Guía docente
820532 - SOPQ - Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Última modificación: 01/07/2026

Unidad responsable: Escuela de Ingeniería de Barcelona Este
Unidad que imparte: 713 - EQ - Departamento de Ingeniería Química.

Titulación: GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA (Plan 2009). (Asignatura obligatoria).

Curso: 2026 **Créditos ECTS:** 6.0 **Idiomas:** Catalán

PROFESORADO

Profesorado responsable: MOISES GRAELLS SOBRE

Otros:

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

CAPACIDADES PREVIAS

Capacidad suficiente de comunicación escrita. Aprendizaje autónomo.

REQUISITOS

OPERACIONS BÀSIQUES I - Prerequisit
OPERACIONS BÀSIQUES II - Corequisit

COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN A LAS QUE CONTRIBUYE LA ASIGNATURA

Específicas:
2. Capacidad para el análisis, diseño, simulación y optimización de procesos y productos.

Transversales:
1. USO SOLVENTE DE LOS RECURSOS DE INFORMACIÓN - Nivel 3: Planificar y utilizar la información necesaria para un trabajo académico (por ejemplo, para el trabajo de fin de grado) a partir de una reflexión crítica sobre los recursos de información utilizados.

METODOLOGÍAS DOCENTES

La asignatura utiliza la metodología expositiva en un 20%, el trabajo en grupo en el aula en un 20%, el trabajo individual en un 20%, el trabajo en grupo en un 20%.
La competencia "uso solvente de recursos de información", que es la que corresponde calificar en esta asignatura, se evaluará en el proyecto de asignatura, así como en la realización los exámenes parcial y final.

OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Saber formular sistemáticamente balances de materia y de energía en estado estacionario.
Saber preparar esquemas de cálculo automático eficientes para la resolución de balances de materia y de energía (ideales / lineales) en estado estacionario utilizando la hoja de cálculo (Excel).
Saber preparar esquemas de cálculo automático eficientes para la resolución de balances de materia y de energía (ideales / lineales) en estado estacionario utilizando y lenguajes de modelado algebraico (GAMS).
Saber distinguir la simulación secuencial-modular de la simulación orientada a ecuaciones.
Saber incorporar métodos numéricos para el cálculo de propiedades termodinámicas y de transporte (no ideales / no lineales) programando la hoja de cálculo (Excel VBA).
Saber buscar información solvente sobre propiedades termodinámicas, y seleccionar y ajustar modelos termodinámicos que reproduzcan el comportamiento experimental de las mezclas (ELV).
Saber simular procesos complejos en estado estacionario utilizando diversos simuladores comerciales de procesos químicos (UNIS, VMGSim, AspenHYSYS, AspenPlus, etc.)

HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTADO

Tipo	Horas	Porcentaje
Horas grupo grande	30,0	20.00
Horas grupo pequeño	30,0	20.00
Horas aprendizaje autónomo	90,0	60.00

Dedicación total: 150 h

CONTENIDOS

(CAST) Tema 1. Introducció

Descripción:
Modelización, simulación, optimización y toma de decisiones. Definiciones: Modelo, variable, parámetros, restricciones y función objetivo. Limitación de los modelos. El tiempo de cálculo como variable del problema. Cálculos preliminares: estimaciones, acotaciones y heurísticas. Ejercicios.

Objetivos específicos:
Aprender a modelizar, analizar y simular procesos químicos en estado estacionario. Aprender a programar funciones de usuario para la resolución numérica de las ecuaciones de los modelos y para el cálculo de propiedades termodinámicas. Aprender a ajustar los parámetros de un modelo.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

(CAST) Tema 2. Balance de matéria en estado estacionario

Descripción:
La hoja de cálculo. Justificación de la utilización de esta herramienta. Interfase de usuario. Control de variables, parámetros y restricciones. Programación de macros. Grados de libertad. Limitaciones del modelo. Ejercicios prácticos.

Objetivos específicos:
Aprender a modelizar, analizar y simular procesos químicos en estado estacionario. Aprender a programar funciones de usuario para la resolución numérica de las ecuaciones de los modelos y para el cálculo de propiedades termodinámicas. Aprender a ajustar los parámetros de un modelo.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

(CAST) Tema 3. Balance de energía en estado estacionario

Descripción:
Cálculo de las temperaturas de las corrientes de proceso. Suposiciones y limitaciones del modelo. Capacidades caloríficas en función de la temperatura. Integración numérica y programación de funciones de usuario. Ejercicios prácticos.

Objetivos específicos:
Aprender a modelizar, analizar y simular procesos químicos en estado estacionario. Aprender a programar funciones de usuario para la resolución numérica de las ecuaciones de los modelos y para el cálculo de propiedades termodinámicas. Aprender a ajustar los parámetros de un modelo.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

(CAST) Tema 4. Modelos y modelización

Descripción:
El modelo como abstracción de la realidad. Modelos gráficos. Analogías con modelos cartográficos. Propósito y utilidad de los modelos. Nivel de detalle. Limitación de los modelos. Elección del modelo. Posibles errores derivados de la elección del modelo. Ejercicios.

Objetivos específicos:
Aprender a modelizar, analizar y simular procesos químicos en estado estacionario. Aprender a programar funciones de usuario para la resolución numérica de las ecuaciones de los modelos y para el cálculo de propiedades termodinámicas. Aprender a ajustar los parámetros de un modelo.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

(CAST) Tema 5. Cálculo de propiedades físicas

Descripción:
Gas ideal y gas de Van der Waals. Resolución iterativa de la ecuación cúbica. Ecuación de Peng-Robinson. Equilibrio Líquido-Vapor (ELV). Ecuación de Antoine y ajuste de parámetros con la herramienta Solver. Regresión no lineal. Caso general: reconciliación de datos. Software disponible para el cálculo de propiedades (Add-ins gratuitos, Bases de datos comerciales, etc.). Ejercicios prácticos.

Objetivos específicos:
Aprender a modelizar, analizar y simular procesos químicos en estado estacionario. Aprender a programar funciones de usuario para la resolución numérica de las ecuaciones de los modelos y para el cálculo de propiedades termodinámicas. Aprender a ajustar los parámetros de un modelo.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

(CAST) Tema 6. Simuladores comerciales - I

Descripción:
Introducción a HYSYS. Componentes, base de datos y componentes hipotéticos. Modelos termodinámicos (Fluid Package) sus limitaciones. Ejemplos. Corrientes de proceso, operaciones y diagrama de flujo. Operación mezclador. Estudio de los grados de libertad. Ejercicios prácticos.

Objetivos específicos:
Aprender a utilizar simuladores comerciales de procesos para simular procesos en estado estacionario. Aprender a reconocer las limitaciones de los modelos simulados ya detectar los errores de modelado.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Hysys.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

(CAST) Tema 7. Simuladores comerciales - II

Descripción:
Simulación de operaciones. Destilación multicomponente. Simulación paso a paso. Grados de libertad. Especificaciones. Visualización y análisis de resultados. Perfiles de separación. Simulación de opciones de mejora. Definición de una función objetivo. Herramienta Case Study. Ejercicios prácticos.

Objetivos específicos:
Aprender a utilizar simuladores comerciales de procesos para simular procesos en estado estacionario. Aprender a reconocer las limitaciones de los modelos simulados ya detectar los errores de modelado.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Hysys.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

(CAST) Tema 8. Simuladores comerciales - III

Descripción:
Simulación de procesos. Simulación secuencial-modular. Conexión de módulos. Errores de modelado y conveniencia de estimaciones preliminares. Ejemplo: Integración energética y violación del segundo principio. Ejercicios prácticos.

Objetivos específicos:
Aprender a utilizar simuladores comerciales de procesos para simular procesos en estado estacionario. Aprender a reconocer las limitaciones de los modelos simulados ya detectar los errores de modelado.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Hysys.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

(CAST) Tema 9. Simuladores comerciales - IV

Descripción:
Sistemas con reacción química. Modelos de HYSYS: Conversión, Equilibrio, Cinético. Sistemas con recirculación y cálculo de la corriente de recirculación. Ejercicios prácticos con HYSYS. Software comercial: apuntes sobre ASPEN Plus, PRO / II, Chemcad, prosa, SuperPro Designer y el mercado de los simuladores de procesos. Ejercicios prácticos.

Objetivos específicos:
Aprender a utilizar simuladores comerciales de procesos para simular procesos en estado estacionario. Aprender a reconocer las limitaciones de los modelos simulados ya detectar los errores de modelado.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Hysys y APENPlus.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

(CAST) Tema 10. Procesos dinámicos

Descripción:
Desarrollo de un ejemplo simple de proceso dinámico discontinuo: el reactor discontinuo. Resolución de ecuaciones diferenciales en Excel (Euler y RK4). Efecto y elección del paso de integración. Programación de funciones de usuario. Generalidad del método numérico. Procesos continuos y discontinuos. Ejercicios prácticos.

Objetivos específicos:
Aprender a modelizar, analizar y simular procesos químicos en estado transitorio.

Actividades vinculadas:
Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

SISTEMA DE CALIFICACIÓN

Cualquier acto de fraude académico, plagio o uso o mera tenencia al alcance de medios no autorizados en cualquier actividad de evaluación comportará la calificación de cero (0) en la prueba o entrega afectada. Además, de acuerdo con la normativa de la Universidad, la posible derivación de los hechos para la apertura de un expediente disciplinario implicará que la asignatura quede en el estado provisional de "pendiente de evaluación" hasta la resolución del expediente. La gestión de estas incidencias se lleva a cabo de acuerdo con el **Marco de actuación para la integridad académica en la evaluación de la UPC**.

1. Problemas 25%
2. Examen Parcial 25%
3. Examen Final 25%
4. Proyecto de simulación 25%. No hay examen de reevaluación.

NORMAS PARA LA REALIZACIÓN DE LAS PRUEBAS.

Las pruebas se realizarán individualmente en el aula informática. Consistirán en la elaboración de soluciones a una propuesta de simulación, total o parcial, de un proceso y deberán presentarse en formato digital y entregar a través de ATENEA dentro del plazo de tiempo prefijado por el profesorado.

BIBLIOGRAFÍA

Básica:
- 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 línea]. Cham: Springer International Publishing, 2016 [Consulta: 30/06/2023]. Disponible a: https://discovery.upc.edu/permalink/34CSUC_UPC/rdgucl/alma991004876355706711. ISBN 3319148125.

Complementaria:
- 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 línea]. Eleventh Edition. Boston, MA: Springer US, 2007 [Consulta: 20/09/2023]. Disponible a: https://discovery.upc.edu/permalink/34CSUC_UPC/rdgucl/alma991001811119706711. ISBN 9780387278438.