

Задания к контрольной работе по Моделированию ЭРСП в хим. технологии»

Согласно номеру варианта из таблицы 1 выберите компоненты бинарной смеси. На основе данных таблицы 2 постройте диаграмму равновесия на рабочем листе табличного процессора MS Excel. Пример работы приводится на странице 3.

Таблица 1

Номера вариантов

№	Студент	компонент А	компонент В
1	Степанов Алексей	.Анилин	Нитробензол
2	Филинов Виталий	Ацетон	Тетрахлорметан
3	Хамдеева Камиля	Бензол	Бутанол
4	Шушляев Роман	Гексан	Гептан
5	Чупахин Александр	Толуол	Бромбензол
16	Гатиев Рамзиль	Бутанол	Этилбензол
17	Гатин Фаниль	Метилацетат	Пентан
18	Иванов Сергей	Анилин	м-Ксилол
19	Камалиев Алмаз	Бензол	Пропанол
20	Марков Евгений	Муравьиная к-та	Ацетон
21	Мингазов Линар	Гексан	Пентан
22	Мулюков Алмаз	Этилбензол	Бромбензол
23	Петров Максим	Изопропанол	Хлороформ

Таблица 2

Вещество	Давление насыщенного пара (мм рт. ст.) над органической жидкостью при температуре (°C)															Тем-ра кипения
	10°C	20°C	30°C	40°C	50°C	60°C	70°C	80°C	90°C	100°C	110°C	120°C	130°C	140°C	150°C	
Анилин	-	-	-	1	2,5	5,6	10,6	18,1	29,4	45,9	69,3	101,4	144,3	199,6		184,13
Ацетон	116,4	184,9	283,6	421,7	610,1	861	1188,1	1611,1	2142	2797	3593,6	4547,6	5669,7	6963,4		56,1
Бензол	45,6	75,2	119,4	182,8	271,3	391,5	550,8	757,7	1021,1	1350,7	1756,9	2250,4	2841,6	3543,1		80,2
Бромбензол	-	-	5,7	10	17	27,6	43,6	66,1	97,7	141,1	198,7	274,9	372,6	495,8		156
Бутанол	1,8	4,5	10,7	18,6	33,1	59	100,6	163,6	255,6	387	572	830,7	1150,2	1518,9		117,5
Гексан	75,7	121,2	187,1	279,4	405,3	572,8	790,6	1068,3	1416,2	1845,1	2366	2990,6	3730,8	4597,2		68,74
Гептан	20,6	35,4	58,4	92,5	141,6	210,2	303,6	427,8	589,4	795,7	1055	1375,2	1765,5	2235,2		98,43
Дихлорэтан	40,4	66,6	105,8	164,4	241,7	349,9	494,3	683	924,7	1229,1	1606,7	2068,5	2625,7	3290,4		83,47
Изопропанол	17	32,4	59,2	105,3	177,1	288,2	454,8	691,8	1020,7	1456,4	2036,8	2797,8	3778,6	5016,8		82,4
о-Ксилол	2,6	4,9	8,9	15,3	25,5	40,8	63,2	95	139	198,5	277,3	379,8	510,7	675,2		144,41
п-Ксилол	—	6,5	11,6	19,8	32,5	51,4	78,7	117,2	169,8	240,4	333,2	452,8	604,6	794,2		138,35
Метанол	55,7	97,4	163,5	264,7	414,8	631,1	934,8	1351	1909,4	2643,6	3592,6	4790,7	6282,6	8125,9		64,5
Метилацетат	104,7	170	265,6	401,1	587,7	837,8	1165,4	1586	2116,5	2775,5	3582,6	4558,6	5724,3	7099,7		57,1
Муравьиная к-та	19,3	32,7	53,3	82,5	125,8	189,8	279,7	397	552	747,5	957	-	-	-		100,7
Нитробензол	-	-	0,4	0,6	1	2	4,2	7,5	12,9	20,9	32,3	48	69,7	100,4		210,9
Октан	5,6	10,5	18,5	31,1	50,4	78,7	119	175	250,8	351,2	481,5	647,6	855,9	1113,3		125,66
Пропанол	7,4	14,4	27,6	50,2	87,3	146,8	239,1	376,5	572,8	843,6	1206,3	1681,6	2294,3	3073,5		97,2
Сероуглерод	197,6	297,5	434,6	618	857,7	1164,9	1551,3	2028,7	2631,5	3367	4234,1	5244,2	6441	7933,7		46
Тетрахлорметан	56,7	91,6	142,5	214,4	313,3	445,9	619,8	843,2	1125,2	1475,2	1903,3	2420	3035,9	3762,1		76,75
Толуол	12,4	21,8	36,7	59,2	92,1	139	203,8	291,2	406,7	556,3	746,6	984,8	1278,5	1635,5		110,63
Уксусная кис-та	—	11,7	20,6	34,8	56,6	88,9	136,9	202,3	293,7	417,1	580,8	794	1067,6	1414,2		118,1
Хлорбензол	4,9	8,8	15,5	26	42	65,5	97,9	144,8	208,4	292,8	402,6	542,8	719	939,4		131
Хлороформ	98,7	157	241	358,6	518,7	731,6	1008,6	1362,1	1805,2	2351,9	3017	3815,5	4763,2	5876,1		61,2
Циклогексан	47,5	77,5	121,7	184,7	271,8	389,2	543,8	743,3	995,8	1310,1	1695,6	2161,4	2717,8	3374,4		80,74
Этанол	23,6	43,9	79,2	135,3	222,2	352,7	543,6	809,7	1170,4	1651,5	2280,2	3087,5	4107,9	5380,2		78,3
Этилацетат	42,7	72,8	118,7	186,2	282,2	415,4	596,3	833,9	1138,9	1523,9	2002,1	2587	3293,3	4136,5		77
Этилбензол	3,8	7,1	12,6	21,5	35,2	55,5	84,8	125,8	181,9	257	355,3	481,7	641,7	841,1		136,18
Этиловый эфир	290,8	439,8	648,3	921,1	1275,9	1733,4	2302,7	2973,2	3829,8	4853,6	6080,8	7508,1	9158,3	-		34,65
Пентан		422	612	864	1191	1605	2121	2754	3518	4429		6750	8189		11693	36,07
м-Ксилол		6,1	11	18,8	30,9	49,1	75,4	113	164	232		440	589		1006	139,1

Источник (в основном): Бобылёв В. Н. Физические свойства наиболее известных химических веществ: Справочное пособие /РХТУ им. Д. И. Менделеева. –М., 2003

Пример. Задачи аппроксимации

Интерполяция и экстраполяция табличных данных в инженерных расчетах

Задачи интерполяции и экстраполяции решаются в целях определения значений функции в точках, в которых она не задана (рис. 2.1).

При этом важно то, что имеются значения функции в других точках плоскости. Применяя математические методы можно подобрать подходящую функцию, график которой проходит через заданные точки или, по крайней мере, на достаточно близком расстоянии к ним. Процесс подбора такой функции называется **аппроксимацией данных**.

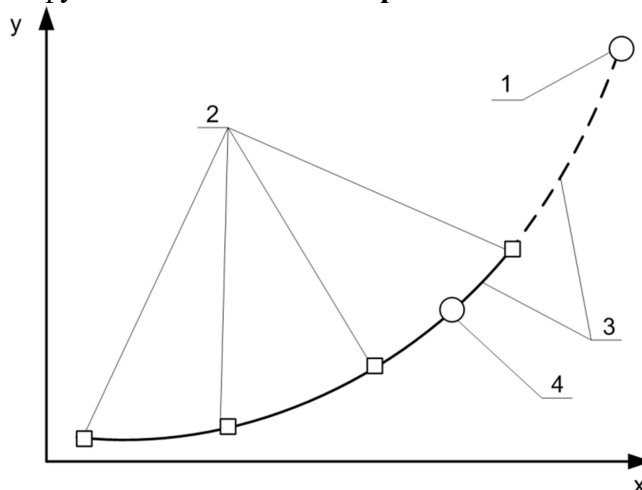


Рис. 2.1. Пояснения к решению задач интерполяции и экстраполяции.

1 – экстраполируемая точка, 2 – известные точки, 3 – график аппроксимирующей функции, 4 – интерполируемая точка.

Аппроксимируя известные значения подходящей функцией, определяют значения функции в других точках (рис. 2.1). При этом, **задача интерполяции** решается тогда, когда нужно определить значение функции внутри отрезка, на границах которого значения функции известны (рис. 2.1 точка 4). **Задача экстраполяции** позволяет определить значение функции за пределами отрезка, на границах которого функция определена (рис. 2.1 точка 1).

При аппроксимации нужно определить уравнение, связывающее функцию y с переменной x . Одно и то же уравнение (рис. 2.1. график 3) используется для решения и задачи интерполяции, и задачи экстраполяции. В формулу подставляется интересующее нас значение x и рассчитывается значение y , соответствующее ему.

2.2. Практическая работа «Аппроксимация данных с помощью средств MS Excel»

Для решения задач аппроксимации разработано большое количество различных прикладных программ. Однако самым простым способом является способ использования табличного процессора.

Рассмотрим решение задач интерполяции и экстраполяции на примере построения диаграммы равновесия бинарной смеси «бензол – толуол».

1) **Ввод исходных данных.** Воспользуемся табличными данными давления насыщенных паров бензола и толуола, взятых из справочника, которые приводятся в таблице 2.1. Введите данные из таблицы 2.1 на рабочий лист табличного процессора MS Excel.

Таблица 2.1

Давление насыщенного пара бензола и толуола в зависимости от температуры.

Температура, °C	Давление насыщенного пара, мм рт.ст	
	бензол	толуол
0	40	25
10	55	26
20	80	30
30	130	43

40	195	65
50	290	100
60	420	150
70	570	220
80	770	320
90		440
100		583
110		770

Для бензола дается 9 точек, а для толуола – 12 точек с диапазоном 10 градусов. Этих данных достаточно для аппроксимации полиномом достаточно высокой степени. В качестве аппроксимирующей функции выберем полином вида $Y = Ax^3 + Bx^2 + Cx + D$. Это полином третьей степени.

2) Построение точечных графиков. Чтобы подобрать подходящую функцию нужно сначала построить графики зависимости давления насыщенного пара, соответственно, для бензола и толуола от температуры. Для определения давления бензола на отрезке температур 80 – 110 град требуется решить задачу экстраполяции. Поэтому в качестве исходных данных для построения аппроксимирующей функции следует взять значения давлений из табл. 2.1 на отрезке температур 0 – 80 град. Для определения давления толуола на отрезке температур 80 – 110 град требуется решить задачу интерполяции. Поэтому в качестве исходных данных для построения аппроксимирующей функции для толуола следует взять значения давлений из табл. 2.1 на отрезке температур 80 – 110 град.

Рекомендуется выбирать график типа **точечный**, но без соединительной линии, чтобы построенная позже линия тренда не накладывалась на сам график (рис. 2.2).

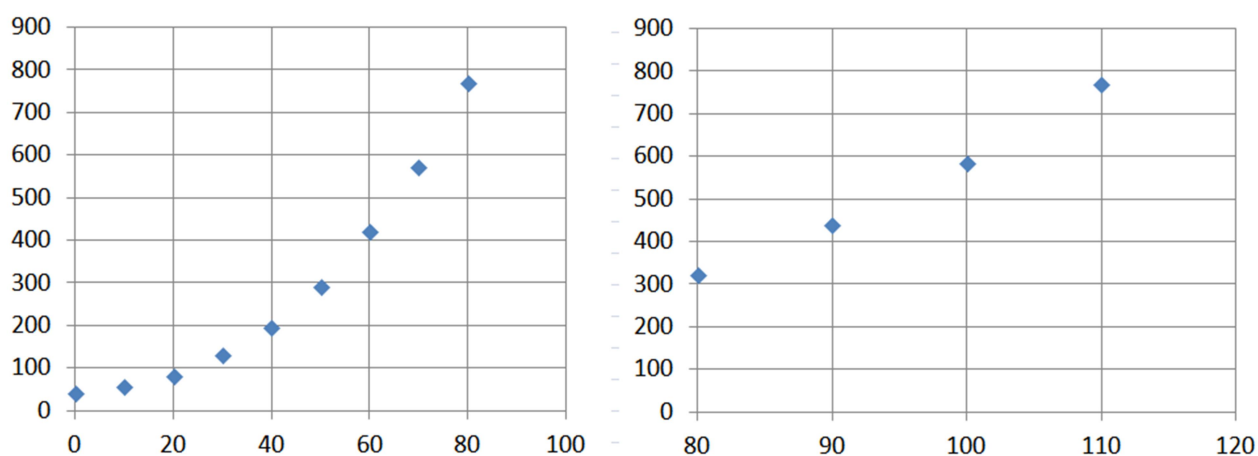


Рис. 2.2. Точечные графики по данным таблицы 2.1

3) Добавление линии тренда. После того, как графики построены, щелчком правой кнопки мыши на любой точке графика нужно вызвать контекстное меню. В нем следует выбрать команду «добавить линию тренда». В результате появляется диалоговое окно, в котором нужно выбрать тип линии тренда – выберем полином. Степень полинома обычно подбирается опытным путем, выбирая наилучшее приближение к заданным точкам. Чем выше степень полинома – тем точнее аппроксимирующая функция. В нашей учебной задаче, чтобы облегчить последующий ввод формул, остановим свой выбор на третьей степени – может даже недостаточно точной.

Далее в этом окне следует в качестве параметра установить флажок на опции «Показывать уравнение на диаграмме» и подтвердить свой выбор нажатием кнопки «ОК».

В результате на построенной вами диаграмме появляются линия тренда и ее уравнение. Повысим точность отображения коэффициентов уравнения. Для этого нужно вызвать контекстное меню для объекта «уравнение». Выполните щелчок правой кнопкой мыши на формуле уравнения и выберите команду «Формат подписи линии тренда». В

открывшемся окне выберите команду «число» и установите тип отображаемых данных – экспоненциальный, число десятичных знаков – 6. Выполните аналогичные операции для толуола – не забывайте, что для него нужно выбрать диапазон 80 – 110 °С. (рис. 2.3). Перепишите получившиеся уравнения:

$$\text{для бензола} - p = 6,355219 \cdot 10^{-4} \cdot T^3 + 5,376984 \cdot 10^{-2} \cdot T^2 + 0,7396585 \cdot T + 40,35354$$

$$\text{для толуола} - p = 3,5 \cdot 10^{-3} \cdot T^3 - 0,83 \cdot T^2 + 77,15 \cdot T - 2332$$

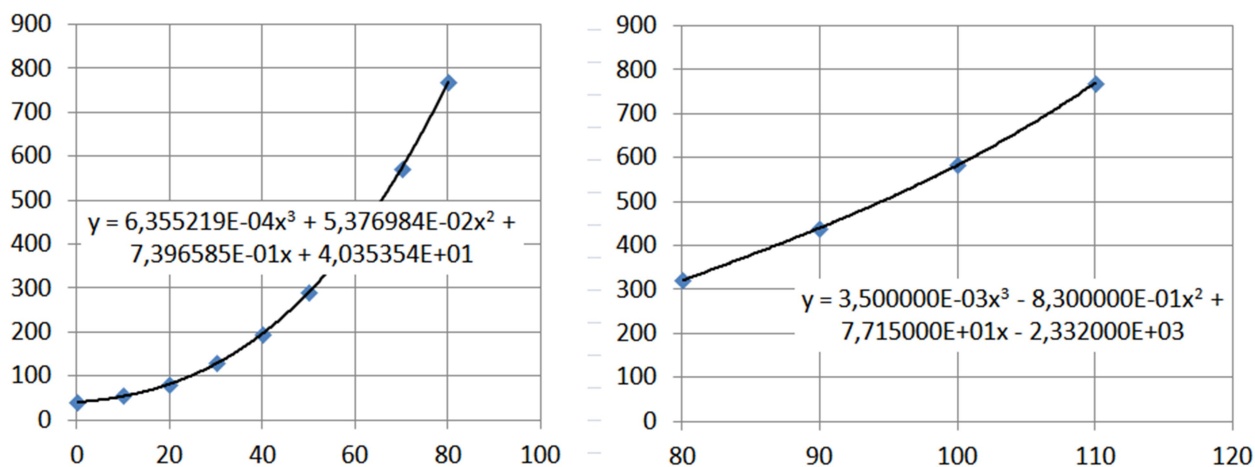


Рис. 2.3. Графики для определения уравнений линии тренда

4) Расчет значений функций с помощью аппроксимирующих формул.

Полученные ранее уравнения линии тренда

$$\text{для бензола} - p = 6,355219 \cdot 10^{-4} \cdot T^3 + 5,376984 \cdot 10^{-2} \cdot T^2 + 0,7396585 \cdot T + 40,35354$$

$$\text{для толуола} - p = 3,5 \cdot 10^{-3} \cdot T^3 - 0,83 \cdot T^2 + 77,15 \cdot T - 2332$$

протабулируйте (вычислите на заданном промежутке с определенным шагом).

Рассчитываем значения температур на отрезке 80 – 110 °С с шагом 1 градус, решая, таким образом, для бензола задачу экстраполяции, а для толуола – задачу интерполяции.

Результаты расчетов (фрагмент) приводятся в табл. 2.2.

Таблица 2.2

Фрагмент таблицы с рассчитанными давлениями насыщенного пара

Температура	Давление бензола P_B	Давление толуола P_T
80	769,0	320,0
81	790,8	331,6
82	813,0	343,2
...	...	...
...	...	...
...	...	...
108	1548,0	728,1
109	1582,8	748,7
110	1618,2	770,0

5) Использование результатов аппроксимации. Вычислим равновесные составы фаз и построим диаграммы равновесия в координатах t - x , y и y^* - x для бензольно-толуольной смеси при атмосферном давлении.

Используя результат решения предыдущей задачи, рассчитаем концентрации бензола в жидкой x и паровой y фазах. Из закона Дальтона можно вывести формулы для расчета равновесных фаз:

$$x = \frac{P - P_T}{P_B - P_T} \quad y = \frac{P_B \cdot x}{P},$$

где x и y - мольные доли бензола в жидкости и в равновесном с ней паре; барометрическое давление $P = 760$ мм рт.ст., P_B – давление бензола, P_T – давление толуола (из табл. 2.2).

Используя эти формулы, вычислим мольные доли бензола в жидкости x и в равновесном с ней паре y для значений температур 80 – 110 °С (табл. 2.3).

Таблица 2.3

Результаты расчета концентраций бензола в жидкости и паре

Температура	Давление бензола P_B	Давление толуола P_T	x	y
80	769,0	320,0	0,980	0,992
81	790,8	331,6	0,933	0,971
82	813,0	343,2	0,887	0,949
...	...	...	...	...
...	...	...	...	...
...	...	...	...	...
108	1548,0	728,1	0,039	0,079
109	1582,8	748,7	0,014	0,028
110	1618,2	770,0	-0,012	-0,025

По данным табл. 2.3 строим графики $T - x$ и $T - y$ (рис. 2.4), выбирая тип диаграммы – точечный график без маркеров с соединительной линией.

При построении диаграммы с двумя графиками (рис. 2.4) следует ввести 2 ряда данных. Второй ряд добавляется выбором вкладки «Ряд» - кнопка «добавить». Обратите внимание на то, что температура является ординатой обоих графиков, а x и y – их абсциссами. Во время ввода в поля абсциссы и ординаты не ошибитесь, не перепутайте их друг с другом.

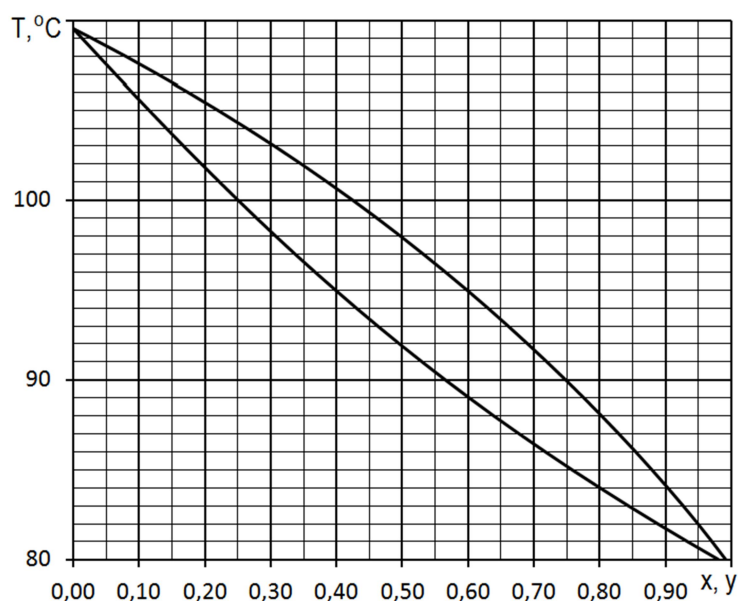


Рис. 2.4. Диаграмма состояния бинарной смеси «бензол – толуол»

Обратите внимание на то, что в точке $x, y = 0$, диаграмма (рис. 2.4) не вышла на правильное значение температуры кипения в 110 °С (~ 109,5), а в точке $x, y = 1$ не вышла на температуру 80 °С (~ 79,5). Неточность в половину градуса связана с ошибкой аппроксимации. Вероятно, выбор в качестве аппроксимирующей функции полинома более высокой степени, позволил бы решить задачу с меньшей ошибкой.

Можно заметить еще один важный момент. Сравните расчетное значение давления толуола в точках 80, 90, 100 и 110 градусов с заданным (табл. 2.1). Сравнение показывает, что даже полином третьей степени для толуола дает практически полное совпадение.