



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA



Código Disciplina/Nome: EQE 038- Simulação e Otimização de Processos Químicos
Tipo: Disciplina Complementar de Escolha Condicionada
Carga Horária Teórica : 30 h Prática: 15 h
Cursos : Disciplina de Escolha Condicionada para os cursos de Engenharia Química, Engenharia de Alimentos e Engenharia de Bioprocessos.
Pré-requisito: Obrigatório: Recomendado: EQE 358: Métodos Numéricos Aplicados à Engenharia Química EQE 478: Modelagem e Dinâmica de Processos EQE 487: Controle e Instrumentação de Processos
Créditos:03
Objetivo: Apresentar os conceitos básicos e procedimentos para a utilização de simuladores de processos no projeto, simulação, controle e otimização de equipamentos e processos da indústria química.
Ementa: Revisão dos conceitos básicos de modelagem, simulação, controle e otimização de processos. Revisão de métodos numéricos usados pelos simuladores de processo. Arquitetura de simuladores de processos e técnicas de simulação. Apresentação dos simuladores utilizados na disciplina. Pacotes de propriedades termodinâmicas e definição de correntes materiais. Simulação de processos envolvendo os principais equipamentos da indústria química: bombas, compressores, válvulas, controladores, misturadores e divisores de correntes, tanques de armazenamento, vasos de expansão, trocadores de calor, reatores químicos, colunas de destilação e colunas de adsorção. Exemplos de projeto, otimização e controle de processos usando simuladores. Exemplos de estimação de parâmetros e reconciliação de dados usando simuladores de processo.
Conteúdo Programático: 1. Revisão dos conceitos básicos de modelagem matemática de processos. Revisão de métodos numéricos usados pelos simuladores de processo: métodos para a resolução de modelos estáticos, métodos para a resolução de modelos dinâmicos (4 h). 2. Revisão dos conceitos básicos de controle de processos e controle proporcional-integral-derivativo (PID) (2 h). 3. Revisão dos conceitos básicos de otimização: função objetivo, variáveis de decisão, restrições e região de busca. Otimização com restrição e otimização sem restrição (2 h). 4. Arquitetura de simuladores de processos e técnicas de simulação: Abordagem sequencial modular, abordagem sequencial simultânea e abordagem orientada por equações (1 h). 5. Apresentação dos simuladores de processos usados na disciplina: introdução,

descrição, ambientação e simulação de alguns exemplos (8 h).

6. Pacotes de propriedades termodinâmicas: adição de componentes à simulação, seleção do modelo termodinâmico e adição de correntes materiais (2 h).
7. Bombas, compressores, válvulas e tanques de armazenamento: definição do problema, construção da simulação, especificação das informações necessárias e verificação dos resultados (2 h).
8. Trocadores de calor: definição do problema, construção da simulação, especificação das informações necessárias e verificação dos resultados (2 h).
9. Vasos de expansão e equilíbrio termodinâmico: definição do problema, construção da simulação, especificação das informações necessárias e verificação dos resultados (2 h).
10. Reatores químicos (reator de conversão, reator de equilíbrio, reator CSTR e reator PFR): definição do problema, construção da simulação, especificação das informações necessárias e verificação dos resultados (3 h).
11. Colunas de destilação: Definição do problema, construção da simulação, especificação das informações necessárias e verificação dos resultados (3 h).
12. Colunas de adsorção: Definição do problema, construção da simulação, especificação das informações necessárias e verificação dos resultados (2 h).
13. Simulação de processos envolvendo sistema reação/separação (2 h).
14. Simulação de processos envolvendo sistemas com reciclos (2 h).
15. Otimização: definição das variáveis de otimização, da função objetivo e das restrições nos simuladores. Otimização de equipamentos e processos (3 h).
16. Estudo de casos com processos típicos da Engenharia Química e exemplos de estimação de parâmetros e reconciliação de dados usando simuladores de processo (5 h).

Bibliografia Recomendada (no mínimo 3)

1. EDGAR, T.F.; HIMMELBLAU, D.M.; LASDON, L.S. "Optimization of Chemical Processes", MacGraw-Hill, 2001.
2. BIEGLER, L.T. "Nonlinear Programming: Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Processes", SIAM, 2010.
3. SEBORG, D.E.; EDGAR, T.F.; MELLICHAMP, D.A.; DOYLE III, F.J. "Process Dynamics and Control", 3ª ed., John Wiley and Sons, 2011.
4. RICE, R.R.; DO, D.D. "Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers", 2ª ed., John Wiley & Sons, 2012.

Bibliografia Complementar (no mínimo 5)

1. LUYBEN, W.L. "Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers". Mc-Graw-Hill, 1990.
2. OGUNNAIKE, B.A.; RAY, W.H., "Process Dynamics, Modeling, and Control", Oxford Univ. Press, New York, 1994.
3. BEQUETTE, B.W. "Process Dynamics. Modeling, Analysis, and Simulation", Prentice Hall, 1998.
4. NOCEDAL, J.; WRIGHT, S.J. "Numerical Optimization" – Springer, 1999.
5. DOBRE, T. G.; MARCANO, J. G. S. "Chemical Engineering: Modelling, Simulation and Similitude", WILEY-VCH, 2007.
6. AspenONE V8.x Documentation.
7. EMSOManual, versão Academicbeta 0.10.x