



GUÍA DOCENTE 2024/25

Centro 310 - Facultad de Ciencia y Tecnología

Ciclo Indiferente

Plan INQUI15b - Máster Universitario en Ingeniería Química

Curso Indiferente

ASIGNATURA

504255 - Modelado y simulación de procesos químicos

Créditos ECTS : 6

DESCRIPCIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN DE LA ASIGNATURA

Esta asignatura es una de las nucleares del Área de Conocimiento y por ello forma parte del conjunto de asignaturas obligatorias, estando presente en todos los estudios de máster en Ingeniería Química en España y en el resto del mundo. Para su máximo aprovechamiento es necesario haber cursado las materias básicas del corpus de la Ingeniería Química, tanto las que ahondan en los Fenómenos de Transporte (Mecánica de Fluidos, Transmisión de Calor, Transferencia de Materia) como las que abordan el diseño del reactor químico (Cinética de los Procesos Químicos, Diseño de Reactores) y de las operaciones de separación (Procesos de Separación). Además es recomendable disponer de conocimientos en materias complementarias como Cálculo Numérico, Termodinámica, Instrumentación y Control y Programación (todas ellas incluidas en el Grado en Ingeniería Química y en muchos Grados de Enseñanzas Técnicas). El conocimiento y manejo de lenguajes de programación científicos como Scilab y Matlab y de herramientas de simulación de procesos químicos en estado estacionario como Proll, ASPEN, HYSIS o DWSIM es deseable aunque no preceptivo. La asignatura está muy relacionada con todas las materias del Máster que amplían el conocimiento de los pilares de la Ingeniería Química: Ampliación de Reactores Químicos, Control Avanzado de Procesos, Operaciones Avanzadas de Separación y Optimización Avanzada de Procesos Químicos. Su estudio y superación dota al alumnado de la capacidad de abordar el modelado y simulación en estado no estacionario de procesos fisicoquímicos de interés industrial, aprovechando la capacidad de cálculo de los microprocesadores para construir herramientas que permitan abordar el estudio del efecto de las variables de diseño y de operación sobre los resultados del proceso. Las posibilidades de aplicación de los conocimientos aquí adquiridos en el desarrollo de la práctica profesional son por tanto ilimitadas.

COMPETENCIAS / RESULTADOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

COMPETENCIAS DE LA ASIGNATURA

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

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

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

RESULTADOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Tras cursar la asignatura, el alumnado será capaz de:

- Identificar los fenómenos fundamentales que controlan un proceso
- Desarrollar el modelado matemático
- Resolver las ecuaciones mediante herramientas de cálculo avanzadas
- Evaluar la adecuación del modelo desarrollado en base al análisis de los resultados
- Proponer y ejecutar la simulación de situaciones diversas y estudiar la respuesta del modelo

CONTENIDOS TEÓRICO-PRÁCTICOS

Balances de materia y cantidad de movimiento en estado estacionario y no estacionario. Transferencia en la interfase
Balances microscópicos de materia y cantidad de movimiento en estado estacionario y no estacionario: ecuación de continuidad. Distribución de velocidad

Balances de energía macroscópicos en estado estacionario y no estacionario. Transferencia en la interfase

Balances de energía microscópicos: distribución de temperaturas en medios sólidos y en medios fluidos

Balances de materia macroscópicos y microscópicos en sistemas multicomponentes. Distribución de concentraciones con una o más variables independientes. Transferencia en la interfase

Balances de materia macroscópicos y microscópicos en sistemas multicomponentes con reacción química. Incorporación del modelo cinético al balance de materia. Distribución de concentraciones con una o más variables independientes

Métodos de resolución de las ecuaciones resultantes del modelado: ecuaciones múltiples lineales, ecuaciones múltiples no lineales, ecuaciones diferenciales ordinarias y ecuaciones diferenciales parciales

Preparación de software informático para evaluación y uso externo el modelo desarrollado.



METODOLOGIA (ACTIVIDADES FORMATIVAS)

Actividad Formativa	Horas	Porcentaje presencialidad
Presentación y defensa de proyectos	6	100 %
Clases expositivas	12	100 %
Manejo de fuentes y recursos	17	0 %
Trabajo en grupo	30	40 %
Análisis de casos	40	30 %
Ejercicios	45	40 %

TIPOS DE DOCENCIA

Tipo de Docencia	M	S	GA	GL	GO	GCL	TA	TI	GCA
Horas de Docencia Presencial	12				48				
Horas de Actividad No Presencial del Alumno/a	18				72				

Leyenda: M: Magistral S: Seminario GA: P. de Aula
GL: P. Laboratorio GO: P. Ordenador GCL: P. Clínicas
TA: Taller TI: Taller Ind. GCA: P. de Campo

HERRAMIENTAS Y PORCENTAJES DE CALIFICACIÓN

Denominación	Ponderación mínima	Ponderación máxima
Examen escrito	0 %	40 %
Exposiciones	20 %	40 %
Trabajos Prácticos	40 %	80 %

CONVOCATORIA ORDINARIA: ORIENTACIONES Y RENUNCIA

CRITERIOS DE EVALUACIÓN:

(1) EJERCICIOS VOLUNTARIOS: 30%

Ejercicios Teóricos: La máxima calificación requiere de un informe bien escrito y razonado donde se describa adecuadamente el planteamiento de los balances correspondientes al sistema propuesto.

Ejercicios Prácticos: Para conseguir la máxima calificación se deberá entregar el algoritmo chequeado y validado para un funcionamiento correcto y un informe con (1) el planteamiento de los balances correspondientes al sistema propuesto, (2) el desarrollo matemático necesario para obtener el modelo del sistema, (3) un diagrama de flujo del algoritmo explicando la estrategia de resolución y (4) un análisis de los resultados de las simulaciones.

Este apartado se satura con la realización correcta de cinco de los ocho ejercicios propuestos.

(2) EJERCICIO GUI: 20%

La valoración de la GUI se realizará en base a los siguientes criterios:

Operatividad (0-10, peso 5)

No elementos (1 punto/elemento, peso 1)

No elementos diferentes (1 punto/tipo elemento, peso 3)

Estética (0-10, peso 2)

Originalidad (0-10, peso 2)

(3) SEGUIMIENTO DE LA ASIGNATURA: 10%

Glosario: Cada aportación original se valorará con 1 punto.

Foro P&C:

Pregunta: 1 punto

Primera respuesta: 2 puntos

Respuesta excelente: 3 puntos

Para obtener la calificación de este apartado se sumarán todos los puntos obtenidos en el Glosario y en el Foro y se dividirá el resultado entre 4.

Este apartado se satura con 40 puntos.

(4) EXAMEN FINAL: 40%

El examen final consistirá en la realización de un ejercicio completo de modelado y simulación de un proceso concreto, en el que se podrá utilizar todo el material disponible en egela.

NOTA FINAL: En todas las actividades evaluadas se deberá obtener una calificación mínima de 4/10.

RENUNCIA: El o la estudiante deberá comunicar antes de la realización del examen y por escrito su deseo de renunciar a la convocatoria ordinaria. Para ello se dirigirá mediante correo electrónico a todo el profesorado de la asignatura y a la persona coordinadora del Máster.

COVID-19:

Si debido a las recomendaciones de las autoridades sanitarias no se pudiera realizar la evaluación presencial, se propondrá al alumnado un procedimiento de evaluación no presencial.



CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA: ORIENTACIONES Y RENUNCIA

CRITERIOS DE EVALUACIÓN: Los mismos que en la convocatoria ordinaria.

RENUNCIA: El o la estudiante deberá comunicar antes de la realización del examen y por escrito su deseo de renunciar a la convocatoria extraordinaria. Para ello se dirigirá mediante correo electrónico a todo el profesorado de la asignatura y a la persona coordinadora del Máster.

MATERIALES DE USO OBLIGATORIO

Aula virtual egela
Software: Scilab y Matlab

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía básica

Ingham, J., Dunn, I.J., Heizle, E., Prenosil, J.E., Snape, J.B. Chemical Engineering Dynamics. An Introduction to Modelling and Computer Simulation. 3rd Ed. Wiley-VCH, 2007
Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E. N., Transport phenomena, 2nd edition, Wiley (2005)

Bibliografía de profundización

Ramírez, W.F., Computational Methods for Process Simulations, Butterworths, 1989.
Welty, J.R., C.E. Wicks, R.E. Wilson, and G. Rorrer, Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer, 4th edition, Wiley (2000).
Constantinides, A., Mostoufi, N., Numerical Methods for Chemical Engineers with Matlab Applications, Prentice Hall (1999)
Marchand, P., Holland, O.T., Graphics and GUIs with Matlab, 3rd edition, Chapman & Hall/CRC (2003)

Revistas

www.sciencedirect.com/science/bookseries/15707946

Direcciones de internet de interés

www.scilab.org
www.mathworks.es
cacheme.org
chengineer.com