



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 29/08/2022 12:09:34)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
(Asignaturas Optativas-Plan Ord. C.D. N°024/12) Optativa: Modelado y Simulación de Reactores Químicos y Biorreactores.	INGENIERÍA QUÍMICA	024/1	2022	1° cuatrimestre
		2-19/15		

### II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
RODRIGUEZ, MARIA LAURA	Prof. Responsable	P.Aso Simp	10 Hs
BELZUNCE, PABLO SANTIAGO	Responsable de Práctico	JTP Exc	40 Hs
VILLARROEL ROCHA, DIMAR	Auxiliar de Práctico	A.1ra Simp	10 Hs

### III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
Hs	3 Hs	4 Hs	Hs	7 Hs

Tipificación	Periodo
C - Teoría con prácticas de aula	2° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
08/08/2022	18/11/2022	15	105

### IV - Fundamentación

El espacio curricular aúna dos campos del conocimiento, los Reactores (Químicos y Biológicos) con el Análisis Numérico, a través de modelos matemáticos. El modelado matemático es la ciencia o el arte de transformar cualquier problema de macroescala o microescala en ecuaciones matemáticas. El modelado matemático de los sistemas y procesos químicos y biológicos se basan en química, bioquímica, microbiología, fenómenos de difusión, transferencia de calor, reacciones catalíticas y biocatalíticas, balances de materia y energía, etc.

Tan pronto como los procesos químicos y biológicos se convierten en ecuaciones, deben resolverse eficientemente para tener valor práctico. Las ecuaciones son usualmente resueltas numéricamente con la ayuda de computadoras y software adecuado. Casi todos los problemas que enfrentan los ingenieros son no lineales y requieren técnicas numéricas para resolverlos. Una tarea central resulta entonces identificar los procesos químicos / biológicos que tienen lugar dentro de los límites del sistema bajo análisis y ponerlos eficazmente en forma de ecuaciones utilizando supuestos justificables y leyes físico-químicas y biológicas. La mejor y más moderna clasificación de diferentes procesos es a través de la teoría de sistemas. Los modelos pueden formarse a partir de ecuaciones de diseño de estado estacionario utilizadas en el diseño (principalmente tamaño y optimización), o ecuaciones de estado no estacionario (dinámico) utilizadas en el arranque, apagado, y en el diseño de sistemas de control.

La complejidad del modelo matemático depende del grado de precisión requerido y de la complejidad de la interacción entre

los diferentes procesos que toman lugar dentro de los límites del sistema y en la interacción entre el sistema y su entorno. Resulta importante para los ingenieros alcanzar un grado óptimo de sofisticación (complejidad) para el modelo del sistema. Por “grado óptimo de sofisticación” nos referimos a encontrar un modelo para el proceso, que sea lo más simple posible sin sacrificar la precisión requerida según lo dictado por la aplicación práctica específica del modelo.

## V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Se pretende que el alumno sea capaz de simular y analizar un reactor a partir de las ecuaciones fundamentales. Para el logro de dicho objetivo se propone brindar una formación orientada a desarrollar capacidades que permitan el manejo de estrategias de síntesis, modelado y simulación de reactores y biorreactores.

Resultados de Aprendizaje:

- Implementar técnicas para la construcción de modelos matemáticos de reactores químicos y biorreactores con el fin de representar los fenómenos físicos y químicos involucrados, mediante el uso de leyes de conservación de masa, calor y cantidad de movimiento.
- Identificar modelos matemáticos de reactores químicos y biorreactores de diferente grado de complejidad para interpretar las hipótesis planteadas y los fenómenos que se pretende analizar.
- Diseñar y codificar un ambiente de simulación para simular la operación de un reactor (o biorreactor) mediante un lenguaje de programación.
- Analizar resultados de simulación a partir de las potencialidades del modelo planteado, siguiendo criterios que les permitan explorar las ventanas operativas más adecuadas.
- Validar sus modelos frente a información de literatura para confirmar las hipótesis consideradas.

Competencias

Competencias Tecnológicas abordadas

1. Competencias para identificar formular y resolver problemas de ingeniería. Se pretende que el alumno:

- Sea capaz de evaluar el contexto particular del problema e incluirlo en el análisis
- Sea capaz de desarrollar criterios profesionales para la evaluación de las alternativas y seleccionar la más adecuada en un contexto particular.
- Sea capaz de establecer supuestos, de identificar técnicas eficaces de resolución y de estimar errores.

2. Competencia para concebir, diseñar y desarrollar proyectos de ingeniería (Sistemas, componentes, productos o procesos).

Se pretende que el alumno:

- Sea capaz de modelar el objeto del proyecto, para su análisis (modelos físicos y químicos y simulación)
- Sea capaz de evaluar y optimizar el diseño.
- Sea capaz de documentar el proyecto y comunicarlo de manera efectiva.

3. Competencia para utilizar de manera efectiva las técnicas y herramientas de aplicación en la ingeniería. Se pretende que el alumno:

- Sea capaz de seleccionar fundamentadamente las técnicas y herramientas más adecuadas, analizando la relación costo/beneficio de cada técnica.
- Sea capaz de interpretar los resultados que se obtengan de la aplicación de las diferentes técnicas y herramientas utilizadas.

Competencias Sociales, Políticas y Actitudinales abordadas

4. Competencias para desempeñarse de manera efectiva en equipos de trabajo. Se pretende que el alumno:

- Sea capaz de identificar las metas y responsabilidades individuales y colectivas y actuar de acuerdo a ellas.
- Ser capaz de realizar una evaluación de funcionamiento y la producción del equipo.

5. Competencia para comunicarse con efectividad. Se pretende que el alumno:

- Sea capaz de expresarse de manera concisa, clara y precisa, tanto en forma oral como escrita.
- Sea capaz de producir textos técnicos, rigurosos y convincentes.
- Ser capaz de comprender textos técnicos en idioma inglés.

6. Competencia para aprender en forma continua y autónoma. Se pretende que el alumno:

- Sea capaz de reconocer la necesidad de un aprendizaje continuo en un campo de permanente evolución.
- Sea capaz de lograr autonomía de aprendizaje siendo capaz de hacer búsqueda bibliográfica por diversos medios y de seleccionar el material relevante.

## VI - Contenidos

**Tema 1. Modelado y simulación de reactores**

Aspectos generales de los balances de masa, calor y cantidad de movimiento. Ecuaciones fundamentales del modelo: Ecuaciones de continuidad de especies. Forma general y formas específicas. Ecuación de energía. Forma general y formas específicas. Ecuación de cantidad de movimiento.

### **Tema 2. Modelado matemático 1D de reactores catalíticos de lecho fijo**

Modelos pseudohomogéneos en estado estacionario con y sin retromezclado. Hipótesis del modelo. Modelos heterogéneos en estado estacionario: Modelos isotérmicos con resistencias interfaciales e intraparticulares a transferencia de masa. Hipótesis del modelo, estimación de parámetros y técnica de resolución numérica. Modelos adiabáticos y no-isotérmicos con resistencias interfaciales a la transferencia de masa y calor y con resistencias intraparticulares a transferencia de masa. Hipótesis de los modelos. Análisis de los números de Biot y Péclet. Estimación de parámetros. Técnicas de resolución numérica. Modelos en estado no estacionario debido a la desactivación del catalizador. Simulación de un caso práctico de interés con complejidad creciente en el modelo.

### **Tema 3. Modelado y simulación de reactores de membrana**

Clasificación de los reactores de membrana. Aplicaciones. Leyes de permeación en adición controlada de reactivos y en remoción selectiva de productos de reacción. Reactores tipo carcasa y tubos. Modelos matemáticos uni y bidimensionales pseudohomogéneos. Suposiciones del modelo. Balances de masa y energía entre los tubos y la carcasa. Técnica de resolución numérica. Análisis de la simulación en casos prácticos de interés.

### **Tema 4. Modelado y simulación de reactores estructurados**

Principales tipos y clasificación. Características y principales aplicaciones. Modelos a nivel del canal: Modelos 1D pseudohomogéneos y heterogéneos. Modelos adiabáticos y no-isotérmicos. Modelos de recubrimiento uniforme y uniformemente no-uniforme. Hipótesis de los modelos planteados y técnicas de resolución numérica. Modelos a nivel del reactor: Modelos discretos y continuos. Análisis de la simulación en un caso práctico de interés.

### **Tema 5. Modelado y simulación de biorreactores**

Procesos biotecnológicos: modelado y simulación. Aspectos generales en la construcción de modelos. Modelos en biotecnología. Reactores enzimáticos. Cinética enzimática. Enzimas libres, inmovilizadas y confinadas. Reactores discontinuos, continuos y semicontinuos. Funcionamiento isoterma y no isoterma. Modelos de difusión-reacción en sistemas enzimáticos heterogéneos. Aplicación a la cinética de Michaelis-Menten reversible. Técnica de resolución numérica: estimación del factor de efectividad.

### **Tema 6. Modelado de reactores de lecho fluidizado**

Principales aspectos en la fluidización. Transición desde fluidización suave a fluidización burbujeante. Clasificación de Geldart de partículas. Concepto de velocidad terminal de partícula. Regímenes de fluidización. Distribuidores. Burbujas. Modelo de Davidson para una burbuja aislada. Modelo de tres fases de Kunii y Levenspiel. Correlaciones. Intercambio de gas entre fase emulsión y burbuja. Modelos de flujo para lecho burbujeante de partículas finas, intermedias y grandes.

## **VII - Plan de Trabajos Prácticos**

Los profesores de la asignatura pondrán a disposición de los alumnos programas y rutinas realizados, que corresponden a la resolución de los modelos desarrollados en las clases teóricas:

Práctico introductorio: Introducción al lenguaje de programación y entorno de simulación

Práctico 1.- Modelos de un reactor de lecho fijo con grado de complejidad creciente.

Práctico 2.- Modelos de un reactor de membrana con adición controlada de reactivos.

Práctico 3.- Modelos de un reactor estructurado de tipo monolítico.

Práctico 4.- Modelos de un reactor tanque agitado continuo, en estado estacionario, con enzimas inmovilizadas.

Práctico 5.- Modelos de un reactor estructurado con enzimas inmovilizadas en las paredes de los canales.

Práctico 6.- Modelos de un reactor de lecho fluidizado.

Con todos ellos se realizarán simulaciones de esos sistemas para estudiar la influencia de las distintas variables en su comportamiento.

Los trabajos prácticos 1 al 6 se abordan desde la perspectiva del aprendizaje basado en problemas, se pretende que el

estudiante construya su conocimiento sobre la base de problemas y procesos con reacción y que, además, lo haga con el mismo razonamiento que utilizará cuando sea profesional. En cada práctico se plantean problemas a partir de las que se van desprendiendo preguntas a las que el estudiante debe responder, al finalizar el práctico el alumno debe entregar un informe presentando los resultados que será evaluado mediante rúbricas.

## VIII - Regimen de Aprobación

### METODOLOGÍA DE DICTADO Y APROBACIÓN DE LA ASIGNATURA

#### METODOLOGÍA:

La metodología adoptada para el dictado de las clases es teórico - práctico. Los principales aspectos serán los siguientes:

- Se explicarán al comienzo de cada clase los conceptos esenciales de cada tema.
- Los alumnos tendrán total libertad para solicitar aclaraciones cuando las explicaciones no sean lo suficientemente claras.
- Los docentes mostrarán a los alumnos la solución de problemas modelo que den lugar a la aplicación de los conceptos introducidos en clase. Luego serán seleccionados otros problemas para resolución por parte de los alumnos de manera que posibiliten la ejercitación de los conceptos, y la resolución de los problemas que los incluyen.
- Se implementarán trabajos prácticos.

#### REGIMEN DE REGULARIDAD:

Condiciones para promocionar el curso:

Sólo podrán acceder a este régimen los alumnos que cumplan con las condiciones que estipula el régimen de correlatividades para cursar la asignatura y que se encuentren debidamente inscriptos en este curso.

- Condiciones para regularizar el curso:

- 1) Asistencia al 80% de las actividades presenciales programadas.
- 2) Aprobación del 100% de las evaluaciones teórico-prácticas, con una calificación de al menos 70%.

Exámenes parciales: 2 exámenes parciales más un trabajo integrador.

Los alumnos tendrán opción a 2 (dos) recuperatorios por cada parcial (Ord. CS 32/14)

- Condiciones para aprobar el curso:

Accederán al examen final en condiciones de alumno regular los que sean reconocidos en tal situación en la asignatura por sección alumnos. El examen final podrá ser oral u escrito, y podrá comprender cualquier contenido del programa analítico de la materia.

Régimen de Promoción sin examen final:

Sólo podrán acceder a este régimen los alumnos que cumplan con las condiciones requeridas para cursar y aprobar la asignatura que estipula el régimen de correlatividades vigentes en el plan de estudios de la carrera y se encuentren debidamente inscriptos en este curso.

Condiciones para promocionar la asignatura:

- 1) Asistencia al 80% de las actividades presenciales programadas.
- 2) Aprobación del 100% de las evaluaciones teórico-prácticas, con una calificación de al menos 80 %. Estas evaluaciones son de carácter individual o grupal y poseen dos instancias de recuperación por evaluación (Ord. CS 32/14). La promoción es válida en tanto y en cuanto se alcance una calificación de al menos el 80% en cada evaluación parcial o en la primera instancia de recuperación de cada evaluación.
- 3) Aprobación de la evaluación final integradora, con calificación de al menos el 80%. Esta evaluación, de carácter individual o grupal, se realizará a través de la resolución de casos prácticos apoyándose en la lectura de artículos científicos, que luego expondrán.

Son requisitos indispensables haber cumplido con el porcentaje de asistencia estipulado y la aprobación de los trabajos prácticos. Una vez aprobadas todas instancias de evaluación (prácticas, teóricas y trabajo integrador), la nota final de la asignatura será el promedio de las calificaciones obtenidas en cada instancia.

Régimen de Promoción con examen final para Alumnos Libres:

Sólo podrán acceder a este régimen los alumnos que registraron su inscripción anual en el período establecido y aquellos que estén comprendidos en alguna de las siguientes opciones:

- a. Los alumnos que se inscribieron en el curso como promocionales o regulares y no cumplieron con los requisitos estipulados en el programa.
- b. Los alumnos no inscriptos para cursar, que cumplen con las correlativas requeridas para rendir el curso.
- c. Los alumnos que han regularizado el curso, pero que no rindieron la asignatura en el plazo establecido. Nota: También será

de aplicación toda otra norma vigente para esta categoría de alumnos como la que exige haber regularizado al menos una asignatura de su carrera en el año académico en el que se inscribe para rendir (Ordenanza Rectoral N° 11/83).

Características de las evaluaciones libres:

- El examen versará sobre la totalidad del último programa, contemplando los aspectos teóricos y prácticos del curso.
- El examen constará de una instancia referida a los Trabajos Prácticos previa al desarrollo de los aspectos teóricos, que se realizará el día fijado para el Examen Final.
- La modalidad del examen final podrá ser escrita u oral de acuerdo a como lo decida el tribunal evaluador.
- El alumno que pretenda rendir un examen libre deberá consultar previamente con el responsable de la asignatura. Este requisito es indispensable para programar las actividades de evaluación prácticas y teóricas.

## RÚBRICAS

Las calificaciones serán resultado de la evaluación integral del desempeño del alumno, que indica no sólo el grado de adquisición de conocimientos, sino también el desarrollo de las capacidades propuestas.

La puntuación para evaluar la adquisición de capacidades queda comprendido entre Excelente (5), Muy Bueno (4), Bueno (3), En proceso (2) y Necesita mejorar (1).

Así las capacidades a evaluar comprenden:

1. Comprensión del problema: Capacidad de identificar y formular claramente el problema.

o Excelente (5): Interpreta en forma precisa la situación problemática.

o Muy Bueno (4): Interpreta la situación problemática en equipo sin consultar al docente.

o Bueno (3): Interpreta la situación problemática en equipo consultando al docente.

o En proceso (2): Interpreta parcialmente la situación problemática y requiere asistencia del docente.

o Necesita mejorar (1): Interpreta inadecuadamente la situación problemática o no participa de la etapa de interpretación.

2. Elaboración de modelos: Capacidad de plantear modelos matemáticos a partir de ciertas hipótesis, realizando una búsqueda racional de parámetros que se requieran.

o Excelente (5): Busca y sugiere claramente el modelo matemático de del fenómeno físico-químico bajo estudio, y adopta correctamente las hipótesis simplificadoras y los parámetros correspondientes.

o Muy Bueno (4): Refina el modelo matemático del fenómeno físico-químico bajo estudio sugerido por otro, y adopta correctamente las hipótesis simplificadoras y los parámetros correspondientes.

o Bueno (3): No refina o sugiere el modelo matemático del fenómeno físico-químico bajo estudio, ni las hipótesis, pero está dispuesto a tratar las propuestas sugeridas por otros realizando búsqueda de parámetros.

o En proceso (2): No refina o sugiere el modelo matemático del fenómeno físico-químico bajo estudio, ni las hipótesis, pero está dispuesto parcialmente a tratar las propuestas sugeridas por otros realizando búsqueda de parámetros.

o Necesita mejorar (1): No refina o sugiere el modelo matemático del fenómeno físico-químico bajo estudio, ni las hipótesis y no participa en tratar las propuestas sugeridas por otros.

3. Resolución numérica: Uso de técnicas numéricas de resolución de las ecuaciones que describen el modelo.

o Excelente (5): Selecciona correctamente la técnica de resolución numérica. Hace un uso adecuado del programa de simulación y demuestra solvencia en la elaboración del algoritmo de cálculo.

o Muy Bueno (4): Refina la selección de la técnica de resolución numérica propuesto por otro. Hace un uso adecuado del programa de simulación y demuestra capacidad para discutir la elaboración del algoritmo de cálculo.

o Bueno (3): Necesita validar con el equipo la selección de la técnica de resolución numérica. Hace un adecuado uso del programa de simulación, y una adecuada selección de las sentencias de ejecución del algoritmo de cálculo.

o En proceso (2): Necesita asistencia del docente para validar la selección de la técnica de resolución numérica, así como el uso del programa de simulación, y la selección de las sentencias de ejecución del algoritmo de cálculo.

o Necesita mejorar (1): No hace uso de la herramienta de cálculo.

4. Simulación del proceso: Capacidad de simular la operación del proceso y desarrollar criterios que les permitan explorar las ventanas operativas.

o Excelente (5): Ejecuta correctamente el programa y usa en forma precisa los criterios ingenieriles para explorar las ventanas operativas más adecuadas.

o Muy Bueno (4): Ejecuta correctamente el programa y refina los criterios ingenieriles aportados por otro para explorar las ventanas operativas más adecuadas.

- o Bueno (3): Ejecuta correctamente el programa y toma y reproduce los criterios ingenieriles aportados por otros para explorar las ventanas operativas más adecuadas.
  - o En proceso (2): Necesita asistencia para ejecutar correctamente el programa y toma y reproduce los criterios ingenieriles aportados por otros para explorar las ventanas operativas más adecuadas.
  - o Necesita mejorar (1): No ejecuta el programa.
5. Validación del modelo: Capacidad para evaluar la confiabilidad del modelo.
- o Excelente (5): Interpreta de forma precisa los resultados y los contrasta adecuadamente frente a criterios de ingeniería y/o información bibliográfica.
  - o Muy Bueno (4): Refina la interpretación de los resultados y los contrasta adecuadamente frente a criterios de ingeniería y/o información bibliográfica.
  - o Bueno (3): Requiere asistencia del equipo para interpretar de forma precisa los resultados y los contrasta adecuadamente frente a criterios de ingeniería y/o información bibliográfica.
  - o En proceso (2): Requiere asistencia del docente para interpretar de forma precisa los resultados y los contrasta adecuadamente frente a criterios de ingeniería y/o información bibliográfica.
  - o Necesita mejorar (1): No interpreta los resultados ni los contrasta adecuadamente frente a criterios de ingeniería y/o información bibliográfica.
6. Trabajando con otros: Desempeño efectivo en equipo, alcanzando metas grupales e individuales.
- o Excelente (5): Casi siempre escucha, comparte y apoya el esfuerzo de otros. Trata de mantener la unión de los miembros trabajando en grupo.
  - o Muy Bueno (4): Usualmente escucha, comparte y apoya el esfuerzo de otros. Mantiene una actitud pasiva en el grupo.
  - o Bueno (3): A veces escucha, comparte y apoya el esfuerzo de otros. No toma una posición.
  - o En proceso (2): A veces escucha, comparte y apoya el esfuerzo de otros. Pero algunas veces no es un buen miembro del grupo.
  - o Necesita mejorar (1): Raramente escucha comparte y apoya el esfuerzo de otros. Frecuentemente no es un buen miembro del grupo.
7. Comunicación efectiva de resultados: Capacidad de documentar el proyecto y comunicarlo de manera efectiva.
- o Excelente (5): Se expresa de manera concisa, clara y precisa, tanto en forma oral como escrita.
  - o Muy Bueno (4): Se expresa parcialmente de manera concisa, clara y precisa, tanto en forma oral como escrita.
  - o Bueno (3): A veces se expresa de manera concisa, clara y precisa, tanto en forma oral como escrita.
  - o En proceso (2): Requiere asistencia para expresarse de manera concisa, clara y precisa, tanto en forma oral como escrita.
  - o Necesita mejorar (1): No se expresa de manera concisa, clara y precisa, tanto en forma oral como escrita.
8. Autonomía: Capacidad autodidacta de afrontar el problema mediante el uso de recurso bibliográficos impresos u online.
- o Excelente (5): Se mantiene enfocado en el trabajo que necesita hacer. Muy auto-dirigido.
  - o Muy Bueno (4): La mayor parte del tiempo se enfoca en el trabajo que se necesita hacer. Otros miembros del grupo pueden contar con esta persona.
  - o Bueno (3): Algunas veces se enfoca en el trabajo que se necesita hacer. Otros miembros del grupo deben recordarle a esta persona que se mantenga enfocada.
  - o En proceso (2): Requiere asistencia para enfocarse en el trabajo que se necesita hacer.
  - o Necesita mejorar (1): Raramente se enfoca en el trabajo que se necesita hacer. Deja que otros hagan el trabajo.

## **IX - Bibliografía Básica**

- [1] G.F. Froment, J. De Wilde, K.B. Bischoff, Chemical Reactor Analysis and Design (third ed), Wiley, Canada (2011).
- [2] A. Dixon, Modeling and Simulation of Heterogeneous Catalytic Processes, Academic Press (2014)
- [3] J. Ancheyta, Modeling and Simulation of Catalytic Reactors for Petroleum Refining, John Wiley & Son (2011).
- [4] S.S.E. H. Elnashaie and S.S. Elshishini. Modelling, simulation, and optimization of industrial fixed bed catalytic reactors, Gordon and Breach Science Publishers S.A (1997).
- [5] J.G. Sanchez-Macano, T.T. Tsotsis, Catalytic Membranes and Membrane Reactors, Wiley-VCH, Weinheim (2002).
- [6] A. Julbe, D. Farrusseng, C. Guizard, Porous ceramic membranes for catalytic reactors—overview and new ideas, J. Membr. Sci. 181 (2001) 3.
- [7] R.E. Hayes, S.T. Kolaczowski, Introduction to Catalytic Combustion, first ed., Gordon and Breach Science Publishers,

Netherlands (1997).

[8] A. Cybulski, J.A. Moulijn, Monoliths in heterogeneous catalysis, *Catal. Rev.*, 36 (1994), pp. 179-270.

[9] F. Kapteijn, G.B. Marin, J.A. Moulijn, Catalytic reaction engineering, Chapter 8 in catalysis: an integrated approach, in: R.A. van Santen, P.W.N.M. van Leeuwen, J.A. Moulijn, B.A. Averill (Eds.), Elsevier, Amsterdam (1999).

[10] J.E. Bailey, D. F. Ollis, *Biochemical Engineering Fundamentals*, McGraw-Hill, New York (1977).

[11] P.M. Doran, *Bioprocess Engineering Principles*, Academic Press, London (1995).

[12] J. Ingham, I.J. Dunn IJ, E. Heinzle, J.E. Prenosil, *Biological reaction engineering*, Wiley (2003).

[13] J. Nielsen, J. Villadsen, G. Liden. *Bioreaction Engineering Principles*, Kluwer (2003).

[14] J.M. Smith, H.C. Van Ness, M.M. Abbott, *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics* McGraw-Hill, New York (2005).

[15] R.C. Reid, J.M. Prausnitz, T.K. Sherwood, *The Properties of Gases and Liquids* (third ed.), Mc Graw Hill, New York (1977).

## X - Bibliografía Complementaria

[1] A.G. Dixon, Recent research in catalytic inorganic membrane reactors, *Int. J. Chem. React. Eng.* 1 (2003) 1 (Rev.6).

[2] G. Saracco, H.W.J.P. Neomagnus, G.F. Versteeg, W.P.M. van Swaaij, High-temperature membrane reactors: potential and problems, *Chem. Eng. Sci.* 54 (1999) 1997.

[3] J. Chen, H. Yang, N. Wanga, Z. Ring, T. Dabros, Mathematical modeling of monolith catalysts and reactors for gas phase reactions, *Appl. Catal. A*, 345 (2008) 1-11.

[4] A. Bódalo y colab., *Análisis y simulación digital de reactores de lecho fijo para sistemas de enzimas inmovilizadas*, Secretariado de Publicaciones. Universidad de Murcia (1986).

[5] Artículos propios

[6] M.L. Rodriguez, L.E. Cadús, D.O. Borio, "Effect of heat losses on monolithic reactors for VOC abatement".

[7] *Chem. Eng. J.*, *Chem. Eng. J.*, En prensa (2018). <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.10.076>

[8] M.L. Rodriguez, L.E. Cadús, D.O. Borio, "Monolithic reactor for VOCs abatement: Influence of non-

[9] uniformity in the coating". *J. Env. Chem. Eng.*, 5 (2017) 292-302.

[10] M.L. Rodriguez, L.E. Cadús, D.O. Borio, "VOCs abatement in adiabatic monolithic reactors: heat effects,

[11] transport limitations and design considerations". *Chem. Eng. J.*, 306 (2016) 86-98.

[12] M.L. Rodríguez, L.E. Cadús, "Mass transfer limitations in a monolithic reactor for the catalytic oxidation

[13] of ethanol", *Chem. Eng. Sci.*, 143 (2016) 305-313.

[14] M.L. Rodriguez, M. N. Pedernera, D.O. Borio, "Two dimensional modeling of a membrane reactor for ATR

[15] of methane". *Catal. Today*, 193 (2012) 137-144.

[16] M.L. Rodriguez, D.E. Ardissonne, E. López, M. N. Pedernera, D.O. Borio, "Reactor designs for ethylene

[17] production via ethane ODH: comparison of performance", *Ind. Eng. Chem. Res.* 50 (2011) 2690-2697.

[18] M.L. Rodriguez, D.E. Ardissonne, E. Heracleous, A.A. Lemonidou, E. López, M.N. Pedernera, D.O. Borio,

[19] "Oxidative dehydrogenation of ethane to ethylene in a membrane reactor: A theoretical study", *Catal.*

[20] *Today*, 157 (2010) 303-309.

[21] M.L. Rodriguez, D.E. Ardissonne, M. N. Pedernera, D.O. Borio, "Influence of the oxygen feed distribution

[22] on the performance of a catalytic reactor for ATR of methane", *Catal. Today*, 156 (2010) 246-253.

[23] M.L. Rodríguez, D.E. Ardissonne, E. Heracleous, A. A. Lemonidou, E. López, M. N. Pedernera, D.O. Borio.

[24] "Simulation of a membrane reactor for the catalytic oxydehydrogenation of ethane". *Ind. Eng. Chem. Res.*,

[25] 48 (2009) 1090-1095.

[26] "Limitaciones difusionales en la eliminación de clorofenoles mediante el uso de enzimas inmovilizadas en

[27] soportes monolíticos. Estudio teórico", Eliana Avila, Daniel Borio, Laura Rodriguez, III Simposio

[28] Latinoamericano de Biocatálisis y Biotransformaciones, VIII Encuentro Regional de Biocatálisis y

[29] Biotransformaciones, 27 al 30 Nov 2018, San Luis, Argentina.

[30] "Obtención de velocidades de reacción efectivas en reactores monolíticos para combustión de etanol",

[31] A. F. Miranda, D. O. Borio y M. L. Rodríguez, IV Reunión Interdisciplinaria de Tecnología y Procesos Químicos

[32] RITeQ 2018, Villa Carlos Paz, Córdoba, 29 de mayo al 01 de junio de 2018.

[33] "Eliminación de clorofenoles mediante el uso de enzimas inmovilizadas en soportes monolíticos", E.E

[34] Ávila, D. O. Borio y M.L. Rodríguez, IV Reunión Interdisciplinaria de Tecnología y Procesos Químicos RITeQ

[35] 2018, Villa Carlos Paz, Córdoba, 29 de mayo al 01 de junio de 2018.

[36] Artículos publicados en las revistas científico-técnicas con acceso a través de la página en Internet del Ministerio de

## **XI - Resumen de Objetivos**

El objetivo de la asignatura es que el alumno aprenda el uso de herramientas computacionales (programas de cálculo numérico y simuladores de proceso) para modelar, simular y evaluar el comportamiento de reactores químicos y biorreactores.

## **XII - Resumen del Programa**

Tema 1. Modelado y simulación de reactores  
Tema 2. Modelado matemático de reactores catalíticos de lecho fijo  
Tema 3. Modelado y simulación de reactores de membrana  
Tema 4. Modelado y simulación de reactores estructurados  
Tema 5. Modelado y simulación de biorreactores  
Tema 6. Modelado de reactores de lecho fluidizado

## **XIII - Imprevistos**

Cuando por razones de fuerza mayor no pudiera dictarse la teoría de las unidades temáticas se entregará material (apuntes o bibliografía). Las prácticas podrán autoadministrarse a partir de las guías correspondientes. En ambos casos existirá la posibilidad de supervisión o consulta a los docentes de la asignatura.

## **XIV - Otros**

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