

11

1er Cuatrimestre 1975

DEPARTAMENTO DE INDUSTRIAS.-

PROGRAMA QUIMICA INDUSTRIAL OPTATIVA 1975



1º).- ASPECTOS ECONOMICOS DE LA INDUSTRIA QUIMICA.-

Punto de partida. El círculo "vicioso" de la pobreza. Relaciones circulares de la industria química. Creación y distribución de riquezas. Fuentes de riqueza nacional. Punto a donde queremos llegar. Objetivo final y etapas de nuestro estudio. El análisis de mercado como etapa inicial. Otras etapas. Análisis de mercado. Usos de modelos matemáticos de predicción. Nociones de estadísticas de las tendencias. Determinación de la capacidad instalada. Importancia del análisis de mercado.

2º).- ESTADISTICA APLICADA.-

Estudio de un caso en que hacen falta interpretaciones de datos experimentales: la cinética química. Cálculo de la velocidad de reacción. Método diferencial. Aplicación del método de cuadrados mínimos al cálculo. Regresión simple. Método integral. Regresión múltiple. Regresión simple que pasa por el origen. Extensión del tema para abarcar estudios típicos del análisis de mercado. Expresiones analíticas de diversas curvas para ajuste por regresión.

3º).- ESTEQUIOMETRIA APLICADA.-

Nomenclatura. Estequiometría de las reacciones simples. Definición de la conversión generalizada y su uso en distintos casos de reacciones simples. El factor de la expansión molar. Estequiometría de las reacciones múltiples. Forma de generalizar el caso de las reacciones simples de manera que abarque también el caso de las múltiples. Conversión global y selectividad puntal. Adaptación del factor de expansión para que resulte útil en las reacciones múltiples. Generalización de las reacciones múltiples.

4º).- TERMODINAMICA APLICADA.-

Equilibrio químico de las reacciones simples gaseosas. Cambios en la energía libre. Entalpía de reacción. Ecuación de van' t Hoff. Equilibrio químico de las reacciones múltiples gaseosas. Mínimo número de reacciones químicas a tener en cuenta durante los cálculos termodinámicos. Equilibrio en reacciones heterogéneas. Actividad de líquidos y sólidos. Condición para que una fase condensada se vaporice plenamente. Algunos casos de aplicación de la regla de las fases para separaciones de fases y para predicciones con reacciones heterogéneas.

5º).- SIMULACION DE UNA PLANTA QUIMICA.-

Simulación de equipos y plantas. Modelos de simulación de un tanque mezclador, de un lavador de una y de múltiples etapas, de un lavador multietapas en contracorriente, de un extractor líquido-líquido. Subsistemas que aparecen en plantas químicas. Teoría de reclico. Ventajas e inconveniente. La pruga. Introducción a la simulación de un destilador. Métodos gráficos de diseño.

6º).- DESCRIPTIVA DE EQUIPOS.-

Flujo de fluidos. Flujo a través de ductos. Control y medida del fluido. Expansión y contracción. Costos asociados. Mezclado de fluidos. Transmisión de calor. Calentamiento y enfriamiento. Vaporización y condensación. Evaporadores, cristalizadores, secadores. Costos. Reacción química. Reactores homogéneos, sin cambiadores de calor y con ellos. Reactores heterogéneos. Gas-líquido. El saturador. Tipo torre. Gas-sólido. Reactor a lecho fijo. Reactor a lecho móvil.

Cilindro rotatorio. Horno a bandeja. Sólidos fluidizados. Reactores líquido-sólidos.

Separación mecánica. Separaciones basadas en movimientos relativos y en la permeabilidad.

Separación difusional. Procesos de transferencia de masas. Equipos correspondientes. Costos asociados.

Materiales de construcción. Nociones con respecto a la corrosión metálica.

7^a).- CAMBIADORES DE CALOR.-

Modelo matemático general y su reducción al estudio de cambiadores de calor. Explicación somera de los doce mecanismos considerados en el modelo matemático general. Posibilidades de una solución sencilla. Significado de los parámetros del modelo referente al cambiador de calor. Caso en que tanto la fase fría como la caliente son del tipo tanque continuo idelamente agitado. Caso en que una de las fases es tanque continuo agitado y la otra lo es del tipo flujo pistón ideal. Caso en que ambas fases son del tipo flujo pistón ideal. Cambiadores de calor en procesos batch, siendo la fase cambiadora de calor continuo. Breves comentarios con respecto a las soluciones complicadas.

8^a).- RECUPERACION DE CALOR.-

Generalidades sobre calor sensible, calor de reacción, efectos térmicos asociados con la recuperación del producto deseado. Costos. Combinaciones que involucran calor sensible. Cambiadores de calor balanceados y no-balanceados. Eficiencia termodinámica del cambiador: mínimos costos variables. Crítica a esa forma de encarar la eficiencia. Diseño. Las reacciones endotérmicas como sumidero de calor. Temperaturas mínima y máxima admisibles. Métodos para suministrar calor a las reacciones endotérmicas. Calor indirecto. Calefacción eléctrica. Combinación de reacciones. Las reacciones exotérmicas como la fuente de calor. Reactores adiabáticos donde el reactivo se calienta interiormente. Lo mismo pero exteriormente. Cascada de reactores adiabáticos. Reactores refrigerados. Reactores auto-refrigerados por cambio de fase. Refrigeración por combinación de reacciones. Recuperación del calor sensible de los productos. Recuperación y purificación del producto. Planificación de un flujograma.

9^a).- CINETICA HOMOGENEA ISOTERMICA.-

La velocidad de reacción y forma de adptar el concepto a diversos tipos de reactores. Orden de reacción. Ecuaciones de diseño de un reactor a tanque continuo idelamente agitado, a flujo pistón ideal y discontinuo, con cualquier cinética homogénea arbitraria. Costante equilibrio, desde el punto de vista cinético. Conversión de equilibrio. Factor de expansión molar. Selectividad inicial. Formas concretas en que se pueda modificar la selectividad. Su justificación teórica.

10^a).- CINETICA QUIMICA HETEROGENEA.-

Interfases permeables e impermeables. Mecanismos de difusión y teoría de las películas.

Primer caso: Combustión homogénea. Diversos controles que aparecen. El factor de ubicación.

Segundo caso: Reacciones sólido-sólido. Ley lineal y cuadrática. Concepto del factor de efectividad.

Tercer caso: Combustión heterogénea. Concepto del factor de transporte. Forma de calcularlo teóricamente.

Cuarto caso: Reacciones fluido-sólido-sólido. Modelo del frente móvil. Combinación de los dos casos previos.
Quinto caso: Reacciones fluido-fluido. Estudio de cuatro controles típicos. El factor de reacción y su incidencia sobre el diseño.

11º)- CINETICA NO-ISOTERMICA.-

Consideraciones básicas con respecto a la ecuación de Arrhenius. Relaciones para sistemas isotérmicos, entre conversión y velocidad de reacción. Lo mismo, para sistemas no-isotérmicos. Reacciones en serie-paralelo. Selectividad y temperatura. Diseño de reactores no-isotérmicos. Introducción desde el punto de vista del balance de masa solamente. Reacciones reversibles. Reacciones en serie.

12º)- FACTORES CON PROBLEMAS TERMICOS.-

Fuentes y sumideros de calor en un reactor. Balances de calor sin reacción y con ella. Adiabasis. Autotermia. Balances de calor en reactores del tipo tanque continuo idealmente agitado con reacción conducida no-adiabatica ni isotérmicamente. Mecanismo de radiación y su influencia. Simultáneo balance de masa y calor. Reacción irreversible de primer orden. Tratamiento para el modelo tanque continuo idealmente agitado y su extensión a otros casos. El punto caliente. Simultáneo balance de masa y calor en un reactor discontinuo.

13º)- CATALISIS.-

Ideas fundamentales sobre catálisis heterogeneo. Clasificación de los procesos catalíticos desde el punto de vista tecnológico. Etapa controlante. Número de sitios activos. Justificación del uso de catalizadores porosos y de la preferente operación en control difusional. El factor de efectividad en las reacciones catalíticas. Nuevas variables del proceso en el caso de control difusional.

14º)- TECNICAS USADAS FRENTE A REACCIONES CON Fº DESFAVORABLE.-

Electrólisis. Modificaciones en la presión. Su influencia sobre el equilibrio y sobre la cinética. Acoplamiento de reacciones. La técnica de Solvay.

15º)- MODELOS DE OPTIMIZACION.-

Importancia de la optimización durante la toma de decisiones en un problema industrial. Variables de estado y de decisión. Criterios de optimización de equipos: tecnológicos, económicos y más allá de los económicos. Estudio en detalle. Igualdades y desigualdades limitantes. Nociones sobre modelos probabilísticos. Algunos modelos triviales del tipo de los usados en programación lineal. Simulación de una planta química típica.

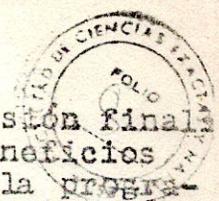
16º)- METODOS DE OPTIMIZACION.-

Argumentación matemática. Clasificación de las técnicas de optimización. Cálculo diferencial clásico. Su formulación matricial. Multiplicador y no-lineal. Programación geométrica. Técnica de las dos derivadas. Búsqueda directa. Método de Fibonacci. Nociones sobre Operación Evolucionaria. Simplex EvOp. Programación dinámica. Principio de máximo de Pontryagin.

17º)- APLICACION DELA OPTIMIZACION A TEMAS YA ESTUDIADOS.

El precio como decisión gerencial. El método de cuadrados mínimos. Determinación del orden óptimo en estudios de cinética. Búsqueda de la mejor curva que ajuste datos.

Composición óptima de la alimentación cuando la conversión final es cercana a la del equilibrio. Optimización de los beneficios en un problema de reacciones múltiples. Aplicación de la programación geométrica en la búsqueda de la mínima energía libre. Purga óptima. Reciclo óptimo. tiempo de retención óptimo de una reacción consecutiva en tanque continuo idealmente agitado y flujo pistón ideal. Duración óptima de un proceso discontinuo. Cascada óptima de dos tanques con reacción irreversible isotérmica. Conflictos entre termodinámica y cinética. Tiempo de retención y temperatura óptimos en un tanque a reciclo. Optimización de la reacción de Denbigh. El punto caliente: su búsqueda experimental. Reflujo óptimo de la columna de destilación. Optimización de un reactor a tanque continuo idealmente agitado con cambiador de calor externo.



180)- BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL.-

- MEISSNER. H.P. - Processes and systems in industrial chemistry. Prentice Hall, 1971.-
- TATCHER. Ch. M. Fundamentos de Ingeniería Química, CECSA. México, 1965. Apuntes de cátedra recopilados con el título "Compendio de la Tecnología Química" 1974.

-O-O-O-O-O-O-O-

ING. J. ...
DEPARTAMENTO INDUSTRIAL