



DATOS IDENTIFICATIVOS

Simulación y optimización de procesos químicos

Asignatura	Simulación y optimización de procesos químicos			
Código	V12G350V01702			
Titulación	Grado en Ingeniería en Química Industrial			
Descriptores	Creditos ECTS 6	Seleccione OB	Curso 4	Cuatrimestre 1c
Lengua	Gallego			
Impartición	Inglés			
Departamento	Ingeniería química			
Coordinador/a	Sánchez Bermúdez, Ángel Manuel			
Profesorado	Sánchez Bermúdez, Ángel Manuel			
Correo-e	asanchez@uvigo.es			
Web	http://http://eqea.uvigo.es			
Descripción general	<p>Materia obligatoria que se imparte en el 7º cuatrimestre de la Licenciatura en Química Industrial, una vez que los alumnos hayan estudiado las asignaturas en las que deben aportar los conocimientos necesarios para abordar esta asignatura, que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Métodos numéricos utilizados en ingeniería química. - Diseño de reactores químicos. - Diseño de equipos para operaciones de separación. - Diseño de equipos de transferencia de calor utilizados en procesos químicos. - Control y seguridad de procesos químicos. <p>Esta asignatura se imparte en el último año. EL alumno accede a ella después de adquirir y desarrollar habilidades para administrar fácilmente las herramientas informáticas de computación numérica, en cuyo uso continuarán trabajando y profundizando.</p>			

Competencias

Código	
B3	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.
B4	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 en la mención de Química Industrial.
C20	CE20 Capacidad para el análisis, diseño, simulación y optimización de procesos y productos.
D2	CT2 Resolución de problemas.
D6	CT6 Aplicación de la informática en el ámbito de estudio.
D8	CT8 Toma de decisiones.
D9	CT9 Aplicar conocimientos.
D10	CT10 Aprendizaje y trabajo autónomos.
D17	CT17 Trabajo en equipo.

Resultados de aprendizaje

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje
------------------------------------	---------------------------------------

Simular un diagrama de flujo de un proceso en régimen estacionario. Conocer los métodos más importantes de simulación de procesos (modular y basado en ecuaciones). Analizar las características estructurales de un proceso químico y determinar el orden de cálculo de las unidades, establecer el flujo de información y seleccionar las variables o corrientes de corte de forma adecuada. Resolver problemas de gran escala modelados por sistemas de ecuaciones algebraicas (sistemas dispersos).	B3 B4	C20	D6 D8 D9 D10 D17
Analizar un proceso, determinar sus grados de libertad y elegir las mejores variables para la optimización. Conocer los conceptos básicos de los algoritmos de optimización determinista más importantes, tanto en variables continuas como discretas. Modelar adecuadamente un problema de optimización y/o síntesis de procesos y usar las herramientas apropiadas para resolverlo.	B3 B4	C20	D6 D9 D17
Conocer los conceptos básicos del diseño de procesos a través de simuladores de proceso. La descomposición jerárquica y los fundamentos del diseño basado en superestructuras. Aplicar los conceptos de integración energética para el diseño de redes de intercambio de calor. Saber cómo adquirir y utilizar información bibliográfica y técnica relacionada con este tema. Conocimiento y aplicación de la terminología en inglés utilizada para describir los conceptos correspondientes a este tema.	B3 B4	C20	D2 D6 D9 D10

Contenidos

Tema

PARTE 1: SIMULACIÓN

TEMA 1. SIMULACIÓN DE PROCESOS. DIAGRAMAS DE FLUJO.
Simulación por ordenador. Tipos de simuladores. Optimización

TEMA 2. SIMULACIÓN MODULAR SECUENCIAL.
Descomposición del sistema a gran escala. Algoritmos de particionamiento. Descomposición de redes cíclicas máximas.

UNIDAD 3. SIMULACIÓN ORIENTADA A ECUACIONES.
Método de factorización local (criterio Markowitz). Reordenación "A priori" de matrices dispersas. Fase numérica

TEMA 4. GRADOS DE LIBERTAD DE UN DIAGRAMA DE FLUJO.
Grados de libertad. Resolución de sistemas de ecuaciones no cuadráticas. Elección de variables de diseño.

TEMA 5. PROPIEDADES FÍSICAS NUESTROS SIMULADORES DE PROCESO.
Obtención y empleo de las propiedades físicas. Sistemas de cálculo de propiedades físicas.

TEMA 6. DISEÑO CONCEPTUAL DE PROCESOS.
Síntesis jerárquica. Síntesis basada en programación matemática.
Ejemplos de aplicación: síntesis de redes de intercambiadores de calor (método de diseño "Pinch"). Extensiones del método Pinch.

TEMA 7. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS.

Conceptos básicos de optimización. Optimización no lineal sin restricciones. Conceptos básicos de optimización no lineal con restricciones (igualdad y desigualdad).

TEMA 8. MÉTODOS NUMÉRICOS DE OPTIMIZACIÓN. OPCIONAL SIN RESTRICCIONES.

Optimización multivariable sin restricciones. Método de gradiente El método de Newton. Métodos de la secante.

TEMA 9. PROGRAMACIÓN LINEAL (LP).

Definiciones y teoremas básicos de la programación lineal. Solución del problema El algoritmo Simplex. Programación cuadrática

TEMA 10. MÉTODOS NUMÉRICOS PARA OPTIMIZAR PROBLEMAS NO LINEALES CON RESTRICCIONES.

Métodos de penalización, barreras y métodos lagrangianos. Programación cuadrática sucesiva. Método de gradiente reducido.

TEMA 11. INTRODUCCIÓN A LA PROGRAMACIÓN MATEMÁTICA CON VARIABLES DISCRETAS.

Programación lineal entera mixta (MILP). Algoritmos de ramificación y alineación con relajación lineal. Programación no lineal entera mixta (MINLP).

TEMA 12. MODELADO CON VARIABLES BINARIAS.

Conceptos básicos de álgebra de Boole. Transformación de expresiones lógicas a expresiones algebraicas. Modelado con variables discretas y variables continuas.

ESTUDIO DE CASOS

Ejemplos prácticos de aplicación en industrias químicas y de proceso, utilizando software de simulación y optimización de procesos.

Planificación			
	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Actividades introductorias	5	6	11
Lección magistral	12	0	12
Trabajo tutelado	15	45	60
Resolución de problemas	10	15	25
Estudio de casos	15	22.5	37.5
Examen de preguntas de desarrollo	4.5	0	4.5

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías	
	Descripción
Actividades introductorias	Presentación e introducción al uso de los programas de simulación y optimización: Matlab, Python-Cantera, DWSIM, HYSYS e GAMS
Lección magistral	Exposición en clase de los conceptos y procedimientos claves para el aprendizaje del contenido del temario.
Trabajo tutelado	Realización por parte del alumno de un caso práctico personalizado a modo de proyecto de la asignatura en el que simulará y optimizará un proceso de producción de la ingeniería química.
Resolución de problemas	Resolución de aplicación de los métodos numéricos a problemas de modelización y optimización de la ingeniería química.
Estudio de casos	Resolución de casos prácticos y ejercicios de aplicación de los conocimientos relacionados con la materia con la ayuda del profesor y de forma autónoma.

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Estudio de casos	Atención para la resolución de dudas y seguimiento del trabajo diario del alumno.
Trabajo tutelado	Será un trabajo a realizar por el alumno con asistencia en tutorías por parte del profesor.
Actividades introductorias	Serán proporcionadas por el profesorado de la materia tanto en aula como en aula informática, planteando algún ejercicio para resolver por el alumno, siendo atendido éste en tutorías.

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje		
Trabajo tutelado	Un caso práctico a entregar antes del examen final de la asignatura.	20	B3 B4	C20	D6
Estudio de casos	Casos entregables por parte del alumno.	20	B3 B4	C20	D2 D6 D8 D9 D10 D17
Examen de preguntas de desarrollo	Examen teórico-práctico de conceptos y procedimientos claves.	60	B3 B4	C20	D2 D9

Otros comentarios sobre la Evaluación

Alumnos con evaluación continua:

-En la segunda convocatoria se conserva la nota de la evaluación continua.

Alumnos con renuncia oficial a la evaluación continua:

-El examen final valdrá el 100% de la nota para aquellos alumnos con renuncia a la evaluación continua concedida oficialmente por el centro.

Compromiso ético:

Se espera que el alumno presente un comportamiento ético adecuado. En el caso de detectar un comportamiento no ético (copia, plagio, utilización de aparatos electrónicos no autorizados, y otros) se considerará que el alumno no reúne los requisitos necesarios para superar la materia. En este caso la calificación global en el presente curso académico será de suspenso (0,0).

Fuentes de información

Bibliografía Básica

Kamal I.M. Al-Malah, **Aspen Plus: Chemical Engineering Applications**, 1st Edition, Wiley, 2016

Juma Haydary, **Chemical Process Design and Simulation: Aspen Plus and Aspen Hysys Applications**, 1st Edition, AIChE, 2019

D.M. Himmelblau, K.B. Bischoff, **Análisis y Simulación de Procesos**,

Simant Ranjan Upreti, **PROCESS MODELING AND SIMULATION FOR CHEMICAL ENGINEERS**, 1st Edition, Wiley, 2017

Bibliografía Complementaria

David. M. Himmelblau, **Optimization of Chemical Processes**, 2nd Edition, McGraw-Hill Higher Education, 2001

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Control e instrumentación de procesos químicos/V12G350V01603

Diseño de plantas químicas y de proceso/V12G350V01914

Modelado de procesos biotecnológicos/V12G350V01924

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Gestión y puesta en servicio de plantas químicas y de proceso/V12G350V01912

Optimización de productos/V12G350V01701

Procesos y productos biotecnológicos/V12G350V01922

Química orgánica industrial/V12G350V01923

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Ingeniería química I/V12G350V01405

Termodinámica y transmisión de calor/V12G350V01301

Experimentación en química industrial I/V12G350V01505

Experimentación en química industrial II/V12G350V01602

Ingeniería química II/V12G350V01503

Reactores y biotecnología/V12G350V01601

Calor y frío en la industria de proceso/V12G350V01913

Técnicas y gestión medioambientales/V12G350V01925

Otros comentarios

Os pilares que sustentan esta materia concréntanse no uso das técnicas de cálculo numérico, aplicado ós contidos propios da enxeñaría química: balances de materia i enerxía , fenómenos de transporte, termodinámica, fluidodinámica, termotecnia, operacións de separación, reactores , control de procesos , etc.).
