

## 1.- DATOS DE LA ASIGNATURA

Nombre de la asignatura:	Simulación de Procesos
Carrera:	Ingeniería Química
Clave de la asignatura:	IQD-1023
SATCA*	2-3-5

## 2.- PRESENTACIÓN

### Caracterización de la asignatura.

Esta asignatura aporta al perfil profesional del Ingeniero Químico la capacidad de modelar los equipos y procesos químicos seleccionados en clase, desarrollar módulos de simulación e integrarlos en la construcción de un simulador particular; así como, propiciar la discusión e interpretación de los resultados obtenidos con el uso de algunos simuladores comerciales para diseñar, seleccionar, operar, optimizar y controlar procesos químicos en plantas industriales y de servicios, con tecnologías limpias de acuerdo a las normas de higiene y seguridad, de manera sustentable.

Para estructurarla se ha realizado un análisis en el campo de las Operaciones Unitarias, Ingeniería de Reactores, Control de Procesos, así como en Industria Química, identificando los temas que tienen una aplicación más importante en el entorno laboral del ingeniero químico.

Esta materia es de carácter integrador, hace uso de las competencias adquiridas en materias como Procesos de Separación, Ingeniería de Reactores, Síntesis y Optimización de Procesos, por esta razón se ha colocado al final de la trayectoria escolar, de manera tal que en ella se apliquen y verifiquen los conocimientos adquiridos sobre la Ingeniería Aplicada. En general, esta asignatura proporciona al Ingeniero Químico en formación la capacidad de utilizar herramientas para la construcción de modelos que representen y predigan desde las propiedades de sustancias hasta la operación de plantas químicas completas, permitiendo así un análisis y optimización de las mismas.

### Intención didáctica.

El temario del curso se ha organizado en tres unidades. La primera de ellas aborda conceptos fundamentales de programación que se cubrieron en materias de ciencias de la ingeniería e ingeniería aplicada. La segunda unidad incorpora la programación de módulos para la elaboración de simuladores de procesos. Finalmente, la tercera unidad incluye la utilización de simuladores comerciales para la representación, análisis y operación de equipos de proceso.

En la primera unidad se tratan los fundamentos básicos de la Ingeniería Química, para propiciar en el estudiante una visión de conjunto que le permita construir un modelo matemático de algún proceso químico en particular. Al estudiar cada fundamento se incluyen los conceptos involucrados en él, así como ejemplos prácticos para hacer un tratamiento más significativo, oportuno e integrado de dichos fundamentos. También se presentan un análisis de los grados de libertad de los modelos estudiados y su especificación.

En la segunda unidad, se integran los fundamentos vistos en la unidad anterior al establecer los modelos de equipos individuales, de: reactores químicos, columnas de destilación, intercambiadores de calor, bombas, mezcladores, etc.; y a la vez se presentan algoritmos

---

\* Sistema de asignación y transferencia de créditos académicos

de solución de los modelos y las estrategias de solución numérica. Se consideran los cálculos de las principales propiedades termodinámicas, necesarias en la solución numérica de los modelos, a través del módulo de propiedades termodinámicas y se incluye la explicación del análisis y la interpretación de los resultados numéricos obtenidos. Se sugiere asimismo, una actividad integradora: la construcción de un simulador particular, utilizando los módulos desarrollados en clase, se considera como condición necesaria que estudiantes muestren habilidad en el uso de algún lenguaje de programación específico (Fortran, Matlab, C, C++, etc.).

En la tercera unidad, se hace uso de un simulador comercial (Aspen Plus, Hysys) que permita aplicar los conceptos de simulación anteriormente estudiados dirigiéndolos a casos de estudio de diseño, análisis y optimización de procesos. La naturaleza de esta unidad permite con mayor facilidad la representación de sistemas complejos, esto permite analizar el efecto de una o más variables sobre el proceso en estudio. Además, al tratarse de un software de utilización comercial, se logra una competencia dirigida y relacionada directamente con el ámbito laboral.

El enfoque sugerido para la materia requiere que las actividades prácticas promuevan el desarrollo de habilidades para la construcción de modelos de equipos o procesos químicos así como su solución a través de la aplicación de los fundamentos de ingeniería química y métodos numéricos.

En las actividades prácticas sugeridas, es conveniente que el profesor busque sólo guiar a sus alumnos para que ellos establezcan los modelos de los equipos o procesos en estudio y seleccionen el método numérico que le permita solucionar el modelo en estudio.

Se sugieren utilizar actividades de aprendizaje diversificadas para hacer más significativo y efectivo el aprendizaje y el consecuente desarrollo de las competencias correspondientes. Algunas de las actividades de aprendizaje pueden hacerse como actividad extra clase y en clase realizar una discusión de resultados, permitiendo que el alumno tenga contacto con el concepto en forma concreta y que sea a través de la reflexión, el análisis y la discusión que se logre el conocimiento, la resolución de problemas. Se sugiere que se diseñen los problemas, con grado sobreespecificado o subespecificado en variables, de tal manera que se involucre al alumno en el análisis de grados de libertad y su especificación.

En la realización de las actividades programadas es muy importante que el estudiante aprenda a valorar los trabajos que lleva a cabo y a entender que está construyendo su hacer profesional, que debe apreciar la importancia del conocimiento y los hábitos de trabajo, desarrollar la curiosidad, la puntualidad, la tenacidad, la flexibilidad y la autonomía en la toma de decisiones.

Finalmente, se insiste reiterativamente que en esta materia se integran todos los fundamentos y conceptos de ingeniería química, que son la base principal para el desarrollo del modelamiento de equipos y procesos que se deseen simular con un software comercial a fin de que el alumno pueda visualizar e interpretar la importancia de la aplicación industrial de la simulación de procesos químicos.

Es necesario que el profesor ponga atención y cuidado en estos aspectos en el desarrollo de las actividades de aprendizaje de esta asignatura.

### **3.- COMPETENCIAS A DESARROLLAR**

#### **Competencias específicas:**

- Utilizar software comercial para el análisis y optimización de procesos químicos.
- Desarrollar programas para simular un equipo de procesos.

#### **Competencias genéricas:**

##### **Competencias instrumentales**

- Capacidad de análisis y síntesis.
- Capacidad de organizar y planificar
- Conocimientos básicos de la carrera
- Comunicación oral y escrita
- Habilidades básicas de manejo de la

	<p>computadora.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Habilidad para buscar y analizar información proveniente de fuentes diversas.</li> <li>• Solución de problemas.</li> <li>• Toma de decisiones.</li> </ul> <p><b>Competencias interpersonales</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Capacidad crítica y autocrítica</li> <li>• Trabajo en equipo</li> <li>• Habilidades interpersonales</li> </ul> <p><b>Competencias sistémicas</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• .Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica</li> <li>• Habilidades de investigación</li> <li>• Capacidad de aprender</li> <li>• Capacidad de generar nuevas ideas (creatividad)</li> <li>• Habilidad para trabajar en forma autónoma</li> <li>• Búsqueda del logro</li> </ul>
--	---

#### 4.- HISTORIA DEL PROGRAMA

Lugar y fecha de elaboración o revisión	Participantes	Evento
IT de Villahermosa Del 7 al 11 de septiembre de 2009	Representantes de los Institutos Tecnológicos de: IT de Aguascalientes IT de Celaya IT de Chihuahua IT de Durango IT de La Laguna IT de Lázaro Cárdenas IT de Matamoros IT de Mérida IT de Minatitlán IT de Orizaba IT de Pachuca IT de Parral IT de Tapachula IT de Tepic IT de Toluca IT de Veracruz IT de Villahermosa ITS de Centla	Reunión Nacional de Diseño e Innovación Curricular para la formación y desarrollo de competencias profesionales de la carrera de Ingeniería Química
Instituto Tecnológico de Veracruz de Septiembre 2009 a Enero 2010.	Representante de la Academia de Ingeniería Química	Análisis, enriquecimiento y elaboración del programa de estudio propuesto en la Reunión Nacional de Diseño Curricular de la carrera de Ingeniería Química.

Lugar y fecha de elaboración o revisión	Participantes	Evento
IT de Celaya Del 8 al 12 de febrero de 2010	Representantes de los Institutos Tecnológicos participantes de: IT de Aguascalientes IT de Celaya IT de Chihuahua IT de Durango IT de La Laguna IT de Lázaro Cárdenas IT de Matamoros IT de Mérida IT de Minatitlán IT de Orizaba IT de Pachuca IT de Parral IT de Tapachula IT de Toluca IT de Veracruz IT de Villahermosa ITS de Centla	Reunión Nacional de Consolidación de la carrera de Ingeniería Química

#### 5.- OBJETIVO GENERAL DEL CURSO

Utilizar software comercial para el análisis y optimización de procesos químicos.

Desarrollar programas para simular un equipo de procesos.

#### 6.- COMPETENCIAS PREVIAS

- Resolver sistemas de ecuaciones lineales.
- Resolver problemas aplicando cálculo vectorial.
- Realizar problemas de cálculo integral y diferencial.
- Resolver sistemas de ecuaciones diferenciales.
- Resolver modelos matemáticos usando métodos numéricos.
- Aplicar lenguajes de programación (Fortran, C++, Matlab) para resolver modelos matemáticos.
- Realizar balances de materia y energía.
- Calcular propiedades termodinámicas y de transporte.
- Resolver problemas de diseño de equipos de separación.
- Resolver problemas de diseño de equipos de reacción.
- Analizar y sintetizar procesos de Ingeniería Química.

#### 7.- TEMARIO

Unidad	Temas	Subtemas
1	Fundamentos de simulación	1.1. Conceptos básicos 1.2. Balances simples 1.3. Balances simultáneos de masa y calor 1.4. Algoritmos de solución de modelos en ingeniería química: método modular-secuencial y método orientado a ecuaciones
2	Simulación modular	2.1. Desarrollo de módulos de simulación para

		solución de modelos en ingeniería química 2.2. Construcción de un simulador usando los módulos vistos 2.3. Interpretación de resultados
3	Simulación comercial	3.1. Manejo de un simulador comercial 3.2. Solución de casos de estudio de diseño, análisis y optimización de procesos en ingeniería química 3.3. Interpretación de resultados

## 8.- SUGERENCIAS DIDÁCTICAS

El profesor debe:

Ser conocedor de la disciplina que está bajo su responsabilidad, conocer su origen y desarrollo histórico para considerar este conocimiento al abordar los temas. Desarrollar la capacidad para coordinar y trabajar en equipo; orientar el trabajo del estudiante y potenciar en él la autonomía, el trabajo cooperativo y la toma de decisiones. Mostrar flexibilidad en el seguimiento del proceso formativo y propiciar la interacción entre los estudiantes. Tomar en cuenta el conocimiento de los estudiantes como punto de partida y como obstáculo para la construcción de nuevos conocimientos.

- Propiciar actividades de metacognición. Ante la ejecución de una actividad, señalar o identificar el tipo de proceso intelectual que se realizó: un análisis, una síntesis, la creación de un heurístico, etc. Al principio lo hará el profesor, luego será el alumno quien lo identifique. Ejemplos: aplicación de leyes de conservación de materia y energía a diferentes casos de estudio.
- Propiciar actividades de búsqueda, selección y análisis de información en distintas fuentes. Ejemplos: buscar y analizar los diferentes métodos de simulación, Hacer una investigación bibliográfica y en internet de los diferentes tipos de simuladores comerciales.
- Fomentar actividades grupales que propicien la comunicación, el intercambio argumentado de ideas, la reflexión, la integración y la colaboración de y entre los estudiantes. Por ejemplo: Realizar sesiones de seminarios donde se expongan los resultados de las simulaciones de plantas químicas y los análisis de los resultados.
- Diseñar, analizar y/o optimizar problemáticas propias del campo ocupacional. Ejemplos: Hacer una investigación de campo, para encontrar en que plantas químicas se utilizan los simuladores comerciales.
- Relacionar los contenidos de esta asignatura con las demás del plan de estudios a las que ésta da soporte para desarrollar una visión interdisciplinaria en el estudiante. Ejemplos: simular procesos de destilación, absorción, reactores químicos, cálculos de redes de tuberías, cálculo de integración de energía, cálculo de redes de intercambiadores de calor, destilación de crudos, plantas criogénicas, entre algunos.
- Propiciar el desarrollo de capacidades intelectuales relacionadas con la lectura, la escritura y la expresión oral. Ejemplos: redactar reportes e informes de las actividades de simulación, exponer al grupo las conclusiones obtenidas. Es conveniente que los reportes contengan toda la información que concluya y apoye a su análisis y que la redacción sea muy clara y concisa.
- Propiciar el desarrollo de actividades intelectuales de inducción-deducción y análisis-síntesis, que encaminen hacia la investigación. Ejemplo: a partir de un problema real,

propiciar que el estudiante elabore sus propias consideraciones y elija el modelo que mejor represente el proceso a tratar.

- Desarrollar actividades de aprendizaje que propicien la aplicación de los conceptos, modelos y metodologías que se van aprendiendo en el desarrollo de la asignatura.
- Proponer problemas que permitan al estudiante la integración de contenidos de la asignatura y entre distintas asignaturas, para su análisis y solución. Por ejemplo, se puede plantear al estudiante la representación de una planta real y que proponga alguna mejora en el proceso, sustentando sus decisiones.
- Relacionar los contenidos de la asignatura con el cuidado del medio ambiente.
- Cuando los temas lo requieran, utilizar medios audiovisuales para una mejor comprensión del estudiante.
- Propiciar el uso de las nuevas tecnologías en el desarrollo de la asignatura (procesador de texto, hoja de cálculo, base de datos, graficador, Internet, etc.).

### 9.- SUGERENCIAS DE EVALUACIÓN

La evaluación debe ser continua y formativa por lo que se debe considerar el desempeño en cada una de las actividades de aprendizaje, haciendo especial énfasis en:

- Simular procesos químicos: modelar procesos, programar simuladores y operar simuladores comerciales.
- Resolver los proyectos y elaborar reportes de la simulación, así como de las conclusiones obtenidas de dichas simulaciones.
- Resolver la evaluación escrita de los contenidos del programa oficial para comprobar el manejo de aspectos teóricos y declarativos.
- Elaborar un proyecto final en equipo, empleando un simulador comercial y siguiendo toda la secuencia desarrollada de análisis, optimización y elaboración de reporte técnico.
- Asistir al aula de manera puntual, preferentemente en un 90% de las asistencias totales.

### 10.- UNIDADES DE APRENDIZAJE

#### Unidad 1: Fundamentos de simulación

Competencia específica a desarrollar	Actividades de Aprendizaje
<p>Conocer y comprender los conceptos básicos de modelación matemática y simulación.</p> <p>Desarrollar modelos matemáticos de balances de materia y energía simples y combinados.</p> <p>Conocer los métodos de resolución de modelos matemáticos de ingeniería química en estado estable.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Discutir que es y para que sirve la simulación.</li> <li>• Investigar los distintos modelos matemáticos; desde una ecuación algebraica de una variable, hasta sistemas de ecuaciones diferenciales parciales.</li> <li>• Realizar balances de masa y energía, así como aplicar los principios fisicoquímicos necesarios para establecer el modelo de un proceso o una operación unitaria.</li> <li>• Investigar los métodos de solución de los distintos modelos matemáticos, simbólicos, por series y numéricos.</li> <li>• Identificar que método de solución de modelos matemáticos es el más adecuado para resolver los modelos de ingeniería química desarrollados previamente.</li> <li>• Investigar los métodos modulares</li> </ul>

	<p>secuenciales y orientados a ecuaciones</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Construir una lista de ventajas y otra de desventajas del método modular secuencial y repetir ese ejercicio con el método orientado a ecuaciones</li> <li>• Realizar una comparación entre los dos métodos, con base en la lista.</li> </ul>
--	---

### Unidad 2: Simulación modular

Competencia específica a desarrollar	Actividades de Aprendizaje
<p>Desarrollar módulos de simulación de sistemas en estado estable.</p> <p>Construir simuladores en estado estable con los módulos desarrollados.</p> <p>Usar los módulos desarrollados para hacer análisis de sensibilidad de las variables de respuesta e interpretar los resultados en estado estable.</p> <p>Desarrollar módulos de simulación de sistemas simples en estado dinámico.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Investigar cual es la estructura de los simuladores modulares.</li> <li>• Desarrollar módulos de simulación para diferentes procesos unitarios.</li> <li>• Desarrollar un módulo de simulación para el cálculo de propiedades termodinámicas</li> <li>• Unir los módulos para construir un simulador de un proceso químico en estado estable.</li> <li>• Resolver un problema de diseño en estado estable con el simulador construido</li> <li>• Aplicar el simulador en condiciones de operación para discriminar resultados</li> <li>• Interpretar los resultados obtenidos en la solución de los problemas anteriores</li> <li>• Unir los módulos para construir un simulador de un proceso químico simple en estado dinámico.</li> <li>• Resolver un problema de diseño simple en estado dinámico con el simulador construido.</li> </ul>

### Unidad 3: Simulación comercial

Competencia específica a desarrollar	Actividades de Aprendizaje
<p>Aplicar un simulador comercial a la solución de casos de estudio o problemas de final abierto.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Hacer una investigación bibliográfica y en internet, de los distintos simuladores comerciales existentes, su estructura y sus aplicaciones.</li> <li>• Revisar manuales de usuario del simulador comercial.</li> <li>• Resolver con un simulador comercial los modelos matemáticos anteriormente resueltos con los módulos desarrollados.</li> <li>• Usar un simulador comercial para el análisis de operaciones unitarias específicas.</li> <li>• Hacer una investigación bibliográfica de distintas plantas químicas que se puedan simular con un simulador comercial.</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Representar una planta química con un simulador comercial.</li> <li>• Resolver problemas de diseño de procesos de final abierto.</li> <li>• Hacer estudios de sensibilidad y optimización de una planta química mediante el uso de un simulador comercial e interpretar los resultados.</li> </ul>
--	---

## 11.- FUENTES DE INFORMACIÓN

1. *Manuales del(de los) simulador(es)* con que cuente la institución
2. Bird, R. B., Stewart, W. E. y Lightfoot, E. N. *Fenómenos de Transporte*. Reverté.
3. Carnahan, B., Luther, H. A. y Wilkes, J. O. *Applied Numerical Methods*. John Wiley & Sons.
4. Chapra, Steven; *Métodos Numéricos para Ingenieros*; McGraw Hill, 5ª Edición, 2007.
5. Crowe, C. M., Hamielec, A. E., Hoffman, T. W. y Johnson, A. I. *Chemical Plant Simulation*. Prentice – Hall.
6. Cutlip, Michael B.; *Resolución de Problemas en Ingeniería Química y Bioquímica con Polymath, Excel y Mathlab*; Pearson Educación, 2008.
7. Davis, Mark E.; *Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers*; Wiley, 2001.
8. Edwards, Henry C.; *Ecuaciones Diferenciales y Problemas con Valores en la Frontera*; Pearson Educación, 4ª Edición, 2008.
9. Elnasaie, Said; *Numerical Techniques for Chemical and Biological Engineers Using MatLab*; Springer, 2007.
10. Felder, R. M. y Rousseau, R. W. *Principios Básicos de los Procesos Químicos*. El Manual Moderno.
11. Franks, R. G. E. *Modeling and Simulation in Chemical Engineering*. Wiley – Interscience, 1972.
12. Gottfried, Byron; *Programación en C*; McGraw Hill, 2ª Edición, 2005.
13. Ingham, John; *Chemical Engineering Dynamics*; Wiley-VCH , 2007
14. Jiménez Gutiérrez, Arturo. *Diseño de Procesos en Ingeniería Química*. Reverté, 2003.
15. Lee, R. C. T.; *Introducción al Diseño y Análisis de Algoritmos*; McGraw Hill, 2007.
16. Levenspiel, O. *Ingeniería de Reacciones Químicas*. Reverté.
17. Luyben, William, L.; *Process Modeling Simulation and Control for Chemical Engineers*; McGraw Hill, 2ª Edición, 1996.
18. Motard, R. L., Schacham, M. y Rosen, E. M. *Steady State Chemical Process Simulation*. AIChE Journal, 21, 417, 1975.
19. Sifuentes, V. H.; *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*; Plaza y Valdez, 2007.
20. Reklaitis, G. V. y Schneider, D. R. *Balances de Materia y Energía*. Nueva Editorial Interamericana.
21. Rudd, Dale F., Powers, Gary J. & Sirola, Jeffrey J. *Process Synthesis*. Prentice- Hall.
22. Walas, S. *Reaction Kinetics for Chemical Engineers*. McGraw – Hill.
23. Zill, Dennis G.; *Ecuaciones Diferenciales con Aplicaciones de Modelado*; Cengage Learning, 9ª Edición, 2009.

## 12.- PRÁCTICAS PROPUESTAS

Las prácticas propuestas en el presente programa no son únicas para el desarrollo de actividades en la asignatura. Cualquier práctica de las cubiertas en el programa podrá ser sustituida por otra en la medida que los objetivos educacionales de la misma queden cumplidos.



- Programación de simuladores:

Como ejemplo, se sugiere elaborar algunos de los siguientes programas:

- Representación del flujo en tubos concéntricos.
  - Representación de la difusión de masa en una película descendente.
  - Solución ecuaciones lineales de balances de materia y balances de energía.
  - Ajuste datos experimentales del seguimiento cinético de una reacción química.
  - Determinación de propiedades de mezclas: densidad, presión de vapor, concentración, entre otros; empleando modelos.
  - Determinación de propiedades de transporte: viscosidad, coeficientes de transferencia de calor, masa.
  - Representación de equipos de procesos únicos.
  - Representación de procesos con diversos equipos.
- Operación de simuladores:
    - Predicción y determinación de propiedades de sustancias usando simuladores.
    - Simulación de una red de ductos: tuberías, bombas, accesorios, válvulas, etc.
    - Simulación de un sistema de reducción de tamaño y clasificación de sólidos.
    - Simulación de un proceso que integre diversas operaciones de separación e intercambio de calor, como destilación, intercambiadores de calor, evaporadores, reactores, etc.
    - Simulación de un proceso real, es decir, elaborar una simulación a partir de lecturas obtenidas de un equipo(s) que se encuentre en operación estable.
    - Simulación de un proceso industrial de la región, por ejemplo un proceso de transporte y separación de crudo, obtención de sus productos principales. Simulación de la caracterización de crudos.