

Universitatea POLITEHNICA din Bucuresti

Facultatea Chimie Aplicata si Stiinta Materialelor

Catedra Inginerie Chimica

FISA DISCIPLINEI

Optimizarea proceselor chimice si biochimice

Titlul Disciplinei: *Optimizarea proceselor chimice si biochimice*

Titulari de disciplina: Prof. dr. ing. Alexandru WOINAROSCHY, Prof. dr. ing. Mihaela MIHAI, Conf. dr. ing. Raluca ISOPESCU, SL. dr. ing Dana Irina OFITERU

Tipul: pregatire de specialitate

Numar ore curs: 28 ore

Numar ore aplicatii: 28 ore

Numarul de puncte de credit: 4

Semestrul: 8

Pachetul: aria curriculara de specialitate : **Ingineria si informatica proceselor chimice si biochimice**

Preconditii: parcurgerea si/sau promovarea urmatoarelor discipline:

- Matematica
- Bazele ingineriei chimice
- Metode numerice in ingineria chimica
- Operatii unitare in industriile de proces
- Macrolimbaje de calcul stiintific
- Fenomene de transfer
- Analiza statistica si programarea experimentelor
- Instrumente informatice in ingineria de proces.

1. OBIECTIVELE DISCIPLINEI

• curs

Identificarea si formularea generala a problemelor de optimizare in cadrul proceselor chimice si biochimice. Elaborarea si validarea modelelor de regresie si neuronale apte pentru aplicatii de optimizari de procese. Adaptarea modelelor teoretice la specificul aplicatiilor de optimizare a proceselor. Formularea criteriilor de optimizare de natura economica si tehnico-economica. Cunoasterea metodelor reprezentative, frecvent utilizate, de rezolvare a problemelor de optimizare a proceselor chimice si biochimice:

analitice, numerice, bazate pe forme canonice si pentru politici optime, precum si a aplicatiilor soft specifice disponibile. Optimizarea unor procese complexe cu ajutorul de tehnici adecvate. Optimizarea in conditii de incertitudine a proceselor chimice si biochimice si elemente de analiza de risc tehnic si economic.

- **aplicatii**

Familiarizarea cu modul general de identificare si formulare a problemelor de optimizare de procese in ingineria chimica si biochimica. Calculul coeficientilor de regresie si al ponderii conexiunilor interneuronale din cadrul modelelor empirice de regresie si respectiv, neuronale. Formulari si selectii de criterii de optimizare pentru diverse procese chimice si biochimice. Deprinderea utilizarii aplicatiilor software specifice pentru rezolvarea de probleme de optimizare de procese.

2. COMPETENTE SPECIFICE (din spectrul de competente al programului de studii)

Capacitatea de operare performanta a utilajelor comune industriilor de proces. Abilitatea de a utiliza instrumente informatice in rezolvarea problemelor de inginerie chimica si biochimica. Capacitatea de integrare in echipe care realizeaza activitati interdisciplinare.

3. CONTINUTUL TEMATIC

a. Curs:

| Cap. | Continutul | Nr. Ore |
|------|--|---------|
| 1 | Notiuni introductive: grade de libertate, tipuri de decizii, natura variabilelor, etapele rezolvarii unei aplicatii de optimizare | 2 |
| 2 | Criterii de optimizare a sistemelor din ingineria biochimica: criterii economice, criterii tehnico-economice. | 1 |
| 3.1 | Modele teoretice utilizate pentru descrierea proceselor chimice si biochimice. Simplificarea modelelor teoretice | 1 |
| 3.2 | Analiza de regresie: identificarea variabilelor, alegerea formei modelului, obtinerea si testarea datelor experimentale, determinarea coeficientilor, testarea modelului | 2 |
| 3.3 | Modelarea proceselor chimice si biochimice cu ajutorul retelelor neuronale: tipuri de retele neuronale, algoritmi de invatare, aplicatii tipice | 2 |

| | | |
|-----|---|-------------|
| 4.1 | Metode analitice clasice de optimizare: metoda substitutiei variabilelor din restrictii, metoda multiplicatorilor Lagrange. Exemplificari specifice | 2 |
| 4.2 | Metode numerice directe de optimizare a proceselor chimice si biochimice: eliminarea de intervale, expolrarea suprafetei functiei obiectiv cu si fara evaluarea derivatelor, metode adaptiv aleatoare, algoritmi genetici. Tratarea restrictiilor in cadrul metodelor numerice directe: metode de proiectie, metode de penalizare | 8 |
| 4.3 | Programarea liniara: algoritmul simplex, rezolvarea sistemelor neliniare mari prin liniarizari succesive. Aplicatii tipice frecvente ale programarii liniare: alocari resurse, retete optime etc. | 2 |
| 4.4 | Identificarea politicilor de control optimal cu ajutorul principiului maximului. Aplicatie: optimizarea regimului termic al reactoarelor chimice in care au loc reactii multiple | 2 |
| 4.5 | Optimizarea sistemelor mari cu ajutorul programarii dinamice si al nivelelor decizionale multiple. Aplicatii specifice. | 4 |
| 5 | Optimizarea in conditii de incertitudine. Simularea Monte-Carlo. Analiza de risc. | 2 |
| | | Total 28 |

b. Aplicatii:

| | | |
|-----|--|----------|
| 3.2 | Calculul coeficientilor modelelor de regresie | 4 |
| 3.3 | Modelarea unui proces in regim stationar si a unui proces in regim dinamic cu ajutorul retelelor neuronale | 6 |
| 4.1 | Calcul de compozitii la echilibru cu ajutorul metodei multiplicatorilor Lagrange | 2 |
| 4.2 | Optimizarea unei coloane de separare prin rectificare printr-o metoda directa | 6 |
| 4.4 | Optimizarea profilului de temperatura a unui reactor chimic | 4 |
| 4.5 | Optimizarea unui proces de extractie lichid-lichid prin programare dinamica | 4 |
| 5 | Aplicatie de optimizare in conditii de incertitudine prin simulare Monte-Carlo | 2 |
| | | Total 28 |

4. EVALUAREA

a) Activitatile evaluate si ponderea fiecareia (conform Regulamentului studiilor de licenta) :

- evaluarea activitatilor practice prin minimum doua testari pe parcursul semestrului : 40%
- tema de casa (studiu de caz de optimizare de proces): 10%
- verificare finala a cunostiintelor teoretice; 50%

b) Cerintele minimale pentru promovare

- obtinerea a 50 % din punctajul total;
- obtinerea a 50 % din punctajul verificarii finale.

c) Calculul notei finale

- prin rotunjirea punctajului final.

5. REPERE METODOLOGICE (modul de prezentare, materiale, etc.)

- intregul proces de didactic este interactiv;
- indicarea frecventa in cadrul cursului de referinte teoretice si aplicative pe site-uri de INTERNET;
- exemplificari grafice animate cu calculatorul;
- desfasurarea tuturor orelor de aplicatii cu accesul fiecarui student la câte o statie de calcul si folosirea de soft de aplicatie adecvat (MATLAB, EXCEL, METAWIN, GAMS etc)

6. BIBLIOGRAFIA

1. A. Woinaroschy si O. Smigelschi: "*Ingineria sistemelor si optimizarea proceselor chimice*", Editura Didactică si Pedagogică, Bucuresti, **1983**.
2. A. Woinaroschy, M. Mihai si R. Isopescu: "*Optimizarea proceselor din industria chimică. Exemple si aplicatii*", Editura Tehnică, Bucuresti, **1990**.
3. A. Woinaroschy: "*Rețele neurale*", Centrul de multiplicare UPB, **1993**.
4. D.R. Baughman, Y.A. Liu: "Neural Networks in Bioprocessing and Chemical Engineering", Academic Press, New York, **1995**
5. T.F. Edgar, D.M. Himmelblau, L.S. Lasdon: "Optimization of Chemical Processes", McGraw Hill, Boston, **2001**.