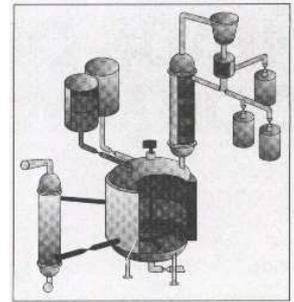


Asignatura: "Ingeniería de la Reacción Química"

Descriptores:

Cinética química aplicada. Catálisis. Reactores ideales y reales. Estabilidad. Optimización.



PLANTEAMIENTO Y OBJETIVOS

La `Ingeniería de la Reacción Química (IRQ)` es la disciplina que, por si misma, hace que la *Ingeniería Química* tenga entidad propia dentro de las `Ingenierías`. Así, el estudio de la "operación unitaria química" (aquella cuyo objetivo es redistribuir átomos de unas especies -reactivos- para dar lugar a los productos) tiene una importancia central en el curriculum al constituir el corazón de todos los procesos, y aun cuando el reactor es un item menor de capital, su operación determina la carga y tamaño de los equipos de separación. La inclusión de esta disciplina dentro de las materias del titulo de Ing. Tec. en Química Industrial, asegura el estudio de esta "operación", siempre presente en un proceso químico, junto con las correspondientes etapas físicas que en su caso la acompañen.

La IRQ es la metodología para sistemas químicos reactivos, donde es preciso escalar y operar industrialmente los resultados observados en los laboratorios, que permite tratar de un modo unificado cualquier problema de reacción independientemente de su naturaleza química o industria específica.

La base de esta disciplina es cuantificar la influencia de los fenómenos de transporte y la cinética, para relacionar el funcionamiento de los reactores con las condiciones y variables de entrada:

$$\text{Funcionamiento del reactor} = f(\text{entrada, cinética, contacto})$$

Para este cometido se requieren la química, termodinámica, cinética, mecánica de fluidos, física, biología, etc. El rendimiento, la selectividad o la producción pueden considerarse como medidas del funcionamiento, mientras que la alimentación y condiciones operativas constituyen las variables de entrada. La dinámica de fluidos (simples o multifásicos) determina el contacto, mientras que la descripción cinética relaciona la velocidad de reacción con las variables intensivas como la temperatura y presión, las concentraciones, actividad del catalizador, etc.

La asignatura incluye una **introducción a los reactores químicos** (conceptos fundamentales y cinética aplicada, dedicada esta al cálculo de la reactividad, esencial para el diseño, control y optimización de los reactores industriales), con cinco temas clave que abarcan el **análisis de sus distintos tipos y operación** (reactores ideales, régimen transitorio y reacciones múltiples, flujo no ideal y sistemas heterogéneos).

Junto a los principios básicos, solo será posible enseñar normalmente algunos desarrollos bien elegidos y valiosos; aunque desde el punto de vista que la IRQ es una disciplina madura, más importante que un desarrollo mayor de los principios, resulta su aplicación y las nuevas tecnologías. Y aunque el empleo de las computadoras, métodos numéricos y programación es de gran utilidad para enfrentar los principios básicos de la IRQ con los problemas prácticos reales, no deben olvidarse los riesgos de una excesiva sofisticación matemática que pierda el contacto con la realidad (p.ej. modelos muy complejos, asumiendo un conocimiento preciso de la cinética, algo que rara vez sucede en la práctica industrial); por ello, debe buscarse un compromiso entre el nivel óptimo de IRQ y las prácticas demasiado simplistas, donde el escalamiento se basa muchas veces en la semejanza de velocidades espaciales y los márgenes de seguridad.

Programa

T1. Introducción; fundamentos y tipos de reactores

La operación unitaria química. Tipos de reactores químicos: tanques agitados, reactor tubular y lechos de partículas (geometría, dinámica del flujo y fases presentes). Tamaño, disposición y condiciones operativas (transferencia, mezcla y caída de presión). Reactores y nuevos procesos de interés industrial.

Estequiometría, termoquímica y cinética aplicadas. Reactores experimentales e interpretación de resultados cinéticos. Mecanismos y etapas químicas y físicas (transporte, difusividad y adsorción). Bases de datos cinéticos.

T2. Modelos y diseño de reactores simples

El modelo cinético; gráficas de velocidad. Balances de materia: ecuaciones de diseño para reactores discontinuos, de mezcla completa y flujo de pistón; efecto de la densidad de la masa reaccionante. Balance y transferencia térmica: líneas de operación en sistemas isotérmicos, adiabáticos, autotérmicos y programados. Resolución general y diseño óptimo. Comparación de reactores únicos y múltiples; recirculación.

T3. Regimen no estacionario y reacciones múltiples

Operaciones semicontinuas. Periodo transitorio en reactores continuos: efecto retardador. Análisis de estabilidad de la operación y dinámica de reactores. Multiplicidad y unicidad en procesos no isotérmicos; reacciones fuera de control y extinción. Sistemas oscilantes y caóticos.

Distribución de los productos y selectividad en las reacciones múltiples. Etapas reversibles, consecutivas y simultáneas; reacciones mixtas. Efectos de mezcla, concentración de los reactivos, temperatura y contacto.

T4. Flujo no ideal

Hidrodinámica y distribución de los tiempos de residencia: análisis mediante técnicas de estímulo-respuesta (trazadores). Modelos y métodos para flujos no ideales: flujo disperso en pistón, tanques en serie y modelos combinados (zonas muertas, cortocircuitos y en recirculación). Mezcla de los fluidos: grados de segregación y tiempos de mezcla; efecto de la cinética. Mezclas con dos fluidos. Dispositivos mezcladores.

T5. Sistemas heterogéneos

Combinación de resistencias, transferencia entre fases y teoría de película. Reacciones fluido-sólido catalíticas: modelos pseudohomogéneos y heterogéneos (factor de efectividad). Teoría y diseño de procesos catalíticos: lechos fijos y reactores fluidizados; desarrollo de catalizadores. Reacciones con partículas sólidas no catalíticas. Procesos fluido-fluido; tipos de contacto con agitación, reactores de borboteo y dispersión estática. Sistemas de tres fases.

P. Seminarios prácticos y problemas

Estas actividades son complementarias a los diversos ejercicios y ejemplos básicos, que se realizan dentro cada tema del programa teórico.

- Seleccionar en la bibliografía trabajos de investigaciones cinéticas de interés industrial. Realización de un estudio crítico donde se expondrán su objeto, los resultados obtenidos, el tratamiento de los datos experimentales y su aplicación práctica; se comentarán los métodos empleados así como las incertidumbres encontradas, y se discutirá como trasladar las conclusiones obtenidas a una escala industrial, con los estudios y desarrollos posteriores que deberían abordarse.
- Programas de cálculo y simuladores para reactores químicos modélicos, con extensiones al análisis y diseño de operaciones no isotérmicas, régimen no estacionario, sistemas múltiples y procesos complejos: reacción exotérmica en lecho múltiple, neutralización en tanque semicontinuo, reacciones inestables, procesos en serie y sistemas no homogéneos.
- Trabajos bibliográficos y exposición de temas de ampliación sobre reactores no convencionales como los lechos fluidos, de borboteo, columnas pulsantes, de platos, mezcladores estáticos, suspensiones, etc.

Temporización:

| | | | |
|-----|-------|--------|----------------------------------|
| T1: | 4 h. | P: | 15 h. |
| T2: | 12 h. | | |
| T3: | 8 h. | | |
| T4: | 6 h. | | |
| T5: | 15 h. | TOTAL: | 60h (créditos: 4,5T+1,5P) |

Evaluación

- La asignatura se evalúa mediante examen presencial, con propuestas de desarrollos y cálculos (fundamentalmente resolución de ejercicios), y a través del aprovechamiento de los seminarios prácticos y problemas que se realizan durante el curso.
- La calificación final (0-10) será el resultado de ambas evaluaciones, pudiéndose superar la asignatura (5) con nota mínima de 4 en el examen principal, y posibilidad de compensar con el resto de las actividades académicas propuestas.

Fuentes bibliográficas

- Ingeniería de las reacciones químicas. LEVENSPIEL
- El omnilibro de los reactores químicos. LEVENSPIEL
- Ingeniería de las reacciones químicas y catalíticas. CARBERRY
- Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. FOGLER
- Chemical reactor design. NAUMAN
- Teoría del reactor químico. DENBIGH
- Reactores bioquímicos. ATKINSON
- Ingeniería de la reacción química. GUTIERREZ

Asignatura: **"Experimentación en Ingeniería Química II"**

Laboratorio de "Ingeniería de la reacción química"

Objetivos.-

Experimentación con los tipos fundamentales de reactores homogéneos, sus condiciones de operación, los modelos no ideales de flujo y catalizadores.

Prácticas.-

- Estudio cinético en un reactor discontinuo de laboratorio de la reacción de saponificación del acetato de etilo en medio alcalino: determinación experimental de parámetros de velocidad (ordenes de reacción, constantes de velocidad, factores de temperatura y efectos de mezcla).
- Escalamiento en reactor piloto continuo con agitación: influencia del tamaño del reactor, conversión en estado estacionario, distribución de tiempos de residencia, y regímenes transitorios (puesta en marcha y parada del sistema).
- Reactor de flujo tubular: perfil de concentraciones, desviaciones del modelo ideal (flujo de pistón) y efecto de la recirculación.
- Intercambio de calor y aireación en tanques agitados: ciclos de calefacción-refrigeración y transferencia gas-líquido en un sistema discontinuo.
- Estudio y modelización de sistemas no estacionarios, retardados y caóticos; reacción oscilante de Belousov-Zhabotinsky (oxidación y bromación catalítica del ácido malónico).
- Propiedades de catalizadores, determinación del área específica y porosidad por medidas de adsorción (isotérmicas en fase gaseosa o en disolución).

Temporización.-

Se seleccionan 5 prácticas en sesiones de laboratorio de 4h (Total: 20h, 2 créditos)

Evaluación.-

Para superar la asignatura es necesario la realización presencial de todas las prácticas programadas, junto con la culminación y discusión de la memoria de resultados. Existirá un examen final, que podrá ser liberatorio en los casos de los alumnos que hayan completado satisfactoriamente las prácticas (por evaluación continua).