|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **B-III – Charakteristika studijního předmětu** | | | | | |
| **Název studijního předmětu** | Výpočetní metody v termodynamice směsí | | | | |
| **Typ předmětu** | Povinně volitelný | **Doporučený ročník / semestr** | | |  |
| **Rozsah studijního předmětu** | 20p + 6cv | **Hodin** | 26 | **Kreditů** |  |
| **Prerekvizity, korekvizity, ekvivalence** | | | | | |
| **Prerekvizity** Základy matematické analýzy, lineární algebry a numerických metod; znalost základů termodynamiky je výhodou | | | | | |
| **Způsob ověření studijních výsledků** | Zkouška | **Forma výuky** | | Přednáška, cvičení | |
| **Forma způsobu ověření studijních výsledků a další požadavky na studenta** | | | | | |
| Ústní zkouška | | | | | |
| **Garant předmětu** | doc. Ing. Jiří Mikyška, Ph.D. | | | | |
| **Zapojení garanta do výuky předmětu** | Přednášející, zkoušející | | | | |
| **Vyučující** | | | | | |
| doc. Ing. Jiří Mikyška, Ph.D. | | | | | |
| **Stručná anotace předmětu** | | | | | |
| Cílem předmětu je podat přehled základních numerických metod používaných v termodynamice směsí – vyšetřování stability vícesložkové směsi, výpočet fázové rovnováhy, kritického bodu směsí a přidružené úlohy. Náplň kurzu může být po dohodě s přednášejícím upravena s ohledem na potřeby posluchačů a jejich předchozí znalosti.  **Osnova**   1. Základy termodynamiky směsí – základní termodynamické veličiny, první a druhý zákon termodynamiky, termodynamické potenciály. 2. Stavové rovnice reálného plynu (kubické rovnice, kubická rovnice s asociací), výpočet termodynamických veličin ze stavových rovnic. 3. Gibbsovo kritérium fázové stability, podmínky fázové rovnováhy, kritérium kritického bodu. 4. Testování fázové rovnováhy – TPD funkce, metoda postupných aproximací, Newtonova metoda. 5. Výpočet fázové rovnováhy vícesložkové směsi při zadaném tlaku, teplotě a chemickém složení směsí – konvenční metoda, metoda založená na objemu, metoda postupných aproximací, Newtonova metoda. 6. Výpočet kritického bodu vícesložkové směsi. 7. Alternativní formulace výše uvedených úloh – zejména test fázové stability a výpočet fázové rovnováhy při specifikaci VTN (objem, teplota, látková množství) a UVN (vnitřní energie, objem, látková množství). | | | | | |
| **Studijní literatura a studijní pomůcky** | | | | | |
| 1. Firoozabadi: Thermodynamics and Applications in Hydrocarbon Energy Production, McGraw Hill, 2016. 2. M. L. Michelsen, J. Mollerup: Thermodynamic Models: Fundamentals and Computational Aspects, ISBN: 87-989961-3-4, 2nd edition, Tie-Line Publications, 2007. 3. L. T. Biegler: Nonlinear Programming – Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Processes, MOS-SIAM Series on Optimization, 2010. 4. Firoozabadi: Thermodynamics of Hydrocarbon Reservoirs, McGraw Hill, 1999. | | | | | |