

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

Asignatura	CÁLCULO Y DISEÑO DE REACTORES QUÍMICOS (Complementos de formación)		
Materia			
Módulo			
Titulación	MÁSTER EN INGENIERÍA QUÍMICA		
Plan	542	Código	53926
Periodo de impartición	2º CUATRIMESTRE	Tipo/Carácter	OBLIGATORIA
Nivel/Ciclo	GRADO	Curso	1º
Créditos ECTS	6 ECTS		
Lengua en que se imparte	CASTELLANO		
Profesor/es responsable/s	MARÍA TERESA GARCÍA CUBERO SUSANA LUCAS YAGÜE		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	TELÉFONO: 983 423000 ext. 3237 / ext. 4074 E-MAIL: maite@iq.uva.es ; susana@iq.uva.es		
Horario de tutorías	Véase www.uva.es → Centros → Campus de Valladolid → Escuela de Ingenierías Industriales → Tutorías		
Departamento	INGENIERÍA QUÍMICA Y TECNOLOGÍA DEL MEDIO AMBIENTE		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

Esta asignatura se imparte en el segundo cuatrimestre de tercer curso del Grado en Ingeniería Química y en ella se desarrollan los aspectos fundamentales del cálculo y dimensionado de los equipos de transformación química más ampliamente utilizados en los procesos químicos industriales.

1.2 Relación con otras materias

Introducción a la Ingeniería Química (tercer curso, primer cuatrimestre)

1.3 Prerrequisitos

Conocimientos en balances de materia, energía y equilibrio químico

Conocimientos en Cinética Química Aplicada. Catálisis

Conocimientos en difusividad y mecanismos de transferencia de materia, incluido el transporte de interfase

2. Competencias

2.1 Generales

Código	Descripción
GG1	Capacidad de análisis y síntesis
CG2	Capacidad de organización y planificación del tiempo
CG7	Capacidad de razonamiento crítico
CG9	Capacidad para trabajar en equipo de forma eficaz

2.2 Específicas

Código	Descripción
CE24	Conocimiento y capacidades para el diseño de reactores químicos

3. Objetivos

OBJETIVO GLOBAL

Analizar y diseñar reactores químicos homogéneos y heterogéneos.

OBJETIVOS PARCIALES

- seleccionar el tipo de reactor más adecuado para una determinada aplicación
- identificar y explicar las desviaciones respecto de la idealidad de los reactores químicos
- identificar y explicar las desviaciones respecto de la idealidad de los reactores químicos durante la operación
- realizar análisis de estabilidad en sistemas de reacción



4. Contenidos y/o bloques temáticos

Bloque 1: Conceptos Generales

Carga de trabajo en créditos ECTS: 0,30

a. Contextualización y justificación

El primer bloque, que se corresponde con el tema 1, está dedicado al planteamiento de los objetivos de la asignatura y a fijar los conceptos y fundamentos básicos de Reactores Químicos, como son los tipos de reactores comúnmente empleados en la Industria Química y de procesos, fundamentos del análisis y diseño de reactores químicos, ecuaciones de conservación de materia, energía y cantidad de movimiento y caracterización del flujo no ideal en reactores químicos.

b. Objetivos de aprendizaje

Al finalizar el tema el alumno debe ser capaz de:

- enumerar y describir las características de los principales tipos de reactores químicos empleados en la industria química
- establecer las ecuaciones básicas de diseño: balance de materia, energía y cantidad de movimiento de diferentes configuraciones de reactores químicos
- identificar el tipo de reactor más adecuado para llevar a cabo una determinada reacción química
- identificar los principales riesgos relacionados con la operación de reactores químicos

c. Contenidos

TEMA 1: Conceptos Generales

Configuraciones de reactores químicos: equipos utilizados en la Industria Química. Fundamentos del análisis y diseño: ecuaciones de conservación. Caracterización del flujo no ideal. Seguridad en Reactores Químicos

d. Métodos docentes

Se recoge, de forma general, en el apartado 5 de la guía docente

e. Plan de trabajo

Semana 1, Tema 1

f. Evaluación

La evaluación de la asignatura se encuentra recogida en el apartado 7 de la guía docente

g. Bibliografía básica

- Fogler, H.S. "Elements of Chemical Reaction Engineering", Prentice- Hall, 1992.
- M. Santamaría, J. Herguido, M.A. Menéndez, A. Monzón. "Ingeniería de reactores". Ed. Síntesis, 1999.
- Missen, R.W., Mims, C.A., Saville, B.A., 1999, Introduction to Chemical Reactions Engineering and Kinetics. John Wiley & Sons, New York.

h. Bibliografía complementaria

- Hill, C.G., 1977, *An Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design*. John Wiley & Sons, New York.
- Walas, S.M., 1995, *Chemical Reaction Engineering Handbook of Solved Problems*. Australia: Gordon and Beach.

**i. Recursos necesarios**

Pizarra
Ordenador / Cañón
Acceso internet (Campus virtual UVa)

j. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
0,30	Semana 1

Bloque 2: Reactores HomogéneosCarga de trabajo en créditos ECTS: **a. Contextualización y justificación**

En este bloque se aborda el diseño y análisis de la operación de los reactores ideales en los que tienen lugar reacciones homogéneas. Se distinguen dos tipos básicos: Reactores de tanque agitado, que pueden operar en discontinuo, semicontinuo o continuo y Reactores tubulares continuos. El bloque se divide en tres temas:

Tema 2. Reactores de Tanque Agitado.

En este tema se aborda el diseño de reactores discontinuos de tanque agitado isotérmicos y no isotérmicos. Posteriormente se analizará cómo llevar a cabo un control óptimo de la temperatura del reactor, estableciendo cuál es la temperatura óptima de operación y/o el perfil óptimo de temperaturas. Finalmente, se aborda el diseño de reactores continuos de tanque agitado isotérmicos y no isotérmicos. Se analiza la estabilidad de la operación en estado estacionario y durante los periodos de arranque y puesta en marcha.

Tema 3. Reactor Continuo Tubular de flujo pistón.

Este tema aborda el diseño de reactores continuos tubulares isoterms y no-isoterms. Se analiza la estabilidad de la operación y el caso particular de reactor tubular con recirculación.

Tema 4. Comparación de configuraciones de sistemas de Reacción.

Este tema plantea la comparación y optimización de los diferentes tipos de reactores homogéneos estudiados, para llevar a cabo una determinada reacción química simple o compleja.

b. Objetivos de aprendizaje

- calcular el tiempo de reacción necesario para llevar a cabo una reacción química en un reactor discontinuo de tanque agitado que opere en condiciones isotérmicas, adiabáticas o no-isotérmicas no-adiabáticas. Determinar la temperatura óptima isotérmica de operación. Obtener el perfil óptimo de operación.
- plantear las ecuaciones de diseño de los diferentes tipos de reactores continuos en operación isotérmica y no isotérmica y determinar el volumen de reacción necesario para alcanzar una conversión determinada.
- obtener el estado estacionario de operación en un reactor continuo de tanque agitado que opere en condiciones adiabáticas o con intercambio de calor y analizar la estabilidad local de los posibles estados estacionarios de operación
- determinar la relación de recirculación óptima en un reactor tubular con recirculación que opere en condiciones isotérmicas
- seleccionar de forma cualitativa y cuantitativa el mejor tipo de reactor para llevar a cabo una reacción en serie, en paralelo o en serie-paralelo.
- Calcular la concentración óptima de producto deseado

c. Contenidos**Tema 2. Reactores de Tanque Agitado**



Características. Diseño del reactor discontinuo de tanque agitado: operación isotérmica y no isotérmica. Control óptimo de temperatura: temperatura óptima de operación – perfil óptimo de temperatura. Diseño del reactor continuo de tanque agitado: operación isotérmica y no isotérmica. Secuencias de reactores continuos de tanque agitado en serie. Estabilidad del reactor en estado estacionario. Análisis general de estabilidad. Planos de fases. Periodo de puesta en marcha.

Tema 3. Reactor Continuo Tubular

Características. Diseño del reactor: operación isotérmica y no isotérmica. Análisis de estabilidad. Reactor con recirculación

Tema 4. Optimización de Sistemas de Reacción

Configuraciones de reactores. Análisis para reacciones simples y complejas. Efecto de la temperatura. Aplicación al diseño.

d. Métodos docentes

Se detallan en el apartado 5 de la guía docente

e. Plan de trabajo

Semanas 1 a 4: Tema 2
Semanas 4 a 5: Tema 3
Semana 5 a 6: Tema 4

En el apartado 8 se describe el cronograma de actividades previsto.

f. Evaluación

La evaluación de los contenidos de la asignatura se llevará a cabo conforme se especifica en el apartado 7 de la guía docente.

g. Bibliografía básica

- Fogler, H.S. "Elements of Chemical Reaction Engineering", Prentice-Hall, 1992.
- J.M. Santamaría, J. Herguido, M.A. Menéndez, A. Monzón. "Ingeniería de reactores". Ed. Síntesis, 1999.
- Missen, Ronald W. "Introduction to chemical reaction engineering and kinetics" John Wiley & Sons, 1999

h. Bibliografía complementaria

- Levenspiel, O., 2004, *Ingeniería de las Reacciones Químicas*, Ed. Reverté, Barcelona, 3ª Edición.
- Walas, S.M., 1995, *Chemical Reaction Engineering Handbook of Solved Problems*. Australia: Gordon and Beach.

i. Recursos necesarios

Pizarra
Ordenador / Cañón
Acceso internet (Campus virtual UVa)

j. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
2.3	Semanas 1 a 6

**Bloque 3: Reactores Heterogéneos**

Carga de trabajo en créditos ECTS: 1,60

a. Contextualización y justificación

En este bloque temático se presentan los conceptos básicos del diseño de reactores en los que tienen lugar reacciones heterogéneas tanto catalíticas como no catalíticas. Se abordará el dimensionado de reactores catalíticos de lecho fijo y reactores gas-líquido. Para ello, se plantearán los modelos más simples que permiten llevar a cabo el diseño preliminar de los diferentes tipos de reactores. El bloque se divide en dos temas:

Tema 5. Reactores catalíticos de lecho Fijo.

En este tema se estudian en primer lugar las diferentes configuraciones de reactor utilizadas en la industria. Se aborda el diseño preliminar de este tipo de reactores planteando modelos de cálculo sencillos que permiten reproducir el comportamiento de dichos reactores, tanto para la operación isotérmica como adiabática. Se evalúan las necesidades de intercambio de calor y la posible presencia de puntos calientes en el interior del reactor.

Tema 6. Reactores gas-líquido

En primer lugar, se analizan las configuraciones de reactores gas-líquido más empleadas en la industria, con especial énfasis en los modelos de flujo para las fases gas y líquida. Se aborda el dimensionado de reactores de columna y tanque, analizando las diferencias entre los distintos tipos de reactores.

b. Objetivos de aprendizaje

- seleccionar la configuración de reactor catalítico (tipo de catalizador, reactor, condiciones de operación)
- determinar la cantidad de catalizador necesaria para llevar a cabo una reacción en un reactor catalítico de lecho fijo que opere en condiciones isotérmicas, utilizando el modelo básico unidimensional
- determinar la cantidad de catalizador necesaria para llevar a cabo una reacción en un reactor catalítico de lecho fijo que opere en condiciones adiabáticas, utilizando el modelo básico unidimensional
- evaluar las necesidades de intercambio de calor en las reacciones catalíticas
- análisis de estabilidad: identificación de puntos calientes en reactores catalíticos de lecho fijo
- seleccionar la configuración de reactor gas-líquido más adecuada para una determinada reacción
- determinar el volumen de reacción necesario para llevar a cabo una reacción gas-líquido operando en columna o en tanque

c. Contenidos**Tema 5. Reactores catalíticos de lecho fijo**

Características. Configuración de reactores: Factores implicados en el diseño. Modelo básico unidimensional. Operación Isotérmica. Operación adiabática. Estabilidad de la operación

Tema 6. Reactores gas-líquido

Características. Configuración de reactores. Modelos de flujo para el diseño de reactores. Operación en columna: torres de platos y empaquetadas. Operación en tanque: tanque agitado y de borboteo.

d. Métodos docentes

Se detallan en el apartado 5 de la guía docente

e. Plan de trabajo

Semana 6 a 8: Tema 5
Semana 9 a 11: Tema 6

En el apartado 8 se describe el cronograma de actividades previsto.

f. Evaluación

La evaluación de los contenidos de la asignatura se llevará a cabo conforme se especifica en el apartado 7 de la guía docente.

**g. Bibliografía básica**

- *Missen, R.W., Mims, C.A., Saville, B.A., 1999, Introduction to Chemical Reactions Engineering and Kinetics. John Wiley & Sons, New York.*
- *Froment, G.F., Bischoff, K.F., 1990, Chemical Reactor Analysis and Design, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2nd Edition.*
- *Fogler, H.S., 1999, Elements of Chemical Reaction Engineering, Prentice-Hall International, Inc., New Jersey, 3rd Edition.*

h. Bibliografía complementaria

- Hill, C.G., 1977, An Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design. John Wiley & Sons, New York.
- Levenspiel, O., 2004, Ingeniería de las Reacciones Químicas, Ed. Reverté, Barcelona, 3a Edición.
- Walas, S.M., 1995, Chemical Reaction Engineering Handbook of Solved Problems. Australia: Gordon and Beach.
- Holland, C.D.; "Fundamentals of Chemical Reaction Engineering", Prentice Hall, 1989

i. Recursos necesarios

Pizarra
Ordenador / Cañón
Acceso internet (Campus virtual UVa)

j. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
1,6	Semanas 6 a 11

Bloque 4: Flujo No IdealCarga de trabajo en créditos ECTS: **a. Contextualización y justificación**

Hasta ahora se ha considerado el dimensionado de reactores cuyo modelo de flujo es ideal, es decir, que responden a un flujo de mezcla perfecta o pistón. En este bloque se abordan los conceptos relacionados con el flujo no ideal. En primer lugar, se definen las funciones de distribución de tiempos de residencia. Se presentan algunos modelos de flujo que pueden representar el comportamiento de sistemas reales y, en último lugar se aborda el diseño de reactores reales. El bloque se divide en dos temas:

Tema 7. Flujo no ideal

En este tema se introduce al alumno en el flujo no ideal, analizando los datos procedentes de técnicas estímulo respuesta que permiten la caracterización del flujo no ideal. Se definen las funciones de distribución de edad y se plantean modelos sencillos, simples y combinados, que permitan reproducir el tipo de flujo que presentan los reactores reales.

Tema 8. Conversión en reactores reales

En este tema se lleva a cabo la aplicación de los diferentes modelos de flujo al diseño de reactores. Se analizan los modelos de macromezcla y micromezcla y se aplica el concepto de macromezcla al cálculo de la conversión en reactores reales.

b. Objetivos de aprendizaje

- establecer funciones que caractericen las desviaciones de la idealidad del flujo en reactores continuo
- proponer modelos que representen el tipo de flujo en el reactor
- aplicar a Reacción Química el modelo de macromezcla
- determinar la conversión en reactores reales



c. Contenidos

Tema 7. Flujo no ideal

Caracterización del flujo no ideal. Funciones de distribución de edad. Medida experimental. Modelos simples y combinados.

Tema 8. Conversión en reactores reales

Aplicación del modelo de flujo al diseño de reactores. Macromezcla.

d. Métodos docentes

Se detallan en el apartado 5 de la guía docente

e. Plan de trabajo

Semanas 12 a 13: Tema 7

Semana 14: Tema 8

En el apartado 8 se describe el cronograma de actividades previsto.

f. Evaluación

La evaluación de los contenidos de la asignatura se llevará a cabo conforme se especifica en el apartado 7 de la guía docente.

g. Bibliografía básica

- Missen, R.; Mims, C.; Saville, B.; "Introduction to chemical reaction engineering and kinetics" Wiley, 1999
- Fogler, H.S. "Elements of Chemical Reaction Engineering", Prentice-Hall, 1992.
- D.M. Himmelblau; K.B. Bischoff "Análisis y Simulación de Procesos"

h. Bibliografía complementaria

i. Recursos necesarios

Pizarra

Ordenador / Cañón

Acceso internet (Campus virtual UVa)

j. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
0,55	Semanas 12 a 14

**5. Métodos docentes y principios metodológicos**

MÉTODOS DOCENTES	OBSERVACIONES
Clases de aula teóricas.	En las clases se desarrollan los contenidos, teniendo en cuenta los objetivos establecidos previamente y las competencias que los alumnos deben adquirir. Todos los contenidos se acompañan de ejemplos reales.
Clases de aula de problemas.	Las clases prácticas, de resolución de problemas, tienen como finalidad el análisis y aplicación de los contenidos teóricos. El alumno dispone de una colección de problemas, algunos de los cuales se desarrollan al finalizar cada tema, planteándolos siempre en orden creciente de complejidad
Clases de seminario	Se plantea la realización de cuatro seminarios a lo largo del cuatrimestre: Semana 4 – Utilización de herramientas de cálculo para establecer la influencia de los parámetros de operación en un reactor homogéneo. Semana 9 – Reactores Catalíticos de lecho fluidizado: iniciación al cálculo de reactores heterogéneos mediante modelos cinéticos. Semana 12 – Utilización de hojas de cálculo para la evaluación de modelos de flujo en reactores de flujo no ideal. Semana 14 – Aspectos básicos de seguridad en el diseño básico y la operación de reactores químicos.
Trabajos Prácticos	Para cada tema el alumno podrá realizar diferentes actividades propuestas con el módulo de tareas de Moodle. De estas tareas, una será de presentación obligatoria por cada alumno mientras que el resto serán de realización opcional.
Web/Aula virtual	Todo el contenido del curso se encuentra disponible en el Campus Virtual UVa (http://campusvirtual.uva.es).

6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teórico-prácticas (T/M)	30	Estudio y trabajo autónomo individual	70
Clases prácticas de aula (A)	20	Estudio y trabajo autónomo grupal	20
Laboratorios (L)			
Prácticas externas, clínicas o de campo	2		
Seminarios (S)	8		
Tutorías grupales (TG)			
Evaluación (fuera del periodo oficial de exámenes)			
Total presencial	60	Total no presencial	90

**7. Sistema y características de la evaluación**

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Examen final	70%	Contribución a la calificación final de la asignatura: 20% Teoría y 50% Problemas (Nota mínima en examen = 4 puntos sobre 10)
Tareas	20%	A lo largo del cuatrimestre se propondrán tres tareas evaluables, una de ellas en colaboración con las asignaturas de Cálculo y Diseño de Operaciones de Separación, Operaciones Unitarias Industriales y Control y Simulación de Procesos Químicos.
Control intermedio	10%	Al finalizar el Bloque II, se realizará un control intermedio con cuestiones teórico prácticas de los bloques I y II.

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**
 - Nota del examen final = x
 - Nota de tareas = y
 - Nota del control intermedio = zNota final (si $x \geq 4$, nota final = $0,7 \cdot x + 0,2 \cdot y + 0,1 z$, si $x < 4$, nota final = x)
- **Convocatoria extraordinaria: Para la evaluación de la convocatoria extraordinaria no se tendrá en cuenta el resultado del control intermedio, con lo que el examen final escrito contribuirá con un 80% al valor de la nota final.**
 - Nota del examen final = x
 - Nota de tareas = yNota final (si $x \geq 4$, nota final = $0,8 \cdot x + 0,2 \cdot y$, si $x < 4$, nota final = x)

**8. Consideraciones finales**

Se describe el cronograma completo de actividades a realizar en la asignatura:

ACTIVIDAD / EVALUACIÓN	DESCRIPCIÓN	COMPETENCIAS GENERALES*	SEMANA PREVISTA
CONTROL INTERMEDIO (10% nota final)	Trabajo individual Resolución de cuestiones teórico-prácticas de los Bloques I y II	CG1, CG2 CG7	SEMANA 8
SEMINARIO 1	Trabajo en equipo Influencia de los parámetros de operación en reactores de tanque agitado Utilización de hojas de cálculo para establecer la influencia de diferentes parámetros en la estabilidad de la operación en estado estacionario en un reactor continuo de tanque agitado. Se plantea la obtención de los planos de fase que indicarán la mejor forma de llevar a cabo el arranque del reactor.	CG2 CG7 CG9	SEMANA 3
SEMINARIO 2	Seminario Iniciación al cálculo de reactores catalíticos de lecho fluidizado Se plantean las características principales de este tipo de reactores, teniendo en cuenta las etapas tanto de transporte entre fases como de reacción química, se describe el modelo de Kunii-Levenspiel, que se resuelve para una reacción de orden 1. Deberán resolver un problema cerrado para determinar las dimensiones del reactor.	CG1, CG7	SEMANA 9
SEMINARIO 3	Trabajo en equipo Cálculo de parámetros de modelos de flujo no ideal Resuelven, mediante el empleo de hojas de cálculo, un problema de determinación de parámetros de modelos de flujo a partir de datos experimentales. Deberán seleccionar el/los métodos de cálculo más apropiados e interpretar los resultados obtenidos.	CG2, CG7, CG9	SEMANA 13
SEMINARIO 4	Seminario Seguridad en plantas químicas Se inicia el seminario con ejemplos reales de desastres ocurridos en plantas químicas industriales, analizando las principales causas. Se establecen criterios para identificar la peligrosidad de las sustancias que intervienen en los procesos y de los propios procesos. Deberán resolver un problema para identificar la peligrosidad de las sustancias empleadas en un proceso real.	CG1 CG7	SEMANA 14



ACTIVIDAD / EVALUACIÓN	DESCRIPCIÓN	COMPETENCIAS GENERALES*	SEMANA PREVISTA
TAREA 1**	<p>Trabajo en equipo</p> <p>Dimensionado de un equipo de tanque agitado</p> <p>A partir de un proceso industrial real, identifican las reacciones que tienen lugar para obtener el producto deseado. Resuelven el problema considerando que solo transcurre la reacción de interés y analizan la influencia de diferentes parámetros en la producción. Deben prestar especial atención a la posible formación de compuestos en fase gaseosa y/o vapor y tener en cuenta los problemas de seguridad asociados.</p>	CG1, CG7 CG9	SEMANA 4
TAREA 2**	<p>Trabajo en equipo</p> <p>Dimensionado de un reactor heterogéneo</p> <p>Como parte de la actividad conjunta para las asignaturas de tercer curso, segundo cuatrimestre, para el proceso de fabricación seleccionado se plantea el dimensionado y la operación en un reactor heterogéneo, considerando tanto la reacción principal como las posibles reacciones secundarias que puedan tener lugar.</p>	CG1, CG7 CG9	SEMANA 11
TAREA 3**	<p>Trabajo en equipo</p> <p>Aplicación de modelos de flujo al cálculo de reactores químicos</p> <p>A partir del proceso real abordado en la tarea 1, se plantea la obtención del modelo de flujo en el reactor a partir de datos experimentales obtenidos mediante la técnica de estímulo respuesta. Aplicando el concepto de macromezcla, los estudiantes deben determinar la conversión real.</p>	CG1, CG7 CG9	SEMANA 14

*Competencias generales

CG1 Capacidad de análisis y síntesis

CG2 Capacidad de organización y planificación del tiempo

CG7 Capacidad de razonamiento crítico/análisis lógico

CG9 Capacidad para trabajar en equipo de forma eficaz

** Las tareas computan un 20% a la calificación global de la asignatura