Ministerio de Cultura y Educación **(Programa del año 2023)**
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Ingeniería y Ciencias Agropecuarias
Departamento: Ingenieria de Procesos
Area: Procesos Químicos

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
() Optativa: Simulación y Optimización de Procesos.	INGENIERÍA QUÍMICA	Ord 24/12 -17/2 2	2023	1° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
RODRIGUEZ, MARIA LAURA	Prof. Responsable	P.Aso Simp	10 Hs
MIRANDA, ANGEL FEDERICO	Auxiliar de Práctico	A.1ra Simp	10 Hs
MUFARI, Abigail	Auxiliar de Práctico	A.1ra Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	**Teóricas**	**Prácticas de Aula**	**Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.**	**Total**
Hs	3 Hs	4 Hs	Hs	7 Hs

Tipificación	Periodo
C - Teoria con prácticas de aula	1º Cuatrimestre

Duración			
Desde	**Hasta**	**Cantidad de Semanas**	**Cantidad de Horas**
13/03/2023	26/06/2024	15	105

IV - Fundamentación

La Ingeniería de Procesos es una disciplina relativamente madura. Se basa en el avance importante realizado en las últimas décadas en el campo del modelado de procesos fisicoquímicos, el cálculo numérico y simbólico, junto a la evolución vertiginosa de la computación como ciencia y como herramienta auxiliar en la tarea del ingeniero, tanto en el diseño como en el gerenciamiento de la producción. Conceptualmente, en las últimas décadas se ha consolidado una nueva visión o filosofía, el “Diseño Sistémico de Procesos”, o “Process System Engineerning”. Este enfoque se basa en metodologías para lograr el diseño tanto de la estructura de un flowsheet (síntesis de procesos) como su análisis, evaluación y optimización (selección de la alternativa más prometedora) mediante un ciclo iterativo de síntesis – análisis - optimización – síntesis... En las últimas cuatro décadas se ha progresado enormemente, lográndose propuestas importantes para desarrollar un cuerpo de conocimientos que abarque y sistematice la Ingeniería de Procesos; y además, se ha difundido a gran escala la utilización de dichas técnicas y herramientas en la industria en general (ejercicio profesional). El tronco principal de conocimientos en los cuales se basa la visión sistémica del diseño de procesos, y por lo tanto esta asignatura; se relaciona con los fundamentos de la ingeniería química o fenómenos de transporte, termodinámica, fisicoquímica y cinética química, las operaciones unitarias, junto con el modelado y el análisis numérico como herramienta de resolución sistemática de sistemas de ecuaciones de alta

dimensión.
En la actualidad, el medio es cada vez más exigente y requiere profesionales habilitados para dar respuestas rápidas y a bajo costo a las diversas interrogantes de la investigación, la industria y de sus propias empresas o proyectos. El Modelamiento o Simulación de Procesos resulta así una alternativa clave para encontrar estas respuestas y evaluar los procesos en forma rápida y a muy bajo costo. La simulación aparte de ser una aplicación de las matemáticas a un problema real haciendo posible analizarlo y predecirlo; va mucho más allá: los avances informáticos han hecho de esta herramienta no solo un medio más accesible y fácil de utilizar, sino la han convertido en un requerimiento fundamental para la evaluación, optimización y el control de los procesos de producción.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Se pretende que el alumno sea capaz de simular y analizar un proceso que incluya las operaciones de uso convencional en Ingeniería Química. Para el logro de dicho objetivo se propone brindar una formación orientada a desarrollar capacidades que permitan el manejo de estrategias de síntesis, modelado y simulación de procesos que den solución a situaciones reales.
Se capacitará al alumno en el uso de simuladores de acceso libre abarcando además aspectos conceptuales que permitan reconocer su potencialidad.
Resultados de Aprendizaje:
• Interpretar procesos químicos (o alimenticios) que involucren operaciones unitarias y/ reacción química para sintetizar en un flowsheet
• Implementar software de simulación de procesos para realizar el flowsheeting
• Seleccionar paquetes termodinámicos apropiados de acuerdo a las condiciones del proceso y a la naturaleza de las corrientes involucradas para lograr resultados realistas de las simulaciones.
• Diseñar una estrategia adecuada para resolución del módulo o equipo según la información disponible del sistema
• Analizar un proceso con operaciones unitarias y/o reacción química mediante simulación para lograr la comprensión de la interrelación y el efecto de las variables de proceso
• Evaluar la posibilidad de modificación del proceso, tendiente a la intensificación del mismo
• Establecer ventanas operativas adecuadas que permitan una operación eficiente del proceso
• Informar los resultados obtenidos a partir de las simulaciones realizadas

VI - Contenidos

Tema 1: INGENIERÍA DE PROCESOS Y SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS.
Ingeniería de Procesos. Etapas en la tarea de diseño sistémico de procesos industriales. Síntesis de procesos, Simulación, Optimización. Evolución histórica. Distintos enfoques para abordar el problema de síntesis. Descomposición del problema en sub-problemas. El criterio ingenieril. Procesos típicos en Ingeniería Química y o de Alimentos. Visión sistémica. El sistema de utilidades (vapor, energía eléctrica y mecánica, agua de enfriamiento, gases inertes, sistemas contra incendio, etc.) Consumos energéticos. Insumos típicos y características generales de los procesos químicos. El sistema de reacción. El sistema de separación. El sistema de intercambio térmico. Recuperación de energía. El problema del reciclo. Representación estructural de procesos. Planos y Diagramas de Flujos de procesos. Modelado de la estructura. Simulación de Procesos Químicos. Simulación estacionaria y dinámica. Simuladores modulares secuenciales vs. globales. Módulos de equipos en un simulador modular de procesos químicos. Banco de modelos para la estimación de propiedades físico-químicas. Uso de un simulador de procesos modular secuencial en estado estacionario. Simuladores comerciales más difundidos (ASPEN, PRO-II, HYSYS, CHEMCAD, otros).
Ejercitación Práctica. Resolución de Problemas.

Tema 2. REVISIÓN DE METODOS PARA LA ESTIMACION DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS Y FISICO-QUIMICAS.
Revisión de las propiedades termodinámicas de equilibrio. Equilibrio químico y equilibrio físico. Revisión de correlaciones para la estimación de la presión de vapor. Equilibrio liquido - vapor en sistemas ideales y semi-ideales. Propiedades termodinámicas de mezclas a bajas, moderadas y altas presiones. Equilibrios de fases en sistemas no ideales. Coeficientes de actividad y fugacidad. Ecuaciones de estado. Fase liquida. Ecuaciones de Margules, Van Laar, Wilson, NRTL, UNIQUAC – UNIFAC. Uso de datos experimentales para calcular constantes. Cálculo de coeficientes de actividad y fugacidad.
Métodos para la estimación del calor latente de vaporización. Capacidad calorífica de gases ideales y de mezclas de gases ideales y no ideales. Capacidad calorífica de líquidos puros y de mezclas. Revisión de entalpías de exceso. Estimación de Entalpía y Entropía. Sustancias puras y mezclas. Estimación de propiedades físico-químicas y simulación de procesos. Selección del método para la predicción de propiedades del equilibrio liquido – vapor, entalpía, entropía y demás propiedades

según los componentes a tratar.
Ejercitación Práctica. Resolución de Problemas.

Tema 3: MODULOS PARA LA SIMULACIÓN DE EQUIPOS DE PROCESO
Sumadores, divisores, intercambiadores de calor sencillos. Simulación de evaporadores flash. Flash isotérmico. Flash adiabático. Otras especificaciones para el equipo flash. Cálculos de temperatura de burbuja y de rocío. Determinación de la fase de un sistema dado. Separadores líquido – liquido (L-L) y sistemas (L-L-V) líquido-líquido-vapor. Módulos Reactor (y sus variantes), Bombas, válvulas, Tanques, compresores, expansores, otros. Módulos para separación de mezclas multicomponentes. en cascadas contracorriente múltiple etapa. Modelos basados en etapas de equilibrio. Eficiencia de etapa. Módulos de simulación específicos y posibilidad de incorporación de módulos del usuario en los simuladores comerciales.

Ejercitación Práctica. Resolución de Problemas.

Tema 4: SIMULACION DE PROCESOS
Simulación de procesos. Destilación (Shortcut and rigorous distillation columns). Convergencia de módulos. Convergencia del proceso. Análisis de resultados de simulación.
Ejercitación Práctica. Resolución de Problemas.

Tema 5: OPTIMIZACIÓN
Introducción a la optimización de procesos. Procedimientos de optimización. Opciones de Optimización en DWSIM Análisis de sensibilidad. Optimizador multivariable. Operaciones Lógicas. Reciclo de masa. Reciclo de energía. Controlador y función objetivo. Especificación.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Práctico 1. Introducción a DWSIM
Práctico 2. Cálculo y estimación de propiedades termodinámicas
Práctico 3. Cálculo y convergencia de módulos de DWSIM (equipos)
Práctico 4. Simulación de procesos complejos. Destilación.
Práctico 5. Optimización de procesos.

Los trabajos prácticos se abordan desde la perspectiva del aprendizaje basado en problemas, se pretende que el estudiante construya su conocimiento sobre la base de problemas y situaciones de la vida real y que, además, lo haga con el mismo proceso de razonamiento que utilizará cuando sea profesional. En cada práctico se plantea un problema de donde se van desprendiendo preguntas a las que el estudiante debe responder, al finalizar el práctico el alumno debe entregar un informe presentando los resultados que será evaluado.

VIII - Regimen de Aprobación

A - METODOLOGÍA DE DICTADO DEL CURSO:
La metodología adoptada para el dictado de las clases es teórico - práctico. Los principales aspectos serán los siguientes:
- Se explicarán al comienzo de cada clase los conceptos esenciales de cada tema.
- Los alumnos tendrán total libertad para solicitar aclaraciones cuando las explicaciones no sean lo suficientemente claras.
- Los docentes mostrarán a los alumnos la solución de problemas modelo que den lugar a la aplicación de los conceptos introducidos en clase. Luego serán seleccionados otros problemas para resolución por parte de los alumnos de manera que posibiliten la ejercitación de los conceptos, y la resolución de los problemas que los incluyen.
- Se implementarán trabajos prácticos para los que deberán entregar un informe.

B - CONDICIONES PARA REGULARIZAR EL CURSO
Sólo podrán acceder a este régimen los alumnos que cumplan con las condiciones que estipula el régimen de correlatividades para cursar la asignatura y que se encuentren debidamente inscriptos en este curso.
- Condiciones para regularizar el curso:
1) Asistencia al 80% de las actividades presenciales y virtuales programadas.
2) Aprobación del 100% de las evaluaciones teórico-prácticas, con una calificación de al menos 70%.

Exámenes parciales: 2 exámenes parciales más un trabajo integrador.
Los alumnos tendrán opción a 2 (dos) recuperatorios por cada parcial (Ord. CS 32/14)

C – RÉGIMEN DE APROBACIÓN CON EXÁMEN FINAL
Accederán al examen final en condiciones de alumno regular los que sean reconocidos en tal situación en la asignatura por sección alumnos. El examen final podrá ser oral u escrito, y podrá comprender cualquier contenido del programa analítico de la materia.

D – RÉGIMEN DE PROMOCIÓN SIN EXAMEN FINAL
Sólo podrán acceder a este régimen los alumnos que cumplan con las condiciones requeridas para cursar y aprobar la asignatura que estipula el régimen de correlatividades vigentes en el plan de estudios de la carrera y se encuentren debidamente inscriptos en este curso.
Condiciones para promocionar la asignatura:
1) Asistencia al 80% de las actividades presenciales y virtuales programadas.
2) Aprobación del 100% de las evaluaciones teórico-prácticas, con una calificación de al menos 80 %. Estas evaluaciones son de carácter individual o grupal y poseen dos instancias de recuperación por evaluación (Ord. CS 32/14). La promoción es válida en tanto y en cuanto se alcance una calificación de al menos el 80% en cada evaluación parcial o en la primera instancia de recuperación de cada evaluación.
3) Aprobación de la evaluación final integradora, con calificación de al menos el 80%. Esta evaluación, de carácter individual o grupal, se realizará a través de la resolución de casos prácticos apoyándose en la lectura de artículos científicos, que luego expondrán.
Son requisitos indispensables haber cumplido con el porcentaje de asistencia estipulado y la aprobación de los trabajos prácticos. Una vez aprobadas todas instancias de evaluación (prácticas, teóricas y trabajo integrador), la nota final de la asignatura será el promedio de las calificaciones obtenidas en cada instancia.

E – RÉGIMEN DE APROBACIÓN PARA ESTUDIANTES LIBRES
Este curso no acepta la condición de LIBRE.

IX - Bibliografía Básica

[1] Husain A. Chemical Process Simulation. John Wiley & Sons 1 1986
[2] Himmelblau D. M. and Edgar T. F., Optimization of Chemical Processes, 2da edicion, Mc Graw Hill, Boston, ISBN: 0-07-039359-1 1 2001
[3] Smith R. Chemical Process Design and Integration. McGraw Hill 1 2005
[4] Franks R. G. E, Modeling and Simulation in Chemical Engineering. John Wiley & Sons
[5] Reklaitis G.V, et al. Engineering Optimization. Methods and Applications. John Wiley and Sons 1 2003
[6] Scenna N., et al. Modelado, simulación y optimización de procesos químicos. Edutec-UTN 1 2002
[7] Henao C. A. Simulación y Evaluación de Procesos Químicos. Universidad Pontificia Bolivariana. 1 2005
[8] Biegler L., I. Grossmann, A. Westerberg. Systematic methods of chemical process design. ISBN: 0134924223. 1 1997
[9] Flecther, R. Practical Methods of Optimization. Volume 1: Unconstrained Optimization. John Wiley & Sons, Ltd. New York. 1 1980
[10] Flecther, R. Practical Methods of Optimization. Volume 2: Constrained Optimization. John Wiley & Sons, Ltd. New York. 1 1981
[11] Rao, Singiresu S., Engineering Optimization: Theory and Practice. 3º Ed. John Wiley & Sons, Inc. New York. 1 1996
[12] Luyben W. L. Process Modeling, Simulation, And Control For Chemical Engineers. Second edition. McGraw Hill 1 1996
[13] Kyle B. G., Chemical and Process Thermodynamics, 3ra edición, Prentice Hall, New Jersey, ISBN: 0-13-1300 30 1 2001
[14] Biegler L. T., Grossmann I. E., Westerberg A. W. Systematic Methods of Chemical Process Design. Prentice Hall 1 1997
[15] Reid R., Prausnitz J., Poling B., The Properties of Gases and Liquids, Fourth Edition 1 1987
[16] Poling B., Prausnitz J., O' Connell J., The Properties of Gases and Liquids, Fourth Edition 1 2000
[17] Gmehling J., Kolbe B., Kleiber M., Rarey J., Chemical Thermodynamics for Process Simulation 1
[18] Process Modelling and Simulation in Chemical, Biochemical and Environmental Engineering, Ashok Kumar Verma, Taylor & Francis Group (2015).
[19] El material listado está disponible en Repositorios Digitales.

X - Bibliografia Complementaria

[1] Artículos publicados en las revistas científico-técnicas con acceso a través de la página en Internet del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva (MINCYT): “Biblioteca Electrónica de Ciencia y Tecnología”.

XI - Resumen de Objetivos

Se pretende que el alumno sea capaz de simular y analizar un proceso que incluya las operaciones de uso convencional en Ingeniería Química. Para el logro de dicho objetivo se propone brindar una formación orientada a desarrollar capacidades que permitan el manejo de estrategias de síntesis, modelado y simulación de procesos que den solución a situaciones reales.

Resumen de resultados de aprendizaje:
• Interpretar procesos químicos (o alimenticios)
• Implementar software de simulación de procesos
• Seleccionar paquetes termodinámicos apropiados
• Diseñar una estrategia adecuada para resolución del módulo o equipo
• Analizar un proceso con operaciones unitarias y/o reacción química
• Evaluar la posibilidad de modificación del proceso
• Establecer ventanas operativas adecuadas
• Informar los resultados obtenidos

XII - Resumen del Programa

Tema 1: Ingeniería de procesos y simulación de procesos químicos
Tema 2. Revisión de métodos para la estimación de propiedades termodinámicas y físico-químicas.
Tema 3: Módulos para la simulación de equipos de proceso
Tema 4: Simulación de procesos
Tema 5: Optimización

XIII - Imprevistos

Cuando por razones de fuerza mayor no pudiera dictarse la teoría de las unidades temáticas se entregará material (apuntes o bibliografía). Las prácticas podrán autoadministrarse a partir de las guías correspondientes. En ambos casos existirá la posibilidad de supervisión o consulta a los docentes de la asignatura.

XIV - Otros

Aprendizajes Previos:
· Interpretar la fenomenología involucrada en equipos de operaciones unitarias I, II, III, reactores químicos.
· Calcular propiedades termodinámicas de fluidos en estado ideal y real, para componentes puros y mezclas a través de ecuaciones empíricas apropiadas: ecuaciones cúbicas de estado analíticas y no - analíticas, modelos de coeficientes de actividad, etc.
· Interpretar conceptos de fugacidad y actividad.
· Interpretar enfoques termodinámicos de propiedades residuales y propiedades de exceso.
· Comprender los conceptos de entalpía, entropía, energía libre de Gibbs, energía interna.
· Conjeturar sobre influencia de las variables y los parámetros de diseño en el comportamiento de un sistema
· Leer e interpretar tablas y gráficos
· Leer e interpretar textos técnicos

Detalles de horas de la Intensidad de la formación práctica.
Cantidad de horas de Teoría: 3hs
Cantidad de horas de Práctico Aula: 1hs (Resolución de prácticos en carpeta)
Cantidad de horas de Práctico de Aula con software específico: 1.0hs (Resolución de prácticos en PC con software específico propio de la disciplina de la asignatura)
Cantidad de horas de Formación Experimental: --hs (Laboratorios, Salidas a campo, etc.)
Cantidad de horas de Resolución Problemas Ingeniería con utilización de software específico: 1.5hs (Resolución de Problemas de ingeniería con utilización de software específico propio de la disciplina de la asignatura)
Cantidad de horas de Resolución Problemas Ingeniería sin utilización de software específico: --hs (Resolución de Problemas

de ingeniería SIN utilización de software específico)
Cantidad de horas de Diseño o Proyecto de Ingeniería con utilización de software específico: 0.5hs (Horas dedicadas a diseño o proyecto con utilización de software específico propio de la disciplina de la asignatura)
Cantidad de horas de Diseño o Proyecto de Ingeniería sin utilización de software específico: --hs (Horas dedicadas a diseño o proyecto SIN utilización de software específico)

Aportes del curso al perfil de egreso:
1.1. Identificar, formular y resolver problemas. (Nivel 1)
1.2. Concebir, diseñar, calcular, analizar y desarrollar proyectos. (Nivel 2)
2.1. Utilizar y adoptar de manera efectiva las técnicas, instrumentos y herramientas de aplicación. (Nivel 1)
2.4. Aplicar conocimientos de las ciencias básicas de la ingeniería y de las tecnologías básicas. (Nivel 2)
2.6. Evaluar críticamente ordenes de magnitud y significación de resultados numéricos. (Nivel 1)
3.1. Desempeñarse de manera efectiva en equipos de trabajo multidisciplinarios. (Nivel 1)
3.2. Comunicarse con efectividad en forma escrita, oral y gráfica. (Nivel 1)
3.3. Manejar el idioma inglés con suficiencia para la comunicación técnica. (Nivel 2)
3.4. Actuar con ética, responsabilidad profesional y compromiso social, considerando el impacto económico, social y ambiental de su actividad en el contexto local y global. (Nivel2)
3.5. Aprender en forma continua y autónoma. (Nivel 1)
3.6. Actuar con espíritu emprendedor y enfrentar la exigencia y responsabilidad propia del liderazgo. (Nivel 1)