

PROCESOS UNITARIOS

Marzo de 1969

P R O G R A M AI. SISTEMATICA DE REACTORES

1. Introducción. Fenomenología de los procesos. La reacción química. Los fenómenos de transferencia. Las ecuaciones de cambio para sistemas químicos.
2. Diseño y optimización. El problema de diseño como integración de las ecuaciones de cambio. El problema de la optimización como selección, entre diversos diseños, del más acorde con un funcional explícito.
3. Clasificación de los reactores desde distintos puntos de vista.

II. DISEÑO DE REACTORES QUIMICOSA. REACTORES HOMOGENEOS1. Introducción.

- a. Reacción simple. Su estequiometría. Cinética de la reacción irreversible. Cinética y termodinámica de la reacción reversible.
- b. Reactor experimental homogéneo. Análisis de datos cinéticos en modelo discontinuo.
- c. Sistemas múltiples. Su estequiometría y cinética. Método de las matrices para reacciones múltiples irreversibles. Método de Wei y Prater para reacciones múltiples reversibles.

2. Reactores ideales.

- a. Reacción simple isocórica. Tanque continuo idealmente agitado. Otros modelos ideales. La cascada de reactores.
- b. Reacción isocórica múltiple. Distribución de productos.
- c. Reacción no-isocórica simple y múltiple.

3. Reactores no-ideales.

- a. Diseño sin balance de calor. Apartamiento de la idealidad. Causas fluidodinámicas. Balances de población. Estímulo-respuesta en reactores ideales y no-ideales. Modelo de flujo combinado. Modelo de dispersión longitudinal. Modelo de la cascada. Modelo de segregación. Diseño gráfico según Schoenemann.
- b. Diseño con balance de calor. Generalidades. Reactor adiabático. Reactor autotérmico. Reactor no-adiabático no-isotérmico del tipo tanque continuo idealmente agitado: con camisa y con serpentines. Reactor no-adiabático no-isotérmico del tipo tubular: perfiles.
- c. Diseño con balance de cantidad de movimiento. Nociones sobre el reactor tubular con fricción.

B. REACTORES HETEROGENEOS1. Sistemas sólido-fluido. Sólido no reactivo.

- a. Introducción. Catálisis heterogénea. Características de la fase sólida. Propiedades geométricas y físicas. Adsorción física y química. Expresión cinética pseudo-homogénea. Concepto de etapa controladora. Factor de transporte. Fenómenos de transferencia de calor y materia



intraparticulares. Factor de efectividad. Sistemas isotérmicos y no-isotérmicos. Conductividad térmica y difusividad efectivas.

b. Reactores a lecho fijo. Distintos tipos. Ecuaciones de diseño. Fenómenos de transferencia de calor y materia entre la fase fluida y la superficie del catalizador. Diseño de reactores catalíticos a lecho fijo isotérmicos, adiabáticos, autotérmicos y no-adiabáticos no-isotérmicos.

b. Reactores a lecho fluidizado. Aspectos generales del diseño.

2. Sistemas sólido-fluido. Sólido reactivo. Modelo del frente móvil. Estado seudo-estacionario.

3. Sistemas fluido-fluido. Factor de reacción. Gráfico de Van Krevelen.

### III. OPTIMIZACION DE REACTORES QUIMICOS.

1. Modelos. Diseño racional de un reactor según J.M. Smith. Mejoras y optimización. Procesos de decisión. Entrada, salida, realimentación, ecuaciones de proceso. Variables de estado y de decisión. El funcional. Su clasificación. Funcionales con estructura polinomial. Suboptimización. Simplificación del funcional. Desigualdades e igualdades limitantes. Restricciones y política. Parámetros y variables aleatorias.

2. Métodos.

a. Estrategia de decisión a priori. Clasificación matemática de los equipos y su formulación matricial. Reglas para construir las matrices de ecuaciones de proceso. Ecuaciones algebraicas, incrementales, diferenciales totales y parciales e incrementales-diferenciales. Métodos para cada caso.

b. Nociones de programación dinámica.

c. Nociones del principio de máximo.

3. Ejemplos. Estabilidad dinámica. Perfil óptimo de temperatura de una reacción exotérmica reversible en reactor a parámetro distribuido. Óptimo ciclo para una reacción con simultáneo ensuciamiento del catalizador. Óptimo diseño global según Westbrook y Aris.



## TECNOLOGIA DE LA INGENIERIA QUIMICA

1969

- 1.- Visión general del campo de la Estadística aplicada a la Ingeniería Química. Conceptos fundamentales. Definiciones.
- 2.- La inferencia estadística. Una y dos colas. Una y dos medias. Una y dos varianzas. Tests exactos y no-paramétricos.
- 3.- Análisis de la varianza. Clasificación simple y doble. Diseños: cruzado, anidado y múltiple.
- 4.- Diseño de experimentos. Factorial. Confundido. Replicaciones. Cuadrados latinos.
- 5.- Correlación, regresión, asociación. Coeficientes. Tests de distintos tipos. Linear y curvilínea.
- 6.- Gráficos de control. Para variables y para atributos. Estadística de atributos.
- 7.- Elementos de Investigación Operativa. Modelos. Búsqueda del óptimo.
- 8.- Planteo de modelos. Clasificación. Análisis desde una perspectiva matemática. Ecuaciones diferenciales.
- 9.- Solución de modelos de subsistemas. Técnicas de estímulo-respuesta. El escalón, el pulso, la excitación en frecuencias.
- 10.- Linealización de modelos no-lineales.
- 11.- Criterios de estabilidad de subsistemas. Ejercicios de aplicación.
- 12.- Análisis, diseño y simulación de sistemas. Ampliación para el caso de modelos matemáticos estocásticos.
- 13.- Teoría y sistemática del diseño de una planta química. Balances, diagramas, esquemas.
- 14.- La seguridad y la economía en el diseño de plantas químicas. Bibliografía sobre el tema.

### BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL

- Gore, W.L.- Métodos estadísticos para experimentación química y tecnológica. Edit. Tecnos. Madrid.
- Güenther, W.C.- Analysis of variance. Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, (1964).
- Winer, B.J.- Statistical principles in experimental design. Mc.Graw Hill, New York (1962).
- Brownlee, K.A.- Statistical theory and methodology in science and engineering, Wiley (1960).
- Starr and Miller - Executive decisions and Operations Research.
- Himmelblau, D.M. and Bischoff, K.B.- Process analysis and simulation. Wiley (1968).
- Brötz, W.- Grundriss der Chemischen Reaktiostechnik, Verlag Chemie (1958)