Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Факультет цифровых технологий и химического инжиниринга

Кафедра информационных компьютерных технологий

**ОТЧЕТ ПО ПРАКТИЧЕСКОЙ РАБОТЕ № 14**

**ПО КУРСУ**

**«ЦИФРОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ»:**

**«Название работы из ведомости»**

Ведущий преподаватель

Ст. преподаватель Скичко Е.А.

**СТУДЕНТ группы КС-20** Мелехин А.А.

**Москва**

**2024**

# **Задание**

**Задание 1**. Рассчитайте с использованием данных БД *«Third Millennium»* тепловой эффект реакции синтеза метанола при *525 K*. Какова теплоемкость метанола при этой температуре?

**Задание 2**. Определить изменение Энтропии при смешивании Газа и Газа ; *T = 298 K*. Начальное давление газов равно *101325 Па.* Принять, что данные вещества подчиняются законам идеальных газов.

**Задание 3**. Рассчитайте с помощью полиномов NASA энтропию при *250 K* для вещества  *(ALLENE)*.

**Теоретическое обоснование решения**

**Термодинамическим процессом** называется любое изменение состояния системы, характеризующееся изменением ее термодинамических параметров.

**«Нулевой» закон термодинамики:** для любой термодинамической системы существует состояние термодинамического равновесия, которое при фиксированных внешних условиях самопроизвольно достигается с течением времени.

**Функции состояния** - *U, H, S, G, А, Cp, Cv*. Изменение функции состояния не зависит от пути, а только от конечного и начального состояния системы.

**Функции пути** - теплота процесса (Q) и механическая работа (W). Бесконечно малое количество нельзя обозначить дифференциалом. Только буквой «дельта»: δQ и δW.

**Формулировка Кирхгофа 1-го закона термодинамики:** Изменение внутренней энергии закрытой системы в бесконечно малом (начальное и конечное состояние бесконечно близки) равновесном процессе равно разности количества теплоты и работы δW, совершаемой системой.

Где – количество теплоты,

- работа, совершаемая системой

**Закон Гесса:** тепловой эффект химической реакции при P, T=const зависит только от вида и состояния исходных веществ и продуктов реакции и не зависит от пути её протекания.

Qp = ΔHp,T

**Энтальпия** образования простых веществ в устойчивых стандартных состояниях равна нулю.

**Следствия:**

•Тепловой эффект химической реакции равен разности сумм теплот образования (ΔHf) продуктов реакции и исходных веществ, умноженных на стехиометрические коэффициенты (ν):

•Тепловой эффект химической реакции равен разности сумм теплот сгорания (ΔHc) исходных веществ и продуктов реакции, умноженных на стехиометрические коэффициенты (ν):

**Закон Кирхгофа:**

где - стандартная энтальпия при заданной температуре, Дж/моль,

- стандартная энтальпия образования при 298 К, Дж/моль,

*-* стандартная теплоёмкость при постоянном давлении, Дж/моль К.

В полиномах формата NASA 7 первых коэффициентов для высокотемпературных диапазонов (1000 – 6000 К), 7 последующих для низкотемпературного диапазона (200 – 1000 К).

**2-ой закон термодинамики:** существует экстенсивная функция состояния, называемая энтропией, изменение которой связано с поглощаемой теплотой и температурой системы уравнением:

**3-ий закон термодинамики:** прим �→0, энтропия системы стремится к постоянной величине. При  �=0 энтропия идеального кристалла равна нулю�0.

Производство энтропии называют еще некомпенсированной теплотой

В закрытой системе (только теплообмен с внешней средой, нет массообмена)

Первое слагаемое отвечает за теплообмен с внешней средой. Второе – производство энтропии – за теплоту, которая потребляется в необратимом процессе (>0). В обратимом процессе она равна нулю.

**Для решения задания 1** необходимо сначала посчитать по полиному NASA энтальпию образования каждого из веществ, воспользовавшись коэффициентами БД, указанной в задании. Затем по следствию из закона Гесса необходимо рассчитать тепловой эффект реакции. Для выполнения 2-го пункта задания 1 необходимо рассчитать теплоёмкость по формуле.

**Для решения задания 2** необходимо воспользоваться квадратом Борна.

**Для решения задания 3** необходимо также воспользоваться полиномом NASA для расчета энтропии и коэффициентами из БД *«Third Millennium»*.

**Код**

**Задание 1**. **(Программа task1.py)**

def H(array, T):  # расчёт энтальпии по формуле на слайде 37 лекции 1

    R = 8.3144

    result = 0

    for i in range(5):

        result += (array[i] / (i + 1)) \* pow(T, i)

    result += array[5] / T

    return result \* R \* T

def Cp(array, T):  # расчёт теплоёмкости по формуле на слайде 37 лекции 1

    R = 8.3144

    result = 0

    for i in range(5):

        result += array[i] \* pow(T, i)

    return result \* R

def main():

    # красные: 1000 - 6000 K

    # синие: 200 - 1000 K

    BLUE\_METHANOL = [5.65851051E+00, -1.62983419E-02, 6.91938156E-05, -7.58372926E-08, 2.80427550E-11, -2.56119736E+04, -8.97330508E-01] # Метанол Third Milenium стр. 68 pdf

    BLUE\_CO = [0.35795335E+01, -0.61035369E-03, 0.10168143E-05, 0.90700586E-09, -0.90442449E-12, -0.14344086E+05, 0.35084093E+01] # Оксид углерода Third Milenium стр. 71 pdf

    BLUE\_H2 = [0.23443029E+01, 0.79804248E-02, -0.19477917E-04, 0.20156967E-07, -0.73760289E-11, -0.91792413E+03, 0.68300218E+00] # Водород Third Milenium стр. 242 pdf

    T = 525

    print("Тепловой эффект реакции синтеза метанола:", round(H(BLUE\_METHANOL, T) - (2\*H(BLUE\_CO, T) + H(BLUE\_H2, T)), 4), "Дж/Моль")  # продукт - реагнеты

    print("Теплоемкость метанола:", round(Cp(BLUE\_METHANOL, T), 4), "Дж/(Кг\*К)")

if \_\_name\_\_ == "\_\_main\_\_":

    main()

**Задание 2**. **(Программа task2.py)**

#задача с смешиванием газов варинат 14

import math

def main():

    T = 298

    P = 101325

    Va = 4 \* pow(10, -4)  # азот N2

    Vb = 7 \* pow(10, -4)  # вода H2O

    R = 8.3144

    na = (P \* Va) / (R \* T)

    nb = (P \* Vb) / (R \* T)

    answer = na \* R \* math.log((Va + Vb) / Va) + nb \* R \* math.log((Va + Vb) / Vb)

    print("Изменение энтропии: ", round(answer, 4), "Дж/К")

if \_\_name\_\_ == "\_\_main\_\_":

    main()

**Задание 3**. **(Программа task3.py)**

# расчёт энтропии вариант 14

import math

def S(array, T):

    R = 8.31

    result = array[0] \* math.log(T)

    for i in range(1, 5):

        result += (array[i]/i)\*math.pow(T, i)

    result += array[6]

    return result \* R

def main():

    T = 250

    BLUE\_C3H4 = [0.26130445E+01, 0.12122575E-01, 0.18539880E-04, 0.12791347E-07, -0.10482247E-10, 0.21541567E+05, 0.10226139E+02] # Third Milenium стр. 68 pdf

    print("Энтропия вещества C3H4 равна:", round(S(BLUE\_C3H4, T), 4), "Дж/К")

if \_\_name\_\_ == "\_\_main\_\_":

    main()

**Результаты расчетов**

Результат работы программы по **заданию 1:**

*Тепловой эффект реакции синтеза метанола: -98698.9086 Дж/Моль*

*Теплоемкость метанола: 60.9439 Дж/(Кг\*К)*

Результат работы программы по **заданию 2:**

*Изменение энтропии: 0.2452 Дж/К*

Результат работы программы по **заданию 3:**

*Энтропия вещества C3H4 равна: 235.3422 Дж/К*