

IQ774 MODELACION DE PROCESOS QUIMICOS

08 UD (3-1-4)

REQUISITOS: IQ56A OPERACIONES DE TRANSFERENCIA II (S)/AUTOR

OBJETIVOS:

Aplicación de técnicas de modelación matemática y computacionales a la simulación de procesos químicos en estado estacionario.

METODOLOGIA

Dos clases de 1 ½ horas cada una a la semana. Se contempla además la ejecución de programas de computación para aplicar las técnicas consideradas.

EVALUACION

Dos controles, un examen y tareas

Programa

1. Introducción

- 1.1 ¿Qué es la simulación?
- 1.2 ¿Cómo organizar la simulación de una planta química?
- 1.3 Los programas ejecutivos

2. DE LA PLANTA AL COMPUTADOR

- 2.1 Del flow-Sheet de la planta al diagrama de flujo de información
- 2.2 De la información al problema numérico
- 2.3 Planificación de los cálculos
- 2.4 El problema del reciclo
- 2.5 Cálculo de sistemas con reciclos, el método de Nagiev

3. SOLUCIONES DE ECUACIONES ALGEBRAICAS

- 3.1 Ecuaciones explícitas e implícitas
- 3.2 Método de sustituciones sucesivas
- 3.3 Método de Wegstein
- 3.4 Método de Newton

4. SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES

- 4.1 Ecuaciones independientes
- 4.2 Reducción de Gauss-Jourdan

5. SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES

- 5.1 Método de Procedencia-Ordenación
- 5.2 Método de corte
- 5.3 Iteración sin usar derivadas parciales
- 5.4 Iteración con el uso de derivadas parciales

6. LA SOLUCION MODULAR Y LA MODELACION

- 6.1 División y sumador de flujos
- 6.2 Mezclador
- 6.3 Tanque reactor
- 6.4 Intercambiador de calor

7. SISTEMAS DE EQUILIBRIO MULTICOMPONENTES

- 7.1 Cálculo de entalpía
- 7.2 Cálculo de pts. de burbujas y rocío
- 7.3 Cambios de fase generalizados
- 7.4 Evaporador Flash
- 7.5 Destilación Batch
- 7.6 Sistemas en etapas

8. EJEMPLOS A RESOLVER

- 8.1 El proceso Haber
- 8.2 Planta de Otto y Williams
- 8.3 Planta de Butadieno

Bibliografía:

- 1. Crowe et al: "Chemical Plant Simulation", Prentice-Hall, 1971
- 2. Nagiev "The theory of Recycle Processes in Chemical Engineering" Mac Millan, 1964
- 3. Franks, R. "Modeling and Simulation in Chemical Eng.". Wiley, 1972
- 4. Henley & Rosen: "Material and Energy Balance Computations" Wiley, 1969
- 5. Myers & Seider: "Introducción to Chemical Engineering and Computer Calculations". Prentice Hall, 1976.
- 6. Felder & Rousseau: "Elementary Principles of Chemical Processes", Wiley, 1978