|  |
| --- |
| МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ |
| ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  высшего образования |
| **Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»** |

КАФЕДРА №97

«Суперкомпьютерное моделирование в инженерно-физических процессах»

**ОТЧЁТ**

**Лабораторная работа по предмету «Химическая кинетика»**

**на тему:**

**«Сравнение моделей идеального газа и газа Ван-Дер-Ваальса»**

Выполнил:

студент группы Б21-221 Чурсин Алексей Владимирович

Проверила: Богданова Юлия Андреевна

г. Москва, 2024

Оглавление

[Постановка задачи 3](#_Toc179918816)

[Теоретическая часть 4](#_Toc179918817)

[Ход работы 6](#_Toc179918818)

[Результаты 7](#_Toc179918819)

[Источники 12](#_Toc179918820)

[Приложения 13](#_Toc179918821)

# Постановка задачи

Необходимо:

1. Выполнить моделирование изотермического сжатия вещества с использованием различных моделей уравнений состояния:

* Уравнение состояния идеального газа
* Уравнение газа Ван-Дер-Ваальса

1. Необходимо определить критические параметры и сравнить результаты с данными эксперимента.
2. Построить графики зависимости давления от плотности при следующих температурах: 300К, 500К, 1000К.
3. Построить графики зависимости температуры от плотности при следующих давлениях: 1 атм, 100 атм, 500 атм.

В работе исследуется – вода в состоянии пара, молярная масса воды:

Поправочные коэффициенты для паров воды равны:

# Теоретическая часть

В работе используются различные уравнения состояния, такие, как:

1. Уравнение состояния идеального газа (для одного моля)

где *p* – давление газа на один моль, – плотность газа на один моль, *T* – температура газа (в градусах Кельвина), *M* – молярная масса вещества, R – универсальная газовая постоянная.

1. Уравнение Ван-Дер-Ваальса (для одного моля)

где и – поправки к уравнению идеального газа. Поправка учитывает силы притяжения между молекулами (давление на стенку уменьшается, так как есть силы, втягивающие молекулы приграничного слоя внутрь), поправка — суммарный объём молекул газа.

У Ван-Дер-Ваальсовского газа можно найти критические значения , которые характеризуют критическое состояние, то есть такое состояние, в котором жидкая и газообразная фазы вещества неразличимы. Находятся критические параметры из системы двух уравнений:

Таким образом, критические параметры для уравнения Ван-Дер-Ваальса равны:

# Ход работы

Согласно формулам (4) были посчитаны критические параметры газа Ван-Дер-Ваальса:

Для паров воды экспериментальные значения равны:

(экспериментальные значения получены с сайта <https://webbook.nist.gov/cgi/fluid>)

Относительные погрешности равны:

Из этого можно сделать вывод, что уравнение Ван-Дер-Ваальса плохо описывает водяной пар при маленьких объёмах (больших плотностях).

Были написаны программы на языке Python, с помощью которых были построены:

графики зависимости давления от плотности при постоянных температурах для разных моделей газов; (Приложение 1)

графики зависимости температуры от плотности при постоянных давлениях для разных моделей газов; (Приложение 2)

графики ошибок. (Приложение 3)

# Результаты

|  |
| --- |
| E:\Python\Python_MEPHI\7sem(chim_kin)\300.png |
| a) |
| E:\Python\Python_MEPHI\7sem(chim_kin)\500.png |
| b) |
| E:\Python\Python_MEPHI\7sem(chim_kin)\1000.png |
| c) |
| Рисунок 1. Сравнение графиков зависимости давления от плотности при разных температурах для разных моделей газов с экспериментом.   1. Температура 300К 2. Температура 500К 3. Температура 1000К |

При температурах, ниже критической, вода не описывается корректно ни одной моделью газа. Поэтому детально рассматривать необходимо только последний график, при температуре 1000 К. При увеличении давления реальные значения всё сильнее начинают расходиться со значениями модели идеального газа. Из этого был сделан вывод о том, что модель идеального газа применима для высоких температур, но невысоких давлений.

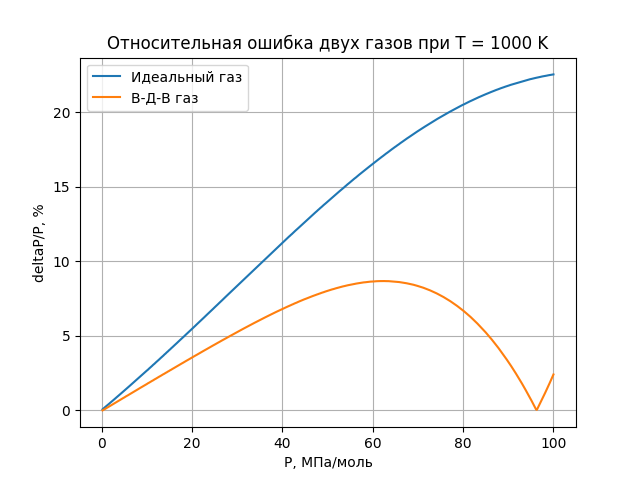


Рисунок 2. График зависимости относительной ошибки давления газа от давления.

Исходя из Рис. 2, можно сделать вывод о том, что модель газа Ван-Дер-Ваальса лучше описывает водяной пар при температуре 1000К, чем модель идеального газа. Также из данного графика можно определить значения давлений для различных моделей, при которых относительная ошибка расчётов будет меньше, чем заданная.

Также были построены изобары, то есть графики зависимости температуры от плотности при постоянном давлении.

|  |
| --- |
| E:\Python\Python_MEPHI\7sem(chim_kin)\1atm.png |
| a) |
| E:\Python\Python_MEPHI\7sem(chim_kin)\1atm_start.png |
| b) |
| E:\Python\Python_MEPHI\7sem(chim_kin)\10atm.png |
| c) |
| E:\Python\Python_MEPHI\7sem(chim_kin)\500atm.png |
| d) |
| Рисунок 3. Зависимости температуры от объёма.   1. При P = 1 атм 2. Более подробный начальный участок при P = 1 атм 3. При P = 100 атм 4. При P = 5000 атм |

Исходя из графиков, делается вывод о том, что лучше всего уравнения Ван-дер-Ваальсовского и идеального газов моделируют реальный пар при давлениях порядка 1 атмосферы (101325 Па). При этом заметно, что уравнение Ван-Дер-Ваальса моделирует газ лучше, чем уравнение идеального газа, что видно из Рис. 3 b), c).

# ****Источники****

1. Eric W. Lemmon, Ian H. Bell, Marcia L. Huber, and Mark O. McLinden, "Thermophysical Properties of Fluid Systems" in NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69, Eds. P.J. Linstrom and W.G. Mallard, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899, <https://doi.org/10.18434/T4D303>, (retrieved October 8, 2024).

# Приложения

Приложение 1. Код на языке Python для построения изотерм:

import matplotlib.pyplot as plt  
import numpy as np  
  
Ts = [300, 500, 1000]  
figs = [plt.figure() for i in range(len(Ts))]  
axes = [figs[i].add\_subplot() for i in range(len(Ts))]  
with open("Theoretical\_isoterm.csv") as file:  
 file.readline()  
 data = file.readlines()  
theory\_data = list(map(lambda x: x.split(';'), data))  
step = 0.01  
start = 1  
stop = 300  
for q in range(len(Ts)):  
 T = Ts[q]  
 ros = np.linspace(start, stop, 100000)  
 Ps\_ideal = 8.31 \* T \* ros / 0.018  
 Ps\_ideal /= 1e6  
 axes[q].plot(ros, Ps\_ideal)  
  
 num\_of\_comps = 1  
 Ps\_vdv = [0] \* num\_of\_comps  
 A = np.array([0.556])  
 B = np.array([0.0000306])  
 xs = np.array([1])  
 for i in range(num\_of\_comps):  
 Ps\_vdv[i] = (8.31 \* T \* ros / 0.018 / (1 - ros / 0.018 \* B[i]) - A[i] \* ros \* ros / 0.018 / 0.018)  
 Ps\_res = ros \* 0  
 for i in range(num\_of\_comps):  
 Ps\_res += Ps\_vdv[i] \* xs[i]  
 Ps\_res /= 1e6  
 axes[q].plot(ros, Ps\_res)  
  
 #нанесение теоретических точек на график  
 theory\_x = list(map(lambda x: float(x[2\*q+1]), theory\_data))  
 theory\_y = list(map(lambda x: float(x[2\*q]), theory\_data))  
 axes[q].scatter(theory\_x, theory\_y)  
  
 axes[q].grid()  
 axes[q].set\_ylabel("P, МПа/моль")  
 axes[q].set\_xlabel("ρ, кг/моль\*м³")  
 axes[q].legend(["Идеальный газ", "В-Д-В газ", "Реальные значения"])  
 axes[q].set\_title(f"Сравнение двух газов при T = {T} K")  
  
  
plt.show()

Приложение 2. Код на языке Python для построения изобар:

import matplotlib.pyplot as plt  
import numpy as np  
  
Ps = np.array([1, 100, 5000])  
Ps \*= 100000  
figs = [plt.figure() for i in range(len(Ps))]  
axes = [figs[i].add\_subplot() for i in range(len(Ps))]  
with open("Theoretical\_isobar.csv") as file:  
 file.readline()  
 data = file.readlines()  
theory\_data = list(map(lambda x: x.split(';'), data))  
step = 0.01  
start = 15  
stop = 50  
for q in range(len(Ps)):  
 P = Ps[q]  
 Vs = np.linspace(start, stop, 100000)  
 Vs /= 1000000  
 Ts\_ideal = P \* Vs / 8.31  
 axes[q].plot(Vs, Ts\_ideal)  
  
 num\_of\_comps = 1  
 Ts\_vdv = [0] \* num\_of\_comps  
 A = np.array([0.556])  
 B = np.array([0.0000306])  
 xs = np.array([1])  
 for i in range(num\_of\_comps):  
 Ts\_vdv[i] = (P + A[i] / Vs / Vs) \* (Vs - B[i]) / 8.31  
 Ts\_res = Vs \* 0  
 for i in range(num\_of\_comps):  
 Ts\_res += Ts\_vdv[i] \* xs[i]  
 axes[q].plot(Vs, Ts\_res)  
  
 #нанесение теоретических точек на график  
 theory\_x = list(map(lambda x: float(x[2\*q+1]), theory\_data))  
 theory\_y = list(map(lambda x: float(x[2\*q]), theory\_data))  
 axes[q].scatter(np.array(theory\_x) \* 0.018, theory\_y)  
  
 axes[q].grid()  
 axes[q].set\_ylabel("T, К")  
 axes[q].set\_xlabel("V, м³/моль")  
 axes[q].legend(["Идеальный газ", "В-Д-В газ", "Реальные значения"])  
 axes[q].set\_title(f"Сравнение двух газов при P = {P} Па")  
  
  
plt.show()

Приложение 3. Код для вычисления и обработки ошибки.

import matplotlib.pyplot as plt  
import numpy as np  
  
Ts = [1000]  
figs = [plt.figure() for i in range(len(Ts))]  
axes = [figs[i].add\_subplot() for i in range(len(Ts))]  
with open("Theoretical\_isoterm.csv") as file:  
 file.readline()  
 data = file.readlines()  
theory\_data = list(map(lambda x: x.split(';'), data))  
step = 0.01  
start = 1  
stop = 300  
for q in range(len(Ts)):  
 T = Ts[q]  
 #нанесение теоретических точек на график  
 theory\_x = list(map(lambda x: float(x[2\*2+1]), theory\_data))  
 theory\_y = np.array(list(map(lambda x: float(x[2\*2]), theory\_data)))  
 #axes[q].scatter(theory\_x, theory\_y)  
  
 ros = np.array(theory\_x)  
 Ps\_ideal = 8.31 \* T \* ros / 0.018  
 Ps\_ideal /= 1e6  
 axes[q].plot(theory\_y, abs(Ps\_ideal - theory\_y) / theory\_y \* 100)  
  
 num\_of\_comps = 1  
 Ps\_vdv = [0] \* num\_of\_comps  
 A = np.array([0.556])  
 B = np.array([0.0000306])  
 xs = np.array([1])  
 for i in range(num\_of\_comps):  
 Ps\_vdv[i] = (8.31 \* T \* ros / 0.018 / (1 - ros / 0.018 \* B[i]) - A[i] \* ros \* ros / 0.018 / 0.018)  
 Ps\_res = ros \* 0  
 for i in range(num\_of\_comps):  
 Ps\_res += Ps\_vdv[i] \* xs[i]  
 Ps\_res /= 1e6  
 axes[q].plot(theory\_y, abs(Ps\_res - theory\_y) / theory\_y \* 100)  
  
 axes[q].grid()  
 axes[q].set\_ylabel("deltaP/P, %")  
 axes[q].set\_xlabel("P, МПа/моль")  
 axes[q].legend(["Идеальный газ", "В-Д-В газ", "Реальные значения"])  
 axes[q].set\_title(f"Относительная ошибка двух газов при T = {T} K")  
  
  
plt.show()