

**Simulació de Processos Químics**

Codi: 102444

Crèdits: 3

Titulació	Típus	Curs	Semestre
2500897 Enginyeria Química	OB	3	2

**Professor/a 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 i opimització.

**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. Optimització.
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, 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, realitzen algun exemple pràctic de cadascun dels blocs. Al finalitzar la sessió, els alumnes entreguen els resultats obtinguts i són avaluats.
- La sessió avaluable de Bloc 2.4 consta d'un treball individual d'optimització que els alumnes prepararan i presentaran a classe de forma aleatòria. El treball s'avaluarà posteriorment.

Les activitats avaluables dels blocs 2.1, 2.2, 2.3 i 2.4 comptaran per un percentatge del 25% de la nota final i no són recuperables.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
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	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

### a) Avaluació contínua:

L'assignatura s'avalua en forma contínua amb 4 activitats avaluables dels Blocs 2.1, 2.2, 2.3 i 2.4 respectivament, que computen un 25% cadascuna.

Les activitats dels Blocs 2.1, 2.2 i 2.3 es faran en forma d'examen parcial als laboratoris informàtics, mentre que l'activitat avaluable del Bloc 2.4 es farà en forma de treball.

En el cas d'irregularitats en alguna d'aquestes activitats avaluables s'aplicaran els criteris del punt e).

Per aprovar l'assignatura caldrà treure un mínim de 5.0 com a nota mitjana de l'avaluació contínua i una nota mínima de 1.0 en cada activitat, excepte en el cas de que l'alumne no es presenti a l'activitat.

### b) Revisió de qualificacions:

Per a cada activitat d'avaluació, s'indicarà un lloc, data i hora de revisió en la que l'estudiant podrà revisar l'activitat amb el professor. En aquest context, es podran fer reclamacions sobre la nota de l'activitat, que seran avaluades pel professorat responsable de l'assignatura. Si l'estudiant no es presenta a aquesta revisió, no es revisarà posteriorment aquesta activitat.

### c) Recuperació:

L'alumne/a 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/a 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 5.0. En el cas de no presentar-se a aquest examen l'alumne/a mantindrà la nota de l'avaluació contínua (sigui la que sigui).

L'estudiant es pot presentar a la recuperació sempre que s'hagi presentat a un conjunt d'activitats que representin un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura.

#### **d) Qualificacions:**

Matricules d'honor. Atorgar una qualificació de matrícula d'honor és decisió del professorat responsable de l'assignatura. La normativa de la UAB indica que les MH només es podran concedir a estudiants que hagin obtingut una qualificació final igual o superior a 9.00. Es pot atorgar fins a un 5% de MH del total d'estudiants matriculats.

Un estudiant es considerarà no avaluable (NA) si no s'ha presentat en un conjunt d'activitats el pes de les quals equivalgui a un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura.

#### **e) Irregularitats per part de l'estudiant, còpia i plagi:**

Sense perjudici d'altres mesures disciplinàries que s'estimin oportunes, 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, la còpia, el plagi, l'engany, deixar copiar, etc. en qualsevol de les activitats d'avaluació implicarà suspendre-la amb un zero. Les activitats d'avaluació qualificades d'aquesta forma i per aquest procediment no seran recuperables. Si és necessari superar qualsevol d'aquestes activitats d'avaluació per aprovar l'assignatura, aquesta assignatura quedarà suspesa directament, sense oportunitat de recuperarla en el mateix curs. En aquest cas, la nota final de l'alumne/a és un SUSPENS (3.0 de qualificació numèrica).

#### **f) Calendari i programació:**

Les dates d'avaluació continuada i lliurament de treballs es publicaran a l'aula Moodle corresponent i poden estar subjectes a possibles canvis de programació per motius d'adaptació a possibles incidències. Sempre s'informarà via aula Moodle sobre aquests canvis ja que s'entén que aquesta és la plataforma habitual d'intercanvi d'informació entre professors i estudiants.

## **Activitats d'avaluació**

<b>Títol</b>	<b>Pes</b>	<b>Hores</b>	<b>ECTS</b>	<b>Resultats d'aprenentatge</b>
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.

Bibliografía 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).