

1973

28

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. FLUODINAMICA DE REACTORES

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

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 HOMOGÉNEOS ISOTÉRMICOS 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 HOMOGÉNEOS NO-ISOTÉRMICOS

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

Balace 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 HETEROGÉNEOS

### a) Sistemas sólido-fluido

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

### b) Sistemas líquido-gas

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

## 10. OPTIMIZACIÓN DE SISTEMAS QUÍMICOS

- 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.
- 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 muchas variables. Combinación de las dos formas de búsqueda. El multiplicador de Lagrange en el caso de igualdades limitantes. Nociones de programación dinámica.
- 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.
- 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).

-o-o-o-o-o-o-o-