

**UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL
FACULTAD REGIONAL ROSARIO**

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

PROGRAMA ANALÍTICO DE LA ASIGNATURA: **Integración IV**

APROBADO RESOLUCIÓN Nro. 329/98 CO. ACAD. F.R.R.

PLAN DE ESTUDIOS ORDENANZA N°: 768

NIVEL DE IMPLEMENTACIÓN: 4°

HORAS SEMANALES: 3

DICTADO ANUAL

ÁREA DE CONOCIMIENTO: Computación Aplicada a la Ingeniería Química

PROFESORES: **Dr. Nicolás J. Scenna**
Dr. Alejandro S. Santa Cruz
Dra. Sonia J. Benz

DIRECTOR DE DEPARTAMENTO: **Ing. Edgardo N. Martín**

OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA:

El contenido propuesto para la asignatura se deriva del planteo de los siguientes objetivos:

- Introducir al alumno al modelado de procesos por computadora.
- Introducir al alumno al concepto de diseño asistido por computadora.
- Introducir al alumno al análisis numérico y la optimización de procesos.
- Lograr una síntesis de lo aprendido en la carrera, por ejemplo, las formas de plantear un modelo físico, la resolución del sistema resultante, diversos tipos de modelos, su relación con la ingeniería, la termodinámica, la estimación de propiedades fisicoquímicas, los fenómenos de transporte, la cinética química, el diseño de equipos de diversa índole, por ejemplo de separación, de intercambio calórico, la teoría de mediciones y el error de estimación, programación y computación, etc.
- Lograr que el alumno domine las técnicas de simulación de procesos, tanto en estado estacionario como dinámico.
- Lograr que el alumno maneje adecuadamente simuladores comerciales. Esto significa tener habilidad para modelar un complejo químico, introducir los datos, seleccionar los parámetros e hipótesis adecuadas, procesar la información lograda mediante las simulaciones, y preparar un reporte escrito (con las gráficas correspondientes) que indiquen las conclusiones obtenidas. Aquí resultará importante la identificación de la etapa del proyecto y su relación con la rigurosidad de los resultados requerida, si es necesario utilizar métodos de optimización, simulación estacionaria o dinámica, métodos fisicoquímicos simplificados o rigurosos, etc.
- Conseguir que el alumno pueda plantear un modelo para equipos específicos, logre seleccionar el método numérico adecuado para la

solución del mismo, identificar los productos comerciales existentes para su implementación y programación por computadora, disponer de la habilidad y la capacidad para intercambiar opiniones con especialistas de otras disciplinas (métodos numéricos, análisis de sistemas, programación) a los efectos de implementar la solución informática adecuada.

- Dotar al alumno de un espíritu crítico respecto del uso de los productos informáticos, especialmente en la interpretación de los resultados, la noción de los errores posibles, su relación con el desempeño del equipo real de planta, la necesidad de disponer de criterio y juicio ingenieril, comprender las limitaciones de cualquier modelo por más riguroso que parezca, etc. Comprender claramente el concepto de modelo y realidad, resultados del simulador vs. planta piloto y proceso real.
- Adquirir nociones acerca del uso de los métodos informáticos en las distintas facetas de la vida profesional de un ingeniero químico, por ejemplo: diseño de equipos, diseño gráfico (lay - out, diagramas de cañerías e instrumentos, ingeniería de detalle), síntesis de procesos, síntesis del sistema de control, análisis de fallas, optimización de un proceso dado, análisis de operabilidad, supervisión en tiempo real, optimización en tiempo real, entrenamiento de personal mediante simulación en tiempo real, bases de datos para sistemas de información de planta, sus potenciales usos, etc. Lograr una adecuada interpretación de la tarea del modelado y simulación de procesos con respecto al contexto arriba mencionado.

El logro de los objetivos propuestos requiere de un equipo de docentes responsables trabajando en forma coordinada.

FUNCION DE LA ASIGNATURA EN EL PLAN DE ESTUDIOS: La asignatura Integración IV, perteneciente al Tronco Integrador del Diseño Curricular, tiene como función relacionar e integrar los conocimientos tanto en el nivel horizontal como vertical (por ejemplo, Integración V – Proyecto). Asimismo, constituye un elemento primordial para enfatizar el aprendizaje de la práctica profesional, ejercitándola partiendo de problemas básicos, concretos y realistas. En síntesis, es una asignatura que funciona como nexo para articular la formación del estudiante y el ejercicio profesional, evitando la dicotomía teoría – práctica.

PROGRAMA ANALITICO

Tema 1: INTRODUCCION A LOS METODOS INFORMATICOS APLICADOS AL MODELADO EN INGENIERIA.

Introducción. Evolución histórica. Métodos numéricos como herramienta para el modelado de procesos en Ingeniería Química. Modelos "no convencionales". Representación de problemas mediante la utilización de grafos. Descomposición de problemas complejos. Partición. Sistemas de gerenciamiento de información. Paradigmas informáticos.

Tema 2: INTRODUCCION AL DISEÑO DE PROCESOS QUIMICOS. BREVES NOCIONES.

Introducción. Etapas en la tarea de diseño. La tarea de la síntesis de procesos químicos. Descomposición del problema en subproblemas. Síntesis de la red de intercambiadores. Síntesis de sistemas de separación. Espacio de soluciones del problema. Distintos enfoques para abordar el problema de síntesis. Ejemplos de aplicación. Sistemas integrados de información.

Tema 3: REVISION DE METODOS NUMERICOS APLICABLES EN SIMULACION DE PROCESOS EN ESTADO ESTACIONARIO.

Conceptos básicos. Métodos básicos. Discusión de la convergencia. Principales métodos. Método de Newton - Raphson. Usos de la derivada de la función. Sustitución directa o aproximaciones sucesivas. Aceleradores de convergencia. Procedimiento de Wegstein. Solución de sistemas de ecuaciones lineales simultáneas. Planteo del problema. Teoremas básicos. Métodos directos. eliminación gaussiana. análisis de errores. métodos iterativos. método de Jacobiano. Método de Gauss - Seidel. Problemas propuestos.

Tema 4: SISTEMAS DE ECUACIONES DE GRAN DIMENSION Y POCO DENSOS.

Introducción. Resolución numérica de sistemas de ecuaciones no lineales. Métodos de Newton - Raphson. Linealización. Matrices tridiagonales. Método de Thomas. Extensión del método de Thomas a matrices tridiagonales en bloque. Método de sustitución directa o aproximaciones sucesivas. Análisis estructural de sistemas de elevada dimensión. Algoritmo de Steward para la determinación del conjunto de salida. Especificaciones de variables y grados de libertad de un sistema de ecuaciones. Algoritmos para la selección de variables a especificar. Sistemas cíclicos. Algoritmos de particionado, rasgado y ordenamiento. Arquitectura modular secuencial. Método de particionado de Norman (1965). Algoritmo de particionado de Keham y Shacham. Rasgado del diagrama de flujos o grafo. Algoritmo de Barkeley y Motard (1972). Etapa de ordenamiento. Problemas propuestos.

Tema 5: SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS.

Introducción. Clasificación de los métodos de simulación. *Simulación cualitativa y cuantitativa. Simulación estacionaria y dinámica.* Simuladores de procesos

químicos complejos. Simuladores de procesos en estado estacionario modulares secuenciales vs. simuladores globales.

Tema 6: INTRODUCCION A LAS CARACTERISTICAS DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL.

Estructura de un simulador modular secuencial en estado estacionario. Modelado de equipos para simulación de procesos. Programación de módulos de simulación. Breve descripción de los distintos módulos de equipos presentes en un simulador modular de procesos químicos. Aspectos básicos a tener en cuenta en el uso de un simulador de procesos modular secuencial en estado estacionario. *Simuladores comerciales mas difundidos (aspen, PRO-II, HYSYM, CHEMCAD, etc.). Introducción a su uso, ejercitación practica.*

Tema 7: PROPIEDADES TERMODINAMICAS DE EQUILIBRIO. REVISION.

Introducción. Revisión de sistemas termodinámicos. Revisión de equilibrio líquido - vapor. Correlaciones para la estimación de la presión de vapor. Estimación de presión de vapor de cortes de petróleo. Equilibrio líquido - vapor en sistemas semi-ideales. Propiedades termodinámicas de mezclas ideales a bajas presiones. Propiedades termodinámicas de mezclas ideales a presiones bajas a moderadas. Equilibrios de fases en sistemas no ideales. Teoría de soluciones regulares y correlaciones de Chao - Seader y Grayson - Streed. Ecuaciones que describen coeficientes de actividad de la fase líquida. Ecuación de Margules. Ecuación de Van Laar. Ecuación de Wilson. Ecuación NRTL. Ecuación Uniquac. El método Unifac. Uso de datos experimentales para calcular constantes. Cálculo de coeficientes de actividad. Coeficientes de actividad a dilución infinita. Equilibrio líquido - vapor a altas presiones. Modelos para la fase vapor a presiones altas. Fenómenos críticos en las mezclas a altas presiones. Selección del método para la predicción de propiedades del equilibrio líquido - vapor.

Tema 8: ESTIMACION DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS. REVISION.

Introducción. Repaso de entalpías de exceso. Repaso de métodos para la estimación del calor latente de vaporización. Métodos para la estimación de la capacidad calorífica. Capacidad calorífica de gases ideales. Capacidad calorífica de mezclas de gases ideales. Capacidad calorífica de líquidos puros. Densidad de líquidos. Estimación de propiedades termodinámicas de transporte. Viscosidad. Conductividad térmica de gases a baja presión. Conductividad térmica de mezclas de gases a baja presión. Conductividad térmica de líquidos. Coeficiente de difusión.

Tema 9: MODULO PARA LA SIMULACION DE EVAPORADORES FLASH.

Introducción. Flash isotérmico. Flash adiabático. Flash a fracción de vaporización (o de licuefacción) dada. Otras especificaciones para el equipo flash. Otras aplicaciones de los algoritmos para simulación de evaporadores

flash. Separadores líquido - líquido. Cálculos de puntos de burbuja y rocío. Temperatura de burbuja. Temperatura de rocío.

Tema 10: MODELADO DE EQUIPOS DE SEPARACION MULTICOMPONENTES EN CASCADAS CONTRACORRIENTE MULTIPLE ETAPA.

Introducción. Repaso del concepto de etapas de equilibrio. Repaso de eficiencia de etapa. Simulación de cascadas múltiple etapa basado en el concepto de etapas de equilibrio. Métodos de resolución aproximados. Repaso de los métodos de etapa a etapa. Métodos de resolución matriciales (semirrigurosos). Modelo matemático. Métodos rigurosos de resolución simultánea. Sistema de ecuaciones. Estructura del jacobiano. Procedimiento numérico de resolución. Opciones estructurales. Métodos jerárquicos con dos niveles de iteración (inside - out). Métodos de relajación. Múltiples soluciones en equipos de separación multicomponentes múltiple etapa.

Tema 11: INTRODUCCION A LA OPTIMIZACION.

Introducción. Formulación del modelo. Ejemplos: planificación de producción de una refinería. Modelado del ejemplo. Teoría y algoritmos de optimización. Programación lineal. Solución gráfica de PL. El algoritmo simplex. Programación no lineal. Teoría clásica de la programación no lineal. Programas matemáticos no condicionados. Programas matemáticos condicionados por igualdades. Problemas condicionados por desigualdades. Algoritmos para resolver PNL. Restricciones univariadas. Algoritmos para resolver PNL multivariadas sin restricciones. Algoritmos para PNL con restricciones.

Tema 12: OPTIMIZACION DE PROCESOS POR COMPUTADORA.

Introducción. Ejemplos. Diseño de un absorbedor. Diseño de una planta completa. Un problema de optimización con óptimos locales. Simulación de procesos por computadora y su relación con optimización. Distintos enfoques. Enfoque global. Enfoque modular simultáneo. Optimización de procesos con el enfoque modular secuencial. Métodos de caja negra. Métodos de camino no factible. Métodos de camino factible. Métodos híbridos. Optimización de procesos con el enfoque global. Optimización de procesos con el enfoque modular simultáneo. Simuladores comerciales que incorporan optimizadores. Introducción a su manejo. Ejercitación practica.

Tema 13: METODOS NUMERICOS. APROXIMACION PARA LA SOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.

Introducción. Ecuaciones diferenciales ordinarias de orden n. Solución de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden. Aproximación a la solución mediante expansión en series de Taylor. Métodos explícitos de resolución de EDOs. Método de Euler. Métodos de Runge - Kutta. Métodos de

múltiple paso. Métodos predictores- correctores. Sistemas de ecuaciones diferenciales. Problemas propuestos.

Tema 14: SIMULACION DINAMICA DE EQUIPOS DE PROCESOS ELEMENTALES.

Introducción. Simulación dinámica de equipos sencillos de proceso. Modelo para la simulación dinámica de un separador flash. Ejemplos de aplicación.

Tema 15: SIMULACION DINAMICA DE EQUIPOS DE SEPARACION MULTIPLE ETAPA EN CONTRACORRIENTE.

Introducción. Modelos para sistemas de separación múltiple – etapa multicomponente en contracorriente. Sistema de ecuaciones del modelo. Procedimientos de calculo. Ejemplos de aplicaciones específicas: Destilación batch. Simuladores comerciales dinámicos (HYSYS, Aspen, etc.). Su utilización. Ejercitación práctica.

Tema 16: METODOS, ESTRUCTURAS Y MODELOS PARA LA SIMULACION DE PROCESOS BATCH.

Introducción. El rol de los procesos batch en la industria química. Aplicación de la simulación en la ingeniería de procesos batch. Características de los procesos batch. Los sistemas de simulación. Simuladores batch comerciales.

Tema 17: SIMULACION DINAMICA EN TIEMPO REAL.

Introducción. Características generales de un simulador en tiempo real. Construcción de un simulador de tiempo real. Tiempo real. Ruidos y fallas. Ejemplos

TRABAJOS PRACTICOS: de resolución de ejercicios, de resolución de problemas, de laboratorio, de campo, de investigación bibliográfica, de proyectos, otros.

Los trabajos Prácticos tienen como objetivo favorecer en el alumno el desarrollo de su capacidad para relacionar conceptos teóricos con situaciones reales y promover la aplicación integrada de los conocimientos adquiridos para ganar confianza en la teoría y verificar sus limitaciones. Los trabajos prácticos consistirán en la resolución de ejercicios y resolución de problemas mediante el desarrollo de algoritmos y/o la aplicación de utilitarios de computación, software específico o simuladores de procesos según corresponda.

BIBLIOGRAFIA:

Bibliografía básica:

Scenna N. J. "Modelado, Simulación y Optimización de Procesos", UTN, 1998

Bibliografía general y Específica:

- Benz S. J. "Síntesis Óptima de Trenes de Destilación Flexibles con Integración Calórica", Tesis Doctoral, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fé, Argentina, 1991.
- Carnahan, B., H. A. Luther y J. O. Wilkes, "Applied Numerical Methods", John Wiley and Sons, Inc., New York (1969).
- Cerro, R. L., L. E. Arri, M. G Chiovetta. y G. Pérez, "Curso Latinoamericano de Diseño de Procesos por Computadora", Parte I (Tomo I): Simulación de Procesos por Computadora, INTEC, Santa. Fe, Argentina, Agosto de 1978.
- Cerro, R. L., L. E. Arri, M. G Chiovetta. y G. Pérez, "Curso Latinoamericano de Diseño de Procesos por Computadora", Parte I (Tomo II): Simulación de Procesos por Computadora, INTEC, Santa. Fe, Argentina, Agosto de 1978.
- Cohen, A. M., J. F. Cutts, R. Fielder, D. E. Jones, J. Ribbans y E. Stuart, "Análisis Numérico", Editorial Reverté S. A., Barcelona (1977).
- Douglas J., "Conceptual Design of Chemical Processes", Mc Graw-Hill Co, 1988.
- Franks R.G.E., Mathematical Modeling in Chemical Engineering, John Wiley and Sons Inc. NY - 1965.
- Franks R.G.E., "Modeling and Simulation in Chemical Engineering", John Wiley and Sons Inc. NY 1972.

- Santa Cruz, Alejandro, "Flujo de Fluidos No - Newtonianos a través de Conductos", Tesis Doctoral, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Pcia. de Santa Fe, República Argentina, 1987.
- Scenna N. J., "Síntesis de Procesos de Desalinización Térmica", Tesis Doctoral, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fé, Argentina, 1987.
- Westerberg, A.W., H. P. Hutchison, R. L. Motard y P. Winter, "Process Flowsheeting", Cambridge University Press (1979).
- Tarifa E.E., "Diagnosis de Fallas en Plantas Químicas Complejas: Plantas de Grandes Dimensiones y Procesos Batch", Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, 1995.
- Tarifa E.E., Humana D., Vázquez G., Franco S., Scenna N.J., "Simulación Dinámica en Tiempo Real. Pasteurizador HTST", UNJu, 1997.