

## Simulación de Procesos Químicos

Código: 102444  
Créditos ECTS: 3

2024/2025

Titulación	Tipo	Curso
2500897 Ingeniería Química	OB	3

### Contacto

Nombre: Jose Antonio Feliu Gil

Correo electrónico: josepanton.feliu@uab.cat

### Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

### Prerrequisitos

Se recomienda haber cursado las siguientes asignaturas:

- Termodinámica aplicada
- Reactores químicos
- Transmisión de calor
- Transporte y circulación de fluidos
- Operaciones de separación
- Cinética química
- Aplicaciones informáticas

### Objetivos y contextualización

1. Aprender a utilizar óptimamente herramientas comerciales de simulación de procesos.
2. Adquirir los conocimientos de simulación necesarios para plantear y resolver casos paradigmáticos de la Ingeniería Química, especialmente aquéllos que necesitan herramientas matemáticas avanzadas para la resolución de sus balances de materia y energía, tanto en estado estacionario como en estado no-estacionario.
3. Aplicar las herramientas de simulación para predecir el comportamiento de los procesos.
4. Adquirir los conocimientos necesarios para realizar análisis de sensibilidad de parámetros mediante simulación matemática.
5. Aplicación de algoritmos de optimización de los parámetros de los procesos

### Competencias

- Aplicar las técnicas de análisis y síntesis de sistemas a la Ingeniería del proceso y del producto.
- Demostrar que comprende los principales conceptos del control de procesos de Ingeniería Química.
- Demostrar que conoce las diferentes operaciones de reacción, separación, procesado de materiales y transporte y circulación de fluidos involucradas en los procesos industriales de la Ingeniería 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.
- Hábitos de trabajo personal
- Trabajo en equipo

## Resultados de aprendizaje

1. Aplicar los conocimientos de reactores y operaciones de separación a la elaboración de modelos y simulación de procesos.
2. Aplicar los recursos informáticos de simulación y control de procesos.
3. Elaborar modelos de comportamiento dinámico de sistemas compuestos por diversas operaciones.
4. Trabajar cooperativamente.
5. Trabajar de forma autónoma.
6. Utilizar la modelización matemática de sistemas dinámicos y procesos en el ámbito de la Ingeniería Química.

## Contenido

1. Introducción a la asignatura
2. Repaso a los conceptos de Optimización. Aplicaciones a la Simulación de Procesos
3. Herramientas comerciales de simulación para el diseño de equipos y procesos
4. Simulación de procesos en estado estacionario:
  - 4.1 Estimación de propiedades de compuestos puros y de mezclas
  - 4.2 Termodinámica aplicada
  - 4.3 Transmisión de calor y intercambiadores
  - 4.4. Cinética química y reactores ideales

## Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases teóricas	7	0,28	1, 3, 6
Seminarios	4	0,16	2, 1, 3, 6
Sesión de problemas/prácticas Bloque 2	4	0,16	2, 1, 3, 6, 5
Sesión de problemas/prácticas Bloque 4	16	0,64	2, 1, 3, 6, 5
Tipo: Autónomas			
Trabajo individual	40	1,6	2, 1, 3, 6, 5, 4

La asignatura se estructura en tres tipos de sesiones:

- 12 sesiones teórico-prácticas (100 minutos) realizadas en las aulas de informática donde se expondrán primero los contenidos teóricos que serán después aplicados en la parte práctica de la sesión, donde los alumnos trabajarán por parejas. Algunos de los casos construidos podrán ser entregables no evaluables
- 2 Sesiones prácticas evaluables (2 h) realizadas en las aulas de informática, en la que los alumnos, individualmente, resolverán problemas de los bloques temáticos 2; 4.1 + 4.2 + 4.3 + 4.4. Al finalizar la sesión, los alumnos entregan los resultados obtenidos y son evaluados.
- 2 Seminarios (90 minutos) llevados a cargo por expertos en el campo de la simulación comercial de procesos (externos en la UAB)

La actividad evaluable correspondiente al bloque 2 contará un 30% de la nota total

La actividad evaluable correspondiente a los bloques 4.1+4.2+4.3+4.4 contará un 60% de la nota total

La asistencia a cada uno de los seminarios impartidos por los expertos externos contará un 5% de la nota total

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

## Evaluación

### Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Actividad de evaluación de los Bloques 4.1 + 4.2 + 4.3 + 4.4	60%	2	0,08	2, 1, 5
Actividad de evaluación del Bloque 2	30%	2	0,08	2, 1, 5
Asistencia a seminarios	10%	0	0	2, 1, 3, 6, 5, 4
Examen de recuperación	100%	0	0	2, 1, 3, 6, 5

#### a) Evaluación continua:

La asignatura se evalúa en forma continua con 2 actividades evaluables individuales, una con los contenidos del bloque 2 (que computa un 30% del total), y otra con los contenidos de los bloques 4.1 + 4.2 + 4.3 + 4.4 (que computa un 60% del total). Estas actividades se realizarán en forma de examen parcial en los laboratorios informáticos. Por otra parte, la asistencia a cada uno de los 2 seminarios impartidos por expertos externos en la UAB computará un 5% del total.

En caso de irregularidades en alguna de estas actividades evaluables se aplicarán los criterios del punto e). Para aprobar la asignatura será necesario sacar un mínimo de 5.0 como nota media de la evaluación continua y una nota mínima de 3.0 en cada actividad evaluable.

#### b) Revisión de calificaciones:

Para cada actividad de evaluación, se indicará un lugar, fecha y hora de revisión en la que el estudiante podrá revisar la actividad con el profesor. En este contexto, se podrán realizar reclamaciones sobre la nota de la actividad, que serán evaluadas por el profesorado responsable de la asignatura. Si el estudiante no se presenta a esta revisión, no se revisará posteriormente esta actividad.

#### c) Recuperación:

El alumno/a que no supere la asignatura mediante la evaluación continua podrá hacer un examen final de recuperación, que incluirá contenidos de toda la asignatura y que computará por un 90% (el 10% de la asistencia a los seminarios se mantendrá).

La nota mínima para superar ese examen final vuelve a ser de 5.0. En caso de no presentarse a este examen el alumno/a mantendrá la nota de la evaluación continua (sea la que sea).

El estudiante puede presentarse a la recuperación siempre que se haya presentado aun conjunto de actividades que representen un mínimo de dos terceras partes de la calificación total de la asignatura.

d) Calificaciones:

Matriculas de honor. Otorgar una calificación de matrícula de honor es decisión del profesorado responsable de la asignatura. La normativa de la UAB indica que las MH sólo podrán concederse a estudiantes que hayan obtenido una calificación final igual o superior a 9.00. Puede otorgarse hasta un 5% de MH del total de estudiantes matriculados.

Un estudiante se considerará no evaluable (NA) si no se ha presentado en un conjunto de actividades cuyo peso equivalga a un mínimo de dos terceras partes de la calificación total de la asignatura.

e) Irregularidades por parte del estudiante, copia y plagio:

Sin perjuicio de otras medidas disciplinarias que se estimen oportunas, se calificarán con un cero las irregularidades cometidas por el estudiante que puedan conducir a una variación de la calificación de un acto de evaluación. Por tanto, la copia, el plagio, el engaño, dejar copiar, suplantación de identidad, etc. en cualquiera de las actividades de evaluación supondrá suspenderla con un cero. Las actividades de evaluación calificadas de esta forma y por este procedimiento no serán recuperables. Si es necesario superar cualquiera de estas actividades de evaluación para aprobar la asignatura, esta asignatura quedará suspendida directamente, sin oportunidad de recuperarla en el mismo curso. En este caso, la nota final del alumno/a es un SUSPENSO (3.0 de calificación numérica).

f) Calendario y programación:

Las fechas de evaluación continua y entrega de trabajos se publicarán en el aula Moodle correspondiente y pueden estar sujetas a posibles cambios de programación por motivos de adaptación a posibles incidencias. Siempre se informará vía aula Moodle sobre estos cambios ya que se entiende que ésta es la plataforma habitual de intercambio de información entre profesores y estudiantes.

Esta asignatura no contempla un sistema de evaluación única.

## Bibliografía

Manuales y ayuda para el software utilizado

- Aspen Physical Property Methods V12 (October 2020)
- Aspen Physical Property Models V12 (October 2020)
- Aspen HYSYS. Unit Operations Reference Guide V12.1 (May 2021)

Bibliografía específica de los casos considerados

- Foo, D., "Chemical Engineering Process Simulation", 2nd Edition (2022)
- Edgar, T. F., et al. « Optimization of Chemical Processes », 2<sup>nd</sup> Edition (2001)
- Turton, R., "Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes, 5th Edition (2019)
- Hanyak Jr., M.E., "Chemical Process Simulation and the Aspen HYSYS software" (2012)

## Software

Se utilizarán los distintos programas contenidos en la suite AspenTech (aspenONE).

Opcionalmente se podrá utilizar Matlab y MS Excel en algún ejercicio de optimización

Opcionalmente, se ofrecerá un seminario con otros simuladores comerciales.

## Lista de idiomas

Nombre	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(PAUL) Prácticas de aula	211	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PAUL) Prácticas de aula	212	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PAUL) Prácticas de aula	213	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PAUL) Prácticas de aula	214	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto