

**Unidade Curricular (português):**

Laboratórios de Engenharia Química 2

**Curricular unit (inglês):**

Chemical Engineering Laboratories 2

**Docente responsável**

**Nome completo: Teodoro José Pereira Trindade**

**Número de horas de contacto na unidade curricular: 45**

**Outros docentes:**

José Valério Nascimento Palmeira

João Miguel Alves da Silva

**Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):**

Na disciplina de LEQ2 estão envolvidas aplicações laboratoriais na área de processos químicos, em particular de simulação numérica envolvendo: síntese, análise, integração energética e otimização económica de operações unitárias e processos industriais. Após a aprovação na unidade curricular, o aluno deverá possuir a capacidade de:

1. Utilizar uma ferramenta numérica para conceção (síntese) e avaliação do comportamento (análise) de processos químicos e operações unitárias interdependentes.
2. Definir a estratégia e implementar uma avaliação quantitativa às condições de funcionamento das operações unitárias, assim como dos consumos energéticos do processo.
3. Planear um sistema de integração energética através de uma rede de permutadores de calor. Avaliar as poupanças alcançadas.
4. Adquirir autonomia em opções tecnológicas de processo assim como saber fundamentar a estratégia de síntese de um processo extensível ao nível das otimizações técnica e económica.

**Learning outcomes of the curricular unit:**

In the Chemical Engineering Laboratories 2 course are involved laboratories applications of industrial chemical processes, using computational simulation associated with subjects like: synthesis, analysis, energy integration and economic optimization of unit operations and industrial processes. The students who successfully complete the course will be able to:

1 Fluently use numerical simulators for design (synthesis) and evaluation (analysis) of the chemical processes behavior involving interdependent unit operations.

2 Define the strategy and implement a quantitative evaluation for each operating condition in each unit operations, as well as the energy consumption of the overall process.

3 Design an energy integration scheme using a heat exchanger network. Quantitatively evaluate the savings achieved.

4 Gain the necessary autonomy to make technological options as well as the know-how to design a strategy for processes synthesis at the technical and economic optimizations levels.

### **Conteúdos programáticos:**

1. Introdução à simulação numérica de processos químicos: Ferramentas computacionais de simulação. Limitações da modelação matemática. Seleção de modelos numéricos. Técnicas de estimativa de propriedades. Interpretação de resultados.

2. Análise de processos: Metodologia de análise. Otimização de operações unitárias. Condições fronteira. Análise de fluxos de matéria e energia. Análises de sensibilidade. Simulações em estado estacionário. Simulações em estado transiente.

3. Síntese de processos: Conceção de processos químicos. Recursos bibliográficos e on-line. Estrutura dos diagramas de processos químicos. Princípios heurísticos no desenho de processos. Análise à estabilidade dos processos.

4. Integração e otimização de processos: Integração de calor. Otimização de processos. Estimativa dos custos de capital e custos de produção. Análise económica e de rentabilidade do processo. Relatório de design do processo.

### **Syllabus:**

1. Introduction to Numerical Simulation: Computer simulation of chemical processes. Limitations of the mathematical models. Selection of appropriate fluid package models. Properties estimation techniques. Data interpretation.

2. Process Analysis: Methodology. Equipment optimization. Boundary conditions in the process. Analysis on mass and energy flux. Sensitivity analysis. Steady-state simulation. Dynamic simulation.

3. Process Synthesis: Chemical processes design. Library and on-line resources for chemical process design. Structure of flow diagrams in chemical processes. Heuristics-based principles for chemical process design. Process stability analysis.

4. Process Integration and Optimization: Heat integration. Process optimization. Estimation of capital costs and manufacturing costs. Engineering economics and profitability analysis. Design reports.

### **Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos da unidade curricular:**

Nesta unidade curricular (UC) de natureza laboratorial, os estudantes trabalham sobre um cenário de um processo industrial, percorrendo as várias fases do seu desenvolvimento. Para tal são utilizados simuladores de processo comerciais, nomeadamente o Aspen/HYSYS University. Este tipo de ferramentas computacionais permite o contacto dos alunos com as diferentes operações unitárias e a observação do seu comportamento em vários regimes de funcionamento. Durante o período letivo, o acompanhamento do docente permitirá aumentar o conhecimento específico dos alunos possibilitando-lhes progredir de forma consolidada nas valências a adquirir.

O conteúdo programático da UC será lecionado tendo como base o suporte de um caso de estudo, desenvolvido pelo aluno durante o semestre. Neste trabalho laboratorial pretende-se sintetizar um processo químico e otimizar técnica e economicamente o seu funcionamento. Conceitos gerais de simulação, tais como a correta seleção do modelo termodinâmico e o reconhecimento da sua relevância nos resultados são essenciais. A aplicação do conhecimento heurístico e análise de estabilidade permitem a conceção de um diagrama de processo equilibrado. A integração energética acompanhada por uma correta otimização do processo e análise da rentabilidade são os alicerces para se poder obter uma solução adequada para o trabalho. Valências de autonomia nas decisões técnicas são estimuladas de forma a consolidar os conhecimentos em engenharia.

### **Demonstration of the syllabus coherence with the curricular unit's objectives:**

This subject is a laboratories conceptual process design course, where students work on an industrial process scenario, following the overall stages of its construction. Therefore, commercial process simulators are used in lab classes, namely Aspen / HYSYS University. This type of computational tools allows the students to contact the different unit operations and observe their behavior in various operating regimes. During the academic period, the teacher monitoring will increase the students specific knowledge, enabling them to progress in a consolidated way through the required skills.

The course content will be taught based on the support of an industrial case study, developed by the student during the semester. In this laboratory work, we intend to synthesize a chemical process and optimize the layout technically and economically. General concepts of simulation, such as the adequate selection of the thermodynamic model and the recognition of its relevance in the data results are essential. The application of heuristic knowledge and stability analysis allows the design of a balanced process diagram. Energy integration accompanied by a correct optimization of the process and analysis of the profitability is the foundations to be able to obtain a suitable solution for the work. Autonomy skills in technological decisions are stimulated to merge the consolidate knowledge in chemical engineering.

**Metodologias de Ensino (avaliação incluída):**

Metodologia de Ensino:

No início do semestre será fornecido aos alunos um enunciado contendo uma proposta de desenho de um processo industrial. A realização do trabalho envolve a utilização de um simulador comercial na conceção e cálculo do diagrama de processo. Durante o período letivo os alunos desenvolvem uma solução para o problema tecnológico proposto aplicando técnicas de síntese, heurística, integração energética, otimização e análise de rentabilidade.

Avaliação contínua:

A classificação final (NF) da disciplina envolve as notas do desempenho laboratorial (D), do relatório do trabalho (R), e da apresentação/discussão (A) do mesmo, perante um júri de avaliação.

$$NF = 0.1 D + 0.4 R + 0.5 A$$

Para aprovação  $NF \geq 10$ , sem que nenhuma componente seja inferior a 8. Arredondamento às unidades somente em NF.

Avaliação por exame:

A UC não possui avaliação por exame final.

**Teaching methodologies (including evaluation):**

Teaching Methodology:

At the beginning of the semester students will have access to a written memorandum containing a technical design proposal for an industrial process. The work uses a commercial simulator in the design and calculation of the process diagram. Along the lecturing period students develop a solution to the proposed technological problem by applying techniques of synthesis, heuristics, energy integration, optimization and profitability analysis.

Continuous Evaluation:

The student final classification (NF) in the course includes the marks of the laboratory performance (D), the work report (R), and its presentation / discussion (A), before an evaluation jury.

$$NF = 0.1 D + 0.4 R + 0.5 A$$

For approval  $NF \geq 10$ , with no component less than 8. Rounding to units only in NF.

Assessment by Exam:

The course doesn't have an exam evaluation.

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

A natureza laboratorial da unidade curricular permite ao longo do trabalho experimental, explorar um conjunto de tópicos que abrangem a globalidade dos conteúdos programáticos. A utilização do simulador numérica como ferramenta de engenharia na conceção de um projeto de design de processo, os alunos contactam com problemas reais de engenharia química industrial. Ao efetuar autonomamente a síntese de um processo, o aluno aprende a usar a heurística como critério de decisão, a despistar erros e centrar a atenção em áreas relevantes do processo e respetivos parâmetros de controlo.

Espera-se o entendimento da significância das principais secções de um diagrama de processo: tratamento da matéria prima, reator químico, preparação do efluente reacional, unidade de separação, reciclo, controlo de qualidade do produto, controlo ambiental, etc. A metodologia de análise do processo pode também auxiliar na identificação das zonas mais sensíveis do processo e ainda noutras onde se podem alcançar melhoramentos.

Num diagrama de processo de uma instalação os estudantes deverão distinguir e entender a diferença entre correntes do processo e correntes de utilidades, resolvendo problemas de tecnologia pinch aplicada à integração de calor, onde o número mínimo de permutadores de calor pode ser calculado. Através deste trabalho de projeto os estudantes terão igualmente contacto com as características construtivas de dimensionamento e aplicabilidade de diversos equipamentos industriais de processo tais como válvulas, tubagens, bombas e compressores, colunas de destilação e absorção, permutadores de calor, etc.

É necessária a aprendizagem de diferentes técnicas para a estimativa dos custos de capital, incluindo o efeito da capacidade, condições de temperatura e pressão, materiais de construção, etc. Na estrutura dos custos de produção do produto final, são incluídos o investimento de capital, o custo das utilidades, das matérias primas e outros custos diretos e indiretos. Através de uma aplicação prática os alunos assimilam os conceitos básicos de análise económica necessários para avaliar a rentabilidade deste tipo de projetos, os quais envolvem elevadas despesas de capital. Aplicando critérios de otimização técnica e económica para maximização do lucro do processo, será selecionada a opção mais económica entre as alternativas.

O sistema de avaliação proposto também pretende evidenciar a capacidade de comunicação dos alunos quer através da documentação produzida (relatório técnico) quer pela apresentação oral e poder de argumentação demonstrado na discussão.

**Demonstration of the coherence between the teaching methodologies and the learning outcomes:**

The applied nature of the course, enables throughout the experimental work to explore a comprehensive set of topics that cover the overall lecture content. Using the numerical simulator as an engineering tool in the process design, students contact with real engineering

problems of industrial chemical. Student individual performance in the process synthesis, increases their learning of heuristics as a decision criterion, the screen out the errors and focus their attention on relevant areas of the process and their control parameters.

It is expected that student understand the significance of the main sections of a process diagram: raw material treatment, chemical reactors, reaction effluent preparation, separation units, recycle, product quality control, environmental control, etc. The process analysis methodology can also aid in identifying the most sensitive areas of the process and in other areas where improvements can be achieved.

In a chemical process diagram, students should distinguish and understand the difference between process material currents and utility material currents, solving problems of pinch technology applied to heat integration where the minimum number of heat exchangers can be calculated. Throughout the proposed project, students will also have contact with the design characteristics and function of various equipment in an industrial process such as valves, pipes, pumps and compressors, distillation and absorption columns, heat exchangers, etc.

It is necessary to learn different techniques for estimating capital costs, including the effect of equipment capacity, temperature and pressure conditions, building materials, etc. In the structure of production costs of the final product, capital investment, cost of utilities, raw materials and other direct and indirect costs are also included. Through this practical application, the students will easily assimilate the practical concepts of economic analysis required to evaluate the profitability of the project, which involves high capital expenditures. Applying technical and economic optimization criteria to maximize the profit of the process, the most economical option among the alternatives will be selected.

#### **Bibliografia principal:**

1. W. D. Seider, J. D. Seader, D. R. Lewin, S. Widagdo, R. Gani, e K. M. Ng, Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation, 4th Edition, John Wiley & Sons (ISBN: 978-1-119-28263-1), 2016.
2. R. Turton, R. C. Bailie, W. B. Whiting, J. A. Shaeiwitz, e D. Bhattacharyya, Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes, 4th Edition, Prentice Hall (ISBN: 978-0132618120), 2013.
3. R. M. Murphy, Introduction to Chemical Processes: Principles, Analysis, Synthesis, 1st Edition, McGraw-Hill (ISBN: 978-0072849608), 2007.
4. R. Smith, Chemical Process: Design and Integration, John Wiley & Sons (ISBN: 978-1-119-09441-8), 2014.

