



## 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	<a href="http://http://eqea.uvigo.es">http://http://eqea.uvigo.es</a>			
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"> <li>- Métodos numéricos empregados na enxeñaría química.</li> <li>- Deseño de reactores químicos.</li> <li>- Deseño de equipos para operacións de separación.</li> <li>- Deseño de equipos de transferencia de calor empregados en procesos químicos.</li> <li>- Control e seguridade dos procesos químicos.</li> </ul> <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 correspondentes a esta materia.

A 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.

#### ESTUDO DE CASOS

Exemplos prácticos de aplicación en industrias químicas e de proceso, utilizando software de simulación e optimización de procesos.

## Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Actividades introdutorias	2	8	10
Lección maxistral	6	0	6
Aprendizaxe baseado en proxectos	12	36	48
Estudo de casos	6	0	6
Simulación	0	18	18
Prácticas con apoio das TIC	24	0	24

Resolución de problemas de forma autónoma	0	25	25
Metodoloxías baseadas en investigación	0	10	10
Exame de preguntas de desenvolvemento	0	3	3

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

### Metodoloxía docente

	Descrición
Actividades introductorias	Presentación e introducción ó uso dos programas de simulación e optimización: Matlab, Python-Cantera, COCO SIMULATOR, CHEMPSEP, DWSIM, HYSYS e ASPEN PLUS
Lección maxistral	Presentación verbal organizada de temas referidos ós contidos da asignatura, impartidos polo profesor con axudas visuais. Este método didáctico didáctico, implica a comunicación unidireccional do presentador activo ós estudantes.
Aprendizaxe baseado en proxectos	Os estudantes traballarán nun proxecto durante un período de tempo prolongado (o cuatrimestre) que os involucre na resolución dun problema do mundo real ou na resposta a unha pregunta complexa. Demostran os seus coñecementos e habilidades creando un produto público ou unha presentación para un público real.
Estudo de casos	Se plantexan escenarios baseados en situacións nas que os alumnos observan, analizan, rexistran, implementan, conclúen, resumen ou recomendan. Os estudos de casos créanse e utilízanse como ferramenta de análise e discusión.
Simulación	O alumno ten que preparar, e documentar, unha simulación que implique un proceso orixinal, a mellora de un proceso documentado ou a optimización dun proceso ou planta existente, así como crear unha presentación pública do seu traballo.
Prácticas con apoio das TIC	Se plantexarán simulacións de parte de procesos ou unidades de operación para resolver coas distintas ferramentas informáticas que se contemplan na materia (simuladores de proceso, linguaxes de programación, etc.).
Resolución de problemas de forma autónoma	Se plantexará a resolución de problemas de libros tradicionais da enxeñaría química que serán resoltos mediante as ferramentas propostas na materia, como alternativa ós métodos tradicionais de resolución.
Metodoloxías baseadas en investigación	O alumno deberá documentar o uso de sistemas de busca bibliográfica así como de datos de interese na web (fontes de información titoriais, etc.).

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Simulación	O alumno propondrá unha simulación de un proceso novo, mellora de un existente ou optimización de un proceso ou planta ou, no seu caso, debe adoptar o asignado polo profesor que titorará de xeito individualizado ou por grupo cada unha das simulacións da clase.
Aprendizaxe baseado en proxectos	O profesor propondrá pequenos proxectos que os alumnos han de resolver mediante as ferramentas que se lles indiquen na clase e entregar para a súa puntuación dacordo á rúbrica correspondente que será publicada na plataforma de e-learning. Cada alumno debe entregar o traballo realizado en clase ó finalizar a mesma. Os proxectos recibirán unha puntuación acorde á rúbrica que se publicará na plataforma de e-learning.
Estudo de casos	Se plantexan escenarios baseados en situacións nas que os alumnos observan, analizan, rexistran, implementan, conclúen, resumen ou recomendan. Non haberá probas.
Prácticas con apoio das TIC	Na aula informática ou na aula de teoría se farán simulacións e resolución de problemas mediante ferramentas informáticas que han de ser entregados no memo día polos alumnos. cualificación estará rubricada por rúbrica publicada na plataforma de e-learning.

### Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Aprendizaxe baseado en proxectos	Se realizará durante todo o semestre e se entregará ó concluír as clases presenciais e antes do exame final. A cualificación estará rubricada por rúbrica publicada na plataforma de e-learning.	20	
Simulación	O alumno debe realizae e entregar unha simulación que contribúe á avaliación continua e que debe ser realizada de xeito tutelado durante todo o semestre. A cualificación estará rubricada por rúbrica publicada na plataforma de e-learning.	20	
Resolución de problemas de forma autónoma	Periódicamente o alimno debe entregar resoltos os problemas que se lle plantexan.	10	

Exame de preguntas de desenvolvemento	Corresponde ó exame final da asignatura que, no caso de renuncia á avaliación continua, será o total da nota. Está constituído por un ou varios casos, ou simulacións e a súa corrección estará asemesmo rubricada.	50
---------------------------------------	---	----

### **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**, Reverté, 2004

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

Diseño 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.).