



Universidad
Politécnica
de Cartagena



Guía docente de la asignatura
SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS.
INTRODUCCIÓN A CHEMCAD

**Titulación: Master en Ingeniería Ambiental y de Procesos Químicos
y Biotecnológicos**

Curso 2011/2012

Guía Docente

1. Datos de la asignatura

Nombre	Simulación de Procesos Químicos. Introducción a CHEMCAD				
Módulo	Procesos Químicos y Biotecnológicos				
Código	210601009				
Titulación/es	Master en Ingeniería ambiental y de Procesos Químicos y Biotecnológicos				
Centro	Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial				
Tipo	Obligatoria para la Especialidad de Procesos Químicos y Biotecnológicos, y optativa para el resto de especialidades				
Periodo lectivo	Segundo Cuatrimestre	Curso	2011-2012		
Idioma	Castellano y ocasionalmente inglés				
ECTS	5	Horas / ECTS	25	Carga total de trabajo (horas)	125
Horario clases teoría		Aula	PB-3		
Horario clases prácticas		Lugar	Edificio AHM		

2. Datos del profesorado

Profesor responsable	Luis Javier Lozano Blanco		
Departamento	Ingeniería Química y Ambiental		
Área de conocimiento	Ingeniería Química		
Ubicación del despacho	Campus Muralla del Mar. Edificio AHM, 2ª planta		
Teléfono	968326407	Fax	968325555
Correo electrónico	luisja.lozano@upct.es		
URL / WEB			
Horario de atención / Tutorías			
Ubicación durante las tutorías	Campus Muralla del Mar. Dirección ETSII (Edificio AHM, planta baja)		

Otros profesores

Profesor	Mercedes Alacid Cárceles		
Departamento	Ingeniería Química y Ambiental		
Área de conocimiento	Ingeniería Química		
Ubicación del despacho	Campus Alfonso XIII, Edificio ETSINO, 1º Planta, Desp. 69.1		
Teléfono	968325551	Fax	968325555
Correo electrónico	Mercedes.Alacid@upct.es		
URL / WEB			
Horario de atención / Tutorías			
Ubicación durante las tutorías	despacho		

Profesor	Francisco José Hernández Fernández		
Departamento	Ingeniería Química y Ambiental		
Área de conocimiento	Ingeniería Química		
Ubicación del despacho	Campus Alfonso XIII, Edificio ETSINO, 1º Planta, Desp. 69.1		
Teléfono	968325551	Fax	968325555
Correo electrónico	fjherfer@upct.es		
URL / WEB			
Horario de atención / Tutorías			
Ubicación durante las tutorías			

3. Descripción de la asignatura

3.1. Presentación

El proceso de concepción y diseño de procesos químicos engloba multitud de elementos individuales de muy diversa índole, sobre los cuales es necesario tener un conocimiento, al menos cualitativo, para poder desarrollar y proyectar instalaciones químicas nuevas o ampliaciones de las mismas con garantías de éxito. El curso pretende que el alumno sea capaz de estructurar y clasificar la importancia de estas tareas, haciendo especial hincapié en el análisis económico de los procesos y en los métodos disponibles para predicción de propiedades físico-químicas de aquellos compuestos sobre los que no hay información relevante en la bibliografía. A nivel práctico se persigue que el alumno desarrolle habilidades en el manejo del software de simulación CHEMCAD.

3.2. Ubicación en el plan de estudios

Dadas las características del máster y los módulos que la componen, la asignatura no está sujeta a restricciones en lo que se refiere a su planificación temporal a lo largo del año académico.

3.3. Descripción de la asignatura. Adecuación al perfil profesional

Este curso comprende la descripción sistemática de todos los elementos que deben tenerse en cuenta a la hora de diseñar un nuevo proceso químico a distintos niveles, desde la búsqueda de información sobre el estado de la técnica hasta la selección de los modelos de predicción de propiedades químico físicas de los compuestos que permiten el diseño detallado de operaciones unitarias, pasando por la evaluación económica o la estimación de costes. Puesto que la realidad industrial demuestra que la aplicación de métodos rigurosos para el diseño de equipos o unidades de proceso se realiza con el apoyo de software de simulación, el módulo se complementa con la introducción al software de simulación CHEMCAD para integrar y aplicar los fundamentos descritos anteriormente a casos prácticos. La presentación de todos estos aspectos de una forma estructurada, aunque no detallada debido a la complejidad de algunas de ellas, permiten que el estudiante tenga un punto de partida sólido sobre el que poder desarrollar y proyectar instalaciones químicas, y que sepa estimar el impacto que tienen sobre el diseño final los métodos de cálculo empleados. Asimismo, las herramientas de simulación introducidas podrán ser de gran ayuda al estudiante en tareas de optimización y mejora de instalaciones ya existentes.

3.4. Relación con otras asignaturas. Prerrequisitos y recomendaciones

En cuanto a requisitos previos, es recomendable tener una base sólida en Operaciones Unitarias o Química Industrial y Fundamentos de Química-Física. El uso del simulador comercial CHEMCAD, hojas de cálculo y herramientas de búsqueda en Internet, hacen recomendable que el alumno tenga un buen conocimiento de inglés a nivel de lectura, y que disponga de un nivel mínimo de informática a nivel de usuario.

3.5. Medidas especiales previstas

Alumnos extranjeros: El curso se imparte en idioma castellano, aunque las características de la bibliografía y recursos utilizados en el curso, permitiría un buen aprovechamiento a alumnos que exclusivamente tengan un buen dominio del inglés.

4. Competencias

4.1. Competencias específicas del título según la especialidad

A.- ESPECIALIDAD ACADÉMICA.

- E A1. Aplicar a la docencia científica y tecnológica ligada al campo de competencia del postgrado propuesto, en los niveles formativos medios y superiores, los conocimientos de matemáticas, física, química, biología, geología e ingeniería, necesarios para la adquisición por los alumnos de estos niveles, de la formación básica adecuada.
- E A2. Concebir planes docentes aplicados a enseñanzas medias y superiores que permitan conseguir los objetivos de formación y competencia adecuados a cada caso.
- E A3. Seleccionar las técnicas y procedimientos adecuados en el diseño curricular y para la práctica docente, con especial atención en los aspectos evaluativos.
- E A4. Incorporar las nuevas tecnologías de innovación docente en la impartición de las enseñanzas de nivel medio y superior.
- E A5. Planificar, ordenar y supervisar el trabajo en equipo, fomentando la optimización horizontal de los contenidos educativos.
- E A6. Ejercer funciones de liderazgo y orientación en la formación integral de los discentes en los niveles académicos diana del postgrado.

B.- ESPECIALIDAD PROFESIONAL.

B.1.-PROCESOS QUÍMICOS Y BIOTECNOLÓGICOS

- E B1. Diseñar, planificar, ejecutar, controlar, optimizar, equipos y procesos químicos y/o biotecnológicos dentro del marco del desarrollo sostenible.
- E B2. Seleccionar técnicas y procedimientos apropiados en el diseño, aplicación y evaluación de reactivos, métodos y técnicas analíticas.
- E B3. Valorar los riesgos asociados a la utilización de sustancias químicas y/o biológicas y los grandes riesgos derivados de los procesos industriales.
- E B4. Procesar, manipular y analizar datos físicos, químicos y biológicos resultado de los procesos desarrollados, aplicando herramientas computacionales para la optimización del conjunto.
- E B5. Diseñar experimentos a escala de laboratorio y piloto para la simulación de procesos y el estudio del cambio de escala.
- E B6. Planificar, ordenar y supervisar el trabajo en equipo, ejerciendo funciones de liderazgo y orientación en la ejecución de procesos a escala industrial.

B.2.-INGENIERÍA AMBIENTAL

- E B7. Diseñar, planificar, ejecutar, controlar, optimizar, equipos y procesos para la adecuada gestión y /o tratamiento de efluentes urbanos o industriales.
- E B8. Seleccionar técnicas y procedimientos apropiados en el diseño, aplicación y evaluación de reactivos, métodos y técnicas analíticas para la vigilancia y el control ambiental.
- E B9. Valorar los riesgos asociados a la utilización de sustancias químicas y/o biológicas y los grandes riesgos derivados de los procesos industriales.
- E B10. Procesar, manipular y analizar datos físicos, químicos y/o biológicos resultado de los análisis de los indicadores ambientales, aplicando herramientas computacionales para su tratamiento.

- E B11. Diseñar experimentos a escala de laboratorio y piloto para el desarrollo de nuevas alternativas o mejores tecnologías de control ambiental.
- E B12. Planificar, ordenar y supervisar el trabajo en equipo, ejerciendo funciones de liderazgo y orientación en la ejecución de procesos de gestión, vigilancia y control ambiental.

C.- ESPECIALIDAD INVESTIGACIÓN.

- E C1. Diseñar, planificar, ejecutar proyectos de investigación básica y aplicada en relación con los procesos químicos, biotecnológicos y del medio ambiente.
- E C2. Realizar búsquedas documentales (acceso a documentos científicos, patentes, literatura gris, etc.), indización y catalogación de documentos, y estudios bibliométricos.
- E C3. Establecer contactos profesionales que permitan el intercambio de la investigación y de la innovación científica y tecnológica con otros grupos de investigación, con la industria y el sector productivo.
- E C4. Procesar, manipular y analizar datos físicos, químicos y/o biológicos resultado de las investigaciones, aplicando herramientas computacionales para su tratamiento.
- E C5. Coordinar y lidera proyectos de I+D+i en los ámbitos científicos y tecnológicos propios de este postgrado.
- E C6. Concebir, planificar y materializar en publicaciones los resultados de la investigación, contribuyendo a la difusión de los avances científicos de los grupos vinculados al postgrado.

4.2. Competencias genéricas / transversales

COMPETENCIAS INSTRUMENTALES

- T1.1 Capacidad de análisis y síntesis
- T1.2 Capacidad de organización y planificación
- T1.3 Comunicación oral y escrita en lengua propia
- T1.4 Comprensión oral y escrita de una lengua extranjera
- T1.5 Habilidades básicas computacionales
- T1.6 Capacidad de gestión de la información
- T1.7 Resolución de problemas
- T1.8 Toma de decisiones

COMPETENCIAS PERSONALES

- T2.1 Capacidad crítica y autocrítica
- T2.2 Trabajo en equipo
- T2.3 Habilidades en las relaciones interpersonales
- T2.4 Habilidades de trabajo en un equipo interdisciplinar
- T2.5 Habilidades para comunicarse con expertos en otros campos
- T2.6 Reconocimiento de la diversidad y la multiculturalidad
- T2.7 Sensibilidad hacia temas medioambientales
- T2.8 Compromiso ético

COMPETENCIAS SISTÉMICAS

- T3.1 Capacidad para aplicar los conocimientos a la práctica

- | | | |
|-------------------------------------|-------|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> | T3.2 | Capacidad de aprender |
| <input type="checkbox"/> | T3.3 | Adaptación a nuevas situaciones |
| <input type="checkbox"/> | T3.4 | Capacidad de generar nuevas ideas (creatividad) |
| <input type="checkbox"/> | T3.5 | Liderazgo |
| <input type="checkbox"/> | T3.6 | Conocimiento de otras culturas y costumbres |
| <input checked="" type="checkbox"/> | T3.7 | Habilidad de realizar trabajo autónomo |
| <input type="checkbox"/> | T3.8 | Iniciativa y espíritu emprendedor |
| <input type="checkbox"/> | T3.9 | Preocupación por la calidad |
| <input checked="" type="checkbox"/> | T3.10 | Motivación de logro |

4.3. Resultados esperados del aprendizaje

- R1. Identificar todos los aspectos que deben tenerse en cuenta en el Diseño de Procesos Químicos que puedan suponer oportunidades de negocio viables.
- R2. Emplear correctamente las fuentes de información disponibles para consultar el estado de la técnica sobre distintos procesos y la legislación medioambiental aplicable.
- R3. Priorizar y clasificar los puntos a tener en cuenta en el diseño de procesos en función de su relevancia para el análisis de viabilidad de distintas alternativas de proceso.
- R4. Dimensionar de forma aproximada algunas de las operaciones más habituales en la industria química.
- R5. Cuantificar la diferencia existente entre los resultados obtenidos en el diseño de equipos mediante distintos métodos para poder decidir sobre la aplicación de unos u otros.
- R6. Extraer detalles y especificaciones de proceso de bases de datos de patentes y literatura abierta.
- R7. Relacionar los métodos de estimación de costes de capital con el grado de exactitud de cada uno de ellos.
- R8. Estimar de forma aproximada los costes de capital de una planta química
- R9. Determinar los métodos de estimación de costes de producción.
- R10. Analizar la rentabilidad económica de procesos químicos.
- R11. Describir las bases teóricas para la estimación de propiedades físico-químicas de las sustancias que intervienen en un proceso químico y relacionarlas con los métodos de estimación disponibles.
- R12. Seleccionar el modelo termodinámico más adecuado para la estimación de propiedades físico-químicas de los compuestos.
- R13. Estimar propiedades físico-químicas de los compuestos.
- R14. Manejar adecuadamente la bibliografía para obtener datos de propiedades físico-químicas y de equilibrio de sustancias (capacidades caloríficas, entalpías de reacción, etc...)
- R15. Manejar correctamente el simulador de procesos químicos CHEMCAD.

5. Contenidos

5.1. Programa de teoría

UD1. Fundamentos del diseño de procesos químicos.

Fases en el desarrollo del diseño: Justificación documental, definición del proceso, ámbito de aplicación y aspectos de diseño. Criterios de priorización. Tipos de Diseño.

UD2. Criterios generales para el diseño de operaciones unitarias.

Compresores y Bombas de vacío. Transporte de partículas sólidas. Torres de refrigeración. Cristalización a partir de disoluciones. Molienda. Destilación y absorción de gases. Motores y equipos de aprovechamiento energético. Secado de sólidos. Evaporadores. Extracción líquido-líquido. Filtración. Fluidización. Intercambiadores de calor. Asilamiento térmico. Mezcla y agitación. Aumento del tamaño de partícula. Tuberías y conducciones. Bombas de impulsión. Reactores. Refrigeración. Separación de partículas por tamaño. Servicios Auxiliares. Depósitos. Tanques a presión. Tanques de almacenamiento.

UD3. Análisis económico de procesos químicos.

Estimación de costes de capital. Estimación de costes de producción. Fundamentos de análisis económico. Evaluación de la rentabilidad de procesos.

UD4. Estimación de propiedades físico químicas.

Diagramas de equilibrio. Curvas de residuos. Estimación de condiciones de equilibrio mediante ecuaciones de estado y mediante coeficientes de actividad. Etapas del método de estimación de propiedades físicas. Estimación de entalpías.

5.2. Programa de prácticas

Simulación por computador

Características generales. Representación gráfica de diagramas de flujo. Base de datos de componentes. Elección y especificación de sistemas de unidades. Especificación de corrientes de proceso. Selección de modelos termodinámicos para cálculos de equilibrio de fases y entalpía. Utilización de datos bibliográficos para la introducción de nuevos conjuntos de parámetros de interacción binaria (BIP's) de modelos termodinámicos y para el cálculo de nuevos BIP's a partir de datos de equilibrio. Obtención de propiedades fisicoquímicas de las corrientes o de compuestos puros. Especificación de operaciones unitarias. Corrientes de corte. Opciones de convergencia. Simulación secuencial. Análisis de errores y avisos. Visualización de resultados. Informes y representaciones gráficas. Análisis de sensibilidad. Módulos adicionales.

5.3. Programa resumido en inglés

UD1. Chemical process design fundamentals.

UD2. General criteria for unit operations design.

UD3. Chemical process economics.

UD4. Physical property estimation.

6. Metodología docente

6.1. Actividades formativas			
Actividad	Descripción de la actividad	Trabajo del estudiante	ECTS
Clase de teoría	Clase expositiva utilizando técnicas de aprendizaje cooperativo informal de corta duración. Resolución de dudas planteadas por los estudiantes. Se tratarán los temas de mayor complejidad y los aspectos más relevantes.	<u>Presencial</u> : Asistencia a clase y toma de apuntes.	0.7
		<u>No presencial</u> : Lectura previa de los materiales proporcionados específicamente por el profesor y estudio individual de la materia.	1.6
Clase de problemas resolución de problemas tipo y casos prácticos		<u>Presencial</u> :	
		<u>No presencial</u> :	
Clase de Prácticas. Sesiones de aula de informática	Las sesiones prácticas en aula de informática con software de simulación, permiten ampliar la capacidad del alumno para aplicar los conocimientos teóricos al diseño de procesos.	<u>Presencial</u> : Manejo de software específico de simulación de procesos bajo las indicaciones directas del profesor.	0.3
		<u>No presencial</u> : Manejo de software específico de simulación de procesos de forma autónoma por parte del alumno.	0.8
Actividades de aprendizaje cooperativo	Se propondrán problemas/tareas a resolver mediante trabajo en grupo. La evaluación del trabajo se realizará mediante exposición y defensa de los mismos de forma individual ante el resto de compañeros y el profesor.	<u>Presencial</u> :	
		<u>No presencial</u> : Resolución de problemas o tareas propuestas sobre alguna de las unidades didácticas.	
Actividades de evaluación formativa		<u>Presencial</u> :	
		<u>No presencial</u> :	
Tutorías individuales y de grupo	Sesiones de apoyo a los estudiantes para orientación en el seguimiento de los temas que aborda la asignatura	<u>Presencial</u> : Planteamiento de dudas sobre los temas planteados en la asignatura	0.4
		<u>No presencial</u> :	
Realización de trabajos de investigación individual o en grupo y presentación oral	Planteamiento de un trabajo original de aplicación de los contenidos teóricos presentados en la asignatura.	<u>Presencial</u> :	
		<u>No presencial</u> : Elaboración autónoma de la memoria del trabajo propuesto.	1.2
Realización de exámenes oficiales		<u>Presencial</u>	
		<u>No presencial</u> :	
			5

7. Evaluación

7.1. Técnicas de evaluación				
Instrumentos	Realización / criterios	Ponderación	Competencias genéricas (4.2) evaluadas	Resultados (4.3) evaluados
Prueba escrita Individual	Cuestiones teóricas orientadas a conceptos y definiciones, que evalúan principalmente los conocimientos teóricos.	Sólo será de aplicación para aquellos alumnos que no sigan la asignatura de forma presencial	T1.1, T1.3, T1.7, T1.8, T2.1, T3.1, T3.2	R1, R3, R4, R5, R7, R8, R9, R10, R11, R12, R13, R15
Evaluación de la participación del estudiante en las clases de teoría.	Evaluación subjetiva de la participación del alumno en las actividades desarrolladas en las sesiones de teoría.	20% de la calificación de la asignatura	T1.3, T1.4, T1.8, T2.1, T2.7, T2.8, T3.1,	R1, R3, R7, R9, R11, R12
Evaluación de las prácticas en aula de informática	Evaluación subjetiva de la participación del alumno en las sesiones de prácticas.	20% de la calificación de la asignatura	T1.1, T1.4, T1.5, T1.6, T1.7, T1.8, T2.1, T3.1, T3.2, T3.7, T3.10	R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R11, R12, R13, R14, R15
Evaluación de los trabajos de investigación individuales o en grupo	Se realizará una exposición oral sobre los trabajos presentados, con el fin de evaluar la asimilación de los conceptos incluidos en dicho trabajo.	60% de la calificación de la asignatura	T1.1, T1.3, T1.6, T1.7, T1.8, T2.1, T2.7, T2.8, T3.1, T3.2, T3.7, T3.10	R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R11, R12, R13, R14, R15

7.2. Mecanismos de control y seguimiento

El seguimiento del aprendizaje se realizará mediante las siguientes actividades:

- Cuestiones planteadas de manera informal en clase.
- Supervisión durante las sesiones de prácticas en aula de informática.
- Presentaciones orales de problemas propuestos y demostración de uso del software.
- Tutorías individuales.

8. Recursos y bibliografía

8.1. Bibliografía básica

- TURTON R., BAILIE R.C., WHITTING W.B., SHAEWITZ A. Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes. New York: Prentice-Hall, 2001
- BRANAN, C.R., Rules of Thumb for Chemical Engineers. Houston, Gulf Professional Publishing, 2005.

8.2. Bibliografía complementaria

- PETERS M.S., TIMMERHAUS K.D., WEST R.E., Plant Design and Economics for Chemical Engineers. New York: McGraw-Hill, 2003
- LUYBEN W.L. Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers. New York: McGraw-Hill, 1990.
- HIMMELBLAU D.M., BISCHOFF K.B. Análisis y Simulación de Procesos. Barcelona: Reverté, 1976.
- POLING, PRAUSNITZ Y O'CONNELL, The Properties of gases and liquids, Mc Graw Hill, New York, 2000.
- DAUBERT, T.E. Y DANNERT, R.P., Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals.

8.3. Recursos en red y otros recursos

http://www.chemstations.com/content/documents/CHEMCAD_6_User_Guide_-_online.pdf