

# Системный анализ процессов переработки нефти и газа

## Лабораторная работа №1

### Структуры данных. Функции

#### Задание 1

Уравнение Михаэлиса-Ментен - наиболее известная модель ферментативных кинетических реакций:

$$v = \frac{d[P]}{dt} = \frac{V_{max} \cdot [S]}{K_m + [S]}$$

где  $v$  - скорость реакции, преобразующей субстрат  $S$  в продукт  $P$  и катализируемой ферментом.  $V_{max}$  - максимальная скорость реакции (когда все ферменты связаны с субстратом  $S$ ), а константа Михаэлиса  $K_m$  - это концентрация субстрата, при которой скорость реакции составляет половину от ее максимального значения.

Необходимо написать функцию для расчета скорости ферментативной реакции и рассчитать с ее помощью значение  $v$  при  $S \in [0.01, 0.1]$  с шагом 0.01 М. Принять  $K_m = 0.04$  М;  $V_{max} = 0.1$  М/с.

#### Задание 2

Молекула  $A$  вступает в реакцию образования продуктов  $B$  и  $C$  с константами скорости реакции первого порядка  $k_1$  и  $k_2$  соответственно. Таким образом:

$$\frac{d[A]}{dt} = -(k_1 + k_2) \cdot [A]$$

следовательно:

$$[A] = [A]_0 \cdot e^{-(k_1+k_2) \cdot t}$$

где  $[A]_0$  - начальная концентрация  $A$ . Значения концентрации продуктов (начиная с 0) увеличиваются в соответствии с соотношением  $[B]/[C] = k_1/k_2$ , в то время как закон сохранения вещества требует соблюдения условия  $[B] + [C] = [A]_0 - [A]$ . Таким образом:

$$[B] = \frac{k_1}{(k_1 + k_2)} [A]_0 \left(1 - e^{-(k_1+k_2) \cdot t}\right)$$

$$[C] = \frac{k_2}{(k_1 + k_2)} [A]_0 \left(1 - e^{-(k_1+k_2) \cdot t}\right)$$

Необходимо реализовать функцию для расчета значений концентрации компонентов  $A$ ,  $B$  и  $C$  и найти с ее помощью значения концентраций данных веществ для  $t \in [0, 1]$  шагом 0.1с. Начальная концентрация реагента  $[A]_0 = 2.0$  моль/дм<sup>3</sup>; константы скорости реакций:  $k_1 = 3$ ,  $k_2 = 1.5$  с<sup>-1</sup>.

### Задание 3

Определение концентрации ионов  $[H^+]$  в растворе с учетом константы диссоциации кислоты  $K_a$  и концентрации кислоты  $c$  происходит посредством последовательного применения формулы:

$$[H^+]_{n+1} = \sqrt{(K_a \cdot (c - [H^+]_n))}$$

при начальном значении  $[H^+]_n = 0.0$ . Итерации продолжаются до тех пор, пока изменение значения  $[H^+]$  не станет меньше, чем некоторая предварительно заданная малая пороговая величина допустимого отклонения. Величину допустимого отклонения принять  $\varepsilon = 1.0E-10$ .

Название	Формула	$pK_a$
Азотистая	$HNO_2$	3.35
Уксусная	$CH_3COOH$	4.76
Угольная	$H_2CO_3$	6.37
Сероводородная	$H_2S$	6.92
Хлорноватистая	$HClO$	7.25
Бромноватистая	$HBrO$	8.7
Ортотеллуровая	$H_6TeO_6$	8.8

$pH$  раствора ( $pH = -\lg [H^+]$ );  $pK_a = -\lg (K_a)$ . Концентрацию кислоты принять  $c = 0.01$  М.

Составьте функцию для расчета pH кислоты. Используя данную функцию, рассчитайте:

1. Зависимость pH от концентрации азотистой кислоты при значениях  $c \in [0.01, 0.1]$  с шагом 0.01 М.
2. Зависимость pH от показателя константы диссоциации кислоты при постоянной концентрации  $c = 0.01$  М. Значения показателей констант диссоциации взять из таблицы.

### Задание 4

Реализуйте функцию, возвращающую словарь, в котором ключами будут имена  $C_1$ - $C_5$ , а значениями другой словарь, содержащий молекулярную массу, температуру и плотность соответствующих алканов. Общая формула для алканов:  $C_nH_{2n+2}$ .

1. Температуру кипения можно определить по следующей формуле:

$$T_b = 1090 - \exp \left( 6.9955 - 0.11193 \cdot N_C^{2/3} \right)$$

где  $N_C$  - число атомов углерода в молекуле алкана.

2. Формула для вычисления плотности:

$$\rho = 1.07 - \exp \left( 3.56073 - 2.93886 \cdot MW^{0.1} \right)$$

где  $MW$  - молекулярная масса алкана.