

Python для задач химической технологии

Лабораторная работа № 2

Введение в библиотеки NumPy, SciPy и Matplotlib

Задание 1

Формула нормализованной гауссовой функции со средним значением μ и стандартным отклонением σ :

$$g(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Необходимо написать функцию, основанную на использовании массивов NumPy для вычисления гауссовых функций при $\mu = 0$ и $\sigma^2 = 0.5; 1.0, 1.5$. Использовать сетку из 1000 точек в интервале $-10 \leq x \leq 10$. Постройте графики данных функций.

Задание 2

Уравнение Ван дер Ваальса, описывающее состояние газа, можно записать в виде следующей формулы как зависимость давления p газа от его молярного объема V и температуры T :

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$$

где a и b – специальные молекулярные константы, а $R = 8.314$ Дж / К·моль – универсальная газовая константа.

Формулу легко преобразовать для вычисления температуры по заданному давлению и объему, но ее форма, представляющая молярный объем в отношении к давлению и температуре, является кубическим уравнением:

$$pV^3 - (pb + RT)V^2 + aV - ab = 0$$

Все три корня этого уравнения ниже критической точки (T_c , p_c) являются действительными: наибольший и наименьший соответствуют молярному объему газообразной фазы и жидкой фазы соответственно. Выше критической точки, где не существует жидкая фаза, только один корень является действительным и соответствует молярному объему газа (в этой области его также называют сверхкритической жидкостью, или сверхкритической средой).

Критическая точка определяется по условию $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 p}{\partial V^2}\right)_T = 0$ и для идеального газа Ван дер Ваальса выводятся формулы:

$$T_c = \frac{8a}{27Rb} \quad p_c = \frac{a}{27b^2}$$

Для NH_3 константы Ван дер Ваальса $a = 0.4225$ л² · Па · моль⁻² и $b = 37.07 \times 10^{-6}$ м³ · моль⁻¹.

- Найти критическую точку для аммиака, затем определить молярный объем при комнатной температуре и давлении (298 K , 1 атм) и при следующих условиях (500 K , 12 МПа).
- Изотерма – это множество точек (p , V) при постоянной температуре, соответствующее уравнению состояния газа. Построить изотерму (p в зависимости от V) для аммиака при температуре 350 K , используя уравнение Ван дер Ваальса, и сравнить ее с изотермой при температуре 350 K для идеального газа, уравнение состояния которого имеет вид $p = RT/V$ (принять значения p принадлежащими интервалу $[101\ 325; 10\ 000\ 000]$ Па, 1000 элементов).