




Universidad
Politécnica
de Cartagena



Guía docente de la asignatura

SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

**Titulación: Máster en Ingeniería Ambiental
y de Procesos Sostenibles**

CSV:	ISPWKMG9DY1gtr1MakbL5z		Fecha:	29/01/2019 23:27:58	
Normativa:	Este documento es copia auténtica imprimible de un documento administrativo firmado electrónicamente y archivado por la Universidad Politécnica de Cartagena.				
Firmado Por:	Universidad Politécnica de Cartagena - Q8050013E				
Url Validación:	https://validador.upct.es/csv/ISPWKMG9DY1gtr1MakbL5z		Página:	1/15	

1. Datos de la asignatura

Nombre	Simulación y Optimización de Procesos Químicos				
Materia*					
Módulo*	Especialización				
Código	226109002				
Titulación	Máster en Ingeniería Ambiental y de Procesos Sostenibles				
Plan de estudios	2261				
Centro	Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial				
Tipo	Optativa				
Periodo lectivo	Cuatrimstral	Cuatrimestre	2	Curso	16/17
Idioma	Castellano				
ECTS	3	Horas / ECTS	25	Carga total de trabajo (horas)	75

* Todos los términos marcados con un asterisco que aparecen en este documento están definidos en *Referencias para la actividad docente en la UPCT y Glosario de términos*:

<http://repositorio.bib.upct.es/dspace/bitstream/10317/3330/1/isbn8469531360.pdf>

2. Datos del profesorado

Profesor responsable	Mercedes Alacid Cárceles		
Departamento	Ingeniería Química y Ambiental		
Área de conocimiento	Ingeniería Química		
Ubicación del despacho	Edificio de Minas y Navales. Primera planta. Despacho 27.2		
Teléfono	968.32.5551	Fax	968.32.5555
Correo electrónico	Mercedes.Alacid@upct.es		
URL / WEB	http://moodle.upct.es		
Horario de atención / Tutorías	Lunes, de 11 a 14 h y Miércoles, de 11 a 14h		
Ubicación durante las tutorías	Despacho Mercedes		

Titulación	Doctora en CC Químicas por la Universidad de Murcia
Vinculación con la UPCT	Profesora Titular de Universidad (TU)
Año de ingreso en la UPCT	1999
Nº de quinquenios (si procede)	4
Líneas de investigación (si procede)	Análisis y extracción de colorantes naturales y polifenoles en material vegetal; Secado por atomización de zumos y extractos vegetales; Análisis de aguas residuales; Química teórica molecular.
Nº de sexenios (si procede)	3
Experiencia profesional (si procede)	Experiencia profesional en las Universidades de Murcia (doctorado y un año de contrato de reincorporación Marie Curie), Montpellier , Francia (dos años de contrato postdoctoral Marie Curie) y Politécnica de Cartagena.
Otros temas de interés	

Profesor responsable	Luis Javier Lozano Blanco		
Departamento	Ingeniería Química y Ambiental		
Área de conocimiento	Ingeniería Química		
Ubicación del despacho	Campus Muralla del Mar (ETS Ingeniería Industrial). Segunda planta. Despacho 2147		
Teléfono	968326407		
Correo electrónico	luisja.lozano@upct.es		
URL / WEB	http://moodle.upct.es/		
Horario de atención / Tutorías			
Ubicación durante las tutorías	Despacho 2147		

Titulación	Ingeniero Industrial. Doctor por La UPCT
Vinculación con la UPCT	Profesor Titular de Universidad
Año de ingreso en la UPCT	1991
Nº de quinquenios (si procede)	4
Líneas de investigación (si procede)	Procesos Químicos (Código UNESCO 3303.03). Separación Química (Código UNESCO 3303.04)
Nº de sexenios (si procede)	3
Experiencia profesional (si procede)	Subdirector de la ETSII (2004-2008) Director de la ETSII (2008-2012) Director General de Universidades e Investigación CARM (2013-2015) Perfil profesional completo en: https://es.linkedin.com/in/luis-j-lozano-89585b21
Otros temas de interés	

3. Descripción de la asignatura

3.1. Descripción general de la asignatura

El desempeño profesional de los ingenieros dedicados a las industrias de proceso químico engloba una serie de tareas que se pueden agrupar en cuatro grandes bloques conceptuales: diseño de equipos, diseño de procesos, diseño de plantas químicas y operación de plantas químicas. Independientemente del alcance de cada tarea y del conocimiento de los fundamentos físico-químicos de cada operación, es necesario tener las competencias necesarias para poder realizar la simulación y optimización de equipos, procesos y/o plantas mediante computador.

Este curso comprende la descripción sistemática de todos los elementos que deben tenerse en cuenta a la hora de simular un proceso químico a distintos niveles; desde la búsqueda de información sobre el estado de la técnica, hasta la selección de los modelos de predicción de propiedades químico físicas de los compuestos que permiten el diseño de cada operación unitaria, pasando por la integración energética, o el diseño de los servicios auxiliares.

El curso pretende que el alumno sea capaz de estructurar y clasificar la importancia de estas tareas, logrando un enfoque holístico de ésta disciplina. A nivel práctico se persigue que el alumno desarrolle habilidades en el manejo del software de simulación de procesos, tanto comercial como de código abierto.

3.2. Aportación de la asignatura al ejercicio profesional

Puesto que la realidad industrial demuestra que la aplicación de métodos rigurosos para el diseño de equipos o unidades de proceso se realiza con el apoyo de software de simulación, el módulo se complementa con sesiones prácticas para que el estudiante adquiera las habilidades necesarias para el uso eficaz de ésta herramienta, integrando y aplicando los fundamentos teóricos a casos prácticos. La presentación de todos estos aspectos de una forma estructurada, aunque no detallada debido a la complejidad de algunas de ellas, permiten que el estudiante tenga un punto de partida sólido sobre el que poder desarrollar y proyectar instalaciones químicas, y que sepa estimar el impacto que tienen sobre el diseño final los métodos de cálculo empleados.

Asimismo, las herramientas de simulación introducidas podrán ser de gran ayuda al estudiante en tareas de operación, optimización y mejora de instalaciones ya existentes.

3.3. Relación con otras asignaturas del plan de estudios

3.4. Incompatibilidades de la asignatura definidas en el plan de estudios

No existen


3.5. Recomendaciones para cursar la asignatura

Se recomienda tener una base sólida en Tecnología e Ingeniería de Procesos Químicos, así como fundamentos de Química-Física, Termodinámica y Mecánica de Fluidos.

El uso de software de simulación, hojas de cálculo y herramientas de búsqueda en Internet, hacen recomendable que el alumno tenga un buen conocimiento de inglés a nivel de lectura, y que disponga de un nivel mínimo de informática a nivel de usuario.

3.6. Medidas especiales previstas

Tal como recoge el artículo 6 de la Normativa de Evaluación de la UPCT, el Vicerrectorado correspondiente podrá establecer adaptaciones especiales en la metodología y el desarrollo de enseñanzas para los estudiantes que padezcan algún tipo de discapacidad o alguna limitación, a efectos de posibilitarles la continuación de los estudios. El estudiante que, por sus circunstancias, pueda necesitar de medidas especiales de este tipo, debe comunicárselo al profesor al principio del curso. Asimismo, los estudiantes extranjeros que puedan tener dificultades con el idioma deben comunicárselo al profesor. Las pruebas de evaluación pueden desarrollarse en inglés.

CSV:	ISPWKMG9DY1gtr1MakbL5z		Fecha:	29/01/2019 23:27:58	
Normativa:	Este documento es copia auténtica imprimible de un documento administrativo firmado electrónicamente y archivado por la Universidad Politécnica de Cartagena.				
Firmado Por:	Universidad Politécnica de Cartagena - Q8050013E				
Url Validación:	https://validador.upct.es/csv/ISPWKMG9DY1gtr1MakbL5z		Página:	6/15	

4. Competencias y resultados del aprendizaje

4.1. Competencias básicas* del plan de estudios asociadas a la asignatura

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

4.2. Competencias generales del plan de estudios asociadas a la asignatura

CG1.- Que los estudiantes hayan demostrado una comprensión detallada y fundamentada de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en el campo de la Ingeniería Ambiental y de Procesos Sostenibles.

CG2.- Que los estudiantes sean capaces de fomentar, en contextos profesionales, el avance tecnológico, social o cultural dentro de una sociedad basada en el conocimiento.

CG5.- Ser capaces de asumir la responsabilidad de su propio desarrollo profesional y de su especialización en uno o más campos del ámbito de la Ingeniería Ambiental y de Procesos Sostenibles

4.3. Competencias específicas* del plan de estudios asociadas a la asignatura

4.4. Competencias transversales del plan de estudios asociadas a la asignatura

4.5. Resultados** del aprendizaje de la asignatura

Al finalizar la asignatura el estudiante debe ser capaz de:


1. Identificar todos los aspectos que deben tenerse en cuenta en la simulación de procesos químicos.
2. Emplear correctamente las fuentes de información disponibles para consultar el estado de la técnica sobre distintos procesos.
3. Cuantificar la diferencia existente entre los resultados obtenidos en el diseño de procesos mediante distintos métodos para poder decidir sobre la aplicación de unos u otros modelos.
4. Manejar correctamente software de simulación de procesos químicos en estado estacionario.
5. Aplicar técnicas de optimización de procesos a partir de los resultados obtenidos con software de simulación.
6. Aplicar las bases teóricas para la estimación de propiedades físico-químicas de las sustancias que intervienen en un proceso químico y relacionarlas con los métodos de

estimación disponibles.

7. Seleccionar el modelo termodinámico más adecuado para la estimación de propiedades físico-químicas de los compuestos.
8. Manejar adecuadamente la bibliografía para obtener datos de proceso, propiedades físico-químicas y de equilibrio de sustancias.

**** Véase también la *Guía de apoyo para la redacción, puesta en práctica y evaluación de los resultados del aprendizaje*, de ANECA:**

http://www.aneca.es/content/download/12765/158329/file/learningoutcomes_v02.pdf

CSV:	ISPWKMG9DY1gtr1MakbL5z		Fecha:	29/01/2019 23:27:58	
Normativa:	Este documento es copia auténtica imprimible de un documento administrativo firmado electrónicamente y archivado por la Universidad Politécnica de Cartagena.				
Firmado Por:	Universidad Politécnica de Cartagena - Q8050013E				
Url Validación:	https://validador.upct.es/csv/ISPWKMG9DY1gtr1MakbL5z		Página:	8/15	

5. Contenidos

5.1. Contenidos del plan de estudios asociados a la asignatura

Criterios generales para el diseño de procesos químicos.
Fundamentos de la simulación de procesos.
Optimización de Procesos Químicos.
Estimación de propiedades físico-químicas.

5.2. Programa de teoría (unidades didácticas y temas)

Unidad Didáctica 1. Criterios generales para el diseño de procesos químicos.
Fases en el desarrollo del diseño. Justificación documental, definición del proceso, ámbito de aplicación y aspectos de diseño. Tipos de Diseño.

Unidad Didáctica 2. Fundamentos de la Simulación de Procesos.
Modelos matemáticos. Métodos de resolución de modelos. Análisis Global de sistemas.

Unidad Didáctica 3. Optimización de procesos químicos.
Definición de problemas de optimización. Herramientas de optimización. Programación lineal.

Unidad didáctica 4. Estimación de propiedades físico químicas.
Diagramas de equilibrio. Curvas de residuos. Estimación de condiciones de equilibrio mediante ecuaciones de estado y mediante coeficientes de actividad. Etapas del método de estimación de propiedades físicas. Estimación de entalpías.

Unidad Didáctica 5. Simulación de procesos químicos mediante computador.
Simuladores comerciales. Software de simulación de código abierto.

5.3. Programa de prácticas (nombre y descripción de cada práctica)

Práctica 1. Manejo básico del software de simulación Chemcad (P1). 2 horas.
Identificación de datos en menús y búsqueda de parámetros.

Práctica 2. Presentación gráfica de diagramas de flujo (P2). 2 horas.
Construcción de distintos diagramas de proceso incluyendo especificación de corrientes de proceso y manejo de bases de datos de componentes.

Práctica 3. Selección de modelos termodinámicos óptimos para la simulación de las propiedades fisicoquímicas, construcción de diagramas de equilibrio y obtención de las propiedades físicas. Obtención de parámetros de interacción binaria a partir de datos bibliográficos. (P3). 2 horas

Práctica 4. Simulación de unidades de proceso (P4) 2 horas: Reactores Químicos, Columnas de absorción, extracción y destilación, y diseño de intercambiadores de calor.

Práctica 5. Simulación de un proceso completo (P5). 2 horas.
Los estudiantes seleccionarán un proceso de entre los suministrados por el profesorado y realizará una simulación completa del mismo, incluyendo: selección de modelos termodinámicos para cálculos de equilibrio de fases y entalpía; utilización de datos bibliográficos; especificación de operaciones unitarias; análisis de errores y avisos; visualización de resultados; informe y representación gráfica.

Práctica 6. Optimización de procesos (P6). 2 horas
Sobre un proceso propuesto se desarrollarán varias propuestas de optimización mediante realización de análisis de sensibilidad.

Todas las prácticas se realizan en aula de informática y en horario presencial convencional. Son obligatorias.

Prevención de riesgos

La Universidad Politécnica de Cartagena considera como uno de sus principios básicos y objetivos fundamentales la promoción de la mejora continua de las condiciones de trabajo y estudio de toda la Comunidad Universitaria.

Este compromiso con la prevención y las responsabilidades que se derivan atañe a todos los niveles que integran la Universidad: órganos de gobierno, equipo de dirección, personal docente e investigador, personal de administración y servicios y estudiantes.

El Servicio de Prevención de Riesgos Laborales de la UPCT ha elaborado un "Manual de acogida al estudiante en materia de prevención de riesgos" que puedes encontrar en el Aula Virtual, y en el que encontraras instrucciones y recomendaciones acerca de cómo actuar de forma correcta, desde el punto de vista de la prevención (seguridad, ergonomía, etc.), cuando desarrolles cualquier tipo de actividad en la Universidad. También encontrarás recomendaciones sobre cómo proceder en caso de emergencia o que se produzca algún incidente.

En especial, cuando realices prácticas docentes en laboratorios, talleres o trabajo de campo, debes seguir todas las instrucciones del profesorado, que es la persona responsable de tu seguridad y salud durante su realización. Consúltale todas las dudas que te surjan y no pongas en riesgo tu seguridad ni la de tus compañeros.

5.4. Programa de teoría en inglés (unidades didácticas y temas)

Unit 1. General criteria for chemical process simulation.

Stages in design development. Documentation and references, process definition, scope and design aspects. Types of design.

Unit 2. Process simulation fundamentals.

Mathematical models. Methods for model resolution. Global analysis of systems.

Unit 3. Chemical process optimization.

Definition of optimization problems. Optimization tools. Linear Programming.

Unit 4. Estimation of physicochemical properties.

Equilibrium diagrams. Residue curves. Estimation of equilibrium conditions using equations of state and activity coefficients. Stages for physicochemical properties estimation methods. Enthalpy estimation.

Unit 5. Computer aided chemical process simulation.

Commercial simulators. Open access simulation software.

5.5. Objetivos del aprendizaje detallados por unidades didácticas

Unidad Didáctica 1. Criterios generales para el diseño de procesos químicos.

- Identificar todos los aspectos que deben tenerse en cuenta en el diseño de procesos químicos.
- Emplear correctamente las fuentes de información disponibles para consultar el estado de la técnica sobre distintos procesos.
- Priorizar adecuadamente cada uno de los aspectos a tener en cuenta durante el diseño de un proceso químico.
- Conocer las diferencias de alcance entre los distintos tipos de diseño en Ingeniería Química: Diseño de equipos, Diseño de procesos, Diseño de plantas.

Unidad Didáctica 2. Fundamentos de la simulación de procesos.

- Conocer las fases de elaboración de modelos matemáticos de procesos químicos.
- Estimar la relevancia de las suposiciones y simplificaciones de los modelos matemáticos de cara a su resolución y posterior validación.
- Realizar correctamente el análisis de grados de libertad de los modelos como paso previo a la selección de las variables de diseño.
- Escoger el método de resolución más adecuado para cada tipo de modelo, así como la herramienta informática más adecuada.
- Planificar la simulación de procesos completos mediante la selección adecuada de variables de corte y la ordenación de los flujos de información.

Unidad Didáctica 3. Optimización de procesos químicos.

- Identificar problemas de optimización mediante la correcta selección de las variables de diseño, función objetivo y restricciones de proceso.
- Aplicar técnicas de optimización mediante la realización de análisis de sensibilidad sobre los resultados de diversas simulaciones de proceso.

Unidad Didáctica 4. Estimación de propiedades físico-químicas.

- Identificar los Modelos Termodinámicos adecuados para simular el equilibrio entre fases y el contenido entálpico según los tipos de corrientes del proceso.
- Para un Modelo termodinámico, identificar los Parámetros de Interacción Binaria (BIP) de que dispone el simulador y discernir si se dispone de los BIP's más importantes para la simulación.
- Generar nuevos conjuntos de BIP's mediante regresión a partir de datos de equilibrio.
- Generar diagramas de equilibrio, curvas de residuos, etc y utilizarlos correctamente a la hora de decidir sobre las condiciones óptimas (presión y temperatura) de operación.
- Conocer todo el potencial que ofrecen los simuladores a la hora de buscar todo tipo de propiedades, tanto de compuestos puros como de mezclas.

Unidad Didáctica 5. Simulación de procesos químicos mediante computador.

- Manejar adecuadamente software comercial para la simulación de procesos en estado estacionario.
- Manejar adecuadamente software de código abierto para la simulación de procesos en estado estacionario.
- Presentar adecuadamente los resultados de una simulación, incluyendo diagramas de flujo, especificaciones de equipos, representaciones gráficas y análisis de resultados.

6. Metodología docente

6.1. Metodología docente*

Actividad*	Técnicas docentes	Trabajo del estudiante	Horas
Clases teóricas en aula	Clase expositiva mediante presentación y/o explicación del profesor. Resolución de dudas planteadas por los estudiantes.	<u>Presencial</u> : Asistencia. Toma de apuntes.	15
		<u>No presencial</u> : Estudio de la materia	15
Prácticas en aula de informática	Las sesiones prácticas en aula de informática con software de simulación.	<u>Presencial</u> : Participación activa. Demostración por el profesor y manejo de software de simulación	12
		<u>No presencial</u> : Manejo individual de software de simulación. Resolución de simulaciones propuestas por el profesor.	12
Realización de trabajos de investigación individual o en grupo	Se realizará una simulación de un proceso químico concreto de entre los propuestos por el profesorado. La evaluación del trabajo se realizará mediante exposición y defensa del mismos de forma individual ante el resto de compañeros y el profesor	<u>Presencial</u> : exposición de la simulación realizada.	1
		<u>No presencial</u> : realización de la simulación y preparación de la exposición de resultados.	20
Tutorías/Seminarios	Sesiones de apoyo a los estudiantes para orientación en el seguimiento de los temas que aborda la asignatura	<u>Presencial</u> : planteamiento de dudas.	1
		<u>No presencial</u> :	
Examen	En el caso de que algún alumno no haya asistido a las clases de teoría y prácticas de la asignatura, además de presentar un trabajo, tendrá que realizar un examen de la asignatura.	<u>Presencial</u> :	1
		<u>No presencial</u> :	
			75

6.2. Resultados (4.5) / actividades formativas (6.1)

	Resultados del aprendizaje (4.5)							
Actividades formativas (6.1)	1	2	3	4	5	6	7	8
Clases teóricas en aula	X	X	X	X	X	X	X	X
Prácticas en aula de informática				X	X	X	X	
Realización de trabajos de investigación individual o en grupo	X	X	X	X	X		X	X

7. Metodología de evaluación

7.1. Metodología de evaluación*

Actividad	Tipo		Sistema y criterios de evaluación*	Peso (%)	Resultados (4.5) evaluados
	Sumativa*	Formativa*			
Prueba escrita individual	X		Cuestiones teóricas orientadas a conceptos y definiciones, que evalúan principalmente los conocimientos teóricos.	0-50	1 a 8
Evaluación de las prácticas en aula de informática	X		Evaluación subjetiva de la participación del alumno en las sesiones de prácticas.	10	4 a 7
Evaluación de trabajos de Investigación individuales o en grupo	X		Se realizará una simulación de un proceso químico concreto de entre los propuestos por el profesorado. La evaluación del trabajo se realizará mediante exposición oral y defensa del mismo de forma individual (o grupal) ante el resto de compañeros y el profesorado de la asignatura	50-90	1 a 5, 7, 8

Tal como prevé el artículo 5.4 del *Reglamento de las pruebas de evaluación de los títulos oficiales de grado y de máster con atribuciones profesionales* de la UPCT, el estudiante en el que se den las circunstancias especiales recogidas en el Reglamento, y previa solicitud justificada al Departamento y admitida por este, tendrá derecho a una prueba global de evaluación. Esto no le exime de realizar los trabajos obligatorios que estén recogidos en la guía docente de la asignatura.

7.2. Mecanismos de control y seguimiento (opcional)

El seguimiento del aprendizaje se realizará mediante alguno o algunos de los siguientes mecanismos para la **valoración de las actividades de evaluación formativa y/o sumativa realizadas**:

- Asistencia y participación en las sesiones tanto teóricas como prácticas realizadas en el aula de informática.
- Valoración de la actitud del alumnado durante las clases.
- Resolución de trabajos prácticos propuestos
- Valoración de los informes entregados así como de la exposición oral realizada.

8 Bibliografía y recursos

8.1. Bibliografía básica*

- TURTON, R. Analysis, synthesis, and design of chemical processes. New York: Prentice-Hall, 2012. ISBN 9780132618120
Libro disponible en biblioteca UPCT:
http://unicorn.bib.upct.es/uhtbin/cgisirsi/x/0/0/57/5/3?searchdata1=216867{CKEY}&searchfield1=GENERAL^SUBJECT^GENERAL^^&user_id=WEBSEVER
- SEIDER, W.D. Product and process design principles, synthesis, analysis and evaluation. John Wiley, 2010. ISBN 9780470048955
Libro disponible en la biblioteca de la UPCT:
http://unicorn.bib.upct.es/uhtbin/cgisirsi/x/0/0/57/5/3?searchdata1=216684{CKEY}&searchfield1=GENERAL^SUBJECT^GENERAL^^&user_id=WEBSEVER
- SINNOTT, R. & TOWLER, G. Diseño en ingeniería química. Ed. Reverté, Barcelona 2012. ISBN 9788429171990.
Libro disponible en biblioteca UPCT:
http://unicorn.bib.upct.es/uhtbin/cgisirsi/x/0/0/57/5/3?searchdata1=215430{CKEY}&searchfield1=GENERAL^SUBJECT^GENERAL^^&user_id=WEBSEVER

8.2. Bibliografía complementaria*

- DAUBERT, T.E. and DANNERT, R.P., Physical and thermodynamic properties of pure chemicals data compilation. ISBN 0891169482
Libro disponible en biblioteca UPCT:
http://unicorn.bib.upct.es/uhtbin/cgisirsi/x/0/0/57/5/3?searchdata1=134561{CKEY}&searchfield1=GENERAL^SUBJECT^GENERAL^^&user_id=WEBSEVER
- PUIGJANER, L., OLLERO, P., DE PRADA, C., JIMÉNEZ, L. Estrategias de modelado, simulación y optimización de procesos. 2006. ISBN 8497564049
Libro disponible en biblioteca UPCT:
http://unicorn.bib.upct.es/uhtbin/cgisirsi/x/0/0/57/5/3?searchdata1=154037{CKEY}&searchfield1=GENERAL^SUBJECT^GENERAL^^&user_id=WEBSEVER

8.3. Recursos en red y otros recursos

<http://moodle.upct.es>

http://www.chemstations.com/content/documents/CHEMCAD_6_User_Guide_-_online.pdf