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 Баранова Д.И.

(Подпись)

\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2023 г.

Отчет принят:

Преподаватель

доцент ОХИ ИШПР, к.т.н. В.А. Чузлов

(Подпись)

\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2023 г.

Томск 2023 г.

**Задание 1**

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

Состав потока в мольных долях:

где - мольная доля i-го компонента; - массовая доля i-го компонента; - молярная масса i-го компонента; - число компонентов в системе; - индекс компонента в системе.

Плотность потока:

где ρ - плотность потока; - массовая доля i-го компонента; - плотность i-го компонента; - число компонентов в системе; - индекс компонента в системе.

Среднюю молекулярную массу потока:

где - средняя молекулярная масса потока; - массовая доля i-го компонента; - молярная масса i-го компонента; - число компонентов в системе; - индекс компонента в системе.

Таблица 1 – Исходные данные

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Параметр | C1 | C2 | C3 | i-C4 | n-C4 | i-C5 | n-C5 | C6 |
| ωi | 0,1 | 0,1 | 0,1 | 0,4 | 0,2 | 0,05 | 0,03 | 0,02 |
| ρi, г/см3 | 0,416 | 0,546 | 0,585 | 0,5510 | 0,6 | 0,616 | 0,6262 | 0,6594 |
| Mi, 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, мольн:")

for mf in mf\_mole\_fractions:

print(f'{mf:8.4f}')

print("\nПлотность потока: {:.4f} г/см³".format(density))

print("Ср. Мол. 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/см³

Средняя молекулярная масса потока: 41,1560 г/моль

**Задание 2**

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

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Поток | C1 | C2 | C3 | i-C4 | n-C4 | i-C5 | n-C5 | C6 |
| 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 смесевого потока можно найти следующим образом:

где – массовая доля i-го компонента в смесевом потоке; – массовая доля i-го компонента в j-ом потоке; – массовый расход j-го потока; – индекс потока; – индекс компонента в системе; – 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 смесевого потока:")

for comp in final\_flow\_composition:

print(f'{comp:8.4f}')

**Ответ**:

Состав смесевого 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/м3] вычисляется по формуле:

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

= 273,15 – нормальная температура, [K];

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

= 101325 – нормальное давление, [Па];

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

Необходимо реализовать функцию для определения плотности метана (CH4) при P=200 кПа и температуре T∈[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 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 при P=200кПа:

1. At 200 K: 1,9304 кг/м³
2. At 250 K: 1,5443 кг/м³
3. At 300 K: 1,2869 кг/м³
4. At 350 K: 1,1031 кг/м³
5. At 400 K: 0,9652 кг/м³
6. At 450 K: 0,8579 кг/м³
7. At 500 K: 0,7721 кг/м³

**Задание 4**

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

где – ацентрический фактор, вычисляемый по уравнению:

- приведенная температура:

=0,2634 - приведенное давление; = 272,65 - температура кипения, [K]; =425,15, [K].

Необходимо реализовать функции для рассчета фактора сжимаемости z при   
T ∈ [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 Т:")

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 Т:

1. At 200 K: 17,2649
2. At 225 K: 8,2943
3. At 250 K: 4,7466
4. At 275 K: 3,1001
5. At 300 K: 2,2359
6. At 325 K: 1,7393
7. At 350 K: 1,4347
8. At 375 K: 1,2392
9. At 400 K: 1,1096

**Задание 5**

Реализуйте функцию, возвращающую словарь, в котором ключами будут имена C1-C5, а значениями другой словарь, содержащий молекулярную массу, темперутару и плотность соответствующих алканов. Общая формула для алканов: CnH2n+2.

**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}