

Schlussprojekt

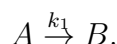
Chemische Reaktion

zur 49. und 50. KW (30.11. – 13.12.2020)

Beschreibung

Analytische Betrachtung

Wir betrachten eine chemische Reaktion, bei der der Stoff A zum Stoff B umgesetzt wird. Zum Beispiel reagiert Ethin mit Wasserstoff und wird zu Ethen. Wir schreiben



Dabei gilt, dass die zeitliche Abnahme der Konzentration c_A vom Stoff A proportional ist zur Konzentration des noch vorhandenen Stoffes A . Für die Geschwindigkeit der Reaktion gilt also

$$\frac{dc_A(t)}{dt} = -k_1 c_A(t). \quad (1)$$

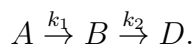
Hierbei ist k_1 die Geschwindigkeitskonstante der Reaktion, welche von Umgebungsparametern abhängen kann, wie zum Beispiel der Konzentration oder Art einer Säure. Zum Zeitpunkt $t = 0$ gilt für die Konzentration

$$c_A(0) = c_A^0 > 0.$$

Die exakte analytische Lösung der Gleichung (1) lautet

$$c_A(t) = c_A^0 e^{-k_1 t}. \quad (2)$$

Bei einer zweistufigen Reaktion wird das Produkt B mit Hilfe einer weiteren Reaktion in das Produkt D umgewandelt, wobei die Geschwindigkeitskonstante hierbei k_2 ist. Wir schreiben



Zum Beispiel reagiert Ethin mit Wasserstoff und wird zu Ethen umgesetzt, welches wiederum mit Wasserstoff zu Ethan reagiert. Zum Zeitpunkt $t = 0$ gilt für die Konzentrationen c_A , c_B und c_D , dass

$$c_A(0) = c_A^0, \quad c_B(0) = c_D(0) = 0. \quad (3)$$

Für die Gesamtkonzentration gilt für alle $t \geq 0$

$$c_A(0) = c_A(t) + c_B(t) + c_D(t). \quad (4)$$

Die Reaktionsgeschwindigkeit hängt wieder linear von der Konzentration ab, d.h. wir haben

$$\frac{dc_A(t)}{dt} = -k_1 c_A(t) \quad (5)$$

$$\frac{dc_D(t)}{dt} = k_2 c_B(t). \quad (6)$$

Weil B das Produkt von A und das Edukt von D ist, haben wir

$$\frac{dc_B(t)}{dt} = k_1 c_A(t) - k_2 c_B(t). \quad (7)$$

Daraus erhalten wir ein System linearer Differentialgleichungen bestehend aus (5), (6) und (7) mit den Anfangsbedingungen (3) und der Gesamtkonzentration (4).

Analytisch können die Konzentrationen $c_A(t)$, $c_B(t)$ und $c_D(t)$ bestimmt werden, indem man zuerst (5) löst, was wie oben in der Lösung (2) resultiert. Diese Lösung kann dann in (7) eingesetzt werden, wodurch wir die Gleichung

$$\frac{dc_B(t)}{dt} + k_2 c_B(t) = k_1 c_A^0 e^{-k_1 t}$$

erhalten. Die Lösung dieser Differentialgleichung lautet

$$c_B(t) = c_A^0 \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}).$$

Mit Hilfe der Gleichung für die Gesamtkonzentration ergibt sich dann die Konzentration $c_D(t)$ als

$$c_D(t) = c_A^0 \left(1 + \frac{1}{k_2 - k_1} \{k_1 e^{-k_2 t} - k_2 e^{-k_1 t}\} \right).$$

Numerische Betrachtung

Wir können Gleichung (1) mit Hilfe des sogenannten expliziten Euler-Verfahrens im Zeitintervall $[0, T]$ numerisch lösen. Dazu approximieren wir für ein $h > 0$ die Ableitung mit einer *finiten Differenz*

$$\frac{c_A(t+h) - c_A(t)}{h} \approx c'_A(t) = -k_1 c_A(t).$$

Das heisst, wir haben

$$\begin{aligned} c_A(t+h) &\approx -hk_1 c_A(t) + c_A(t) \\ &= (1 - hk_1) c_A(t). \end{aligned}$$

Man erhält damit die Iterationsvorschrift

$$\begin{aligned} c_A^{(i+1)} &= (1 - hk_1) c_A^{(i)}, \\ t^{(i+1)} &= t^{(i)} + h, \end{aligned} \quad (8)$$

mit welcher man sukzessive Näherungen $c_A^{(i)}$ an $c_A(t^{(i)})$ berechnen kann, indem man mit

$$\begin{aligned}c_A^{(1)} &= c_A^0, \\ t^{(1)} &= t_0,\end{aligned}$$

startet. Dabei entspricht $i = 1$ dem Anfangszeitpunkt $t^{(1)} = t_0$, $i = 2$ dem Zeitpunkt $t^{(2)} = t_0 + h$, usw.

Um das oben beschriebene System linearer Differentialgleichungen, welches die zweistufige Reaktion beschreibt, numerisch zu lösen, können wir zuerst analog zur einstufigen Reaktion Gleichung (5) numerisch lösen, indem wir das explizite Euler-Verfahren verwenden. Danach können wir (7) numerisch lösen. Hierzu approximieren wir die Ableitung wiederum mit einer finiten Differenz, wodurch wir

$$\frac{c_B(t+h) - c_B(t)}{h} \approx k_1 c_A(t) - k_2 c_B(t)$$

erhalten. Dadurch erhalten wir die Iterationsvorschrift

$$\begin{aligned}c_B^{(i+1)} &= (1 - hk_2)c_B^{(i)} + hk_1 c_A^{(i)}, \\ t^{(i+1)} &= t^{(i)} + h,\end{aligned}\tag{9}$$

mit der Notation von oben und mit dem Startwert

$$c_B^{(1)} = 0.$$

Nun kann $c_D(t)$ durch Verwendung der Gleichung für die Gesamtkonzentration approximiert werden, indem man

$$c_D^{(i)} = c_A^0 - c_A^{(i)} - c_B^{(i)}\tag{10}$$

für alle $i = 1, 2, \dots, N$ berechnet. N hängt hierbei von T und h ab, denn es gilt:

$$(N - 1)h = T.$$

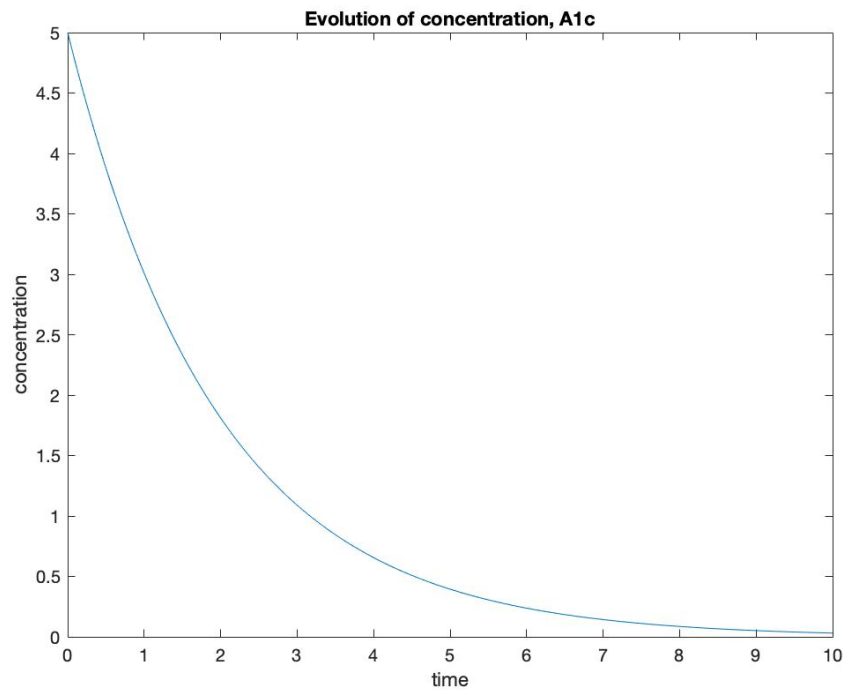
Aufgaben

Löse die folgenden Aufgaben selbstständig mit Matlab und L^AT_EX.

Aufgabe 1: Zuerst möchten wir die Gleichung (1) numerisch lösen, um den zeitlichen Verlauf der Konzentration c_A zu bestimmen. Dafür betrachten wir das Zeitintervall $[0, T]$, d.h. $t_0 = 0$.

- Rechne zuerst von Hand nach, dass der analytische Ausdruck (2) wirklich die Differentialgleichung (1) mit dem korrekten Anfangswert löst.
- Schreibe eine Funktion `c_A = expliziter_Euler(k_1, h, c_A0, T)`, welche die Gleichung (1) **numerisch** mit der expliziten Euler Methode löst (siehe Abschnitt “Numerische Betrachtung”, Gleichung (8)). Die Übergabeparameter beschreiben hierbei die Geschwindigkeitskonstante k_1 , die Schrittweite h , die Anfangskonzentration c_A^0 und den Endpunkt des Zeitintervalls $[0, T]$.

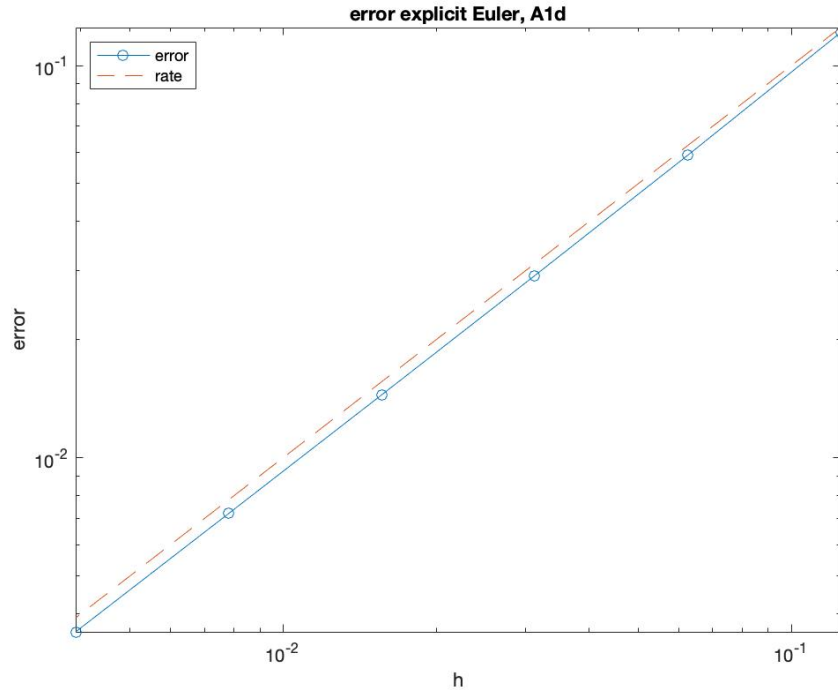
- c) Teste deine Funktion, indem du $k_1 = 0.5$, $h = 2^{-4}$, $c_{A0} = 5$ und $T = 10$ wählst. Schreibe dazu ein Skript. Zeichne den zeitlichen Verlauf der Konzentration c_A in eine Abbildung. Beschrifte die Achsen und füge einen Titel hinzu. Speichere die Abbildung ab, um sie in den Bericht einfügen zu können (siehe auch Abschnitt “Abgabe”). Die Abbildung sollte folgendermassen aussehen:



- d) Schreibe ein Skript, in dem du folgendes machst: Zeichne für $k_1 = 1$ und $h = 2^{-3}, 2^{-4}, 2^{-5}, 2^{-6}, 2^{-7}, 2^{-8}$, $c_{A0} = 5$ und $T = 10$ den Fehler

$$\text{err} = \max_{1 \leq i \leq N} \left| c_A^{(i)} - c_A^0 e^{-k_1 t^{(i)}} \right|$$

in eine Abbildung, mit der Option ‘-o’. Dabei soll auf der x -Achse h angegeben sein, auf der y -Achse der Fehler. Benutze statt `plot` den Befehl `loglog`. Um den Fehler zu berechnen, kannst du den Befehl `max` von Matlab benutzen. Zeichne zusätzlich eine Vergleichskurve hinein, indem du die verschiedenen h gegen die verschiedenen h plottest. Füge eine Legende und einen Titel dazu und beschrifte die Achsen. Die beiden Kurven sollten dieselbe Steigung haben. Speichere die Abbildung ab, um sie in den Bericht einfügen zu können. Die Abbildung sollte folgendermassen aussehen:



e) Erstelle mit \LaTeX eine Tabelle, die wie folgt aussieht:

h	Fehler
2^{-3}	
2^{-4}	
2^{-5}	
2^{-6}	
2^{-7}	
2^{-8}	

Vervollständige die Tabelle mit den in d) berechneten Werten und füge sie in den Bericht ein.

Aufgabe 2: Wir nehmen nun an, dass wir k_1 beeinflussen können. In dieser Aufgabe wollen wir k_1 so bestimmen, dass die Konzentration c_A zum Zeitpunkt $t = T$ den Wert c_{desired} annimmt. Dies wollen wir mit einer Bisektion erreichen. Wir nehmen an, wir haben am Anfang zwei verschiedene k_1 , nämlich k_a und k_e mit $k_a < k_e$. Zusätzlich seien die Konzentration c_A zum Zeitpunkt $t = T$ berechnet mit k_a grösser als die gewünschte Konzentration c_{desired} und berechnet mit k_e kleiner. Wir wollen k_{result} so bestimmen, dass die damit berechnete Konzentration c_A die gewünschte Konzentration c_{desired} bis auf eine vorgegebene Genauigkeit tol annähert. Dazu verfolgen wir folgende Strategie:

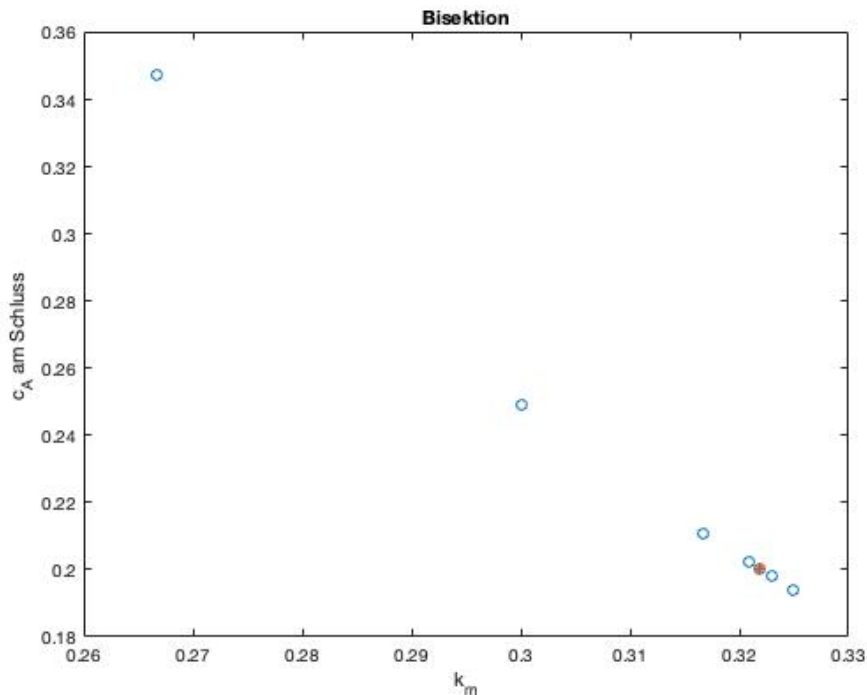
1. Berechne $k_m = \frac{1}{2} (k_a + k_e)$.

2. Berechne c_A mit dem expliziten Euler-Verfahren mit der Geschwindigkeitskonstanten k_m .
 3. Überprüfe, ob $c_A < c_{\text{desired}}$ oder $c_A > c_{\text{desired}}$ zum Zeitpunkt $t = T$ ist.
 - a) Fall $c_A < c_{\text{desired}}$: Setze $k_e = k_m$ und $k_a = k_a$.
 - b) Fall $c_A > c_{\text{desired}}$: Setze $k_a = k_m$ und $k_e = k_e$.
 4. Wiederhole 1. bis 3. *solange*, bis $|c_A - c_{\text{desired}}| < \text{tol}$ zum Zeitpunkt $t = T$ ist. Setze dann $k_{\text{result}} := k_m$.
- a) Schreibe eine Funktion

`k_result = Bisektion(tol, k_a, k_e, h, c_A0, T, c_desired).`

Benutze dafür eine `while`-Schleife und `if`-Abfrage.

- b) Teste deine Funktion für $\text{tol} = 10^{-3}$, $k_a = \frac{1}{5}$, $k_e = \frac{1}{3}$, $h = 2^{-12}$, $c_{A0} = 5$, $T = 10$ und $c_{\text{desired}} = 0.2$, indem du ein Skript schreibst. Was erhältst du für k_{result} ? (Antwort: 0.3219.)
- c) Visualisiere den Verlauf der Bisektion, indem du jeweils k_m und das dazugehörige $c_A(T)$ zeichnest. Schreibe dazu ein Skript. Zeichne in dieselbe Abbildung auch k_{result} zusammen mit c_{desired} . Ändere dazu deine Funktion `Bisektion` dazu so ab, dass sie auch einen Vektor mit den verschiedenen k_m und einen Vektor mit den zugehörigen c_A zum Zeitpunkt T als Output hat. Setze dazu die maximale Anzahl an Iterationen auf 1000. Dies erlaubt dir, die Output-Vektoren am Anfang deiner Funktion mit Null zu initialisieren. Am Ende deiner Funktion musst du die beiden Vektoren auf die richtige Länge zuschneiden, damit die überflüssigen Nullen abgeschnitten werden. Speichere die Abbildung ab, um sie in den Bericht einfügen zu können. Die Abbildung sollte folgendermassen aussehen:



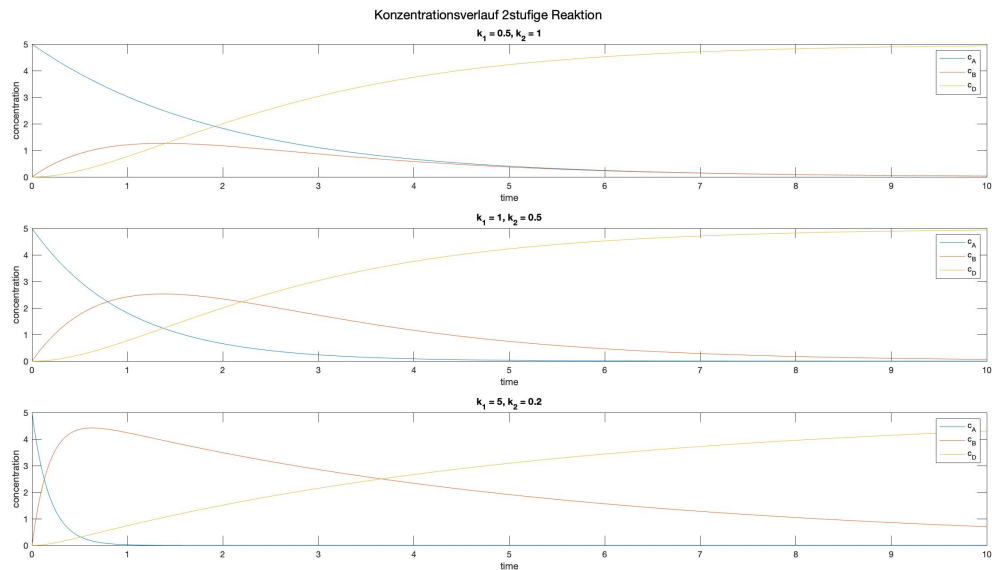
Aufgabe 3: In dieser Aufgabe wollen wir die zweistufige Reaktion betrachten, wie sie oben beschrieben ist.

a) Schreibe eine Funktion

$$[c_A, c_B, c_D] = \text{zweistufige_Reaktion}(k_1, k_2, h, c_{A0}, T),$$

welche das System linearer Differentialgleichungen bestehend aus (5), (6), (7) mit den Anfangsbedingungen (3) und der Gesamtkonzentration (4) **numerisch** löst, indem für die Konzentration c_A wieder das explizites Euler-Verfahren verwendet wird wie bei Aufgabe 1b), zur Berechnung von c_B die Formel (9) benutzt wird und für die Berechnung von c_D (10) verwendet wird (siehe Abschnitt “Numerische Betrachtung”).

- b) Teste deine Funktion aus a), indem du für $c_A^0 = 5$, $T = 10$ und $h = 2^{-5}$ die Konzentrationen c_A , c_B und c_D berechnest. Schreibe dazu ein Skript. Zeichne für $k_1 = \frac{1}{2}$, $k_2 = 1$ und $k_1 = 1$, $k_2 = \frac{1}{2}$ und $k_1 = 5$, $k_2 = \frac{1}{5}$ den Verlauf der Konzentrationen c_A , c_B und c_D jeweils in eine Abbildung. Benutze den Befehl `subplot`, um für jedes Paar von k_1 und k_2 die drei Konzentrationen zu zeichnen. Füge jeweils einen Titel hinzu, der die Wahl von k_1 und k_2 beschreibt. Füge jeweils eine Legende hinzu, die die Art des Stoffes beschreibt, beschrifte die Achsen und füge einen Übertitel hinzu. Speichere die Abbildung ab, um sie in den Bericht einfügen zu können. Deine Abbildung sollte folgendermassen aussehen:



Abgabe

Die Abgabe des Projektes soll per Email bis zum 13.12.2020, 23:59 Uhr, erfolgen. Hierzu soll eine Dokumentation in \LaTeX angefertigt werden, welche die Lösungen der Aufgaben 1 bis 3 und folgend dann alle geschriebenen Quelldateien als Listings enthält. Eine Vorlage dafür findest du in dem **beilage.zip** von der Webseite der Vorlesung. Die Kommentare in der Vorlage helfen dir, das Richtige einzufügen. Zusätzlich zur Dokumentation muss ein Beamer-Folienvortrag von drei bis sechs Folien, welche die Implementierung und die Ergebnisse zeigen sollen, in der Woche nach der Abgabe gehalten werden.

Die Dokumentation, der Folienvortrag sowie die Quelldateien werden dabei wie folgt abgegeben: Es soll eine Email mit dem Betreff **Praktikum Projekt Abgabe** bis 13.12.2020, 23:59 Uhr an ra.bruegger-at-unibas.ch abgeschickt werden, welche eine angehängte zip-Datei mit dem Dateinamen **nachname-vorname.zip** hat. In dieser zip-Datei sollen

- die Dokumentation als pdf-Datei mit Dateinamen **nachname-vorname-doku.pdf** und als **.tex**-Datei inklusive Abbildungen,
- die Vortragsfolien als pdf-Datei mit Dateinamen **nachname-vorname-vort.pdf** und als **.tex**-Datei inklusive Abbildungen,
- und einen Ordner mit Namen **nachname-vorname-code**, der die Quelldateien (d.h. alle **.m**-Files inklusive Test-Skripts) enthält,

enthalten sein.

Vortragstermine

Die Vorträge finden in der Woche 51 vom 14.12.2020 bis 17.12.2020 während des Praktikums einzeln über Zoom statt. Die Einteilung wird per Email verschickt. Bitte halte den Legi

bereit. Eine funktionierende Kamera und Mikrophon sind Pflicht. Deine Präsentation sollte 4-5 Minuten dauern, sodass du noch 4-5 Minuten Fragen dazu beantworten kannst. Halte dazu deine Folien bereit und auch den Matlab-Code.