



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Ref. Expte. N° 1115/2020

Ciudad Autónoma de Buenos Aires, 28 de septiembre de 2020

VISTO:

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Industrias, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Ciencia de Datos Aplicada a Procesos Químicos** para el año 2020,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,
lo actuado por la Comisión de Posgrado,
lo actuado por la Comisión de Presupuesto y Administración,
lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada en el día de la fecha,
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD
DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
RESUELVE:**

ARTÍCULO 1°: Aprobar el nuevo curso de posgrado **Ciencia de Datos Aplicada a Procesos Químicos** de 63 horas de duración, que será dictado por el Dr. Gabriel Horowitz con la colaboración del Dr. Mauricio Maestri.

ARTÍCULO 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Ciencia de Datos Aplicada a Procesos Químicos** para su dictado en el segundo cuatrimestre de 2020.

ARTÍCULO 3°: Aprobar un puntaje máximo de tres(3) puntos para la Carrera del Doctorado.

ARTÍCULO 4°: Disponer que de no mediar modificaciones en el programa, la carga horaria y el arancel, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

ARTÍCULO 5°: Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Dirección de Movimiento de Fondos, a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido, archívese.

RESOLUCIÓN CD N° 0857


Dr. PABLO J. GROISMAN
Secretario Adjunto de Posgrado
FCEyN - USA


Dr. JUAN CARLOS REBORADA
DECANO

CIENCIA DE DATOS APLICADA A PROCESOS QUÍMICOS

Materia optativa de la Carrera

Duración: 63 horas de clases (9 hs/semana repartidas en clases teóricas, de problemas y seminarios).

Fundamento y Objetivo:

El origen de la inquietud de esta materia es un cambio tecnológico que se está dando en la industria de procesos químicos y que está cambiando la forma de tomar decisiones, poniendo a disposición de los procesistas y jefes de laboratorio herramientas cuantitativas de soporte a la toma de decisiones. Este fenómeno se expresa en la aparición de herramientas de Aprendizaje de Máquinas en los laboratorios y en los procesos químicos. Estas técnicas tienen su origen en la computación y la matemática aplicada. En el ámbito de la química general y la industrial en particular, la utilización de herramientas provenientes de otros ámbitos no es una novedad. La adopción del estudio de los fenómenos de transporte al diseño de procesos impulsada inicialmente por Lewis y cristalizada en el famoso libro de Lightfoot, Bird y Stewart es un ejemplo claro de la riqueza que, la adopción de estas herramientas de la física, le aportó a las materias dictadas en el departamento de industrias.

Por otro lado, esta interacción también aportó enormemente a las disciplinas de origen. Ejemplo de eso es el aporte del propio Stewart a la resolución de ecuaciones diferenciales por el método de colocaciones ortogonales. En el futuro, las herramientas de soporte a la toma de decisiones con métodos cuantitativos serán otro ámbito en que la química podrá nutrirse y nutrir a otras disciplinas.

En el presente contexto tecnológico, el objetivo de la materia es brindar una actualización a los estudiantes graduados de la Lic. en Ciencias Químicas sobre las nuevas tecnologías de soporte a la toma de decisiones basadas en métodos cuantitativos. Estas herramientas les serán de gran utilidad en el futuro, tanto en el ámbito de la industria como en el de la academia.

Contenidos Básicos:

Adquisición, análisis y filtrado de datos de procesos continuos. Estadística descriptiva y Clustering. Métodos de inferencia de variables no medidas en el proceso basados en datos y basados en primeros principios. Métodos de detección y diagnóstico de fallas basados en datos y basados en primeros principios. Optimización de procesos basados en datos y basados en experimentos. Métodos de caja negra.

Programa Analítico:

Unidad 1

Introducción a la toma de decisiones cuantitativa.

Contexto tecnológico del surgimiento de las herramientas informáticas de soporte a la toma de decisiones. Impacto en la industria de procesos y en el laboratorio.

Unidad 2

Adquisición, análisis y filtrado de datos de procesos.

Historiadores de datos de procesos: Algoritmos de guardado de datos en plantas químicas y su efecto sobre la calidad de datos. Filtros aplicables a procesos químicos y tiempos característicos de procesos químicos. **Estadística descriptiva.** **Reconciliación de datos de procesos continuos:** Balances de masa como modelo fundamental de la

reconciliación de los procesos químicos continuos. Aplicación en el ámbito de la planta industrial, el laboratorio y la planta piloto.**Clustering:** Clusterizar procesos continuos con varios estados estacionarios.**Análisis de componentes principales:**Aplicación a la selección de dominios de modelos de primeros principios en la industria de procesos. TP: 1- Diagnóstico de fallas de caudalímetros de una planta petroquímica por reconciliación de datos. 2- Segmentación automática de imágenes por clusterización.

Unidad 3

Métodos de inferencia de variables no medidas en procesos.

Métodos de inferencia de variables basados en datos:modelos compatibles con espectrofotometría y modelos compatibles con balances de materia.**Métodos de inferencia de variables basados en primeros principios:**Método de residuos estructurados.

TP: 1- Inferencia de temperatura de un plato de columna de destilación utilizando cuadrados mínimos parciales. 2- Inferencia de ensuciamiento de un intercambiador de calor basado en modelos de primeros principios.

Unidad 4

Métodos de diagnóstico de fallas en procesos.

Métodos de diagnóstico de fallas en procesos basados en datos:Validez de la suposición de linealidad en cinética química. Relación costo beneficio de métodos no lineales. Detección de instrumentos fallados en procesos continuos.

Métodos de diagnóstico de fallas en procesos basados en primeros principios:Óptimo costo beneficio de la complejidad de los modelos de primeros principios.

TP: 1- Diagnóstico de falla en un manómetro de una columna de destilación basado en análisis de componentes principales. 2- Diagnóstico de coquización de catalizador de un reactor de steam reforming basado en modelo de primeros principios. 3- Diagnóstico de fallas en un proceso piloto basado en residuos estructurados

Unidad 5

Optimización de procesos.

Métodos de optimización de procesos basados en datos:Aplicación al control de calidad en el laboratorio. Selección de variables.**Métodos de optimización de procesos basados en experimentos:**Diseño de experimentos en laboratorio. Diseño de experimentos para el ajuste de modelos de primeros principios.

TP: 1- Optimización de gestión de proyectos basada árboles de decisión. 2- Diseño de experimentos para la optimización de intercambiador de calor simulado.

Bibliografía

Bibliografía

1. Fault Diagnosis: Models, Artificial Intelligence, Applications. Józef Korbicz , Jan M. Koscielny, Zdzislaw Kowalczyk , Wojciech Cholewa, 2004, Springer, ISBN-13:978-3540407676.
2. Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems, Aurélien Géron, 2019, O'Reilly Media, ISBN-13:978-1492032649.

3. Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques (Morgan Kaufmann Series in Data Management Systems) (Inglés) 4th Edición, Ian H. Witten, Eibe Frank, Mark A. Hall, Christopher J. Pal, 2017, Morgan Kaufmann, ISBN-13: 978-0128042915
4. Automatic Kick Detection Method and Preliminary Results, Mauricio Ibarra, Jonatan Medina, Cristian Romero, Denis Bogino, Raúl Krasuk, Gabriel Horowitz, SPE ONE Petro, <https://doi.org/10.2118/179183-MS>
5. Automatic Qualitative Trend Simulation method for diagnosing faults in industrial processes, Mauricio Maestri, Miryan Cassanello, Gabriel Horowitz, Computers and Chemical Engineering, Vol. 64, (2014), Pag. 55–62.
6. Kernel PCA Performance in Processes with Multiple Operation Modes, Mauricio Maestri, Miryan Cassanello, Gabriel Horowitz, Chemical Product and Process Modeling, Vol. 4, Iss. 5, Article 4 (2009) Disponible en: <http://www.bepress.com/.ISSN> (Online) 1934- 2659
7. A robust clustering method for detection of abnormal situations in a process with multiple steady-state operation modes, Mauricio Maestri, Pablo Groisman, Andrés Farall, Miryan Cassanello, Gabriel Horowitz, Computers and Chemical Engineering, Vol 34, iss 2, (2010), Pag. 223-231.

Puntaje propuesto : 3 puntos
Correlativas: Química Industrial (TP)