

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:

- 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.

Competències genèriques

Capacitats prèvies

Es requereix una bona base d'Enginyeria Química: balanços de matèria 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	
.	

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. Eines bàsiques	
3.2. Equacions diferencials ordinàries	
3.3. Equacions diferencials amb condicions de contorn	
4. Mètodes matemàtics per a l'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

L'eina principal utilitzada són les classes de teoria. S'introdueixen de forma ordenada i concisa els conceptes teòrics necessaris pel posterior desenvolupament pràctic. S'encomanen petites tasques a desenvolupar per l'estudiant durant la classe.

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

Classes de problemes a l'ordinador. Se selecciona una sèrie de problemes de la col·lecció de cada tema. Es treballa amb els arxius de Matlab descarregant-los del Campus Virtual.

Teoria: dilluns de 11:00 a 12:00, dimarts de 10:00 a 11:00 i dijous de 13:00 a 14:00.

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

22/02/2008	08:30-11:00	LII1-2	Classe Problemes
07/03/2008	08:30-11:00	LII1-2	Classe Problemes
28/03/2008	08:30-11:00	LII1-2	Classe Problemes
11/04/2008	08:30-11:00	LII1-2	Classe Problemes
25/04/2008	08:30-11:00	LII1-2	Classe Problemes
28/04/2008	15:00-17:00	LII1-2	Classe extra repas
05/05/2008	15:00-17:00	LII1-2	Classe extra repas
16/05/2008	08:30-11:00	LII1-2	Classe Problemes
19/05/2008	15:00-17:00	LII1-2	Classe extra repas
26/05/2008	15:00-17:00	LII1-2	Classe extra repas
30/05/2008	08:30-11:00	LII1-2	Classe Problemes
20/06/2008	10:30-15:30	LII1-3	Examen

Avaluació

1a convocatòria (febrer/juny)		2a convocatòria (juliol/setembre)
Avaluació en grups	Avaluació individual	
No hi ha.	Part de la nota s'obté obligatoriament d'activitats d'avaluació continuada: Examen modelització de sistemes: 10 % Problemes entregats: 10 % Treball de modelització: 30 % Hi ha exàmen final, teoria més problemes: 50 %. 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, 50 % 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. ISBN 0-13-012641-1

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. Edgard 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/>