

Datos identificativos de la asignatura

Asignatura	CALCULO AVANZADO DE PROCESOS QUIMICOS
Código	2202
Departamento	Ingeniería Química y Química Inorgánica http://departamentos.unican.es/quimica/
Área	Ingeniería química
Tipo	obligatoria
Curso/Cuatrimestre	Cuarto/primerio
Créditos BOE/Horas ECTS	9 créditos/ 225 horas trabajo alumno
Idioma de impartición	Español

Conocimientos previos

Calculo de procesos químicos, mecánica de fluidos y transmisión de calor, cinética y termodinámica química aplicadas, operaciones básicas de la ingeniería química, fundamentos de informática

Objetivos y competencias a adquirir en la asignatura

Objetivos generales	Competencias
Introducción en los principios y técnicas matemáticas a utilizar para la resolución de problemas de ingeniería química descritos por ecuaciones diferenciales mediante métodos numéricos. Resolución de diversas aplicaciones en Ingeniería Química a través de manejo de software (Fortran, librerías matemáticas NAG), que se emplean como herramientas de aprendizaje a lo largo de las clases prácticas.	Capacidad de resolver problemas de ingeniería química que requieran la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales.

Asignación de horas ECTS

9 CREDITOS BOE: 225 horas de trabajo del alumno/cuatrimestre por asignatura		
HORAS PRESENCIALES: 90	CM Horas Magistrales/cuatrimestre= 45	CT Horas Tutoradas/cuatrimestre = 45
	CM Horas Magistrales/semana = 3	CT Horas Tutoradas/semana =3
HORAS NO PRESENCIALES: 135	AT Actividades Tutoradas/cuatrimestre = 45	AI Actividades Independientes/cuatrimestre =90
	AT Actividades Tutoradas/semana = 3	AI Actividades Independientes/semana = 6

📄 **Organización docente de la asignatura**

Distribución de la asignatura

CONTENIDO	CM (horas)	CT (horas)	AT (horas)	AI (horas)
<p>BLOQUE TEMATICO 1: <u>Introducción. Conceptos generales</u></p> <p>1.1. CONTENIDOS TEÓRICOS (CM): Tema 1: Presentación. Sistemas de Ingeniería Química descritos mediante Ecuaciones diferenciales. Estrategias de resolución Tema 2: Clasificación de problemas de Ing. Química descritos mediante Ecuaciones diferenciales. Condiciones de integración. Adimensionalización. PRESENTACIÓN: Clases magistrales</p>	2,0			2
1.2.1-ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (CT) y (AT). Problemas de aplicación		2,0	2,0	1
1.2.2-ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (CT) y (AT). Prácticas en ordenador		-----	-----	-----
1.3.-ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN. Se evaluarán las actividades de aprendizaje y se realizará una prueba de evaluación conjunta de todos los bloques temáticos.		0,5		3
<p>BLOQUE TEMATICO 2: Problemas de Ing. Química dependientes de una sola variable. Métodos numéricos de resolución</p> <p>2.1. CONTENIDOS TEÓRICOS (CM): Tema 3: Tipos generales de problemas ordinarios del valor inicial en Ing. Química: estudio y comparación de métodos numéricos de resolución. Tema 4: Tipos particulares de problemas ODE-IVP en Ingeniería Química: ecuaciones de orden superior. Problemas no lineales. Sistemas de ecuaciones. Tema 5: Tipos generales de problemas ordinarios de valor frontera en Ingeniería Química: Estudio y comparación de métodos de resolución. Tema 6: Tipos particulares de problemas ODE-BVP en Ingeniería Química: problemas no lineales, sistemas de ecuaciones</p>	13			20
2.2.1-ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (CT) y (AT). Problemas de aplicación		6,0	10	4
2.2.2-ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (CT) y (AT). Prácticas en ordenador: Cinética de sistemas de reacciones Modelado de reactores Difusión en una dirección en estado estacionario Conducción de calor en una dirección en estado estacionario		20	11	5
2.3.-ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN. Se evaluarán las actividades de aprendizaje y se realizará una prueba de evaluación conjunta de todos los bloques temáticos.		1		8

BLOQUE TEMATICO 3: Problemas de Ingeniería Química dependientes de varias variables. Métodos numéricos de resolución.				20
3.1. CONTENIDOS TEÓRICOS (CM): Tema 7: Introducción: generación de problemas en derivadas parciales en Ingeniería Química. Clasificación Tema 8: Tipos de problemas del valor inicial en una (o más) direcciones espaciales en Ingeniería Química. Tema 9: Tipos de problemas del valor frontera en más de una dimensión espacial en ingeniería Química.	13			
3.2.1-ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (CT) y (AT). Problemas de aplicación		6,0	10	4
3.2.1-ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (CT) y (AT). Prácticas en ordenador: Conducción de calor y difusión de materia en una (o más) dimensiones espaciales en estado dinámico. Conducción de calor y difusión de materia en más de una dimensión espacial en estado estacionario		20	11	5
3.3.-ACTIVIDADES DE EVALUACION. Se evaluarán las actividades de aprendizaje y se realizará una prueba de evaluación conjunta de todos los bloques temáticos		1,0		8
BLOQUE TEMATICO 4: Modelado con ecuaciones diferenciales en Ingeniería Química				3
4.1. CONTENIDOS TEÓRICOS (CM): Tema 10: Modelado de sistemas en Ingeniería Química: reacción química, transferencia de materia, transmisión de calor	2			
4.2.-ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (CT) y (AT). Problemas de aplicación		2,0	4	2
4.3.-ACTIVIDADES DE EVALUACION. Se evaluarán las actividades de aprendizaje y se realizará una prueba de evaluación conjunta.		0,5		2
	30	60	45	87
		90	135	

Realización de Actividades Prácticas Presenciales.

Las actividades prácticas presenciales se realizan en aulas de ordenadores de la ETSIIyT.

Los alumnos matriculados serán distribuidos en grupos de acuerdo al número de alumnos matriculados.

El número de grupos definitivo atenderá al número de alumnos matriculados y se establecerá una vez finalizado el plazo de matrícula.

La distribución de alumnos en los grupos será realizada por los profesores. Los alumnos no tienen garantizada la inclusión en un determinado grupo u horario de su elección al matricularse.

Métodos de evaluación

CRITERIO DE EVALUACION	%
Evaluación Continua (Actividades de Aprendizaje) La evaluación continua comprende las actividades de aprendizaje de problemas de aplicación + prácticas de ordenador	50
Examen Final:	50
TOTAL	100

Observaciones

1. Evaluación de la “materia de aula”

La materia desarrollada a través de las clases magistrales y las actividades de aprendizaje en aula (se denominará en este escrito como “materia de aula”) se evaluará través del **examen final** y del **examen parcial** que se realizará al finalizar la parte correspondiente a ODEs.

Los alumnos que obtengan una nota igual o superior a 5 en el examen parcial no tendrán que examinarse de esa parte (ODEs) en el examen final. La nota definitiva de la materia teórica será entonces la media de ambos exámenes siempre que se apruebe el examen final. En ningún caso se guardarán notas para septiembre.

Un alumno podrá renunciar a su nota aprobada del examen parcial y examinarse de toda la materia en el examen final.

$$\text{Nota materia aula} = \frac{\text{Ex.parcial} + \text{Ex.f inal}}{2} \text{ (alumnos que se presenten al parcial)}$$

$$\text{Nota materia aula} = \text{nota examen final} \text{ (alumnos que no se presenten al examen parcial)}$$

2. Evaluación de la “materia de laboratorio”

La materia desarrollada a través de las clases prácticas de ordenador (se denominará en este escrito “materia de laboratorio” a esta parte) se evaluará al 50% mediante evaluación continua a través de la presentación de los Informes correspondientes a los ejercicios prácticos resueltos correspondiendo el otro 50% de la nota práctica a la realización de un examen de ordenador al finalizar el curso. Para poder hacer media, es necesario aprobar el examen correspondiente a la “materia de laboratorio”:

$$\text{Nota materia de laboratorio} = (\text{nota evaluación continua} + \text{nota examen})/2$$

3. Evaluación global de la asignatura

- La nota final de la asignatura se obtendrá como la media de la correspondiente a la materia de aula y de laboratorio:

$$\text{Nota Final} = (\text{nota materia de aula} + \text{nota materia laboratorio})/2$$

IMPORTANTE: Para tener derecho a que se realice la nota final como media de las notas de “materia práctica” y “materia teórica” el alumno tiene que tener al menos una nota de aprobado (5,00) en ambas partes. En caso de tener suspensa alguna de las dos partes la nota final será suspenso. No se guardan partes para septiembre ni para el año siguiente.

NOTA: Todos los alumnos tienen derecho a realizar un examen final único (100% de la Nota) compuesto de dos pruebas, una en relación a la materia de aula y otra en relación a la materia de laboratorio, renunciando al sistema propuesto anteriormente. Para aprobar la asignatura será necesario tener al menos una nota de aprobado (5,0) en ambas pruebas.

Tutorías: **(Dpto. Ingeniería Química y Química Inorgánica).**

Manuel Alvarez Guerra: alvarezgm@unican.es Despacho 535 piso -5 escalera C

Bibliografía

- Ayyub, B.M., McCuen, R.H. Numerical methods for engineers. Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ. 1996.
- Beers, K.J. Numerical Methods for Chemical Engineering. Applications in MATLAB. Cambridge University Press, Cambridge, UK. 2007.
- Butcher, J.C. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Wiley, Chichester, UK. 2003.
- Constantinides, A., Mostoufi, N. Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications. Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, NJ., USA. 1999.
- Cutlip, M.B., Shacham, M. Problem Solving in Chemical and Biochemical Engineering with POLYMATH, Excel, and MATLAB, 2nd ed. Prentice Hall, Upper Saddle River, N.J., USA. 2008.
- Davis, M.E. Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos. Compañía Editoria Continental de C.V. México, México D.F. 1990.
- Elnashaie, S., Uhlig, F. Numerical Techniques for Chemical and Biological Engineers using MATLAB. Springer, New York, NY. 2007.
- Gerald, C.F., Wheatley, P. O. Applied Numerical Analysis, 7th ed. Addison-Wesley Publishing Company, Boston, USA. 2004.
- Griffiths, D.F., Higham, D.J. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Springer, Berlín, Alemania. 2010.
- Lindfield, G.R., Penny, J.E.T. Numerical Methods, 3rd Edition. Academic Press, Amsterdam. 2012.
- Loney, N.W. Applied Mathematical Methods for Chemical Engineers, 2nd ed. CRC Press, Boca Raton, Florida, USA. 2007.
- Mathews, J. H., Fink, K. D. Métodos Numéricos con MATLAB. Prentice Hall Iberia, Madrid. 2000.
- Morton, K.W., Mayers, D. F. Numerical Solution of Partial Differential Equations: An Introduction, Second Edition. Cambridge University Press, Cambridge, UK. 2005.
- Rice, R.G., Do D.D. Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers, 2nd Edition. John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, USA. 2012.
- Riggs, J.B. An Introduction to Numerical Methods for Chemical Engineers, Second Edition. Texas Tech University Press, Lubbock, Texas. 1994.
- Walas, S.M. Modeling with Differential Equations in Chemical Engineering. Butterworth-Heinemann, Stoneham, MA, USA. 1991.
- Zill, D.G. Ecuaciones Diferenciales con Aplicaciones de Modelado, 9th ed. Cengage Learning, México D.F. 2009.