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:

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

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 $-10 \leqslant x \leqslant 10$. 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 $(\partial p/\partial V)_T = \left(\partial^2 p/\partial V^2\right)_T = 0$ и для идеального газа Ван дер Ваальса выводятся формулы:

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

Для NH_3 константы Ван дер Ваальса $a = 0.4225\ л^2 \cdot Па \cdot м^6 \cdot моль^{-2}$ и $b = 37.07 \times 10^{-6}\ м^3 \cdot моль^{-1}$.

- Найти критическую точку для аммиака, затем определить молярный объем при комнатной температуре и давлении (298 К, 1 атм) и при следующих условиях (500 К, 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 К, используя уравнение Ван дер Ваальса, и сравнить ее с изотермой при температуре 350 К для идеального газа, уравнение состояния которого имеет вид $p = RT/V$ (принять значения p принадлежащими интервалу $[101325; 1000000]$ Па, 1000 элементов).

Задание 3

Закон Бугера–Ламберта–Бера связывает концентрацию вещества c в образце раствора с интенсивностью света, проходящего через этот образец I_t с заданной толщиной слоя вещества l при известной длине волны λ:

$$I_t = I_0 e^{-\alpha c l}$$

где I_0 - интенсивность света на входе в вещество, α - коэффициент поглощения при длине волны λ.

После проведения ряда измерений, позволяющих определить часть света, которая прошла сквозь раствор, I_t/I_0, коэффициент поглощения α можно при помощи линейной аппроксимации:

$$y = \ln\left(I_t/I_0\right) = -\alpha c l$$

Несмотря на то что эта прямая проходит через начало координат ($y = 0$ при $c = 0$), мы будем выполнять подгонку для более общего линейного отношения:

$$y = mc + k$$

где $m = -\alpha l$ с проверкой k на приближение к нулю.

При рассмотрении образца раствора с толщиной слоя 0.8 см при измерениях были получены данные, приведенные в таблице: отношение I_t/I_0 при пяти различных концентрациях:

С, моль/л	I_t/I_0
0.4	0.891
0.6	0.841
0.8	0.783

C, моль/л	I_t/I_0
1.0	0.744
1.2	0.692

Используя линейную аппроксимацию, определите коэффициент α.