



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN  
PLAN DE ESTUDIOS DE LA LICENCIATURA  
EN INGENIERÍA QUÍMICA**



<b>PROGRAMA DE LA ASIGNATURA DE:</b>				
<b>SIMULACIÓN DE PROCESOS</b>				
<b>IDENTIFICACIÓN DE LA ASIGNATURA</b>				
<b>MODALIDAD:</b>	Curso			
<b>TIPO DE ASIGNATURA:</b>	Teórico-Práctica			
<b>SEMESTRE EN QUE SE IMPARTE:</b>	Octavo			
<b>CARÁCTER DE LA ASIGNATURA:</b>	Obligatoria			
<b>NÚMERO DE CRÉDITOS:</b>	6			
<b>HORAS A LA SEMANA:</b>	4	<b>Teóricas:</b> 2	<b>Prácticas:</b> 2	<b>Semanas de clase:</b> 16
				<b>TOTAL DE HORAS:</b> 64
<b>SERIACIÓN:</b>	Si ( <input checked="" type="checkbox"/> )	No ( <input type="checkbox"/> )	Obligatoria ( <input checked="" type="checkbox"/> )	Indicativa ( <input type="checkbox"/> )
<b>SERIACIÓN ANTECEDENTE:</b>	Seriación por bloques. Haber aprobado por lo menos el 80% de las asignaturas de los 6 primeros semestres			
<b>SERIACIÓN SUBSECUENTE:</b>	Ninguna			

**OBJETIVO GENERAL**

- Utilizar las herramientas matemáticas y computacionales necesarias para simular el comportamiento de plantas químicas operando en estado estacionario.
- Modelar matemáticamente procesos trabajando en estado no estacionario, poniendo especial énfasis en aquellos controlados por dispositivos que siguen los algoritmos típicos para control por retroalimentación, con el fin de utilizar los modelos matemáticos y proponer cambios en los procesos y en sus controladores para mejorar su funcionamiento y desempeño cuando fuera necesario.

**ÍNDICE TEMÁTICO**

<b>UNIDAD</b>	<b>TEMAS</b>	<b>Horas Teóricas</b>	<b>Horas prácticas</b>
1	Introducción	2	0
2	Modelado y Análisis de Sistemas a partir de Principios Básicos	4	6
3	Estrategia Modular Secuencial	6	6
4	Estrategia Modular Simultánea	4	2
5	Estrategia Basada en Ecuaciones	2	4
6	Utilización de un Simulador de Procesos para Procesos en Estado Estacionario	8	8
7	Simulación Dinámica de Procesos utilizando el Simulador	6	6

	<b>TOTAL DE HORAS TEÓRICAS</b>	<b>32</b>	<b>0</b>
	<b>TOTAL DE HORAS PRÁCTICAS</b>	<b>0</b>	<b>32</b>
	<b>TOTAL DE HORAS</b>	<b>64</b>	

## **CONTENIDO TEMÁTICO**

---

### **1. INTRODUCCIÓN.**

- 1.1. Desarrollo histórico de la simulación de procesos
- 1.2. Relación entre modelado, simulación, optimización y síntesis de procesos.
- 1.3. Estrategias de simulación de procesos:
  - 1.3.1. Modular secuencial.
  - 1.3.2. Modular simultáneo.
  - 1.3.3. Basada en ecuaciones.
- 1.4. Ventajas y desventajas respecto al uso de software comercial

### **2. MODELADO Y ANÁLISIS DE SISTEMAS A PARTIR DE PRINCIPIOS BÁSICOS**

- 2.1. Sistemas de primer orden
  - 2.1.1. Tanque de homogeneización
  - 2.1.2. Reactor CSTR
  - 2.1.3. Ley de enfriamiento de Newton aplicada a equipos de proceso
- 2.2. Sistemas de orden superior
  - 2.2.1. Tanques múltiples en serie
  - 2.2.2. Tanque con sistema de enfriamiento
  - 2.2.3. Extractor líquido-líquido por lotes
  - 2.2.4. Cascada de extractores a contracorriente
  - 2.2.5. Absorción
  - 2.2.6. Destilación binaria plato a plato

### **3. ESTRATEGIA MODULAR SECUENCIAL.**

- 3.1 Descomposición de Diagramas de flujo. Flowsheeting
- 3.2 Métodos basados en las matrices booleanas
- 3.3 Descomposición de sistemas de gran escala
  - 3.3.1 Lineales
  - 3.3.2 Con elementos no lineales
  - 3.3.3 Localización de redes cíclicas máximas.
  - 3.3.4 Algoritmo de Sargent y Westerberg.
  - 3.3.5 Algoritmo de Tarjan.
- 3.4 Selección de las corrientes de corte:
  - 3.4.1 Caso general planteamiento como un “set-covering problem” (algoritmo de Pho y Lapidus)
  - 3.4.2 Número mínimo de corrientes de corte (algoritmo de Barkley y Motard)
  - 3.4.3 Conjunto de corrientes de corte no redundante (Algoritmo de Upadhye y Grens.

- 3.5 Procesos con una o varias corrientes de recirculación
- 3.6 Ejercicios

#### **4 ESTRATEGIA MODULAR SIMULTÁNEA**

- 4.1 Efecto de las estrategias tipo cuasi Newton sobre la convergencia de los diagramas de flujo.
- 4.2 Ejemplos y Ejercicios

#### **5 ESTRATEGIA BASADA EN ECUACIONES**

- 5.1 Introducción.
- 5.2 Métodos de factorización de matrices dispersas.
- 5.3 Métodos a priori y métodos locales.
- 5.4 Métodos locales: Criterio de Markowitz.
- 5.5 Métodos a priori.
  - 5.5.1 Triangularización por bloques
  - 5.5.2 Base de salida admisible (transversal completa).
  - 5.5.3 Aplicación de los algoritmos de Sargent y Tarjan a matrices dispersas.
  - 5.5.4 Reordenación.
  - 5.5.5 Transformación en matriz triangular bordeada.
- 5.6 Fase numérica. Algoritmo RANKI
- 5.7 Comparación entre los diferentes sistemas de simulación. Ventajas e Inconvenientes.
- 5.8 Ejercicios

#### **6 UTILIZACIÓN DE UN SIMULADOR DE PROCESOS PARA PROCESOS EN ESTADO ESTACIONARIO**

- 6.1 Opciones termodinámicas
  - 6.1.1 Modelos de propiedades termodinámicas
    - 6.1.1.1 Ecuaciones para estado gaseoso
    - 6.1.1.2 Modelos para los coeficientes de actividad
    - 6.1.1.3 Selección del modelo termodinámico
- 6.2 Selección de métodos de integración numérica
- 6.3 Simulación de procesos gobernados por fenómenos de superficie
- 6.4 Simulación de operaciones unitarias en estado estacionario
  - 6.4.1 Evaporación instantánea
    - 6.4.1.1 Cálculo de punto de burbuja
    - 6.4.1.2 Cálculo de punto de rocío
    - 6.4.1.3 Proceso isotérmico
    - 6.4.1.4 Proceso adiabático
  - 6.4.2 Intercambiadores de calor
  - 6.4.3 Columnas de destilación, absorción y desorción
  - 6.4.4 Reactores CSTR en serie
  - 6.4.5 Columnas fraccionadora (Splitters)
  - 6.4.6 Reactores PFR con y sin recirculación
  - 6.4.7 Ciclos de potencia
  - 6.4.8 Ciclos de refrigeración

## 7 SIMULACIÓN DINÁMICA DE PROCESOS UTILIZANDO EL SIMULADOR O CON SOFTWARE PROPIO

- 7.1.1 Transición desde la simulación en estado estacionario a la simulación dinámica
- 7.1.2 Problemas numéricos en simulación dinámica
- 7.1.3 Simulación dinámica de sistemas de evaporación instantánea
- 7.1.4 Simulación dinámica de columnas de destilación
- 7.1.5 Simulación dinámica de reactores químicos
- 7.1.6 Introducción al control de procesos
- 7.1.7 Dinámica y control en el dominio de tiempo
- 7.1.8 Dinámica y control en el dominio de Laplace
- 7.1.9 Dinámica y control en el dominio de Fourier

### ACTIVIDADES PRÁCTICAS:

Durante las sesiones prácticas se realizará la resolución de una serie de ejercicios, se elaborarán algoritmos de cómputo propios y un reporte de ejecución de simulaciones con algún paquete de software especializado. Estas actividades deberán estar relacionadas con las unidades temáticas descritas, reflejar el número de horas prácticas señaladas y ser consideradas en la evaluación final de la asignatura.

## BIBLIOGRAFÍA

---

### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA:

- Babu, B. V. Process Plant Simulation. Oxford University Press. New York. 2004.
- Bequette, B. W. Process Dynamics. Modeling, Analysis and Simulation. Prentice Hall. USA. 2003.
- Cameron, I. T., Hangos, K., Perkins, J. G. Process Modelling and Model Analysis. Vol. 4. Process Systems Engineering. Academic Press. USA. 2001.
- Dimian, A. C. Integrated Design and Simulation of Chemical Processes. Computer Aided Chemical Engineering vol. 13. Elsevier. Amsterdam, Netherlands. 2008.
- Ghmeling, J., Kolbe, B., Kleiber, M. Rarey, J. Chemical Thermodynamics for Process Simulation. Wiley-VCH. Weinheim, Germany. 2012.
- Jana, A. K. Chemical Process Modeling and Computer Simulation. PH Learning Private. USA. 2011.
- Jiménez, A. Diseño de Procesos en ingeniería Química. Reverté. México. 2008.
- Luyben, W. L. Process Modeling, Simulation and Control for Chemical engineers, 2<sup>nd</sup> ed. Mc Graw Hill. USA. 1990.
- Martínez, V. H. Simulación de procesos en ingeniería química. Plaza y Valdéz. México. 2000.

## BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

- Himmelblau, D., Bischoff, K. B. Análisis y simulación de procesos. Reverté. España, 2004.
- Birta, L. G., Arbez, G. Modelling and Simulation: Exploring Dynamic System Behaviour. 2<sup>nd</sup> ed. Springer. London. 2011.
- Thomas, P. J. Simulation of Industrial Processes for Control Engineers. Butterworth-Heinemann. Germany. 1999
- Torres, R., Castro, J. Análisis y Simulación de procesos de Refinación del Petróleo. Instituto Politécnico Nacional. México. 2002
- Knopf, F. C. Modeling, Analysis and Optimization of Process and Energy Systems. John Wiley and Sons. USA. 2011.
- Ferrarini, L., Veber, C. Modeling, Control, Simulation, and Diagnosis of Complex Industrial and Energy Systems. International Society of Automation. International Society of Automation. USA. 2009.

## CIBERGRAFÍA

- <http://www.chemsep.org>

## SUGERENCIAS DIDÁCTICAS RECOMENDADAS PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA

---

---

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS	UTILIZACIÓN EN EL CURSO
Exposición oral	X
Exposición audiovisual	
Actividades prácticas dentro de clase	X
Ejercicios fuera del aula	X
Seminarios	
Lecturas obligatorias	
Trabajo de investigación	
Prácticas de Taller	X
Taller de resolución de problemas asistida por el profesor	X
Uso de Software especializado para simulación de procesos	X

## MECANISMOS DE EVALUACIÓN.

ELEMENTOS UTILIZADOS PARA EVALUAR EL PROCESO ENSEÑANZA-APRENDIZAJE	UTILIZACIÓN EN EL CURSO
Exámenes parciales	X
Examen final	X
Trabajos y tareas fuera del aula	X
Exposición de seminarios por los alumnos.	
Participación en clase	X
Taller de resolución de problemas asistida por el profesor	X
Asistencia	

PERFIL PROFESIOGRÁFICO REQUERIDO PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA			
LICENCIATURA	POSGRADO	ÁREA INDISPENSABLE	ÁREA DESEABLE
Ingeniería Química	Ingeniería de procesos		Modelado y simulación de procesos
Con experiencia docente			