

# Modelagem e Simulação de Processos Químicos - IQD0016 - Turma T01

---

Universidade de Brasília - Instituto de Química

## Plano de Ensino

### Professor

Alexandre Umpierre

IQD BT 86/5

[aumpierre@unb.br](mailto:aumpierre@unb.br)

### Período letivo

2024/1

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

### Horário e local das aulas

4M34, BSAS B2 16/9

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 um trabalho  $HW_1$  e duas provas,  $P_1$  e  $P_2$ . A prova  $P_1$  versará sobre modelagem e a prova  $P_2$  versará sobre simulação. O trabalho  $HW_1$  versará sobre modelagem e simulação 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  $P_1$  e  $P_2$  e do trabalho  $HW_1$ .

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.

A avaliação substitutiva, se cabível, será aplicada com os mesmos critérios e regras da avaliação a ser substituída.

## Datas das avaliações

- $P_1$  - 08/05/2024
- $P_2$  - 28/06/2024
- $HW_1$  - Disponibilizado na página da disciplina até às 23h59 de 30/04, entregue até às 23h59 de 03/07
- Avaliação substitutiva - 12/07/2024

## 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 $HW_1$ :

- Realizados individualmente ou em duplas, de forma assíncrona
- Pode ser realizado com auxílio de quaisquer simuladores e rotinas de programação
- Disponibilizado para download nesta página
- O arquivo de resolução deve ser entregue exclusivamente por email em formato pdf
- O arquivo de resolução deve ser identificado com nomes e matrículas dos autores e nomeado de acordo com o exemplo:

*MSPQ\_T01\_20241\_HW1\_yyyymmdd\_matriculasnumeros.pdf*

- Não serão aceitos links para repositórios em nuvem
- O arquivo de resolução deve ser redigido de acordo com as *instruções para elaboração de avaliações extraclasse*, descritas neste documento
- O arquivo de resolução deve ser 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.doc)

[https://github.com/aumpierre-unb/MSPQ0120241/raw/main/template\\_MSPQ.docx](https://github.com/aumpierre-unb/MSPQ0120241/raw/main/template_MSPQ.docx)

[https://github.com/aumpierre-unb/MSPQ0120241/raw/main/template\\_MSPQ.odt](https://github.com/aumpierre-unb/MSPQ0120241/raw/main/template_MSPQ.odt)

### **\*\*Orientações para a prova $P_1$ :**

- Realizada individualmente, de forma síncrona
- Realizado sem qualquer forma de consulta
- Prazo de entrega de uma hora
- As questões serão de escolha simples ou múltipla ou discursivas

### **\*\*Orientações para a prova $P_2$ :**

- Realizada individualmente, de forma síncrona
- Deve ser realizada sobre o ambiente de simulação EMSO
- Realizada com suporte dos computadores da sala de aula, exclusivamente
- Realizada com consulta ao acervo pessoal de rotinas e modelos de simulação, exclusivamente
- Prazo de entrega de uma hora
- 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, tabuções, 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/>

