

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	46559
<b>Nombre</b>	Simulación y optimización avanzada de procesos
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	7.5
<b>Curso académico</b>	2023 - 2024

**Titulación(es)**

<b>Titulación</b>	<b>Centro</b>	<b>Curso</b>	<b>Periodo</b>
2261 - M.U. en Ingeniería Química	Escuela Técnica Superior de Ingeniería	1	Segundo cuatrimestre

**Materias**

<b>Titulación</b>	<b>Materia</b>	<b>Caracter</b>
2261 - M.U. en Ingeniería Química	7 - Simulación y optimización avanzada de procesos	Obligatoria

**Coordinación**

<b>Nombre</b>	<b>Departamento</b>
BORRAS FALOMIR, LUIS	245 - Ingeniería Química
RIBES BERTOMEU, JOSEP	245 - Ingeniería Química
RUANO GARCIA, MARIA VICTORIA	245 - Ingeniería Química

**RESUMEN**

La asignatura Simulación y Optimización Avanzada de Procesos tiene como objetivo general que el estudiante conozca la metodología utilizada para el desarrollo de modelos de operaciones unitarias básicas de la Ingeniería Química y sea capaz de aplicarlos correctamente a la simulación y optimización de procesos. Para ello, la asignatura se divide en dos bloques. En el primer bloque se verán los procedimientos de análisis y calibración de modelos matemáticos, y se aplicarán los conocimientos obtenidos mediante el uso del programa Matlab®. En el segundo bloque se aplicarán los modelos a la simulación de procesos industriales concretos, tanto en estado estacionario como transitorio, para el dimensionado de equipos y la optimización del proceso. En este bloque se resolverán casos prácticos mediante el uso de los simuladores comerciales Aspen Plus® y Aspen Hysys®.



Se trata de una asignatura obligatoria de carácter semestral que se imparte durante el segundo semestre del Máster en Ingeniería Química. En el plan de estudios actual consta de un total de 7,5 ECTS. Esta asignatura forma parte del módulo de Ingeniería de Procesos y Producto. La asignatura se imparte en Castellano.

## CONOCIMIENTOS PREVIOS

### Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

### Otros tipos de requisitos

## COMPETENCIAS

### 2261 - M.U. en Ingeniería Química

- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Capacidad para aplicar el método científico y los principios de la ingeniería y economía, para formular y resolver problemas complejos en procesos, equipos, instalaciones y servicios, en los que la materia experimente cambios en su composición, estado o contenido energético, característicos de la industria química y de otros sectores relacionados entre los que se encuentran el farmacéutico, biotecnológico, materiales, energético, alimentario o medioambiental
- Concebir, proyectar, calcular, y diseñar procesos, equipos, instalaciones industriales y servicios, en el ámbito de la ingeniería química y sectores industriales relacionados, en términos de calidad, seguridad, economía, uso racional y eficiente de los recursos naturales y conservación del medio ambiente



- Saber establecer modelos matemáticos y desarrollarlos mediante la informática apropiada, como base científica y tecnológica para el diseño de nuevos productos, procesos, sistemas y servicios, y para la optimización de otros ya desarrollados
- Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de emitir juicios y toma de decisiones, a partir de información incompleta o limitada, que incluyan reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas del ejercicio profesional
- Comunicar y discutir propuestas y conclusiones en foros multilingües, especializados y no especializados, de un modo claro y sin ambigüedades
- Adaptarse a los cambios, siendo capaz de aplicar tecnologías nuevas y avanzadas y otros progresos relevantes, con iniciativa y espíritu emprendedor
- Poseer las habilidades del aprendizaje autónomo para mantener y mejorar las competencias propias de la ingeniería química que permitan el desarrollo continuo de la profesión
- Ser capaces de acceder a herramientas de información en diferentes áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente
- Ser capaces de valorar la necesidad de completar su formación técnica, científica, en lenguas, en informática, en literatura, en ética, social y humana en general, y de organizar su propio autoaprendizaje con un alto grado de autonomía
- Habilidad para defender criterios con rigor y argumentos, y de exponerlos de forma adecuada y precisa
- Ser capaces de asumir la responsabilidad de su propio desarrollo profesional y de su especialización en uno o más campos de estudio
- Diseñar productos, procesos, sistemas y servicios de la industria química, así como la optimización de otros ya desarrollados, tomando como base tecnológica las diversas áreas de la ingeniería química, comprensivas de procesos y fenómenos de transporte, operaciones de separación e ingeniería de las reacciones químicas, nucleares, electroquímicas y bioquímicas
- Aplicar conocimientos de matemáticas, física, química, biología y otras ciencias naturales, obtenidos mediante estudio, experiencia, y práctica, con razonamiento crítico para establecer soluciones viables económicamente a problemas técnicos
- Conceptualizar modelos de ingeniería, aplicar métodos innovadores en la resolución de problemas y aplicaciones informáticas adecuadas, para el diseño, simulación, optimización y control de procesos y sistemas
- Tener habilidad para solucionar problemas que son poco familiares, incompletamente definidos, y tienen especificaciones en competencia, considerando los posibles métodos de solución, incluidos los más innovadores, seleccionando el más apropiado, y poder corregir la puesta en práctica, evaluando las diferentes soluciones de diseño
- Dirigir y supervisar todo tipo de instalaciones, procesos, sistemas y servicios de las diferentes áreas industriales relacionadas con la ingeniería química



## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Conocer los distintos tipos de modelos, estacionarios y dinámicos, para la simulación de procesos en Ingeniería Química.

Ser capaz de desarrollar modelos matemáticos, estimar el valor de los parámetros a partir de los datos experimentales y valorar el ajuste obtenido.

Conocer los algoritmos de optimización matemática más utilizados y ser capaz de aplicarlos a casos concretos mediante el uso de herramientas informáticas de cálculo numérico.

Ser capaz de llevar a cabo un análisis de sensibilidad e incertidumbre de un modelo matemático y extraer conclusiones.

Conocer los modelos de estimación de propiedades termodinámicas más utilizados en Ingeniería Química.

Conocer y adquirir habilidad en el uso de simuladores para el diseño de los equipos básicos utilizados en plantas químicas.

Ser capaz de optimizar el funcionamiento de una planta química completa utilizando simuladores (incluyendo tanto la integración de corrientes de proceso como de la energía) y de exponer los resultados.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Modelación matemática en la simulación y optimización de procesos.

Simulación de procesos químicos: modelos estacionarios y dinámicos. Formulación de modelos. Incertidumbre y sensibilidad de los parámetros. Análisis de sensibilidad global y local.

Estimación de parámetros. Método de mínimos cuadrados en la calibración de parámetros. Algoritmos de optimización avanzados. Estimación de la incertidumbre en los parámetros.

Uso de herramientas informáticas para la optimización y estimación de parámetros. Desarrollo de modelos complejos de simulación en Matlab®. Cálculo de la sensibilidad de los parámetros. Obtención de los parámetros más importantes. Aplicación de los algoritmos de optimización avanzados a la estimación de parámetros: Algoritmos genéticos y otros métodos de búsqueda.

### 2. Simulación y diseño de procesos mediante Aspen Plus® y Aspen Hysys®

Simulación en estado estacionario y dinámico. Selección y aplicación de los modelos de predicción de propiedades termodinámicas. Diseño de procesos industriales. Optimización. Dimensionado de equipos. Introducción a la utilización del Aspen Process Economic Analyzer® (APEA). Resolución de casos prácticos.

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en aula	23,00	100
Prácticas en laboratorio	22,00	100
Clases de teoría	16,00	100
Seminarios	10,00	100
Tutorías regladas	4,00	100
Elaboración de trabajos en grupo	50,00	0
Elaboración de trabajos individuales	10,00	0
Estudio y trabajo autónomo	23,00	0
Preparación de actividades de evaluación	20,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	10,00	0
<b>TOTAL</b>	<b>188,00</b>	

**METODOLOGÍA DOCENTE**

La asignatura se desarrollará mediante clases de teoría y clases prácticas.

**Actividades teóricas:** En las clases teóricas, mediante la lección magistral participativa, se desarrollarán los temas, proporcionando una visión global e integradora, analizando con mayor detalle los aspectos clave y de mayor complejidad, fomentando, en todo momento, la participación del estudiante. Asimismo se recomendará los recursos adecuados para la preparación posterior del tema en profundidad por parte del estudiante.

**Actividades prácticas:** Las clases prácticas servirán para complementar las actividades teóricas con el objetivo de aplicar los conceptos básicos y ampliarlos con el conocimiento y la experiencia que vayan adquiriendo los estudiantes durante la realización de los trabajos propuestos. Estas actividades se realizarán en el aula o en grupos reducidos. Comprenden los siguientes tipos de actividades presenciales:

- Clases de problemas y cuestiones en aula. El profesor explicará una serie de problemas tipo, que permiten al estudiante adquirir la destreza necesaria para analizar, plantear y resolver los problemas de cada tema. Algunos problemas se resolverán en clases prácticas de grupo reducido.
- Sesiones de discusión y resolución de problemas o trabajos. En estas sesiones, que se realizarán en grupos reducidos, se analizarán y discutirán una serie de ejercicios o trabajos previamente planteados por el profesor y trabajos realizados por los estudiantes en pequeños grupos. Estas sesiones se realizarán en clases prácticas de grupo reducido.
- Prácticas en aula informática. En estas sesiones, los alumnos utilizarán los simuladores comerciales Aspen Hysys® y Aspen Plus® para la aplicación práctica de los conocimientos y habilidades de



diseño, simulación y optimización, desarrollados durante la asignatura. Estas sesiones se realizarán en grupos reducidos.

Para el desarrollo de todas estas actividades, tanto los estudiantes como el profesor harán uso del Aula Virtual.

## EVALUACIÓN

Para la evaluación del aprendizaje del estudiante se considerará una evaluación continua, una evaluación de las actividades prácticas y una evaluación final, mediante dos modalidades:

### Modalidad A:

#### APARTADO

Actividades presenciales	5% SOBRE NOTA FINAL
Trabajos	60% SOBRE NOTA FINAL
Examen final	35% SOBRE NOTA FINAL

### Modalidad B:

#### APARTADO

Actividades presenciales	5% SOBRE NOTA FINAL
Trabajos	45% SOBRE NOTA FINAL
Examen final	50% SOBRE NOTA FINAL

Para poder optar a la modalidad A será necesaria una asistencia mínima a las sesiones de prácticas informáticas del 90%.

**Actividades presenciales:** Se basará en la participación y grado de implicación del estudiante en el proceso de enseñanza/aprendizaje, teniendo en cuenta la asistencia regular a las actividades presenciales previstas, y la resolución de cuestiones propuestas, de forma individual y/o en grupos pequeños.

**Trabajos:** Se basará en la resolución de un caso práctico mediante un simulador de procesos y la elaboración de un informe detallado que incluirá todos aquellos aspectos trabajados en las sesiones informáticas.

**Examen final:** El estudiante deberá realizar una prueba objetiva individual, que consistirá en un examen al final. Este examen constará tanto de cuestiones teórico/prácticas como de problemas, con el fin de comprobar que se han asimilado los conceptos básicos de la asignatura.



Para poder aprobar será necesario obtener una nota media de 5 puntos sobre 10, siempre que se obtenga una nota igual o superior a 5 puntos (sobre 10) en los trabajos y el examen final.

El sistema de evaluación es independiente de la convocatoria (1ª o 2ª).

## REFERENCIAS

### Básicas

- Nicolás J. SCENNA y col., 2007, Modelado, simulación y optimización de procesos químicos, Edutecne.
- Edgar, T. F., Himmelblau, D. M. and Lasdon, L. S., 2001. Optimization of Chemical Processes, McGraw-Hill.
- SEIDER, W.D, SEADER, J.D., LEWIN, D.R., 1999. Process Design Principles, John Wiley & Sons, New York

### Complementarias

- Steven C. Chapra y Raimond P. Canale, 1988. Métodos Numéricos para Ingenieros. McGraw-Hill, México.
- Ravindran, A., Ragsdell, K. M., Reklaitis, G. V., 2007. Engineering Optimization: Methods and Applications, John Wiley & Sons, New York.
- LUYBEN, W.L, 2006, Distillation design and control using Aspen Simulation, John Wiley & Sons, New York