

Opis wybranych układów fizykochemicznych w stanie nierównowagi termodynamicznej

Rafał Staroszczyk
promotor: dr Piotr Weber

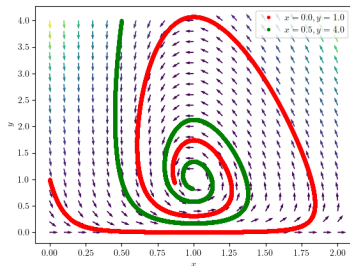
Politechnika Gdańska

2 czerwca 2023

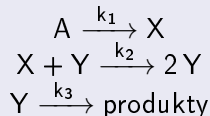
- Przedstawienie teorii termodynamiki nierównowagowej, kinetyki reakcji chemicznych oraz modeli reakcji oscylacyjnych
- Analiza teoretyczna modeli reakcji chemicznych oscylacyjnych
- Symulacja numeryczna tych modeli

Model Lotki

Historycznie pierwszy model, który można zastosować do reakcji chemicznych oscylacyjnych. Oryginalnie użyty do modelowania populacji.



Równania reakcji

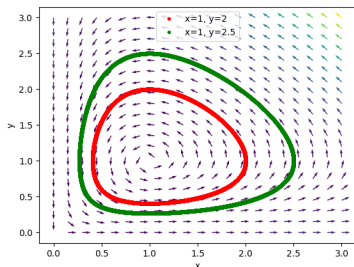


Równania różniczkowe

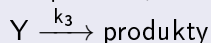
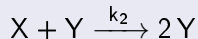
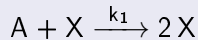
$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= a - axy \\ \frac{dy}{d\tau} &= xy - y \end{aligned}$$

Model Lotki-Volterra

Modyfikacja modelu Lotki z autokatalizą. Wykres fazowy jest zawsze torem zamkniętym.



Równania reakcji

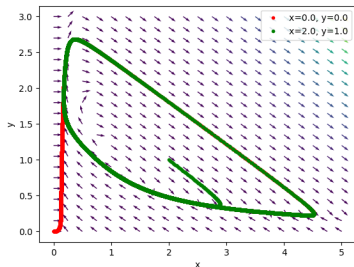


Równania różniczkowe

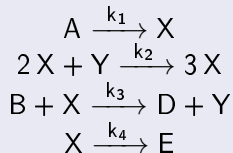
$$\frac{dx}{d\tau} = ax - axy$$

$$\frac{dy}{d\tau} = xy - y$$

Model bruskelator



Równania reakcji

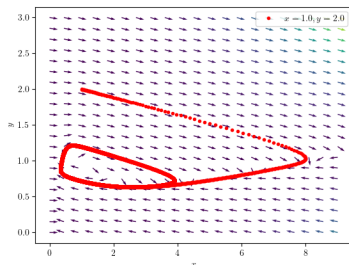


Równania różniczkowe

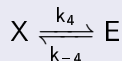
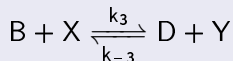
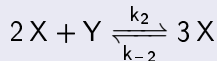
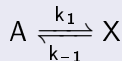
$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= 1 + ax^2y - ax - x \\ \frac{dy}{d\tau} &= -bx^2y + bx \end{aligned}$$

Model bruskelator ogólny

Uogólniona wersja modelu bruskelator, w których każda z reakcji jest odwracalna.



Równania reakcji



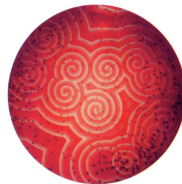
Równania różniczkowe

$$\frac{dx}{d\tau} = 1 + ax^2y - ax - x - cx - bc^3 + by + c$$

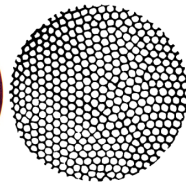
$$\frac{dy}{d\tau} = -bx^2y + bx + dx^3 - dy$$

Źródło produkcji entropii

$$\sigma = J_U \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \sum_i J_i \cdot \nabla \left(\frac{\mu_i}{T} \right) + \sum_r \frac{A_r}{T} \frac{d\xi_r}{dt}$$



(a) Reakcja
Biełousowa-
Żabotyńskiego



(b) Komórki
Bénarda