

## PROGRAMA

### 1. IDENTIFICACION.

<b>Materia:</b>	<b>CALCULO DE REACTORES</b>
<b>Código:</b>	<b>IQ -7165</b>
<b>Prelación:</b>	<b>IQ 7144 – IQ 9243</b>
<b>Ubicación:</b>	<b>Séptimo Semestre</b>
<b>TPLU:</b>	<b>3-2-0-4</b>
<b>Condición :</b>	<b>Obligatoria</b>
<b>Departamento:</b>	<b>Operaciones Unitarias y Proyectos</b>

### 2. JUSTIFICACION

*El Ingeniero Químico es un profesional que diseña y supervisa la operación de Plantas donde ocurren los cambios físicos y químicos de los materiales. Las reacciones químicas ocupan un lugar preponderante dentro de la carrera, y el diseño y control de los reactores químicos es un conocimiento imprescindible del curriculum.*

### 3. REQUERIMIENTOS.

*La Ingeniería de las Reacciones Químicas requieren una base importante de conocimientos en tópicos relacionados con la fisicoquímica, Termodinámica y los Principios de la Ingeniería Química.*

### 4. OBJETIVOS.

#### GENERALES

- Presentar una introducción sobre el modelamiento y el diseño de los reactores homogéneos y algunos conceptos de cinética heterogénea.*

#### ESPECIFICOS

- Desarrollar y aplicar las ecuaciones de dimensionamiento de las unidades de reacción.*
- Estudiar el efecto de la temperatura y de la presión sobre el diseño de los reactores químicos.*
- Presentar algunas aplicaciones sencillas de la computación en el diseño de reactores químicos y en el análisis de sensibilidad de su operación, así como en el arranque y parada de la unidad.*
- Evaluar las variables involucradas en el diseño de reactores para reacciones múltiples.*

## **5. CONTENIDO PROGRAMATICO**

### **CAPITULO 1. INTRODUCCION**

*Termodinámica. Cinética. Clasificación de las reacciones. Variables que afectan la velocidad de reacción. Definición de velocidad de reacción. Conversión.*

### **CAPITULO 2. VELOCIDAD DE REACCION Y ESTEQUIOMETRIA**

*Tabla estequiométrica. Sistemas discontinuos y de flujo. Reacciones con cambio de fase.*

### **CAPITULO 3. RECOLECCION Y ANALISIS DE DATOS DE VELOCIDAD DE REACCION**

*Método diferencial. Método integral. Método de las velocidades iniciales. Método de la vida media. Reactor diferencial. Reactor integral. Tratamiento estadístico de datos de velocidad (Mínimos cuadrados).*

### **CAPITULO 4. CLASIFICACION Y CARACTERISTICAS GENERALES DE LOS REACTORES QUIMICOS.**

*Tipos de reactores. Aplicaciones. Balance general de materia. Casos particulares. Reactor por cargas. Reactor flujo pistón (RP). Reactor agitado permanentemente (RAP). Diseño óptimo de un reactor. Reactores industriales. Características técnicas.*

### **CAPITULO 5. DIMENSIONAMIENTO DE REACTORES**

*Diseño de unidades discontinuas y continuas. Reactores en serie. Paralelo y combinaciones serie-paralelo. Optimización de cascadas de RAP's.*

### **CAPITULO 6. DISEÑO DE REACTORES ISOTERMICOS**

*Esquema de diseño. Escalado. Diseño de Reactores agitados. Diseño de Reactores tubulares. Caída de presión de reactores. Reacciones reversibles. Operación no estacionaria de reactores.*

### **CAPITULO 7. DISEÑO DE REACTORES NO ISOTERMICOS**

*Balance de energía. Aplicación al diseño de reactores. Reactores discontinuos. Reactores de flujo. Caso adiabatico y no adiabatico. Conversión de equilibrio. Progresión óptima de temperatura. Temperatura óptima de entrada. Múltiples estados estacionarios. Estabilidad del punto de operación. Gráfica de ignición - extinción.*

## **CAPITULO 8. DISEÑO DE REACTORES COMPLEJOS**

*Reacciones en serie, paralelo y combinaciones serie-paralelo. Selectividad. Maximización de la selectividad. Tabla estequiométrica para reacciones múltiples. Diseño del reactor. Caso isotérmico y no isotérmico. Recirculación en reactores.*

## **CAPITULO 9. CINETICA HETEROGENEA Y CATALISIS**

*Introducción al diseño de reactores heterogéneos.*

### **6. METODOLOGIA.**

*Clases teóricas convencionales. Presentación de tópicos especiales por parte de los estudiantes, en base a asignaciones de artículos de investigación sobre avances recientes en diseño y operación de reactores. Así mismo, dos programas de computación con aplicación de métodos numéricos en la materia.*

### **7. RECURSOS.**

*En las clases magistrales, los convencionales. El uso de transferencias y/o diapositivas en las exposiciones y del computador para las aplicaciones numéricas.*

### **8. EVALUACION.**

*Se contempla la evaluación continua mediante la realización de 6-7 exámenes parciales. Así mismo, la presentación de 2 asignaciones con uso de la computadora que incluyen los siguientes tópicos:*

- *Resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias, con el método de Euler o de Runge-Kutta.*
- *Aplicación del paquete Tutsim (o similar) al cálculo de reactores (arranque de un RAP).*
- *Cada asignación aporta 5 puntos a la nota del último examen.*
- *Seminarios sobre artículos de investigación relacionados con la asignatura, con una ponderación de hasta 5 puntos del siguiente examen.*

### **9. BIBLIOGRAFIA.**

*FOGLER, H.S. "Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas". Prentice Hall, tercera edición, México, 2001.*

LEVENSPIEL, O., *"Ingeniería de las Reacciones Químicas"* .Reverté. 1972, *"El Omnilibro de los Reactores Químicos"* .Reverté. 1978, *"El Minilibro de los Reactores Químicos"*. Reverté. 1978.

SMITH, J. M., *"Chemical Engineering Kinetics"*. McGraw Hill. 1970.

SCHMIDT, L.D. *"The Engineering of Chemical Reactions"*, Oxford University Press, Oxford, 1998.