



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Proyecto de Innovación y Mejora de la Calidad Docente

Convocatoria 2015

Nº de proyecto: 285

Título del proyecto:

Desarrollo de un programa de modelado y simulación para separaciones mediante lecho móvil simulado (SMB) para su empleo didáctico en el nuevo máster de Ingeniería Química

Nombre del responsable del proyecto: V. Ismael Águeda Maté

Facultad de Ciencias Químicas

Departamento de Ingeniería Química

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

El objetivo de este proyecto es el desarrollo de un programa de simulación para diseñar procesos de separación por adsorción en un lecho móvil simulado (SMB), y su empleo en prácticas de laboratorio de asignaturas del máster de Ingeniería Química.

Este objetivo genérico se concreta en los siguientes objetivos específicos:

- Asegurar la calidad en la formación de posgrado con el empleo de tecnologías novedosas y ampliamente empleadas de las que no existe instalación experimental debido a su elevado coste.
- Desarrollar un software basado en la resolución de las ecuaciones fundamentales que permita modelar procesos avanzados de separación ampliamente empleados en la industria.
- Simular otras condiciones de operación similares a las que se emplean en instalaciones industriales. Esta iniciativa puede favorecer la inserción laboral de los estudiantes de máster debido a la amplia utilización de herramientas de simulación en la Ingeniería Química.
- Extender el uso del Campus Virtual UCM. Se empleará esta herramienta para el desarrollo de las asignaturas en las que se realice la práctica. Se incluirá la información necesaria para el correcto desarrollo de la misma con bibliografía específica.
- Desarrollar tutoriales y manuales de manejo en español e inglés del programa de simulación mediante ejemplos. Se pretende potenciar el aprendizaje en inglés, ya que la mayoría de los manuales avanzados que se emplean en los títulos de máster se encuentran publicados en este idioma.
- Generar tablas de datos que permitan realizar la práctica virtualmente para aquellos estudiantes que no puedan realizarlo presencialmente. Permitirá realizar prácticas a través de internet y el aprendizaje autónomo del estudiante.

2. Objetivos alcanzados

De los objetivos inicialmente propuestos, se han alcanzado los siguientes:

- Se ha desarrollado un software basado en la resolución de las ecuaciones fundamentales que permite modelar procesos cíclicos avanzados de separación por adsorción en fase líquida ampliamente empleados en la industria (SMB). El software se llama SMBSIM y está disponible para los estudiantes de las asignaturas de Máster.
- Se han desarrollado tutoriales y manuales de manejo del programa de simulación basados en la resolución de ejemplos en español e inglés. Se pretende potenciar el aprendizaje en inglés, ya que la mayoría de los manuales avanzados que se emplean en los títulos de máster se encuentran publicados en este idioma. Su manejo facilita el aprendizaje y la adquisición de vocabulario específico a través del empleo y uso de nuevas tecnologías.
- Se han propuesto casos prácticos basados en referencias bibliográficas en las se emplean condiciones de operación similares a las que se utilizan en instalaciones industriales. Mediante, esta iniciativa se pretende favorecer la adquisición de competencias específicas necesarias para una adecuada inserción laboral de los estudiantes de máster. La simulación de procesos es una herramienta que se emplea en todos los sectores de la industria química y su conocimiento se antoja de vital importancia.
- El empleo de las herramientas de simulación desarrolladas va a permitir, asegurar la calidad en la formación de posgrado con el empleo de estas tecnologías novedosas y ampliamente empleadas. En aquellos procesos de los que no se dispone de instalación experimental debido a su elevado coste es necesario el empleo de herramientas de simulación para el diseño de instalaciones industriales.
- Como consecuencia de todo lo descrito anteriormente se ha extendido el uso del Campus Virtual UCM. La herramienta de simulación y los manuales y casos prácticos se han puesto a disposición de los estudiantes mediante un Seminario del CV de la UCM.
- El empleo de herramientas de simulación permite el aprendizaje autónomo y a distancia del estudiante ya que no es necesaria la presencia física. En este sentido los estudiantes de Máster en muchos casos se muestran abiertos a esta posibilidad debido a que algunos estudiantes están compaginando sus estudios de Máster con un empleo.
- Un objetivo alcanzado y que no se planteaba como tal en el proyecto es la propuesta por parte de varios estudiantes de Trabajos de Fin de Máster basados en el empleo de estas herramientas de simulación y modelización. Les permite compaginar su vida académica y laboral y los resultados son muy satisfactorios ya que en algunos casos presentan problemáticas de sus centros de trabajo.

3. Metodología empleada en el proyecto

La metodología empleada para el desarrollo del proyecto y consecución de los objetivos planteados ha sido la siguiente:

- 1) Desarrollo de un software basado en la resolución de las ecuaciones fundamentales de balance de materia, energía y cantidad de movimiento. El programa integrador empleado se denomina ODEPACK y consiste en una colección de subrutinas de Dominio Público en FORTRAN. El compilador es SILVERFROST FORTRAN del que la UCM posee licencia educacional
- 2) Desarrollo de manuales de manejo del software. Cada una de las guías que se ha desarrollado tanto en español como en inglés.
- 3) Desarrollo del laboratorio. Se realiza una sesión práctica de manejo del programa informático donde se resuelven las cuestiones planteadas.

4. Recursos humanos

El equipo docente está constituido por tres catedráticos (Gabriel Ovejero, M^a Ángeles Uguina y M^a Dolores Romero), un profesor titular (José Antonio Delgado) y un profesor contratado doctor (V. Ismael Águeda) como responsable del mismo que forman parte del Grupo de Catálisis y Operaciones de Separación (CyPS)" (ref. 910602). Además, se han incorporado dos Técnicos del Centro de Apoyo a la Investigación (CAI) del Taller Electrónico pertenecientes al PAS de la UCM (Andrés Curto y Óscar García).

Los integrantes del equipo son responsables de la docencia en las asignaturas Modelización y Simulación de Procesos y Procesos Avanzados de Separación del nuevo Máster en Ingeniería Química: Ingeniería de Procesos, en las que el desarrollo del presente proyecto de innovación se llevaría a cabo.

Además de impartir docencia en otras asignaturas del Máster en Ingeniería Química, desarrollan su actividad docente en asignaturas del Grado en Ingeniería Química relacionadas con la temática descrita en el presente proyecto como Simulación y control de procesos, Operaciones de Separación e Informática aplicada así como las prácticas pertenecientes a éstas y otras asignaturas durante más de 20 años, por lo queda demostrada su experiencia en la temática descrita.

Su actividad investigadora se centra en aspectos de la Ingeniería Química relacionados con las asignaturas de Modelización y Simulación de Procesos y Procesos Avanzados de Separación. Así, han publicado varios trabajos de investigación en revistas de reconocido prestigio en Ingeniería Química relacionadas con la simulación y modelización de procesos de separación por adsorción en fase líquida de alcoholes y ácidos orgánicos de bajo peso molecular. Además, han registrado un software de simulación de procesos de separación por adsorción empleando la tecnología SMB. En la actualidad desarrollan proyectos en colaboración con empresas bajo el amparo del artículo 83 de la LOU basados en la separación de compuestos químicos empleando la tecnología SMB con referencias 101/2015 y 97 2015.

La amplia experiencia educativa de los miembros del grupo de más de 40 años en la docencia de diferentes asignaturas de Ingeniería Química, junto con el empleo de nuevas herramientas de las que disponen ofrece una serie de sinergias que se pretenden aprovechar en este proyecto.

Todos los miembros del grupo han participado activamente en innovación educativa en las diferentes asignaturas de las que son responsables en diferentes procesos de cambios de planes de estudio. Lo que queda de manifiesto en el apartado de experiencia en innovación educativa.

5. Desarrollo de las actividades

El orden cronológico de desarrollo de las actividades ha sido el siguiente:

- 1) Desarrollo de un software basado en la resolución de las ecuaciones fundamentales de balance de materia, energía y cantidad de movimiento. El programa integrador empleado se denomina ODEPACK y consiste en una colección de subrutinas de Dominio Público en FORTRAN. El compilador es SILVERFROST FORTRAN del que la UCM posee licencia educacional. El producto final se denomina SMBSIM. En el programa hay que introducir una serie de ficheros de entrada con las principales variables de las que depende el proceso de separación SMB y se obtienen una serie de ficheros de salida con parámetros definidos. Se pueden modificar las variables de la unidad SMB, los caudales, composiciones, propiedades del líquido, isotermas de equilibrio, temperaturas, parámetros cinéticos y parámetros del balance de calor
- 2) Desarrollo de manuales de manejo del software. Se han desarrollado los manuales de manejo del software en inglés y en español. Se han incluido las etapas propias de una separación basada en la tecnología SMB (Simulated Moving Bed), incluyendo un ejemplo didáctico de resolución del modelo. Se ha elegido una separación enantiomérica basada una referencia bibliográfica. El manual en inglés permite obtener el vocabulario técnico específico para procesos SMB.
- 3) Guiones de prácticas e información básica necesaria. Se ha incluido información necesaria para el desarrollo de la práctica:
 - a. Introducción: En esta primera parte se desarrollará una breve reseña a los procesos de adsorción y a la aplicación industrial que se pretende estudiar, su importancia, y los procedimientos tradicionales para su resolución. Se presentará el programa de simulación con las ventajas que ofrece la resolución mediante simulación.
 - b. Desarrollo: En esta segunda parte, se desglosarán, paso por paso, las diferentes etapas que han de seguirse para la resolución de cada problema. Esta parte se encuentra incluida en el manual de manejo del programa.
 - c. Resultados: En esta tercera etapa se mostrarán los diferentes resultados que pueden obtenerse del programa generado. Asimismo, se hará hincapié en el significado físico de los mismos, ya que se trata de que el estudiante vea el programa como una “herramienta de cálculo” que facilita en gran medida la resolución de ecuaciones y modelos que de otra manera, mediante la resolución “a mano”, implicarían cálculos muy tediosos. Como en el caso anterior se incluye dentro del manual del programa.
 - d. Información bibliográfica: Se adjunta información bibliográfica tanto de aplicaciones de la tecnología SMB como del modelado de estos procesos.

4) Desarrollo del laboratorio:

- a. En una primera sesión se obtendrán los datos bibliográficos necesarios.
- b. En una segunda sesión se realizarán los cálculos matemáticos para obtener resultados a partir de datos experimentales. Se optimizará el proceso de separación SMB.
- c. Se entregarán los archivos con los cálculos realizados en la sesión de prácticas.

5) Implementación en el CV del laboratorio de la asignatura. Se incluirán los productos desarrollados en los apartados anteriores. Se introducirá una herramienta para entregar las tareas y ser evaluadas: Transcurridos 15 días se entregará un guión de prácticas con una breve introducción y objetivos, los resultados y la discusión de los mismos y por último unas conclusiones. La extensión máxima del informe se limitará a 15 páginas.

6. Anexos

Los productos obtenidos se han implementado en un seminario del campus virtual de la UCM desarrollado en la plataforma Moodle. Se ha denominado Laboratorio de procesos avanzados de simulación ya que con el desarrollo de esta práctica se pueden complementar los conocimientos y competencias que se deben adquirir en las asignaturas del máster de ingeniería química de Modelización y simulación de procesos y de Operaciones avanzadas de separación.

La url para acceder al seminario es:

<https://cv4.ucm.es/moodle/course/view.php?id=54094>