

# Python для задач химической технологии

## Лабораторная работа №3

### Введение в библиотеки NumPy, SciPy и Matplotlib (продолжение)

#### Задание 1

Дана зависимость давления паров вещества от температуры:

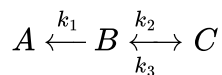
| $T, ^\circ\text{C}$ | $p, \text{атм}$ |
|---------------------|-----------------|
| 40                  | 0.2453          |
| 50                  | 0.5459          |
| 60                  | 1.2151          |
| 70                  | 2.7042          |
| 80                  | 6.0184          |
| 90                  | 13.3943         |
| 100                 | 29.8096         |

Определить значения давления паров при  $T \in [40; 100]$  с шагом  $5^\circ\text{C}$ , используя:

- Кубический сплайн;
- Одну из аппроксимирующих функций: проверить линейную, степенную и экспоненциальную аппроксимирующие функции, выбрать наиболее подходящую (по значению суммарной ошибки) и провести расчеты с использованием данной функции.

#### Задание 2

Дана схема химических превращений:



$$\begin{aligned} C_{A_0} &= 0.8 \text{ (моль/л);} & k_1 &= 0.8 \text{ (с}^{-1}\text{);} \\ C_{B_0} &= 0.2 \text{ (моль/л);} & k_2 &= 0.96 \text{ (с}^{-1}\text{);} \\ C_{C_0} &= 0.0 \text{ (моль/л);} & k_3 &= 0.1 \text{ (с}^{-1}\text{).} \end{aligned}$$

Решите систему дифференциальных уравнений изменения концентраций веществ во времени при помощи функции `scipy.integrate.solve_ivp()` на отрезке  $[0; 5]$  с шагом  $h = 0.1$ . По результатам расчетов постройте зависимость  $C(t)$  для каждого компонента при помощи библиотеки `matplotlib`.

### Задание 3

Используя функцию `scipy.integrate.quad()` для вычисления значения энтропии воды при ее нагревании от 400 до 500 К по формуле:

$$\Delta S = \eta \int\limits_{400}^{500} \frac{C_v(T)dT}{T}$$
$$C_v(T) = R \sum\limits_{j=1}^{12} A_j \tau^{j-1}$$
$$\tau = 1 - T/T_c$$

где  $T$  - температура, К;  $\eta = 3$  - количество молей;  $C_v$  - теплоемкость, Дж/(моль К);  $R$  - универсальная газовая постоянная;  $T_c = 647.126$  - критическая температура, К.

Коэффициенты полинома  $A(1) - A(12)$ :

| Коэффициент | Значение     |
|-------------|--------------|
| $A_1$       | 7.4305055    |
| $A_2$       | -24.93618016 |
| $A_3$       | 195.5654567  |
| $A_4$       | 1986.485797  |
| $A_5$       | -53305.43411 |
| $A_6$       | 505697.1723  |
| $A_7$       | -2724774.677 |
| $A_8$       | 9167737.673  |
| $A_9$       | -19622033.78 |
| $A_{10}$    | 25984725.33  |
| $A_{11}$    | -19419431.35 |
| $A_{12}$    | 6263206.554  |