

|                          |                                 |                     |  |               |     |   |    |    |    |   |   |   |   |   |    |   |   |   |
|--------------------------|---------------------------------|---------------------|--|---------------|-----|---|----|----|----|---|---|---|---|---|----|---|---|---|
| Unidade Curricular       | Simulação de Processos Químicos | Área Científica     | Simulação, Controlo e Otimização de Processos Químicos |               |     |   |    |    |    |   |   |   |   |   |    |   |   |   |
| Mestrado em              | Engenharia Química              | Escola              | Escola Superior de Tecnologia e de Gestão de Bragança  |               |     |   |    |    |    |   |   |   |   |   |    |   |   |   |
| Ano Letivo               | 2022/2023                       | Ano Curricular      | 1  | Nível         | 2-1 |   |    |    |    |   |   |   |   |   |    |   |   |   |
| Tipo                     | Semestral                       | Semestre            | 2  | Créditos ECTS | 6.0 |   |    |    |    |   |   |   |   |   |    |   |   |   |
| Código                   |                                 | 6362-756-1204-00-22 |  |               |     |   |    |    |    |   |   |   |   |   |    |   |   |   |
| Horas totais de trabalho | 162                             | Horas de Contacto   | T  | 15            | TP  | - | PL | 45 | TC | - | S | - | E | - | OT | - | O | - |

T - Ensino Teórico; TP - Teórico Prático; PL - Prático e Laboratorial; TC - Trabalho de Campo; S - Seminário; E - Estágio; OT - Orientação Tutórica; O - Outra

Nome(s) do(s) docente(s) Hélder Teixeira Gomes

### Resultados da aprendizagem e competências

No fim da unidade curricular o aluno deve ser capaz de:

1. Interpretar dados de processos e reconhecer softwares utilizados na modelação e simulação de processos químicos
2. Demonstrar conhecimentos sobre diagramas de processo, variáveis de processo e análise de graus de liberdade. Recordar os constituintes de um balanço
3. Desenvolver modelos de processos em estado transiente e em estado estacionário
4. Utilizar ferramentas informáticas de uso geral na resolução de problemas de modelação e simulação em Engenharia Química
5. Utilizar software comercial de simulação de processos químicos na resolução de problemas de simulação em Engenharia Química envolvendo reação
6. Utilizar software de simulação comercial para simular e analisar processos envolvendo separações
7. Utilizar software de simulação comercial para simular, analisar e otimizar processos de Engenharia Química

### Pré-requisitos

Antes da unidade curricular o aluno deve ser capaz de:

1. Dominar os fundamentos em ciências de engenharia e da especialidade
2. Dominar a formulação de balanços de massa e de energia
3. Dominar os fundamentos e métodos de otimização
4. Dominar a utilização de meios informáticos

### Conteúdo da unidade curricular

Importância e potencialidades da modelação e simulação de processos de Engenharia Química. Identificação de softwares utilizados na modelação e simulação de processos químicos. Utilização de software de uso geral na resolução de problemas de modelação e simulação em Engenharia Química. Utilização de software comercial na simulação, análise e otimização de processos de Engenharia Química.

### Conteúdo da unidade curricular (versão detalhada)

1. Introdução
  - A importância e potencialidades da modelação e simulação de processos de Engenharia Química
  - Softwares utilizados na simulação de processos químicos
2. Conceitos básicos
  - Fundamentos da modelação: aspetos gerais e procedimentos de modelação de processos químicos
  - Formulação de modelos dinâmicos: estado transiente e estado estacionário
  - Constituintes de um balanço: acumulação, convecção, difusão, transporte interfacial, reação química
  - Outras relações/correlações necessárias na modelação de processos químicos
  - Balanço de material
  - Balanço de energia
  - Balanço de quantidade de movimento
  - Adimensionalização de variáveis
3. Modelação e simulação de processos de Engenharia Química
  - Simulação de processos descritos por equações às derivadas parciais
  - Modelação e simulação de reatores tubulares
  - Reator tubular de fluxo pistão
  - Reator tubular com dispersão axial
  - Balanço de energia em reatores tubulares
4. Simulação de processos de Engenharia Química recorrendo a simuladores comerciais
  - Diagramas de processo
  - Variáveis de processo
  - Balanços de massa, de energia e de quantidade de movimento
  - Simuladores comerciais
  - Definição de pacote de propriedades termodinâmicas e de componentes
  - Instalação e definição de correntes
  - Processos de mistura
  - Reatores
  - Reciclo e purga
  - Implementação da ferramenta Case Studies
5. Simulação de processos de separação recorrendo a simuladores comerciais
  - Colunas de separação
  - Simulação de uma coluna de destilação
  - Definição de especificações
  - Determinação de perfis de temperatura e de composição
  - Processos de extração líquido-líquido
  - Extrator simples
  - Processos de extração com estágios múltiplos
  - Extração em coluna
  - Aplicação das funções SET e ADJUST
6. Integração energética e otimização em processos químicos recorrendo a simuladores comerciais
  - Permutadores de calor
  - Integração de energia em colunas de destilação
  - Função objetivo e restrições
  - Métodos de otimização
  - Implementação da função Optimizer
  - Maximização do lucro e da produção

### Bibliografia recomendada

1. W. D. Seider, J. D. Seader, D. R. Lewin, Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation, John Wiley & Sons, 2nd Edition, 2004

**Bibliografia recomendada**

2. C. A. Silebi, W. E. Schiesser, Dynamic Modeling of Transport Process Systems, Academic Press, 1992
3. J. Ingham, I. J. Dunn, E. Heinzle, J. E. Prenosil, Chemical Engineering Dynamics. An Introduction to Modeling and Computer Simulation, Wiley-VCH, 2nd Completely Revised Edition, 2000
4. R. G. E. Franks, Mathematical Modeling in Chemical Engineering, John Wiley & Sons, 1967

**Métodos de ensino e de aprendizagem**

Aulas teórico-práticas: exposição dos conceitos e técnicas de modelação e simulação e de casos de estudo típicos em Engenharia Química. Aulas práticas: resolução acompanhada de problemas de modelação e simulação com recurso a ferramentas computacionais. Período não-presencial: estudo da matéria dada e resolução de problemas de modelação e simulação de processos de Engenharia Química.

**Alternativas de avaliação**

1. Avaliação Distribuída: - (Ordinário, Trabalhador) (Final)
  - Trabalhos Práticos - 30% (Casos de estudo: trabalhos de simulação envolvendo casos de estudo de processos químicos)
  - Prova Intercalar Escrita - 30% (Exame de avaliação intercalar: realizado na semana 7 ou 8)
  - Exame Final Escrito - 40% (Exame de avaliação final: realizado na semana 15 ou 16 (exame global))
2. Avaliação por Exame Final - (Ordinário, Trabalhador) (Recurso, Especial)
  - Exame Final Escrito - 100%
3. Alunos com Estatuto Trabalhador-Estudante: - (Trabalhador) (Final, Recurso, Especial)
  - Exame Final Escrito - 100%

**Língua em que é ministrada**

Inglês

**Validação Eletrónica**

|                       |                              |                          |
|-----------------------|------------------------------|--------------------------|
| Hélder Teixeira Gomes | Simão Pedro de Almeida Pinho | José Carlos Rufino Amaro |
| 07-03-2023            | 21-03-2023                   | 25-03-2023               |