

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

<b>Asignatura</b>	Modelado y Optimización de Procesos Químicos		
<b>Materia</b>			
<b>Módulo</b>	Complementos de formación		
<b>Titulación</b>	Máster en Ingeniería Química		
<b>Plan</b>	542	<b>Código</b>	53932
<b>Periodo de impartición</b>	1er Cuatrimestre	<b>Tipo/Carácter</b>	Obligatoria
<b>Nivel/Ciclo</b>	Máster	<b>Curso</b>	Complementos
<b>Créditos ECTS</b>	4.5 ECTS		
<b>Lengua en que se imparte</b>	Castellano		
<b>Profesor/es responsable/s</b>	Ángel Martín Martínez, Sergio Bordel		
<b>Datos de contacto (E-mail, teléfono...)</b>	<a href="mailto:angel.martin.martinez@uva.es">angel.martin.martinez@uva.es</a> <a href="mailto:sergio.bordel@uva.es">sergio.bordel@uva.es</a>		
<b>Departamento</b>	Ingeniería Química y Tecnología del Medio Ambiente		
<b>Fecha de revisión por el Comité de Título</b>	16/07/2024		



## 1. Situación / Sentido de la Asignatura

---

### 1.1 Contextualización

---

Esta asignatura se imparte en el primer cuatrimestre del cuarto curso del Grado de Ingeniería Química, y en ella se aplican los conocimientos de fundamentos obtenidos a lo largo del Grado para el desarrollo de modelos matemáticos de procesos químicos y la optimización de procesos químicos.

### 1.2 Relación con otras materias

---

Esta asignatura aplica conocimientos previos adquiridos en otras asignaturas del grado: Introducción a la Ingeniería Química, Termodinámica Química y Transferencia de Materia, Cálculo y diseño de operaciones de separación, cálculo y diseño de reactores químicos.

### 1.3 Prerrequisitos

---

Recomendaciones de conocimientos previos:

- Conocimientos de Matemáticas.
- Conocimientos de Informática. Uso de hojas de cálculo y programas de cálculo científico.
- Conocimientos de Termodinámica.
- Conocimientos de procesos químicos: reacción, separación, transferencia de calor y flujo de fluidos.



## 2. Competencias

---

### 2.1 Generales

---

- CG1. Capacidad de análisis y síntesis.
- CG2. Capacidad de organización y planificación del tiempo.
- CG3 Capacidad de expresión oral.
- CG4 Capacidad de expresión escrita.
- CG6. Capacidad de resolución de problemas.
- CG7. Capacidad de razonamiento crítico/análisis lógico.
- CG8 Capacidad para aplicar los conocimientos a la práctica.

### 2.2 Específicas

---

- CE32. Capacidad para el análisis diseño y optimización de procesos y productos.
- CE40. Capacidad para el modelado de fenómenos y sistemas en el ámbito de la ingeniería química.
- CE41. Capacidad para diseñar, gestionar y operar procedimientos de simulación de procesos químicos.
- CE42. Capacidad para diseñar, gestionar y operar procedimientos de control de procesos químicos.
- CE43. Capacidad para diseñar, gestionar y operar procedimientos de instrumentación de procesos químicos.



### 3. Objetivos

El objetivo básico de la asignatura es que el alumno aprenda a aplicar e integrar conocimientos básicos de diversos campos de la ingeniería química (termodinámica, procesos de transporte, operaciones de separación y reacción, control de procesos, etc.) para desarrollar modelos de procesos, y que mediante la resolución de los modelos mediante las técnicas matemáticas adecuadas, pueda emplearlos para la toma de decisiones en el diseño y optimización de procesos.

Con ello, los objetivos específicos de la asignatura son:

- Conocer los tipos de modelos más empleados en la simulación de procesos químicos y los métodos de resolución numérica para cada uno de ellos.
- Seleccionar el modelo más adecuado para cada caso concreto y aplicarlo en procesos químicos.
- Aplicar técnicas de estimación y optimización de parámetros de los modelos.
- Formular problemas de toma de decisiones usando técnicas de optimización, y resolverlos empleando técnicas de optimización adecuadas.



#### 4. Contenidos y/o bloques temáticos

##### Bloque 1: Modelado de procesos químicos

Carga de trabajo en créditos ECTS: 3,0

###### a. Contextualización y justificación

En este bloque se estudian las principales técnicas de modelado que se aplican en procesos químicos, aplicándolos a casos concretos de especial relevancia en la industria química.

###### b. Objetivos de aprendizaje

Capacidad para el modelado de fenómenos y sistemas en el ámbito de la ingeniería química (CE32), integrando conocimientos obtenidos en asignaturas anteriores (CG1), y para aprender y trabajar de forma autónoma (CG6), buscando bibliografía sobre algún conocimiento de vanguardia, y utilizando los conocimientos adquiridos en el modelado de sistemas clave para la industria química.

###### c. Contenidos

Tema 1 - Métodos de resolución de ecuaciones algebraicas y diferenciales no lineales: Métodos analíticos. Métodos numéricos: métodos de Euler explícitos e implícitos, métodos de diferencias finitas.

Tema 2 – Modelos en Ingeniería Química: tipos de modelos. Modelos basados en los fenómenos de transporte: modelos globalizados y modelos distribuidos.

Tema 3 – Comportamiento dinámico.

Tema 4 – Modelos de balance de población.

###### d. Métodos docentes

Exposición teórica.

Realización de prácticas de desarrollo de modelos de procesos clave en la industria química: transferencia de calor en elementos de diferentes geometrías, destilación, adsorción, reactor de tanque agitado, reactor catalítico tubular.

Adicionalmente, en una tarea se realizará el desarrollo del modelado de un sistema de reacción y separación de un proceso de vanguardia. Para su desarrollo no bastará con la aplicación de los conocimientos obtenidos en las clases, siendo necesaria la búsqueda de información tecnológica en la bibliografía reciente

---

### e. Plan de trabajo

---

El estudio de los contenidos se realizará a partir del análisis de ejemplos concretos, que se implementarán y se resolverán en los seminarios.

---

### f. Evaluación

---

Para toda la asignatura, la evaluación se encuentra recogida en el apartado 7: Sistema y características de la evaluación, de esta guía docente.

Para evaluar la adquisición de la capacidad para desarrollar proyectos incorporando conocimientos de vanguardia, se evaluará: 1) el grado de actualidad de los conocimientos incorporados, 2) la capacidad de búsqueda, 3) el nivel de profundización y adquisición de los conocimientos, y 4) la implementación de los conocimientos en el desarrollo del proyecto.

---

### g Material docente

---

---

#### g.1 Bibliografía básica

---

1. Himmelblau, D. M., Bischoff, K. B. "Análisis y Simulación de Procesos". Reverte, 1992.
2. Strogatz, S. H. "Nonlinear dynamics and chaos", 2<sup>nd</sup> Ed. Westview Press, 2015.

---

#### g.2 Bibliografía complementaria

---

1. Luyben, W. L. "Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers, 2nd Ed.". McGraw-Hill, 1990.
2. Seider, W. D., Seader, J. D., Lewin, D. R. "Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation, 2nd Ed.". John Wiley & Sons, 2003.
3. Puigjaner, L., Ollero, P., de Prada, C., Jiménez, L. "Estrategias de modelado, simulación y optimización de procesos". Ed. Síntesis, 2006.
4. Teschl, G. "Ordinary differential equations and dynamic systems". American Mathematical Society, 2012.

---

#### g.3 Otros recursos telemáticos (píldoras de conocimiento, blogs, videos, revistas digitales, cursos masivos (MOOC), ...)

---

En el campus virtual de la asignatura se proporcionan vídeos docentes que explican la elaboración de diferentes modelos.

---

### h. Recursos necesarios

---

**i. Temporalización**

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
3,0 ECTS	Semanas 1 a 8 del curso

**Bloque 2: Optimización de procesos químicos**

Carga de trabajo en créditos ECTS: 1,5

**a. Contextualización y justificación**

En este bloque se estudian diversas técnicas de optimización, aplicándolos a los casos concretos de la determinación de parámetros de los modelos desarrollados en el bloque anterior mediante optimización a partir de datos experimentales, y de la optimización del rendimiento de los procesos modelizados en el bloque anterior.

**b. Objetivos de aprendizaje**

Capacidad para el análisis diseño y optimización de procesos y productos (CE32), a partir de la aplicación de métodos de optimización sobre modelos de procesos químicos.

**c. Contenidos**

Tema 6 – Métodos de optimización de parámetros de modelos: método de los momentos, ajustes por mínimos cuadrados, algoritmos genéticos.

Tema 7 – Métodos de optimización no lineal. Método de los multiplicadores de Lagrange. Funciones convexas. Algoritmos de optimización sin restricciones: método del descenso más pronunciado. Optimización con restricciones: condiciones de Karush-Kuhn-Tucker. Modelos estadísticos. Optimización en ambientes de riesgo o incertidumbre. Aplicación a la optimización de procesos químicos.

**d. Métodos docentes**

Exposición teórica.

Realización de prácticas de optimización de parámetros en un modelo mediante diferentes metodologías: optimización por el método de Newton, algoritmos genéticos, método de los

momentos. Prácticas de implementación de un algoritmo de optimización. Prácticas de resolución de problemas de optimización en ambientes de riesgo o incertidumbre.

---

#### **e. Plan de trabajo**

El estudio de los contenidos se realizará a partir del análisis de ejemplos concretos, que se implementarán y se resolverán en los seminarios.

---

#### **f. Evaluación**

Para toda la asignatura, la evaluación se encuentra recogida en el apartado 7: Sistema y características de la evaluación, de esta guía docente.

Para evaluar la adquisición de la capacidad para desarrollar proyectos incorporando conocimientos de vanguardia, se evaluará: 1) el grado de actualidad de los conocimientos incorporados, 2) la capacidad de búsqueda, 3) el nivel de profundización y adquisición de los conocimientos, y 4) la implementación de los conocimientos en el desarrollo del proyecto.

---

#### **g Material docente**

---

##### **g.1 Bibliografía básica**

1. L. Puigjaner, P. Ollero. C. de Prada, L. Jiménez. "Estrategias de modelado, simulación y optimización de procesos químicos". Síntesis, 2006.
2. E. Ramos Méndez. "Modelización". Ediciones Académicas, 2017.

---

##### **g.2 Bibliografía complementaria**

1. R. Vélez Ibarrola. "Teoría de la Decisión". UNED, 2012.
2. Boyd, S., Vandenberghe, L. "Convex optimization". Cambridge University Press, 2004
3. Lazic, Z. R. "Full scale plant optimization in chemical engineering". Wiley, 2022.

---

##### **g.3 Otros recursos telemáticos (píldoras de conocimiento, blogs, videos, revistas digitales, cursos masivos (MOOC), ...)**

En el campus virtual de la asignatura se proporcionan vídeos docentes que explican la resolución de problemas de optimización

---

#### **h. Recursos necesarios**

**i. Temporalización**

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
1,5 ECTS	Semanas 9 a 12 del curso

**5. Métodos docentes y principios metodológicos**

MÉTODOS DOCENTES	OBSERVACIONES
<b>Clases de aula teóricas.</b>	En las clases se desarrollan los contenidos, teniendo en cuenta los objetivos establecidos previamente y las competencias que los alumnos deben adquirir. Todos los contenidos se acompañan de ejemplos reales.
<b>Clases de aula de problemas.</b>	Las clases prácticas, de resolución de problemas, tienen como finalidad el análisis y aplicación de los contenidos teóricos.
<b>Laboratorio de informática</b>	Laboratorio de informática de desarrollo de ejemplos prácticos de los modelos y las técnicas impartidas en la asignatura, que se impartirá on-line empleando vídeos docentes pregrabados y videoconferencias.
<b>Web/Aula virtual</b>	Todo el contenido del curso se encuentra disponible en el Campus Virtual UVa ( <a href="http://campusvirtual.uva.es">http://campusvirtual.uva.es</a> ).

## 6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES o PRESENCIALES A DISTANCIA <sup>(1)</sup>	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases Teóricas	15	Estudio y trabajo autónomo individual	67,5
Clases prácticas	10		
Laboratorios de informática	20		
Total presencial	<b>45</b>	Total no presencial	<b>67,5</b>
TOTAL presencial + no presencial			<b>112,5</b>

## 7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
EXAMEN ESCRITO	50%	El examen podrá constar de ejercicios de aplicación y cuestiones teórico-prácticas. Se requerirá una nota mínima de 4.0/10 en el examen para superar la asignatura.
EVALUACIÓN CONTINUA DE PRACTICAS DE LABORATORIO	50%	Ejercicios realizados durante las clases de seminario de informática. Para recibir calificación en este elemento, se requerirá entregar al menos el 80% de los seminarios propuestos durante el curso; de no ser así, este elemento se calificará con "0 – No presentado".

### CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**
  - Examen escrito. Informes de prácticas de seminarios de informática.
- **Convocatoria extraordinaria:**
  - Examen escrito. Informes de prácticas de seminarios de informática.

## 8. Consideraciones finales