Universitat Autònoma de Barcelona

2023/2024

Dinàmica de Fluids Computacional, Modelització i Optimització de Processos

Codi: 43325
Crèdits: 9

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

Professor/a de contacte

Nom: Albert Guisasola Canudas

Correu electrònic: albert.guisasola@uab.cat

Idiomes dels grups

Podeu accedir-hi des d'aquest enllaç. Per consultar l'idioma us caldrà introduir el CODI de l'assignatura. Tingueu en compte que la informació és provisional fins a 30 de novembre de 2023.

Equip docent

Albert Guisasola Canudas

Equip docent extern a la UAB

Martí Cortada García

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.

Coneixements bàsics de dibuix tècnic per ordinador amb software tipus AutoCAD

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, principalment l'ANSYS.

Resultats d'aprenentatge

- CA09 (Competència) Integrar els coneixements cinètics, termodinàmics, de fenòmens de transport i de mètodes numèrics per a analitzar, dissenyar, modelitzar i optimitzar diferents tipus de reactors i la seva estratègia d'operació.
- CA09 (Competència) Integrar els coneixements cinètics, termodinàmics, de fenòmens de transport i de mètodes numèrics per a analitzar, dissenyar, modelitzar i optimitzar diferents tipus de reactors i la seva estratègia d'operació.
- CA10 (Competència) Formular i resoldre problemes d'optimització matemàtica univariable, multivariable i tecnicoeconòmica.
- KA06 (Coneixement) Reconèixer l'estructura i el funcionament dels paquets comercials de Computational Fluid Dynamics (CFD).
- KA07 (Coneixement) Definir les nocions bàsiques de disseny d'experiments.
- SA06 (Habilitat) Deduir les habilitats d'aprenentatge necessàries per a continuar la formació d'una manera autodirigida o autònoma.
- SA06 (Habilitat) Deduir les habilitats d'aprenentatge necessàries per a continuar la formació d'una manera autodirigida o autònoma.
- SA07 (Habilitat) Construir models matemàtics de processos en estat estacionari i en estat no estacionari usant els mètodes numèrics adequats per a la resolució dels models.
- SA08 (Habilitat) Deduir les equacions de canvi dels fenòmens de transport a la resolució de problemes d'enginyeria per a establir el model del sistema.
- SA09 (Habilitat) Utilitzar les eines informàtiques pertinents per a complementar els coneixements en l'àmbit de l'enginyeria biològica i l'enginyeria ambiental.
- SA09 (Habilitat) Utilitzar les eines informàtiques pertinents per a complementar els coneixements en l'àmbit de l'enginyeria biològica i l'enginyeria 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.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes teòriques i teorico-pràctiques	56	2,24	CA09, CA10, KA06, KA07, SA07, SA08, SA09
Tipus: Supervisades			
Plantejament de la resolució de casos proposats	14	0,56	CA09, CA10, KA06, SA06, SA07, SA08, SA09
Tipus: Autònomes			
Estudi, recerca d'informació i resolució dels casos propossats.	89	3,56	CA09, KA06, KA07, SA06, SA08, SA09

Avaluació

a) Procés i activitats d'avaluació programades

L'assignatura està dividida en dos mòduls independents: 1) Dinàmica de Fluids Computacional (CFD) i 2) Modelització i Optimització de Processos (MOP).
A continuació es detallen les activitats d'avaluació de cada mòdul de l'assignatura amb el seu percentatge de pes sobre la qualificació final:

Modelització i Optimització de Processos
- Activitat 1 (15 %). Entregues de problemes.
- Activitat 2 (60 %). Examen parcial.
- Activitat 3 (25 %). Treball/s de modelització sobre sistemes reals.

Dinàmica de Fluids Computacional

- Activitat 1 (5%). Treball CFD1.

- Activitat 2 (10%). Treball CFD2.

- Activitat 3 (15%). Treball CFD3.

- Activitat 4 (70%). Examen.

La nota final és el promig de la nota dels dos mòduls. La nota de cada mòdul ha de ser superior o igual a 4.5/10 per poder fer promig. Cal treure un mínim de 3.0 en cadascú dels dos examens per tal de fer promig. La no presència a classe quan es realitzin proves d'avaluació és un zero de l'activitat, sense possibilitat de recuperació.

b) Programació d'activitats d'avaluació

La calendarització de les activitats d'avaluació es donarà el primer dia de l'assignatura i es farà pública a través del Campus Virtual.

c) Procés de recuperació

El/la estudiant es pot presentar a la recuperació de cada mòdul sempre que s'hagi presentat a un conjunt d'activitats que representin un mínim de dues terceres parts de la qualificació total del mòdul. D'aquests, es podran presentar a la recuperació aquells estudiants que tinguin com a mitjana de toteslesactivitats del mòdul una qualificació superior a 3.0.
El procès derecuperació de cada mòdul consistirà en un examen amb tots els continguts del mòdul. La qualificació màxima que es podrà obtenir utilitzant aquest procediment serà d'un 6.0 a cada mòdul recuperat.

d) Procediment de revisió de les qualificacions

Per a cada activitat d'avaluació, s'indicarà un lloc, data i hora de revisió en la que es podrà revisar l'activitat amb el professor. En aquest context, es podran fer reclamacions sobre la nota de l'activitat, que seran avaluades pel professorat responsable de l'assignatura. Si lla persona interessada no es presenta a aquesta revisió, no es revisarà posteriorment aquesta activitat.

e) Qualificacions

En cas de que un dels mòduls no arribi a 4.5/10, la nota final màxima de l'assignatura serà 4/10 i s'haurà de repetir el mòdul suspès al curs següent.

Matricules d'honor. Atorgar una qualificació de matrícula d'honor és decisió del professorat responsable de l'assignatura. La normativa de la UAB indica que les MH només es podran concedir a qui hagi obtingut una qualificació final igual o superior a 9.00. Es pot atorgar fins a un 5% de MH del total d'alumnat matriculat.

Es considerarà no avaluable (NA) quan un/a estudiant si no s'ha presentat en un conjunt d'activitats el pes de les quals equivalgui a un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura.

f) Irregularitatst, còpia i plagi

Sense perjudici d'altres mesures disciplinàries que s'estimin oportunes, es qualificaran amb un zero les irregularitats comeses per l'estudiant que puguin conduir a una variació de la qualificaciód'un acte d'avaluació. Per tant, la còpia, el plagi, l'engany, deixar copiar, etc. en qualsevol de les activitats d'avaluació implicarà suspendre-la amb un zero.

h) Avaluació dels estudiants repetidors

L'únic canvi en l'avaluació de l'assignatura de l'alumnat repetidors és la possibilitat de mantenir les qualificacions d'un mòdul aprovat al curs anterior. Aquesta opció s'haurà de comunicar per correu electrònic al professor responsable, com a molt tard 15 dies després de l'inici de les classes.

AVALUACIÓ ÚNICA
Aquesta assignatura no ofereix avaluació única

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
CFD. Examen	35	3	0,12	CA09, KA06, KA07, SA09
CFD. Resolució de casos d'estudi	15	30	1,2	CA09, KA06, KA07, SA06, SA09
MOP. Entrega de problemes	7.5	10	0,4	CA09, CA10, KA07, SA06, SA07, SA08, SA09
MOP. Examen	30	3	0,12	CA09, CA10, KA07, SA06, SA07, SA08, SA09
MOP. Treball/s de modelització i simulació de sistemes reals	12.5	20	0,8	CA09, CA10, KA07, SA06, SA07, SA08, SA09

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.

- S.V. Patankar, "Numerical Heat transfer and Fluid Flow". Hemisphere Pub., 1980.

- J. Tu, G.H. Yeoh, C. Liu. Computational Fluid Dynamics. A practical Approach. Elsevier, 2nd ed., 2013

- Jiyuan Tu, Guan-Heng Yeoh and Chaoqun Liu. Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach, 2008.

- R. Byron Bird, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot. Transport Phenomena, 2002.

- Blazek J. Computational Fluid Dynamics: Principles and applications, 2005.

- Ferziger J., Peric M. Computational Method for Fluid dynamics, 2020

- 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

- Yeong Koo Yeo;Yeong Koo Yeo. Chemical Engineering Computation with MATLAB® 2020

- Al-Malah K MATLAB Numerical Methods with Chemical Engineering Applications, 2013

Programari

Serà necessari un coneixement mínim de MATLAB. El mòdul de CFD es farà amb FLUENT.