

## PROGRAMA DE CURSO REACTORES AVANZADOS

### A. Antecedentes generales del curso:

Departamento	Ingeniería Química Biotecnología y Materiales					
Nombre del curso	Reactores Avanzados	Código	IQ5317	Créditos	6	
Nombre del curso en inglés	<i>Heterogeneous reactors</i>					
Horas semanales	Docencia	3,0	Auxiliares	1,5	Trabajo personal	5,5
Carácter del curso	Obligatorio	X		Electivo		
Requisitos	IQ4112: Métodos matemáticos para procesos, IQ4314: Diseño de Reactores					

### B. Propósito del curso:

El propósito del curso es que el estudiantado pueda mejorar el desempeño de reactores heterogéneos. Para ello, se modela un reactor, utilizando cinéticas de reacción superficial, transferencias de masa externa o interna, según la etapa limitante. La sensibilidad del modelo, comparada con datos experimentales permite dar un diagnóstico de la etapa limitante y, sobre esa base, proponer mejoras.

Las/los estudiantes serán habilitados para diagnosticar y proponer mejoras en sistemas catalíticos y no catalíticos, con potenciales aplicaciones en tratamiento de aguas, tratamiento de gases y procesos energéticos, entre otros.

El curso tributa a las siguientes competencias específicas (CE) y competencias genéricas (CG):

CE1: Concebir, dimensionar y diseñar conceptualmente procesos industriales, considerando prefactibilidad técnico-económica y aspectos sociales, normativos y de desarrollo sustentable.

CE2: Modelar y simular procesos industriales, aplicando herramientas de las ciencias, a fin de analizar la prefactibilidad técnica de los procesos.

CE8: Concebir soluciones a problemáticas industriales mediante el diseño y la supervisión de estudios experimentales y prototipos de escala piloto de alternativas tecnológicas tradicionales o novedosas.

### CG1: Comunicación académica y profesional

Comunicar en español de forma estratégica, clara y eficaz, tanto en modalidad oral como escrita, puntos de vista, propuestas de proyectos y resultados de investigación fundamentados, en situaciones de comunicación compleja, en ambientes sociales, académicos y profesionales.

### CG3: Compromiso ético

Actuar de manera responsable y honesta, dando cuenta en forma crítica de sus propias acciones y sus consecuencias, en el marco del respeto hacia la dignidad de las personas y el cuidado del medio social, cultural y natural.

## C. Resultados de aprendizaje:

Competencias específicas	Resultados de aprendizaje
CE1, CE2	RA1: Formula una expresión cinética que representa el cambio de un sistema molecular de reactantes a productos, para sistemas homogéneos y heterogéneos limitados por la reacción, utilizando teoría de grafos-P.
CE1, CE2	RA2: Formula una expresión cinética que representa el cambio de un sistema molecular de reactantes a productos, para sistemas heterogéneos limitados por transferencia de masa interna o externa, utilizando ecuaciones de transferencia de masa.
CE2	RA3: Diagnostica la etapa limitante de un reactor heterogéneo comparando la sensibilidad de tres modelos teóricos con la respuesta del reactor estudiado a los mismos cambios usando datos experimentales.
CE8	RA4: Propone cambios operacionales o de diseño a un reactor para mejorar su conversión, sobre la base de un modelo de base fenomenológica que depende de la concentración de reactantes y la presión.
Competencias genéricas	Resultados de aprendizaje
CG1	RA5: Comunica de manera clara y eficaz, mediante un video de 10 min., cómo es el funcionamiento de un reactor heterogéneo y la estructura básica de un modelo (dominios y fenómenos), considerando el uso de recursos verbales y no-verbales y el seguir un hilo explicativo/argumentativo consistente.

CG3	RA6: Analiza de manera reflexiva el impacto de la propuesta de cambios para un reactor en su contexto, considerando efectos ambientales, energéticos, de costos estimados y riesgos para la comunidad.
-----	--

#### D. Unidades temáticas:

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
1	RA1, RA6	Mecanismos de reacción en reactores homogéneos	3 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
1.1. Reactores homogéneos y balances de masa. 1.2. Mecanismos de reacción. 1.3. Grafos-P. 1.4. Algoritmo para componer una cinética de reacción. 1.5. Mecanismos de Lindemann e intermediarios activos.		El/la estudiante: <ol style="list-style-type: none"> <li>Formula el balance de masa para reactores homogéneos, adaptando sus ecuaciones a casos Batch, CSTR o PFR.</li> <li>Traduce un mecanismo de reacción a un grafo-P, verificando que todas las reacciones sean elementales.</li> <li>Distingue un paso limitante en un mecanismo de reacción considerando energías de activación, reactividad de especies y dificultades de coordinación espacial.</li> <li>Explica las reacciones de una especie utilizando los conceptos de intermediario activo y mecanismos de Lindemann.</li> <li>Deduca la expresión cinética de reacción global, utilizando un algoritmo formal que depende de la reacción limitante y la hipótesis de pseudo estado estacionario.</li> <li>Ajusta los parámetros cinéticos de una cinética de reacción, utilizando integradores numéricos, optimizadores no-lineales y un set de datos experimentales.</li> <li>Analiza el impacto de los cambios de un reactor homogéneo, considerando efectos ambientales y energéticos, de manera reflexiva.</li> </ol>	
Bibliografía de la unidad		[Fogler, 2016]	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
2	RA1	Reacciones heterogéneas	3 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
2.1. Enzimas. 2.2. Reactores biológicos. 2.3. Reactores catalíticos. 2.4. Mecanismos de Langmuir-Hinshelwood y Eley-Rideal.		El/la estudiante: <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Explica las reacciones enzimáticas, utilizando los conceptos de intermediario activo y mecanismos de reacción.</li> <li>2. Deduce la ecuación de Michaelis-Menten utilizando el algoritmo de construcción de cinéticas de reacción.</li> <li>3. Utiliza la ecuación de Michaelis-Menten para justificar la estructura de la ecuación de Monod.</li> <li>4. Aplica la ecuación de Monod sobre una población de microorganismos en fase de crecimiento exponencial.</li> <li>5. Formula y resuelve balances de masa para biomasa, sustratos y productos para poblaciones en fase exponencial o estacionaria en reactores de tipo Batch, CSTR o PFR.</li> <li>6. Describe la estructura básica de un catalizador soportado, considerando sus aplicaciones industriales.</li> <li>7. Deduce la cinética de reacción heterogénea para mecanismos de reacción Langmuir-Hinshelwood y Eley-Rideal.</li> </ol>	
Bibliografía de la unidad		[Fogler, 2016]	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
3	RA2, RA3, RA4, RA5, RA6	Modelación de reactores heterogéneos	9 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>3.1. Expresiones cinéticas con cambio de propiedad extensiva (volumen, masa, área superficial, sitio activo).</p> <p>3.2. Etapas limitantes (transferencia de masa externa, transferencia de masa interna o reacción).</p> <p>3.3. El rol de la presión: la ecuación de Ergun.</p> <p>3.4. Modelación de reactores con limitante de transf. int., transf. ext. o reacción.</p> <p>3.5. Análisis de sensibilidad de modelos y reactores: temperatura, velocidad superficial, tamaño de partícula.</p> <p>3.6. Propuesta de mejoras en reactores heterogéneos.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Modifica factores de la estructura matemática de la cinética de reacción para depender de diferentes propiedades extensivas, a saber: volumen de reactor, masa de catalizador, área de catalizador, sitio activo.</li> <li>2. Formula y resuelve balances de masa para reactores catalíticos de lecho empacado, considerando pérdidas de carga según la ecuación de Ergun.</li> <li>3. Sustituye el término matemático de la cinética de reacción en la ecuación de Balance de Masa considerando la etapa limitante.</li> <li>4. Ajusta los parámetros de cinéticas limitadas por reacción, transporte interno o transporte interno en un reactor de lecho empacado, utilizando un set de datos experimentales, integradores numéricos y optimizadores no-lineales.</li> <li>5. Diagnostica cuál es la etapa limitante de un reactor heterogéneo usando tres modelos, comparando su respectiva sensibilidad con la sensibilidad de un reactor real ante cambios en la temperatura, presión, velocidad superficial o diámetro de partícula.</li> <li>6. Propone cambios para mejorar la conversión de un reactor, considerando la etapa limitante y su sensibilidad a parámetros físicos.</li> <li>7. Analiza el impacto de la propuesta de cambios para un reactor heterogéneo en su contexto, considerando efectos ambientales, energéticos, de costos estimados y riesgos a la seguridad.</li> <li>8. Elabora un video de 10 min. para explicar de manera clara y eficaz el funcionamiento de un reactor heterogéneo y la estructura básica de un modelo (dominios y fenómenos), considerando recursos verbales y no-verbales y una línea argumentativa coherente.</li> </ol>	
Bibliografía de la unidad		<p>[1] Fogler, 2016.</p> <p>[2] Díaz-Alvarado, 2012.</p>	

## E. Estrategias de enseñanza – aprendizaje:

El curso considera una serie de estrategias:

- Clases expositivas.
- Actividades prácticas: modelación y simulación de reactores.
- Video grupal del estudio de un reactor.

*La metodología de enseñanza y aprendizaje es activo-participativa, el/la estudiante realizará actividades individuales y colectivas. El/la estudiante complementa las actividades en el aula con estudio personal.*

## F. Estrategias de evaluación:

El curso considera las siguientes instancias de evaluación:

- Controles
- Video grupal.
- Coevaluaciones y autoevaluaciones asociadas al video grupal.

*Al inicio de cada semestre el académico o académica informará al y la estudiante sobre los tipos y cantidad de evaluaciones, así como las ponderaciones correspondientes.*

## G. Recursos bibliográficos:

### Bibliografía obligatoria:

- [1] Fogler, H. Scott. (2016). Elements of Chemical Reaction Engineering. Financial Times Prentice Hall.
- [2] Díaz-Alvarado, F. (2012). Reformado de alcoholes para la producción de Hidrógeno: Análisis termodinámico y propuesta de mecanismos de reacción mediante Grafos-P. Tesis para optar al grado de Doctor en Ciencias de la Ingeniería, mención Química. Universidad de Chile.

## H. Datos generales sobre elaboración y vigencia del programa de curso:

Vigencia desde:	Otoño, 2023
Elaborado por:	Felipe Díaz Alvarado
Validado por:	Validador par: Irene Martínez CTD de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales (IQBM)
Revisado por:	Área de Gestión Curricular