

**Simulació de Processos Químics**

Codi: 102444

Crèdits: 3

Titulació	Típus	Curs	Semestre
2500897 Enginyeria Química	OB	3	2

**Professor de contacte**

Nom: Antoni Sánchez Ferrer

Correu electrònic: Antoni.Sanchez@uab.cat

**Utilització d'idiomes a l'assignatura**

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

**Equip docent**

Borja Solis Duran

Albert Guisasola Canudas

**Prerequisits**

Es recomana haver cursat les següents assignatures:

- Reactors químics
- Transmissió de calor
- Operacions de separació
- Cinètica química
- Aplicacions informàtiques

**Objectius**

1. Reforçar les bases que governen els principals processos de l'Enginyeria Química: balanços de matèria i energia en estat estacionari i no estacionari.
2. Aprendre eines de simulació de processos, especialment Matlab i Hysys.
3. Adquirir els coneixements de simulació necessaris per plantejar i resoldre casos paradigmàtics de l'Enginyeria Química, especialment aquells que necessiten eines matemàtiques avançades per a la seva resolució.
4. Aplicar les eines de simulació per predir el comportament de processos.
5. Adquirir els coneixements necessaris per portar a terme anàlisis de sensibilitat de paràmetres mitjançant simulació matemàtica.
6. Ajust de paràmetres.

**Competències**

- Aplicar les tècniques d'anàlisi i síntesi de sistemes a l'enginyeria del procés i del producte.
- Demostrar que es comprenen els principals conceptes del control de processos d'enginyeria química.
- Demostrar que es coneix, a nivell bàsic, l'ús i la programació dels ordinadors, i saber aplicar els recursos informàtics aplicables en enginyeria química.
- Demostrar que es coneixen les diferents operacions de reacció, separació, processament de materials i transport i circulació de fluids involucrades en els processos industrials de l'enginyeria química.
- Hàbits de treball personal
- Treball en equip

## Resultats d'aprenentatge

1. Aplicar els coneixements de reactors i operacions de separació a l'elaboració de models i a la simulació de processos.
2. Aplicar els recursos informàtics de simulació i control de processos.
3. Elaborar models de comportament dinàmic de sistemes compostos per diverses operacions.
4. Treballar cooperativament.
5. Treballar de manera autònoma.
6. Utilitzar la modelització matemàtica de sistemes dinàmics i processos en l'àmbit de l'enginyeria química.

## Continguts

1. Introducció. Eines de simulació.
2. Blocs temàtics:
  - 2.1. Cinètica química
  - 2.2. Sistemes en estat no estacionari.
  - 2.3. Reactors: sistemes no isoterms i modelització i simulació de DTRs.
  - 2.4. Ajust de paràmetres i anàlisi de sensibilitat.
3. Simulació de sistemes complexos amb Hysys (a confirmar).

## Metodologia

La assignatura s'estructura amb tres tipus de sessions:

- Sessions teòriques (1 h) fetes a classe on s'exposaran els casos que seran estudiats a les sessions pràctiques.

- Sessions pràctiques no avaluables (2 h) fetes a les aules d'informàtica, en la qual els alumnes, individualment en el cas dels blocs temàtics 2.1, 2.2 i 2.3 i 2.4, realitzen algun exemple pràctic d'algun dels blocs. El Bloc 3 es farà en forma de sessió en grup per part d'un professor extern, tot i que encara està per confirmar.

- Sessions pràctiques avaluables (2 h) fetes a les aules d'informàtica, en la qual els alumnes, individualment en el cas dels blocs temàtics 2.1, 2.2 i 2.3 i 2.4, realitzen algun exemple pràctic de cadascun dels blocs. Al finalitzar la sessió, els alumnes entreguen els resultats obtinguts i són avaluats.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
-------	-------	------	--------------------------

**Tipus: Dirigides**

Classes teòriques	8	0,32	1, 3, 6
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Sessió avaluable Bloc 2.1	2	0,08	2, 3, 5
Sessió avaluable Bloc 2.2	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Sessió avaluable Bloc 2.3	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Sessió avaluable Bloc 2.4	2	0,08	1, 3, 4, 6
Sessió no avaluable Bloc 2.1	2	0,08	2, 3, 5
Sessió no avaluable Bloc 2.2	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Sessió no avaluable Bloc 2.3-2.4	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Sessió no avaluable Bloc 3	2	0,08	1, 2, 3, 4, 6
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Estudi per part dels alumnes	40	1,6	1, 2, 3, 4, 5, 6

**Avaluació**

L'assignatura s'avalua en forma contínua amb 4 activitats que computen un 25% cadascuna.

Per aprovar la assignatura caldrà treure un mínim de 5 com a nota mitjana de l'avaluació contínua.

Totes les activitats avaluable s'han d'haver fet. L'alumne que no assisteixi a una activitat avaluable tindrà una qualificació de 0 en aquella activitat.

Aquell alumne que fagi menys de 3 activitats avaluable automàticament té un No Avaluable de l'assignatura.

L'alumne que no superi l'assignatura mitjançant l'avaluació contínua (ja hagi suspès o tingui un No Avaluable) podrà fer un examen final de recuperació, que inclourà qualsevol part de l'assignatura i que computarà per un 100%. També podran fer l'examen de recuperació els alumnes aprovats per pujar nota, però llavors renuncien a la nota de l'avaluació continuada.

Qualsevol alumne que es presenti a aquest examen automàticament renuncia a qualsevol qualificació prèvia que tingués de forma contínua. La nota mínima per superar aquest examen final torna a ser de 5. En el cas de no presentar-se a aquest examen l'alumne mantindrà la nota de l'avaluació contínua (sigui la que sigui).

**Sense perjudici d'altres mesures disciplinàries que s'estimin oportunes, i d'acord amb la normativa acadèmica vigent, es qualificaran amb un zero les irregularitats comeses per l'estudiant que puguin conduir a una variació de la qualificació d'un acte d'avaluació. Per tant, copiar o deixar copiar una pràctica o qualsevol altra activitat d'avaluació implicarà suspendre-la amb un zero, i si és necessari superar-la per aprovar, tota l'assignatura quedarà suspesa. No seran recuperables les activitats d'avaluació qualificades d'aquesta forma i per aquest procediment, i per tant l'assignatura serà suspesa directament sense oportunitat de recuperar-la en el mateix curs acadèmic.**

Les dates d'avaluació continuada i lliurament de treballs es publicaran al campus virtual (o similar, especificar) i poden estar subjectes a possibles canvis de programació per motius d'adaptació a possibles incidències. Sempre s'informarà al campus virtual (o similar) sobre aquests canvis ja que s'entén que aquesta és la plataforma habitual d'intercanvi d'informació entre professors i estudiants.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Activitat avaluable Bloc 2.1	25	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Activitat avaluable Bloc 2.2	25	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Activitat avaluable Bloc 2.3	25	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Activitat avaluable Bloc 2.4	25	2	0,08	1, 2, 3, 4, 6
Examen final de recuperació	100	3	0,12	1, 2, 3, 5, 6

## Bibliografia

Manuais i ajudes del programari utilitzat.

Brian H. Hahn, Daniel T. Valentine. Essential Matlab for Engineers and Scientists (Fourth Edition). Elsevier Ltd.

Bibliografia específica de simulació:

Finlayson, B.A., (2006), Introduction to chemical engineering computing. Wiley.

Elnashaie S., Uhlig F., (2007), Numerical Techniques for Chemical and Biological Engineers Using MATLAB. Springer.

Cutlip, M.B., Shacham, M., (2008), Resolución de problemas en Ingeniería Química y Bioquímica con Polymath, Excel y Matlab. Prentice Hall.

Bibliografia específica dels casos considerats:

Scott Fogler, H., "Elements of Chemical Reaction Engineering". 4th ed. (2005).

Scott Fogler, H., "Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas". 4a ed. (2008).

Levenspiel, O., "Chemical reaction engineering". 3rd ed. (1999).

Levenspiel, O., "Ingeniería de las reacciones químicas". 3a ed. (2006).

Missen, R., "Introduction to chemical reaction engineering and kinetics". (1998).