

## מטלת תכנות בקורס כימיה כללית 2 לתלמידי ביו-רפואה

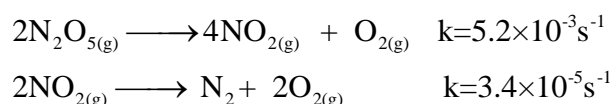
תאריך הגשה: 25.5.22

פורמט הגשה: העלו קובץ ZIP המכיל את ה script הראשי ואת קבצי הפונקציות הנלוות וקובץ PDF עם השמות שלכם המכיל את התשובות הסופיות לשאלות וגרפים.

שאלות לגבי הפן התכנותי יש לשלוח בפורום המיועד. שאלות הקשורות לתוכן הקורס, יש להפנות לצוות הקורס. שעת תקבלה תקבע לפי הצורך והזמינות.

### מטלה 1

נתונות שתי תגובות עוקבות:



בניסוי ריכוז ההתחלתי של  $\text{N}_2\text{O}_{5(g)}$  שווה ל-1.40 M. כתבו תוכנית במטלב שתציג גרף יחיד של ריכוזי כל מרכיבי התגובה בזמן.

### הנחיות:

- גודל צעד – 0.5 second.
- זמן הצגה – 10,000 שניות.
- נחשב את הריכוז של כל אחד מהרכיבים בכל שניה בשיטה נומרית בעזרת MATLAB:
  - כתבו פונקציה `calc_concentrations1(start_conc,k1,k2,dt)` המחשבת את ריכוז הרכיבים לאורך זמן. צרו מראש וקטורים מאופסים שיכילו את הריכוזים של כל מרכיב לאורך הזמן, אורכם יהיה ככמות צעדי הזמן שנבדק. עדכנו את תנאי ההתחלה בוקטורי הריכוז. כתבו לולאה בה עבור כל צעד זמן, חשבו מה ההפרש בין הריכוז הקודם לריכוז הנוכחי, ועדכנו את הצעד הנוכחי (בדרך זו אנחנו בעצם מקרבים את הנגזרת להיות הפרש שני ערכים צמודים חלקי ההפרש ביניהם). את הריכוזים יש לחשב באמצעות הנוסחאות המוכרות מהקורס. שימו לב כי ייתכן ויהיו תהליכים הקורים במקביל ויש להתחשב בשניהם עבור אותו צעד זמן. הפלטים של הפונקציה יהיו וקטורי הריכוזים.
- כתוב סקריפט ראשי `main_YourName_chemistry` אשר יגדיר את הפרמטרים הדרושים לפונקציה ויקרא לה.

- לשם הצגה ויזואלית של התוצאות, לאחר הקריאה לפונקציה השתמשו בפלטים כדי ליצור גרף כאשר ציר X הוא ציר הזמן בשניות וציר Y הוא ציר הריכוזים במולר. הגרף צריך להכיל את כל המרכיבים ועל מנת להבחין ביניהם יש להשתמש במקרא (legend במטלב). יש לכלול כותרות צירים וכותרת גרף רלוונטיים (title, xlabel, ylabel).

## מטלה 2

תוצאות בקובץ המצורף input\_data.mat התקבלו עבור תגובת הפירוק של A ל-B ו-C (בפאזה גזית)

לפי התגובה:  $A_{(g)} \longrightarrow B_{(g)} + 2C_{(g)}$ . ריכוזו ההתחלתי של A בניסוי הוא 0.250 M.

א. טענו את הקובץ המצורף input\_data.mat (פונקציית load) בסקריפט הראשי. הקובץ מכיל מטריצה בעלת 2 טורים כאשר הטור הראשון הוא טור הזמנים בשעות והטור השני מכיל את הריכוזים של C בנקודות זמן שנמדדו.

ב. חשבו את הריכוז של A ו-B עבור אותן נקודות הזמן בעזרת פונקציה חדשה - `calc_concentrations2(input_data, A_start_conc)` המקבלת את המטריצה input\_data ואת הריכוז ההתחלתי של A ומחשבת את הריכוזים של A ו-B.

ג. קראו לפונקציה בסקריפט הראשי והציגו את שלושת הריכוזים בגרף אחוד עם מקרא (legend). צרפו לגרף כותרות צירים וכותרת גרף מתאימים.

ד. צרו פונקציה נוספת `reaction_order(A)` המקבלת את הריכוז של A ובודקת התאמות לפונקציות שונות לפי סדרי תגובה שונים לפי מה שלמדתם בכיתה:

a. צרו שלושה וקטורים להתאמת סדר תגובה (ln במטלב ניתן ע"י פונקציית log) ובצעו התאמה ליניארית עבור כל אחד מהם. מומלץ להשתמש באחת מפונקציות ההתאמה של מטלב: פונקציית polyfit לחישוב הפרמטרים של הקירוב הליניארי ו-polyval לחישוב הערכים של הקירוב עפ"י הפרמטרים שחושבו (לצורך השרטוט), או פונקציית fit (שאותה אני אישית מעדיף) אשר יוצרת מבנה נתונים שבעזרתו ניתן לחלץ את הפרמטרים, לשרטט ולחשב את ערכי הקירוב. (אני ממליץ לקרוא על הפונקציות באתר של מטלב).

b. חשבו את Rsquared של כל קירוב. (Rsquared הינו מדד לטיב קירוב ומייצג את היחס בין סכום ריבועי המרחקים של נקודות המדידה מהעקומה המקורבת לבין השונות של נקודות המדידה. ככל ש-Rsquared קרוב יותר ל-1 הקירוב טוב יותר, מומלץ לקרוא גם עליו). ובחרו את סדר התגובה המתאים לפי זה שנתן את ה-Rsquared הטוב ביותר

c. שרטטו שלושה גרפים כשאר בכל גרף אמורים להופיע גרף ההתאמה הליניארי ונקודות המדידה שעל פיהן נעשתה ההתאמה. הציגו בכותרת הגרף את הקבוע הקינטי שחושב.

d. בנוסף על הפונקציה להדפיס את המשפט 'The reaction is of zero/first/second order' בהתאם לסדר שבחרתם.

ה. קראו לפונקציה `reaction_order(A)` בסקריפט הראשי.

(פונקציות רלוונטיות ליצירת גרפים: `figure`, `plot`, `hold on`, `legend`, `title`, `xlabel`, `ylabel`)