

Simulació i optimització de processos químics

Codi	Tipus	Curs/Semestre	Crèdits
20626	Obligatòria Semestral	4 / 2	6

Objectius

Competències específiques

Coneixements

La simulació de processos és una eina molt important a l'hora d'estudiar i predir el comportament dels diferents sistemes que habitualment es presenten a l'enginyeria química i a moltes altres disciplines científiques.

L'alumne ha de poder aplicar amb criteri les eines bàsiques de la modelització i simulació de processos als sistemes d'enginyeria química.

Habilitats

L'alumne ha de ser capaç de:

- Deduir les equacions de models que descriuen el comportament de sistemes habituals a l'enginyeria química.
- Dominar els mètodes matemàtics necessaris per:
 - simular el comportament d'aquests sistemes.
 - ajustar un model matemàtic a dades experimentals utilitzant tècniques d'optimització.
- Dominar l'entorn de programació Matlab per a poder aplicar pràcticament la simulació de models matemàtics i l'ajust de models a dades experimentals.
- Aplicar les nocions bàsiques de disseny d'experiments i de bondat d'ajust.

Competències genèriques

Capacitats prèvies

Es requereix una bona base d'Enginyeria Química: balanços de materia i energia, disseny de reactors i operacions de separació.

S'han de conèixer mètodes numèrics per a la resolució de problemes d'enginyeria química.

És important conèixer la programació amb Matlab.

Continguts

1. Introducció a la simulació	
-------------------------------	--

Esquema general del procés de simulació

2. Modelització de sistemes a enginyeria química

- 2.1. Models de sistemes
- 2.2. Fonaments de modelització en enginyeria química
- 2.3. Exemples de models matemàtics a sistemes d'enginyeria química

3. Simulació de sistemes d'enginyeria química

- 3.1. Eines matemàtiques bàsiques
- 3.2. Sistemes d'enginyeria química amb equacions diferencials ordinàries
- 3.3. Sistemes d'enginyeria química amb equacions diferencials amb condicions de contorn

4. Optimització en enginyeria química

- Introducció. Optimització analítica
- 4.1. Mètodes matemàtics d'optimització de funcions
 - 4.2. Determinació de paràmetres de models matemàtics
 - 4.3. Anàlisi de sensibilitat de paràmetres de models

5. Disseny d'experiments i disseny en presència d'incertesa

- 5.1. Introducció
- 5.2. Models lineals
- ANOVA

Metodologia docent

A les classes de teoria s'introdueixen breument els conceptes teòrics que els alumnes hauran de treballar. S'encomanen petites tasques a desenvolupar per l'estudiant durant la classe. Part dels continguts es treballaran a les classes de teoria a l'ordinador.

S'utilitza el Campus Virtual per donar els materials de teoria i problemes, així com per entregar els problemes i treballs demanats.

Classes de problemes a l'ordinador. Se selecciona una sèrie d'exercicis de la col·lecció de cada tema que els alumnes hauran de solucionar i entregar.

Teoria: dilluns de 11:00 a 12:00, dijous de 13:00 a 14:00. Divendres de 9:00 a 11:00 cada dues setmanes.

Problemes a l'aula d'informàtica Lab-1 i Lab-2: divendres de 9:00 a 11:00 cada dues setmanes.

Reserves aules:

DV 20/02/2009 09:00-11:00 LII1-2

Classe Problemes

DV 27/02/2009 09:00-11:00 LII1-2	Teoria
DV 06/03/2009 09:00-11:00 LII1-2	Classe Problemes
DV 13/03/2009 09:00-11:00 LII1-2	Teoria
DV 20/03/2009 09:00-11:00 LII1-2	Classe Problemes
DV 27/03/2009 09:00-11:00 LII1-2	Teoria
DV 03/04/2009 09:00-11:00 LII1-2	Classe Problemes
DX 15/04/2009 15:00-17:00 LII2-3	Classe extra repas
DV 17/04/2009 09:00-11:00 LII1-2	Teoria
DV 24/04/2009 09:00-11:00 LII1-2	Classe Problemes
DX 29/04/2009 15:00-17:00 LII2-3	Classe extra repas
DV 08/05/2009 09:00-11:00 LII1-2	Teoria
DX 13/05/2009 15:00-17:00 LII2-3	Classe extra repas
DV 15/05/2009 09:00-11:00 LII1-2	Classe Problemes
DV 22/05/2009 09:00-11:00 LII1-2	Teoria
DX 27/05/2009 15:00-17:00 LII2-3	Classe extra repas
DV 29/05/2009 09:00-11:00 LII1-2	Classe Problemes

Avaluació

1a convocatòria (febrer/juny)		2a convocatòria (juliol/setembre)
Avaluació en grups	Avaluació individual	
No hi ha.	La nota final es calcula amb els següents percentatges: Modelització de sistemes: 10% Problemes entregats: 15 % Treballs de modelització: 35 % Exàmen final, teoria més problemes: 40 %. La nota de l'exàmen ha de ser ≥ 4.0 per fer mitjana. A l'examen final es requereix una nota de teoria ≥ 4.0 per fer mitja amb els problemes. En cas de no presentar-se a l'examen, la qualificació és "No presentat".	Es matenen les notes d'avaluació continuada de la 1a convocatòria. Es repeteix l'examen, 40 % de la nota final.

Bibliografia bàsica

B.W. Bequette. Process Dynamics. Modeling Analysis and Simulation. Prentice-Hall. International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences.
 G. Lindfield and J. Penny. Numerical Methods Using MATLAB, 2e. Prentice Hall, 2000. ISBN0-13-012641-1
 W.L. Luyben. Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers, 2nd ed. McGraw-Hill, New York, 1990.

MATLAB

<http://www.mathworks.es/>

The MathWorks MATLAB® 7 y Simulink® 6, (Release 14).

Versión estudiante: MATLAB & Simulink Student Version Release 14.

Guía de usuario. Versión 7 (R14). Prentice-Hall. Madrid.

http://www.mathworks.es/academia/student_version/learnmatlab.pdf

Bibliografia complementària

Optimització

G. V. Reklaitis, A. Ravindran, K. M. Ragsdell. Engineering optimization methods and applications. New York [etc.] John Wiley cop. 1983. ISBN: 0-471-05579-4

T.F. Edgar and D.M. Himmelblau. Optimization of Chemical Processes. McGraw- Hill, New York, 1988.

Disseny d'experiments

G.E.P. Box, W.G. Hunter, J.S. Hunter. Estadística para investigadores. Reverté, Barcelona, 1988.

D.C. Montgomery. Design and Analysis of Experiments. John Wiley & Sons, New Cork, 1991.

Enllaços

[Web Matlab](http://www.mathworks.es/)

<http://www.mathworks.es/>