

# Системный анализ процессов переработки нефти и газа

## Лабораторная работа №3

### Введение в библиотеку NumPy

#### Задание 1

Заполните матрицу  $a$  (5, 10) случайными целыми числами  $\in [-10; 10]$ . Выведите значения ее элементов на экран.

1. Найдите произведение минимального элемента матрицы на сумму ее четных элементов. Выведите результат.
2. Найдите столбец матрицы с минимальной суммой положительных элементов и выведите индекс этого столбца.

#### Задание 2

По имеющимся исходным данным, используя массивы NumPy, определите:

1. Состав потока в мольных долях:

$$\chi_i = \frac{\frac{\omega_i}{M_i}}{\sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{M_i}}$$

где  $\chi_i$  - мольная доля  $i$ -го компонента;  $\omega_i$  - массовая доля  $i$ -го компонента;  $M_i$  - молярная масса  $i$ -го компонента;  $n$  - число компонентов в системе;  $i$  - индекс компонента в системе.

2. Плотность потока:

$$\rho = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{\rho_i}}$$

где  $\rho$  - плотность потока;  $\omega_i$  - массовая доля  $i$ -го компонента;  $\rho_i$  - плотность  $i$ -го компонента;  $n$  - число компонентов в системе;  $i$  - индекс компонента в системе.

3. Среднюю молекулярную массу потока:

$$m = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{M_i}}$$

где  $m$  - средняя молекулярная масса потока;  $\omega_i$  - массовая доля  $i$ -го компонента;  $M_i$  - молярная масса  $i$ -го компонента;  $n$  - число компонентов в системе;  $i$  - индекс компонента в системе.

## Исходные данные

Параметр	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$iC_4$	$nC_4$	$iC_5$	$nC_5$	$nC_6$
$\omega_i$	0.1	0.1	0.1	0.4	0.2	0.05	0.03	0.02
$\rho_i$ , г/см <sup>3</sup>	0.416	0.546	0.585	0.5510	0.6	0.616	0.6262	0.6594
$M_i$ , г/моль	16	30	44	58	58	72	72	86

Вычисления необходимо реализовать в **виде функций**.

## Задание 3

Дана температурная зависимость кинематической вязкости воды:

T [°C]	0	21.1	37.8	54.4	71.1	87.8	100
$\mu_k$ [10 <sup>-3</sup> м <sup>2</sup> /с]	1.79	1.13	0.696	0.519	0.338	0.321	0.296

- Используя метод `fit()` класса `numpy.polynomial.Polynomial` подберите степень полинома (ограничим поиск в пределах 1-4). В качестве критерия используйте среднеквадратичную ошибку:

$$MSE = \frac{1}{n} \times \sum_{i=1}^n (y_i - \tilde{y}_i)^2$$

где MSE - среднеквадратичная ошибка;  $n$  - количество наблюдений;  $y_i$  - фактическое значение;  $\tilde{y}_i$  - предсказанное значение.

- Используя полином с выбранной в пункте 1 степенью, определите значения  $\mu_k$  при  $T = 10^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $60^\circ$  и  $90^\circ$  C.

## Задание 4

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/(моль · К) – универсальная газовая постоянная.

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

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

Для этана ( $C_2H_6$ ) константы Ван-дер-Ваальса  $a = 0.5580 \text{ л}^2 \cdot \text{Па} \cdot \text{м}^6 \cdot \text{моль}^{-2}$  и  $b = 65.1 \times 10^{-6} \text{ м}^3 \cdot \text{моль}^{-1}$ .

- Реализовать функцию для нахождения критической точки газа по уравнению Ван-дер-Ваальса.
- Реализовать функцию для нахождения молярного объема газа с учетом критической точки. Определить молярный объем при комнатной температуре и давлении (298 К, 101325 Па) и при следующих условиях: температура 500 К, давление  $12 \times 10^6$  Па.

**Совет:** используйте класс `numpy.polynomial.Polynomial` для кубического уравнения и нахождения его корней. Проверить является ли число действительным можно при помощи функции `numpy.isreal()`

(<https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.isreal.html>).

Получить действительную часть числа, представленного в комплексном виде, можно при помощи атрибута `real`:

```
import numpy as np
a = np.array([1+0.5j, 10, 2+0j])
print(a.real) # array([ 1., 10.,  2.]
```

## Задание 5

Двухпараметрическое уравнение состояния Редлиха-Квонга имеет следующий вид:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{T^{0.5}V(V + b)}$$

где  $P$  - давление, Па;  $T$  - абсолютная температура, К;  $V$  - молярный объем,  $\text{м}^3/\text{моль}$ ;  $R = 8.314$  - универсальная газовая постоянная, Дж/(моль · К).

Константы  $a$  и  $b$  зависят от конкретного вещества и вычисляются по следующим формулам:

$$a = \frac{1}{9 \cdot \left(\sqrt[3]{2} - 1\right)} \frac{R^2 T_c^{2.5}}{P_c}$$
$$b = \frac{\sqrt[3]{2} - 1}{3} \frac{R T_c}{P_c}$$

где  $T_c$  - критическая температура, К;  $P_c$  - критическое давление, Па.

Уравнение состояния Редлиха-Квонга можно записать относительно коэффициента сжимаемости  $Z$ :

$$Z^3 - Z^2 + (A - B^2 - B)Z - AB = 0$$

где  $A = \frac{aP}{R^2 T^{2.5}}$ ;  $B = \frac{bP}{RT}$ .

С учетом того, что коэффициент сжимаемости  $Z = \frac{PV}{RT}$ , плотность газа может быть выражена следующим образом:

$$\rho = \frac{M \cdot P}{R \cdot T \cdot Z}$$

где  $\rho$  - плотность газа, кг/м<sup>3</sup>;  $M$  - молярная масса газа, кг/моль.

- 1. Необходимо реализовать функции для вычисления коэффициента сжимаемости и плотности реального газа с использованием библиотеки NumPy.
- 2. Рассчитать плотность пропана при атмосферном давлении, значения  $T$  принять принадлежащими интервалу [273.15, 298.15] К, 10 элементов.

Свойства пропана

Свойство	Значение	Единицы измерения
Молярная масса	0.0441	кг/моль
Критическая температура, $T_c$	370	К
Критическое давление, $P_c$	4.27	МПа

*Примичание:* при решении кубического уравнения выбирается максимальный действительный корень.