



PROGRAMA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA:	Modelagem e Simulação de Processos Químicos (DEQ- 1709042)				
PRÉ-REQUISITO:	Fenômenos de Transporte III (1709006) e REATORES QUÍMICOS I (1709043)				
CARGA HORÁRIA: 60 horas				CRÉDITOS:	ANO
TEÓRICA 50,00 %	PRÁTICA 50,00 %	ESTÁGIO 0 %	TOTAL 100%	04	2018

EMENTA

Introdução à modelagem aplicada na engenharia química. Uma classificação Geral da modelagem matemática. Revisão e aplicações teóricas das leis fundamentais da engenharia química. Revisão aos conceitos fundamentais de programação. Modelagem e Simulação de Equações de Estado Cúbicas. Modelagem e Simulação do equilíbrio líquido-vapor e líquido-líquido. Modelagem e Simulação de Reatores Químicos Isotérmicos e Não-Isotérmicos. Modelagem e Simulação de processos de separação. Introdução às técnicas estatísticas e de identificação de sistemas aplicadas à engenharia química. Introdução às técnicas estatísticas e de identificação de sistemas aplicadas à engenharia química. Simulação de Unidades Integradas

OBJETIVOS

Habilitar o aluno à modelagem, simulação e análise de estacionária e transiente de equipamentos e processos químicos industriais.

METODOLOGIA

Aulas expositivas;
Quadro e recursos multimídia;
Softwares de simulação e controle (Matlab®, Simulink® e Aspen Plus e Dynamics™);
Resolução de exercícios;

AVALIAÇÃO

Os alunos serão avaliados mediante a aplicação de exames teóricos, seminários aplicados e trabalhos práticos de simulação, além da avaliação continuada, através de atividades e participação em sala e extra sala.



CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- 1. Introdução à modelagem aplicada na engenharia química:** modelagem fenomenológica; modelagem empírica; modelagem mista ou por analogia (caixa cinza); uma introdução à simulação de processos; aplicações da modelagem.
- 2. Uma classificação Geral da modelagem matemática:** causais e não causais; Estáticos e dinâmicos; Estocásticos e determinísticos; Paramétricos concentrados e distribuídos; Lineares e não lineares; Variantes e invariantes no tempo; discretos e contínuos; quanto aos números de entradas (SISO, SIMO, MISO e MIMO).
- 3. Revisão e aplicações teóricas das leis fundamentais da engenharia química:** Princípios de conservação de massa, energia (1ª e 2ª Lei) e momento; equações constitutivas; análise de graus de liberdades em processos químicos e bioquímicos industriais.
- 4. Revisão dos conceitos fundamentais de programação:** algoritmos, estruturas de fluxo e linguagens de programação (C++, Fortran, Matlab, VBA etc.) e recursos de *softwares*: Aspen Plus e Dynamics™, Hysis™.
- 5. Modelagem e Simulação de Equações de Estado Cúbicas:** modelo do gás ideal; Equação de van der Waals; Equação Redlich-Kwong; Soave-Redlich-Kwong; Peng-Robinson; análises das raízes das Equações cúbicas.
- 6. Modelagem e Simulação do equilíbrio líquido-vapor e líquido-líquido:** modelagem gama-phi; modelagem phi; graus de liberdade do ELV/ELL; cálculos da temperatura e da pressão de bolha; cálculos da temperatura e da pressão de orvalho; modelos de atividade (cálculo da energia de Gibbs livre em excesso).
- 7. Modelagem e Simulação da destilação Flash:** modelagem do flash binário e multicomponente; graus de liberdade; tipos de flash: vaporização, condensação, isotérmico, adiabático e não-adiabático; cálculo da carga térmica do flash; análise transiente do flash.
- 8. Modelagem e Simulação de Reatores Químicos Isotérmicos e Não-Isotérmicos:** reatores em batelada e semi-batelada, reatores contínuos de misturas e pistonado; análises de graus de liberdade; reações simples e múltiplas (em série, paralela e complexa); operação em regime estacionário e transiente.
- 9. Modelagem e Simulação de processos de separação:** destilação binária e multicomponentes; absorção e stripping; análise de graus de liberdade; simulação em regime estacionário e transiente.
- 10. Introdução às técnicas estatísticas e de identificação de sistemas aplicadas à engenharia química:** PLS, Box-Jenkins, Output Error, ARX, ARMAX, redes neurais artificiais; e lógica fuzzy.
- 11. Simulação de Unidades Integradas:** reatores contínuos em série; processos químicos com reciclos; dimensionamento da unidade; operação em regime transiente.



BIBLIOGRAFIA

- LUYBEN, W.L. *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*. Ed. McGraw-Hill International Editions. 2nd ed 1990.
- LUYBEN, W.L. *Plantwide Process Control*. McGraw-Hill Professional Publishing, July 31st 1998.
- LUYBEN, W. L. *Distillation design and control using Aspen simulation*. 2nd ed., Copyright by John Wiley & Sons, Inc. All rights reserved 2013.
- MORAIS JR, A.A. Notas de aulas da disciplina: Instrumentação e Controle de Processos Industriais. João Pessoa, Paraíba, UFPB, 2017.
- DAVIS, MARK E. *Numerical methods and modeling for chemical engineers*. Dover Publications; Reprint edition, November 20, 2013.
- Franks, R. G. E. *Modeling and Simulation in Chemical Engineering*. Wiley-Interscience; 1 edition, June 2, 1972.
- GILANI, H. G.; SAMPER, K. G.; and HAGHI, R. K. *Advanced process control And simulation For chemical engineers*. Apple Academic Press, 2013.
- Haykin, S. O. *Neural Networks and Learning Machines*. Prentice Hall; 3 edition. November 28, 2008.
- LUYBEN, W.L. *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*. Ed. McGraw-Hill International Editions. 2nd ed 1990.
- MORAIS JR, A.A. Notas de aulas da disciplina: Modelagem e Simulação de Processos Químicos. João Pessoa, Paraíba, UFPB, 2014.
- NUNES, G. C., MEDEIROS, J. L., ARAÚJO, O. Q. F. Modelagem e controle na produção de petróleo – aplicações em MATLAB. São Paulo: Blucher, 2010.
- YANG, W.Y.; CAO, W.; CHUNG, T. S.; AND MORRIS, J. *Applied numerical methods using MATLAB®*. John Wiley & Sons, 2005.
- RICE, R. G. AND V DUONG, D. D. *Applied mathematics and modeling for chemical engineers*. Rice, 2nd ed., OPA, 2002.
- T. EDGAR, T. AND HIMMELBLAU, D. M. *Optimization of Chemical Processes*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math; 2 edition, January 12, 2001.
- TSOUKALAS, L. H.; UHRIG, R. E.; AND ZADEH, L. A. *Fuzzy and Neural Approaches in Engineering*. Wiley-Interscience; 1 edition, February 5, 1997.