
1. Caracterização da Unidade Curricular

1.1 Designação

[4100] Modelização e Simulação de Processos / Process Simulation and Modelization

1.2 Sigla da área científica em que se insere

CEE

1.3 Duração

Unidade Curricular Semestral

1.4 Horas de trabalho

135h 00m

1.5 Horas de contacto

Total: 67h 30m das quais T: 6h 00m | TP: 34h 30m | P: 27h 00m

1.6 ECTS

5

1.7 Observações

Unidade Curricular Obrigatória

2. Docente responsável

[1192] João Miguel Alves da Silva

3. Docentes e respetivas cargas letivas na unidade curricular

Não existem docentes definidos para esta unidade curricular

4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes)

Com esta UC pretende-se que os alunos aprendam a utilizar simuladores de processos comerciais como o Aspen HYSYS e Aspen One para a simulação de processos químicos e biológicos. A utilização destas ferramentas permitirá aos alunos desenvolverem conhecimento sobre o funcionamento de varias operações unitárias presentes nos processos e também apreender a interligação entre as diferentes operações unitárias e as implicações do funcionamento de cada uma delas no desempenho de todo o processo. As questões relacionadas com a otimização do processo serão igualmente abordadas, com especial enfase na parte energética.

Os alunos ao concluírem esta UC deverão ser capazes de simular processos químicos e biológicos com sentido crítico relativo aos resultados obtidos. Deverão ainda saber utilizar estas ferramentas para análise de processos existentes de modo a estudar possíveis alterações aos mesmos com vista à sua melhoria.

**4. Intended learning outcomes
(knowledge, skills and
competences to be developed
by the students)**

With this UC it is intended that students learn to use commercial process simulators like Aspen HYSYS and Aspen One for the simulation of chemical and biological processes. The use of these tools will allow the students to develop knowledge about the operation of several unit operations present in the processes and also to understand the interconnection between the different unit operations and the implications of the operation of each of them in the performance of the whole process. Issues related to process optimization will also be addressed, with particular emphasis on the energy part.

At the conclusion of this unit, students should be able to simulate chemical and biological processes with a critical sense regarding the results obtained. They should also be able to use these tools to analyse existing processes in order to study possible changes to them in order to improve.

5. Conteúdos programáticos

1. Importância da simulação de processos - simuladores comerciais;
2. A previsão das propriedades termodinâmicas na simulação de processos;
3. Simulação de processos com variação de pressão e temperatura;
4. Operações lógicas utilizadas nos simuladores de processos;
5. Simulação de reatores;
6. Simulação de processos de separação;
6. Otimização de unidades processuais e de processos;
7. Análise económica recorrendo aos dados de simulação.

5. Syllabus

1. Importance of process simulation - commercial simulators;
2. The prediction of thermodynamic properties in process simulation;
3. Simulation of processes with variation of pressure and temperature;
4. Logical operations used in process simulators;
5. Simulation of reactors;
6. Simulation of separation processes;
6. Optimization of process and process units;
7. Economic analysis using simulation data.

6. Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular

A UC visa familiarizar os alunos com a utilização de simuladores comerciais tirando partido das potencialidades destes para o estudo de operações unitárias e processos químicos e biológicos. Será dada relevância ao funcionamento das operações unitárias estudadas anteriormente onde será possível desenvolver com maior detalhe questões relacionadas com o dimensionamento dos equipamentos e estudo das condições de funcionamento, bem como a estimativa de custos associada aos mesmos. A simulação dinâmica permite melhorar a perceção do funcionamento real dos equipamentos. Simultaneamente, o estudo de processos constituídos por várias operações unitárias permite abordar as questões relacionadas com a otimização dos processos, nomeadamente a influência que o funcionamento de uma operação tem nas operações a jusante. São ainda abordados conceitos relacionados com a integração energética.

6. Evidence of the syllabus coherence with the curricular unit's intended learning outcomes

The UC aims to familiarize students with the use of commercial simulators, taking advantage of their potential for the study of unit operations in chemical and biological processes, with emphasis on unit operations previously studied. The dynamic simulation allows a good perception of the real functioning of the equipment. The use of simulators allows consolidation of the knowledge about unit operations previously studied. The study of processes made up of several unit operations makes it possible to address issues related to the optimization of processes, namely the influence that the operation of an operation has on downstream operations. Concepts related to energy integration are also addressed.

7. Metodologias de ensino (avaliação incluída)

Todas as aulas TP e PL desta UC decorrem no laboratório de informática com acesso aos simuladores de processos utilizados (pacote ASPEN Academic). Nas aulas teóricas serão expositivas dando ênfase ao modo como funcionam os simuladores comerciais e suas limitações indicando quais os aspetos a ter em conta na simulação de vários tipos de processos. Nas aulas teórico-práticas são apresentados exemplos concretos que cobrem os vários tópicos do programa. Nas aulas práticas os alunos desenvolvem os trabalhos de avaliação.

Avaliação distribuída com exame final: Realização de três trabalhos (CTP1, CTP2, CTP3) e um trabalho final (CTPF) durante o semestre e, um exame final com classificação (CEF). Cada trabalho terá uma nota mínima de 8,00 valores e o exame terá a nota mínima de 9,50 valores. A classificação final (CF) é obtida com base na relação:

$CF = 0,70 \times (0,10 \times CTP1 + 0,20 \times CTP2 + 0,20 \times CTP3 + 0,50 \times CTPF) + 0,30 \times CEF$, sendo o aluno aprovado quando o valor obtido for $\geq 9,50$ valores.

**7. Teaching methodologies
(including assessment)**

All TP and PL classes of this CU are in the computer lab with access to the process simulators used (ASPEN Academic package). The theoretical classes will be expository emphasizing the way the commercial simulators work and their limitations indicating which aspects to take into account in the simulation of various types of processes. In the theoretical-practical classes are presented concrete examples that cover the various topics of the program. In the practical classes, the students develop the evaluation works.

Distributed assessment with final exam: Three assignments (CT1, CT2, CT3), one final assignment (CFT) during the semester, and one final exam (FE). Each assignment will have a minimum score of 8.00 (0-20) and the final exam (CFE) has a minimum score of 9.50 (0-20). The final classification (FC) is obtained based on the relation:

$FC = 0.70 \times (0.10 \times CT1 + 0.20 \times CT2 + 0.20 \times CT3 + 0.50 \times CFT) + 0.30 \times CFE$, and the student is approved when the value obtained is ≥ 9.50 (0-20).

**8. Demonstração da coerência
das metodologias de ensino
com os objetivos de
aprendizagem da unidade
curricular**

A lecionação de todas as aulas TP e PL da unidade curricular decorrem em contexto de laboratório de informática o que permite que os alunos possam acompanhar nos simuladores de processos os conceitos transmitidos. A capacidade do laboratório de informática é limitada pelo que o número de alunos em sala de aula é reduzido (máximo 18) o que permite que o docente possa facilmente acompanhar a evolução da aprendizagem por parte dos alunos. Os trabalhos de avaliação incidem sobre aspetos concretos relacionados com o programa da UC estando previsto um total de 27 horas para que os alunos possam desenvolver em contexto de sala de aula, e com o auxílio do docente, os problemas apresentados. No entanto, para que o aluno tenha sucesso será necessário que desenvolva autonomamente partes dos trabalhos pois as 27 horas são insuficientes para a totalidade do trabalho exigido. Os trabalhos 1 a 3 poderão ser desenvolvidos individualmente, ou em grupo de dois alunos. O trabalho final é desenvolvido individualmente. O exame tem como objetivo avaliar aspetos genéricos relacionados com a simulação de processos de forma a validar a aprendizagem dos alunos.

A unidade curricular tem uma página de suporte no moodle onde toda a documentação será disponibilizada. Essa página também será utilizada para apoio aos alunos e entrega de todos os trabalhos de avaliação.

8. Evidence of the teaching methodologies coherence with the curricular unit's intended learning outcomes

All the TP and PL classes of the curricular unit take place in a computer lab context, which allows students to follow in the process simulators the concepts transmitted in the context of theoretical-practical classes and laboratory classes. The capacity of the computer lab is limited so that the number of students in the classroom is reduced (maximum 18) which allows the teacher to easily follow the evolution of the learning by the students. The evaluation works focus on concrete aspects related to the UC program and a total of 27 hours are envisaged so that the students can develop in the classroom context, and with the help of the teacher, the problems presented. However, in order for the student to succeed, it will be necessary to develop autonomously parts of the work because the 27 hours are insufficient for the totality of the work required. Works 1 to 3 can be developed individually, or in a group of two students. The final work will be developed individually. The objective of the exam is to evaluate generic aspects related to the simulation of processes to validate student learning.

The curricular unit has a support page in Moodle where all the documentation will be available. This page will also be used to support students and submit all assessment works.

9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória

1. Seider, W.D.; Seader, J.D.; Lewin, D.; Widalga, S.; "Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation", Wiley, 2010.
2. Smith, R.; "Chemical Process Design and Integration", Wiley, 2005.
3. Biegler, L.T.; Grossmann, I.E.; Westerberg, A.W.; "Systematic Methods of Chemical Process Design", Prentice Hall International, 1997.
4. "Process Simulator manuals", Aspen Technology, 2017.
5. Moran, S.; "An Applied Guide to Process and Plant Design", Butterworth-Heinemann, 2015.
6. Towler, G.; Sinnott, R.; "Chemical Engineering Design: Principles, Practice, and Economics of Plant and Process Design", 2nd Ed., Butterworth-Heinemann, 2013.
7. Al-Malah, K.I.M.; "ASPEN PLUS Chemical Engineering Applications", Wiley, 2017.
8. Hamid, M.K.A.; "Aspen HYSYS: An Introduction to Chemical Engineering Simulation", LAP LAMBERT Academic Publishing, 2013.
9. Hanyak Jr., M.E.; "Chemical Process Simulation and the Aspen HYSYS Software", Create Space Independent Publishing Platform, 2012

10. Data de aprovação em CTC

11. Data de aprovação em CP