

Семёнов Иван Александрович,

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: semenovia.chem@yandex.ru

Петров Александр Васильевич,

магистрант кафедры ХТТ, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: thehereticanthe@mail.ru

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ НА ЯЗЫКЕ PYTHON

Semenov I.A., Petrov A.V.

PREDICTION OF PROPERTIES AND SIMULATION OF THE PHASE STATE OF MULTICOMPONENT SYSTEMS IN PYTHON

Аннотация. В работе рассмотрен подход к составлению математической модели технологических процессов при помощи языка программирования Python. Даны общие сведения о назначении и возможностях модулей Thermo и Chemical. Показано, что данные модули содержат в себе основные функции, позволяющие прогнозировать физико-химические свойства, а также моделировать фазовые состояния сложных многокомпонентных систем.

Ключевые слова: математическое моделирование, химическая технология, язык программирования Python, физико-химические свойства, фазовые состояния, модуль Thermo, модуль Chemicals.

Abstract. The thesis considers an approach to compiling a mathematical simulation of chemical processes using the Python programming language. General information about the purpose and capabilities of the 'Thermo' and 'Chemical' modules is given. It is shown that these modules contain the main functions and classes that make it possible to predict the properties and to simulate the phase states of multicomponent systems.

Keywords: Mathematical simulation, chemical technology, Python programming language, physical and chemical properties, phase states, 'Thermo' module, 'Chemicals' module.

Точный расчет физико-химических свойств веществ и их смесей имеет важное значение при моделировании и оптимизации химико-технологических процессов. Свойства веществ, такие как плотность, вязкость, теплоемкость и т.п. используют при создании математических моделей химических процессов. Неточные данные о свойствах могут привести к ошибкам при моделировании процесса, что в конечном итоге приведёт к неэффективной работе оборудования при реализации технологического процесса, низкому качеству продукции и угрозе безопасности [1].

Современное математическое моделирование технологических процессов в большинстве случаев подразумевает использование специализированного программного обеспечения, такого как Aspen Hysys, Aspen Plus, PRO/II, ChemCAD, UniSim Design и т.п. Данные программные продукты в обязательном порядке содержат в себе методы расчета основных физико-химических свойств веществ и их смесей, а также имеют в своем составе встроенные базы данных по важным термодинамическим параметрам компонентов. Однако основным недостатком использования таких программных пакетов является их дороговизна. Высокая стоимость делает необоснованным использование их для ре-

шения задач, которые не требуют расчета работы крупных технологических объектов.

Решение малых или нестандартных задач химической технологии требует от специалиста умений самостоятельно составить математическую модель процесса. Простые модели могут быть составлены и решены при помощи математических пакетов, более сложные задачи возможно потребуют написание отдельных программ, например, на языке программирования Python.

Python является универсальным языком программирования, который можно использовать для широкого круга приложений, в том числе и для решения задач в области химической технологии. На текущий момент для Python имеется огромное количество специализированных и свободно распространяемых модулей. Эти модули содержат в себе наборы функций и классов для выполнения всевозможных задач. Для целей расчета физико-химических свойств индивидуальных веществ и их смесей широко используют модули Thermo и Chemicals.

Модуль Chemicals, по своей сути, является базовым для работы модуля Thermo. Он предоставляет доступ к обширной базе данных различных термодинамических констант и параметров веществ (около 20 000 компонентов) и содержит в себе основные методы расчета физико-химических свойств для индивидуальных компонентов в газовом, жидком и твердом состояниях. Все свойства рассчитываются модулем с учетом заданных условий: температуры и давления.

Модуль Thermo, содержащий в себе модуль Chemicals, предоставляет пользователю большой набор функций и методов для расчета свойств не только индивидуальных компонентов, но и их смесей для всех возможных агрегатных состояний. Также модуль позволяет выполнять расчеты фазового равновесия в многокомпонентных системах с помощью имеющихся в нём численных методов.

Используя модуль Thermo можно описать фазовое состояние многокомпонентной системы жидкость – пар при помощи таких моделей равновесия как Wilson, NRTL, UNIFAC и т.п. Для учета неидеальности газовой фазы в модуле содержатся наиболее распространенные уравнения состояния: Пенга–Робинсона (PR), Соаве–Редлиха–Квонга (SRK) и т.п. Эти методы широко используют при моделировании технологических процессов, поскольку они обеспечивают точное предсказание термодинамических свойств в широком диапазоне условий.

Модули Thermo и Chemical могут быть использованы для написания математических моделей процессов химической технологии. Их использование позволяет рассчитывать фазовые состояния сложных смесей и оценивать их физико-химические свойства с учетом неидеальности систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Poling, B.E., Prausnitz, J.M., O'Connell J.P. The Properties of Gas and Liquids. 5th ed. – NY: McGraw-Hill, 2003. – 803 p.