

FACULTAD: INGENIERÍA		ESCUELA: INGENIERÍA QUÍMICA		DEPARTAMENTO: DISEÑO Y CONTROL DE PROCESO	
ASIGNATURA: Simulación de Procesos			CODIGO: 5454		PAG: 1.DE: 5
REQUISITOS: Transferencia de Masa (5304) y Cinética (5313)				UNIDADES: 4	
HORAS					
TEORIA	PRACTICA	TRABAJO SUPERV	LABORATORIO	SEMINARIO	
4					
<p>PROPOSITO:</p> <p>La simulación de procesos físico-químicos es una poderosa herramienta que permite a los Ingenieros Químicos predecir el comportamiento de un proceso usando relaciones básicas de ingeniería tales como los balances de masa y energía, el equilibrio químico y de fases y las relaciones cinéticas. Los simuladores comerciales apoyan en este propósito ya que para datos termodinámicos dados, condiciones de operación realistas y modelos matemáticos rigurosos se puede simular el comportamiento de una planta de procesos. Este curso pretende desarrollar criterios que permitan al participante determinar el alcance y las limitaciones de la simulación de procesos en estado estacionario con un simulador de procesos comercial.</p> <p>OBJETIVOS GENERALES:</p> <p>Al final del curso el participante estará en la capacidad de:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Simular procesos con y sin reacción química, independientemente de la herramienta de simulación que se utilice. • Realizar cálculos típicos y frecuentes del ingeniero químico con la ayuda de simuladores de procesos. • Decidir la mejor configuración de modelos de simulación en diagramas de simulación para obtener respuestas asertivas. • Seleccionar los métodos termodinámicos más adecuados para procesos con cálculos de equilibrio de fases con mezclas ideales, altamente polares e hidrocarburos. • Interpretar los resultados de la simulación de procesos y estimar el grado de incertidumbre de los resultados. • Manejar técnicas básicas para simulación de procesos físico-químicos. 					
FECHA: 07/03/2005	Nº EMISION:	PERIODO VIGENTE: 01/2004	ULTIMO PERIODO 2015	PROFESOR: R. Guillen	
JEFE DE DPTO. TRINO ROMERO	FIRMA JEFE DEPT:	APROB.C.ESC. 29 MAR 2004	APROB.C.FAC 29 MAR 2005.	DIRECTOR: JOSÉ SORRENTINO	

EVALUACION:

La evaluación de esta asignatura se realizará por medio de trabajos prácticos individuales utilizando un simulador de procesos comercial y por exposiciones en parejas de temas técnicos asociados a la simulación de procesos. De esta manera se brinda, de forma contextual, una perspectiva realista de los beneficios y limitaciones de uso del simulador de procesos en situaciones que el ingeniero de procesos enfrenta en su día a día. Para efectos de la calificación de las evaluaciones, estas actividades tienen la siguiente ponderación:

Trabajos prácticos Individuales 80%

Exposiciones 20%

Trabajos Prácticos Individuales: Para cada tema a cubrir del programa, el estudiante realizará un trabajo práctico con ayuda del simulador comercial. Este trabajo será evaluado mediante un informe que debe cubrir los siguientes aspectos:

- Descripción del problema.
- Descripción del modelo de cálculo/simulación.
- Justificación del modelo termodinámico y de cálculo de propiedades de transporte utilizado si aplica o es relevante para la obtención de los resultados.
- Tabla de resultados en las unidades especificadas por el problema.
- Discusión de resultados.
- Conclusiones y recomendaciones.

Cada informe será evaluado sobre la base de cien (100) puntos, con puntajes asignados según calificaciones asociadas al grado de Deficiencia, Suficiencia y Excelencia. Los 10 informes tendrán igual ponderación en la calificación parcial de los informes, es decir, que el estudiante podrá acumular un máximo de mil (1000) puntos. Los valores a ser considerados en estos informes y sus ponderaciones son:

Actividad a Evaluar	Ponderación	Deficiente	Satisfactorio	Excelente
Confiabilidad de los resultados	25%	10	20	25
Uso acertado y originalidad de los modelos de simulación	25%	10	20	25
Uso acertado de los modelos termodinámicos y de propiedades de transporte.	5%	1	3	5
Calidad de la discusión técnica del informe.	30%	10	20	30
Puntualidad	5%	0	5	
Ortografía y redacción	5%	0	3	5
Presentación	5%	1	3	5

Exposiciones en parejas: Serán asignadas exposiciones cortas en parejas con el fin de brindarle al estudiante una perspectiva más amplia de las aplicaciones, beneficios y tendencias de la simulación de procesos.. Para desarrollar estos temas el estudiante deberá hacer investigaciones bibliográficas, investigaciones vía Internet, lectura de los manuales de los programas, etc.

Las exposiciones tendrán una duración aproximada de 15 a 25 minutos. Los ocho (8) temas a ser sorteados entre las parejas de estudiantes serán:

- El estándar de simuladores comerciales para las operaciones unitarias y métodos termodinámicos CAPE-OPEN.
- Sistemas de entrenamiento de Operadores, de optimización y gerencia en línea.
- Termodinámica de sistemas altamente no ideales.
- Termodinámica de gases e hidrocarburos.
- Inclusión de sustancias creadas por el usuario en el simulador.
- Simuladores de terceros que se integran en los simuladores comerciales.
- Inclusión en el simulador comercial de operaciones unitarias y programas desarrollados por el usuario.
- Tendencias de las tecnologías de computación recientes a ser utilizadas en combinación con la simulación de procesos clásica: química computacional, redes neurales, etc.

Cada exposición será evaluada sobre la base de 100 puntos, con puntajes asignados según calificaciones asociadas al grado de Deficiencia, Suficiencia y Excelencia. Los criterios a ser evaluados en estas exposiciones, sus ponderaciones y tabla de evaluación de muestran a continuación.

Actividad a Evaluar	Ponderación	Deficiente	Satisfactorio	Excelente
Alcance de la investigación realizada	40%	15	35	40
Coherencia y claridad del discurso.	30%	10	20	30
Promueve y Genera la participación del público.	20%	10	15	20
Calidad del material de apoyo/recursos.	10%	5	8	10

CONTENIDO:

1. Introducción a la Simulación de Procesos

- Usos del simulador en la industria de procesos moderna.
- Usos potenciales del simulador como herramienta de optimización en línea, gerencia en línea de procesos químicos, entrenamiento de operadores, etc.
- Alcances de los estándares CAPE-OPEN y OPC.
- Beneficios de la simulación dinámica

2. El Simulador de Procesos Comercial como una calculadora

- Uso de la base datos de sustancias químicas pura para acceder a datos de propiedades físicas y de transporte de sustancias químicas puras.
- Procedimiento de cálculo de un simulador de procesos secuencial-modular.
- Introducción a la selección de métodos de convergencia utilizados por el simulador.
- Uso de las herramientas de cálculo líquido-vapor para determinar puntos de burbuja y de rocío, hacer diagrama de fases, etc

3. Selección de Modelos Termodinámicos

- Criterios de selección para hidrocarburos y sustancias no ideales.
- Los modelos SRK y Peng-Robinson.
- Métodos UNIQUAC, NTRL, UNIFAC.
- Métodos para otros sistemas únicos (aminas, metanol, etc).

4. Uso del Simulador de Procesos Comercial en el Diseño y Evaluación de Procesos

- Interpretación del cálculo en modo de diseño y evaluación.
- Métodos de monitoreo y evaluación rápida de intercambiadores de calor y columnas de destilación y absorción.
- Herramientas de dimensionamiento y evaluación de columnas de destilación.

5. Aplicaciones de las Operaciones Unitarias Ficticias

- Estudio de Casos o Análisis de sensibilidad.
- Uso de los Manipuladores de Variables.

6. Modelado de Crudos

- Curvas de destilación.
- Selección del número de pseudo-componentes.
- Alcances y limitaciones del uso de pseudos-componentes.

7. Destilación Atmosférica y al vacío

- Introducción a la destilación atmosférica y al vacío.
- Planificación de las corridas de pruebas o test-runs.
- Criterios para la conversión a etapas ideales.
- Técnicas de convergencia.

8. Introducción al Modelado de Reactores

- Cálculos de evaluación y diseño.
- Tipos de modelos de reactores.

9. Modelado de sistemas no ideales

- Uso de la base de datos de parámetros de interacción binaria
- Regresión de parámetros de integración binaria a partir de datos de equilibrio líquido-vapor.

REQUISITOS:

- 1 Formales: Transferencia de masa (5304)
- 2 Académicos: El estudiante debe conocer y manejar los principios básicos de fenómenos de transporte, operaciones unitarias, termodinámica del equilibrio y balances de masa y energía

HORAS DE CONTACTO:

La materia tiene cuatro (4) horas semanales teóricas lo cual implica un mínimo de 4 horas semanales de estudio y preparación de la materia por parte del estudiante.

BIBLIOGRAFÍA

- SEIDER, W.D; SEADER J.D; Lewin D. R. "*Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation*". John Wiley & Sons; 1st edition. August 6, 1998. ISBN: 0471243124
- KAES, Gerald L.. "*Refinery Process Modeling*". Elliott & Fitzpatrick. March 1, 2000. ISBN: 0967927404
- WALAS, Stanley. "*Phase Equilibria in Chemical Engineering*". Butterworth-Heinemann; New Ed edition. January, 1985. ISBN: 0750693134