



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 2024)
(Programa en trámite de aprobación)
(Presentado el 15/04/2024 12:25:45)

I - Oferta Académica

| Materia | Carrera | Plan | Año | Período |
|--|--------------------|----------------------------|------|-----------------|
| () Optativa: Modelado y Simulación de Reactores Químicos y Biorreactores. | INGENIERÍA QUÍMICA | Ord 24/12 -17/2 2 | 2024 | 1° cuatrimestre |

II - Equipo Docente

| Docente | Función | Cargo | Dedicación |
|--------------------------|----------------------|------------|------------|
| RODRIGUEZ, MARIA LAURA | Prof. Responsable | P.Aso Simp | 10 Hs |
| BELZUNCE, PABLO SANTIAGO | Prof. Colaborador | P.Adj Exc | 40 Hs |
| MUFARI, Abigail | Auxiliar de Práctico | A.1ra Exc | 40 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 | 1° Cuatrimestre |

| Duración | | | |
|------------|------------|---------------------|-------------------|
| Desde | Hasta | Cantidad de Semanas | Cantidad de Horas |
| 11/03/2024 | 21/06/2024 | 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

Objetivos:

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:

- 1- Implementar técnicas de síntesis para la construcción de modelos matemáticos de reactores químicos y biorreactores
- 2- Identificar modelos matemáticos de reactores químicos y biorreactores de diferente grado de complejidad.
- 3- Desarrollar modelos de difusión-reacción en procesos catalíticos y biocatalíticos a partir de las hipótesis que caracterizan a cada modelo
- 4- Diseñar un ambiente de simulación para llevar a cabo la resolución de los modelos matemáticos planteados.
- 5- Simular la operación de un reactor para explorar las ventanas operativas más adecuadas.
- 6- Analizar resultados de simulación a partir de criterios fisicoquímicos y termodinámicos.
- 7- Validar los modelos frente a información de literatura para confirmar las hipótesis planteadas o realizar ajustes en el modelo planteado
- 8- Adquirir habilidades de aprendizaje que les permitan estudiar de un modo autodirigido o autónomo.

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.- Introducción a lenguaje de programación.

Práctico 2.- Modelado y simulación de un reactor de lecho fijo con grado de complejidad creciente.

Práctico 3.- Modelado y simulación de un reactor de membrana con adición controlada de reactivos.

Práctico 4.- Modelado y simulación de un reactor estructurado de tipo monolítico.

Práctico 5.- Modelado y simulación de biorreactores

Práctico 6.- Modelado y simulación de un reactor de lecho fluidizado.

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 los 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:

Este curso no acepta la condición de LIBRE.

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

- [6] Chem. Eng. J., Chem. Eng. J., En prensa (2018). <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.10.076>
- [7] M.L. Rodriguez, L.E. Cadús, D.O. Borio, “Monolithic reactor for VOCs abatement: Influence of non-
- [8] uniformity in the coating”. J. Env. Chem. Eng., 5 (2017) 292-302.
- [9] M.L. Rodriguez, L.E. Cadús, D.O. Borio, “VOCs abatement in adiabatic monolithic reactors: heat effects,
- [10] transport limitations and design considerations”. Chem. Eng. J., 306 (2016) 86-98.
- [11] M.L. Rodríguez, L.E. Cadús, “Mass transfer limitations in a monolithic reactor for the catalytic oxidation
- [12] of ethanol”, Chem. Eng. Sci., 143 (2016) 305-313.
- [13] M.L. Rodriguez, M. N. Pedernera, D.O. Borio, “Two dimensional modeling of a membrane reactor for ATR
- [14] of methane”. Catal. Today, 193 (2012) 137-144.
- [15] M.L. Rodriguez, D.E. Ardissonne, E. López, M. N. Pedernera, D.O. Borio, “Reactor designs for ethylene
- [16] production via ethane ODH: comparison of performance”, Ind. Eng. Chem. Res. 50 (2011) 2690-2697.
- [17] M.L. Rodriguez, D.E. Ardissonne, E. Heracleous, A.A. Lemonidou, E. López, M.N. Pedernera, D.O. Borio,
- [18] “Oxidative dehydrogenation of ethane to ethylene in a membrane reactor: A theoretical study”, Catal.
- [19] Today, 157 (2010) 303-309.
- [20] M.L. Rodriguez, D.E. Ardissonne, M. N. Pedernera, D.O. Borio, “Influence of the oxygen feed distribution
- [21] on the performance of a catalytic reactor for ATR of methane”, Catal. Today, 156 (2010) 246-253.
- [22] M.L. Rodríguez, D.E. Ardissonne, E. Heracleous, A. A. Lemonidou, E. López, M. N. Pedernera, D.O. Borio.
- [23] “Simulation of a membrane reactor for the catalytic oxydehydrogenation of ethane”. Ind. Eng. Chem. Res.,
- [24] 48 (2009) 1090-1095.
- [25] “Limitaciones difusionales en la eliminación de clorofenoles mediante el uso de enzimas inmovilizadas en
- [26] soportes monolíticos. Estudio teórico”, Eliana Avila, Daniel Borio, Laura Rodriguez, III Simposio
- [27] Latinoamericano de Biocatálisis y Biotransformaciones, VIII Encuentro Regional de Biocatálisis y
- [28] Biotransformaciones, 27 al 30 Nov 2018, San Luis, Argentina.
- [29] “Obtención de velocidades de reacción efectivas en reactores monolíticos para combustión de etanol”,
- [30] A. F. Miranda, D. O. Borio y M. L. Rodríguez, IV Reunión Interdisciplinaria de Tecnología y Procesos Químicos
- [31] RITeQ 2018, Villa Carlos Paz, Córdoba, 29 de mayo al 01 de junio de 2018.
- [32] “Eliminación de clorofenoles mediante el uso de enzimas inmovilizadas en soportes monolíticos”, E.E
- [33] Ávila, D. O. Borio y M.L. Rodríguez, IV Reunión Interdisciplinaria de Tecnología y Procesos Químicos RITeQ
- [34] 2018, Villa Carlos Paz, Córdoba, 29 de mayo al 01 de junio de 2018.
- [35] Artículos publicados en las revistas científico-técnicas con acceso a través de la página en Internet del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva (MINCYT): “Biblioteca Electrónica de Ciencia y Tecnología”.

XI - Resumen de Objetivos

1. Implementar técnicas de síntesis
2. Identificar modelos matemáticos de reactores químicos y biorreactores
3. Desarrollar modelos de difusión-reacción en procesos catalíticos y biocatalíticos
4. Diseñar un ambiente de simulación
5. Simular la operación de un reactor
6. Analizar resultados de simulación
7. Validar los modelos frente a información de literatura
8. Adquirir habilidades de aprendizaje

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

XIV - Otros

Aprendizajes Previos:

- Formular balances de masa, energía y cantidad de movimiento en estado estacionario y no estacionario, a partir de ecuaciones generales de conservación con reacción química
- Interpretar la estequiometría de reacción, parámetros de la cinética química y de transporte, naturaleza termodinámica de la reacción
- Resolver ecuaciones diferenciales ordinarias de valor inicial
- Reconocer variables y parámetros de reactores
- Interpretar y graficar perfiles espaciales de las variables de proceso
- Relacionar variables en una ecuación diferencial o algebraica
- Conjeturar sobre influencia de las variables y los parámetros de diseño en el comportamiento de un sistema
- Conocer estructuras de programación y pseudocódigo
- Aplicar métodos numéricos para resolución de ecuaciones diferenciales
- Implementar la resolución de ecuaciones en un lenguaje de programación
- Leer e interpretar tablas y gráficos
- Leer e interpretar textos técnicos

Detalles de horas de la Intensidad de la formación práctica.

Cantidad de horas de Teoría: 3hs

Cantidad de horas de Práctico Aula: 1hs (Resolución de prácticos en carpeta)

Cantidad de horas de Práctico de Aula con software específico: 1hs (Resolución de prácticos en PC con software específico propio de la disciplina de la asignatura)

Cantidad de horas de Formación Experimental: --hs (Laboratorios, Salidas a campo, etc.)

Cantidad de horas de Resolución Problemas Ingeniería con utilización de software específico: 2hs (Resolución de Problemas de ingeniería con utilización de software específico propio de la disciplina de la asignatura)

Cantidad de horas de Resolución Problemas Ingeniería sin utilización de software específico: -.hs (Resolución de Problemas de ingeniería SIN utilización de software específico)

Cantidad de horas de Diseño o Proyecto de Ingeniería con utilización de software específico: -- hs (Horas dedicadas a diseño o proyecto con utilización de software específico propio de la disciplina de la asignatura)

Cantidad de horas de Diseño o Proyecto de Ingeniería sin utilización de software específico: --hs (Horas dedicadas a diseño o proyecto SIN utilización de software específico)

Aportes del curso al perfil de egreso:

- 1.1. Identificar, formular y resolver problemas. (Nivel 1)
- 1.2. Concebir, diseñar, calcular, analizar y desarrollar proyectos. (Nivel 2)
- 2.1. Utilizar y adoptar de manera efectiva las técnicas, instrumentos y herramientas de aplicación. (Nivel 1)
- 2.2. Contribuir a la generación de desarrollos tecnológicos y/o innovaciones tecnológicas. (Nivel 1)
- 2.3. Considerar y actuar de acuerdo con disposiciones legales y normas de calidad. (Nivel 1)
- 2.4. Aplicar conocimientos de las ciencias básicas de la ingeniería y de las tecnologías básicas. (Nivel 2)
- 2.6. Evaluar críticamente ordenes de magnitud y significación de resultados numéricos. (Nivel 1)
- 3.1. Desempeñarse de manera efectiva en equipos de trabajo multidisciplinarios. (Nivel 1)
- 3.2. Comunicarse con efectividad en forma escrita, oral y gráfica. (Nivel 1)
- 3.3. Manejar el idioma inglés con suficiencia para la comunicación técnica. (Nivel 2)
- 3.4. Actuar con ética, responsabilidad profesional y compromiso social, considerando el impacto económico, social y ambiental de su actividad en el contexto local y global. (Nivel2)
- 3.5. Aprender en forma continua y autónoma. (Nivel 2)
- 3.6. Actuar con espíritu emprendedor y enfrentar la exigencia y responsabilidad propia del liderazgo. (Nivel 1)

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA**Profesor Responsable**

Firma:

Aclaración:

Fecha: