

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

28 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
```

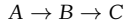
```
[6]: n, m = 2, 3  
      quad(func, -np.pi/2, np.pi/2, args=(n, m))
```

```
[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 | ΔH , 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



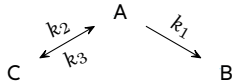
Используя функцию `scipy.integrate.quad`, вычислите значение энтропии воды при ее нагревании от 400 до 500 K по формуле:

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

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

Задание 3

Дана схема химических превращений:



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

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

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

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

TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Контакты

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



Учебный корпус №2, ауд. 136



chuva@tpu.ru



+7-962-782-66-15

Благодарю за внимание!