

1 Modeli

Naznake: $\alpha = (m_0 - m_t)/(m_0 - m_f)$, m_0 masa na početku intervala, m_f : masa na kraju intervala, m_t : masa u t (temperaturi T). Predviđa se $f(\alpha)$: matematički izraz koji odgovara kinetičkom mehanizmu, tj. on se fituje prema ulaznim podacima.

Definišu i sljedeće: konstrukcija konvencionalnog modela krive $\alpha = f(t)$ po tačkama zagrijavanja – prvi korak u konstrukciji modela kinetike

Prvi model koji je korišten:

$$\frac{d\alpha}{dt} [k(1 - \alpha)^n]$$

$1 - \alpha$ je količina nereagujućeg uzorka na datom intervalu, k je konstanta odnosa, izvedena iz Arrhenius-ovog zakona, $k = Ae^{(-E_a/Rt)}$, gdje je R univerzalna gasna konstanta, jednaka 8.31446261815324. Na prva tri intervala (I, II i III) korišten je ovaj model. Imamo sljedeće vrijednosti za konstante:

- interval I–III: $E_a = 21$, $A = 4.227 \cdot 10^4$, $n = 0.488$. Model izgleda ovako u konačnici:

$$\frac{d\alpha}{dt} \left[4.227 \cdot 10^4 [e^{-21/(8.31446261815324 \cdot t)}] (1 - \alpha)^{0.488} \right]$$

Greške za model su sljedeće: $\sum_1 = 5.584$, $\sum_2 = 0.3393$. \sum_1 označava sumu kvadrata težinskih odnosa normalizovanih reziduala; \sum_2 : kumulativna suma kvadrata normalizovanih reziduala – pogledati paragraf prije Sekcije 3 (nisam 100% siguran šta je ovo, da li ono što zovemo RSS).

- Interval IV: model koji je ovdje najbolji je tzv. Burnham and Braun nucleation and growth model dat sljedećim zapisom:

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(1 - \alpha)^n (1 - q(1 - \alpha))^m$$

gdje je q parametar inicijalizacije, m faktor grananja (procesa); k ima standardno značenje, kao i u prethodnoj tački.

Koeficijenti izvučeni iz ovog njihovog softvera su: $E_a = 129$, $A = 9.86610^{10}$, $n = 1.257$, $m = 0.919$.

Konačan model ima oblik:

$$\frac{d\alpha}{dt} \left[9.866 \cdot 10^{10} [e^{-129/(8.31446261815324 \cdot t)}] (1 - \alpha)^{1.257} ((1 - q(1 - \alpha))^{0.919}) \right]$$

Kako se $q = 0.99$ uzima po defaultu (pretpostavljam da su i u radu isto tako radili, nije bas eksplicitno navedeno da jesu, ali pominju da je ovaj parametar obično takav), konačno dobijamo model:

$$\frac{d\alpha}{dt} 9.866 \cdot 10^{10} [e^{-129/(8.31446261815324 \cdot t)}] (1 - \alpha)^{1.257} (1 - 0.99 \cdot (1 - \alpha))^{0.919}$$

Informacije o greškama modela: \sum_1 i \sum_2 su 2.4274 i 9.10610^1 , redom.

Slobodno zamijeni $\alpha zaf(t)$; mene ova njihova parametrizacija pomalo zbunjuje – ok, jasna je, ali nepotrebno je pisati formule u zavinsosti od α , a ne od model funkcije f , po kojoj ide izvod.