

ASSIGNATURA: Simulació i optimització de processos químics

Codi: 20626

Tipus Assign.: Ob
Crèdits Totals: 6.0

Curs: 4^t
Teor.: 4.5

Quad.: 8^e
Prob.: 1.5

Departament: Enginyeria Química

Professors: Juan Baeza QC/1145 JuanAntonio.Baeza@uab.es
 Albert Guisasola QC/1109 Albert.Guisasola@uab.es

Campus Virtual: <https://www.interactiva.uab.es/cv/>

Objectius de l'assignatura:

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'objectiu general d'aquesta assignatura és que l'alumne sigui capaç d'aplicar amb criteri les eines bàsiques de la modelització i simulació de processos als sistemes d'enginyeria química. Específicament, l'alumne ha de ser capaç de:

- Deducir 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.

Assignatures que es recomana haver cursat prèviament:

Aplicacions de la informàtica a problemes d'enginyeria química, Mètodes numèrics
També es requereix una forta base d'Enginyeria Química.

Programa:

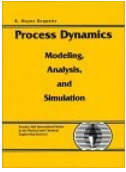
1. Introducció a la simulació
2. Modelització de sistemes
 - 2.1. Models de sistemes
 - 2.2. Fonaments de modelització en enginyeria química
 - 2.3. Exemples de models matemàtics a sistemes d'enginyeria química
3. Mètodes matemàtics per a la simulació en enginyeria química
 - 3.1. Sistemes d'equacions lineals
 - 3.2. Arrels d'equacions no lineals
 - 3.3. Equacions diferencials ordinàries
 - 3.4. Equacions diferencials amb condicions de contorn
4. Mètodes matemàtics per a l'optimització en enginyeria química
 - 4.1. Introducció
 - 4.2. Mètodes matemàtics d'optimització de funcions
 - 4.3. Determinació de paràmetres de models matemàtics
5. Disseny d'experiments i disseny en presència d'incertesa
 - 5.1. Introducció
 - 5.2. Models lineals en els paràmetres
 - 5.3. Localització dels graus de llibertat
 - 5.4. Localització dels experiments

Sistema d'avaluació:

La nota final de l'assignatura es calcula amb les següents notes parcials:

Examen final (teoria més problemes):	85 %
Problemes entregats:	10 %
Examen modelització de sistemes:	5 %

Bibliografía:



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. ISBN 0-13-012641-1



W.L. Luyben.

Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers, 2nd ed.

McGraw-Hill, New York, 1990.

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.

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