



FACULTAD DE INGENIERÍA UNIVERSIDAD NACIONAL DE JUJUY

1. PROGRAMA ANALÍTICO

ASIGNATURA			PERIODO LECTIVO
Simulación y Optimización			2024
CARRERA		CÁTEDRA	
INGENIERÍA QUÍMICA		Ingeniería de Procesos	
PLAN DE ESTUDIO	ÁREA	CURSO	CARÁCTER
2022	Ing. Qca.	5° año	Teórico-Práctico
RÉGIMEN DE DICTADO	CARGA HORARIA		ACREDITACIÓN
Cuatrimestral	6 hs/semana	90 hs totales	Promoción con examen final
OBJETIVOS GENERALES			
Lograr que los estudiantes alcancen las siguientes competencias:			
<ul style="list-style-type: none">• Modelar, simular y optimizar equipos de plantas químicas utilizando un entorno de simulación orientado a ecuaciones.• Simular y optimizar plantas químicas utilizando simuladores comerciales modulares secuenciales.			

CONTENIDOS
<p>Unidad I: Introducción general Sistemas. Frontera de sistemas. Entidades. Atributos. Entradas. Salidas. Proceso. Finalidad. Diseño, supervisión y operación. Objetivos del estudio. Aspectos relevantes. Modelos. Modelado. Simulación. Tipos de modelos: físicos y simbólicos. Solución analítica vs. solución numérica. Estructura de un simulador. Ventajas y desventajas de la simulación. Simulación y optimización. Aplicaciones. Etapas de una simulación: formulación del problema, definición del sistema, formulación del modelo, recolección de datos, implementación del modelo, verificación, validación, diseño de experimentos, experimentación, interpretación, implementación y documentación. Un caso de estudio.</p>
<p>Unidad II: Teoría de modelos Definición de variables. Clasificación de variables: de entrada, de salida, parámetros, internas, de estado. Utilidad de la clasificación de variables en el diseño, adquisición, control y supervisión de un sistema. Definición de estado de un sistema. Clasificación de estados: estacionario, dinámico, estable e inestable. Tipos de plantas químicas. Operación de un equipo. Tipos de sistemas: deterministas, estocásticos, continuos, discretos, con parámetros concentrados y con parámetros distribuidos. Modos de simulación: modo análisis o desempeño, modo diseño y modo control. Emulación de modos. Tipos de modelos: empíricos y con base teórica. Identificación de parámetros. Interpolación y regresión. Rango de validez de los modelos. Planilla de cálculo: Excel, orden de precedencia de los operadores, referencias absolutas y relativas, gráficos. línea de tendencia, errores absolutos y relativos, y cifras significativas.</p>
<p>Unidad III: Fundamentos del modelado Etapas del desarrollo de un modelo: planteamiento de objetivos, modelo conceptual, modelo</p>



matemático, estimación de parámetros, simplificación, consistencia matemática, resolución del modelo, verificación, validación y perfeccionamiento. Grados de libertad: sistemas determinados, subdeterminados, sobredeterminados. Alternativas para anular los grados de libertad. Sistema de ecuaciones lineales. Modelo de espacio de estados. Modelos con parámetros concentrados y con parámetros distribuidos. Balances estacionarios y dinámicos. Variables de estado. Ecuaciones constitutivas. Ecuación de continuidad. Formulación de balances: propiedad extensiva, volumen de control macroscópico y microscópico. Balance global de materia para sistemas con parámetros concentrados y con parámetros distribuidos. Balance de componentes para sistemas con parámetros concentrados y con parámetros distribuidos. Cantidad de balances de componentes que pueden plantearse. Demostración de la dependencia lineal del balance global respecto a los balances de componentes. Variación de la propiedad intensiva: la concentración. Medidas de concentración: densidad, concentración masa de componentes, fracción másica, densidad molar, concentración molar, fracción molar y peso molecular medio. Conversión de fracciones molares a fracciones másicas, y viceversa. Energía total, energía mecánica y energía térmica. Balance de energía en función de entalpías y en función de temperaturas para sistemas con parámetros concentrados y con parámetros distribuidos. Estado de referencia. Calor de reacción. Balance de cantidad de movimiento: un bloque, una tubería y un cohete. Balance por fases: un evaporador. Estado pseudoestacionario: tanque con serpentín. Ecuaciones constitutivas: ecuaciones de estado, ecuaciones de equilibrio, ecuaciones de transporte, ecuaciones de cinética química, ecuaciones características de equipos, correlaciones fisicoquímicas, reglas de mezcla. Válvulas de control. Tipos de válvulas: lineales, igual porcentaje y apertura rápida. Modo de fallas de válvulas: falla cerrada, falla abierta. Rango de operación. Controladores PID. Modo regulador y servo. Acción de control: directa, reversa. Acción de cada efecto. *Reset* manual. *Windup*.

Unidad IV: Simulación de equipos

Ley de enfriamiento de Newton. Determinación experimental de la constante de enfriamiento. Simulación del enfriamiento de un objeto: desarrollo del modelo de espacio de estado, determinación experimental del coeficiente global de transferencia de energía, resolución empleando Euler en Excel. Estrategia de simulación. Sistema de primer orden. Enfoques para resolución de modelos: ecuaciones, diagramas y programación. Enfoque orientado a ecuaciones: Berkeley Madonna, E-ZSolve, GProms, EMSO y Open Modelica. Enfoque orientado a diagramas: Simulink, ViSim y Xcos. Enfoque orientado a programación: Fortran, C, Pascal, Julia, Python, MathCad, SMath, Matlab, Octave y Scilab. Berkeley Madonna: comentarios, bloque de inicialización, bloque de ecuaciones diferenciales, bloque de ecuaciones algebraicas, bloque de datos, realización de gráficos, exportación de resultados a Excel. MathCad: bloque de inicialización, bloque de ecuaciones diferenciales, bloque de ecuaciones algebraicas, bloque de datos, resolución con Euler, realización de gráficos, exportación de resultados a Excel. Simulación de un tanque con descarga gravitatoria: estado estacionario, estado dinámico y determinación del coeficiente de tamaño de una válvula. Simulación de un tanque calefaccionado con descarga gravitatoria: determinación del coeficiente global de transferencia de energía. Simulación de un controlador PI de nivel: selección de válvula, selección del tipo de acción y *reset* manual, *offset* variable, sintonía del controlador, saturación y *windup*. Simulación de un reactor refrigerado: puesta en marcha del reactor y parada del reactor. Estudio de estabilidad del reactor. *Runaway*. Instalación de un controlador PI de temperatura: selección de válvula, selección del tipo de acción y *reset* manual, sintonía del controlador, saturación y *windup*.



Unidad V: Simulación de plantas

Definición de planta y sectores. Modelado de plantas: modular secuencial, modular simultáneo, orientado a ecuaciones o global. Comparación y uso de los enfoques. Enfoques para la resolución de modelos: ecuaciones, diagramas y programación. Estructura de un simulador de plantas: control, interfaz, topología, módulos, fisicoquímica y métodos numéricos. Paquetes fisicoquímicos. Modelos fisicoquímicos. Rango de aplicación. El título vapor de una corriente. El punto de rocío y de burbuja, temperaturas y presiones características de esos puntos. Cálculo flash. Reacciones. Síntesis de procesos: estructura de entrada-salida, BDF y PFD. Niveles de modelado. Simuladores: Chemcad, Apen plus, Apen HYSYS, UNISIM, ProSimPlus, COCO y DWSIM. Simulaciones: proceso de combustión, ciclo Rankine, reactor tanque agitado continuo y una torre de destilación.

Unidad VI: Introducción a la optimización

Definición de optimización. Campos de aplicación. Toma de decisiones. Definición del problema. Modelo de optimización. Criterios de optimización: económicos, técnicos, de calidad, de seguridad, ambientales. Función objetivo. Criterios: económico, técnico, de seguridad y ambiental. Problema multicriterio: múltiples funciones objetivo, resolución secuencial, combinación ponderada de funciones objetivo y conversión de funciones objetivo en restricciones. Restricciones: dadas por la naturaleza y criterios ingenieriles. Efectos de las restricciones. Grados de libertad. Región factible. Minimización de la longitud de una viga. Minimización del espesor de aislante de una tubería. Formulación matemática. Programación matemática. Modelo estándar y de estado. Eliminación de variables. Optimización de trayectorias. Curva braquistócrona. Perfil óptimo de temperatura en un reactor tubular. Evolución óptima de la temperatura en un reactor batch. Clasificación de modelos de programación matemática: LP, NLP, ILP, INLP, MILP, MINLP. Planteo y solución de problemas con Solver de Excel, MathCad, y LINGO.

Unidad VII: Programación no lineal

Oportunidad para optimizar. *Trade-off*. Valores extremos. Procedimiento de optimización: definición del sistema, selección del criterio, formulación de la función objetivo, planteamiento de las restricciones, selección de un método numérico adecuado, verificación y análisis de sensibilidad. Fábrica de contenedores. Extracción por solvente. Reconciliación de lecturas: modelo general, redundancia de sensores, redundancia topológica, condiciones necesarias. Programación no lineal. Óptimos globales y locales. *Simulated annealing*. Algoritmo genético. Regresión lineal. Regresión no lineal. Diseño factorial. Función objetivo: VAN, TIR, beneficios y costos. Simplificación de la función objetivo.

Unidad VIII: Programación lineal

Planteo del problema. Solución gráfica. Principios del método Simplex. Casos problemáticos: región factible no acotada, región factible inexistente, solución degenerada. Esencia del método simplex. Problemas especiales de programación lineal: producción, mezcla, transporte (casos según la oferta y la demanda), asignación (casos según la oferta y la demanda). Programación entera. Costo fijo. LINGO: planteo de modelos y resolución. Definiciones: costo reducido, *slack* o *surplus*, precio dual, rango. Estudio de sensibilidad.



2. BIBLIOGRAFÍA

Título	Autores	Editorial	Año de edición	Ejemplares disponibles
Análisis y Simulación de Procesos	Himmelblau D. M, Bischoff K. B.	Reverté	1976	2
Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes	Turton R., Bailie R. C., Whiting W. B., Shaeiwitz J. A.	Prentice Hall PTR, 2° edición	2002	2
Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes	Turton R., Bailie R. C., Whiting W. B., Shaeiwitz J. A.	Prentice Hall PTR, 1° edición	1998	1
Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers	Rice G. R., Do D. D.	John Wiley	1995	1
Chemical Engineering Dynamics. Modelling with PC Simulation	Ingham J., Dunn I. J., Heinzle E. H., Prenosil J. E.	VCH, Weinheim.	1994	1
Chemical Process Simulation	Husain A.	John Wiley & Sons	1986	1
Introduction to MathCAD for Scientists and Engineers	Wieder S.	McGraw Hill	1992	1
Métodos numéricos aplicados con software	Nakamura S.	Prentice Hall	1992	5
Modelado, simulación y optimización de procesos químicos.	Scenna N. J. et al.	UTN	1999	2
Optimización dinámica	Cerdá E.	Prentice Hall	2001	2
Optimization: Theory and Practice	Beveridge G. S. G.	McGraw-Hill Book Company	1970	1
Process Design Principles	Seider W. D., Seader J. D., Lewin D. R.	John Wiley & Sons	1999	1
Process dynamics Modeling, analysis, and simulation.	Bequette W. B.	New Jersey Prentice Hall	1998	1
Process plant simulation.	Babu B.V.	New Delhi Oxford university press	2004	1 - Contiene 1 CD
Simulación dinámica de tiempo real Pauterizador HTST.	Tarifa E. E. y otros	Jujuy Universidad Nacional	1998	1
Systematic Methods of Chemical Process Design	Bigler L. T., Grossmann I. E., Westerberg A. W.	Prentice Hall	1997	2



Técnicas de simulación por computadora para el análisis de flowsheets.	Correa C. A.	Tucumán Universidad Nacional-Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología	1986	2
--	--------------	---	------	---

San Salvador de Jujuy, 7 de marzo de 2024.-

ENRIQUE EDUARDO TARIFA
SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN
PERIODO LECTIVO 2024