

820532 - SOPQ - Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Unidad responsable: 295 - EEBE - Escuela de Ingeniería de Barcelona Este
Unidad que imparte: 713 - EQ - Departamento de Ingeniería Química
Curso: 2019
Titulación: GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA (Plan 2009). (Unidad docente Obligatoria)
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA (Plan 2009). (Unidad docente Obligatoria)
Créditos ECTS: 6 Idiomas docencia: Catalán, Inglés

Profesorado

Responsable: Moisés Graells Sobré
Otros: Moisés Graells Sobré

Horario de atención

Horario: Debe pedirse cita previa mediante correo electrónico institucional (@estudiant.upc.edu) o través de ATENEA.

Capacidades previas

Capacidad suficiente de comunicación escrita. Aprendizaje autónomo.

Requisitos

OPERACIONS BàSIQUES I - Prerequisit
OPERACIONS BàSIQUES II - Corequisit

Competencias de la titulación a las cuales 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

820532 - SOPQ - Simulación y Optimización de Procesos Químicos

/ 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

Dedicación total: 150h	Horas grupo grande:	30h	20.00%
	Horas grupo mediano:	0h	0.00%
	Horas grupo pequeño:	30h	20.00%
	Horas actividades dirigidas:	0h	0.00%
	Horas aprendizaje autónomo:	90h	60.00%

820532 - SOPQ - Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Contenidos

<p>(CAST) Tema 1. Introducció</p>	<p>Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h</p>
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.</p> <p>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.</p>	
<p>(CAST) Tema 2. Balance de materia en estado estacionario</p>	<p>Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h</p>
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.</p> <p>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.</p>	

820532 - SOPQ - Simulación y Optimización de Procesos Químicos

<p>(CAST) Tema 3. Balance de energía en estado estacionario</p>	<p>Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h</p>
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.</p> <p>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.</p>	
<p>(CAST) Tema 4. Modelos y modelización</p>	<p>Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h</p>
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.</p> <p>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.</p>	

820532 - SOPQ - Simulación y Optimización de Procesos Químicos

<p>(CAST) Tema 5. Cálculo de propiedades físicas</p>	<p>Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h</p>
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.</p> <p>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.</p>	
<p>(CAST) Tema 6. Simuladores comerciales - I</p>	<p>Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h</p>
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Hysys.</p> <p>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.</p>	

820532 - SOPQ - Simulación y Optimización de Procesos Químicos

<p>(CAST) Tema 7. Simuladores comerciales - II</p>	<p>Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h</p>
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Hysys.</p> <p>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.</p>	
<p>(CAST) Tema 8. Simuladores comerciales - III</p>	<p>Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h</p>
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Hysys.</p> <p>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.</p>	

820532 - SOPQ - Simulación y Optimización de Procesos Químicos

(CAST) Tema 9. Simuladores comerciales - IV	Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Hysys y APENPlus.</p> <p>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.</p>	
(CAST) Tema 10. Procesos dinámicos	Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h
<p>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.</p> <p>Actividades vinculadas: Ejercicios de casos prácticos relacionados con el contenido del tema, realizados en soporte Excel.</p> <p>Objetivos específicos: Aprender a modelizar, analizar y simular procesos químicos en estado transitorio.</p>	

Sistema de calificación

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

Normas de realización de las actividades

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.

820532 - SOPQ - Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Bibliografía

Básica:

Finlayson, Bruce A. Introduction to chemical engineering computing. Hoboken, N.J: Wiley Interscience, cop. 2006. ISBN 0471740624.

Liengme, Bernard V.; Ellert, David J. A Guide to Microsoft Excel 2007 for scientists and engineers. London: Elsevier/AP, 2009. ISBN 9780123746238.

Billo, E. Joseph. Excel for scientists and engineers : numerical methods. West Sussex: John Wiley and Sons, 2007. ISBN 9780471387343.

Complementaria:

Seider, Warren D.; Lewin, Daniel R.; Seader, J. D. Product and process design principles : synthesis, analysis, and evaluation. 3th ed. Hoboken: John Wiley & Sons, cop. 2010. ISBN 9780470414415.