**Лабораторная работа 5 по Цифровому моделированию физико-химических систем**

**Построение диаграмм фазового равновесия с использованием уравнения состояния. Анализ фазовых диаграмм**

Используя

1. модель Пенга-Робинсона для газовой фазы и модель modified UNIFAC (Dortmund) для жидкой фазы **binary\_PR\_UNIFAC\_mod.py**,
2. модель Пенга-Робинсона для газовой и 1-2 жидких фаз **binary\_PR.py** (kij найти с помощью регрессии на листах 1 или 2 книги BIPJ…xlsx по экспериментальным данным Dortmund Data Base <http://www.ddbst.com/en/EED/VLE/VLEindex.php>),

1) построить y-x диаграмму для первого компонента при T = 333.15 K.

2) построить P-x диаграмму при T = 333.15 K, отметить на ней все фазы и чистые компоненты

3) построить T-x диаграмму при P = 1 бар, отметить на ней все фазы и чистые компоненты. Определите тип диаграммы из изученных и отклонение от идеальности (например, «диаграмма кипения с азеотропом с положительным отклонением от закона Рауля»),

4) Поставьте фигуративную точку D на T-x диаграмме в двухфазной области. Определите равновесные составы фаз, определяемые фигуративной точкой D, определите долю каждой фазы по правилу рычага. Проведите анализ процесса нагревания эквимолярной (50:50) смеси жидкостей вплоть до образования эквимолярного пара (см. семинарский материал),

5) Рассчитайте среднюю относительную ошибку определения мольной доли а) в газовой фазе и б) в жидкой фазе для каждой из моделей по пяти парам (P,T) из экспериментальных данных базы Dortmund Data Base <http://www.ddbst.com/en/EED/VLE/VLEindex.php> (необходимо провести flash-расчеты с обеими моделями при этих пяти парах (P,T), затем посчитать относительную ошибку для каждой модели)

для системы (вариант)

1. ацетонитрил – 1,2-этандиол (этиленгликоль)
2. ацетонитрил – 1,3-бутадиен
3. ацетонитрил – 1-бутанол (н-бутанол)
4. ацетонитрил – 2-пропанол (изопропиловый спирт)
5. ацетонитрил – уксусная кислота
6. ацетонитрил – ацетон
7. ацетонитрил – бензол
8. ацетонитрил – хлороформ
9. ацетонитрил – этанол
10. ацетонитрил – гексан (н-гексан)
11. ацетонитрил – метанол
12. ацетонитрил – вода
13. ацетонитрил – м-ксилол
14. ацетон – 1-бутанол (н-бутанол)
15. ацетон – 2-пропанол (изопропиловый спирт)
16. ацетон – бензол
17. ацетон – хлороформ
18. ацетон – циклогексан (н-гексан)
19. ацетон – этанол
20. ацетон – гексан (н-гексан)
21. ацетон – метанол
22. ацетон – тетрагидрофуран (THF)
23. ацетон – вода
24. 1,2-этандиол (этиленгликоль) – этанол
25. 1,2-этандиол (этиленгликоль) – 1-бутанол (н-бутанол)
26. 1,2-этандиол (этиленгликоль) – 2-пропанол (изопропиловый спирт)
27. 1,2-этандиол (этиленгликоль) – метанол
28. 1,2-этандиол (этиленгликоль) – тетрагидрофуран (THF)
29. 1,2-этандиол (этиленгликоль) – вода
30. этанол – 1-бутанол (н-бутанол)
31. этанол – 2-пропанол (изопропиловый спирт)
32. этанол – бензол
33. этанол – метанол
34. этанол – гексан (н-гексан)
35. этанол – тетрагидрофуран (THF)
36. ацетон – гексен
37. диэтиловый эфир (ethyl ether) – уксусная кислота
38. диэтиловый эфир (ethyl ether) – бензол
39. диэтиловый эфир (ethyl ether) – гексан (н-гексан)
40. диэтиловый эфир (ethyl ether) – метанол
41. диэтиловый эфир (ethyl ether) – тетрагидрофуран (THF)
42. этилацетат – уксусная кислота
43. этилацетат – бензол
44. этилацетат – 1-бутанол (н-бутанол)
45. этилацетат – циклогексан (н-гексан)
46. этилацетат – метанол
47. этилацетат – тетрагидрофуран (THF)
48. этилацетат – вода
49. бензол – 1-бутанол (н-бутанол)
50. бензол – гексан (н-гексан)
51. бензол – циклогексан (н-гексан)
52. бензол – метанол
53. бензол – тетрагидрофуран (THF)
54. бензол – вода
55. 1-бутанол (н-бутанол) – 2-пропанол (изопропиловый спирт)
56. 1-бутанол (н-бутанол) – хлороформ
57. 1-бутанол (н-бутанол) – гексан (н-гексан)
58. 1-бутанол (н-бутанол) – циклогексан (н-гексан)
59. 1-бутанол (н-бутанол) – метанол
60. 1-бутанол (н-бутанол) – тетрагидрофуран (THF)
61. 1-бутанол (н-бутанол) – вода
62. хлороформ – метанол
63. хлороформ – вода
64. циклогексан (н-гексан) – метанол
65. ацетонитрил – п-ксилол
66. ацетонитрил – тетрагидрофуран (THF)
67. ацетон – п-ксилол
68. этилацетат – 1,2-этандиол (этиленгликоль)
69. этилацетат – п-ксилол
70. бензол – хлороформ

Варианты повышенной сложности

Построить с помощью программы binary\_PR\_UNIFAC\_mod.py

при P = 1 бар T-x диаграмму для системы с ограниченной растворимостью в жидкой фазе

А) ацетонитрил – циклогексан (н-гексан)

Б) вода-анилин

В) вода-фенол

Г) вода-диэтиламин

Д) вода-триэтиламин

Определите тип диаграммы из изученных и отклонение от идеальности (например, «диаграмма кипения с азеотропом с положительным отклонением от закона Рауля и ограниченной взаимной растворимостью в жидкой фазе»),

Найти T-x диаграмму взаимной растворимости системы в сети Интернет и сравнить пределы взаимной растворимости с полученными в моделировании.

Поставьте фигуративную точку D на T-x диаграмме в двухфазной области. Определите равновесные составы фаз, определяемые фигуративной точкой D, определите долю каждой фазы по правилу рычага. Проведите анализ процесса нагревания эквимолярной (50:50) смеси жидкостей вплоть до образования эквимолярного пара (см. семинарский материал).

**Доп. материал**: пример T-x диаграммы для несмешивающихся жидкостей без наложения парожидкостного равновесия на область сосуществования двух жидких фаз и с ним (здесь на примере с низкокипящим азеотропом)

<http://chem331001fall09.pbworks.com/w/page/15647340/f/1257702796/Figure%206-26.jpg>

<https://learncheme.com/quiz-yourself/interactive-self-study-modules/partially-miscible-liquids-phase-diagrams/partially-miscible-liquids-phase-diagrams-simulations/>