

## 66212 - Simulación y optimización de procesos químicos

### Información del Plan Docente

**Año académico:** 2022/23

**Asignatura:** 66212 - Simulación y optimización de procesos químicos

**Centro académico:** 110 - Escuela de Ingeniería y Arquitectura

**Titulación:** 531 - Máster Universitario en Ingeniería Química

**Créditos:** 6.0

**Curso:** 1

**Periodo de impartición:** Primer semestre

**Clase de asignatura:** Obligatoria

**Materia:**

## 1. Información Básica

### 1.1. Objetivos de la asignatura

**La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:**

La *Simulación y Optimización de Procesos Químicos* se fundamenta en la utilización del cálculo avanzado para, haciendo uso de herramientas informáticas, predecir el comportamiento de un sistema incluso antes de que éste exista. Del mismo modo, y dada la potencia de la simulación como herramienta predictiva, es capaz de ser utilizado en las etapas de diseño, operación y desmantelamiento de una planta química, teniendo por tanto implicaciones en diseño, discriminación de alternativas, cálculo de costes, operación, optimización energética, seguridad y análisis de riesgos, logística, y un largo etcétera ligadas a la producción. Dada la particular característica de *¿sistema complejo?* que reúne una planta química, puede incluso ser utilizada para determinar propiedades sistémicas del propio proceso.

La pretensión de una asignatura como ésta en el contexto del Máster Universitario de Ingeniería Química es múltiple:

1. Que el estudiante adquiera un cierto grado de empatía con los simuladores comerciales actualmente en el mercado, identificando sus capacidades y sus limitaciones, y siendo capaz de interpretar cómo opera el simulador y en consecuencia extraer la máxima cantidad de información de él.
2. En un segundo nivel, no menos importante, el estudiante deberá ser capaz de desarrollar sus propios modelos y construir herramientas *¿ad-hoc?*, adecuándose al nivel de complejidad del problema y a sus circunstancias (medios limitados).
3. Por extensión, y como paso posterior a la simulación, el estudiante deberá ser capaz de llevar a cabo la optimización (técnica, medioambiental, económica,...), teniendo en cuenta las restricciones impuestas por el entorno, mediante la aplicación de técnicas específicas de optimización.

Estos planteamientos y objetivos están alineados con algunos de los Objetivos de Desarrollo Sostenible, ODS, de la Agenda 2030 (<https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/>) y determinadas metas concretas, de tal manera que la adquisición de los resultados de aprendizaje de la asignatura proporcionan capacitación y competencia al estudiante para contribuir en cierta medida a su logro:

- Objetivo 7: Garantizar el acceso a una energía asequible, segura, sostenible y moderna para todos.  
Meta 7.3 De aquí a 2030, duplicar la tasa mundial de mejora de la eficiencia energética.
- Objetivo 8: Promover el crecimiento económico sostenido, inclusivo y sostenible, el empleo pleno y productivo y el trabajo decente para todo.  
Meta 8.4 Mejorar progresivamente, de aquí a 2030, la producción y el consumo eficientes de los recursos mundiales y procurar desvincular el crecimiento económico de la degradación del medio ambiente, conforme al Marco Decenal de Programas sobre Modalidades de Consumo y Producción Sostenibles, empezando por los países desarrollados.
- Objetivo 9: Industria, innovación e infraestructuras.  
Meta 9.4 De aquí a 2030, modernizar la infraestructura y reconvertir las industrias para que sean sostenibles, utilizando los recursos con mayor eficacia y promoviendo la adopción de tecnologías y procesos industriales limpios y ambientalmente racionales, y logrando que todos los países tomen medidas de acuerdo con sus

capacidades respectivas.

- Objetivo 12: Garantizar modalidades de consumo y producción sostenibles.

Meta 12.2 De aquí a 2030, lograr la gestión sostenible y el uso eficiente de los recursos naturales.

Meta 12.4 De aquí a 2020, lograr la gestión ecológicamente racional de los productos químicos y de todos los desechos a lo largo de su ciclo de vida, de conformidad con los marcos internacionales convenidos, y reducir significativamente su liberación a la atmósfera, el agua y el suelo a fin de minimizar sus efectos adversos en la salud humana y el medio ambiente.

Meta 12.5 De aquí a 2030, reducir considerablemente la generación de desechos mediante actividades de prevención, reducción, reciclado y reutilización.

## 1.2. Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Tanto en la producción industrial, como en la investigación de cualquier proceso químico, un aspecto fundamental reside en la capacidad del ingeniero para modelar el fenómeno (proceso - unidad de proceso - sistema) que está analizando. Esto es, traducir a un modelo matemático los fenómenos físicos y químicos que se verifican de forma empírica. Durante los cursos de grado se han sentado las bases, de forma compartimentada (por asignaturas), que sustentan la *Simulación y Optimización de Procesos Químicos* (también conocida como *Análisis de Procesos Químicos*).

Una vez modelado, el siguiente paso consiste en extraer de él la mayor cantidad de información posible acerca del efecto producido por la variación de cada uno de los parámetros de los que éste depende.

Para llevar a cabo esta tarea, es imprescindible familiarizarse con las técnicas de construcción de modelos y cálculo numérico más adecuadas para cada caso, así como con las herramientas más habitualmente utilizadas para conseguir estos fines.

El objetivo último de esta asignatura es por tanto, el de familiarizar al ingeniero de procesos químicos, con cómo afrontar la simulación y optimización de éstos, bien utilizando herramientas comerciales, o creando las suyas propias, teniendo en cuenta el nivel de incertidumbre en las variables, la complejidad del sistema y las limitaciones de su entorno.

## 1.3. Recomendaciones para cursar la asignatura

La asignatura *Simulación y Optimización de Procesos Químicos*, tiene un marcado carácter transversal (asignatura de *integración*? de conocimientos), y por tanto se apoya en conocimientos y habilidades adquiridos en gran parte de las asignaturas cursadas durante el Grado de Ingeniería Química de la Universidad de Zaragoza. Los pilares que la sustentan se concretan en el uso de técnicas de cálculo numérico aplicado a los contenidos propios de la ingeniería química: *balances de materia y energía, fenómenos de transporte, termodinámica, fluidodinámica, termotecnia, operaciones de separación, reactores, control de procesos*, etc.).

Es muy recomendable haber desarrollado durante los cursos de grado un alto interés por las técnicas de programación en lenguajes de alto nivel (VBA, Fortran, Python,...), en aplicaciones de cálculo numérico (hoja de cálculo, EES, MATLAB, etc.) y en el uso de simuladores comerciales de procesos (Aspen Plus, Aspen Hysys, UniSim), aunque su desconocimiento no es excluyente.

El estudio continuado y el trabajo día a día (de modo autónomo o en grupo reducido), son fundamentales para que el alumno alcance de manera satisfactoria el aprendizaje propuesto. Los estudiantes deben tener en cuenta que para su asesoramiento disponen del profesor en tutorías personalizadas y grupales.

# 2. Competencias y resultados de aprendizaje

## 2.1. Competencias

**Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...**

### **Competencias Genéricas**

- 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. (CG1)
- 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. (CG2)
- 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. (CG5)
- Tener capacidad de análisis y síntesis para el progreso continuo de productos, procesos, sistemas y servicios

utilizando criterios de seguridad, viabilidad económica, calidad y gestión medioambiental. (CG6)

- 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. (CG7)
- Comunicar y discutir propuestas y conclusiones en foros multilingües, especializados y no especializados, de un modo claro y sin ambigüedades. (CG9)
- Adaptarse a los cambios, siendo capaz de aplicar tecnologías nuevas y avanzadas y otros progresos relevantes, con iniciativa y espíritu emprendedor. (CG10)
- 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. (CG11)

### **Competencias Específicas**

- 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. (CE1).
- 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. (CE2)
- 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. (CE3)
- 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. (CE4)
- Diseñar, construir e implementar métodos, procesos e instalaciones para la gestión integral de suministros y residuos, sólidos, líquidos y gaseosos, en las industrias, con capacidad de evaluación de sus impactos y de sus riesgos. (CE6)

## **2.2. Resultados de aprendizaje**

**El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...**

- Realiza el modelado matemático de fenómenos y unidades de proceso propios de la Ingeniería Química, así como de las interacciones entre las distintas unidades que conforman un sistema (diagrama de flujo del proceso). Asimismo, es capaz de elegir la escala de simulación más adecuada a los intereses del objetivo fijado a priori.
- Sabe elegir simplificaciones asumibles en función del destino de los resultados de la modelización. Es capaz de escoger un adecuado compromiso entre los binomios *?detalle-precisión?* y *?robustez-economía de resolución?*.
- Resuelve modelos de simulación de unidades y procesos mediante herramientas de cálculo *?ad-hoc?* y utiliza programas comerciales de cálculo con el mismo propósito. Adicionalmente, adecúa la herramienta utilizada al nivel de complejidad, disponibilidad y circunstancias.
- Conoce la técnica de optimización de procesos más acorde a la complejidad y precisión del problema a resolver.
- Analiza correctamente los resultados obtenidos en la simulación-optimización. Critica los resultados y les asigna una cota de validez/incertidumbre.

## **2.3. Importancia de los resultados de aprendizaje**

El seguimiento y superación de la asignatura tiene como finalidad completar la formación científica y técnica del estudiante, y fijar los conocimientos específicos del módulo de *Ingeniería de Procesos y Producto*, definido en Resolución de 8 de junio de 2009 de la Secretaría General de Universidades *?BOE 4 agosto 2009?*. Concretamente en el ámbito del *Simulación y Optimización de Procesos Químicos*.

El enfoque de la asignatura es doble: por un lado aporta conocimientos y modos de trabajo hasta ahora desconocidos por el graduado (técnicas de simulación y optimización), y por otro cohesiona los conocimientos adquiridos en distintas asignaturas del grado alineándolos en la consecución de un problema multidimensional común (asignatura de *?integración de conocimientos?*).

La *Simulación y Optimización de Procesos* es una herramienta imprescindible como elemento predictivo. Como

consecuencia del estudio de un sistema complejo, el ingeniero será capaz de determinar el efecto que sobre un determinado sistema o elemento, supone la modificación de los parámetros de operación (p.ej. la temperatura, presión o concentración sobre la cinética de reacción, difusión de contaminantes en un medio gaseoso, equilibrio de fases en una unidad de separación, etc.). Del mismo modo, aprenderá que cualquier efecto aplicado sobre uno de los elementos del sistema, repercute en el comportamiento del resto de la unidad de proceso y por tanto de todo el sistema.

Dicha información, obtenida en laboratorio o en planta piloto, es la clave para la modelización de todo el proceso. Finalmente, la simulación resulta ser un elemento clave para proceder al cambio de escala (*scale-up* o *scale-down*), o a la extrapolación y cuantificación del efecto producido sobre el sistema por la modificación de cualquier cambio en las variables del proceso. Esta asignatura supone el cambio de paradigma ya enunciado a finales de la década de los setenta del pasado siglo: "*Simula y construye*" en lugar "*Construye y prueba*".

## 3. Evaluación

### 3.1. Tipo de pruebas y su valor sobre la nota final y criterios de evaluación para cada prueba

**El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación**

#### **Opción 1:**

Es la opción más recomendable para la adquisición progresiva de los contenidos, habilidades y competencias de la asignatura.

La evaluación es global y comprende:

1. Realización de los problemas y casos propuestos (**CPP**) a lo largo del desarrollo de la asignatura. Ejercicios propuestos y resueltos valorados por observación.
2. Realización de trabajos tutelados (**TTE**). Los entregables correspondientes a trabajos tutelados (1-2 tareas por curso) consistirán en ejercicios para el desarrollo de habilidades en construcción de herramientas de simulación propias (*ad-hoc*). Se tratará de ejercicios resueltos de forma individual. Se valorarán, tanto la eficacia en la resolución, como la flexibilidad de la herramienta. Igualmente se pondrá especial atención en la presentación de la herramienta (habitualmente será escrita *-siempre en soporte electrónico-*, pero opcionalmente alguna de ellas puede serlo de forma oral).
3. Realización de un ejercicio práctico de gran envergadura (*Trabajo Fin de Curso*) (**TFC**). Dicho ejercicio, que se realizará en grupos de 2 ó 3 alumnos, comprenderá la simulación y optimización de un proceso completo propuesto por el profesor de la asignatura. Se calificará atendiendo a la calidad de la resolución, a las técnicas empleadas, el desarrollo de herramientas propias, la coherencia de los resultados y la presentación de los mismos.
4. Realización de un *examen* (**EXA**) al finalizar la asignatura. Esta prueba, que será del tipo *libro abierto*, consistirá en la resolución de ejercicios de tipo práctico utilizando los recursos (*libros, apuntes, tablas de datos, calculadora programable, etc.*), que el alumno considere conveniente. La resolución del examen siempre será individual. Si se reúnen las condiciones necesarias para asegurar la individualidad de los ejercicios (no existencia de comunicación entre alumnos durante el transcurso del ejercicio de examen), podría utilizarse ordenador personal como herramienta de cálculo de altas prestaciones.

La nota de la asignatura se calculará atendiendo a la siguiente ponderación:

$$\text{Nota} = 0.1 * \text{CPP} + 0.1 * \text{TTE} + 0.2 * \text{TFC} + 0.6 * \text{EXA}$$

Todas las categorías de evaluación se puntuarán sobre 10 puntos. Se precisará una nota mínima en el examen (**EXA**), de 4 puntos sobre 10 para superar la asignatura.

Los epígrafes 1 a 3 sólo serán puntuables durante el transcurso del periodo de impartición de la docencia de la asignatura.

#### **Opción 2:**

Aquellos alumnos que decidan no utilizar el método de evaluación descrito como **Opción 1**, pueden optar por presentarse exclusivamente al examen de convocatoria (**EXA**). En este caso, la calificación de la asignatura se calculará como un 100% de la nota final.

$$\text{Nota} = 1.0 * \text{EXA}$$

Será posible ser evaluado por esta segunda opción tanto en primera como en segunda convocatoria.

El mencionado examen (**EXA**) será de similares características a las del examen final de la **Opción 1**, incluyendo adicionalmente el desarrollo de una herramienta '*ad-hoc*' como las descritas en el epígrafe 2 del **Opción 1**. Para el desarrollo de esta última prueba (herramienta '*ad-hoc*') se dispondrá de un plazo acorde a la complejidad del ejercicio que se plantee. En este caso la nota mínima en su conjunto para superar la asignatura será 5.0. Las opciones de evaluación 1 y 2 son mutuamente excluyentes (puede optarse libremente por una u otra, pero no por combinaciones de ambas).

Las calificaciones alcanzadas serán válidas exclusivamente durante el curso académico en el que se obtengan.

## 4. Metodología, actividades de aprendizaje, programa y recursos

### 4.1. Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

Los temas de esta asignatura se distribuyen en dos bloques bien diferenciados (A y B), correspondientes a los descriptores del título: A) *Simulación de Procesos Químicos* y B) *Optimización de Procesos Químicos*. La secuencia de exposición es importante por cuanto que la *Optimización* está fuertemente basada en los modelos, que son el resultado de la *Simulación*.

Tanto uno como otro se desgranar en temas que agrupan conocimientos con un *leitmotiv* común. Esta elección determina que la extensión de los temas no sea homogénea, encontrando temas que requieren mayor número de horas de exposición y otros de menor duración. Algo similar ocurre respecto a la distribución de la tipología docente: algunos temas contienen una carga *teórica* mayor que otros, que prácticamente están desprovistos de dicho atributo, y sin embargo requieren de un mayor número de horas de resolución de ejercicios.

Aunque a lo largo del curso se alternan clases de teoría con clases de carácter práctico (resolución de ejercicios y casos de estudio), la asignatura tiene carácter eminentemente práctico. Su espíritu puede resumirse en una frase atribuida a Confucio: *Lo oigo y lo olvido. Lo veo y lo recuerdo. Lo hago y lo comprendo?*

Paralelamente a las clases de corte tradicional, se han planificado sesiones de laboratorio con dos objetivos: familiarizar al estudiante con el uso de simuladores comerciales (*Aspen Plus, Aspen Hysys, UniSim*), además de proporcionar una experiencia *"hands-on"* para la resolución de distintos tipos de problemas de modelado en la industria de procesos, que deberán ser resueltos con las herramientas más adecuadas a cada situación. Del mismo modo, se impartirán seminarios prácticos sobre el uso de herramientas de cálculo (*Hoja de cálculo, Matlab / Octave, EES, Python,...*) para la resolución de problemas planteados a lo largo del curso.

### 4.2. Actividades de aprendizaje

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

Clases magistrales (30 h) donde se impartirá la teoría de los distintos temas que se han propuesto y se resolverán problemas modelo.

Clases presenciales de resolución de problemas y casos (20 h). En estas clases se resolverán problemas por parte del alumno supervisado por el profesor. Los problemas o casos estarán relacionados con la parte teórica explicada en las clases magistrales.

Sesiones de laboratorio (8 h) donde, mediante un ejercicio práctico, el alumno afianzará los contenidos desarrollados en las clases magistrales.

Sesión de prácticas especiales (2 h) correspondientes a visita a empresa, charla de expertos, seminario temático o similar, etc? como complemento formativo a las actividades anteriores.

Trabajos tutelados (14 h no presenciales), individuales ó en grupo. Se propondrán 2 ó 3 actividades que serán tuteladas por los profesores.

Trabajos de aplicación e investigación prácticos. (10 h no presenciales), consistentes en la resolución en grupo (2 ó 3 alumnos) de un problema de gran envergadura. Será tutorizado por el profesor, corregido y puntuado.

Estudio individual (60 h no presenciales). Se recomienda al alumno que realice el estudio individual de forma continuada a lo largo del semestre.

Evaluación (6 h). Se realizará una prueba global (examen), donde se evaluarán los conocimientos teóricos y prácticos alcanzados por el alumno.

### 4.3. Programa

El temario previsto para la asignatura es el siguiente:

#### BLOQUE A.- SIMULACIÓN

1. Introducción: Modelos y Sistemas. Análisis de Procesos. Simuladores comerciales vs. herramientas *ad-hoc?*. Software para simulación: simuladores, lenguajes de programación e intérpretes. Simulación y Optimización en la Ingeniería de Procesos.
2. Diagramas de Bloques, de Flujo y de P&ID. Recirculación, purga y Bypass. Técnicas de simulación de procesos. Técnicas de convergencia. Análisis de grados de libertad de un sistema.
3. Descomposición de diagramas de flujo. Corrientes de corte. Estrategias de resolución. Algoritmos. Convergencia numérica: Algoritmos de Newton y Wegstein.
4. Modelos para estimación de propiedades termodinámicas: Ecuaciones de estado (EOS), Modelos de actividad. Modelos de fugacidad. Modelos de entalpía.
5. Modelos de unidades auxiliares. Convencionalismos. Modelos de unidades en régimen estacionario: Mezcladores, Separadores de corrientes, Separadores de componentes. Equipos de impulsión: Bombas, compresores y expansores.
6. Modelos para Reactores Conceptuales: Conversión Fija, Reactor de Equilibrio, Reactor de Gibbs.
7. Modelos para Reactores Ideales: Flujo en Pistón (PFR), Mezcla Perfecta (CSTR), Reactor Discontinuo (BATCH).

Reactores NO Ideales.

8. Unidades de Separación I. Equilibrio L-V. Separadores de fases (flash). Condiciones de operación característica. Determinación de variables de estado en corrientes de proceso.

9. Unidades de Separación II. Destilación: Modelos heurísticos para destilación multicomponente, Métodos Semi-rigurosos. Claves para resolución por métodos Rigurosos. Absorción y Arrastre: Modelos heurísticos.

10. Unidades con intercambio de calor: Cambiadores de Calor y Reactores. Balances de entalpía. Ciclos de Hess. Efecto de la presión.

11. Simulación dinámica de unidades de proceso. Técnicas generales de cálculo. Casos de estudio.

12. Introducción a la estimación de costes. Rentabilidad y Beneficio. Amortización de equipos. Reglas heurísticas de dimensionado de equipos de proceso. Índice de escala - Regla de Williams. Método de *Guthrie* simplificado. Índices de apreciación de costes.

## **BLOQUE B.- OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS**

13. Introducción a la optimización de procesos. Elementos para optimización de procesos químicos. Técnicas de optimización.

14. Optimización No-lineal (NLP) con y sin restricciones. Método de Powell. Método de Nelder y Mead. Métodos de Máximo Gradiente.

15. Optimización Lineal (LP). Método de resolución gráfica. Método del SIMPLEX lineal.

16. Técnicas avanzadas de optimización aplicadas a unidades y procesos. Métodos evolutivos: Algoritmos genéticos, Recocido simulado, Evolución diferencial, *Tabu search*. Optimización multiobjetivo.

17. Optimización de redes de intercambiadores de calor. Método de PINCH. Mínimo consumo de energía. Mínimo número de HX.

18. Optimización dinámica de unidades de proceso.

### **4.4. Planificación de las actividades de aprendizaje y calendario de fechas clave**

El calendario detallado de comienzo de las actividades, así como el lugar de impartición de cada una de ellas es responsabilidad de la *Escuela de Ingeniería y Arquitectura (EINA)*, y puede ser consultado en tiempo y forma en la web pulsando aquí. Como referencia, puede consultarse las actividades del curso 2021-22 pulsando aquí. Adicionalmente, cada profesor informará sobre su disponibilidad para la atención de tutorías y sobre las modificaciones, puntuales o prolongadas que puedan producirse en éstas a lo largo del curso.

Se trata de una asignatura obligatoria de 6 créditos ECTS, lo que equivale a 150 horas de trabajo del estudiante, repartidas según la descripción del apartado 4.2 '*Actividades de aprendizaje*'

### **4.5. Bibliografía y recursos recomendados**

<http://psfunizar10.unizar.es/br13/egAsignaturas.php?codigo=66212>