PROGRAMA

Actividad Curricular	DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS
Docente responsable	Mauricio Colombo
Equipo docente	Mauricio Colombo Fernando Daniel Mele Teresa Únzaga
Departamento	Ingeniería de Procesos y Gestión Industrial
Vigencia	2022
Carrera	INGENIERÍA QUÍMICA
Plan de estudios	Plan 1993 – Modificación 2004
Res. Ministerial de reconocimiento oficial	RM N° 389-2017
Código	15_QQU
Tipo de Actividad	Obligatoria
Ubicación en la carrera	Módulo X – Quinto año Bloque curricular: Tecnologías aplicadas
Correlativas	**Para cursar:** • Análisis y Diseño de Reactores I (regular) • Operaciones Unitarias II (regular) **Para aprobar:** Análisis y Diseño de Reactores I (aprobada) Operaciones Unitarias II(aprobada)
Carga horaria presencial total	• 128 horas Totales • 8 horas semanales (16 semanas)
Distribución de actividades presenciales	• 30 horas de Clases Teórico-Prácticas • 46 horas de Problemas de ingeniería • 40 horas de Proyecto y Diseño • 12horas de evaluaciones

Recursos empleados	**Libros (en biblioteca de la FACET)** • Edgar Thomas F, Himmelblau David M, Lasdon Leon S., (1998). Optimization of chemical processes, Editorial McGraw-Hill, USA. 2 ed. • A. Ravindran, K. M. Ragsdell y G. V. Reklaitis (2006). Engineering optimization methods and applications, John Wiley & Sons, USA., 2 ed. • Warren D. Seider,et. al. (2009). Product and process design principles synthesis, analysis, and evaluation. 3 ed. • Robin Smith Chemical process design, (1995), New York McGraw-Hill. USA. 1 ed. • Thomas K. Sherwood., (1963). A course in process design. Cambridge, Massachusetts M.I.T. Press Massachusetts Institute of Technology. USA • Towler G, Sinott R., Diseño en Ingeniería Química., (2009). Ed. Reverté, Barcelona, España. Trad. 5 ed. **Software (con licencia estudiantil)** • UniSim Design, Hyprotech. USA. • GAMS, Gams Corporation, USA. **Aula virtual** Para información general y material de estudio de los alumnos: https://facetvirtual.facet.unt.edu.ar/course/view.php?id=73 **Aulas** Disponible con proyector multimedia y acceso a red informática (4-1-23)

Objetivos en el Plan de Estudio	• Integrar conocimientos para crear, desarrollar y seleccionar alternativas de procesos químicos industriales, combinando métodos heurísticos y algorítmicos de síntesis y optimización de procesos. • Adquirir destreza para resolver problemas de simulación de procesos, utilizando software específico. • Adquirir destreza en la formulación y resolución de problemas de optimización, utilizando software específico.
Resultados de Aprendizaje (Competencias)	• Aplicar correctamente los balances de materia y energía, operaciones de separación, ingeniería de las reacciones químicas, y valorización y transformación de materias primas y recursos energéticos. • Aplicar correctamente el análisis, diseño, simulación y optimización de procesos y productos. • Aplicar correctamente los principios básicos de los sistemas de producción y fabricación. • Desarrollar proyectos en el ámbito de la ingeniería química. • Aplicar los criterios de integración de procesos y flujos de energía con consciencia medioambiental y de sostenibilidad. • Formular y resolver un problema de optimización, escribiendo el correspondiente modelo matemático que incluya una función objetivo, una o más variables de diseño, las variables accesorias que sean necesarias y diferentes restricciones de igualdad o desigualad. El modelo ha de ser matemáticamente consistente, razonablemente escalado y resoluble en la práctica con los medios disponibles. • Escribir los programas correspondientes con el lenguaje de programación propio del curso (GAMS, en la actualidad) para resolver los modelos matemáticos referidos. • Interpretar la solución numérica obtenida con el programa del curso en términos de ecuaciones y variables de interés. • Determinar la sensibilidad de la solución obtenida con el programa a les variaciones de los diferentes parámetros, o a posibles variaciones introducidas en el modelo matemático. • Simular el comportamiento de procesos en régimen utilizando el simulador UniSim. • Gestionar un proyecto técnico propio de Ingeniería Química basado en el trabajo en equipo. • Definir las tareas que permitan lograr los objetivos del proyecto. • Planificar los mecanismos de seguimiento de la implementación

Métodos de Enseñanza	• CLASES TEÓRICO PRÁCTICAS. El curso se organiza con 2 clases teórico – prácticas por semana. En la primera parte, los estudiantes organizados en grupos de trabajo realizan un proyecto de síntesis requiriéndose para ello el uso de simuladores. En la 2da. Parte, se imparten 4 horas de teoría sobre métodos de optimización. • PRÁCTICOS DE PROBLEMAS. En la primera parte se imparten 5 horas por semana. Las clases prácticas están diseñadas para que los estudiantes adquieran un manejo de los métodos heurísticos y algorítmicos aplicados a casos particulares. En la segunda parte, los problemas se resuelven con GAMS, para lo cual están disponibles problemas tipo de ingeniería química resueltos y se imparten 4 horas de clases prácticas por semana. • DESARROLLO DE UN PROYECTO: Como integración de los conceptos de la primera parte y de conocimientos previos de las unidades de operación y reacción, se desarrollan en grupos un Proyecto de Diseño de un caso base
Métodos de Evaluación	**Para regularidad**: • Los alumnos deben asistir al 80 % de las clases prácticas. • Deben realizar y aprobar un proyecto de diseño de un caso base con su respectiva recuperación • Deben rendir y aprobar 1 evaluación parcial escrita de la segunda parte, con su respectiva recuperación. • Se deben presentar y aprobar el 100% de los trabajos prácticos **Para aprobación**: Examen final integrador – Oral y/o Escrito.
Condiciones de aprobación	Aprobar el examen final integrador con nota según reglamento de la FACET.
Contenidos mínimos del Plan de Estudios	Procedimientos de síntesis de procesos: Descomposición del proceso en un subconjunto de problemas más simples. Orden de precedencia en el desarrollo del proceso (selección y determinación de las materias primas, caminos de reacción, de corrientes de entrada y salida, reciclos, purgas del proceso). Identificación de las variables de diseño importantes y de interacciones entre unidades del proceso. Uso de reglas heurísticas para definir la estructura del proceso y los valores de las variables de diseño. Síntesis de subsistemas: unidades de separación y redes de intercambio calórico. Identificación de las variables de diseño importantes y de interacciones entre unidades de proceso. Optimización de procesos: formulación y resolución.

Programa analítico de contenidos	T.1: SÍNTESIS, ANÁLISIS Y DISEÑO DE PROCESOS Síntesis basada en niveles de decisión y heurísticos. Naturaleza de la síntesis, análisis y diseño de procesos. El aspecto creativo del diseño de procesos. Procedimientos de síntesis de procesos: Descomposición del proceso en un subconjunto de problemas más simples. Orden de precedencia en el desarrollo del proceso (selección y determinación de las materias primas, caminos de reacción, de corrientes de entrada y salida, reciclos, purgas del proceso). Identificación de las variables de diseño importantes y de interacciones entre unidades del proceso. Uso de reglas heurísticas para definir la estructura del proceso y los valores de las variables de diseño. Estudio de casos. T.2: DESARROLLO DE UN CASO BASE Búsqueda de información y datos para el diseño. Métodos de diseño rápido para unidades de proceso. Simulación. Uso de UniSim. Información y datos para el diseño: Predicción de propiedades termodinámicas de gases y líquidos. Deducción de reglas generales para la especificación de variables de diseño de unidades de proceso (Inter- cambiadores de calor, separadores flash, condensadores parciales, destilación, absorción). Métodos de diseño rápidos para columnas de separación de mezclas multicomponentes (destilación y absorción). Métodos empíricos (cálculo de Nmin y Rmin) y métodos de grupo. Simulación. Estrategias modular, secuencial y orientada a ecuaciones. Ventajas y desventajas. Aplicaciones a problemas industriales usando UniSim. T.3: SÍNTESIS DEL SISTEMA DE SEPARACIÓN Y DE REDES DE INTERCAMBIO DE CALOR El sistema de separación: Estructura general del sistema de separación. Sistema de separación de va- por: Selección del método de separación (condensación, absorción y adsorción). Sistema de separación de líquidos: Selección del método de separación (destilación, destilación extractiva, destilación azeotrópica, destilación reactiva, extracción, cristalización, adsorción, reacción). Determinación de la secuencia de columnas de destilación mediante el uso de reglas heurísticas. Métodos de ahorro de energía en des- tilación: Sistemas de recompresión de vapores. Sistemas de múltiple efecto. Redes de intercambio calórico: Objetivos a plantear en problemas de integración energética. Concepto de ¨punto de corte¨. Significado y utilidad. Diseño de redes según los objetivos de máxima recuperación energética, mínimo número de unidades. Compromiso entre ahorro energético e inversión. Uso de servicios auxiliares múltiples. Integración calórica entre columnas de destilación y el resto del proceso.

Programa analítico de contenidos (continuación)	T.4: OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS Métodos de programación matemática en problemas restringidos con variables continuas y binarias. Uso de GAMS. Organización del problema de optimización. El sistema. Alternativas para la representación de su estructura. Grados de libertad y restricciones del sistema. La función objetivo. Criterios de selección. Procedimiento general para optimizar. Optimización de funciones de una variable sin restricciones. Métodos analíticos. Condiciones para la existencia de extremos. Unimodalidad. Métodos numéricos. Métodos de eliminación de regiones. Métodos de aproximaciones polinomiales. Métodos que requieren evaluación de derivadas. Optimización de funciones multivariable sin restricciones. Condiciones para la existencia de extremos. Métodos de búsqueda directa: búsqueda univariante, simplex, Hooke-Jeeves y Powell. Métodos indirectos de primer orden: gradiente (Cauchy), gradiente conjugado (Fletcher-Reeves). Métodos indirectos de segundo orden: Newton, quasi-Newton (Davidson-Fletcher-Powell). Optimización de sistemas secuencia- les. Optimización con restricciones. Programación lineal. Programación no lineal: Multiplicadores de Lagran- ge. Multiplicadores de Kuhn-Tucker. Funciones de penalidad. Métodos de búsqueda directa con restricciones. Programación cuadrática sucesiva. Introducción al entorno de programación GAMS. Optimización con variables binarias y continuas. Proposiciones lógicas. Algebra de Boole. Introducción de cortes binarios. El problema MILP. Método Branch and Bound. El problema MINLP. Estrategias de solución.