4. CLASIFICACION Y CARACTERISTICAS GENERALES DE LOS REACTORES QUIMICOS.

Tipos de reactores. Aplicaciones. Balance general de materia. Casos particulares. Reactor por cargas. Reactor flujo pistón (RP). Reactor agitado permanentemente (RAP). Diseño óptimo de un reactor. Reactores industriales. Características técnicas.

CAPITULO 5. DIMENSIONAMIENTO DE REACTORES

Diseño de unidades discontinuas y continuas. Reactores en serie. Paralelo y combinaciones serie-paralelo. Optimización de cascadas de RAP's.

CAPITULO 6. DISEÑO DE REACTORES ISOTERMICOS

Esquema de diseño. Escalado. Diseño de Reactores agitados. Diseño de Reactores tubulares. Caída de presión de reactores. Reacciones reversibles. Operación no estacionaria de reactores.

CAPITULO 7. DISEÑO DE REACTORES NO ISOTERMICOS

Balance de energía. Aplicación al diseño de reactores. Reactores discontinuos. Reactores de flujo. Caso adiabatico y no adiabatico. Conversión de equilibrio. Progresión optima de temperatura. Temperatura óptima de entrada. Múltiples estados estacionarios. Estabilidad del punto de operación. Gráfica de ignición - extinción.

CAPITULO 8. DISEÑO DE REACTORES COMPLEJOS

Reacciones en serie, paralelo y combinaciones serie-paralelo. Selectividad.

Maximización de la selectividad. Tabla estequiométrica para reacciones múltiples. Diseño del reactor. Caso isotérmico y no isotérmico. Recirculación en reactores.

CAPITULO 9. CINETICA HETEROGENEA Y CATALISIS

Introducción al diseño de reactores heterogéneos.

6. METODOLOGIA.

Clases teóricas convencionales. Presentación de tópicos especiales por parte de los estudiantes, en base a asignaciones de artículos de investigación sobre avances recientes en diseño y operación de reactores. Así mismo, dos programas de computación con aplicación de métodos numéricos en la materia.

7. RECURSOS.

En las clases magistrales, los convencionales. El uso de transferencias y/o diapositivas en las exposiciones y del computador para las aplicaciones numéricas.

8. EVALUACION.

Se contempla la evaluación continua mediante la realización de 6-7 exámenes parciales. Así mismo, la presentación de 2 asignaciones con uso de la computadora que incluyen los siguientes tópicos:

- *Resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias, con el método de Euler o de Runge-Kutta.*
- *Aplicación del paquete Tutsim (o similar) al cálculo de reactores (arranque de un RAP).*
- *Cada asignación aporta 5 puntos a la nota del último examen.*
- *Seminarios sobre artículos de investigación relacionados con la asignatura, con una ponderación de hasta 5 puntos del siguiente examen.*

9. BIBLIOGRAFIA.

FOGLER, H., "Elements of Chemical Reaction Engineering", 2nd. Edition. Prentice Hall. 1992

LEVENSPIEL, O., "Ingeniería de las Reacciones Químicas" .Reverté. 1972, "El Omnilibro de los Reactores Químicos" .Reverté. 1978, "El Minilibro de los Reactores Químicos". Reverté. 1978.

SMITH, J. M., "Chemical Engineering Kinetics". McGraw Hill. 1970.

10. VIGENCIA:

Desde: Semestre B-2001.