



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
DECANATO DE ENSINO DE GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE ASSUNTOS ACADÊMICOS E REGISTRO GERAL
DIVISÃO DE REGISTROS ACADÊMICOS

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

CÓDIGO: IT 1304	MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS
CRÉDITOS: 03 (T-03)	Cada crédito corresponde a 15h/aula

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

INSTITUTO DE TECNOLOGIA

OBJETIVO DA DISCIPLINA:

- 1) Estudar os fundamentos teóricos e computacionais necessários para realizar a modelagem matemática e a simulação computacional de processos químicos.
- 2) Aplicar técnicas numéricas de resolução de sistemas de equações algébricas e de equações diferenciais ordinárias e parciais utilizadas na modelagem de processos químicos.
- 3) Realizar simulações computacionais de processos químicos com a finalidade de estudar seu comportamento nos regimes permanente e transiente, em condições isotérmicas e não isotérmicas.

EMENTA:

Princípios da modelagem matemática de processos químicos. Revisão de balanços de massa e de energia de processos químicos nos regimes permanente e transiente. Estudo computacional de diferentes modos de operação e diferentes tipos de reatores, incluindo cinéticas homogêneas e heterogêneas. Estudos de simulação de processos de mistura e de separação com transferência de calor e massa. Estudos de simulação de processos a parâmetros concentrados e parâmetros distribuídos, modelados por equações diferenciais ordinárias e equações diferenciais parciais. Simulação computacional de processos químicos.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

Parte I: Modelagem

1. Princípios da Modelagem Matemática: Utilidade e importância dos modelos matemáticos; classificação dos modelos matemáticos; princípios da formulação matemática.
2. Desenvolvimento e Classificação de Modelos Matemáticos: Segundo a descrição molecular: microscópica, macroscópica. Segundo a natureza dos processos descritos: determinístico e estocástico; a parâmetros concentrados e a parâmetros distribuídos, lineares e não lineares, no regime permanente e no regime transiente. Segundo a natureza das equações resultantes: equações algébricas; equações diferenciais ordinárias (PVI e PVC); equações diferenciais parciais; equações de diferenças.
3. Desenvolvimento de modelos matemáticos de processos químicos.

Parte II: Simulação

1. Introdução à programação computacional científica.
2. Desenvolvimento de códigos computacionais.
3. Sistematização da implementação do código computacional para simulação de processos químicos.
4. Estudo de técnicas numéricas para resolução de problemas descritos por sistemas de equações algébricas; EDOs, Sistemas de EDOs e EDPs.
5. Análise do comportamento estacionário e dinâmico de processos químicos através da simulação computacional.
6. Projeto e dimensionamento de reatores e equipamentos de separação.

BIBLIOGRAFIA:

BIBLIOGRAFIA:

1. BEQUETTE, B.W. *Process Dynamics, Modeling, Analysis and Simulation*. Prentice Hall, 1998.
2. BOYCE, W. E. & DIPRIMA, R. C. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*. Guanabara Dois, 1993.
3. CONSTANTINIDES, A. & MOSTOUFI, N. *Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications*. Prentice-Hall, 2000.
4. CUTLIP, M.B. *The Use of Mathematical Software Packages in Chemical Engineering – A Collection of Representative Problems in Chemical Engineering for Solution by Numerical Methods*. Prentice-Hall, 2008.
5. ELNASHAIE, S. & UHLIG, F. *Numerical Techniques for Chemical & Biological Engineers Using MATLAB – A Simple Bifurcation Approach*. Springer-Verlag, 2007.
6. HEINZLE, E., BIWER, A. & COONEY, C. *Development of Sustainable Bioprocesses – Modeling and Assessment*. John Wiley & Sons, 2006.
7. RUGGIERO, M.A.G O. & LOPES, V.L.R. *Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais – 2ª Edição*. Makron Books, 1997.
8. VOLESKY, B. & VOTRUBA, J. *Modeling and Optimization of Fermentation Processes*. Elsevier, 1992.