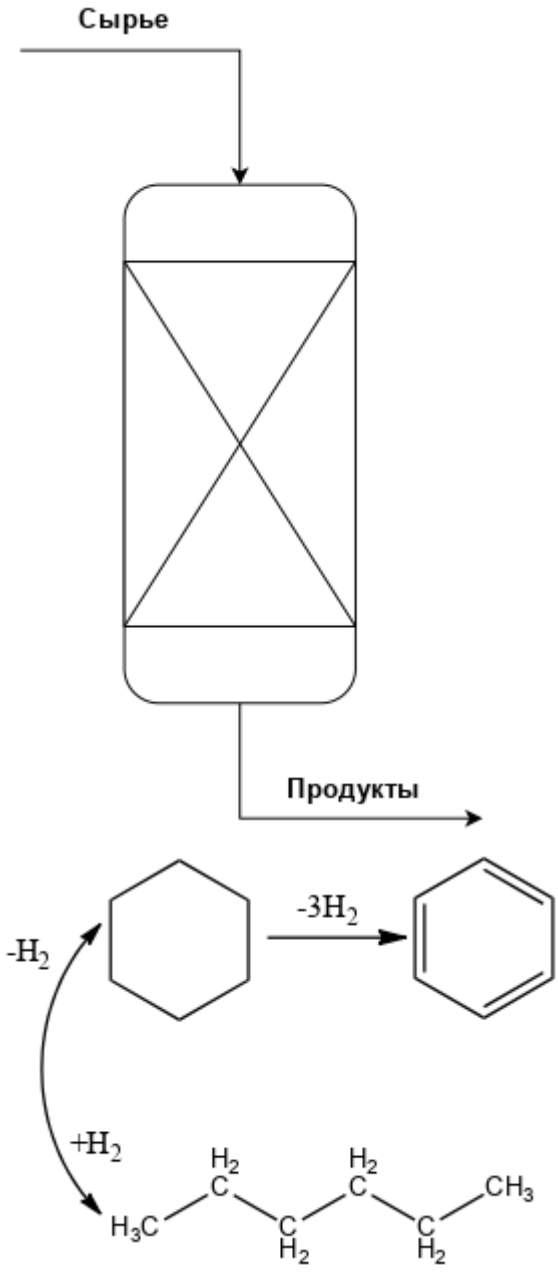
Системный анализ процессов переработки нефти и газа

Лабораторная работа №8

Введение в объектно-ориентированное программирование

Пример

Рассчитать состав продуктов:



Исходные данные:

Компонент	Концентрация, моль/л
$\text{cyclo}-C_6H_{12}$	0.8
$\text{n}-C_6H_{14}$	0.2
C_6H_6	0.0
H_2	0.0

Реакции, представленные на схеме:

1. $\text{cyclo}-C_6H_{12} \longrightarrow C_6H_6 + 3H_2$
2. $\text{cyclo}-C_6H_{12} + H_2 \longrightarrow \text{n}-C_6H_{14}$
3. $\text{n}-C_6H_{14} \longrightarrow \text{cyclo}-C_6H_{12} + H_2$

Скорости реакций:

1. $r_1 = k_1 \cdot [\text{cyclo}-C_6H_{12}]$
2. $r_2 = k_2 \cdot [\text{cyclo}-C_6H_{12}] \cdot [H_2]$
3. $r_3 = k_3 \cdot [\text{n}-C_6H_{14}]$

$$\begin{cases} \dfrac{d\,[\text{cyclo}-C_6H_{12}]}{dt} = -r_1 - r_2 + r_3; \\ \dfrac{d\,[\text{n}-C_6H_{14}]}{dt} = r_2 - r_3; \\ \dfrac{d\,[C_6H_6]}{dt} = r_1; \\ \dfrac{d\,[H_2]}{dt} = 3r_1 - r_2 + r_3 \end{cases}$$

$k_1 = 0.4;\ k_2 = 0.05;\ k_3 = 0.25$
Расход сырья 10 л/с. Объем реактора 15 л.

Реализация класса `Flow`

```python
# flow.py
import numpy as np


class Flow:
    def __init__(
            self,
            volume_flow_rate: float,
            molar_fractions: np.ndarray
        ) -> None:
        self.volume_flow_rate = volume_flow_rate
        self.molar_fractions = molar_fractions
        return
```

```
if __name__ == '__main__':
    ...
```

Реализация класса `Reactor`

```
# reactor.py
import numpy as np
from scipy.integrate import solve_ivp
from typing import Callable
import matplotlib.pyplot as plt
import flow


class Reactor:
    def __init__(self, volume: float) -> None:
        self.volume = volume
        return

    def calculate(
                    self,
                    kinetic_equations: Callable,
            feedstock: flow.Flow,
            args: tuple = (),
            n: int = 50
    ) -> None:
        self.feedstock = feedstock
        self.residence_time = self.volume / self.feedstock.volume_flow_rate
        self.time = np.linspace(0, self.residence_time, n)

        self.solution = solve_ivp(
            fun=kinetic_equations, t_span=(0, self.residence_time),
            y0=self.feedstock.molar_fractions,
            dense_output=True, args=args
        )
        self.products = flow.Flow(
            volume_flow_rate=self.feedstock.volume_flow_rate,
            molar_fractions=self.solution.y[:, -1],
        )
        return

    def draw_profile(
                    self,
                    filename: str = '',
                    labels: list[str] = []
        ) -> None:
        profile = self.solution.sol(self.time)

        if not labels:
            legend = False
```

```
            labels = ('', ) * profile.shape[0]
        else:
            legend = True

        for mf, label in zip(profile, labels):
            plt.plot(self.time, mf, label=label)

        if legend:
            plt.legend()

        plt.xlabel('Время, с')
        plt.ylabel('Концентрация компонента, моль/л')
        plt.tight_layout()

        if filename:
            plt.savefig(filename, dpi=800)

        plt.show()
        return


if __name__ == '__main__':
    ...
```

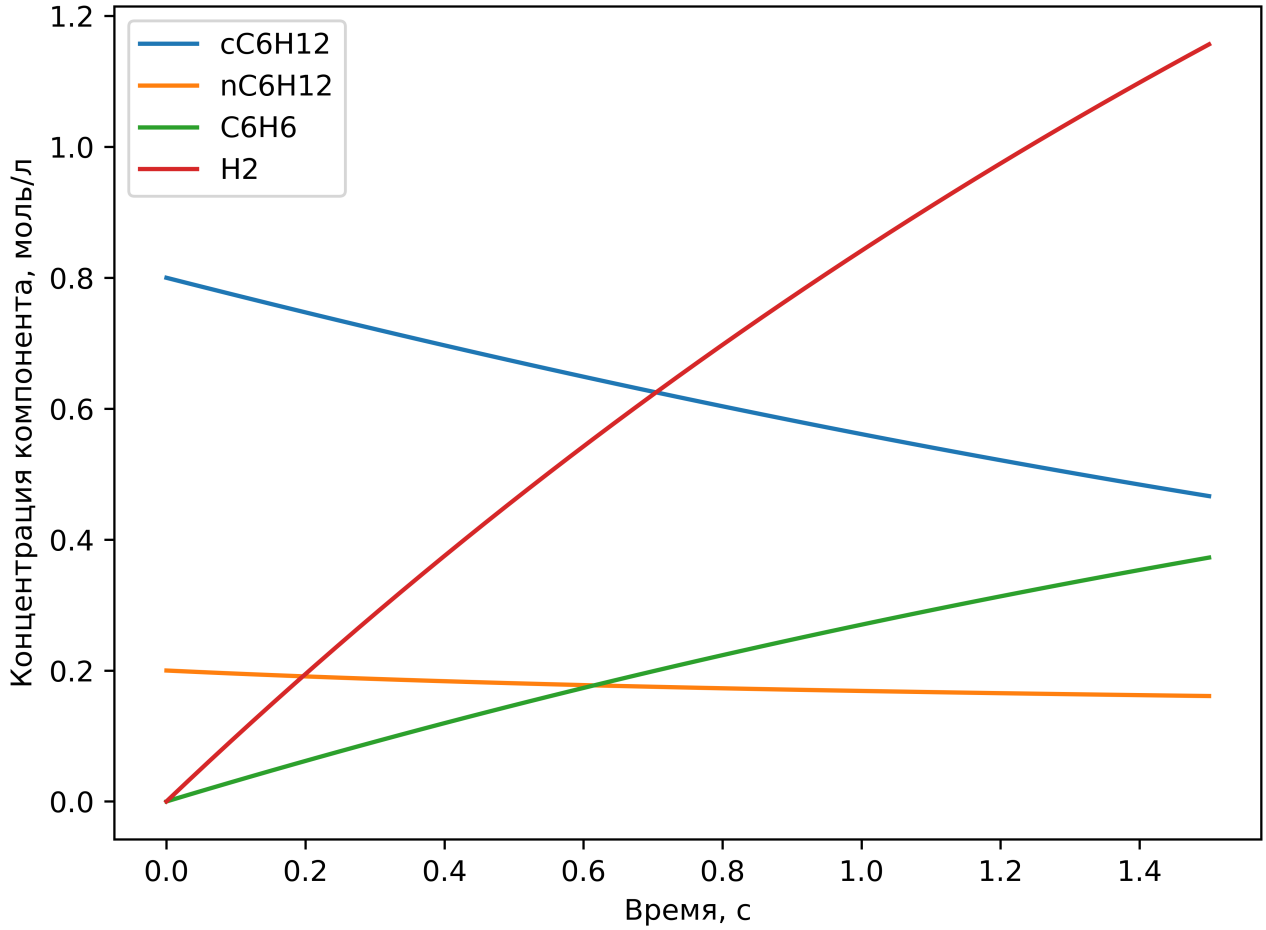
Реализация кинетических уравнений

```
# kinetic.py
import numpy as np


def equations(
                t: float,
                c: np.ndarray,
                k: np.ndarray
) -> np.ndarray:
    cC6H12, nC6H12, C6H6, H2 = c
    k1, k2, k3 = k

    r1 = k1 * cC6H12
    r2 = k2 * cC6H12 * H2
    r3 = k3 * nC6H12

    dcC6H12_dt = -r1 - r2 + r3
    dnC6H12_dt = r2 - r3
    dC6H6_dt = r1
    dH2_dt = 3 * r1 - r2 + r3

    return np.array([dcC6H12_dt, dnC6H12_dt, dC6H6_dt, dH2_dt])
```

```
if __name__ == '__main__':
    ...
```

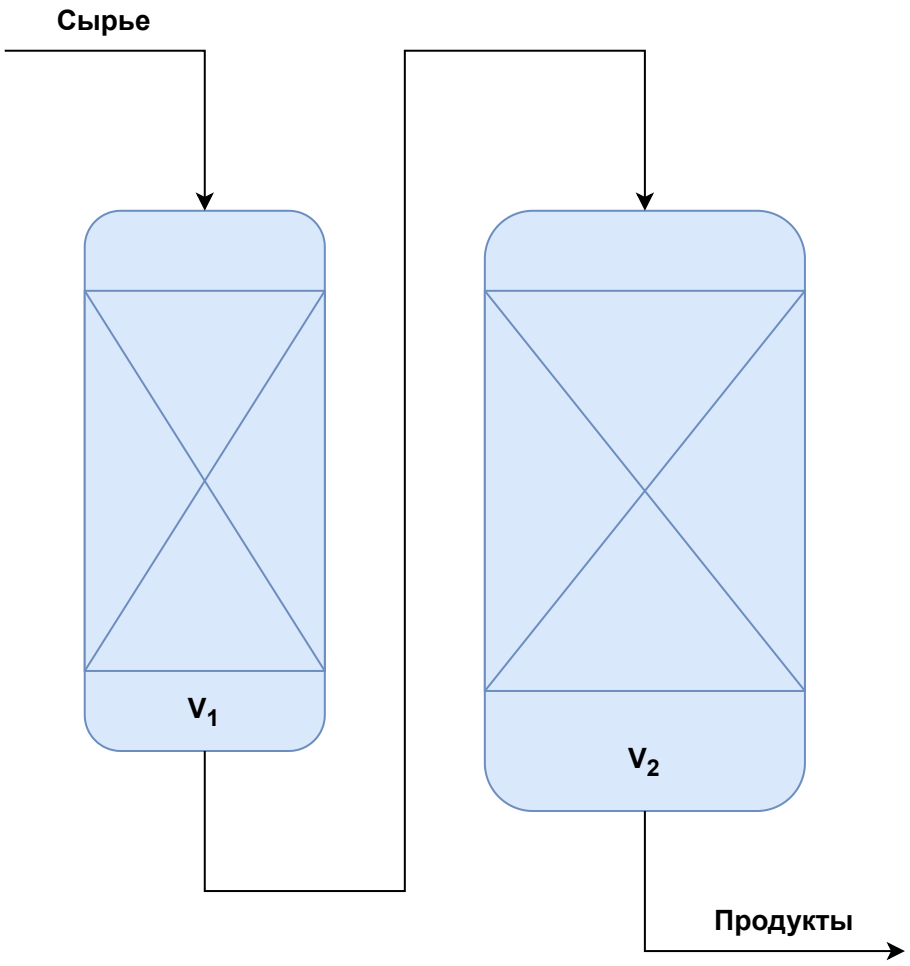
Основная программа:

```
# main.py
import numpy as np
import flow
import reactor
import kinetic


names = 'cC6H12', 'nC6H12', 'C6H6', 'H2'
molar_fractions = np.array([.8, .2, .0, .0])  # моль/л
volume_flow_rate = 10  # л/с
v = 15  # объем реактора, л
k = np.array([.4, .05, .25])


def main() -> None:
    feedstock = flow.Flow(volume_flow_rate=volume_flow_rate,
                          molar_fractions=molar_fractions)
    r1 = reactor.Reactor(v)
    r1.calculate(
            kinetic_equations=kinetic.equations,
        feedstock=feedstock, args=(k, ))
    products = r1.products

    for name, mf in zip(names, products.molar_fractions):
        print(name, mf)

    r1.draw_profile(labels=names, filename='plot.png')
    return


if __name__ == '__main__':
    main()
```



Задание

Дана следующая схема реакторного блока:



1. Необходимо рассчитать состав продуктов. Исходные данные возьмите из примера. Объем реактора V_1 = 15 л, объем реактора V_2 = 1.85 · V_1.
2. Исследуйте влияние объема реактора V_2 на концентрацию бензола в потоке продуктов на интервале $[1.85 \cdot V_1;\ 3.0 \cdot V_1]$, используя сетку из 10-ти значений.