



DATOS IDENTIFICATIVOS

Simulación e optimización de procesos químicos

Materia	Simulación e optimización de procesos químicos			
Código	V12G350V01702			
Titulación	Grao en Enxeñaría en Química Industrial			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	4	1c
Lingua de impartición	Galego Inglés			
Departamento	Enxeñaría química			
Coordinador/a	Sánchez Bermúdez, Ángel Manuel			
Profesorado	Sánchez Bermúdez, Ángel Manuel			
Correo-e	asanchez@uvigo.es			
Web	http://http://eqea.uvigo.es			
Descrición xeral	Asignatura obrigatoria que se imparten no 7º cuadrimestre do Grao en Química Industrial, unha vez que o alumno estudou as materias nas que deben demostrar os coñecementos necesarios sobre: <ul style="list-style-type: none"> - Métodos numéricos empregados na enxeñaría química. - Deseño de reactores químicos. - Deseño de equipos para operacións de separación. - Deseño de equipos de transferencia de calor empregados en procesos químicos. - Control e seguridade dos procesos químicos. <p>Esta materia impártese no último ano. O alumno accede despois de adquirir e desenvolver habilidades para xestionar facilmente as ferramentas informáticas da informática dixital, nas que o uso seguirá funcionando e afondar.</p>			

Competencias

Código	
B3	CG3 Coñecemento en materias básicas e tecnolóxicas que os capacite para a aprendizaxe de novos métodos e teorías, e os dote de versatilidade para adaptarse a novas situacións.
B4	CG4 Capacidade para resolver problemas con iniciativa, toma de decisións, creatividade, razoamento crítico e capacidade para comunicar e transmitir coñecementos, habilidades e destrezas no campo da enxeñaría industrial na mención de Química Industrial.
C20	CE20 Capacidade para a análise, deseño, simulación e optimización de procesos e produtos.
D2	CT2 Resolución de problemas.
D6	CT6 Aplicación da informática no ámbito de estudo.
D8	CT8 Toma de decisións.
D9	CT9 Aplicar coñecementos.
D10	CT10 Aprendizaxe e traballo autónomos.
D17	CT17 Traballo en equipo.

Resultados de aprendizaxe

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe		
Simular un diagrama de fluxo dun proceso en réxime estacionario. Coñecer os métodos mais importantes de simulación de procesos (modular e baseado en ecuacións). Analizar as características estruturais dun proceso químico e determinar o orde de cálculo das unidades, establecer o fluxo de información e seleccionar as variables ou correntes de corte de forma axeitada. Resolver problemas de gran escala modelados por sistemas de ecuacións alxebraicas (sistemas dispersos).	B3	C20	D6
	B4		D8
			D9
			D10
			D17

Analizar un proceso, determinar os seus graos de liberdade e escoller as mellores variables para a súa optimización. Coñecer os fundamentos básicos dos algoritmos mais importantes de optimización determinista, tanto en variable continua como discreta. Modelar axeitadamente un problema de optimización e/ou síntese de procesos e utilizar as ferramentas axeitadas para resolverlo.

B3 C20 D6
B4 D9
D17

Coñecer os fundamentos básicos do deseño de procesos mediante simuladores de proceso. A descomposición xerárquica e os fundamentos do deseño baseado en superestructuras. Aplicar os conceptos de integración de enerxía para o deseño de redes de intercambio de calor. Saber adquirir e utilizar información bibliográfica e técnica referida a esta materia. Coñecemento e aplicación da terminoloxía inglesa empregada para describer os conceptos correspondientes a esta materia.

B3 C20 D2
B4 D6
D9
D10

Contidos

Tema

BLOCK 1: SIMULACIÓN

TEMA 1. SIMULACIÓN DE PROCESOS. DIAGRAMAS DE FLUXO.
Simulacións por computador. Tipos de simuladores. Optimización.

TEMA 2. SIMULACIÓN SECUENCIAL MODULAR.
Descomposición de sistemas a gran escala. Algoritmos de particionamento. Descomposición de Redes Cíclicas Máximas.

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

TEMA 4. GRAOS DE LIBERDADE DUN DIAGRAMA DE FLUXO.
Graos de liberdade. Solución de ecuacións Sistemas de ecuacións non lineais. Selección das variables de deseño.

TEMA 5. PROPIEDADES FÍSICAS EN SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS.
Obtención e uso de propiedades físicas. Uso dos sistemas de cálculo de propiedades físicas.

TEMA 6. DESEÑO CONCEPTUAL DE PROCESOS.
Síntese xerárquica. Síntese baseada na programación matemática. Exemplos de aplicación: Síntese de redes de cambiadores de calor (método de deseño "pinch"). Extensións do método de "pinch".

BLOQUE 2: OPTIMIZACIÓN

TEMA 7. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS.
Conceptos básicos sobre optimización. Optimización non liñal sin restriccións. Conceptos básicos da optimización non liñal con restriccións (igualdade e desigualdade).

TEMA 8. MÉTODOS NUMÉRICOS DE OPTIMIZACIÓN. OPTIMIZACIÓN SIN RESTRICCIÓNES.
Optimización multivariable sen restriccións. Método de gradiente. Método de Newton. Métodos da secante.

TEMA 9. PROGRAMACIÓN LIÑAL (LP).
Definicións e teoremas básicos da programación liñal. Resolución do problema. O algoritmo Simplex. Programación cuadrática.

TEMA 10. MÉTODOS NUMÉRICOS PARA A OPTIMIZACIÓN DE PROBLEMAS NON LIÑAIS CON RESTRICCIÓNES.
Métodos de penalización, barreira e Lagrangiana aumentada. Programación cuadrática sucesiva. Método do gradiente reducido.

TEMA 11. INTRODUCCIÓN A LA PROGRAMACIÓN MATEMÁTICA CON VARIABLES DISCRETAS.
Programación liñal enteira mixta (MILP). Algoritmos de ramificación e acotamento con relaxación liñal. Programación non lineal enteira mixta (MINLP).

TEMA 12. MODELADO CON VARIABLES BINARIAS.
Conceptos básicos do álgebra de Boole. Transformación de expresións lóxicas a expresións alxebraicas. Modelado con variables discretas e variables continuas.

Planificación			
	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Actividades introdutorias	5	6	11
Lección maxistral	12	0	12
Traballo tutelado	15	45	60
Resolución de problemas	10	15	25
Estudo de casos	15	22.5	37.5
Exame de preguntas de desenvolvemento	4.5	0	4.5

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente	
	Descrición
Actividades introdutorias	Presentación e introducción ó uso dos programas de simulación e optimización: Matlab, Python-Cantera, DWSIM, HYSYS e GAMS
Lección maxistral	Exposición en clase dos conceptos e procedementos chave para a aprendizaxe do contido do temario.
Traballo tutelado	Realización por parte do alumno dun caso práctico personalizado a modo de proxecto da asignatura no que simulará e optimizará un proceso de produción da enxeñaría química.
Resolución de problemas	Resolución de aplicación dos métodos numéricos á problemas de modelización e optimización da enxeñaría química.
Estudo de casos	Resolución de casos prácticos e exercicios de aplicación dos coñecementos relacionados coa materia coa axuda do profesor e de forma autónoma.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Estudo de casos	Se realizará en aula informática mediante programas de modelado e simulación, coa atención do profesor.
Traballo tutelado	Será un traballo a realizar polo alumno e asistencia en titorías por parte do profesor.
Actividades introdutorias	Serán proporcionadas polo profesorado da materia tanto en aula como en aula informática, plantexando algun exercicio a resolver polo alumno, sendo atendido éste en titorías.

Avaliación						
	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Traballo tutelado	Un caso práctico a entregar antes do exame final da asignatura.	20	B3 B4	C20	D6	
Estudo de casos	Casos entregables por parte do alumno.	20	B3 B4	C20	D2 D6 D8 D9 D10 D17	
Exame de preguntas de desenvolvemento	Exame teórico-práctico de conceptos e procedementos chave.	60	B3 B4	C20	D2 D9	

Outros comentarios sobre a Avaliación

Alumnos con avaliación continua: A avaliación continua aplicarase na primeira convocatoria.

Para os alumnos con renuncia concedida oficialmente polo centro á avaliación continua o exame final valerá o 100%.

Compromiso ético: Espérase que o alumno presente un comportamento ético adecuado. No caso de detectar un comportamento non ético (copia, plaxio, utilización de aparellos electrónicos non autorizados, e outros) considerarase que o alumno non reúne os requisitos necesarios para superar a materia. Neste caso a cualificación global no presente curso académico será de suspenso (0,0).

Bibliografía. Fontes 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

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Control e instrumentación de procesos químicos/V12G350V01603

Deseño de plantas químicas e de proceso/V12G350V01914

Modelaxe de procesos biotecnolóxicos/V12G350V01924

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Xestión e posta en servizo de plantas químicas e de proceso/V12G350V01912

Optimización de produtos/V12G350V01701

Procesos e produtos biotecnolóxicos/V12G350V01922

Química orgánica industrial/V12G350V01923

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Enxeñaría química I/V12G350V01405

Termodinámica e transmisión de calor/V12G350V01301

Experimentación en química industrial I/V12G350V01505

Experimentación en química industrial II/V12G350V01602

Enxeñaría química II/V12G350V01503

Reactores e biotecnoloxía/V12G350V01601

Calor e frío na industria de proceso/V12G350V01913

Técnicas e xestión medioambientais/V12G350V01925

Outros 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.).