

Системный анализ процессов переработки нефти и газа

Лабораторная работа №4

Введение в библиотеку SciPy. Визуализация данных при помощи библиотеки Matplotlib

Задание 1

Закон Бугера–Ламберта–Бера связывает концентрацию c вещества 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 найти при помощи линейной аппроксимации:

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

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
1.0	0.744
1.2	0.692

Используя линейную аппроксимацию, определите коэффициент α . Постройте график по табличным данным и результатам аппроксимации.

Задание 2

Дана зависимость давления паров вещества от температуры:

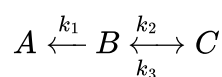
$T, ^\circ\text{C}$	$p, \text{ атм}$
40	0.2453
50	0.5459
60	1.2151
70	2.7042
80	6.0184
90	13.3943
100	29.8096

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

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

Задание 3

Дана схема химических превращений:



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

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 4

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

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

$$C_v(T) = R \sum_{j=1}^{12} A_j \tau^{j-1}$$

$$\tau = 1 - T/T_c$$

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