

Przedmiot: Komputerowe metody projektowania

Kod przedmiotu: WTiICh/IIS/ICH/D1-4

Odpowiedzialny za przedmiot, jego miejsce zatrudnienia i e-mail: dr hab. inż. Józef Nastaj, prof. PS, Zakład Inżynierii Procesowej, Informatyki Procesowej i Ochrony Atmosfery, Instytut Inżynierii Chemicznej i Procesów Ochrony Środowiska, e-mail: jonas@ps.pl

1. **Język wykładowy:** polski

2. **Liczba punktów:** 9

3. **Rodzaj studiów, kierunek, specjalność:** studia II stopnia, stacjonarne, kierunek Inżynieria Chemiczna i Procesowa, specjalność Informatyka procesowa

4. **Status przedmiotu dla ww. studiów:** obowiązkowy

5. **Informacje o formach zajęć:**

Sem.	Pkt	Zajęcia praktyczne									
		Wykład		Seminarium		Ćw/ćw. komp.		Laboratorium		Projekt	
		G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.
II	9	60	E							60	Z
Waga		0,6								0,4	

Objaśnienia: Pkt – liczba punktów, G/sem. – liczba godzin w semestrze, F.z. – forma zaliczenia zajęć (E – egzamin, Z – zaliczenie). Ćw. komp – zajęcia w formie ćwiczeń, na stanowiskach komputerowych

7. **Wymagane zaliczenie przedmiotów poprzedzających (lub określenie wymaganej wiedzy):**

Matematyka, Chemia fizyczna, Termodynamika procesowa, Informatyka i programowanie

8. Program wykładów

Potrzeby, cele i zastosowania komputerowej komputerowego projektowania procesów. Przygotowanie i przetwarzanie danych do projektowania: Stałe fizyczne dla czystych substancji. Zależności **P-V-T** dla czystych gazów i cieczy. Objętościowe własności mieszanin - metody predykcji danych dla mieszanin (reguły mieszania). Własności termodynamiczne gazów doskonałych, rzeczywistych oraz cieczy. Równowaga ciecż-para oraz ciepła parowania czystych cieczy. Równowaga ciecż-para w rzeczywistych układach wieloskładnikowych. **Symulacja procesów:** pojęcia modelowanie, symulacja, projektowanie. Klasyfikacja obiektów jako przedmiotów modelowania. Typy modeli matematycznych i ich struktura matematyczna. Obiekty opisane równaniami algebraicznymi. Obiekty opisane równaniami różniczkowymi zwyczajnymi. Układy opisane równaniami różniczkowymi cząstkowymi. Bilanse masy i energii dla modeli statycznych o parametrach skupionych. Metody predykcji lepkości czystych gazów i cieczy - zależność od temperatury i ciśnienia. Lepkość mieszanin gazów i cieczy - zależność od temperatury i ciśnienia. Współczynniki dyfuzji w układzie wieloskładnikowym dla mieszanin gazowych i ciekłych. Predykcja równowagi ciecż-para metodą UNIFAC. Obsługa wybranych baz danych własności fizykochemicznych. Bilanse masy i energii dla układów dynamicznych o parametrach skupionych i rozłożonych. Omówienie podstawowych członów występujących w tych równaniach: przewodzenie (dyfuzja), adwekcja, źródło, upust. Zagadnienia brzegowe w przypadku współprądu i przeciwpądu. Metodyka rozwiązywania modelu przepływu krzyżowego. Techniki rozwiązywania modeli. **Symulatory procesów:** omówienie występujących na rynku światowym symulatorów procesów. Symulator CHEMCAD V. Inne narzędzia: POLYMATH, MATHCAD, MATLAB z SIMULINKiem, MATHEMATICA, MAPLE.

9. Program zajęć praktycznych *Symulacja wybranych procesów inżynierii chemicznej. Przykładowo:* zebranie i opracowanie danych fizyko-chemicznych dla wybranego układu trójskładnikowego o nieograniczonej, wzajemnej rozpuszczalności., wyszukiwanie danych, aproksymacja danych przy użyciu programu STATISTICA, predykcja danych za pomocą równań przy użyciu programu MATHCAD lub arkusza kalkulacyjnego Excel, wyznaczanie równowagi ciecż-para pod stałym ciśnieniem metodą aproksymacji z użyciem procedury rozwiązywania równań programu POLYMATH, predykcja równowagi VLE dla układu trójskładnikowego metodą UNIFAC. Symulacja suszarki komorowej z recyklem. Znajdowanie optymalnego ekonomicznie stopnia recyklu gazu suszającego. Wprowadzanie danych do biblioteki programu dryPAK, obliczenia bilansowe dla zmiennego stopnia recyklu - program dryPAK, obliczanie wymiarów suszarki oraz optimum ekonomicznego - program MATHCAD. *Symulacja wybranych procesów inżynierii chemicznej. Przykładowo:* Symulacja kolumny rektyfikacyjnej dla mieszaniny trójskładnikowej za pomocą symulatora CHEMCAD V. Przygotowanie danych, symulacja kolumny półkowej i wypełnionej przy użyciu programu CHEMCAD V.

10. Literatura

1. M.B. Cutlip, M. Shacham, *Problem Solving in Chemical Engineering with Numerical Methods*, Prentice Hall, Boston 2007
2. R. Taylor, R. Krishna, *Multicomponent Mass Transfer*, John Wiley & Sons, Inc., New York 1993.
3. M.P. Cady, C.A. Trapp, *A Mathcad Primer for Physical Chemistry*, Oxford university Press, 1999.
4. R.G. Rice, D.D. Do, *Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers*, John Wiley & Sons, Inc., New York 1995
5. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell, *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill. New York 2001.
6. C.J. Geankopolis, *Transport Processes and Unit Operations*, Prentice Hall LPTR, New Jersey 1993.
7. J.R. Welty, C.E. Wics, R.E. Wilson, G. Rorrer, *Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer*, John Wiley & Sons, Inc., New York 2001.
8. A. Jeffrey, *Advanced Engineering Mathematics*, Academic Press, New York 2002.
9. *CHEMCAD V*, Podręcznik użytkownika, Nor-Par a.s. 2001; *CHEMCAD V*, Książka szkoleniowa, Nor-Par a.s. 2001.