

Máster en Iniciación a la Investigación Ingeniería Química y Medioambiente

67006 - Técnicas avanzadas de simulación y optimización de procesos químicos

Guía docente para el curso 2010 - 2011

Curso: 1, Semestre: 1, Créditos: 3.0

Información básica

Profesores

- José Ángel Peña Llorente jap@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda un buen nivel de conocimientos sobre técnicas de cálculo numérico y de optimización, así como en los contenidos propios de la ingeniería química (balances de materia y energía, fenómenos de transporte, termodinámica, fluidodinámica, diseño de unidades de proceso, etc.).

Asimismo, es muy recomendable un alto interés por las técnicas de programación en lenguajes de alto nivel (VBA, Fortran,...), en aplicaciones de cálculo numérico (hoja de cálculo, EES, MATLAB, etc.) y en el uso de simuladores comerciales de procesos (Aspen Plus, Hysys).

Actividades y fechas clave de la asignatura

Según el calendario establecido para todo el Máster. A modo orientativo, puede consultarse en esta [dirección web](#), el calendario correspondiente a los cursos precedentes. Las particularidades serán publicadas en la página web del [Anillo Digital Docente](#) de la asignatura, en su apartado "Calendario".

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

- 1:** Es capaz de llevar a cabo el modelado matemático de fenómenos y unidades de proceso propios de la Ingeniería Química, así como eventualmente, las interacciones entre las distintas unidades que conforman un sistema (proceso). Asimismo, es capaz de elegir la escala de simulación más adecuada a los intereses del objetivo fijado a priori.
- 2:** Es capaz de elegir simplificaciones asumibles en función del destino de los resultados de la modelización. Asimismo deberá ser capaz de escoger un adecuado compromiso entre los binomios detalle-precisión y robustez-economía de resolución.

- 3:** Elige las técnicas de cálculo numérico más adecuadas al nivel de precisión exigido y a las simplificaciones escogidas.
- 4:** Es capaz de manejar programas de cálculo disponibles en el mercado (AspenPlus, Hysys,...), y construir herramientas "ad-hoc" para su resolución (Hojas de cálculo-VBA, Fortran, MatLab-Octave, EES, ...). Adicionalmente, adecúa la herramienta utilizada al nivel de complejidad, disponibilidad y circunstancias.
- 5:** Optimiza los parámetros de operación o diseño de operaciones o unidades de proceso, incluyendo la optimización de la herramienta de cálculo.
- 6:** Interpreta correctamente los resultados obtenidos en la simulación-optimización. Critica los resultados, les asigna una cota de validez/incertidumbre.
- 7:** Es capaz de proceder a la defensa pública de los resultados obtenidos en su simulación/optimización.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Esta asignatura tiene un marcado carácter horizontal. Pretende ser un complemento desde la vertiente investigadora, de los conocimientos sobre simulación y optimización de procesos químicos adquiridos durante los estudios de grado, ingeniería o licenciatura, precedentes del posgrado en el cual se integra. Por tal motivo, se extiende sobre aspectos que no han sido abordados durante los citados estudios de grado, enfocándose sobre contenidos relacionados con la investigación sobre ingeniería de procesos llevada a cabo en la Universidad de Zaragoza.

Aunque alberga un bloque de contenidos teóricos, su vocación es eminentemente práctica, por lo que se pretende que desde prácticamente la primera clase, el alumno sea capaz de resolver por sí solo ejercicios con ayuda de herramientas comerciales, o construir las suyas propias.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

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

La asignatura ***Técnicas Avanzadas de Simulación y Optimización de Procesos Químicos***, tiene carácter optativo y una carga de 3 créditos ECTS.

Se concibe dentro del **Máster Universitario de Iniciación a la Investigación en Ingeniería Química**, como una asignatura horizontal e instrumental, con dos objetivos generales.

En primer lugar, complementa los conocimientos adquiridos por el estudiante de grado, ingeniería o licenciatura, sobre las técnicas básicas de simulación y optimización de procesos químicos. En este aspecto, el enfoque novedoso respecto a los estudios precedentes, es que no se contempla la simulación y optimización como una herramienta dedicada a la producción industrial, sino que se profundiza en los motivos, las técnicas y las limitaciones de los modelos utilizados. Adicionalmente, se hace hincapié en la construcción "ad-hoc" de herramientas por el propio estudiante, y se profundiza en la interpretación de los resultados obtenidos.

En segundo lugar, se presentan técnicas de simulación y optimización novedosas, que proviniendo de otros campos de aplicación, pueden tener cabida en el ámbito de la investigación en procesos químicos.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Una aspecto importante en el proceso de investigación de cualquier proceso químico reside en la capacidad del investigador para modelar el fenómeno (proceso - unidad de proceso - sistema) que está estudiando. Esto es, traducir a un modelo

matemático los fenómenos físicos y químicos que se verifican de forma empírica.

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

Para llevar a cabo esta tarea, resulta 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 futuro investigador en el campo de los procesos químicos, sobre cómo afrontar la simulación y optimización de éstos.

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

- 1:** Modelar matemáticamente un proceso, unidad de proceso o interacciones entre ellas (sistema), y escoger la escala más adecuada a sus intereses.
- 2:** Elegir simplificaciones asumibles en función del destino de los resultados de la modelización. Será capaz de vislumbrar la relación entre los binomios detalle-precisión y robustez-economía de resolución.
- 3:** Elegir las técnicas de cálculo numérico más adecuadas al nivel de precisión exigido y a las simplificaciones escogidas.
- 4:** Manejar programas comerciales de cálculo y construir herramientas "*ad-hoc*" para la resolución de problemas, adecuándolos al nivel de complejidad, disponibilidad y circunstancias.
- 5:** Optimizar parámetros de operación, considerando asimismo la optimización de la propia herramienta de cálculo.
- 6:** Interpretar los resultados obtenidos en el proceso de simulación-optimización, y criticar dichos resultados.
- 7:** Sintetizar la información proveniente de los resultados obtenidos
- 8:** Expresar ideas complejas de forma adecuada al receptor.
- 9:** Representar ideas de forma simbólica.
- 10:** Trabajar por objetivos en tiempo limitado. Planificar tareas.
- 11:** Discriminar información. Priorizarla en función del objetivo a cumplir.

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

La simulación y optimización de procesos es una herramienta imprescindible como elemento predictivo. Como consecuencia de la investigación en cualquiera de los ámbitos relacionados con la investigación de procesos químicos, el investigador será capaz de determinar el efecto que sobre un determinado sistema 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.).

Una vez obtenida dicha información, en laboratorio o en planta piloto, el siguiente paso consiste en la modelización del proceso que ha estudiado. 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".

Evaluación

Actividades de evaluación

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

1: Participación activa en clase, mediante la asistencia continuada a las clases presenciales y la participación activa junto con el resto de sus compañeros y el profesor en las cuestiones planteadas, fruto de los conceptos y técnicas expuestas en las clases. Esta evaluación está vinculada a las competencias (2, 6 á 9 y 11). El porcentaje de peso de este apartado en la evaluación global será del 10%.

La evaluación se basará en:

- Asistencia a clase (control mediante firma)
- Resolución voluntaria de cuestiones o preguntas formuladas por el profesor

2: Exposición de artículos científicos o trabajos propios o de otros, en los que se incluya un apartado dedicado a la simulación y optimización de procesos químicos. Crítica de las suposiciones, métodos y limitaciones impuestas por el conjunto. Esta evaluación está vinculada a las competencias (1 á 3, 6 á 8 y 11). El porcentaje de peso de este apartado en la evaluación global será del 40%.

La evaluación se basará en:

- Complejidad del sistema a simular/optimizar
- Nivel de conocimiento en la descripción del mismo
- Crítica razonada de los pros y contras utilizados
- Propuesta razonada de mejoras. Estimación del coste de las mejoras

3: Resolución particular o en grupo de problemas planteados, como ejemplo de aplicación de los contenidos teórico-prácticos expuestos en clase. Esta evaluación está vinculada a las competencias (1 á 11). El porcentaje de peso de este apartado en la evaluación global será del 40%.

La evaluación se basará en la resolución por cuenta del alumno de al menos un problema planteado o propuesto en clase (planificado con suficiente antelación).

Se valorarán:

- Nivel de detalle de la resolución
- Descripción de los resultados y crítica de éstos
- Adecuación al objetivo a alcanzar en cada caso
- Herramientas utilizadas para la resolución

4: Utilización de herramientas comerciales de simulación (simuladores), o construcción de herramientas "ad-hoc" para la solución de problemas planteados en clase. Esta evaluación está vinculada a las competencias (1 á 6). El porcentaje de peso de este apartado en la evaluación global será del 10%.

La valoración de este apartado está ligada a todas las anteriores.

5: Para el caso de los alumnos no presenciales, o que se encuentren en convocatorias posteriores a aquella en la que se han matriculado por primera vez, el alumno deberá realizar por sus propios medios un trabajo original consistente en la simulación y/u optimización de una unidad, proceso o sistema, a propuesta de los profesores que imparten la asignatura.

Para ello dispondrá de un periodo de tiempo no inferior a un mes ni superior a dos meses (en ambos casos naturales). La defensa de los resultados obtenidos, incluyendo la crítica de éstos, se llevará a cabo mediante una defensa pública, estando constituido el tribunal por los profesores de la asignatura, quienes tras la exposición podrán formular cuantas cuestiones estimen oportunas al respecto del trabajo.

Con una antelación no inferior a una semana natural a la fecha de exposición pública, el alumno que opte por este método de evaluación, hará llegar a los profesores de la asignatura una memoria del trabajo realizado al que hacen referencia los dos párrafos precedentes.

En este contexto, y como prueba de valoración única, el alumno deberá demostrar que ha alcanzado los niveles de destreza/habilidad exigidos a sus compañeros de curso en enseñanza presencial.

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

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

Las clases de esta asignatura se distribuyen en dos bloques bien diferenciados (**A** y **B**). Ambos, no obstante se llevan a cabo de forma paralela. Ambos bloques tienen asignada la misma carga horaria (1.5 + 1.5 ECTS).

Las sesiones del **bloque A** tienen un contenido claramente teórico y corresponden a la descripción de modelos de unidades de proceso junto con los algoritmos para su resolución estructurada. Se imparten en el ámbito de una clase tradicional.

Las sesiones del **bloque B** tienen carácter práctico. Generalmente están precedidas por una introducción teórica a la aplicación. Abordan desde una metodología "hands-on" distintos tipos de problemas de modelado en la industria de procesos, que deberán ser resueltos con las herramientas más adecuadas a cada situación. Estas sesiones se llevan a cabo en laboratorio de simulación.

Las sesiones de ambos bloques tienen una duración nominal de dos horas, lo que implica una carga semanal de 4 horas.

El calendario detallado de comienzo de las actividades, así como el lugar de impartición de cada una de ellas puede ser consultado en tiempo y forma en la siguiente [dirección web](#).

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

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

- 1: Introducción al modelado y simulación
- 2: Simulación de la rectificación en sistemas multicomponentes
- 3: Simulación dinámica de sistemas [Estado No Estacionario]
- 4: Simulación de reactores conceptuales, ideales y no convencionales
- 5: Métodos no ideales de estimación de propiedades termodinámicas. Modelos de actividad, fugacidad y EOS.
- 6: Técnicas de cálculo numérico aplicadas a la simulación de procesos:

- Raíces de funciones
- Sistemas de ecuaciones lineales simultáneas
- Integración numérica
- Ecuaciones diferenciales ordinarias
- Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales

7: Tratamiento de resultados experimentales. Discriminación. Incertidumbre.

8: Métodos Eficientes de Programación No Lineal con y sin restricciones

9: Métodos evolutivos de optimización

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

El calendario de sesiones nominal abarca desde octubre hasta diciembre a razón de 4 horas nominales por semana distribuidas en dos sesiones de 2 horas cada una. La suma total de horas de clase alcanza aproximadamente las 30.

Una descripción más precisa tanto de calendario como de los horarios correspondientes al curso 2009-10 puede consultarse, como referencia, en la siguiente [dirección web](#). Asimismo, en la misma dirección podrán consultarse los correspondientes al curso en vigor en su debido momento.

Una descripción más profusa de la distribución de temas por sesión, así como un calendario más preciso, podrá consultarse en la página de la asignatura correspondiente al [Anillo Digital Docente](#) / Calendario.

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada