



MINISTERIO DE EDUCACIÓN
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN JUAN



INSTITUTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



FACULTAD DE INGENIERÍA

1939 - 2014

Programas

- DOCTORADO EN INGENIERÍA QUÍMICA: Mención Procesos Limpios
- MAESTRÍA EN TECNOLOGÍAS AMBIENTALES

Curso: MODELADO MATEMÁTICO Y SIMULACION

PROFESOR RESPONSABLE:	Dr. Mg. Ing. Rosa Ana Rodríguez, DNI 20505116
PROFESORES:	Dr. Ing. Marcelo Echegaray, DNI 20943694 Dra. Ing. Anabel Fernandez, DNI 35188943 Dra. Ing. Daniela Zalazar, DNI 32689583 Dr. Ing. Gustavo Scaglia, DNI 22009757
COLABORADORA:	Ing. Yanina Baldán, DNI 34917026

Segundo semestre de 2022



MINISTERIO DE EDUCACIÓN
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN JUAN



INSTITUTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



FACULTAD DE INGENIERÍA

1939 - 2014

Programas de: Doctorado en Ingeniería Química: Mención Procesos Limpios

Maestría en Tecnologías Ambientales

Curso: Modelado Matemático y Simulación

Unidad Ejecutora: Instituto de Ingeniería Química

Tipo de asignatura y Destinatarios:

- Curso Básico Obligatorio para Alumnos inscriptos en el Doctorado en Ingeniería Química: Mención Procesos Limpios
- Curso Optativo – Área Diseño para Alumnos inscriptos en la Maestría en Tecnologías Ambientales
- Curso de Perfeccionamiento para Profesionales

Período de dictado: Desde el 4 de noviembre al 9 de diciembre de 2022

Horario de clases: días viernes de 15 a 21 hs y sábado de 8:00 a 14:00 hs.

Horas Totales: 150

Horas Presenciales: 70

Lugar de dictado: Aula de Posgrado Instituto de Ingeniería Química

Cupo Máximo: 15 alumnos

Evaluación: La evaluación global del rendimiento del alumno y de las competencias adquiridas en el curso considerará por una parte los exámenes parciales que se realicen y por otra, el trabajo personal efectuado por el alumno sobre una temática que será entregada al comienzo del curso y deberá ser resuelta durante el transcurso, realizando su exposición al final del mismo.



PROGRAMA ANALÍTICO

UNIDAD I

Sistemas. Definición. Diferentes variables que se pueden encontrar en un sistema. Características. Modelo matemático. Definición. Clasificación: según su grado de determinación (determinísticos o estocásticos); según su comportamiento en el tiempo; según su linealidad; según su descripción matemática; según su uso (de operación, cálculo, planta o proceso, planta-predictivo, con autoadaptación, optimizador). Ecuaciones que resultan de los diferentes modelos. Modos de operación de los modelos: Estimación, diseño y optimización, control, simulación y simulación inversa. Condiciones de un modelo. Construcción de un modelo matemático de sistemas físicos.

UNIDAD II

Utilidad de Modelos termodinámicos. Principios de la termodinámica. Modelos de predicción de diferentes propiedades termodinámicas. Modelos de predicción de factor de compresibilidad de gases y mezclas. Ajuste de parámetros de modelos de predicción de coeficientes de actividad en equilibrio líquido-vapor. Análisis termodinámico de los procesos. Cálculo del trabajo ideal. Trabajo perdido. Análisis termodinámico de procesos de flujo en estado uniforme. Aplicaciones. Mezclas de gas y vapor. Definiciones de aire seco y aire húmedo. Humedad absoluta y relativa. Temperatura de rocío. Modelos termodinámicos de procesos psicrométricos. Termoquímica, combustión, gasificación y pirólisis. Modelos termodinámicos de procesos termoquímicos, análisis exergo-ambiental.

UNIDAD III

Modelos basados en fenómenos de transporte. Transporte de cantidad de movimiento: fluidos newtonianos y no-newtonianos, diseño por balances microscópicos, teoría de capa límite, flujo laminar y turbulento, diseño por similitud, diseño por balances macroscópicos, aplicaciones. Transporte de calor: conducción, convección libre y forzada, radiación, aplicaciones. Transporte de materia: difusión en estado sólido, ley de Fick, transporte de materia en fluidos, reacción química y transporte de materia. Analogías entre el transporte de cantidad de movimiento, materia y energía.

UNIDAD IV

Problemas de optimización. Problemas de control y regulación. Problemas de diseño. Modelo matemático para un proceso dinámico elemental. Procesos dinámicos con parámetros concentrados. Procesos dinámicos con parámetros distribuidos. Desarrollo de un modelo matemático: Porque se necesita un modelo matemático para el control de procesos químicos. Variables y ecuaciones de estado para un proceso químico. Modelos entrada - salida. Objetivos del modelado para el control de procesos.

UNIDAD V

Análisis y simulación de procesos. Definición. Soluciones generales de modelos. Linealización de modelos no lineales. Tipos de programas de simulación, Estructura de un simulador, componentes. Balances en diagrama de flujo. Preprocesamiento, etapas. Módulos básicos de Simulación. Uso de simuladores. Ventajas y desventajas. Aplicaciones.

UNIDAD VI



Modelos empíricos. Obtención del modelo. Formas típicas. Selección de una relación funcional. La función respuesta. Estimación de parámetros. Identificación de modelos (bondad). Desarrollo de modelos matemáticos a partir del diseño experimental. Diseño aleatorizado por bloques completos. Diseño factorial. Estrategias para una experimentación eficiente (métodos de superficies, análisis canónico, estrategia evolutiva, diseños simplex, optimización por búsqueda directa, diseños secuenciales).

UNIDAD VII

Modelado de procesos biotecnológicos: identificación del sistema biológico. Estequiometría y cinética de reacción. Modelado del proceso de deshidratación: cinética de desprendimiento de humedad. Modelado del proceso de extracción de sustancias de alto valor agregado: cinética de reacción.

UNIDAD VIII

Análisis ambiental. Energía e impactos ambientales. Modelos energéticos. Modelado matemático de la dispersión de contaminantes. Objetivos y aplicación de modelos de simulación meteorológicos. Diferentes conceptos de modelado. Modelado de la dinámica de fluidos y turbulencia. Modelos de diagnóstico y pronóstico. Modelos de dispersión. Modelos de Lagrange. Modelos K. Modelos de caja. Modelos Gauss. Consideración de cambios químicos en los modelos de dispersión. Modelos y mediciones. Modelos aplicados a la contaminación de aire, agua y suelos. Modelos de múltiples medios.

BIBLIOGRAFÍA

1. Análisis y simulación de procesos, Himmelblau, Bishoff, Ed. Reverté, 2010.
2. Process Systems Analysis and control. Coughanowr, LeBlanc, McGraw-Hill Book Company, 2008.
3. Process Modeling, Simulation and Control for Chem. Eng. Luyben, McGraw-Hill Book Company, 1973.
4. Statistical Analysis of Network Data: Methods and Models. Kolaczyk. Springer. 2009.
5. Computational Transport Phenomena. Numerical Methods for the Solution of Transport Phenomena. Schiesser, Silebi, Cambridge Univ. Press, 1997.
6. Computational Methods in Chemical Engineering with Maple. White, Subramanian. 2010. Springer.
7. Applied Mathematical Methods in Chemical Engineering. Loney 2° Ed., CRC Press. 2010.
8. Computational Applications in Chemistry. An Introduction for PC users. Ebert, Ederer, Isenhour, Weinheim, Germany, 1989.
9. Analysis of Transport Phenomena (Topics in Chem. Eng.) 2° Ed. Deen. Oxford University Press, 2011.
10. Numerical Methods for Chemical Engineering: Applications in MATLAB. Beers, 1° Ed. Cambridge University Press. 2006.
11. Biotechnology for the Environment: Wastewater Treatment and Modeling, Waste Gas Handling (Focus on Biotechnology). Agathos, Reineke. 1° Ed. Springer. 2010.
12. Mecánica de fluidos. White Mc. Graw Hill. 2010.
13. Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. Anderson, Tannehil, Pletcher, Hemisphere Pub. Corporation, 1986.
14. Transferencia de Calor y Mecánica de Fluidos Computacional, Maliska, ABDR, 1995.
15. Computational Techniques for Fluid Dynamics, Fletcher, Springer-Verlag, 1991.
16. Basic Heat and Mass Transfer. Mills, Prentice Hall, 1999.



MINISTERIO DE EDUCACIÓN
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN JUAN



INSTITUTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



FACULTAD DE INGENIERÍA

1939 - 2014

17. Fundamentos de termodinámica técnica. Morán, Shapiro.. 2° Ed., Reverté, 2005.
18. Termodinámica Química y de los Procesos Irreversibles 2 Ed. Vazquez, Criado-Sancho. Pearson Addison-Wesley, 2010.
19. An Introduction to Applied Statistical Thermodynamics. Sandler. Wiley. 1° Ed., 2010.
20. Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Eng. Ramkrishna. Academic Press, 2010.
21. Biegler, L.; Grossmann, I.; Westerberg, A.; Systematic Methods of Chemical Process Design; Prentice Hall PTR, 1997.
22. Seider, W. D.; Seader, J.D.; Lewin, D.R.; Process Design Principles, John Wiley & Sons, Inc. 1999.
23. Cerro, R.L; Arri, L.E.; Chiovetta, M.G.; Pérez, G.; Curso Latinoamericano de Diseño de Procesos por Computadora. INTEC-Santa Fé, Argentina, 1978.
24. Scenna, Nicolás; Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos, UTN, 1999.

