

**TOMSK  
POLYTECHNIC  
UNIVERSITY**



**ТОМСКИЙ  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Инженерная школа природных ресурсов  
Направление подготовки Химическая технология  
Отделение химической инженерии

## **PYTHON ДЛЯ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

### **Отчет по лабораторной работе № 1**

#### **Функции**

Выполнил студент гр. 2ДМ24

\_\_\_\_\_  
(Подпись)

Иванцов П.С.

\_\_\_\_ 2023 г.

Отчет принят:

Преподаватель  
доцент ОХИ ИШПР, к.т.н.

\_\_\_\_\_  
(Подпись)

В.А. Чузлов

\_\_\_\_ 2023 г.

Томск 2023 г.

## Задание 1

Используя исходные данные из примера, рассчитайте, реализовав соответствующие функции:

Состав потока в мольных долях:

$$X_i = \frac{\frac{\omega_i}{M_i}}{\sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{M_i}},$$

где  $X_i$  - мольная доля  $i$ -го компонента;

$\omega_i$  - массовая доля  $i$ -го компонента;

$M_i$  - молярная масса  $i$ -го компонента;

$n$  - число компонентов в системе;

$i$  - индекс компонента в системе.

Плотность потока:

$$\rho = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{M_i}},$$

где  $\rho$  - плотность потока;

$\omega_i$  - массовая доля  $i$ -го компонента;

$\rho_i$  - плотность  $i$ -го компонента;

$n$  - число компонентов в системе;

$i$  - индекс компонента в системе.

Среднюю молекулярную массу потока:

$$m = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{M_i}},$$

где  $m$  - средняя молекулярная масса потока;

$\omega_i$  - массовая доля  $i$ -го компонента;

$M_i$  - молярная масса  $i$ -го компонента;

$n$  - число компонентов в системе;

$i$  - индекс компонента в системе.

Таблица 1 – Исходные данные

Параметр	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	i-C <sub>4</sub>	n-C <sub>4</sub>	i-C <sub>5</sub>	n-C <sub>5</sub>	C <sub>6</sub>
$\omega_i$	0.1	0.1	0.1	0.4	0.2	0.05	0.03	0.02
$\rho_i$ , г/см <sup>3</sup>	0.416	0.546	0.585	0.5510	0.6	0.616	0.6262	0.6594
M <sub>i</sub> , г/моль	16	30	44	58	58	72	72	86

### Программная реализация:

```
def mole_fractions(mass_fractions: list[float], molar_masses: list[float]) -> list[float]:
    inverse_molar_masses = [mf / mm for mf, mm in zip(mass_fractions, molar_masses)]
    total = sum(inverse_molar_masses)
    return [imm / total for imm in inverse_molar_masses]

def flux_density(mass_fractions: list[float], densities: list[float]) -> float:
    inverse_densities = [mf / d for mf, d in zip(mass_fractions, densities)]
    return 1 / sum(inverse_densities)

def average_molecular_mass(mass_fractions: list[float], molar_masses: list[float]) -> float:
    inverse_molar_masses = [mf / mm for mf, mm in zip(mass_fractions, molar_masses)]
    return 1 / sum(inverse_molar_masses)

mf = [.1, .1, .1, .1, .4, .2, .05, .03, .02]
rho = [.416, .546, .585, .5510, .6, .616, .6262, .6594]
mm = [16, 30, 44, 58, 58, 72, 72, 86]

mf_mole_fractions = mole_fractions(mf, mm)
density = flux_density(mf, rho)
avg_molecular_mass = average_molecular_mass(mf, mm)

print("Состав потока в мольных долях:")
for mf in mf_mole_fractions:
    print(f'{mf:8.4f}')

print("\nПлотность потока: {:.4f} г/см³".format(density))
print("Средняя молекулярная масса потока: {:.4f} г/моль".format(avg_molecular_mass))
```

### Ответ:

Состав потока в мольных долях:

0.2572

0.1372

0.0935

0.0710

0.2838

0.1143

0.0286

0.0144

Плотность потока: 0.5284 г/см<sup>3</sup>

Средняя молекулярная масса потока: 41.1560 г/моль

## Задание 2

Пусть на смешение поступают материальные потоки следующего состава (массовые доли):

Поток	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	i-C <sub>4</sub>	n-C <sub>4</sub>	i-C <sub>5</sub>	n-C <sub>5</sub>	C <sub>6</sub>
1	0.1	0.1	0.1	0.4	0.2	0.05	0.03	0.02
2	0.1	0.2	0.1	0.3	0.1	0.15	0.03	0.02
3	0.1	0.1	0.15	0.35	0.1	0.05	0.08	0.07

Расходы потоков 200, 250 и 120 кг/ч, соответственно. Необходимо рассчитать состав итогового потока в массовых долях, реализовав соответствующую функцию.

Состав смесового потока можно найти следующим образом:

$$\omega_i = \frac{\sum_{j=1}^n G_j \cdot \omega_{i,j}}{\sum_{j=1}^n G_j},$$

где  $\omega_i$  – массовая доля  $i$ -го компонента в смесовом потоке;

$\omega_{ij}$  – массовая доля  $i$ -го компонента в  $j$ -ом потоке;

$G_j$  – массовый расход  $j$ -го потока;

$j$  – индекс потока;

$i$  – индекс компонента в системе;

$n$  – число потоков, подаваемых на смешение.

### Программная реализация:

```
def calculate_final_flow_composition(flows: list[list[float]], flow_rates: list[float]) -> list[float]:
    num_components = len(flows[0])
    total_flow_rate = sum(flow_rates)
    final_composition = [0] * num_components

    for j, flow in enumerate(flows):
        for i in range(num_components):
            final_composition[i] += flow[i] * flow_rates[j]

    final_composition = [comp / total_flow_rate for comp in final_composition]
    return final_composition

flows = [
    [0.1, 0.1, 0.1, 0.4, 0.2, 0.05, 0.03, 0.02],
    [0.1, 0.2, 0.1, 0.3, 0.1, 0.15, 0.03, 0.02],
    [0.1, 0.1, 0.15, 0.35, 0.1, 0.05, 0.08, 0.07]
]
flow_rates = [200, 250, 120]

final_flow_composition = calculate_final_flow_composition(flows, flow_rates)

print("Состав смесового потока:")
for comp in final_flow_composition:
    print(f'{comp:8.4f}')
```

**Ответ:**

Состав смесового потока:

0.1000

0.1439

0.1105

0.3456

0.1351

0.0939

0.0405

0.0305

### Задание 3

Абсолютная плотность газов и паров [кг/м<sup>3</sup>] вычисляется по формуле:

$$\rho = \frac{M}{22.4} \cdot \frac{T_0 \cdot P}{T \cdot P_0}$$

где  $M$  – молярная масса газа или пара, [кг/кмоль];

$T_0 = 273.15$  – нормальная температура, [K];

$T$  – температура, при которой определяется плотность, [K];

$P_0 = 101325$  – нормальное давление, [Па];

$P$  – давление, при котором определяется плотность, [Па].

Необходимо реализовать функцию для определения плотности метана (CH<sub>4</sub>) при  $P=200$  кПа и температуре  $T \in [200; 500]$  с шагом  $h=50$  [K].

### Программная реализация:

```
def calculate_density(M: float, T: float, P: float, T0=273.15, P0=101325) -> float:
    return (M / 22.4) * (T0 * P) / (T * P0)

M_CH4 = 16.04
P = 200000

print("Плотность метана (CH4) при P=200кПа:")
for T in range(200, 501, 50):
    density = calculate_density(M_CH4, T, P)
    print(f'At {T} K: {density:.4f} кг/м³')
```

**Ответ:**

Плотность метана (CH<sub>4</sub>) при P=200кПа:

At 200 К: 1.9304 кг/м<sup>3</sup>

At 250 К: 1.5443 кг/м<sup>3</sup>

At 300 К: 1.2869 кг/м<sup>3</sup>

At 350 К: 1.1031 кг/м<sup>3</sup>

At 400 К: 0.9652 кг/м<sup>3</sup>

At 450 К: 0.8579 кг/м<sup>3</sup>

At 500 К: 0.7721 кг/м<sup>3</sup>

**Задание 4**

Коэффициент сжимаемости учитывает отклонение реального газа от уравнения состояния идеального газа. При точных расчетах коэффициент сжимаемости определяют по формуле:

$$z = 1 + \left(\frac{Pr}{Tr}\right) \cdot \left(0.144 + 0.073 \cdot \omega - \left(\frac{0.33 - 0.46 \cdot \omega}{Tr}\right) - \left(\frac{0.138 + 0.5 \cdot \omega}{T^{2r}}\right) - \left(\frac{0.012 + 0.097 \cdot \omega}{T^{3r}}\right) - \left(0.0073 \cdot \frac{\omega}{T^{8r}}\right)\right)$$

где  $\omega$  – ацентрический фактор, вычисляемый по уравнению:

$$\omega = \frac{3}{7} \cdot \frac{\lg Pr - 5}{\frac{T}{Tr \cdot Tb} - 1} - 1$$

$T_r$  - приведенная температура:

$$T_r = \frac{T}{T_c}$$

$P_r=0.2634$  - приведенное давление;

$T_b=272.65$  - температура кипения, [K];

$T_c=425.15$ , [K].

Необходимо реализовать функции для расчета фактора сжимаемости  $z$  при  $T \in [200; 400]$  с шагом  $h=25$  [K].

## Программная реализация:

```
import math

def calculate_acentric_factor(T: float, T_b: float = 272.65, T_c: float = 425.15, P_r: float = 0.2634) -> float:
    T_r = T / T_c
    return (3 / 7) * ((math.log(P_r) - 5) / (T / (T_r * T_b) - 1)) - 1

def calculate_compressibility(T: float, T_c: float = 425.15, P_r: float = 0.2634) -> float:
    T_r = T / T_c
    omega = calculate_acentric_factor(T, T_c=T_c, P_r=P_r)
    z = 1 + (P_r / T_r) * (0.144 + 0.073 * omega - ((0.33 - 0.46 * omega) / T_r) - ((0.138 + 0.5 * omega) / T_r**2) - ((0.012 + 0.097 * omega) / T_r**3) - (0.0073 * omega / T_r**8))
    return z

print("Коэффициент сжимаемости (z) при различных температурах:")
for T in range(200, 401, 25):
    z = calculate_compressibility(T)
    print(f'At {T} K: {z:8.4f}')
```

## Ответ:

Коэффициент сжимаемости (z) при различных температурах:

At 200 K: 17.2649

At 225 K: 8.2943

At 250 K: 4.7466

At 275 K: 3.1001

At 300 K: 2.2359

At 325 K: 1.7393

At 350 K: 1.4347

At 375 K: 1.2392

At 400 K: 1.1096

## Задание 5

Реализуйте функцию, возвращающую словарь, в котором ключами будут имена C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>, а значениями другой словарь, содержащий молекулярную массу, температуру и плотность соответствующих алканов. Общая формула для алканов: C<sub>n</sub>H<sub>2n+2</sub>.

## Программная реализация:

```
import math

def calculate_alkanes_properties():
    alkanes = {}
    for NC in range(1, 6):
        MW = 12 * NC + (2 * NC + 2) * 1
        Tb = 1090 - math.exp(6.9955 - 0.11193 * (NC ** (2/3)))
```

```

rho = 1.07 - math.exp(3.56073 - 2.93886 * (MW ** 0.1))

alkane_name = f"C{NC}"
alkanes[alkane_name] = {
    "Молекулярная масса": MW,
    "Температура кипения (K)": Tb,
    "Плотность (г/см³)": rho
}

return alkanes

alkanes_properties = calculate_alkanes_properties()
for alkane, properties in alkanes_properties.items():
    print(f"{alkane}: {properties}")

```

### Ответ:

C1: {'Молекулярная масса': 16, 'Температура кипения (K)': 113.89515870858975, 'Плотность (г/см³)': 0.3417559246621025}  
 C2: {'Молекулярная масса': 30, 'Температура кипения (K)': 176.00765124564373, 'Плотность (г/см³)': 0.50374382536956}  
 C3: {'Молекулярная масса': 44, 'Температура кипения (K)': 225.04609396969124, 'Плотность (г/см³)': 0.5880575794529687}  
 C4: {'Молекулярная масса': 58, 'Температура кипения (K)': 266.59014842551005, 'Плотность (г/см³)': 0.6426337863150681}  
 C5: {'Молекулярная масса': 72, 'Температура кипения (K)': 303.01066681204486, 'Плотность (г/см³)': 0.6819127875116566}