



# Planificaciones

7663 - Diseño avanzado de reactores

Docente responsable: AMADEO NORMA ELVIRA

## OBJETIVOS

Esta asignatura tiene como objetivo el diseño de los reactores catalíticos heterogéneos. Utilizando los conceptos vertidos en la asignatura Ingeniería de las Reacciones Químicas I, éstos se aplican y profundizan, para llevar a cabo el diseño y optimización de reactores heterogéneos multifásicos.

En particular, se estudian los reactores de lecho fijo, lecho fluidizado, lecho en suspensión, trickle bed, reactores estructurados y su aplicación industrial.

La primera parte de la asignatura incluye una clasificación y descripción de los catalizadores sólidos empleados en la práctica industrial, los métodos de preparación y las técnicas de caracterización. Se dedica un capítulo a la desactivación de catalizadores y su incidencia en el comportamiento del reactor.

Finalmente se aplican estos conceptos a los proyectos de I + D que se realizan en el Laboratorio, a través de discusión de publicaciones en revistas arbitradas, tanto propios como de otros grupos.

## CONTENIDOS MÍNIMOS

### PROGRAMA SINTÉTICO

A.1 CATALIZADORES SOLIDOS

A.2 DESACTIVACION DE CATALIZADORES

B. REACTORES CATALITICOS HETEROGENEOS

B.1 REACTORES DE LECHO FIJO

B.2 REACTORES DE LECHO FLUIDIZADO

B.3 REACTORES TRIFASICOS

B.4 OTROS REACTORES: estructurados, membranas, etc.

### PROGRAMA ANALÍTICO

A. CATALIZADORES Y DESACTIVACION

A.1 CATALIZADORES SOLIDOS

Definición e importancia de la catálisis heterogénea. Clasificación y selección de catalizadores. Ingeniería de la catálisis. Catalizadores máscicos y soportados. Propiedades de un catalizador industrial.

Preparación de catalizadores. Métodos de preparación de catalizadores máscicos. Métodos de preparación de catalizadores soportados. Variables de control. Ejemplos de aplicación.

Técnicas de caracterización de catalizadores. Superficie específica, porosimetría, termogravimetría, área metálica, acidez, resistencia mecánica. Actividad y estabilidad.

Catalizadores de oxidación selectiva.

A.2 DESACTIVACION DE CATALIZADORES

Causas de desactivación en una operación industrial. Sinterizado, coqueo, venenos, pérdida de compuestos volátiles. Regeneración de catalizadores desactivados. Prevención. Expresiones empíricas de la velocidad de desactivación. Mecanismos de desactivación: serie, paralelo, desactivación independiente.

Efectos difusionales sobre la desactivación. Balances de masa en una pastilla que se desactiva por sinterizado y por envenenamiento. Evolución del factor de efectividad con el tiempo.

Ejemplos de aplicación: Desactivación por sinterizado de catalizadores de cobre. Determinación de una ley cinética empírica.

B. REACTORES CATALITICOS HETEROGENEOS

## B.1 REACTORES DE LECHO FIJO

Importancia de los procesos catalíticos de lecho fijo. Innovaciones tecnológicas. Criterios de diseño.

Modelos pseudohomogéneos: Modelo básico unidimensional, balances de masa y energía, cálculo de la pérdida de carga; transferencia de calor en reactores de lecho fijo, intercambio en co-corriente y en contracorriente, sensibilidad paramétrica. Criterios de diseño, diseño de enfriamiento óptimo, aplicación a un proceso de oxidación parcial, efecto del flujo calórico sobre la vida útil del tubo. Aplicación al proceso de reformado de gas natural. Diseño de un reactor de lecho fijo sujeto a desactivación; políticas óptimas de operación; aplicación a un proceso adiabático.

Modelo bidimensional, parámetros de transporte efectivos, balances de masa y energía. Condiciones de contorno.

Ejemplo de aplicación: Diseño de un reactor de reformado de gas natural aplicando el modelo bidimensional pseudohomogéneo; perfiles radiales de temperatura; vida útil del reactor.

Modelos heterogéneos: Modelo unidimensional con gradientes interfaciales. Balances de masa y energía. Modelo unidimensional con gradientes interfacial e interparticular. Balances de masa y energía.

## B.2 REACTORES DE LECHO FLUIDIZADO

Aplicaciones industriales. Características de un lecho fluidizado. Velocidad mínima de fluidización. Velocidad terminal. Coeficientes de transferencia de calor. Modelado de reactores de lecho fluidizado. Modelo de Kunii y Levenspiel. Ejemplo de aplicación: Reactor de cracking catalítico.

Reactor de lecho móvil.

## B.3 REACTORES TRIFASICOS

Importancia de los reactores trifásicos en la industria. Clasificación de los reactores trifásicos.

Reactores de lecho en suspensión: Aplicaciones industriales. Regímenes fluidodinámicos. Parámetros fluidodinámicos: potencia de agitación, hold up, velocidad de agitación. Estimación de parámetros de transferencia de masa. Diseño de reactores de lecho en suspensión.

Ejemplo de aplicación: Determinación de los parámetros cinéticos y de transporte en un reactor de lecho en suspensión en la oxidación de SO<sub>2</sub>.

Bioreactores: crecimiento celular, balances de masa, ecuaciones de diseño, fermentadores.

Reactores trifásicos de lecho fijo: Aplicaciones industriales. Regímenes de flujo. Parámetros fluidodinámicos: Hold-up eficiencia de mojado. Factor de efectividad. Diseño de reactor trickle-bed.

## B.4 OTROS REACTORES

Reacción y separación simultánea: destilación reactiva y reactores de membrana. Reactores monolíticos. Agitación en reactores discontinuos.

## BIBLIOGRAFÍA

### BIBLIOGRAFIA

#### LIBROS DE TEXTO

- Anderson, J. R., Pratt, K.C.; Introduction to Characterization and Testing of Catalysts. Academic Press, 1985.
- Anderson, R. B.; Experimental Methods in Catalytic Research. Vol. I. Academic Press, 1976.
- Anderson, R.B., Dawson, P.T.; Experimental Methods in Catalytic Research. Vol II. Academic Press, 1976.
- Dumesic, J.A., Rudd, D.F., Aparicio, L.M., Rekoske, J.E., Treviño, A.A.; The Microkinetics of Heterogeneous Catalysis. ACS Professional reference Book, 1993.
- Farina, I.H., Ferretti, O.A., Barreto, G.F., Introducción al Diseño de Reactores Químicos. CEI, 1993.
- Fogler Scott Elements of Chemical Reaction Engineering. Prentice Hall. PTR, Englewood Cliffs, New Jersey. 1992
- Froment y Bischoff; Chemical Reactor. Analysis & Design. J.Wiley & Sons, 1979.
- Gianetto, A., Silveston, P.L.; Multiphase Chemical Reactors. Hemisphere Publishing Corp., 1986.
- Le Page, J.F.; Catalyse de contact. Editions TECHNIP., 1978.
- Levenspiel O., Omnibook de los reactores Químicos, Reverté, 1986.
- Ramachandran P.A, Chaudhari, R.V.; Three Phase Catalytic Reactors. Gordon and Breach Sc. Pub., 1983.
- Richardson, J.T.; Principles of Catalyst Development. Plenum Press, 1989.
- Shah, Y.T.; Gas-liquid-solid Reactor Design. Mc.Graw Hill, 1979.
- Smith, J.M.; Ingeniería de la Cinética Química. CECSA, 1986.
- Westertep, K.R., van Swaij, W.P.M., Beenackers, A.A.C.M.; Chemical Reactor Design and Operation.

J.Wiley & Sons, 1984.

## PUBLICACIONES

González Velasco y col., Optimal inlet temperature trajectories for adiabatic packed reactors with catalyst decay; Chem. Eng. Sc., 47(6), 1495, 1992.

Ginés y col., Activity and structure-sensitivity of the WGS over Cu-Zn-Al mixed oxide catalysts; Appl. Catal.A: General, 131, 283, 1995.

Aparicio, Amadeo, Laborde; Cinética de la desactivación de catalizadores de Cu/Zn/Al empleando la ecuación generalizada de la ley de la potencia; Información Tecnológica, 7(1), 29, 1996.

Chocrón y col., Effect of intraparticle diffusion on catalyst decay; Chem. Eng. Sc., 51(5), 683, 1996.

Amadeo, Laborde; Low temperature WGS: catalyst, kinetics and reactor design and optimization; Trends in Chemical Eng., 3, 159, 1996.

Chocrón, Amadeo, Laborde; Catalyst decay by simultaneous sintering and poisoning: Effects of intraparticle and interfacial gradients; Studies in Surface Science and Catalysis, vol.111 in Catalyst Deactivation 1997, 311-318, 1997.

Bio-ethanol steam reforming on Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst. Comas, J; Mariño, F; Laborde, M; Amadeo, N. Chem. Eng. J. 98, 61, 2004

Synthesis of copper-promoted CeO<sub>2</sub> catalysts. M. Jobbagy, F. Mariño, B. Schönbrod, G. Baronetti, M. Laborde. Chemistry of Materials, 18(7), 1945-1950, 2006

CO preferential oxidation over CuO-CeO<sub>2</sub> catalysts synthesized by the urea thermal decomposition method. Mariño, Fernando; Schönbrod, Betina; Moreno, Máximo; Jobbagy, Matías; Baronetti, Graciela; Laborde, Miguel. Catalysis Today, 133/135 (2008) 735-742

Ethanol Steam Reforming over Rh(1%)MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: A Kinetic Study. C. Graschinsky, M. Laborde, N. Amadeo, A. Le Valant, N. Bion, F. Epron, D. Duprez. Ind. Eng. Chem. Res. 2010 (en prensa)

Ni (II) Mg (II) Al (III) catalyst for hydrogen production from ethanol steam reforming: Influence of activation treatment. A.Romero, M. Jobbagy, M. Laborde, G. Baronetti, N. Amadeo. Catal. Today 149 (2010) 407-412

## RÉGIMEN DE CURSADA

### Metodología de enseñanza

El método de enseñanza propuesto se basa en propiciar una participación activa del alumno. Dicha interacción es garantizada mediante una comunicación fluida docente-alumno, de manera de lograr un ámbito propicio para la exposición y discusión de los distintos temas. Para lograr este estado de participación por parte del alumno, el docente deberá distanciarse del concepto de "clase magistral" y motivar al alumno desarrollando claramente los conceptos, relacionándolos y desafiando al alumno con el planteo oportuno de preguntas o problemas. No se propicia la redacción de apuntes de clases teóricas, de esta manera se induce al alumno a recurrir al libro de texto.

Se pretende introducir al alumno en la metodología científica a través de la lectura, análisis y discusión de trabajos científicos publicados en revistas internacionales.

Asimismo, se propicia el empleo de métodos numéricos de resolución de ecuaciones diferenciales aplicados a la simulación y optimización de reactores.

Debido a la complejidad de los problemas planteados se requiere una intensa dedicación individual fuera del horario de clases, por esta razón está contemplado un horario asignado exclusivamente a evacuar consultas. Finalmente el programa contempla el dictado de conferencias sobre temas específicos, brindadas por ingenieros de procesos con amplia experiencia en la industria.

### Modalidad de Evaluación Parcial

#### i) Modalidad de evaluación

El método de evaluación consiste en 1 examen parcial y una evaluación integradora. El examen parcial se aprueba con un mínimo de 4 puntos, y puede ser recuperado en una sola oportunidad. Los alumnos que hayan aprobado con 7 puntos o más en la primera oportunidad quedan eximidos de la evaluación integradora.

Para aprobar la asignatura el alumno debe presentar una carpeta con los problemas resueltos y el análisis crítico de los artículos científicos vistos en clase.



## CALENDARIO DE CLASES

Semana	Temas de teoría	Resolución de problemas	Laboratorio	Otro tipo	Fecha entrega Informe TP	Bibliografía básica
<1> 09/03 al 14/03	Catalizadores sólidos.					
<2> 16/03 al 21/03	Catalizadores sólidos. Desactivación de catalizadores	catálisis- mecanismos				
<3> 23/03 al 28/03	Desactivación de catalizadores	catálisis - mecanismos				
<4> 30/03 al 04/04	Reactores de lecho fijo	desactivación -				
<5> 06/04 al 11/04	Reactores de lecho fijo	desactivación				
<6> 13/04 al 18/04	Reactores de lecho fluidizado	Diseño de reactores de lecho fijo				
<7> 20/04 al 25/04	Reactores de lecho fluidizado	Diseño de reactores de lecho fijo				
<8> 27/04 al 02/05	Reactores trifásicos	Reactores de Lecho fluidizado				
<9> 04/05 al 09/05	Reactores trifásicos.	Reactores de Lecho fluidizado				
<10> 11/05 al 16/05	Reactores biológicos	Reactores trifásicos				
<11> 18/05 al 23/05	Reactores biológicos	Reactores trifásicos				
<12> 25/05 al 30/05	Procesos de reacción y separación. Reactores de membrana, Destilación extractiva, solvente extractivo	Reactores Biológicos				
<13> 01/06 al 06/06	Reactores estructurados, monolíticos y de pared catalítica.	Procesos de reacción y separación. Reactores estructurados y monolíticos				
<14> 08/06 al 13/06	Energías y Medio Ambiente. Proyecciones Hidrógeno como vector de energía. Pilas de combustible	Discusión de "papers"				
<15> 15/06 al 20/06	Producción y purificación de hidrógeno.	Discusión de "papers"				
<16> 22/06 al 27/06						

## CALENDARIO DE EVALUACIONES

### Evaluación Parcial

Oportunidad	Semana	Fecha	Hora	Aula
1º	15	26/11	14:00	
2º	16	03/12	14:00	
3º		19/12	14:00	
4º				