

# ASSIGNATURA: Simulació i optimització de processos químics

Codi: 20626

---

Tipus Assign.: Ob  
Crèdits Totals: 6.0

Curs: 4<sup>t</sup>  
Teor.: 4.5

Quad.: 8<sup>e</sup>  
Prob.: 1.5

Departament: Enginyeria Química

Professors:            Juan Baeza            QC/1145            [JuanAntonio.Baeza@uab.es](mailto:JuanAntonio.Baeza@uab.es)  
                              Albert Guisasola    QC/1109            [Albert.Guisasola@uab.es](mailto: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

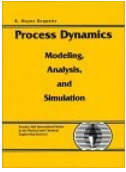
## **Sistema d'avaluació:**

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, 2<sup>nd</sup> 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<sup>®</sup> 7 y Simulink<sup>®</sup> 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](http://www.mathworks.es/academia/student_version/learnmatlab.pdf)