

TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Системный анализ процессов химической технологии

Лабораторная работа №7

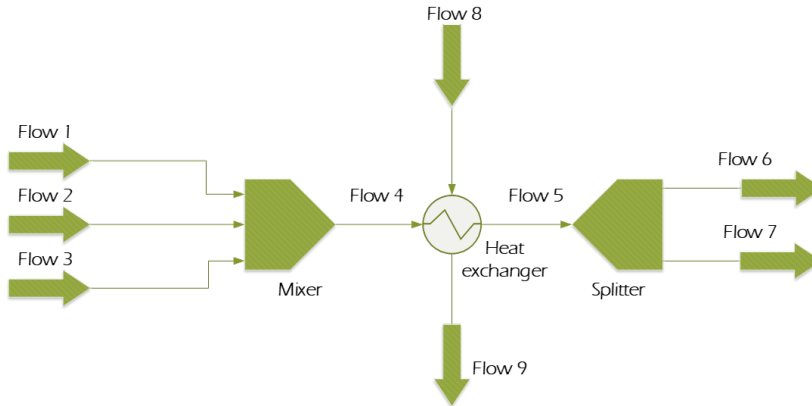
Расчет химико-технологической системы переменной структуры

Вячеслав Алексеевич Чузлов,
к.т.н., доцент ОХИ ИШПР

6 марта 2023 г.

Задача

Рассчитать химико-технологическую систему (определить составы и свойства всех потоков):



Для решения поставленной задачи будет реализована объектная модель: каждый элемент химико-технологической системы будет описан как отдельный класс.

Описание класса Flow

Атрибуты класса	Описание
mass_flow_rate: float	Массовый расход, кг / ч
mole_flow_rate: float	Мольный расход, кмоль / ч
volume_flow_rate: float	Объемный расход, м ³ / ч
mass_fractions: np.ndarray	Массовые доли
mole_fractions: np.ndarray	Мольные доли
volume_fractions: np.ndarray	Объемные доли
temperature: float	Температура потока, К
density: float	Плотность потока, г / см ³
average_mol_mass: float	Средняя молекулярная масса потока, г / моль
cp: float	Массовая теплоемкость потока, кДж / кг
<pre>def __init__(self, mass_flow_rate: float, mass_fractions: np.ndarray, temperature: float) -> None</pre>	Создает новый экземпляр класса Flow, заполняя все поля

Функции для пересчета составов

1. Пересчет массовых долей в объемные:

$$\varphi_i = \frac{\frac{\omega_i}{\rho_i}}{\sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{\rho_i}}$$

где φ_i – объемная доля i -го компонента; ω_i – массовая доля i -го компонента; ρ_i – плотность i -го компонента; n – число компонентов в системе; i – индекс компонента в системе.

2. Пересчет массовых долей в мольные:

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

где χ_i – мольная доля i -го компонента; ω_i – массовая доля i -го компонента; M_i – молярная масса i -го компонента; n – число компонентов в системе; i – индекс компонента в системе.

Функции для расчета плотности и средней молекулярной массы

1. Расчет плотности:

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

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

2. Расчет средней молекулярной массы потока:

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

где m – средняя молекулярная масса потока; ω_i – массовая доля i -го компонента; M_i – молярная масса i -го компонента; n – число компонентов в системе; i – индекс компонента в системе.

Функции для расчета теплоемкости потока

Расчет теплоемкости потока в зависимости от состава потока и температуры среды осуществляется следующим образом:

- определяется теплоемкость компонентов потока при температуре среды:

$$C_{pi} = \sum_{j=1}^5 j \cdot k[i, j] \cdot T^{j-1}$$

где C_{pi} – теплоемкость i -го компонента, кДж / кг; $k[i, j]$ – коэффициенты аппроксимации температурной зависимости энтальпии для i -го компонента; T – температура потока, К;

- определяется общая теплоемкость потока:

$$C_p = \sum_{i=1}^n \omega_i \cdot C_{pi}$$

где ω_i – массовая доля i -го компонента; C_{pi} – теплоемкость i -го компонента, кДж / кг; n – число компонентов в системе.

Численное интегрирование

Вычислим интеграл:

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$$

при помощи функции `scipy.integrate.quad`.

```
[1]: from scipy.integrate import quad
```

```
[2]: def func(x):  
      return 1 / (1 + x ** 2)
```

```
[3]: a, b = 0, 1  
      res = quad(func, a, b)  
      res
```

```
[3]: (0.7853981633974484, 8.719671245021581e-15)
```

Численное интегрирование

- В тех случаях, когда подынтегральная функция принимает один или несколько параметров помимо своего основного аргумента, эти дополнительные параметры могут быть переданы в метод `quad` в виде кортежа в аргументе `args`. Например, определим следующий интеграл в численном выражении:

$$I_{n,m} = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin^n x \cos^m x dx$$

```
[4]: import numpy as np
```

```
[5]: def func(x, n, m):  
      return np.sin(x) ** n * np.cos(x) ** m
```

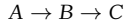
```
[6]: n, m = 2, 3  
      quad(func, -np.pi/2, np.pi/2, args=(n, m))
```

```
[6]: (0.26666666666666666, 2.960594732333751e-15)
```


Система взаимосвязанных ОДУ первого порядка



Рассмотрим следующую схему химических реакций:



с константами скоростей k_1 и k_2 . Уравнения, описывающие скорость изменения концентраций компонентов по времени, записываются следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{d[A]}{dt} = -k_1 [A] \\ \frac{d[B]}{dt} = k_1 [A] - k_2 [B] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_2 [B] \end{cases}$$

Для численного решения предположим $y_1 \equiv [A]$, $y_2 \equiv [B]$ и $y_3 \equiv [C]$:

$$\begin{cases} \frac{d[A]}{dt} = -k_1 y_1 \\ \frac{d[B]}{dt} = k_1 y_1 - k_2 y_2 \\ \frac{d[C]}{dt} = k_2 y_2 \end{cases}$$

Система взаимосвязанных ОДУ первого порядка

Зададимся значениями констант: $k_1 = 0.2 \text{ c}^{-1}$, $k_2 = 0.8 \text{ c}^{-1}$ и начальными условиями: $y_1(0) = 100$, $y_2(0) = 0$, $y_3(0) = 0$.

```
[1]: import numpy as np
      from scipy.integrate import solve_ivp
```

```
[2]: k1, k2 = .2, .8
      y0 = 100, 0, 0
      t0, tf = 0, 20
```

```
[3]: def func(t, y, k1, k2):
      y1, y2, y3 = y
      dy1dt = -k1 * y1
      dy2dt = k1 * y1 - k2 * y2
      dy3dt = k2 * y2

      return dy1dt, dy2dt, dy3dt
```

Система взаимосвязанных ОДУ первого порядка



```
[4]: solution = solve_ivp(
      func, (t0, tf), y0, dense_output=True,
      args=(k1, k2)
    )
    t = np.linspace(t0, tf, 10)
    a, b, c = solution.sol(t)
```

```
[5]: for ai, bi, ci in zip(a, b, c):
      print(f'{ai:>8.2f} {bi:>8.2f} {ci:>8.2f}')
```

100.00	0.00	0.00
64.12	15.74	20.14
41.11	12.75	46.14
26.36	8.63	65.02
16.90	5.61	77.49
10.84	3.61	85.56
6.95	2.31	90.74
4.45	1.49	94.06
2.86	0.95	96.19
1.83	0.61	97.56

TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Задания

Задание 1

Дана зависимость энтальпии от температуры:

T, K	ΔH , кДж/моль
300	29.62
400	21.88
500	15.52
600	10.38
700	6.40
800	3.35
900	1.13
1000	0.21

Определить значения энтальпии при изменении от 300 до 1000 с шагом 50 K, используя:

1. Кубический сплайн;
2. Линейную аппроксимацию.

Задание 2



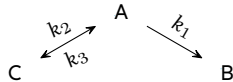
Используя функцию `scipy.integrate.quad`, вычислите значение энтропии воды при ее нагревании от 400 до 500 K по формуле:

$$\Delta S = \eta \cdot \int_{400}^{500} \frac{C_v \cdot dT}{T}$$

Количество молей $\eta = 3$; значение теплоемкости $C_v = 35.0$ Дж / (моль · К).

Задание 3

Дана схема химических превращений:



$$C_{A0} = 0.7 \text{ (моль/л)}; \quad k_1 = 0.21 \text{ (с}^{-1}\text{)};$$

$$C_{B0} = 0.0 \text{ (моль/л)}; \quad k_2 = 0.12 \text{ (с}^{-1}\text{)};$$

$$C_{C0} = 0.0 \text{ (моль/л)}; \quad k_3 = 0.18 \text{ (с}^{-1}\text{)}.$$

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_A + k_3 \cdot C_C \\ \frac{dC_B}{dt} = k_1 \cdot C_A \\ \frac{dC_C}{dt} = k_2 \cdot C_A - k_3 \cdot C_C \end{cases}$$

TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Контакты

Вячеслав Алексеевич Чузлов,
к.т.н., доцент ОХИ ИШПР



Учебный корпус №2, ауд. 136



chuva@tpu.ru



+7-962-782-66-15

Благодарю за внимание!