



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

**PROFESORES:**

Dr. Mg. Ing. Rosa Ana Rodríguez

**COLABORADORES:**

Dr. Ing. Gustavo Scaglia  
Mg. Ing. Cristina Deiana  
Dr. Ing. Marcelo Echeagaray  
Ing. Martha Vallejo  
Dra. Ing. Anabel Fernández  
Ing. Daniela Zalazar

Segundo semestre de 2020



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 Obligatorio para Alumnos inscriptos en la Maestría en Tecnologías Ambientales
- Curso de Perfeccionamiento para Profesionales

**Equipo Docente:**

**Profesor:**

Dr. Mg. Ing. Rosa Ana Rodriguez

**Colaboradores:**

Dr. Ing. Gustavo Scaglia

Mg. Ing. Cristina Deiana

Ing. Marcelo Echegaray

Ing. Martha Vallejo

Dra. Ing. Anabel Fernandez

Ing. Daniela Zalazar

**Asignación horaria:** 150 horas totales  
70 horas presenciales

**Modalidad:** Clases teóricas y seminarios prácticos

Por razones de fuerza mayor, de público conocimiento, se implementará el dictado del curso a través de clases virtuales teórico prácticas con resolución de casos prácticos. Además, se apoyará el Curso en Bibliografía virtual, Videos explicativos, Seminarios virtuales a través de Plataformas externas, Sistemas de Computación de acceso remoto y Foros de Comunicación y Consultas entre otras herramientas virtuales. Como plataforma base se utilizará el Campus Virtual de la UNSJ, dentro del cual se ha creado este curso, y a través del cual se manejará la provisión de material digitalizado, el dictado de clases online utilizando el software Big Blue Button®, como así también los mecanismos de evaluación. Estas tareas se llevarán a cabo dentro del marco de la Resolución 616/20-D.

**Período de dictado:** Desde el 25 de setiembre al 31 de octubre de 2020

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

**Lugar de dictado:** Campus virtual UNSJ

**Cupo:** 15 asistentes

**Arancel:** \$ 4000 (se otorgarán becas parciales para personal de la UNSJ)



MINISTERIO DE EDUCACIÓN  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN JUAN



INSTITUTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



FACULTAD DE INGENIERÍA

1939 - 2014

**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. Todas estas tareas se llevarán a cabo utilizando la plataforma del Campus virtual de la UNSJ.





## 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

Modelos termodinámicos. Principios de la termodinámica. Modelos de predicción de propiedades. Análisis termodinámico de los procesos. Cálculo del trabajo ideal. Trabajo perdido. Análisis termodinámico de procesos de flujo en estado uniforme. Aplicaciones.

### UNIDAD III

Modelos basados en fenómenos de transporte. Modelos de procesos basados en ecuaciones diferenciales. Estimación de parámetros. Modelos en ecuaciones diferenciales parciales. Funciones de transferencia. La función de transferencia como modelo de proceso. Modelos de balance de población. Balances generales de población.

### 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 y control dinámico de un bioproceso. Ejemplos de aplicación.

## 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.
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.





MINISTERIO DE EDUCACIÓN  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN JUAN



INSTITUTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



FACULTAD DE INGENIERÍA

1939 - 2014

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.

