

## Integración del diseño molecular y la simulación de procesos en el desarrollo de nuevos procesos y productos industriales

**José Palomar\***, Víctor Ferro, Jesús Lemus, Pablo Navarro, Cristian Moya, Rubén Santiago, Daniel Hospital, Elisa Hernández, Alejandro Belinchón, Coral Paramio, Jose Daniel Suárez

(\*[pepe.palomar@uam.es](mailto:pepe.palomar@uam.es))

<sup>1</sup> Universidad Autónoma de Madrid, Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias, Calle Tomás y Valiente 7, 28049, Madrid, España

**Palabras clave:** Simulación molecular; Simulación de procesos; Modelos COSMO; Aspen One

### Resumen

Ante el escenario de transformación digital en el que la sociedad se está sumergiendo, junto con la creciente necesidad de adaptar las metodologías docentes a contextos más flexibles y adaptables a tendencias o situaciones de emergencia, la preparación de cursos de simulación de procesos en modalidad a distancia se erige como una vía de trabajo estratégica.

En el curso “Integración del diseño molecular y la simulación de procesos en el desarrollo de nuevos procesos y productos industriales” se combina la enseñanza de la simulación de procesos en simuladores Aspen One (Aspen Plus y Aspen Hysys) con las posibilidades que ofrecen los modelos COSMO, tanto en simulación molecular (COSMOtherm) como su integración en simulación de procesos mediante la metodología multiescala COSMO/Aspen, tal y como se ejemplifica en la Figura 1. Desde 2020, el curso ha evolucionado desde su modalidad presencial (tres primeras ediciones) hasta su formato más flexible de hoy en día, conducido a partir de la plataforma Microsoft Teams.

El curso actual se estructura en una semana (25 h), con sesiones de 5 h/día en formato teoría (2 h) + práctica (3 h), utilizando 3 programas profesionales de modelización molecular (Turbomole), predicción de propiedades (COSMOtherm) y simulación de procesos (Aspen Plus). Las sesiones prácticas se han diseñado para trabajar en formato doble pantalla, con el objetivo de seguir la sesión explicativa en Microsoft Teams a la vez que se trabaja en el PC virtual de la Universidad Autónoma de Madrid, apoyándose en casos prácticos que incluyen guion, tutorial del software y formulario de resultados. Con objeto de cohesionar el curso, las tareas prácticas discurren desarrollando dos procesos: i) Producción de acetato de butilo por trans-esterificación y ii) Diseño de líquidos iónicos para operaciones de separación. Es reseñable el desarrollo de platillas que permiten cumplimentar las distintas tareas con tablas y figuras ya implementadas para facilitar el seguimiento de las sesiones y el aprendizaje de los conceptos, junto con la participación simultánea de tres docentes (un ponente, un moderador del chat y un profesor de apoyo en un canal paralelo) en las clases prácticas.

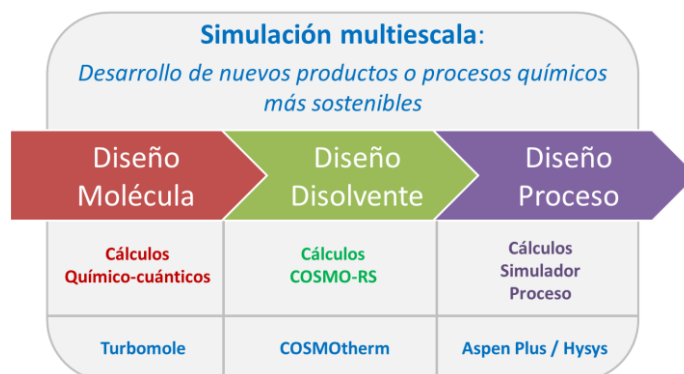


Figura 1. Estructura conceptual del curso.

Los estudiantes valoran muy positivamente tanto el curso como la actividad docente en modalidad online. El 95 % de los estudiantes recomendaría el curso, mientras que el desarrollo de las actividades prácticas, que suele ser la principal dificultad en este tipo de formatos, es satisfactorio para el 80 % de los encuestados, en cifras agregadas de ambas ediciones. La principal contribución que encuentran los estudiantes es la interactividad del curso en formato online.