

Zadania projektowe w ramach przedmiotu: *Komputerowe wspomaganie projektowania*

Zadania wykonywane są w grupach 2 osobowych (max).

Zadanie 1.

Należy stworzyć arkusz kalkulacyjny, który umożliwi wykonanie obliczeń PT-flash dla mieszaniny dwuskładnikowej. Do obliczeń należy przyjąć, że mieszanina spełnia prawo Raoula. W takim przypadku stała równowagi fazowej jest opisana równaniem:

$$K_i = \frac{P_i^{sat}(T)}{P}$$

Dodatkowo należy określić punktu rosy i wrzenia przy podanym ciśnieniu lub temperaturze. Uzyskane wyniki porównać z obliczeniami wykonanymi w ICAS-Utility Toolbox oraz wygenerować wykresy T-xy i P-xy.

| Grupa | Składnik 1 | Składnik 2 | z_1 | z_2 | T [K] | P [MPa] | Obliczyć T_w i T_s przy P [MPa] | Obliczyć P_w i P_s przy T [K] |
|-------|------------|------------|-------|-------|---------|-----------|---------------------------------------|-------------------------------------|
| 1 | n-pentan | n-heksan | 0,5 | 0,5 | 325,0 | 0,102000 | 0,102000 | - |
| 2 | n-pentan | n-heptan | 0,4 | 0,6 | 340,0 | 0,102000 | 0,102000 | - |
| 3 | n-pentan | n-oktan | 0,3 | 0,7 | 350,0 | 0,102000 | 0,102000 | - |
| 4 | n-pentan | n-dekan | 0,2 | 0,8 | 375,0 | 0,102000 | 0,102000 | - |
| 5 | n-heksan | n-heptan | 0,5 | 0,5 | 380,0 | 0,202000 | 0,202000 | - |
| 6 | n-heksan | n-oktan | 0,6 | 0,4 | 390,0 | 0,202000 | 0,202000 | - |
| 7 | n-heksan | n-dekan | 0,7 | 0,3 | 390,0 | 0,202000 | - | 390,0 |
| 8 | n-heptan | n-oktan | 0,8 | 0,2 | 420,0 | 0,202000 | - | 420,0 |
| 9 | n-heptan | n-dekan | 0,3 | 0,7 | 430,0 | 0,303000 | - | 430,0 |
| 10 | n-oktan | n-dekan | 0,4 | 0,6 | 460,0 | 0,303000 | - | 460,0 |
| 11 | n-pentan | n-heksan | 0,1 | 0,9 | 440,0 | 0,303000 | - | 440,0 |

Obliczyć ile należałoby dostarczyć ciepła do mieszaniny o podanym składzie jeżeli surówka byłaby podawana w temperaturze wrzenia a rozdzielacz miałby zachodzić w temperaturze T .

Zadanie 2.1. (dla grup: 1-5)

Chcemy wyekstrahować olej rzepakowy ze zmiażdżonych nasion rzepaku. Olej rzepakowy można scharakteryzować współczynnikiem rozpuszczalności Hildebranda (total Sol.Par.) o wartości między 16-19 (kJ/m³)^{1/2}. Proces ekstrakcji musi zachodzić w fazie ciekłej przy warunkach zbliżonych do warunków normalnych (temperatura procesu może odbiegać od temperatury normalnej). Ponadto rozpuszczalnik powinien mieć zdolność odparowania w granicach 345 i 385 K (możliwy proces destylacji w warunkach umiarkowanych). Znajdź przynajmniej 3 rozpuszczalniki poprzez przeszukanie bazy danych i przy użyciu programu ICAS – ProCAMD. Sprawdź czy którykolwiek ze znalezionych związków poprzez przeszukiwanie bazy danych również został znaleziony w programie ICAS-ProCAMD. Należy wybrać najlepsze 3 rozpuszczalniki. Uzasadnij wybór.

Zadanie 2.2. (dla grup: 6-9)

Należy rozdzielić mieszaninę dwuskładnikową kwasu octowego (10 mol%) i wody (90 mol%) w temperaturze 309 K i pod ciśnieniem 1,1 atm. przy użyciu procesu ekstrakcji. W tym celu należy znaleźć ekstrahent, który będzie przyjazny środowisku i którego dodanie spowoduje wytworzenie dwóch faz ciekłych w zakresie temperatur 310-330 K. Jedna z faz ma być bogata w wodę ($x_{H_2O} > 0,9$) a druga w kwas octowy i dodany rozpuszczalnik. Podaj przynajmniej 3 możliwe rozpuszczalniki. Co najmniej jeden z nich musi być obecny w bazie danych związków chemicznych.