Universidad Tecnológica Nacional
Facultad Regional Buenos Aires

# PROGRAMA ANALÍTICO

**Departamento:** Ingeniería Química

**Carrera:** Ingeniería Química

**Nombre de la actividad curricular:** Ingeniería de las Reacciones Químicas

**Área:** Ingeniería Química

**Bloque:** Tecnologías Aplicadas

**Nivel: IV**

**Tipo:** Obligatoria

**Modalidad:** Cuatrimestral

**Carga Horaria total:** H. Reloj: 120 H. Cátedra: 160

**Carga horaria semanal:** H. Reloj: 7 H. Cátedra: 10

## FUNDAMENTACIÓN

"La Ingeniería Química es la profesión en la cual los conocimientos de matemática, química y otras ciencias naturales, adquiridos por el estudio, son aplicados con criterio para desarrollar vías económicas para el uso de materiales y energía en beneficio de la humanidad". (A.I.Ch.E.)

En este contexto, el desarrollo del proceso para un nuevo material o producto depende de la integración exitosa de las etapas de recepción y tratamiento de materias primas, su transformación química, y la separación y refinación de los productos resultantes.

Esta asignatura, en particular, tiene como objetivo el diseño básico de los reactores químicos, para lo cual se requiere un análisis de los procesos tanto físicos como químicos que ocurren en su interior, ya que los principios que gobiernan las transferencias de masa y energía son tan importantes como los que rigen a la cinética química.

Por lo tanto, siendo una de las características distintivas de la ingeniería química la combinación de las operaciones físicas y químicas, el diseño de los reactores químicos es una actividad específica de los ingenieros químicos.

## OBJETIVOS

Los objetivos generales de esta asignatura se encuadran en un conjunto de habilidades y capacidades a alcanzar.

- Comprender las bases cinéticas necesarias para el diseño de los diferentes tipos de reactores.

- Conocer, comprender, especificar y/o calcular distintos tipos de reactores.
- Identificar, clasificar, relacionar y jerarquizar las principales cuestiones que hacen a los fenómenos físicos y químicos que gobiernan las transformaciones de unas especies químicas en otras, así como también al diseño de los equipos en donde las mismas transcurren.
- Incorporar progresivamente ciertas estrategias de abordaje (conceptuales y metodológicas) a los problemas relacionados con la cinética de las reacciones químicas y el diseño de equipos, que les permitan: interpretar físicamente los mismos, encontrar el modelo que los describe más aproximadamente, emplear el método de cálculo apropiado y discutir los resultados obtenidos con el fin de poder establecer conclusiones pertinentes.
- Integrar conceptos y capacidades adquiridos en otras asignaturas que preceden o coexisten con Ingeniería de las Reacciones Químicas, para poder aplicarlos en el campo laboral, en el desarrollo de nuevas tecnologías, así como también, en la aplicación eficiente de las existentes, con el objetivo de llevar a cabo procesos industriales óptimos, no sólo desde el punto de vista técnico, sino también desde la óptica económica y de la conservación del medio ambiente.

**CONTENIDOS**

**Contenidos mínimos**
Cinética homogénea.
Reactores homogéneos ideales. Operación continua y discontinua.
Operaciones isotérmicas y anisotérmicas.
Reactores reales.
Cinética heterogénea. Fluido-fluido, Fluido-sólido reactivo, Fluido-sólido catalítico. Factor de efectividad. Reactores Heterogéneos: Catalíticos de lecho fijo, torres de absorción con reacción química.

**Contenidos analíticos**
**PARTE 1: SISTEMAS HOMOGENEOS**
**Unidad Temática 1: CINETICA DE LAS REACCIONES QUIMICA HOMOGENEAS.**
Objeto de la cinética química. Clasificación de las reacciones químicas homogéneas. Reacciones simple y múltiple, elemental y no elemental, reversible y autocatalítico. Expresión de velocidad de reacción en sistemas de volumen constante y variable. Variables que afectan a la velocidad de reacción: dependencia de la velocidad con la concentración. Subórdenes de reacción. Dependencia de la velocidad con la temperatura. Constante de velocidad de reacción. Ecuación de Arrhenius. Métodos experimentales para la determinación de los parámetros cinéticos en reactores discontinuos a volumen constante y variable (sub.órdenes de reacción, factor pre-exponencial, energía de activación). Análisis de los datos experimentales. Método integral. Método diferencial. Método de la aislación. Método de las velocidades iniciales.

**Unidad Temática 2: REACTORES IDEALES HOMOGENEOS (ISOTERMICOS-NO ISOTERMICOS)**
Reactores Ideales Isotérmicos: Definición y clasificación de los reactores químicos (reactores tipo tanque, tubulares y columnas, continuos y discontinuos). Modelos de flujo ideal: mezclado ideal y mezclado nulo. Reactor tanque discontinuo idealmente agitado: TDIA (a volumen constante y presión variable o volumen variable y presión constante). Reactores de flujo continuo. Reactor tanque continuo idealmente agitado: TCIA. (densidad constante y variable).

Reactor flujo pistón ideal (densidad constante y variable). Tiempo medio de residencia y tiempo espacial. Comparación del comportamiento de los reactores ideales para reacciones simples de distintos órdenes.
Sistema de Reactores Múltiples: Reactores FPI en serie y/o en paralelo. Reactores TCIA de iguales tamaños conectados en serie, para reacciones de primer y segundo orden. Reactores TCIA de diferentes tamaños conectados en serie. Reactores de diferentes tipos en serie, disposición más adecuada de un sistema de reactores ideales.
Reactores ideales no isotérmicos: Sistemas de reacción no isotérmicos. Análisis de las expresiones de velocidad de reacción (XA = f(T)) para reacciones irreversibles y reversibles. Progresión de temperatura óptima. Diseño de reactores no isotérmicos: planteo de la ecuación de balance de energía. Ecuaciones de diseño para los reactores ideales adiabáticos (TCIA, TDIA y FPI). Condiciones óptimas de operación de los reactores ideales adiabáticos. Ecuaciones de diseño para reactores ideales no isotérmicos-no adiabáticos. Estabilidad del TCIA. Estabilidad del FPI. "Hot-Spot". Reactor FPI con recirculación. Ecuación de diseño. Análisis de su comportamiento. Aplicación a reacciones auto catalíticas y exotérmicas.

**Unidad Temática 3: REACCIONES MULTIPLES**
Reacciones en paralelo. Distribución de productos. Estudio cualitativo y cuantitativo. Rendimiento fraccional instantáneo y global. Determinación del volumen del reactor. Condiciones de operación más adecuadas para reacciones en paralelo. Reacciones en serie. Estudio cualitativo sobre la distribución de los productos. Estudio cuantitativo para reactores FPI y discontinuos. Estudio cuantitativo para el reactor TCIA. Reacciones en serie-paralelo. Estudio cuantitativo para reactores FPI y TDIA. Estudio cuantitativo para reactores TCIA. Aplicaciones.

**Unidad Temática 4: DESVIACIONES A LA HIPOTESIS DE FLUJO IDEAL**
Modelos no ideales. Distribución de tiempos de residencia. Curvas E, F y C. Relaciones. Modelo de flujo segregado. Modelo de flujo pistón disperso. Modelo de tanques en serie. Modelos combinados (estudio cualitativo). Determinación de flujos defectuosos en equipos de proceso (estudio cualitativo).

**PARTE 2: SISTEMAS HETEROGENEOS**
**Unidad Temática 5: CINETICA DE LAS REACCIONES SÓLIDO-FLUIDO CATALITICAS**
Adsorción en superficies sólidas. Adsorción física y química. Isotermas de Langmuir. Isoterma de BET. Propiedades físicas de los catalizadores. Área superficial, volumen de poros, densidad del catalizador, distribución del volumen de poros. Clasificación y preparación de catalizadores. Promotores e inhibidores. Venenos. Etapas presentes en una reacción catalítica heterogénea. Etapa controlante. Expresiones de velocidad de reacción. Reacción y difusión dentro de los catalizadores porosos. Mecanismo de transporte interno de materia. Concepto de difusividad efectiva. Cálculo de difusividad efectiva (modelo de poros en paralelo, modelo de poros al azar). Mecanismo de transporte interno de calor. Conductividad térmica efectiva. Ecuación cinética utilizada para la transferencia de masa con reacción química. Factor de efectividad en sistemas isotérmicos y no isotérmicos. Enmascaramiento de parámetros debido a la difusión interna. Procesos de transporte externo en reacciones heterogéneas. Ecuaciones cinéticas. Enmascaramiento de datos debido al transporte externo. Factor de efectividad global.

**Unidad Temática 6: REACTORES PARA REACCIONES SÓLIDO-FLUIDO CATALITICAS**

Reactores de lecho fijo. Porosidad de lecho. Esquema pseudo homogéneo de diseño. Variación de la presión. Transferencia de calor. Modelo Unidimensional. Otros modelos: bidimensional, lecho fluidizado (estudio cualitativo).

**Unidad Temática 7: CINETICA DE LAS REACCIONES FLUIDO-FLUIDO**
Teoría de la transferencia de masa con reacción química. Modelo de la película. Factor de reacción. Reacciones de primer y pseudo primer orden. Reacciones de segundo orden. Gráfico de van Krevelen y Hoftijzer. Análisis de la etapa controlante en cada caso.

**Unidad Temática 8: REACTORES PARA REACCIONES FLUIDO-FLUIDO**
Criterio de selección y diseño de equipos. Diseño de columnas rellenas. Diseño de recipientes agitados y burbujeo.

**Unidad Temática 9: CINETICA DE LAS REACCIONES SÓLIDO REACTIVO-FLUIDO**
Selección de un modelo. Modelo homogéneo. Modelo de frente móvil. Velocidad de reacción para partículas que no cambian de tamaño (control en película externa, en cenizas y químico). Velocidad de reacción para partículas que cambian de tamaño (control en película externa y químico). Combinación de resistencias. Determinación de la etapa controlante.

**Unidad Temática 10: RECTORES PARA REACCIONES SÓLIDO-FLUIDO (optativa)**
Diseño para sistemas con flujo en pistón de sólidos y composición uniforme del gas. Partículas de un solo tamaño. Partículas de tamaño diferente. Diseño para sistemas con flujo de mezcla completa de sólidos y composición uniforme del gas. Partículas de un solo tamaño. Partículas de tamaño diferente.

**DISTRIBUCIÓN DE CARGA HORARIA ENTRE ACTIVIDADES TEÓRICAS Y PRÁCTICAS**

| **Tipo de actividad** | **Carga horaria total en hs. reloj** | **Carga horaria total en hs. cátedra** |
|---|---|---|
| **Teórica** | 68 | 91 |
| **Formación Práctica** | 52 | 69 |
| **Tipo de actividad** | **Carga horaria total en hs. reloj** | **Carga horaria total en hs. cátedra** |
| Formación experimental | 11 | 14 |
| Resolución de problemas | 41 | 55 |
| Proyectos y diseño | 0 | 0 |
| Práctica supervisada | 0 | 0 |

**ESTRATEGIAS METODOLÓGICAS**

a) Modalidades de enseñanza empleadas según tipo de actividad (teórica-práctica)

Se propone la organización de los contenidos en esquemas jerárquicos y relacionables, partiendo de los conceptos más generales y avanzando progresivamente hacia los más específicos.

En base a lo explicitado:

Las clases "teóricas" son de tipo participativas, donde el docente mediante interrogantes o situaciones supuestas, permite que el alumno elabore respuestas ó soluciones y en forma conjunta saque conclusiones sobre los temas que se van desarrollando.

Las clases "teóricas" son complementadas con las "prácticas" que consisten fundamentalmente en la resolución de situaciones problemáticas con los objetivos de aplicar los conocimientos adquiridos por un lado y generar nuevos interrogantes que permiten completar el tema en cuestión, por el otro. El cálculo numérico requerido en la resolución de las mismas y el análisis de gráficos, cuando se justifica, es realizado mediante el empleo de planillas de cálculo y soft adecuado a la resolución numérica de ecuaciones diferenciales (Mathcad). Asimismo, se realizan dos prácticos en el Laboratorio de Simulación de Procesos utilizando como software el Unisim y/o Hysys.

Series de Problemas: Corresponden a cada unidad temática

- Introducción a la Ingeniería de las Reacciones Químicas (Serie 0)
- Cinética Homogénea
- Diseño de Reactores Ideales Isotérmicos
- Diseño de Sistemas de Reactores Múltiples Isotérmicos
- Diseño de Reactores No Isotérmicos
- Cinética y Diseño para Reacciones Múltiples
- Desviaciones a la Hipótesis de Flujo no Ideal (reemplazada por Práctica de Laboratorio)
- Cinética y Diseño de Reactores Heterogéneos Catalíticos.
- Cinética y Diseño de Reactores Heterogéneos para reacciones fluido-fluido

Tanto en las clases puramente teóricas como en las prácticas se hace hincapié en el siguiente esquema metodológico:

Evaluación del "problema", incluyendo su interpretación física y los alcances de su posible solución.

Planteo o búsqueda del modelo matemático que permite su interpretación.

Planteo del método numérico que permite su resolución.

Discusión de las posibles soluciones, cuando se admite más de una, en términos de las variables del proceso y su optimización.

Planteo, a cargo del docente, de posibles relaciones con otros temas o con los desarrollados en otras asignaturas que preceden o coexisten con Ingeniería de las Reacciones.

El conocimiento adquiere "significación" cuando puede transferirse a situaciones concretas. Atendiendo a esta cuestión, en forma paralela al cursado se realizan, las siguientes Prácticas de Laboratorio:

Determinación de parámetros cinéticos en sistemas homogéneos : hidrólisis alcalina de acetato de etilo.

Reactores no ideales: influencia del caudal de alimentación a un reactor tubular sobre la dispersión del sistema

Simulación de reactor TCIA para la producción de propilen glicol (optativo)

Simulación de un reactor semicontinuo para la hidrólisis alcalina de acetato de etilo.

Simulación de un sistema de reactores para steam-reforming

b) Recursos didácticos para el desarrollo de las distintas actividades (guías, esquemas, lecturas previas, computadoras, software, otros)

Elementos de Tecnología Educativa: A los elementos tradicionales, se agrega el uso de cañón o retroproyector con transparencias, que agiliza notablemente el desarrollo de la explicación, optimizando el tiempo requerido.
Recursos Informáticos:
- Consultas páginas web:
- http://www.engin.umich.edu/~cre/index.htm, http://www.chm.davidson.edu/ChemistryApplets/kinetics/RateOfReaction.html
- http://www.mty.itesm.mx/dia/deptos/iq/iq95-72/Reactores/Clase21_2003.pdf
- http://www.sc.ehu.es/iawfemaf/archivos/materia/teoria.htm
- Simuladores de Procesos: HYSYS, Unisim

**EVALUACIÓN**

a) Modalidad (tipo, cantidad, instrumentos)

**Requisitos de Regularidad**
La evaluación de los conocimientos adquiridos se lleva a cabo a través de dos exámenes parciales teórico- prácticos. Los parciales no aprobados son recuperados según lo establecido en el Reglamento de Estudios de la Universidad Tecnológica Nacional.
Las evaluaciones parciales se aprueban con la calificación 6(seis).
La primera evaluación parcial abarca los temas: Cinética Homogénea, Diseño de Reactores Ideales
La segunda evaluación parcial abarca los temas: Reacciones Múltiples, Diseño de Reactores Catalíticos, Diseño de Reactores Gas-Líquido, Desviaciones de las Hipótesis Fluidodinámicas Ideales.

**Firma de Trabajos Prácticos**
La firma de los trabajos prácticos supone la aprobación de los informes de laboratorio.

**Requisitos de Promoción**
Los criterios para la Promoción Directa están establecidos en la Ordenanza de Consejo Superior 1549. En este contexto, la asignatura Ingeniería de las Reacciones Químicas fija dos instancias de evaluación con nivel de exigencia equivalente: El alumno promociona la asignatura cuando en cada una de las evaluaciones obtiene 8 (OCHO) o más puntos. Se puede alcanzar la promoción recuperando sólo un parcial en su primera instancia.
Si el alumno no alcanza el puntaje necesario para promocionar, pero aprueba las evaluaciones firma la asignatura.

Tanto para promocionar como para firmar la asignatura se deben cumplir con las siguientes condiciones académicas:
- Porcentaje de asistencia establecido en el Reglamento de Estudios,
- Aprobación y entrega en tiempo y forma de los informes correspondientes a los Trabajos Prácticos de laboratorio. En el caso de no cumplir con este requisito el alumno deberá recuperar esta instancia en la fecha habilitada para tal fin.

**Requisitos de Aprobación**

La evaluación final, requisito para la aprobación de la asignatura (cuando el estudiante no ha alcanzado la aprobación directa), está dirigida al análisis conceptual de los contenidos y a su interrelación. Se prioriza la integración de los temas. Generalmente, consta de una parte escrita en la cual el alumno desarrolla los conceptos de un determinado tema, seguida de una parte oral en la cual se hace hincapié en la integración de los diferentes temas de la asignatura.

**Autoevaluación de cátedra**

La autoevaluación de cátedra se realiza a través de encuestas realizadas a los alumnos y de reuniones intercátedra, que tienen por finalidad la optimización del desarrollo de la asignatura. El equipo docente se reúne mensualmente para estimar el avance del dictado de la materia y el rendimiento de los alumnos (preguntas y/o dificultades con respecto al avance de los contenidos, resolución de problemas) ajustes del cronograma, temarios de parciales, y finales; reorientación de la asignatura al cierre y comienzo del nuevo cuatrimestre.

**ARTICULACIÓN HORIZONTAL Y VERTICAL CON OTRAS ASIGNATURAS**

A continuación, se especifican las asignaturas con las que Ingeniería de las Reacciones se articula horizontalmente

Asignatura: **Operaciones Unitarias II** (nivel: 4)
Temas: Transferencia de masa con y sin reacción química
Núcleos temáticos (Ing. de las Reacciones): Cinética y Diseño de reactores para reacciones heterogéneas en particular: Diseño de torres de absorción con reacción química.

Asignatura: **Integración IV** (nivel: 4)
Temas: Estimación de volumen de reactor para su costo aproximado
Núcleos temáticos (Ing. de las Reacciones): Diseño de reactores homogéneos y heterogéneos

Asignatura: **Tecnología de la Energía Térmica** (nivel: 4)
Temas: Transferencia de calor entre el reactor y el sistema de intercambio
Núcleos temáticos (Ing. de las Reacciones): Reactores no isotérmicos homogéneos y heterogéneos

Asignatura: **Biotecnología** (nivel 4)
Temas: Reactores Biológicos
Núcleos temáticos (Ing. de las Reacciones): Reactores no isotérmicos homogéneos y heterogéneos- Catálisis heterogénea.

A continuación especifican las asignaturas con las que Ingeniería de las Reacciones Químicas se articula verticalmente y los temas relacionados.

Asignatura: **Físico-Química**
Temas: Equilibrio Químico- Cinética Homogénea
Núcleos Temáticos (Ing. de las Reacciones Químicas): Diseño de Reactores homogéneos isotérmicos y no isotérmicos

Asignatura: **Termodinámica**
Temas: Balance de energía (orientado desde el Primer Principio)
Núcleos Temáticos (Ing. de las Reacciones Químicas): Diseño de Reactores no isotérmicos

Asignatura: **Integración III**
Temas: Balances macroscópicos de masa y energía

Núcleos Temáticos (Ing. de las Reacciones Químicas): Todos los núcleos temáticos de la asignatura
Asignatura: **Fenómenos de Transporte**
Temas: Balances microscópicos de cantidad de movimiento, energía y masa
Núcleos Temáticos (Ing. de las Reacciones Químicas): Cinética y diseño de reactores heterogéneos
El equipo docente participa de reuniones intercátedras convocadas por Departamento, a fin de generar acuerdos temáticos y de metodologías que faciliten la articulación horizontal y vertical entre las distintas asignaturas

**CRONOGRAMA ESTIMADO DE CLASES**

| Unidad Temática | Duración en hs cátedra |
|---|---|
| 1 | 28 |
| 2 | 52 |
| 3 | 10 |
| 4 | 13 |
| 5 | 20 |
| 6 | 10 |
| 7 | 8 |
| 8 | 4 |
| 9 | 5 |

**BIBLIOGRAFÍA OBLIGATORIA**

Bird, R. B., Stewart W. y Lighfoot, E. (2006). *Fenómenos de transporte.* Limusa Wiley.
Bird, R. B. (2006). *Transport Phenomena*. Wiley
Farina, I. H, Ferretti, O. A. y Barreto, G. F. (1997). *Introducción al diseño de reactores químicos* (Vol. 1). Nueva Librería.
Fogler, H. S. (2008). *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. Prentice Hall.
Fogler, H. S. (2020). *Elements of chemical reaction*. Pearson.
Froment, G. F., Bischoff, K. B., & De Wilde, J. (2010). *Chemical reactors, analysis and design*. Wiley.
Levenspiel, O. (2012). *Ingeniería de las reacciones químicas*. Limusa-Wiley
Smith, J. M. (1991). *Ingeniería de la cinética química*. CECSA

**BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

Cunningham, R., Lombardi, J. (1972). Fundamento del diseño de reactores. Editorial Universitaria de Buenos Aires.
Cussler, E. (2014). Diffusion. *Mass transfer in fluid systems*. Cambridge University Press.
Logan, S. R. (2000). *Fundamentos de cinética química*. Addison Wesley.
Ravi, R., Vinu, R., & Gummadi, S. N. (Eds.). (2017). Coulson and Richardson's Chemical Engineering: volume 3A: c*hemical and biochemical reactors and reaction engineering*. Butterworth-Heinemann.

Walas, S. M. (2010). *Chemical process equipment*. Butterworth Heinemann Series in Chemical Engineering.