

## PROGRAMA DE PROCESOS UNITARIOS

1973

## 1. INTRODUCCION

Fenomenología de los procesos químicos. La reacción química. Transferencia de materia, calor y cantidad de movimiento. El problema del diseño de reactores. Diseño y optimización. Clasificación de los reactores desde distintos puntos de vista.

## 2. FLUOCINAMICA DE REACTORES

Distribución de edades internas y tiempos de residencia. Técnicas experimentales de estímulo y respuesta. Balances de población. Modelos fluocinámicos.

## 3. ESTEQUIOMETRIA

Reacciones simples y complejas. Coeficientes estequiométricos. Avance de la reacción. Conversión.

## 4. CINETICA HOMOGENEA

Reacciones simples irreversibles y reversibles. Orden de reacción. Expresiones cinéticas. Métodos diferencial, integral y estadísticos. Sus aplicaciones y limitaciones. Método de las velocidades iniciales. Método de aislación. Efecto de la temperatura. Energía de activación.

## 5. CINETICA HETEROGENEA

## a) Sistemas sólido no reactivo - fluido (catalíticos)

Fenómenos de transferencia de calor y materia. Resistencias difusionales en película y en poro. Adsorción física y química. Centros activos. Control físico, químico y mixto. Ecuaciones cinéticas mecanísticas y no mecanísticas. Modelo de Hougen-Watson. Factor de transporte. Factor de efectividad. Grupos adimensionales característicos. Casos particulares y generalización desde el punto de vista de la geometría y del orden de reacción. Sistemas no isotérmicos.

## b) Sistemas sólido reactivo-fluido

Modelos continuo y del frente móvil. Resistencias difusionales en película y en cenizas. Ecuaciones cinéticas. Tiempo de reacción completa. Influencia del tamaño de partícula.

## 6. DISEÑO DE REACTORES HOMOGENEOS ISOTERMICOS IDEALES

## a) Caso simple de cinética isomolar -

Diseño de reactores ideales. Análisis comparativo de comportamiento. Procedimiento gráfico. Sistemas múltiples formados por reactores ideales eslabonados entre sí y en paralelo.

## b) Casos complejos de cinética isomolar

Soluciones para el diseño de reactores ideales cuando la cinética homogénea se complica, incluyendo el caso de reacciones complejas en serie y en paralelo: selectividad, rendimiento fraccionario instantáneo y global.

## c) Caso simple de cinética no-isomolar

Diseño de reactores **isobáricos** continuos ideales y de reactores discontinuos no-isobáricos.

#### 7. DISEÑO DE REACTORES HOMOGENEOS ISOTERMICOS REALES

Modelo de la dispersión longitudinal. Analogías con otros modelos. Modelo de la segregación. Casos límites de diseño suponiendo segregación o dispersión. Diseño gráfico según Schoenemann. El modelo de las celdas.

#### 8. DISEÑO DE REACTORES HOMOGENEOS NO-ISOTERMICOS

##### a) Diseño de reactores no-isotérmicos a parámetro concentrado

Balance de masa para reacciones (1) irreversibles, (2) reversibles, (3) complejas. Balance de calor en (1) reactor adiabático, (2) reactor autotérmico, (c) equipo no-adiabático no-isotérmico sin reacción y con ella; con camisa y con serpentines.

##### b) Diseño de reactores no-isotérmicos a parámetro distribuido

Cálculo computacional. Descripción de equipos utilizados en la industria.

#### 9. DISEÑO DE REACTORES HETEROGENEOS

##### a) Sistemas sólido-fluido

Ecuaciones de diseño. Distintos casos fluidodinámicos. Influencia de la distribución de tamaño de partículas.

##### b) Sistemas líquido-gas

Coeficiente de película individuales y globales. Factor de reacción. Distintos casos cinéticos. Reacciones lentas, infinitamente rápidas y de velocidad intermedia. Gráficos de Van Krevelen.

#### 10. OPTIMIZACION DE SISTEMAS QUIMICOS

1. Modelos. Esquema para el diseño racional de un reactor. Concepto de optimización. Nomenclatura para el estudio de modelos matemáticos: entradas, salidas, variables de estado y de decisión, ecuaciones de proceso. El funcional o función-objetivo. Clasificación. Formulación matemática de algunos funcionales de índole económica. Modelos multi-entradas y multi-salidas. Su eslabonamiento en etapas consecutivas con realimentación o sin ella.

2. Métodos. Búsqueda del óptimo por métodos directos. Intervalo de incertidumbre. Mínimo número de tentativas para lograr el óptimo. Extensión a multi-variables. Búsqueda del óptimo con funciones analíticas continuas para una y mucha variables. Combinación de las dos formas de búsqueda. El multiplicador de Lagrange en el caso de igualdades limitantes. Nociones de programación dinámica.

3. Ejemplos. Mención de diversos problemas técnicos del diseño de reactores donde pueden aplicarse criterios de optimización:

(a) reactor en cascada en número fijo de tanques; (b) factor de efectividad en pastillas; (c) reactor combinado; (d) reactor tubular a flujo cruzado; (e) reacción (1) reversible exotérmica, (2) en serie y (3) en paralelo en diversos reactores ideales. Introducción a los problemas económicos en el caso del reactor a reciclo.

4. Control de reactores. Nociones sobre el flujograma de información de un reactor tanque continuo con camisa. Generalidades sobre modos de control. Descripti-

///

va sistemática de instrumentos.

BIBLIOGRAFIA

CUNNINGHAM, R.E. y LOMBARDI, J.L. - Fundamentos del diseño de reactores, Eudeba, Buenos Aires (1972).

LEVENSPIEL, O. - Chemical Reaction Engineering, John Wiley & Sons, Nueva York (1962).

PERRY, J. (ed.) - Chemical Engineers' Handbook, 4ta edición, Mc Graw Hill Book Co., Nueva York (1963).

—○—○—○—○—○—○—