



Asignatura: Simulación y Optimización de procesos
Código: 16569
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Ingeniería Química
Curso Académico: 2016-2017
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 6 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS/ [PROCESS SIMULATION AND OPTIMIZATION](#)

1.1. Código / Course Code

16569

1.2. Materia / Content area

Intensificación Tecnológica (Módulo de Intensificación)

1.3. Tipo / Type of course

Optativa / [Elective](#)

1.4. Nivel / Level of course

Grado / [Bachelor](#)

1.5. Curso / Year of course

4º / 4th

1.6. Semestre / Semester

2nd Semestre / [2nd \(Summer semester\)](#)

1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también Inglés en material docente / [In addition to Spanish, English is also used in teaching material](#)

1.8. Requisitos Previos / Prerequisites

Conocimientos previos recomendados: Tener nociones de Química Orgánica e Inorgánica para comprender las bases químicas de los procesos industriales a modelizar. Dominar los conceptos básicos de Termodinámica y Cinética de los procesos químico-industriales y aplicarlos a la determinación de las limitaciones de un proceso y sus condiciones óptimas de operación. Sobre estas mismas materias, conocer los usos y la estructura de los modelos termodinámicos del tipo ecuación de estado y modelos de actividad y las diferentes formas de expresar la extensión de la reacción química y los equilibrios de fase, así como la cinética de una reacción química. Tener conocimientos y habilidades de cálculo relacionados con los fundamentos de la Ingeniería Química: i)- balances de materia y energía, ii)- selección y consumo de servicios auxiliares, iii)-



Asignatura: Simulación y Optimización de procesos
Código: 16569
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Ingeniería Química
Curso Académico: 2016-2017
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 6 ECTS

operaciones básicas y su diseño, iv)-ingeniería de la reacción química y diseño de reactores. Conocer los conceptos básicos de Ingeniería de Procesos relacionados con el desarrollo de procesos nuevos: estructura y contenido de cada etapa. Tener conocimientos y habilidades básicas en el uso de simuladores de proceso como herramienta en los cálculos del tipo balance de materia y energía, dimensionado y diseño de equipos, análisis energético y económico de procesos. Tener nociones básicas sobre programación en algún lenguaje.

Asignaturas previas recomendadas: Se recomienda haber cursado las asignaturas siguientes: Matemáticas I y II, Física I y II, Química; Ingeniería de Fluidos, Ingeniería Energética y Transmisión de Calor, Termodinámica de los Procesos Industriales; Fundamentos de Ingeniería Química, Experimentación en Ingeniería Química, Operaciones de Separación, Ingeniería de las Reacciones Homogéneas y Heterogéneas; Ingeniería de Procesos y Productos.

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a clases en cualquiera de sus formas es recomendable.

1.10. Datos del equipo docente / **Faculty Data**

Docente(s) / Lecturer(s): Víctor Ferro Fernández (Coordinador)
Departamento de / Department of: Química Física Aplicada
Facultad / Faculty: Ciencias
Despacho - Módulo / Office - Module: 08-501
Teléfono / Phone: +34 91 497 76 07
Correo electrónico/Email: Victor.ferro@uam.es
Página web/Website: <http://www.uam.es/departamentos/ciencias/ingquim/>
Horario de atención al alumnado/Office hours: Previa petición de hora.

El resto del profesorado implicado en la asignatura puede consultarse en la página web del título:

<http://www.uam.es/ss/Satellite/Ciencias/es/1242671470698/listadoCombo/Profesorado.htm/>

1.11. OBJETIVOS DEL CURSO / **OBJECTIVE OF THE COURSE**

Esta asignatura pretende profundizar en algunos contenidos y habilidades y desarrollar otro(a)s en relación con el uso de los simuladores de proceso como herramienta en el trabajo del ingeniero de procesos. Tendrá un enfoque fundamentalmente orientado hacia la Ingeniería de Procesos y pretende preparar al estudiante para usar los simuladores de proceso en su vida académica presente y profesional futura. En este sentido ofrece un paradigma de cálculo (basado en el uso de programas informáticos de simulación de proceso) nuevo que permite reformular los esquemas de cálculo de las asignaturas precedentes basados en procedimientos manuales. A la vez, servirá de apoyo, en la medida de lo posible, al trabajo de asignaturas como Proyectos de



Ingeniería y Trabajo de Fin de Grado donde los cálculos de procesos pueden tener un peso muy importante. Profundizará en algunos temas básicos de la simulación de procesos como el manejo de bases de datos, los sistemas de propiedades de los simuladores (métodos y modelos de cálculo), la convergencia en simuladores con arquitectura secuencial modular. Se introducirán algunos temas nuevos como los modelos termodinámicos para electrolitos, los cálculos de operaciones de separación basados en el control cinético de la transferencia de materia. Así mismo, se introducirán muy breve y básicamente temas como la automatización y el uso de modelos de usuario en simuladores de proceso, la optimización de procesos basada en algoritmos y la simulación dinámica de procesos. Potenciará el uso de otro u otro simulador(es) de proceso para crear en los estudiantes la capacidad para enfrentar diferentes simuladores, aprovechando las ventajas específicas que ofrecen cada uno de ellos.

A través de la metodología docente empleada y las actividades formativas desarrolladas a lo largo del curso, se busca conseguir que el estudiante, al finalizar el mismo sea capaz de:

1. Determinar propiedades termo-físicas, de transporte, datos de equilibrio, etc. para compuestos puros y mezclas, seleccionando el modelo termodinámico adecuado según la naturaleza del sistema a estudiar y el tipo de operación a simular.
2. Realizar cálculos de instalaciones y operaciones de transferencia de calor y transporte de fluidos.
3. Modelizar operaciones y equipos de separación, incluyendo columnas de rectificación, absorción y extracción.
4. Efectuar cálculos de reactores químicos, incluyendo la correcta definición de reacciones simples y complejas.
5. Utilizar modelos de diferentes complejidades para resolver problemas con propósitos, grados de especificación y de información diferentes.
6. Emplear operaciones lógicas, utilidades, extensiones y automatizaciones para enriquecer y facilitar el trabajo de simulación en diagramas de flujo complejos.
7. Realizar cálculos de dimensionado de equipos e instalaciones.
8. Especificar simulaciones dinámicas a partir de las precedentes simulaciones en estado estacionario.
9. Realizar simulaciones sencillas en régimen dinámico y de procesos regulados por controladores.
10. Realizar optimizaciones de operaciones y procesos utilizando algoritmos sencillos de optimización y herramientas de optimización implementadas en los simuladores de proceso comerciales.

Estos resultados de aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del título y la materia de Intensificación Tecnológica en la que se enmarca:



Asignatura: Simulación y Optimización de procesos
Código: 16569
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Ingeniería Química
Curso Académico: 2016-2017
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 6 ECTS

- CB1. Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.
- CG3. Conocimiento en materias básicas y tecnológicas, que les capacite para el aprendizaje de nuevos métodos y teorías, y les dote de versatilidad para adaptarse a nuevas situaciones
- CG4. Capacidad de resolver problemas con iniciativa, toma de decisiones, creatividad, razonamiento crítico y de comunicar y transmitir conocimientos, habilidades y destrezas, en el campo de la Ingeniería Industrial.
- CT3. Demostrar conciencia sobre la responsabilidad de la aplicación práctica de la Ingeniería, el impacto social y ambiental, y compromiso con la ética profesional, responsabilidad y normas de la aplicación práctica de la ingeniería.
- CE20. Capacidad para el análisis, diseño, simulación y optimización de procesos y productos.

1.12. Contenidos del Programa / Course Contents

Contenidos generales de la asignatura. Generalidades de la simulación de procesos en régimen estacionario. Análisis y simulación de procesos. La estrategia modular secuencial para la simulación de procesos en régimen estacionario. Modelado de operaciones básicas. Fundamentos de la simulación dinámica de procesos químicos. Simulación de procesos regulados con controladores PID. Ajuste de controladores. Control de unidades individuales. Control dinámica de procesos químicos. Optimización de procesos. Optimización de funciones de una o varias variables con y sin restricciones. Optimización global. Optimización en el diagrama de flujo de un proceso en régimen estacionario. Diseño de experimentos. Introducción al diseño de experimentos. Diseño de experimentos en simulación y optimización de procesos en régimen estacionario.

Desglose de los contenidos por temas.

Tema 1. Generalidades sobre simulación de procesos. Sistemas de propiedades en simuladores de procesos. La simulación de procesos en la Ingeniería Química. Simuladores de proceso comerciales, comparación entre ellos. Arquitecturas modular, secuencial y basada en ecuaciones. Ventajas y desventajas. Modelos termodinámicos en la estimación de propiedades de sustancias puras y mezclas. Indicaciones para la selección de modelos termodinámicos. Los sistemas de propiedades en los simuladores de proceso.

Tema 2. Simulación de operaciones básicas. Simulación de operaciones de flujo de fluidos y transmisión de calor. Operaciones de separación: modelos simplificados y cálculo riguroso de columnas. Modelos de reacciones químicas y reactores. Uso del Aspen Plus y el Aspen HYSYS.



Asignatura: Simulación y Optimización de procesos
Código: 16569
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Ingeniería Química
Curso Académico: 2016-2017
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 6 ECTS

Tema 3. Operaciones lógicas, utilidades y automatizaciones.

Operaciones lógicas, utilidades, herramientas y automatizaciones en simuladores de proceso. El Aspen Workbook Simulation. Introducción a su uso. Modelos de usuario: tipos, formas de uso.

Tema 4. Simulación de procesos con recirculación. La función Reciclo y la convergencia en simuladores de proceso secuencial modulares. Problemas de convergencia más frecuentes en simuladores del tipo secuencial modulares. Tratamiento al problema de la convergencia en los simuladores Aspen Plus y Aspen HYSYS.

Tema 5. Introducción a la optimización de procesos. Necesidad y fundamentos de la optimización de procesos. Algoritmos básicos de optimización de procesos. Optimización de funciones de una o varias variables con y sin restricciones. Optimización de procesos con relaciones no lineales entre las variables. Optimización en el diagrama de flujo de un proceso en régimen estacionario. Uso de las herramientas de optimización implementadas en los simuladores Aspen HYSYS y Aspen Plus.

Tema 6. Introducción a la simulación dinámica de procesos. Necesidad y fundamentos de la simulación dinámica de procesos. Esquemas de especificación en simulación dinámica de procesos. Simulación dinámica y control de procesos. Simulación de procesos regulados con controladores PID. Ajuste de de controladores. Control de unidades individuales. Control dinámica de procesos químicos sencillos.

1.13. Referencias de Consulta / Recommended Reading.

Bibliografía básica

- **Aspen Technology.** Documentación de la ayuda de los programas que integran la suite Aspen ONE v8.4. 2015. Información on-line gestionada desde el propio programa.
- **HANYAK M.E.** Chemical process simulation. MEH, Lewisburg. 2013.
- **SCHEEFFLAN R.** *Teach yourself the basics of Aspen Plus.* AIChE Wiley. 2011.

Bibliografía de consulta

- **BIEGLER L.T., GROSSMAN I.E., WESTERBERG A.W.** *Systematic Methods of Chemical Processes Design.* Prentice Hall PTR: New Jersey. 1997.
- **COHEN L.** *Diseño y Simulación de Procesos Químicos.* 2da. Edición. Sesur Artes Gráficas: Cádiz. 2003.
- **CUEVAS ARANDA, MANUEL.** Introducción a la simulación de procesos en Ingeniería Química. Editorial de la Universidad de Jaén. 2011.
- **EDGAR T.F., HIMMELBLAU D.M.** *Optimization of Chemical Processes.* Lavoisier: Paris. 2001.



Asignatura: Simulación y Optimización de procesos
Código: 16569
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Ingeniería Química
Curso Académico: 2016-2017
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 6 ECTS

- HYMMELBLAU D.M., BISCHOFF K.B. *Análisis y Simulación de Procesos*. Reverté: Barcelona. 1976.
- LIPTAK B.G. *Optimization of Unit Operations*. Chilton Book Co.: Pennsylvania. 1987.
- LUYBEN W.L. *Plantwide Dynamic Simulators in Chemical Processing and Control*. CRC Press: Boca Ratón. 2002.
- ROFFEL B., BETLEM B. *Process Dynamics and Control*. Wiley: Chichester. 2006.
- SEIDER W.D., SEADER J.D., LEWIN D.R. *Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation*. John Wiley & Sons, Inc.: New York. 1999.

2 Métodos Docentes / Teaching methods

Actividades presenciales

- *Clases con medios informáticos*: El curso se desarrollará en forma de clases con medios informáticos para garantizar el acceso al software de simulación de procesos. Se dedicarán a desarrollar los contenidos teóricos fundamentales de la asignatura. Se distinguirán dos formas fundamentales:
 - Clases teóricas con medios informáticos: Estarán orientadas a la explicación de las técnicas de simulación y el uso simulador de procesos y sus fundamentos. Se desarrollarán a través de ejemplos prácticos que combinen el tratamiento de los nuevos contenidos con la solución de problemas propios de la industria química (aprendizaje basado en problemas).
 - Clases prácticas con medios informáticos: Las prácticas se dedicarán a abordar el estudio, mediante los programas de la suite de programas Aspen ONE y otros paquetes informáticos, de procesos de interés práctico-industrial, así como desarrollar habilidades específicas relacionadas con el uso del simulador de procesos. Los resultados del trabajo en estas clases prácticas pueden ser (o no) evaluados al final de la clase o posteriormente a ella.
- Tutorías: Se realizarán de forma individual o en grupos reducidos. En ellas, el profesor hará un seguimiento del proceso de aprendizaje y se resolverán las dudas de los alumnos orientándolos sobre los métodos de trabajo más útiles para alcanzar los resultados de aprendizaje previstos.

Actividades no presenciales:

- Resolución de problemas y casos prácticos que se asignan durante el desarrollo de las clases teóricas y prácticas con medios informáticos.
- Docencia en red: materiales didácticos y problemas resueltos. Se incluyen Cuestionarios de autoevaluación para orientar el trabajo no presencial de los estudiantes.
- Tutorías y foro de discusión virtuales.

En el desarrollo de las actividades no presenciales se aprovecharán las prestaciones que brinda la plataforma Moodle para la presentación de contenidos y en la comunicación entre los profesores y los estudiantes y entre los propios estudiantes.



Asignatura: Simulación y Optimización de procesos
Código: 16569
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Ingeniería Química
Curso Académico: 2016-2017
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 6 ECTS

3 Tiempo estimado de Trabajo del Estudiante / Estimated workload for the student

		Nº de horas	Porcentaje
Presencial	Clases con medios informáticos	54 h	60h (40%)
	Actividades de evaluación	6 h	
No presencial	Preparación y realización de problemas y casos prácticos a entregar	38 h	90h (60%)
	Estudio semanal (3 h x14 sem)	42 h	
	Preparación del examen	10 h	
Carga total de horas de trabajo: 25 horas X 6 ECTS		150 h	

4 Métodos de Evaluación y Porcentaje en la Calificación Final / Assessment Methods and Percentage in the Final marks

Los resultados de aprendizaje serán evaluados a lo largo del curso mediante diferentes métodos de evaluación, cuya contribución a la calificación final será la siguiente:

Actividad evaluativa	Convocatoria Ordinaria	Convocatoria Extraordinaria
Resolución de problemas y casos prácticos	40%	20%
Examen final	60%	80%

Resolución de problemas y casos prácticos: consiste en la entrega de problemas y/o casos prácticos sobre diferentes contenidos del curso, asignados por los profesores explícitamente con el fin de dirigir y controlar el trabajo no presencial. Estas entregas son de carácter obligatorio. Las propuestas de trabajo estarán a disposición de los estudiantes con suficiente antelación. Las entregas podrían realizarse en grupo cuando su complejidad y/o extensión lo justifique. La nota de esta forma de evaluación también podría incluir los resultados de los cuestionarios de auto-evaluación cuando sean notables por su calidad y como reconocimiento al esfuerzo diario del estudiante. En esta actividad se evaluarán fundamentalmente los resultados de aprendizaje relacionados con la aplicación de los contenidos teóricos y prácticos a la resolución de problemas abiertos, el razonamiento crítico y la capacidad de argumentación así como las normas de la aplicación práctica de la ingeniería y la capacidad para el diseño y simulación de procesos (competencias CG4, CT3 y CE20).



Asignatura: Simulación y Optimización de procesos
Código: 16569
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Grado en Ingeniería Química
Curso Académico: 2016-2017
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 6 ECTS

Examen final: se realizará un examen a la finalización del semestre, en la fecha aprobada por la Junta de Facultad y publicada en el horario. En esta prueba se evaluarán los resultados de aprendizaje relacionados con la asimilación de contenidos teóricos y su aplicación a la resolución de problemas concretos, fundamentalmente relacionados con las competencias CG3, CG4, CB1 y CE20.

En la convocatoria extraordinaria se mantendrá la puntuación obtenida en la entrega de problemas, casos de estudio, etc. durante el curso ordinario.

Para aprobar la asignatura, los estudiantes deberán superar al menos un 40% de la nota de la evaluación frecuente y del examen final. El estudiante que haya participado en conjunto, en menos de un 10% de las actividades prácticas (clases prácticas y prácticas con medios informáticos) y de la evaluación frecuente (entrega de problemas y estudios de casos), será calificado en la convocatoria ordinaria como “No Evaluado”.

5 Cronograma de Actividades (opcional) / Activities Chronogram (optional)

Los tiempos establecidos para cada uno de los bloques es aproximado, pudiendo variar ligeramente según la necesidad de afianzar conocimientos en algún bloque en concreto. Con carácter general, la distribución sería:

Bloque Temático	Horas de clases
Generalidades sobre simulación de procesos.	12 h
Simulación de operaciones básicas.	12 h
Operaciones lógicas, utilidades y automatizaciones.	8 h
Simulación de procesos con recirculación.	12 h
Introducción a la optimización de procesos.	8 h
Introducción a la simulación dinámica de procesos.	8 h