



Ministerio de Cultura y Educación  
Universidad Nacional de San Luis  
Facultad de Ingeniería y Ciencias Agropecuarias  
Departamento: Ingeniería de Procesos  
Area: Procesos Químicos

(Programa del año 2022)  
(Programa en trámite de aprobación)  
(Presentado el 30/08/2022 06:00:28)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
Ingeniería de las Reacciones Químicas 2	INGENIERÍA QUÍMICA	Ord 24/12 -17/2 2	2022	2° cuatrimestre

### II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
TONELLI, FRANCO	Prof. Responsable	P.Adj Exc	40 Hs
ARDISSONE, DANIEL	Prof. Colaborador	P.Tit. Exc	40 Hs
HERRERO, ALFREDO RICARDO	Responsable de Práctico	JTP Exc	40 Hs
COMELLI, OLGA ELISA	Auxiliar de Práctico	JTP Exc	40 Hs

### III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
8 Hs	Hs	Hs	Hs	8 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio	2° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
30/08/2022	30/11/2022	15	120

### IV - Fundamentación

El eje fundamental de la materia Ingeniería de las Reacciones Químicas 2, en adelante IRQUI 2, es el diseño de reactores catalíticos heterogéneos.

Tiene sus pilares fundamentales en materias tales como la Termodinámica, la Fisicoquímica, los Fenómenos de Transporte y la Ingeniería de las Reacciones Químicas.

Esta asignatura y la Ingeniería de las Reacciones Químicas 1 son las materias que marcan una de las diferencias más notables entre la educación del Ingeniero Químico y la de otros Ingenieros. De allí la importancia de su inclusión en el Plan de Estudios.

Como asignaturas auxiliares son de particular importancia los Métodos Numéricos.

### V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

- Modelar procesos de reacción catalizadas o no para diseñar y simular reactores.

- Diseñar y simular reactores catalíticos heterogéneos de lecho fijo para garantizar condiciones adecuadas de operación a partir de su dimensionamiento.
- Evaluar las desviaciones del comportamiento ideal para optimizar los diseños de los reactores.

## VI - Contenidos

### Unidad 1: REACCIONES HETEROGÉNEAS - CATALISIS HETEROGENEA

**Reacciones heterogéneas. Características generales. Clasificación. Definición general de la catálisis. Catalizadores: propiedades. Desactivación. Etapas de una reacción catalítica. Velocidad global de reacción. Adsorción física y química. El modelo de Langmuir: tratamiento Cuantitativo. La teoría de adsorción en multicapas (Ecuación BET).**

Propiedades físicas de los catalizadores. Superficie específica. Volumen hueco y densidad del sólido. Distribución de volumen de poros: método de penetración de mercurio, método de desorción de Nitrógeno.

### Unidad 2: CINÉTICA HETEROGENEA

**Reactores Catalíticos heterogéneos. Evaluación de reactores de laboratorio. Eliminación de controles.**

Expresiones de velocidad para reacciones catalíticas heterogéneas. Derivación de ecuaciones de velocidad. Adsorción. Reacción química superficial. Desorción. Mecanismos. Etapa controlante. Metodología de análisis cinético. Método diferencial: discriminación y estimación basada en la representación de los datos. Estimación de parámetros por regresión lineal: a) Procedimiento de estimación; b) Propiedades estadísticas y pruebas de hipótesis. Estimación de parámetros por regresión no lineal. Método integral de análisis cinético.

### Unidad 3: PROCESOS DE TRANSPORTE EXTERNO EN REACCIONES HETEROGÉNEAS

Efecto de los procesos físicos sobre la velocidad de reacción observada. Resistencia a la transferencia de materia.

Correlaciones. Difusión y reacción en la interfase. Factor de efectividad externo, isotérmico. Efectividad en términos de observables. Efectividad externa no isotérmica generalizada.

### Unidad 4: DIFUSIÓN Y REACCIÓN EN MEDIOS POROSOS

**Transferencia de masa intragranular. Mecanismos de transferencia de materia en capilares. Difusión molecular, Knudsen, combinada, configuracional, superficial. Difusividad efectiva. Definición. Estima a partir de modelos de la estructura porosa. Modelo de poros paralelos. Modelo de poros en desorden.**

Interacción entre transferencia de masa y reacción. Partícula catalítica isotérmica: Diferentes geometrías. Módulo de Thiele. Factor de efectividad interno. Módulo de Thiele observable. Reacciones limitadas por la difusión. Partícula no isotérmica. Diferentes geometrías. Factor de efectividad. Factor de efectividad global. Eliminación de regímenes limitados por reacción y difusión: criterio de Weisz-Prater, criterio de Mears.

### Unidad 5: DISEÑO DE REACTORES HETEROGÉNEOS. REACTORES CATALÍTICOS

Introducción. Diseño de reactores para reacciones catalíticas heterogéneas. Tipos comercialmente significativos de reactores catalíticos heterogéneos. Reactores de lecho fijo. Reactores trickle-bed. Reactores de lecho móvil. Reactores de lecho fluidizado. Reactores slurry. Clasificación de los modelos de reactores de lecho fijo. Modelos pseudo-homogéneos de reactores de lecho fijo. Modelo unidimensional pseudo-homogéneo de reactores de lecho fijo. Modelo bidimensional pseudo-homogéneo de reactores de lecho fijo.

### Unidad 6: REACTORES REALES

La técnica trazador respuesta. Discusión cualitativa. Ecuación de balance de trazador tiempo medio de Residencia. Modelos para reactores no ideales. Modelos para reactores ideales. Flujo pistón y mezcla completa ideales. Estancamiento. Canalizaciones. Dispersión. Modelo de dispersión. Modelo tanques en serie. Modelo en reciclo. Reactor de flujo laminar. Modelo de Dispersión: La ecuación del modelo. Análisis dimensional. Análisis de reactores con flujo pistón disperso. Correlaciones para coeficientes de dispersión. Efectos de la dispersión sobre la performance del reactor. Criterios para desprestigiar efectos de dispersión. Medición de coeficientes de dispersión. Determinación de Distribuciones de tiempos de residencia. Función de densidad de tiempos de residencia. Determinación de  $E(t)$  desde la respuesta a un impulso de trazador.

Determinación del tiempo medio de residencia. Distribución de tiempo de residencia. Determinación de  $F(t)$  desde una respuesta a trazador en escalón positiva o negativa. Tiempo reducido. Desviación desde los patrones de flujo ideal: zonas estancas. Bypass recirculación interna.

Micromezclado y modelo de flujo segregado. Perdición de mezclado. Estados de agregación y mezclado. Modelo de flujo segregado. Modelo de máximo mezclado. Efecto del micromezclado sobre la conversión.

## VII - Plan de Trabajos Prácticos

### TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA

Se realizan Trabajos Prácticos de aula equipadas con computadoras cuyas guías de actividades se apoyan en el Aprendizaje Basado en Problemas (ABP) conforme a una guía proporcionada por los docentes de la asignatura que, básicamente, consistirá en la resolución de problemas oportunamente propuestos por la cátedra, siguiendo el concepto de complejidad creciente y con el objetivo de aplicación de fundamentos teóricos a la vez de herramientas y conocimientos adquiridos en asignaturas anteriores. Según corresponda, los prácticos se resolverán con el auxilio de software específico o adquirido previamente en otras asignaturas, para resolver los temas según la siguiente descripción:

Unidad 1: Reacciones heterogéneas - catálisis heterogénea

Solución de problemas de aula y de aplicación en la ingeniería, usando herramientas informáticas para optimizar el cálculo y análisis de resultados

Unidad 2: Cinética heterogénea

Solución de problemas de aula y de aplicación en la ingeniería, usando herramientas informáticas para optimizar el cálculo y análisis de resultados

Unidad 3: Procesos de transporte externo en reacciones heterogéneas

Solución de problemas de aula y de aplicación en la ingeniería, usando herramientas informáticas para optimizar el cálculo y análisis de resultados

Unidad 4: Difusión y reacción en medios porosos

Solución de problemas de aula y de aplicación en la ingeniería, usando herramientas informáticas para optimizar el cálculo y análisis de resultados

Unidad 5: Diseño de reactores heterogéneos. reactores catalíticos.

Solución de problemas de aula y de aplicación en la ingeniería, usando herramientas informáticas para optimizar el cálculo y análisis de resultados

Unidad 6: Reactores reales

Solución de problemas de aula y de aplicación en la ingeniería, usando herramientas informáticas para optimizar el cálculo y análisis de resultados

Los encuentros se darán en el aula de computación

La metodología empleada para el dictado de las guías de trabajo práctico para el curso de IRQUI 2 es la siguiente:

1° Antes del comienzo de cada guía se realiza un breve repaso de los contenidos vistos en teoría para dar comienzo al trabajo práctico correspondiente al tema dado. Despejamos dudas, vemos ventajas y desventajas entre métodos y las diferencias entre ellos.

2° Se da comienzo a la guía correspondiente. Antes de su resolución, se preguntará por su interpretación para comenzar a resolverlo. Parte del análisis del enunciado de un problema se lleva a cabo con lápiz y papel, y posteriormente se continúa con la resolución ya sea en la PC utilizando MathCad o si la resolución lo permite, en la misma carpeta; y en caso de ser necesario utilizaran programadores gráficos (Excel, Origin) que son de su conocimiento y que algunas veces resultan necesarios para complementar la actividad.

3° Se hace una lectura y análisis de los valores (y gráficos) obtenidos, estableciendo una coherencia entre la relación teoría/práctica. Finalmente darán una conclusión grupal, respetando la palabra del/la compañera/o.

4° Entre todos, cerraremos conceptualmente la clase práctica realizando una puesta en común oral y con ayuda de la pizarra.

Cabe aclarar, que los puntos 3 y 4 algunas veces no se podrán llevar a cabo por cuestiones de tiempo.

Se contemplarán en la evaluación de los trabajos prácticos los siguientes ítems:

- Asistencia (asistir como mínimo al 80% de las clases prácticas)
- Participación
- Trabajo individual
- Comprensión de la actividad

Y en cada ítem se tendrá en cuenta el nivel de alcance estimando si cumple o no cumple con lo estipulado.

#### TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO

Los encuentros se darán en el laboratorio de Ingeniería de las Reacciones Químicas

Se realizarán los siguientes trabajos prácticos de laboratorio:

1. Determinación de distribución de tiempos de residencia en reactores tanque agitado continuos.
2. Determinación de distribución de tiempos de residencia en reactores flujo pistón.

Se contemplarán en la evaluación de los trabajos prácticos de laboratorio los siguientes ítems:

- Asistencia del 100%
- Cumplimiento en el uso de los elementos de seguridad
- Trabajo Grupal
- Aptitud, proactividad, iniciativa
- Toma decisiones
- Entrega y presentación del informe, abordando técnicas, criterios, y conclusiones.

### VIII - Regimen de Aprobación

#### A - METODOLOGÍA DE DICTADO DEL CURSO:

La metodología empleada para el dictado del curso consiste en la exposición oral de cada uno de los temas del presente programa, utilizando recursos tecnológicos tales como PC y proyector, y usando las herramientas digitales disponibles; para tal fin se emplea Power Point. Se acompaña la exposición con el uso del pizarrón.

Tal como se mencionó en el ítem anterior (Ítem VII) la metodología del curso se apoya sobre el Aprendizaje Basado en Problemas (ABP), es por ello que los exámenes parciales y sus respectivos recuperatorios seguirán la misma modalidad descrita en dicho ítem. A su vez, para conformar globalmente parte de la evaluación, se brinda una retroalimentación de forma presencial y personal entre los profesores y el/la estudiante para resaltar aspectos importantes del examen parcial; si se observan características similares se discuten en conjunto.

Los prácticos de laboratorio se realizan en el horario de clases y se evalúan por separado, siendo imprescindible su realización y aprobación para aspirar a la regularidad/promoción de la asignatura.

#### B - CONDICIONES PARA REGULARIZAR EL CURSO

Para regularizar el curso, es requisito que los alumnos:

- Asistir como mínimo al 80% de las clases teórico-prácticas.
- Asistir a los dos trabajos prácticos de laboratorio
- Aprobar los informes de laboratorio
- Aprobar dos evaluaciones parciales de carácter práctico, o sus correspondientes recuperaciones (2), con un mínimo de 7 (siete) puntos.

Fecha tentativa primera evaluación: 22/SET/2015.

Fecha tentativa segunda evaluación: 09/NOV/2015.

#### C – RÉGIMEN DE APROBACIÓN CON EXÁMEN FINAL

- Se requiere la aprobación de un examen oral individual sobre aspectos teóricos de la asignatura.

#### D – RÉGIMEN DE PROMOCIÓN SIN EXAMEN FINAL

Condiciones para promocionar el curso:

- Podrán cursar por este régimen aquellos alumnos que hayan aprobados las asignaturas correlativas requeridas por el plan de

estudios hasta la fecha determinada por el calendario académico, y figuren en condición de promocional en el sistema de alumnos.

- Asistir como mínimo al 80% de las clases teórico-prácticas.
- Asistir 100% a los trabajos prácticos de laboratorio y aprobar los informes respectivos.
- Aprobar dos evaluaciones parciales de carácter práctico, o sus correspondientes recuperaciones, con un mínimo de 7 (siete) puntos.
- Aprobar dos evaluaciones sobre conceptos teóricos de la asignatura, con un mínimo de 7 (siete) puntos. Tales evaluaciones se tomarán en fechas a convenir con los alumnos, en el transcurso del cuatrimestre.
- Aprobar un coloquio integrador, que se tomará en la semana siguiente a la finalización del cuatrimestre.

#### E – RÉGIMEN DE APROBACIÓN PARA ESTUDIANTES LIBRES

- Para el/la estudiante que cursó la asignatura y quedó libre por parciales, habiendo aprobado todas las instancias de trabajos prácticos de laboratorio. Se requiere:

1. Aprobar un examen escrito, de carácter eliminatorio, que consistirá en la resolución de problemas basado en los trabajos prácticos de aula.

2. Aprobar un examen oral de los temas teóricos del curso.

- Para el/la estudiante que no cursó la asignatura. Se requiere:

1. Aprobar el Práctico Seguridad en el Laboratorio.

2. Realizar y aprobar con el correspondiente informe, como mínimo, un trabajo práctico de laboratorio a sortear (Prácticos 1 a 3).

3. Aprobar un examen escrito, que consistirá en la resolución de problemas basado en los trabajos prácticos de aula.

4. Aprobar un examen oral de los temas teóricos del curso.

Cada instancia tiene carácter eliminatorio.

### IX - Bibliografía Básica

[1] [1] Chemical Reactor Analysis and Design. Froment & Bischof. J. Wiley and Sons. N.Y

[2] [2] Ingeniería de la Cinética Química. J.M. Smith. Ed. CECSA.3

[3] [3] Ingeniería de las Reacciones Químicas. O. Levenspiel. Ed. Reverté

[4] [4] Elements of Chemical Reaction Engineering. H.Scott Fogler. Forth Edition, Prentice Hall.

[5] [5] Apuntes de Cátedra.

### X - Bibliografía Complementaria

[1] [1] Charles G. Hill, Jr. John Wiley & Sons

[2] [2] Análisis y Simulación de Procesos. Himmelblau, Bischoff. J. Wiley and Sons, N.Y.

[3] [3] Introducción al Diseño de Reactores Químicos. Ferreti, Farina y Barreto. Ed. EUDEBA.

[4] [4] Process Analysis by Statistical Methods. Himmelblau. J. Wiley and Sons. N.Y.

[5] [5] Chemical kinetics. Laidler K.J. Mc. Graw Hill Book Comp.

[6] [6] Introduction to the Analysis of Chemical Reactors. Aris R., Prentice Hall.

[7] [7] Elementary Chemical Reactor Analysis. Aris, R. Prentice Hall.

[8] [8] Kinetics of Chemical Processes. Boudart, M. Prentice Hall.

[9] [9] Chemical Process Principles. Hougen and Watson.

[10] [10] Trabajos publicados en revistas especializadas.

### XI - Resumen de Objetivos

- Modelar procesos de reacción catalizadas o no.
- Diseñar y simular reactores catalíticos heterogéneos de lecho fijo.
- Evaluar las desviaciones del comportamiento ideal.

### XII - Resumen del Programa

TEMA 1: REACCIONES HETEROGÉNEAS - CATALISIS HETEROGENEA

Reacciones heterogéneas. Clasificación. Definición general de la catálisis. Catalizadores. Etapas de una reacción catalítica. Velocidad global de reacción. Propiedades físicas de los catalizadores

#### TEMA 2: CINÉTICA HETEROGÉNEA

Expresiones de velocidad para reacciones catalíticas heterogéneas. Derivación de ecuaciones de velocidad. Metodología de análisis cinético.

#### TEMA 3: PROCESOS DE TRANSPORTE EXTERNO EN REACCIONES HETEROGÉNEAS

Efecto de los procesos físicos sobre la velocidad de reacción observada. Factor de efectividad externo, isotérmico. Efectividad en términos de observables. Efectividad externa no isotérmica generalizada.

#### TEMA 4: DIFUSIÓN Y REACCIÓN EN MEDIOS POROSOS

Transferencia de masa intragranular. Interacción entre transferencia de masa y reacción. Módulo de Thiele. Factor de efectividad interno. Módulo de Thiele observable. Reacciones limitadas por la difusión. Factor de efectividad. Factor de efectividad global. Eliminación de regímenes limitados por reacción y difusión: criterio de Weisz-Prater, criterio de Mears.

#### TEMA 5: DISEÑO DE REACTORES HETEROGÉNEOS. REACTORES CATALÍTICOS

Diseño de reactores para reacciones catalíticas heterogéneas. Reactores de lecho fijo. Clasificación de los modelos de reactores de lecho fijo. Modelos pseudo-homogéneos de reactores de lecho fijo. Modelo unidimensional pseudo-homogéneo de reactores de lecho fijo. Modelo bidimensional pseudo-homogéneo de reactores de lecho fijo.

#### TEMA 6: REACTORES REALES

La técnica trazador respuesta. Modelos para reactores ideales. Estancamiento. Canalizaciones. Dispersión. Modelo de dispersión. Modelo tanques en serie. Modelo en reciclo. Reactor de flujo laminar. Modelo de Dispersión. Distribuciones de tiempos de residencia. Función de densidad de tiempos de residencia. Micromezclado y modelo de flujo segregado. Perdición de mezclado. Estados de agregación y mezclado. Modelo de flujo segregado. Modelo de máximo mezclado. Efecto del micromezclado sobre la conversión.

### XIII - Imprevistos

Se resolverán de acuerdo a las posibilidades y circunstancias

### XIV - Otros

<b>ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA</b>	
	<b>Profesor Responsable</b>
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	