Guia docent
820532 - SOPQ - Simulació i Optimització de Processos Químics

Última modificació: 01/07/2026

Unitat responsable: Escola d'Enginyeria de Barcelona Est
Unitat que imparteix: 713 - EQ - Departament d'Enginyeria Química.

Titulació: GRAU EN ENGINYERIA QUÍMICA (Pla 2009). (Assignatura obligatòria).

Curs: 2026 **Crèdits ECTS:** 6.0 **Idiomes:** Català

PROFESSORAT

Professorat responsable: MOISES GRAELLS SOBRE

Altres:

Primer quadrimestre:
FABIAN LECHTENBERG - Grup: T1
ALBA ÁGUEDA COSTAFREDA - Grup: T1
MOISES GRAELLS SOBRE - Grup: T1

Segon quadrimestre:
FABIAN LECHTENBERG - Grup: M12
ALBA ÁGUEDA COSTAFREDA - Grup: M12
MOISES GRAELLS SOBRE - Grup: M11

CAPACITATS PRÈVIES

Capacitat suficient de comunicació escrita. Aprenentatge autònom.

REQUISITS

OPERACIONS BÀSIQUES I - Prerequisit
OPERACIONS BÀSIQUES II - Corequisit

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Específiques:
2. Capacitat per analitzar, dissenyar, simular i optimitzar processos i productes.

Transversals:
1. ÚS SOLVENT DELS RECURSOS D'INFORMACIÓ - Nivell 3: Planificar i utilitzar la informació necessària per a un treball acadèmic (per exemple, per al treball de fi de grau) a partir d'una reflexió crítica sobre els recursos d'informació utilitzats.

METODOLOGIES DOCENTS

L'assignatura utilitza la metodologia expositiva en un 20 %, el treball en grup a l'aula en un 20%, treball individual en un 20%, el treball en grup en un 20%.
La competència "ús solvent del recursos d'informació", que es la que es qualifica en aquesta assignatura, s'avaluarà en el projecte d'assignatura, així com dins de la realització dels exàmens parcial i final.

OBJECTIUS D'APRENENTATGE DE L'ASSIGNATURA

Saber formular sistemàticament balanços de matèria i d'energia en estat estacionari.
Saber preparar esquemes de càlcul automàtic eficients per a la resolució de balanços de matèria i d'energia (ideals/lineals) en estat estacionari utilitzant el full de càlcul (Excel).
Saber preparar esquemes de càlcul automàtic eficients per a la resolució de balanços de matèria i d'energia (ideals/lineals) en estat estacionari utilitzant i llenguatges de modelat algebraic (GAMS).
Saber distingir la simulació seqüencial-modular de la simulació orientada a equacions.
Saber incorporar mètodes numèrics per al càlcul de propietats termodinàmiques i de transport (no ideals/no lineals) programant el full de càlcul (Excel VBA).
Saber buscar informació solvent sobre propietats termodinàmiques, i seleccionar i ajustar models termodinàmics que reprodueixin el comportament experimental de les mescles (ELV).
Saber simular processos complexos en estat estacionari utilitzant diversos simuladors comercials de processos químics (UniSim, VMGSim, AspenHYSYS, AspenPlus, etc.)

HORES TOTALS DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup gran	30,0	20.00
Hores grup petit	30,0	20.00
Hores aprenentatge autònom	90,0	60.00

Dedicació total: 150 h

CONTINGUTS

Tema 1. Introducció

Descripció:
Modelització, simulació, optimització i presa de decisions. Definicions: Model, variable, paràmetres, restriccions i funció objectiu. Limitació dels models. El temps de càlcul com a variable del problema. Càlculs preliminars: estimacions, acotacions y heurístiques. Exercicis.

Objectius específics:
Aprendre a modelitzar, analitzar i a simular processos químics en estat estacionari. Aprendre a programar funcions d'usuari per a la resolució numèrica de les equacions dels models i per al càlcul de propietats termodinàmiques. Aprendre a ajustar els paràmetres d'un model.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb suport Excel.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

Tema 2. Balanç de matèria en estat estacionari

Descripció:
La fulla de càlcul. Justificació de l'eina. Interfase d'usuari. Control de variables, paràmetres i restriccions. Programació de macros. Graus de llibertat. Limitacions del model. Exercicis pràctics.

Objectius específics:
Aprendre a modelitzar, analitzar i a simular processos químics en estat estacionari. Aprendre a programar funcions d'usuari per a la resolució numèrica de les equacions dels models i per al càlcul de propietats termodinàmiques. Aprendre a ajustar els paràmetres d'un model.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb suport Excel.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

Tema 3. Balanç d'energia en estat estacionari

Descripció:
Càlcul de les temperatures de les corrents de procés. Suposicions i limitacions del model. Capacitats calorífiques en funció de la temperatura. Integració numèrica i programació de funcions d'usuari. Exercicis pràctics.

Objectius específics:
Aprendre a modelitzar, analitzar i a simular processos químics en estat estacionari. Aprendre a programar funcions d'usuari per a la resolució numèrica de les equacions dels models i per al càlcul de propietats termodinàmiques. Aprendre a ajustar els paràmetres d'un model.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb suport Excel.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

Tema 4. Models i modelització

Descripció:
El model com a abstracció de la realitat. Models gràfics. Analogies amb models cartogràfics. Propòsit i utilitat dels models. Nivell de detall. Limitació dels models. Elecció del model. Possibles errors derivats de l'elecció del model. Exercicis.

Objectius específics:
Aprendre a modelitzar, analitzar i a simular processos químics en estat estacionari. Aprendre a programar funcions d'usuari per a la resolució numèrica de les equacions dels models i per al càlcul de propietats termodinàmiques. Aprendre a ajustar els paràmetres d'un model.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb suport Excel.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

Tema 5. Càlcul de propietats físiques

Descripció:
Gas ideal i gas de Van der Waals. Resolució iterativa de l'equació cúbica. Equació de Peng-Robinson. Equilibri Líquid-Vapor (ELV). Equació d'Antoine i ajust de paràmetres amb l'eina Solver. Regressió no lineal. Cas general: reconciliació de dades. Programari disponible per al càlcul de propietats (Add-ins gratuïts, Bases de dades comercials, etc.). Exercicis pràctics.

Objectius específics:
Aprendre a modelitzar, analitzar i a simular processos químics en estat estacionari. Aprendre a programar funcions d'usuari per a la resolució numèrica de les equacions dels models i per al càlcul de propietats termodinàmiques. Aprendre a ajustar els paràmetres d'un model.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb suport Excel.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

Tema 6. Simuladors comercials - I

Descripció:
Introducció a HYSYS. Components, base de dades i components hipotètics. Models termodinàmics (Fluid Package) les seves limitacions. Exemples. Corrents de procés, operacions i diagrama de flux. Operació mesclador. Estudio dels graus de llibertat. Exercicis pràctics.

Objectius específics:
Aprendre a utilitzar simuladors comercials de processos per simular processos en estat estacionari. Aprendre a reconèixer les limitacions dels models simulats i a detectar els errors de modelat.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb el paquet de Simulació Comercial Hysys.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

Tema 7. Simuladors comercials - II

Descripció:
Simulació d'operacions. Destil·lació multicomponent. Simulació pas a pas. Graus de llibertat. Especificacions. Visualització i anàlisis de resultats. Perfils de separació. Simulació d'opcions de millora. Definició de una funció objectiu. Eina Case Study. Exercicis pràctics.

Objectius específics:
Aprendre a utilitzar simuladors comercials de processos per simular processos en estat estacionari. Aprendre a reconèixer les limitacions dels models simulats i a detectar els errors de modelat.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb el paquet de Simulació Comercial Hysys.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

Tema 8. Simuladors comercials - III

Descripció:
Simulació de processos. Simulació seqüencial-modular. Conexió de mòduls. Errors de modelat i conveniència d'estimacions preliminars. Exemple: Integració energètica i violació del segon principi. Exercicis pràctics.

Objectius específics:
Aprendre a utilitzar simuladors comercials de processos per simular processos en estat estacionari. Aprendre a reconèixer les limitacions dels models simulats i a detectar els errors de modelat.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb el paquet de Simulació Comercial Hysys.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

Tema 9. Simuladors comercials - IV

Descripció:
Sistemes amb recció química. Models de HYSYS: Conversió, Equilibri, Cinètic. Sistemes amb recirculació i càlcul de la corrent de recirculació. Exercicis pràctics amb HYSYS. Programari comercial: apunts sobre ASPEN Plus, PRO/II, ChemCAD, ProSim, SuperPro Designer i el mercat dels simuladors de processos. Exercicis pràctics amb APENPlus.

Objectius específics:
Aprendre a utilitzar simuladors comercials de processos per simular processos en estat estacionari. Aprendre a reconèixer les limitacions dels models simulats i a detectar els errors de modelat.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb els paquets de Simulació Comercial Hysys i APENPlus.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

Tema 10. Processos dinàmics

Descripció:
Desenvolupament d'un exemple simple de procés dinàmic discontionu: el reactor discontinu. Resolució d'equacions diferencials en Excel (Euler i RK4). Efecte i elecció del pas d'integració. Programació de funcions d'usuari. Generalitat del mètode numèric. Processos continus i discontinus. Exercicis pràctics.

Objectius específics:
Aprendre a modelitzar, analitzar i a simular processos químics en estat transitori.

Activitats vinculades:
Exercicis de supòsits relacionats amb el contingut del tema, realitzats amb suport Excel.

Dedicació: 8h
Grup gran/Teoria: 3h
Aprenentatge autònom: 5h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

Qualsevol acte de frau acadèmic, plagi, ús o tinença a l'abast de mitjans no autoritzats en qualsevol activitat d'avaluació comportarà la qualificació de zero (0) en la prova o lliurament afectat. A més, d'acord amb la normativa de la Universitat, la possible derivació dels fets per a l'obertura d'un expedient disciplinari implicarà que l'assignatura quedi en l'estat provisional de "pendent d'avaluació" fins a la resolució de l'expedient. La gestió d'aquestes incidències es desplega d'acord amb el **Marc d'actuació per a la integritat acadèmica en l'avaluació de la UPC**.

1. Problemes 25%
2. Examen Parcial 25%
3. Examen Final 25%
4. Projecte de simulació 25%. No hi ha examen de reavaluació.

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

Les proves es realitzaran individualment a l'aula informàtica. Consistiran en l'elaboració de solucions a una proposta de simulació, total o parcial, d'un procés i s'hauran de presentar en format digital i lliurar a través d'ATENEA dins del termini de temps prefixat pel professorat.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Skogestad, Sigurd. Chemical and energy process engineering. Boca Raton: CRC Press, cop. 2009. ISBN 9781420087550.
- Ghasem, Nayef; Henda, Redhouane. Principles of chemical engineering processes. Boca Raton, FL: CRC Press, cop. 2009. ISBN 9781420080131.
- Gmehling, Jürgen; Kleiber, Michael; Kolbe, Bärbel; Bärbel, Jürgen. Chemical thermodynamics for process simulation. Second edition. Weinheim, Germany: Wiley, 2019. ISBN 9783527343256.
- Finlayson, Bruce A. Introduction to chemical engineering computing. Hoboken, N.J: Wiley Interscience, cop. 2006. ISBN 0471740624.
- Gil Chaves, Iván Darío; López, Javier Ricardo Guevara; García Zapata, José Luis; Leguizamón Robayo, Alexander; Rodríguez Niño, Gerardo. Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering [en línia]. Cham: Springer International Publishing, 2016 [Consulta: 30/06/2023]. Disponible a: https://discovery.upc.edu/permalink/34CSUC_UPC/rdgucl/alma991004876355706711. ISBN 3319148125.

Complementària:

- Arpe, Hans-Jürgen. Industrial organic chemistry. 5th completely revised ed. Weinheim, Germany: WileyVCH, 2010. ISBN 9783527320028.
- Shreve, Randolph Norris; Austin, George T. Shreve's chemical process industries. 5th ed. New York [etc.]: McGraw-Hill Book Company, cop. 1984. ISBN 0070571473.
- Kent, James Albert. Kent and Riegel's Handbook of Industrial Chemistry and Biotechnology [en línia]. Eleventh Edition. Boston, MA: Springer US, 2007 [Consulta: 20/09/2023]. Disponible a: https://discovery.upc.edu/permalink/34CSUC_UPC/rdgucl/alma991001811119706711. ISBN 9780387278438.