

TOMSK  
POLYTECHNIC  
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

# Системный анализ процессов химической технологии

Лабораторная работа №6  
Библиотека SciPy

---

Вячеслав Алексеевич Чузлов,  
к.т.н., доцент ОХИ ИШПР

26 февраля 2023 г.

# Интерполяция

Дана таблица значений теплоемкости вещества при различной температуре ( $C_p = f(T)$ ):

$T$	300	400	500	600
$C_p$	52.89	65.61	78.07	99.24

Используя кубический сплайн, необходимо вычислить значение теплоемкости в точке  $T = 450$  K.

```
[1]: import numpy as np  
      from scipy.interpolate import interp1d
```

```
[2]: t = np.array([300, 400, 500, 600])  
      cp = np.array([52.89, 65.61, 78.07, 99.24])
```

```
[4]: cubic = interp1d(t, cp, kind='cubic')
```

```
[5]: t_new = 450  
      cp_new = cubic(t_new)  
      cp_new
```

```
[5]: array(71.311875)
```

# Аппроксимация

Дана табличная зависимость теплоемкости вещества от температуры.

$T, K$	300	400	500	600	700	800
$C_p, Дж/(моль \cdot K)$	6.97	7.01	7.12	7.28	7.45	7.62

Необходимо построить линейную, степенную и экспоненциальную аппроксимирующие функции и найти значение теплоемкости при температуре  $T = 750 K$ .

- Линейная функция:

$$y = a_0 + a_1 \cdot x$$

где  $a_0$  и  $a_1$  – коэффициенты.

- Степенная функция:

$$y = a \cdot x^b$$

где  $a$  и  $b$  – коэффициенты.

- Экспоненциальная функция:

$$y = a \cdot e^{b \cdot x}$$

где  $a$  и  $b$  – коэффициенты.

# Аппроксимация



```
[1]: import numpy as np
      from scipy.optimize import leastsq
```

```
[2]: def linear(x, params):
      a0, a1 = params
      return a0 + a1 * x

      def power(x, params):
          a, b = params
          return a * x ** b

      def exponential(x, params):
          a, b = params
          return a * np.exp(b * x)

      def residuals(params, x, y, func):
          return y - func(x, params)
```

```
[3]: t = np.array([300, 400, 500, 600, 700, 800])
      cp = np.array([6.97, 7.01, 7.12, 7.28, 7.45, 7.62])
      t_new = 750
```

# Аппроксимация

## ■ Линейная аппроксимация:

```
[4]: linear_params, *_ = leastsq(residuals, x0=(.5, .5), args=(t, cp, linear))
cp_linear = linear(t_new, linear_params)
```

## ■ Степенная аппроксимация:

```
[5]: pow_params, *_ = leastsq(residuals, x0=(.5, .5), args=(t, cp, power))
cp_pow = power(t_new, pow_params)
```

## ■ Экспоненциальная аппроксимация:

```
[6]: exp_params, *_ = leastsq(residuals, x0=(0, 0), args=(t, cp, exponential))
cp_exp = exponential(t_new, exp_params)
```

## ■ Результаты расчетов:

```
[7]: cp_linear, cp_pow, cp_exp
```

```
[7]: (7.511952382705517, 7.488062393161231, 7.514461422236188)
```

# Численное интегрирование

Вычислим интеграл:

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$$

при помощи функции `scipy.integrate.quad`.

```
[1]: from scipy.integrate import quad
```

```
[2]: def func(x):  
      return 1 / (1 + x ** 2)
```

```
[3]: a, b = 0, 1  
      res = quad(func, a, b)  
      res
```

```
[3]: (0.7853981633974484, 8.719671245021581e-15)
```

## Численное интегрирование

- В тех случаях, когда подынтегральная функция принимает один или несколько параметров помимо своего основного аргумента, эти дополнительные параметры могут быть переданы в метод `quad` в виде кортежа в аргументе `args`. Например, определим следующий интеграл в численном выражении:

$$I_{n,m} = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin^n x \cos^m x dx$$

```
[4]: import numpy as np
```

```
[5]: def func(x, n, m):  
      return np.sin(x) ** n * np.cos(x) ** m
```

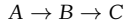
```
[6]: n, m = 2, 3  
      quad(func, -np.pi/2, np.pi/2, args=(n, m))
```

```
[6]: (0.26666666666666666, 2.960594732333751e-15)
```

# Система взаимосвязанных ОДУ первого порядка



Рассмотрим следующую схему химических реакций:



с константами скоростей  $k_1$  и  $k_2$ . Уравнения, описывающие скорость изменения концентраций компонентов по времени, записываются следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{d[A]}{dt} = -k_1 [A] \\ \frac{d[B]}{dt} = k_1 [A] - k_2 [B] \\ \frac{d[C]}{dt} = k_2 [B] \end{cases}$$

Для численного решения предположим  $y_1 \equiv [A]$ ,  $y_2 \equiv [B]$  и  $y_3 \equiv [C]$ :

$$\begin{cases} \frac{d[A]}{dt} = -k_1 y_1 \\ \frac{d[B]}{dt} = k_1 y_1 - k_2 y_2 \\ \frac{d[C]}{dt} = k_2 y_2 \end{cases}$$



# Система взаимосвязанных ОДУ первого порядка

Зададимся значениями констант:  $k_1 = 0.2 \text{ c}^{-1}$ ,  $k_2 = 0.8 \text{ c}^{-1}$  и начальными условиями:  $y_1(0) = 100$ ,  $y_2(0) = 0$ ,  $y_3(0) = 0$ .

```
[1]: import numpy as np
      from scipy.integrate import solve_ivp
```

```
[2]: k1, k2 = .2, .8
      y0 = 100, 0, 0
      t0, tf = 0, 20
```

```
[3]: def func(t, y, k1, k2):
      y1, y2, y3 = y
      dy1dt = -k1 * y1
      dy2dt = k1 * y1 - k2 * y2
      dy3dt = k2 * y2

      return dy1dt, dy2dt, dy3dt
```

## Система взаимосвязанных ОДУ первого порядка



```
[4]: solution = solve_ivp(  
    func, (t0, tf), y0, dense_output=True,  
    args=(k1, k2)  
)  
t = np.linspace(t0, tf, 10)  
a, b, c = solution.sol(t)
```

```
[5]: for ai, bi, ci in zip(a, b, c):  
    print(f'{ai:>8.2f} {bi:>8.2f} {ci:>8.2f}')
```

100.00	0.00	0.00
64.12	15.74	20.14
41.11	12.75	46.14
26.36	8.63	65.02
16.90	5.61	77.49
10.84	3.61	85.56
6.95	2.31	90.74
4.45	1.49	94.06
2.86	0.95	96.19
1.83	0.61	97.56

TOMSK  
POLYTECHNIC  
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

# Задания

## Задание 1

Дана зависимость энтальпии от температуры:

T, K	$\Delta H$ , кДж/моль
300	29.62
400	21.88
500	15.52
600	10.38
700	6.40
800	3.35
900	1.13
1000	0.21

Определить значения энтальпии при изменении от 300 до 1000 с шагом 50 K, используя:

1. Кубический сплайн;
2. Линейную аппроксимацию.

## Задание 2



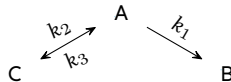
Используя функцию `scipy.integrate.quad`, вычислите значение энтропии воды при ее нагревании от 400 до 500 K по формуле:

$$\Delta S = \eta \cdot \int_{400}^{500} \frac{C_v \cdot dT}{T}$$

Количество молей  $\eta = 3$ ; значение теплоемкости  $C_v = 35.0$  Дж / (моль · К).

### Задание 3

Дана схема химических превращений:



$$C_{A0} = 0.7 \text{ (моль/л)}; \quad k_1 = 0.21 \text{ (с}^{-1}\text{)};$$

$$C_{B0} = 0.0 \text{ (моль/л)}; \quad k_2 = 0.12 \text{ (с}^{-1}\text{)};$$

$$C_{C0} = 0.0 \text{ (моль/л)}; \quad k_3 = 0.18 \text{ (с}^{-1}\text{)}.$$

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_A + k_3 \cdot C_C \\ \frac{dC_B}{dt} = k_1 \cdot C_A \\ \frac{dC_C}{dt} = k_2 \cdot C_A - k_3 \cdot C_C \end{cases}$$

Решите систему дифференциальных уравнений изменения концентраций веществ по времени на отрезке  $[0; 10]$  с шагом  $h = 1$ .

TOMSK  
POLYTECHNIC  
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

# Контакты

Вячеслав Алексеевич Чузлов,  
к.т.н., доцент ОХИ ИШПР



Учебный корпус №2, ауд. 136



[chuva@tpu.ru](mailto:chuva@tpu.ru)



+7-962-782-66-15

**Благодарю за внимание!**