

## 1. Datos Generales de la asignatura

<b>Nombre de la asignatura:</b>	<b>Simulación de Procesos.</b>
<b>Clave de la asignatura:</b>	<b>IQD-1023</b>
<b>SATCA<sup>1</sup>:</b>	<b>2-3-5</b>
<b>Carrera:</b>	<b>Ingeniería Química</b>

## 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 temas. La primera de ellas aborda conceptos fundamentales de programación que se cubrieron en materias de ciencias de la ingeniería e ingeniería aplicada. El segundo tema incorpora la programación de módulos para la elaboración de simuladores de procesos. Finalmente, el tercer tema incluye la utilización de simuladores comerciales para la representación, análisis y operación de equipos de proceso.

En el primer tema se tratan los fundamentos básicos de la Ingeniería Química, para propiciar en el estudiante una visión de conjunto que le permita construir un modelo de 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 el tercer tema, 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

<sup>1</sup> Sistema de Asignación y Transferencia de Créditos Académicos

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 docente busque sólo guiar a sus estudiantes 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 estudiante 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 sobre especificado o sub especificado 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 modelo de equipos y procesos que se deseen simular con un software comercial a fin de que el estudiante pueda visualizar e interpretar la importancia de la aplicación industrial de la simulación de procesos químicos.

Es necesario que el docente ponga atención y cuidado en estos aspectos en el desarrollo de las actividades de aprendizaje de esta asignatura. El aspecto matemático de algún proceso químico en particular es fundamental. 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 de solución de los modelos y las estrategias de solución numérica. Se consideran los

### 3. Participantes en el diseño y seguimiento curricular del programa

Lugar y fecha de elaboración o revisión	Participantes	Evento
<p>Instituto Tecnológico de Villahermosa del 7 al 11 de septiembre de 2009.</p>	<p>Representantes de los Institutos Tecnológicos de:  Aguascalientes, Celaya, Centla, Chihuahua, Durango, La Laguna, Lázaro Cárdenas, Matamoros, Mérida, Minatitlán, Orizaba, Pachuca, Parral, Tapachula, Tepic, Toluca, Veracruz y Villahermosa.</p>	<p>Reunión Nacional de Diseño e Innovación Curricular para el Desarrollo y Formación de Competencias Profesionales de las Carreras de Ingeniería Ambiental, Ingeniería Bioquímica, Ingeniería Química e Ingeniería en Industrias Alimentarias.</p>
<p>Instituto Tecnológico de Celaya del 8 al 12 de febrero de 2010.</p>	<p>Representantes de los Institutos Tecnológicos de:  Aguascalientes, Celaya, Centla, Chihuahua, Durango, La Laguna, Lázaro Cárdenas, Matamoros, Mérida, Minatitlán, Orizaba, Pachuca, Parral, Tapachula, Toluca, Veracruz y Villahermosa.</p>	<p>Reunión Nacional de Consolidación de los Programas en Competencias Profesionales de Carreras de Ingeniería Ambiental, Ingeniería Bioquímica, Ingeniería Química e Ingeniería en Industrias Alimentarias.</p>
<p>Instituto Tecnológico de Villahermosa, del 19 al 22 de marzo de 2013.</p>	<p>Representantes de los Institutos Tecnológicos de:  Aguascalientes, Campeche, Cd. Madero, Celaya, Centla, Chihuahua, Coacalco, Durango, La Laguna, Lázaro Cárdenas, Mérida, Matamoros, Minatitlán, Orizaba, Pachuca, Tapachula, Tijuana, Toluca, Tuxtla Gutiérrez y Villahermosa.</p>	<p>Reunión Nacional de Seguimiento Curricular de las carreras de Ingeniería Ambiental, Ingeniería Bioquímica, Ingeniería en Industrias Alimentarias e Ingeniería Química, del SNIT.</p>
<p>Tecnológico Nacional de México, del 25 al 26 de agosto de 2014.</p>	<p>Representantes de los Institutos Tecnológicos de:  Aguascalientes, Apizaco, Boca del Río, Celaya, Cerro Azul, Cd. Juárez, Cd. Madero, Chihuahua, Coacalco, Coatzacoalcos, Durango, Ecatepec, La Laguna, Lerdo, Matamoros, Mérida, Mexicali, Motúl, Nuevo Laredo, Orizaba, Pachuca, Poza</p>	<p>Reunión de trabajo para la actualización de los planes de estudio del sector energético, con la participación de PEMEX.</p>

	<p>Rica, Progreso, Reynosa, Saltillo, Santiago Papasquiari, Tantoyuca, Tlalnepantla, Toluca, Veracruz, Villahermosa, Zacatecas y Zacatepec.</p> <p>Representantes de Petróleos Mexicanos (PEMEX).</p>	
--	---	--

#### 4. Competencia(s) a desarrollar

Competencia(s) específica(s) de la asignatura
Simula procesos químicos utilizando software comercial.

#### 5. Competencias previas

<ul style="list-style-type: none"> <li>• Resolver sistemas de ecuaciones lineales.</li> <li>• Resolver problemas aplicando cálculo vectorial.</li> <li>• Realizar problemas de cálculo integral y diferencial.</li> <li>• Resolver sistemas de ecuaciones diferenciales.</li> <li>• Resolver modelos matemáticos usando métodos numéricos.</li> <li>• Aplicar lenguajes de programación (Fortran, C++, Matlab) para resolver modelos matemáticos.</li> <li>• Realizar balances de materia y energía.</li> <li>• Calcular propiedades termodinámicas y de transporte.</li> <li>• Resolver problemas de diseño de equipos de separación.</li> <li>• Resolver problemas de diseño de equipos de reacción.</li> <li>• Analizar y sintetizar procesos de Ingeniería Química.</li> </ul>
--

## 6. Temario

No.	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

## 7. Actividades de aprendizaje de los temas

Nombre de tema 1: <b>Fundamentos de simulación</b>	
Competencias	Actividades de aprendizaje
<p><b>Específica(s):</b> Desarrolla y resuelve modelos aplicables a ingeniería química.</p> <p><b>Genéricas:</b></p> <p>Conocimientos sobre el área de estudio y la profesión. Capacidad para identificar, plantear y resolver problemas. Capacidad de trabajo en equipo.</p>	<p>Discutir en que consiste la simulación. Investigar distintos modelos matemáticos; desde una ecuación algebraica de una variable, hasta sistemas de ecuaciones diferenciales parciales. Realizar balance de masa y energía, así como aplicar los principios fisicoquímicos necesarios para establecer el modelo de un proceso o una operación unitaria. Investigar los métodos de solución de los distintos modelos matemáticos, simbólicos, por series y numéricos. Identificar que método de solución de modelos matemáticos es el más adecuado para resolver los modelos de ingeniería química desarrollados previamente. Investigar los métodos modulares secuenciales y orientados a ecuaciones</p> <p>Construir una lista de ventajas y desventajas del método modular secuencial y repetir ese ejercicio con el método orientado a ecuaciones.</p>
Nombre de tema 2: <b>Simulación modular</b>	
Competencias	Actividades de aprendizaje
<p><b>Específica(s):</b></p> <p>Construye simuladores en estado estable con los módulos desarrollados.</p> <p><b>Genéricas:</b></p> <p>Conocimientos sobre el área de estudio y la profesión. Capacidad para identificar, plantear y resolver problemas. Capacidad de trabajo en equipo. Habilidad en el uso del software. Capacidad creativa.</p>	<p>Investigar cual es la estructura de los simuladores modulares. Desarrollar módulos de simulación para diferentes procesos unitarios. Desarrollar un módulo de simulación para el cálculo de propiedades termodinámicas. Unir los módulos para construir un simulador de un proceso químico en estado estable. Resolver un problema de diseño en estado estable con el simulador construido. Aplicar el simulador en condiciones de operación para discriminar resultados. Interpretar los resultados obtenidos en la solución de los problemas anteriores. Unir los módulos para construir un simulador de un proceso químico simple en estado dinámico. Resolver un problema de diseño simple en estado dinámico con el simulador construido.</p>

Nombre de tema 3: <b>Simulación comercial</b>	
Competencias	Actividades de aprendizaje
<p>Específica(s):</p> <p>Aplica un simulador comercial a la solución de casos de estudio o problemas de final abierto.</p> <p>Genéricas:</p> <p>Conocimientos sobre el área de estudio y la profesión. Capacidad para identificar, plantear y resolver problemas. Capacidad de trabajo en equipo. Habilidad en el uso del software. Capacidad creativa. Capacidad de investigación.</p>	<p>Hacer una investigación bibliográfica y en internet, de los distintos simuladores comerciales existentes, su estructura y sus aplicaciones. Revisar manuales de usuario del simulador comercial. Resolver con un simulador comercial los modelos matemáticos anteriormente resueltos con los módulos desarrollados.</p> <p>Usar un simulador comercial para el análisis de operaciones unitarias específicas. Hacer una investigación bibliográfica de distintas plantas químicas que se puedan simular con un simulador comercial. Representar una planta química con un simulador Comercial. Resolver problemas de diseño de procesos de final abierto. Hacer estudios de sensibilidad y optimización de una planta química mediante el uso de un simulador comercial e interpretar los resultados.</p>

## 8. Práctica(s)

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 educativos 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.



## 9. Proyecto de asignatura

El objetivo del proyecto que planteé el docente que imparta esta asignatura, es demostrar el desarrollo y alcance de la(s) competencia(s) de la asignatura, considerando las siguientes fases:

- **Fundamentación:** marco referencial (teórico, conceptual, contextual, legal) en el cual se fundamenta el proyecto de acuerdo con un diagnóstico realizado, mismo que permite a los estudiantes lograr la comprensión de la realidad o situación objeto de estudio para definir un proceso de intervención o hacer el diseño de un modelo.
- **Planeación:** con base en el diagnóstico en esta fase se realiza el diseño del proyecto por parte de los estudiantes con asesoría del docente; implica planificar un proceso: de intervención empresarial, social o comunitario, el diseño de un modelo, entre otros, según el tipo de proyecto, las actividades a realizar los recursos requeridos y el cronograma de trabajo.
- **Ejecución:** consiste en el desarrollo de la planeación del proyecto realizada por parte de los estudiantes con asesoría del docente, es decir en la intervención (social, empresarial), o construcción del modelo propuesto según el tipo de proyecto, es la fase de mayor duración que implica el desempeño de las competencias genéricas y específicas a desarrollar.
- **Evaluación:** es la fase final que aplica un juicio de valor en el contexto laboral-profesión, social e investigativo, ésta se debe realizar a través del reconocimiento de logros y aspectos a mejorar se estará promoviendo el concepto de “evaluación para la mejora continua”, la metacognición, el desarrollo del pensamiento crítico y reflexivo en los estudiantes.

## 10. Evaluación por competencias

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.

## 11. Fuentes de información

### FUENTES DE INFORMACIÓN

1. *Manuales del(de los) simulador(es) con que cuenta 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 Matlab*; 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.