

Presentación

En esta asignatura el alumno aprenderá a seleccionar, elaborar y aplicar el modelo más adecuado para describir el comportamiento termodinámico de un fluido, haciendo uso de software comercial propio de las industrias de procesos.

Programa Básico

Objetivos

El objetivo del curso es conseguir que el alumno, a partir de la descripción de una operación en una industria de proceso, sea capaz de seleccionar el modelado termodinámico necesario para su representación, y pueda implementarlo en la simulación de dicha operación, tanto en régimen estacionario como dinámico.

Las principales competencias a adquirir:

- Aprender a seleccionar modelos termodinámicos, para sistemas simples y complejos, a partir de los componentes constituyentes y las condiciones de operación.
- Ser capaz de seleccionar, calcular y correlacionar sus parámetros.
- Aplicar las herramientas de diseño y optimización que se utilizan en plantas de procesos, para la simulación en régimen estacionario y dinámico.
- Analizar la adecuación del modelo seleccionado a partir del comportamiento de sistemas reales.

Programa de Teoría

PARTE A: Simulación

1. Caso Práctico. Software comercial de simulación de procesos químicos. Fundamentos de la simulación con HYSYS. Ayuda.
2. Uso de la interface PFD. Casos prácticos
3. Equilibrium Reactor. Attachments. Recycle. Databook. Destilación: Shortcut y Colums.
4. Introducción. Descripción de un caso simple.
5. Conceptos fundamentales de la simulación dinámica de procesos químicos.
6. Conversión de un proceso estacionario en una simulación dinámica.
7. Operaciones programadas: Scheduler.

PARTEB: Análisis termodinámico

1. Ecuaciones de estado: factor de compresibilidad
2. Relaciones de Maxwell y derivación de propiedades: entalpía, entropía y fugacidad. Cálculo de propiedades a partir de ecuaciones de estado: discrepancias.
3. Ecuaciones cúbicas: compuestos puros, funciones alfa y factor acéntrico, densidades de líquidos, presión de saturación de substancias polares.
4. Mezclas: reglas de combinación y mezcla. Reglas de mezcla no cuadráticas.
5. Equilibrio entre fases: algoritmo de flash multicomponente (Ratchford-Rice). Equilibrios líquido-líquido y sólido-líquido. Estabilidad. Equilibrio químico.

Programa Práctico

La parte A del curso (Simulación) se desarrollará en un aula informática, mediante el desarrollo de diferentes casos prácticos.

En la parte B (Análisis termodinámico) se analizará, haciendo uso de las herramientas introducidas en la parte A, el

comportamiento termodinámico de diversos sistemas reales. Se analizarán en el aula informática, comparando y adecuando los resultados a valores experimentales.

Evaluación

Cada alumno deberá desarrollar en la parte A un caso práctico correspondiente a la simulación dinámica de un diagrama para la optimización de su proceso de puesta en marcha.

En el apartado B de análisis termodinámico desarrollará dos casos prácticos consistentes en el análisis y modelado termodinámico de un proceso real.

Ambas partes deberán aprobarse por separado, obteniéndose la calificación final por media aritmética de ambas notas.

Bibliografía
