

Guía del alumno

Simulación de procesos químicos

Curso 2012-2013

Profesores:

Manuel Rodríguez
(manuel.rodriquezh@upm.es)

Ismael Díaz
(ismael.diaz@upm.es)

Asignatura troncal

Titulación-
Ingeniero Industrial esp. Química

Créditos ECTS- 4,5

Curso: Cuarto

Información general de la asignatura

Objetivo

El objetivo es conocer la metodología para desarrollar modelos de unidades de operación y procesos químicos, así como realizar su simulación tanto estacionaria como dinámica.

Breve descripción del contenido

La asignatura tiene tres líneas de actuación. Una primera línea teórica donde se aborda la metodología para desarrollar modelos así como los teoría y los algoritmos existentes para la resolución de simulaciones estacionarias y dinámicas. Las otras dos líneas son totalmente prácticas, estando una de ellas dedicada a la simulación estacionaria y la otra a la simulación dinámica. El software empleado para la primera es Aspen Plus y para la segunda Matlab.

Conocimientos que necesita

Tecnología Química: Qué es un proceso químico. Nociones fundamentales de las operaciones básicas de la industria química. Realización de balances de materia y energía, análisis de grados de libertad de un proceso.

Fisicoquímica. Propiedades físicas, métodos principales de cálculo. Equilibrio químico. Cinética química.

Operaciones básicas: Principios que rigen el funcionamiento de las operaciones básicas.

Reactores: Principios que rigen el funcionamiento y diseño de reactores.

Fenómenos de transporte, tanto transferencia de materia como de calor.

Ecuaciones diferenciales. Métodos básicos de resolución numérica.

Capacidades y habilidades que necesita

Tener soltura en el manejo de los conceptos relacionados especialmente con operaciones básicas y reactores.

Tener soltura en el manejo de los ordenadores y software en general.

Conocimientos que aporta

El alumno será capaz de desarrollar modelos de unidades de proceso y procesos de ingeniería química basados en ecuaciones y principios físicos, así como de analizar los resultados de los mismos.

Capacidades y habilidades que aporta.

El alumno será capaz de escoger algoritmos apropiados e implementarlos para la simulación de los modelos.

El alumno conocerá y será capaz de trabajar con simuladores comerciales.

El alumno será capaz de emplear herramientas de simulación para estudiar y analizar un proceso (o una parte del mismo).

Un objetivo importante es ser capaz de plantear un buen modelo del sistema a estudiar.

Programa

1. MODELADO DE SISTEMAS QUÍMICOS

Introducción al modelado y la simulación, teoría general de los sistemas. Modelado de sistemas físicos (ecuaciones de conservación, ecuaciones constitutivas, grados de libertad, etc.)

2. SIMULACIÓN DE PROCESOS EN ESTADO ESTACIONARIO

Diagramas de flujo de proceso. Estrategias de resolución. Estrategia secuencial modular. Estrategia orientada a ecuaciones. Simulación estacionaria de procesos químicos mediante el software Aspen Plus.

3. SIMULACIÓN DE PROCESOS EN ESTADO DINÁMICO

Simuladores orientados a ecuaciones. Asignación de variables, particionado de un sistema. Estrategias de resolución. Simulación dinámica de unidades básicas en ingeniería química mediante el software Matlab.

CONTENIDOS:

Teoría-Formular un modelo y conocer los algoritmos para su resolución.

Ejercicios prácticos-
Mediante el uso de software: Aspen Plus y Matlab

Información de la asignatura

Apuntes de teoría:
presentaciones.

Enunciados y soluciones de problemas

www.diquima.upm.es

en:
docencia-
modelado y
simulación de
procesos químicos

Evaluación

* Los alumnos con una única parte suspensa podrán compensarla si en esa parte tienen una nota de cuatro o más y la puntuación final es igual o superior a cinco puntos. En caso de que la puntuación no llegue a cinco puntos se les aplica el supuesto indicado en el siguiente párrafo.

Los alumnos con una única parte suspensa y una calificación en la misma igual o superior a tres puntos podrán realizar un trabajo para aprobar dicha parte.

La asignatura se evaluará mediante la realización de tres exámenes.

Examen teoría:

El examen consta de una serie de preguntas sobre los temas vistos en teoría incluyendo la aplicación de los algoritmos explicados. Para aprobar esta parte es necesario obtener un cinco.

Si se suspende uno de los exámenes, en la siguiente convocatoria únicamente tendrá que examinarse de la parte suspensa.

Examen simulación estacionaria:

Se realizará un examen práctico con ordenador empleando el software Aspen Plus. El examen consiste en la simulación de un proceso químico. Se realizará este examen a mitad de curso, teniendo los alumnos suspensos otra oportunidad en período de exámenes. Para aprobar esta parte es necesario obtener un cinco.

No compensa ningún examen, es necesario obtener un cinco en cada uno de ellos.*

Examen simulación dinámica:

Se realizará un examen práctico con ordenador empleando el software Matlab. El examen consiste en la simulación de una unidad o proceso químico. Se realizará este examen a final de curso, teniendo los alumnos suspensos otra oportunidad en período de exámenes. Para aprobar esta parte es necesario obtener un cinco.

La puntuación final se obtiene aplicando la siguiente fórmula:

$$Q=T*0,3+ExSS*0,35+ExDin*0,35$$

Siendo: Q: puntuación final, T: calificación en la parte de teoría, ExSS: calificación en el examen de simulación estacionaria, ExDin: calificación en el examen de simulación dinámica

Bibliografía

1. Process Modelling and model analysis. K. Hangos and I. Cameron, 2001, Academic Press
2. Introduction to chemical engineering computing. Bruce A. Finlayson, 2005, Wiley-Interscience
3. Chemical Engineering Dynamics, J. Ingham et al., 2007, Wiley-VCH
4. Modelado, simulación y optimización de procesos químicos. Nicolás J. Scenna et al. EduTecne
5. Process Plant Simulation. B.V. Babu, 2004, Oxford University Press
6. Computational Methods for Process Simulation. W. Fred Ramirez, 1997, Butterworth-Heinemann
7. Conservation equations and modeling of chemical and biochemical processes, Said Elnashaie, P. Garhyan, 2003, Marcel Dekker.
8. Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers. W. Luyben, 1989, Mc Graw Hill
9. Process Dynamics, Modeling, Analysis and Simulation, W. Bequette, 1998, Prentice Hall
10. Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers, R. Rice and D. Do, 1995, Wiley & Sons
11. Continuous System Modeling, F. Cellier, 1991, Pergamon Press
12. Numerical Solution of Ordinary Differential Equations for scientists and engineers, L. Fox and D. Mayers, 1987, Chapman and Hall
13. Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations, Petzold, L.R. and Campbell, S.L. and Brenan, K.E., 1996, Siam

Se adecúan a una parte importante de los contenidos los libros del 1 al 9.