

Modelagem e Simulação de Processos Químicos - IQD0016

Universidade de Brasília - Instituto de Química

Período 2024/1 - Turma T01

Professor

Alexandre Umpierre

IQD BT 86/5

aumpierre@unb.br

Período letivo

2024/1

De 18/03/2024 a 15/07/2024

Horário e local das aulas

4M34, BSA S B1 41/13

6M34, IQD AT 106/21

Horário e local de atendimento aos alunos

46T23, IQD BT 86/5

Questionamentos quanto à matéria devem ser apresentados *presencialmente*, durante as aulas ou nos horários de atendimento.

O contato por email deve ser restrito à questões formais.

Objetivo

Apresentar conceitos básicos sobre modelagem e simulação de modelos matemáticos usados em engenharia química, métodos de otimização, e simulação de processos em ambientes de simulação de processos.

Metodologia

Aulas expositivas com exemplos e exercícios e simulação de processos químicos.

A simulação de processos será realizada usando simuladores e recursos de programação.

Para os exemplos de simulação em sala de aula, será adotado o ambiente de simulação EMSO (disponível para download em <https://www.enq.ufrgs.br/alsoc/download/>).

Os estudantes são instados a construir seus acervos de códigos e modelos para simulação durante o decorrer de todo o semestre, a fim de servirem-se deles para realizarem as avaliações.

Listas de exercícios e estudos dirigido, quando houver, serão divulgados na página da disciplina.

Não são autorizados registros fotográficos do conteúdo ministrado das aulas.

Programa

O conteúdo será dividido em dois módulos:

Módulo 1

- Conceitos básicos de modelagem e simulação
- Modelos matemáticos teóricos, empíricos e icônicos
- Exemplos de modelos matemáticos de processos químicos
- Classificação dos modelos matemáticos
- Simulação de processos químicos (usando o EMSO)

Módulo 2

- Busca univariável e multivariável com e sem restrições
- Algoritmos de otimização
- Simulação de processos químicos (usando o EMSO)

Avaliação

Ao longo do período serão realizados dois trabalhos, HW_1 e HW_2 . O trabalho HW_1 versará sobre modelagem de processos químicos, e o trabalho HW_2 versará sobre simulação e otimização de processos químicos.

As avaliações serão corrigidas em uma escala de 0 a 10.

A nota final será calculada como a média aritmética das provas HW_1 e HW_2 .

As orientações descritas abaixo para resolução, redação e entrega das provas devem ser observadas com atenção.

A inobservância dessas orientações implicará em desconto de nota.

Datas das avaliações

- HW_1 - xx/xx/2024
- HW_2 - xx/xx/2024

Critérios de avaliação

Os critérios de correção das avaliações são observância às orientações e adequação das respostas. Os trabalhos extraclasse devem, ainda, atender às *instruções para redação de trabalhos extraclasse*.

O desenvolvimento das respostas deve estar diretamente e objetivamente relacionado à obtenção das respostas finais e deve seguir uma sequência lógica e consistente com os modelos aceitos pela literatura da área da disciplina.

Afirmações não relacionadas ao desenvolvimento correto das questões serão desconsideradas, independentemente de seus valores e validade.

Orientações para o trabalho *HW*₁:

- Realizado individualmente ou em duplas, de forma assíncrona
- Disponibilizado para download nesta página até xxxxx
- Prazo de entrega até xxxxxx
- Arquivo entregue exclusivamente por email em formato pdf
- O arquivo deve ser identificado com nomes e matrículas dos autores e nomeado de acordo com o exemplo:

MSPQ_T01_20241_P1_yyyymmdd_matriculasonumeros.pdf
- Não serão aceitos links para repositórios em nuvem
- Documento redigido de acordo com as *instruções para elaboração de avaliações extraclasse*, descritas neste documento
- Documento redigido sobre um dos *templates* disponíveis para download:

https://github.com/aumpierre-unb/MSPQ0120241/raw/main/template_MSPQ.doc

https://github.com/aumpierre-unb/MSPQ0120241/raw/main/template_MSPQ.docx

https://github.com/aumpierre-unb/MSPQ0120241/raw/main/template_MSPQ.odt

Orientações para o trabalho *HW*₂:

- Realizado individualmente, de forma síncrona
- Realizado com consulta ao acervo de rotinas e modelos de simulação
- Realizado sem consulta *online*
- Prazo de entrega de uma hora
- As questões serão baseadas no conteúdo desenvolvido em aula
- Arquivos com as respostas entregues em memória *flash*
- Os arquivos devem ser identificado com nome e matrícula do autor e nomeados de acordo com o exemplo:

MSPQ_T01_20241_P2_yyyymmdd_matriculasonumeros_Q1

Bibliografia

Bibliografia básica

- Luyben, W. L. *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*, McGraw-Hill, **1990**.
- Thomas F. Edgar, David M. Himmelblau, Leon S. Lasdon *Optimization of Chemical Processes*, 2nd edition, McGraw-Hill, **2001**.
- Rice, R. R.; Do, D. D. *Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers*, John Wiley & Sons, **1995**.

Bibliografia complementar

- D. Green, R. Perry *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, 8th edition, McGraw-Hill, **2008**.
- Bequette, B. W. *Process Dynamics. Modeling, Analysis, and Simulation*, Prentice Hall, **1998**.
- Paulo Laranjeira e José Carlos Pinto, *Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*, E-papers, **2001**.
- W. McCabe, J. Smith, P. Harriott *Unit Operations of Chemical Engineering*, 7th edition, McGraw-Hill, **2005**.
- Kern, Donald Quentin *Process Heat Transfer*, McGraw-Hill, **1950**.
- R. Sinnott y G. Towler *Diseño en Ingeniería Química*, 5th edition, Reverté, **2012**.
- Fogler, S. H. *Essentials of Chemical Reaction Engineering*, Prentice Hall, **2011**.
- Levenspiel, O. *Chemical Reaction Engineering*, John Wiley & Sons, **1998**.
- Sandler, S. I. *Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics*, 4th edition, Wiley, **2006**.

Instruções para Redação dos Trabalhos Extraclasse

Critérios adicionais de avaliação

Além *observância às orientações e adequação das respostas*, como descrito neste documento, a avaliação de trabalhos extraclasse ainda considera os seguintes quesitos:

- Fidelidade ao *template*
- Originalidade da redação
- Pontualidade de entrega
- Observação à norma culta da língua portuguesa
- Observação às normas da IUPAC para expressão de equações químicas
- Clareza e adequação de figuras, esquemas, tabelas, equações matemáticas

Orientações gerais

- Escreva seu texto sobre o template sem nenhuma edição de fontes, parágrafos, margens, layout, tabuações, cores, etc.
- Todas as variáveis utilizadas devem ser descritas adequadamente no texto e todas (incluindo as letras gregas) as variáveis devem ser apresentadas em *itálico*.
- Não utilize nenhuma forma de destaque (como negrito, *itálico*, sublinhado, realce etc) para o corpo de texto (exceto para representação de variáveis, que devem ser escritas em *itálico*).
- O documento deve ser integralmente em preto.
- Não utilize planos de fundo.
- Figuras, esquemas e tabelas devem ser todos referenciados no texto antes de sua apresentação.
- A adequação à normas diferentes das aqui dispostas significam inadequação a estas normas.
- A transcrição dos códigos usados não será considerada parte da resposta em nenhuma hipótese.

Orientações para apresentação de gráficos e tabelas

- A clareza dos dados apresentados nas figuras e tabelas é de responsabilidade do autor.
- Gráficos devem ser apresentados como figuras.
- Os eixos dos gráficos devem ser corretamente nomeados, as escalas devem ser adequadas para cada caso, e as legendas devem ser apresentadas no caption da figura ou na área do gráfico.
- Todas as figuras e tabelas devem ser numeradas e referenciadas no texto.
- Traços e símbolos em figuras podem ser utilizados diferentes cores/padrões, desde que suficientemente diferentes entre si e claramente identificados em seus respectivos *captions*.

Copyright © 2024 Alexandre Umpierre

<https://aumpierre-unb.github.io/MSPQ0120241/>

 <https://aumpierre-unb.github.io/MSPQ0120241/>