

## PROGRAMA DE DISCIPLINA

Dados da disciplina			Carga horária			Créditos
Código	Nome	Tipo*	Teórica	Prática	Global	
DEQ904	Tópicos de Doutorado em Simulação de Processos	E	60	0	60	4

\* O=Obrigatória; E=Eletiva

### Ementa

Introdução à simulação na engenharia de processos. Introdução ao uso do simulador de processos Aspen Plus. Noções básicas. Análise conceitual de processos químicos utilizando o simulador de processos Aspen Plus. Metodologia de síntese de processos, dimensionamento de equipamentos, eficiência energética, análise de sensibilidade, otimização de processos e ganho de produtividade.

### Conteúdo programático

Introdução. Introdução à engenharia de processos. Introdução à análise de processos. Introdução à simulação de processos químicos usando o simulador comercial Aspen Plus.  
Processos Químicos. Regras heurísticas para síntese de processos. Localização e layout da planta. Considerações ambientais e de segurança. Process Flow Diagram (PFD).  
Introdução à Simulação de Processos. Graus de liberdade. Método sequencial modular. Dimensionamento e simulação.  
Métodos de predição de propriedades termodinâmicas. Bancos de dados DECHEMA (DETERM e DIPPR) e NIST-TRC. Estimativa de propriedades a partir da estrutura molecular. Fluxograma de Eric Carlson para escolha do modelo termodinâmico. Diagrama de equilíbrio.  
Balanços de massa e energia com simulador de processos. Análise de sensibilidade e otimização de processos. Construção de fluxogramas complexos. Reciclo. Corrente de purga. Bloco de equipamentos. Convergência. Separação. Tanques flash. Torres de destilação. Método de Fenske-Underwood-Gilliland (short-cut). Cálculo rigoroso. Separações azeotrópicas. Torres de absorção.  
Trocadores de Calor. Balanço de energia. Cálculo rigoroso.  
Reatores. Reator estequiométrico (conversão). Reatores de equilíbrio. Modelos de reatores ideais (CSTR e PFR/PBR).  
Equipamentos. Bombas, compressores e expansores.  
Solução de problemas e eliminação de gargalos: resolução de problemas em unidades individuais, resolução de problemas em unidades múltiplas, gargalos em processos industriais.

### Bibliografia

#### Bibliografia básica:

SEIDER, W.D., SEADER, J.D., LEWIN, D.R. WIDAGDO, S. Product and Process Design Principles - Synthesis, Analysis and Evaluation, 3rd Edition, Wiley, 2009.  
GHASEM, N. Computer Methods in Chemical Engineering. 1ª ed. Florida: CRC Press, 2012.  
PERLINGEIRO, C. A. G. Engenharia de processos: análise, simulação, otimização e síntese de processos. São Paulo: Edgard Blucher, 2005.

#### Bibliografia complementar:

CONFORTO, S.; SPRANGER, M. A Engenharia de custos na viabilidade econômica de empreendimentos industriais. Rio de Janeiro: Taba Cultural, 2011.  
FELDER, R. M. Princípios elementares dos processos químicos. 3ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2005.  
FOGLER, H. S. Elementos de engenharia das reações químicas. 4ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012.  
HARRIOTT, P.; MCCABE, W. L.; SMITH, J. C. Unit operations of chemical engineering. 7. ed. Boston: McGraw-Hill Professional, 2004.  
PERRY, R. H; GREEN, D. W. Perry's Chemical Engineer's Handbook. 7ª ed. New York: McGraw-Hill, 1998.  
PETERS, M.; TIMMERHAUS, K; WEST, R. Plant design and economics for chemical engineers. 5ª ed. Boston: McGraw-Hill Professional, 2002.  
SANDLER, S.I. Using ASPEN PLUS® in Thermodynamics Instruction. A Step-by-Step Guide. 1ª ed. Wiley, 2015.  
TURTON, R.; BAILE, R. C. Analysis, synthesis and design of chemical processes. 4. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2012.