

Dinàmica de Fluids Computacional, Modelització i Optimització de Processos 2015/2016

Codi: 43325

Crèdits: 9

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
4314579 Enginyeria Biològica i Ambiental	OB	1	A

Professor de contacte

Nom: Juan Antonio Baeza Labat

Correu electrònic: JuanAntonio.Baeza@uab.cat

Utilització de llengües

Llengua vehicular majoritària: espanyol (spa)

Equip docent

Carles de Mas Rocabayera

Albert Guisasola Canudas

Prerequisits

Balanços de matèria i energia.

Fenòmens de transport.

Cinètica química i biològica.

Calcul diferencial. Equacions diferencials ordinàries. Equacions diferencials amb derivades parcials.

Mètodes numèrics.

Llenguatges de programació. Matlab.

Objectius

L'objectiu principal és doble, per una banda l'aplicació, amb criteri, d'eines de modelització, simulació i optimització de processos químics, biotecnològics i ambientals i per l'altra banda treballar les bases de la Dinàmica de Fluids Computacional.

Els objectius específics de l'assignatura són:

- Formular models matemàtics per a diferents processos a partir de balanços en estat no estacionari i altres equacions addicionals.
- Resoldre numèricament models matemàtics amb programes de simulació i analitzar els resultats.
- Utilitzar mètodes per a l'optimització matemàtica univariable i multivariable.
- Ajustar models matemàtics. Analitzar la sensibilitat dels paràmetres del model.
- Aplicar les nocions bàsiques de disseny d'experiments.
- Desenvolupar programes de càlcul, basats en els principis fonamentals dels Fenòmens de Transport i els Mètodes Numèrics adequats.
- Resoldre problemes de Fenòmens de Transport de manera que l'alumne pugui comprendre com estan estructurats i quins són els principis de funcionament dels paquets comercials de CFD.

Competències

- Aplicar la metodologia de recerca, tècniques i recursos específics per investigar i produir resultats innovadors en l'àmbit de l'enginyeria biològica i ambiental

- Integrar els coneixements cinètics, termodinàmics, de fenòmens de transport i de mètodes numèrics per analitzar, dissenyar, modelitzar i optimitzar diferents tipus de reactors biològics i la seva estratègia d'operació.
- Que els estudiants sàpiguin aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seva àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, tot i ser incompleta o limitada, inclogui reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants tinguin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant, en gran manera, amb treball autònom a autodirigit.
- Tenir coneixements que aportin la base o l'oportunitat de ser originals en el desenvolupament o l'aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Utilitzar les eines informàtiques per complementar els coneixements en l'àmbit de l'enginyeria biològica i ambiental

Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar l'estructura i el funcionament dels paquets comercials de CFD
2. Aplicar la metodologia de recerca, tècniques i recursos específics per investigar i produir resultats innovadors en l'àmbit de l'enginyeria biològica i ambiental
3. Aplicar les equacions de canvi dels FT a la resolució de problemes d'enginyeria per establir el model del sistema.
4. Construir models matemàtics de processos químics en estat estacionari i no estacionari
5. Definir, plantejar i resoldre problemes d'optimització tecnicoeconòmica.
6. Desenvolupar programes de càlcul per resoldre les equacions dels FT en problemes concrets.
7. Interpretar les equacions de canvi dels fenòmens de transport (FT) des dels principis físics que les regeixen.
8. Que els estudiants sàpiguin aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seva àrea d'estudi.
9. Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, tot i ser incompleta o limitada, inclogui reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
10. Que els estudiants tinguin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant, en gran manera, amb treball autònom a autodirigit.
11. Tenir coneixements que aportin la base o l'oportunitat de ser originals en el desenvolupament o l'aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
12. Utilitzar i programar els mètodes numèrics adequats per resoldre els models.
13. Utilitzar la simulació per avaluar i predir el comportament de sistemes.
14. Utilitzar les eines informàtiques per complementar els coneixements en l'àmbit de l'enginyeria biològica i ambiental

Continguts

L'assignatura s'estructura en dos mòduls:

Modelització i optimització de processos

- Modelització de processos químics, biològics i ambientals
- Simulació de processos amb equacions diferencials ordinàries
- Simulació de sistemes amb equacions diferencials amb condicions de contorn
- Simulació de sistemes amb equacions diferencials amb derivades parcials
- Mètodes d'optimització univariable, multivariable i amb restriccions
- Ajust de models: determinació de paràmetres i anàlisi de sensibilitat
- Disseny d'experiments

Fluidodinàmica computacional

- Introducció

- La geometria i la malla
- L'integrador
- El visualitzador
- Estudi de casos

Metodologia

El curs es desenvoluparà en classes de teoria i classes teòrico-pràctiques. A més durant el curs s'hauran de resoldre i presentar diferents casos proposats que es realitzaran principalment fora de l'horari de les classes.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes teòriques i teórico-pràctiques	56	2,24	1, 3, 4, 5, 7, 11, 12, 13
Tipus: Supervisades			
Plantejament de la resolució de casos proposats	14	0,56	8, 9, 10, 11
Tipus: Autònomes			
Estudi, recerca d'informació i resolució dels casos proposats.	155	6,2	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14

Avaluació

La nota final serà el promig de la nota dels dos mòduls de l'assignatura.

La nota de cada mòdul ha de ser superior o igual a 5/10 per poder fer promig.

En cas de que un dels mòduls no arribi a 5/10, la nota final màxima de l'assignatura serà 4/10 i s'haurà de repetir el mòdul suspès al curs següent.

La nota del mòdul de CFD es calcularà amb les qüestions plantejades durant les classes (30%) i amb treballs de resolució de casos (70%). La nota mínima dels treballs haurà de ser del 50% de la seva puntuació total.

La nota del mòdul de Simulació i Optimització es calcularà amb dos problemes per fer fora de classe (20%), dos problemes d'examen (30%) i un treball de modelització d'un sistema real (50%).

La no presència a classe quan es realitzin proves d'avaluació és un zero de l'activitat, sense possibilitat de recuperació.

Sense perjudici d'altres mesures disciplinàries que s'estimin oportunes, i d'acord amb la normativa acadèmica vigent, es qualificaran amb un zero les irregularitats comeses per l'estudiant que puguin conduir a una variació de la qualificació d'un acte d'avaluació. Per tant, copiar o deixar copiar una pràctica o qualsevol altra activitat d'avaluació implicarà suspendre-la amb un zero, i si és necessari superar-la per aprovar, tota l'assignatura quedarà suspesa. No seran recuperables les activitats d'avaluació qualificades d'aquesta forma i per aquest procediment, i per tant l'assignatura serà suspesa directament sense oportunitat de recuperar-la en el mateix curs acadèmic.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
CFD. Qüestions plantejades durant les classes	15%	0	0	1, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13
CFD. Resolució de casos d'estudi	35%	0	0	1, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13

SiO. Problemes a realitzar fora de classe	10%	0	0	2, 4, 5, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14
SiO. Problemes d'examen	15%	0	0	4, 5, 8, 9, 10, 11, 12, 13
SiO. Treball de modelització i simulació d'un sistema real	25%	0	0	2, 4, 5, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14

Bibliografia

- J.D. Anderson. Computational Fluid Dynamics. The basics with Applications. McGraw-Hill, Inc., 1995.
- H.K. Versteeg, W. Malalasekera. An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method. Prentice Hall, 2nd ed., 2007.
- J. Tu, G.H. Yeoh, C. Liu. Computational Fluid Dynamics. A practical Approach. Elsevier, 2nd ed., 2013.
- B.W. Bequette. Process Dynamics. Modeling Analysis and Simulation. Prentice-Hall. International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences, 1998.
- W.L. Luyben. Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers, 2nd ed. McGraw-Hill, New York, 1990.
- MATLAB. The MathWorks MATLAB® <http://es.mathworks.com/>
- Versión estudiante: MATLAB & Simulink Student Version.
<https://es.mathworks.com/programs/nrd/buy-matlab-student.html>