



Guía Docente

MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE PROCESOS



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2023-24



I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: Modelización y Simulación de Procesos
CARÁCTER: Obligatoria
MÓDULO: Ingeniería de Procesos y Producto
TITULACIÓN: Máster en Ingeniería Química
SEMESTRE/CUATRIMESTRE: Primer semestre (primer curso)
DEPARTAMENTO/S: Matemática Aplicada e Ingeniería Química

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Grupo Único	
Teoría Seminario Tutoría	<p>Profesor: JOSÉ ANTONIO DELGADO DOBLADEZ Departamento: Ingeniería Química y de Materiales Despacho: QA-144 e-mail: jadeldob@ucm.es</p>
Teoría Seminario Tutoría	<p>Profesor: VICENTE ISMAEL AGUEDA MATE Departamento: Ingeniería Química y de Materiales Despacho: QA-168 e-mail: viam@ucm.es</p>
Teoría Seminario Tutoría	<p>Profesor: BENJAMIN PIERRE PAUL IVORRA Departamento: Análisis Matemática y Matemática Aplicada Despacho: 302-F (Fac. de C.C. Matemáticas) e-mail: ivorra@mat.ucm.es</p>
Laboratorio	<p>Profesor: JOSE ANTONIO DELGADO DOBLADEZ Departamento: Ingeniería Química y de Materiales Despacho: QA-144 e-mail: jadeldob@ucm.es</p> <p>Profesor: VICENTE ISMAEL AGUEDA MATE Departamento: Ingeniería Química y de Materiales Despacho: QA-168 e-mail: viam@ucm.es</p> <p>Profesor: BENJAMIN PIERRE PAUL IVORRA Departamento: Análisis Matemática y Matemática Aplicada Despacho: 302-F (Fac. de C.C. Matemáticas) e-mail: ivorra@mat.ucm.es</p>



II.- OBJETIVOS

■ OBJETIVO GENERAL

El objetivo de esta asignatura es que alumno aprenda a usar el modelado y la simulación como una herramienta para entender los procesos en ingeniería química y su dinámica. La asignatura constará de dos partes o bloques. En la primera se abordarán los fundamentos matemáticos de los métodos numéricos adecuados para la resolución de problemas dinámicos en ingeniería química, basados principalmente en ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. En la segunda se abordarán los fundamentos sobre el modelado de procesos a partir de ecuaciones fundamentales, y se abordara la simulación con ordenador de ejemplos prácticos que incluyen el tipo de ecuaciones anteriormente citado con ordenador, analizando las relaciones causa-efecto en modelos complejos.

■ OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos numéricos para la resolución de problemas dinámicos en Ingeniería Química.
 - Saber programar un método numérico de resolución de ecuaciones diferenciales parciales con MATLAB y COMSOL Multiphysics.
- Saber plantear un modelo de un proceso dinámico en Ingeniería Química a partir de ecuaciones fundamentales y resolverlo con un método numérico adecuado
- Usar la simulación como una herramienta para analizar las relaciones causa-efecto en procesos dinámicos en Ingeniería Química.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

Nociones básicas de informática (manejo de lenguajes de programación como MATLAB), de Matemáticas (análisis matemático), y de Ingeniería Química (operaciones básicas, ingeniería de la reacción química e ingeniería de procesos).

■ RECOMENDACIONES:

Se recomienda haber realizado los estudios necesarios para obtener el Grado en Ingeniería Química

IV.- CONTENIDOS

■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

BLOQUE 1. FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias y Parciales. Regímenes estacionario y no estacionario. Métodos numéricos para ecuaciones de ecuaciones diferenciales: método de diferencias finitas, método de elementos finitos, método de colocación ortogonal. Implementación en MATLAB y COMSOL Multiphysics.

BLOQUE 2. FUNDAMENTOS DEL MODELADO DE PROCESOS: Fundamentos de dinámica de procesos. Desarrollo de modelos dinámicos. Modelado de fenómenos de transporte en procesos no estacionarios. Modelado de procesos dependientes del tiempo



y de una o más coordenadas espaciales. Simulación de procesos dinámicos con MATLAB. Ejemplos de aplicación a casos prácticos en Ingeniería Química.

■ PROGRAMA:

BLOQUE 1. FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS:

Tema 1. Métodos numéricos para ecuaciones diferenciales

Introducción a MATLAB y COMSOL Multiphysics. Conceptos básicos sobre ecuaciones diferenciales. Algunos métodos numéricos para la resolución numérica de ecuaciones en derivadas ordinarias y parciales. Métodos de diferencias finitas y su implementación numérica. Métodos de colocación ortogonal y su implementación numérica. Introducción al método de elementos finitos. Interacciones entre MATLAB y COMSOL Multiphysics. Introducción a la optimización. Optimización de Procesos.

BLOQUE 2. FUNDAMENTOS DEL MODELADO DE PROCESOS:

Tema 1. Fundamentos del modelado dinámico de procesos en Ingeniería Química

Introducción. Aspectos generales sobre el modelado. Metodología general en modelado. Formulación de modelos dinámicos. Balance total. Balance de componentes. Métodos de realización de balances. Elección del volumen de control. Ejemplos. Balance de energía. Ejemplos. Balance de cantidad de movimiento. Ejemplos.

Tema 2: Modelado diferencial de contactores y reactores

Introducción. Reactor tubular. Balance de materia. Balance de energía. Ejemplos. Algoritmo PDELFIN: resolución de problemas en derivadas parciales por el método de colocación ortogonal en incrementos finitos. Manejo del algoritmo PDELFIN en un entorno de MATLAB.

Tema 3: Resolución de ejemplos de casos prácticos en Ingeniería Química

V.- COMPETENCIAS

■ GENERALES:

- **CG-5:** Saber establecer modelos matemáticos y desarrollarlos mediante la informática apropiada, como base científica y tecnológica para el diseño de nuevos productos, procesos, sistemas y servicios, y para la optimización de otros ya desarrollados.
- **CG-11:** Poseer las habilidades del aprendizaje autónomo para mantener y mejorar las competencias propias de la ingeniería química que permitan el desarrollo continuo de la profesión.

■ ESPECÍFICAS:

- **CE-1:** 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.



- **CE-3:** 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.
- **CE-4:** 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

■ TRANSVERSALES:

- **CT-1:** Desarrollar el trabajo de forma autónoma.
- **CT-5:** Elaborar y escribir informes y otros documentos de carácter científico y técnico.
- **CT-6:** Aplicar a entornos nuevos o poco conocidos, dentro de contextos multidisciplinares, los conceptos, principios, teorías o modelos relacionados con la Ingeniería Química.
- **CT-9:** Comunicar conceptos científicos utilizando los medios audiovisuales más habituales, desarrollando las habilidades de comunicación oral.

VI. – HORAS DE TRABAJO POR ACTIVIDAD

Código	Actividad	Total (horas)	Presencialidad
			(%)
AF1	Clases teoría	25	100
AF2	Seminarios	4	100
AF3	Problemas	10	100
AF4	Prácticas	20	100
AF6	Tutorías	2	100
AF7	Evaluación	2	100
AF0	Trabajo autónomo del alumno	87	0

VII.- METODOLOGÍA

El tiempo lectivo del curso se divide en clases teóricas, seminarios, problemas, laboratorios, y tutorías.

Las **clases teóricas** se desarrollarán en un solo grupo, formado por el conjunto de todos los alumnos matriculados en la asignatura. Consistirán, de forma mayoritaria, en lecciones magistrales en las que se expondrán conocimientos teóricos generales sobre la asignatura.



Las **clases de seminario** se realizarán en aulas de informática o con ordenadores personales, en función de la disponibilidad. En estas clases se trabajará en profundidad sobre uso de MATLAB para estudiar los métodos de resolución de las ecuaciones que describen un proceso dinámico.

En las **clases de problemas** se aplicarán los conceptos vistos en las clases de teoría a la resolución de problemas concretos.

En el **laboratorio** los alumnos resolverán casos prácticos usando el programa MATLAB con el asesoramiento del profesor.

En las **tutorías** se supervisará el progreso de los alumnos, resolviendo sus dudas sobre lo aprendido en las diferentes actividades.

Se utilizará el **Campus Virtual** como instrumento para poner a disposición de los alumnos el material que se utilizará en las clases teóricas y prácticas, y como medio de comunicación entre el profesor y los alumnos.

VIII.- BIBLIOGRAFÍA

■ BLOQUE 1:

- FINLAYSON, B.; BIEGLER, L.T., GROSSMAN, I., “Mathematics in Chemical Engineering” in Ullmann’s Modelling and Simulation, J. Wiley (2007).
- FINLAYSON, B., Introduction to Chemical Engineering Computing, J. Wiley (2005).
- VÁZQUEZ, L.; JIMÉNEZ, S.; AGUIRRE, C.; PASCUAL, P. J., “Métodos Numéricos para la Física y la Ingeniería”, Mc Graw-Hill (2009).
- INFANTE, J.A.; REY, J. M^a, “Métodos Numéricos. Teoría, Problemas y Prácticas con MATLAB”, Ediciones Pirámide (1999).
- Á.M RAMOS, Introducción al análisis matemático del método de elementos finitos, Editorial Complutense, (2013).
- ELNASHAIE, S., UHLIG, F., with the assistance of AFFANE, C., “Numerical techniques for chemical and biological engineers using MATLAB: a simple bifurcation approach”, Springer (2007).
- R.W. PRYOR. Multiphysics Modeling Using COMSOL 5 and MATLAB, Mercury, (2015).
- Á. M. RAMOS; J. M. REY: Matemáticas Básicas para el acceso a la Universidad (2^a ed.). Ediciones Pirámide (Grupo ANAYA), (2017).

■ BLOQUE 2:

- INGHAM, J.; DUNN, I.J.; E. HEINZLE, PHENOSIL, J.E.; SNAPE, J.B., Chemical Engineering Dynamics: an introduction to modeling and computer simulation, 3rd edition, Wiley-VCH, Weinheim (2007).
- LUYBEN, W. L., Process Modelling, Simulation, and Control for Chemical Engineers. McGraw-Hill (2^a ed.) (1990).



IX.- EVALUACIÓN

La evaluación del rendimiento del alumno y de las competencias adquiridas en la asignatura se llevará a cabo mediante una evaluación global, que considerará por una parte los exámenes que se realicen y por otra las actividades dirigidas y el trabajo personal efectuado por el alumno.

Para poder realizar la evaluación global de la asignatura, el estudiante deberá haber participado al menos en el 70% de las actividades presenciales de aula (teoría, seminarios y tutorías). La asistencia a todas las sesiones de laboratorio es **obligatoria**.

El rendimiento académico y la calificación final serán el resultado de las calificaciones obtenidas en el Bloque 1 (45%), y en el Bloque 2 (55%), ponderadas de la siguiente forma:

BLOQUE 1:	
Examen:	60%
Actividades dirigidas:	30%
Prácticas de laboratorio:	10%
BLOQUE 2	
Examen:	50%
Actividades dirigidas:	30%
Prácticas de laboratorio:	20%

Será necesario obtener una calificación mínima de cuatro en cada parte para realizar la media.

■ EXAMEN ESCRITO:

Se realizarán dos exámenes escritos, de carácter principalmente práctico, uno al final de cada bloque, que consistirá en un conjunto de cuestiones de desarrollo o aplicación directa de teoría y de problemas numéricos.

■ ACTIVIDADES DIRIGIDAS:

En las actividades dirigidas, los alumnos deberán entregar un informe escrito sobre las actividades realizadas, siguiendo las instrucciones del profesor, para su evaluación. La calificación obtenida en estas actividades se mantendrá todo el curso.

■ PRÁCTICAS:

Con el fin de fomentar el aprendizaje cooperativo se organizarán grupos reducidos.

La evaluación en la convocatoria ordinaria se realizará teniendo en cuenta la aptitud y actitud del alumno en las sesiones prácticas, sus respuestas a cuestiones concretas planteadas por el profesor, así como la calidad del informe escrito presentado por grupo de trabajo sobre la resolución del caso práctico y de la práctica de laboratorio (en aula de informática). Dicho informe se entregará a los profesores de la asignatura para su evaluación. La calificación obtenida en las prácticas se mantendrá todo el curso.



Las calificaciones de las actividades previstas para la evaluación de la asignatura se comunicarán a los estudiantes con la antelación suficiente antes de la realización del examen final, para que puedan planificar adecuadamente el estudio de ésta u otras asignaturas.

En todo caso, se respetará el plazo mínimo de diez días entre la publicación de las calificaciones y la fecha del examen final de la asignatura



PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

BLOQUE	ACTIVIDAD	HORAS	GRUPOS	INICIO	FIN
1. FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS	Teoría y problemas	17	1	1ª semana	8ª semana
	Seminarios	2	1		
2. FUNDAMENTOS DEL MODELADO DE PROCESOS	Teoría y problemas	18	1	8ª semana	15ª semana
	Seminarios	2	1		
BLOQUE 1 y 2.	Tutorías programadas	2	1	Semanas 8ª y 15ª	
1. FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS	Laboratorio	10	2	7ª semana	8ª semana
2. FUNDAMENTOS DEL MODELADO DE PROCESOS	Laboratorio	10	2	14ª semana	15ª semana



RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES

Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
Clases de teoría y problemas	CG-5,CE-1,CE-3,CT-1,CT-5,CT-6,CT-9	Explicación en clase	Toma de apuntes		35	48	83	-
Seminarios	CG-5,CG-11,CE-1,CE-3,CE-4,CT-1,CT-5,CT-6,CT-9	Explicación métodos resolución ecuaciones con MATLAB	Toma de apuntes Manejo del ordenador	Evaluación del informe entregado	4	6	10	20%
Laboratorios	CG-5,CG-11,CE-1,CE-3,CE-4,CT-1,CT-5,CT-6,CT-9	Asesoramiento los alumnos en los casos prácticos asignados	Aplicación de los conocimientos adquiridos en las clases teóricas y seminarios	Evaluación del informe entregado	20	27	47	20%
Tutorías	CG-5,CG-11,CE-1,CE-3,CE-4,CT-1,CT-5,CT-6,CT-9	Supervisión del progreso de los alumnos	Preparación de las preguntas para el profesor, asimilación y aplicación de las explicaciones recibidas		2	3	5	10%
Exámenes	CG-5,CG-11,CE-1,CE-3,CE-4,CT-1,CT-5,CT-6,CT-9	Proponer, vigilar y corregir el examen. Calificar al alumno	Estudiar y realizarlo	Examen sobre los contenidos expuestos en las clases teóricas y de problemas	2	3	5	50%

P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación