

Modelska analiza I

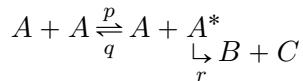
Naloga 105

10.11.2022



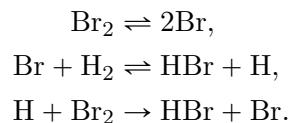
5. naloga – Modeli kemijskih reakcij

1. Za model **binarne reakcije**



kjer je $q/p = 1000$, integriraj sistem eksaktno in v aproksimaciji stacionarnega stanja za $r/qA(0) = 10, 1, 0.1!$

2. Model reakcije $H_2 + Br_2 \rightleftharpoons 2HBr$ vključuje naslednje stopnje:

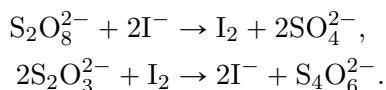


Določi izraz za hitrost reakcije (npr. $[\dot{H}Br]$) v aproksimaciji stacionarnega stanja in primerjaj z empiričnim izrazom

$$[\dot{H}Br] = \frac{k[H_2][Br_2]^{1/2}}{m + \frac{[HBr]}{[Br_2]}}.$$

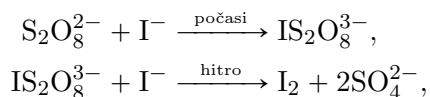
Kako bi najlažje izmeril empirični konstanti k in m ? Skiciraj časovne poteke za $[H_2]/[Br_2] = 100, 1, 0.01$ v začetnem stanju pri $m = 2.5$. Ali kaj pomaga, če že v začetno stanje primešamo mnogo HBr?

3. **Kemijske ure** so reakcije, ki stečejo s predvidljivim in ponavadi ostrom časovnim zamikom. Primer take reakcije je *jodova ura*, ki v eni izmed izvedb temelji na ravnotežju naslednjih reakcij:

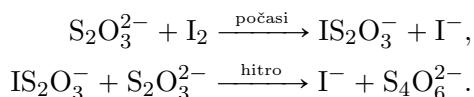


Druga reakcija je bistveno hitrejša od prve, mehanizem merjenja časa pa je enakoverno porabljanje tiosulfata $S_2O_3^{2-}$. Če je persulfat $S_2O_8^{2-}$ v prebitku, lahko za aktivne spremenljivke vzamemo le $[I^-]$, $[I_2]$ in $[S_2O_3^{2-}]$.

Obe zgornji reakciji sta v resnici sosledji dveh binarnih reakcij preko kratkoživega prehodnega stanja. Prva reakcija je sestavljena iz stopenj



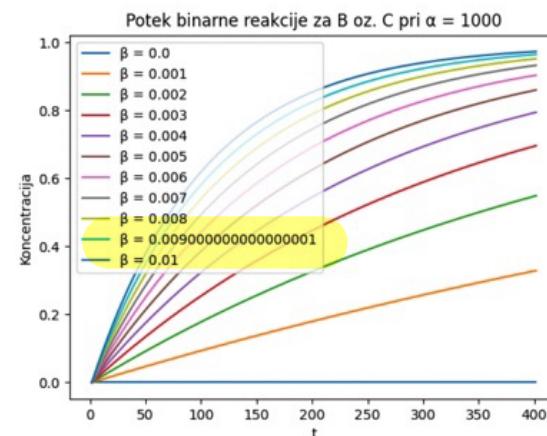
druga pa iz stopenj



V približku stacionarnega stanja izpelji kinetični zvezi za obe glavni reakciji. Razišči potek celotne reakcije in odvisnost trajanja reakcije od začetne koncentracije tiosulfata. Za razmerje hitrosti glavnih reakcij vzemi $\lambda = 1, 10, 100$.

Spljošn napotek:

- Ozmodreverje se na grafih (koncentracija / razločna konc.)
- Uporaba razločnih brov na plath!
- Problem prehodnih vrednosti. Obaze se mora model.
- (Razločne delitve, razločni tipi drf)
- Linearna vs. Logaritemsko skala.
- Encete (relativne, ne absolutne encete)
- Negativne koncentracije?



Slika 2: Vpliv vrednosti β na spreminjanje koncentracije B oz. C. Začetni pogoji so enaki kot v prvem primeru.

Náložky 1:

- Odw霎nost od zvetr鈙ich praguev ($A^* \neq 0$?)
- Odw霎nost od g/p
- Vpravenost stavebneho pruhu?
- Anechoicni reiter.

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

NALOGA 5: MODELI KEMIJSKIH REAKCIJ

MODELSKA ANALIZA 1

DANA KOCIJANČIČ
VPISNA ŠTEVILKA: 28222068

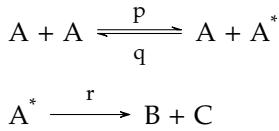
PREDAVATELJ: PROF. DR. SIMON ŠIRCA
ASISTENT: DOC. DR. MIHA MIHOVILOVIČ

Uvod

Kemijske reakcije lahko modeliramo z navadnimi diferencialnimi enačbami prvega reda. Tokrat bo naša naloga preučiti nekaj sistemov takšnih enačb, ki opisujejo kemijske procese. Za numerično reševanje bomo uporabili funkcijo `scipy.integrate.solve_ivp`, s pomočjo katere lahko rešujemo probleme z znanimi začetnimi pogoji.

Model binarne reakcije

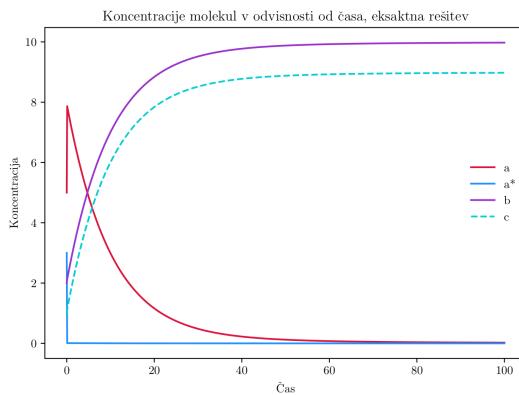
Prvi sistem kemijskih reakcij, s katerim se ukvarjamo je binarna reakcija.



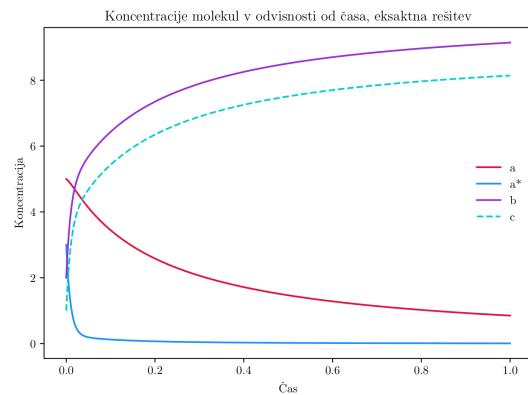
Uvedemo označke za koncentracije $[A] = a$, $[A^*] = a^*$, $[B] = b$ in $[C] = c$. Zapišemo diferencialne enačbe.

$$\begin{aligned}\dot{a} &= -pa^2 + qaa^* \\ \dot{a}^* &= pa^2 - qaa^* - ra^* \\ \dot{b} &= \dot{c} = ra^*\end{aligned}$$

Za občutek narišemo rešitev za izbrane začetne pogoje in izbrane parametre p , q in r . Rezultat je prikazan na sliki 1. Opazimo, da koncentracija a^* takoj pada na nič, torej se molekula A^* porabi v hipu, ko nastane. Ker promptni skok deluje nevezno, sem preverila, da to ni posledica premajhnega števila točk pri diskretizaciji, temveč posledica velikega parametra $q = 1000$. Na sliki 2 si lahko podrobnejše pogledamo obnašanje pri majhnih časih v primeru $q = 1$. Opazimo, da rešitev izgleda gladka, koncentracija a^* pa še zmeraj zelo hitro pada na nič.

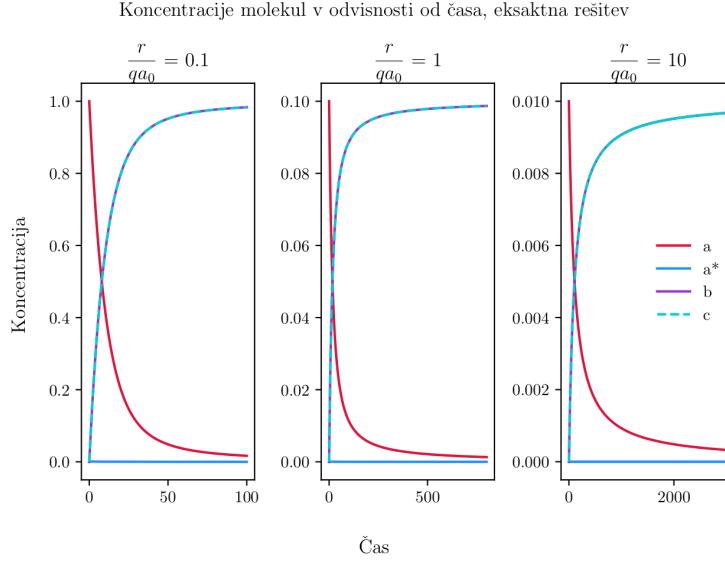


Slika 1: Rešitev sistema enačb, ki opisujejo binarno reakcijo. Za začetne pogoje smo izbrali $a_0 = 5$, $a_0^* = 3$, $b_0 = 2$ in $c_0 = 1$. Hitrosti reakcij so $p = 1$, $q = 1000$ in $r = 100$.

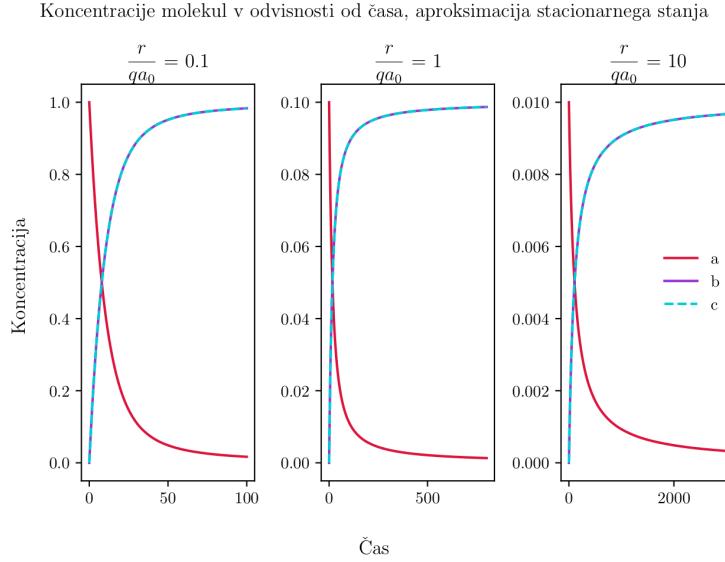


Slika 2: Preverimo, da je rešitev zvezna funkcija. Rišemo časovni potek reakcij za začetne pogoje $a_0 = 5$, $a_0^* = 3$, $b_0 = 2$, $c_0 = 1$ in parametre $p = 1$, $q = 1$ ter $r = 100$.

Poglejmo si nekaj karakterističnih potekov reakcij. Določimo hitrost reakcije $p = 1$, za q pa naj velja $\frac{q}{p} = 1000$. Izberemo $r = 100$ in zahtevamo še $\frac{r}{qa_0} = x$, pri čemer je $x \in \{0.1, 1, 10\}$. Rešitve, ki zadostujejo naštetim pogojem, prikazuje slika 3. Oblike rešitev so si zelo podobne, časovne skale pa se med seboj precej razlikujejo, saj reakcija za $x = 0.1$ poteče v približno 100 časovnih enotah, za $x = 10$ pa v več kot 2000 enotah.



Slika 3: Nekaj karakterističnih potekov binerane reakcije, ki jo opisuje naš sistem. Za začetne pogoje smo izbrali $a_0 = \frac{xr}{q}$.



Slika 4: Časovna odvisnost koncentracij, ki nastopajo v binarni reakciji, ki smo jo poenostavili z aproksimacijo stacionarnega stanja $\dot{a}^* = 0$. Odvisnost ostane enaka kot na sliki 3.

Tako na sliki 1 [kot 3] je koncentracija a^* praktično ves čas na ničli, zato se nam zdi aproksimacija stacionarnega stanja smiselna. Iz enačbe $\dot{a}^* = 0$ izrazimo a^* in ga vstavimo v preostale enačbe.

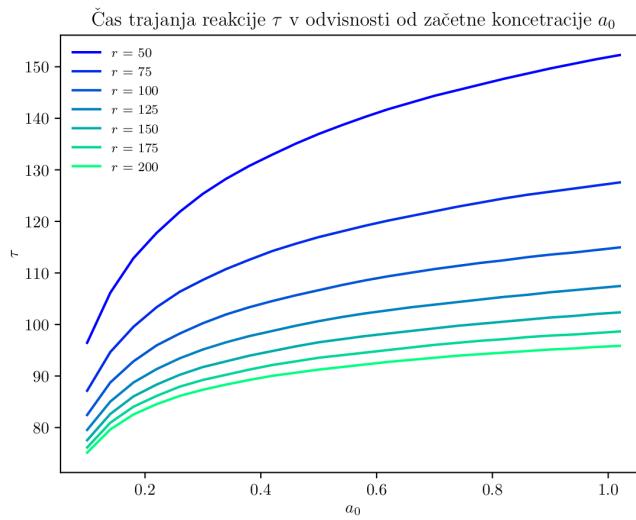
$$a^* = \frac{pa^2}{qa + r} \quad (1)$$

$$\dot{a} = pa^2 \left(\frac{qa}{qa + r} - 1 \right) \quad (2)$$

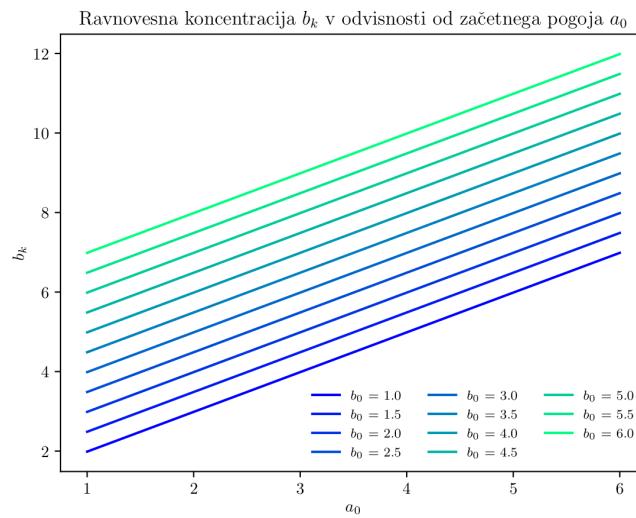
$$\dot{b} = \dot{c} = r \frac{pa^2}{qa + r} \quad (3)$$

Ponovno narišemo rešitve, pri čemer so parametri in začetni pogoji enaki kot na sliki [3]. Rezultat je prikazan na sliki [4]. Opazimo, da z narejenim približkom praktično nismo spremenili dinamike sistema, saj ostane časovna odvisnost enaka.

Poglejmo si, kako se spreminja čas trajanja reakcije z začetnimi pogoji in parametrom r . Račune delamo s sistemom, ki smo ga zapisali z aproksimacijo stacionarnega stanja. Izberemo $p = 1$ in $q = 1000$ ter $b_0 = c_0 = 0$. Čas trajanja reakcije τ za različne vrednosti r v odvisnosti od začetnih pogojev a_0 je prikazan na sliki [5]. Čas τ se podaljšuje z večanjem začetne koncentracije a_0 in krajša z večanjem hitrosti r .



Slika 5: Odvisnost časa trajanja reakcije τ od začetnih pogojev za različne vrednosti parametra r .



Slika 6: Odvisnost končne koncentracije b_k od začetnega pogoja a_0 za različne začetne koncentracije b_0 .

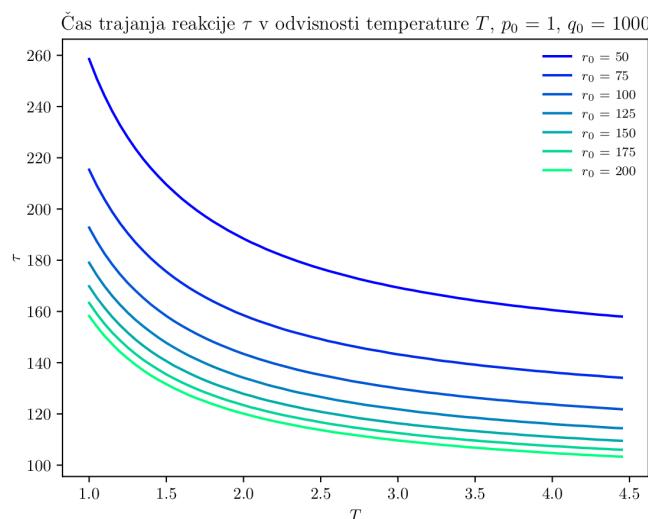
Količina, s katero lahko primerjamo potek reakcij za različne parametre, je tudi ravnotesna koncentracija neke molekule. Opazujemo končno koncentracijo b_k v odvisnosti od začetnih pogojev

a_0 za različne vrednosti b_0 . Opazimo, da je zveza med b_k in obema začetnima pogojema linearна. To prikazuje slika 6.

Kemiki si pri nadzorovanju hitrosti reakcij pomagajo tudi s temperaturo. Tako je mogoče pospešiti počasne reakcije ali upočasniti hitre. Višja kot je temperatura, več je trkov med molekulami in hitrejše so spremembe. Po Arrheniusovi enačbi je hitrost reakcije eksponentna funkcija temperature (vir: https://en.wikipedia.org/wiki/Chemical_kinetics#Temperature). Točno odvisnost zapišemo z enačbo

$$r = r_0 e^{-\frac{E_a}{k_B T}},$$

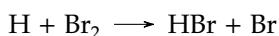
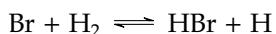
kjer je k_B Boltzmannova konstanta, E_a pa aktivacijska energija. Zaradi preprostosti definiramo karakteristično temperaturo $T_0 = \frac{E_a}{k_B}$ in odslej temperaturo merimo v enotah T_0 . Na sliki 7 res vidimo, da se čas trajanja reakcije τ krajsa z večanjem temperature. Predpostavili smo, da imata tudi q in p enako temperaturno odvisnost.



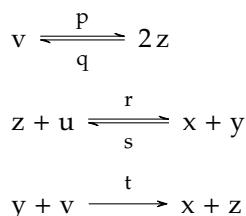
Slika 7: Temperaturna odvisnost časa trajanja reakcije τ . Začetni pogoji so bili $a_0 = 0.5$, $b_0 = c_0 = 0$.

Model reakcije $\text{H}_2 + \text{Br}_2 \rightleftharpoons 2 \text{HBr}$

Obravnavamo model reakcije $\text{H}_2 + \text{Br}_2 \rightleftharpoons 2 \text{HBr}$, ki vključuje stopnje:



Uvedemo krajše oznake za koncentracije $[\text{H}_2] = u$, $[\text{Br}_2] = v$, $[\text{HBr}] = x$, $[\text{H}] = y$ in $[\text{Br}] = z$ ter reakcijske hitrosti p , q , r , s , t .



MODELSKA ANALIZA I

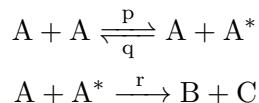
5. naloga – Modeli kemijskih reakcij

Ema Mlinar, vpisna št.: 28222071

9. november 2022

1 Model osnovne binarne reakcije

Obravnavamo model binarne kemijske reakcije:



Tu črke p , q in r predstavljajo hitrosti reakcij. Zapišemo lahko kinematične enačbe za koncentracije:

$$[\dot{A}] = -p[A]^2 + q[A][A^*] \quad (1)$$

$$[\dot{A}^*] = p[A]^2 - q[A][A^*] - r[A^*] \quad (2)$$

$$[\dot{B}] = [\dot{C}] = r[A^*] \quad (3)$$

Kot smo se učili pri kemiji na hitrost reakcije vplivajo naslednji faktorji:

- temperatura
- koncentracija reaktantov
- površina reaktantov (trdna snov)
- (prisotnost katalizatorja)

Vsakega od teh faktorjev bom v naslednjih podpoglajih bolj natančno pogledala, razen zadnje točke, saj so katalizatorji zelo specifične narave in unikatni za vsako reakcijo.

1.1 Temperatura

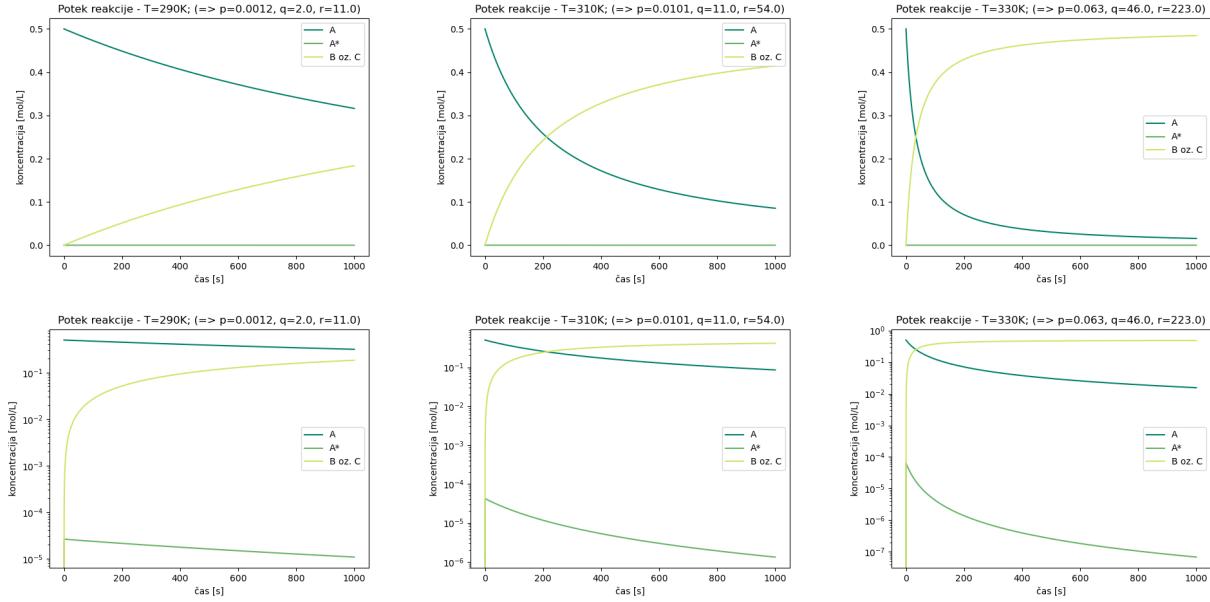
Temperatura je eden glavnih faktorjev vpliva na hitrost kemijske reakcije, vpliva na same vrednosti koeficientov p , q in r . Odvisnost lahko opišemo z Arrheniusovimi enačbami

$$p = p_0 e^{-E_p/(RT)} \quad (4)$$

$$q = q_0 e^{-E_q/(RT)} \quad (5)$$

$$r = r_0 e^{-E_r/(RT)} \quad (6)$$

kjer so p_0 , q_0 in r_0 konstante, specifične za določeno reakcijo; E_p , E_q in E_r pa pripadajoče aktivacijske energije. R je splošna plinska konstanta, ki znaša $8.314 \text{ } JK^{-1}mol^{-1}$.



Slika 1: Prikaz odvisnosti poteka reakcije od temperature v linearni in logaritemski skali. Podatki za aktivacijske energije in konstante p_0 , q_0 in r_0 so: $E_p = 0.78 \cdot 10^5 J/mol$, $p_0 = 1.4 \cdot 10^{11} mol/Ls$, $E_q = 0.62 \cdot 10^5 J/mol$, $q_0 = 3 \cdot 10^{11} mol/Ls$, $E_r = 0.6 \cdot 10^5 J/mol$, $r_0 = 7 \cdot 10^{11} mol/Ls$.

Odvisnost poteka reakcij je prikazana na sliki 1. Vidimo, da je sistem zelo odvisen od temperature. V vseh primerih pa količina A pada eksponentno in počasneje, če je temperatura nižja. Naslednja zanimiva opazka je, da se s temperaturo spreminjajo tudi razmerja med hitrostmi reakcij, npr. q/p . Razmerje q/p je blizu vrednosti predpisani v nalogi $q/p = 1000$, a kot vidimo zaradi različne eksponentne narave p , r in q dobimo različna razmerja, ko višamo temperaturo. Kljub temu pa pri vseh grafih vidimo, da je zaradi velikega razmerja q/p A^* ves čas skoraj 0, saj se ves nastali element A^* zelo hitro porabi, ko nastane.

1.2 Koncentracija reaktantov

Kot že rečeno, reakcijo močno spremenijo tudi drugačne začetne koncentracije reaktantov.

Na sliki 2 je prikazan potek za dve različni začetni koncentraciji reaktanta A , nato pa je prikazano še, kaj se zgodi v primeru, da dodamo v začetno zmes še nekaj snovi A^* .

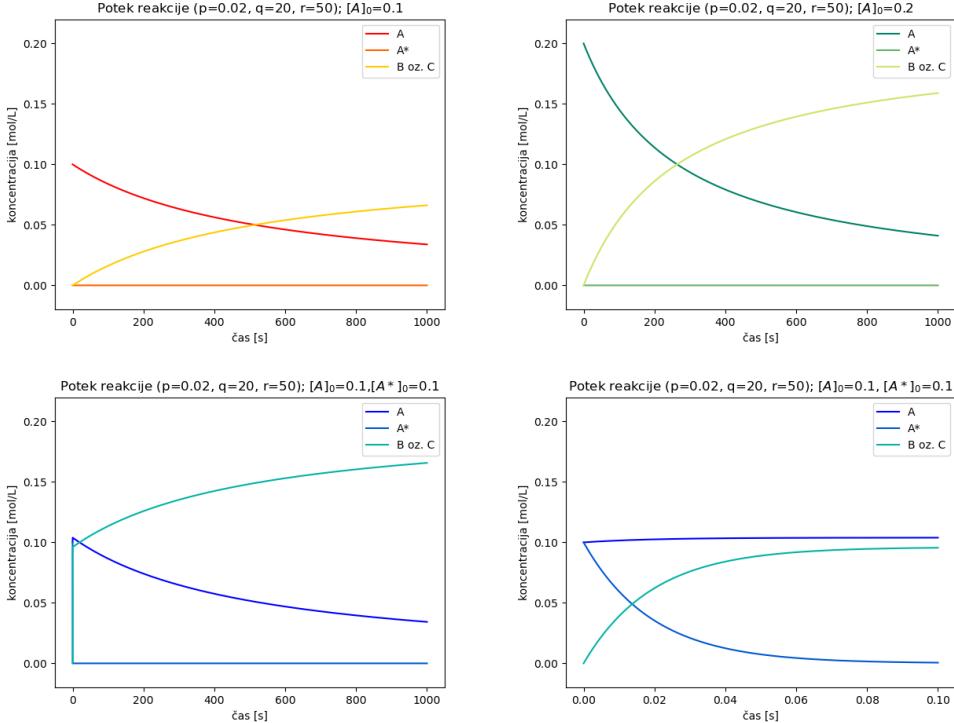
Opazimo lahko, da več reaktantov pospeši reakcijo. Opazimo lahko celo, da imata ob času $t = 1000s$ oba poteka reakcije skoraj enako koncentracijo A , kljub temu, da smo v drugem primeru začeli z dvakrat večjo koncentracijo. Posledično je krivulja pri večji koncentraciji tudi bolj ukrivljena.

Poseben fenomen pa nastane, če začetni količini $[A]_0 = 0.1 mol/L$ primešamo še enako količino A^* . Kot vidimo na grafu zaradi hitrosti reakcij q in r (in počasnosti p) količina A^* nemudoma pade skoraj na 0. Pri tem se določen delež A^* pretvori v B in C , manjši delež pa v A . Če pogledamo začetni del od bližje, vidimo, da se vse to zgodi v začetnih 0.5s.

1.3 Površina reaktantov

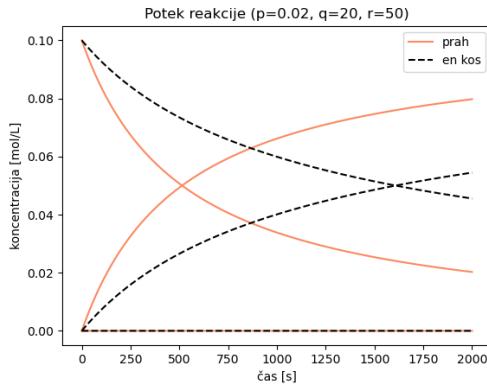
Če je reaktant A v trdnem agregatnem stanju, postane pomembna velikost delcev. Predvidevamo namreč, da reakcija poteka precej počasneje, če je A v enem kosu, reakcija pa lahko poteka samo na robu. To je še bolj očitno, ko imamo reaktanta dva (ali več), saj lahko druga snov pride do prve le preko površine.

Imejmo sedaj dva primera:



Slika 2: Prikaz odvisnosti poteka reakcije od začetne koncentracije A (zgornja dva grafa) za $[A]_0 = 0.1 \text{ mol/L}$ in $[A]_0 = 0.2 \text{ mol/L}$. Spodaj pa je prikazan še primer, ko v začetno zmes dodamo poleg A še enako količino A^* na krajši in daljši časovni skali.

1. A je v enem kosu
2. A je v prahu (neskončno majhni delci)



Slika 3: Prikaz poteka reakcij za reaktant v enem kosu in reaktant v prahu.

V primeru 1 lahko uporabimo zgornji model, v primeru reaktanta v enem kosu pa (če poenostavimo, da ima obliko krogle) velja:

$$V = \frac{4\pi r^3}{3} \quad (7)$$

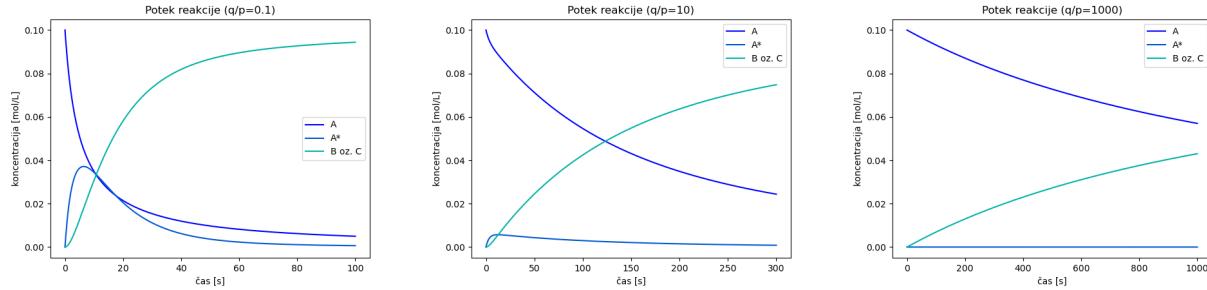
$$S = 4\pi r^2 \quad (8)$$

$$= 4\pi \left(\frac{3V}{4\pi} \right)^{2/3} \quad (9)$$

V enačbah 1 in 2 torej člen $p[A]^2$ zamenjamo z $S \cdot p[A]^2$, saj reakcija lahko poteka le na robu in je tako manj snovi A, ki lahko zreagira. Dobimo graf na sliki 3. Kot pričakovano vidimo, da reakcija poteka počasneje, če je reaktant iz enega kosa, prav tako je krivulja bolj ravna.

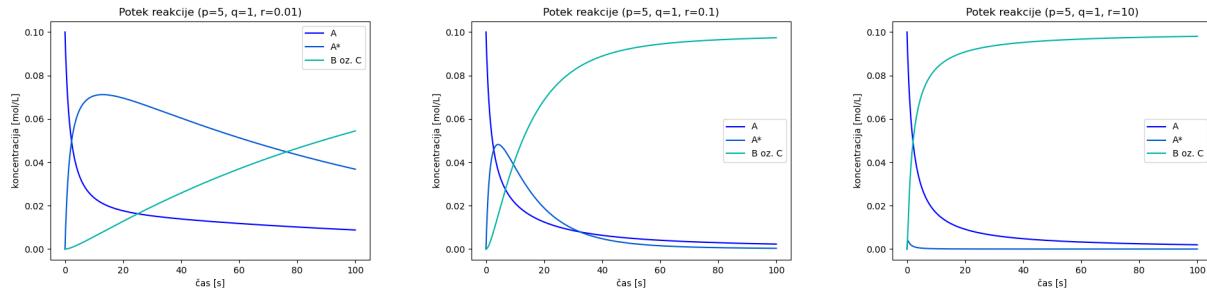
1.4 Različno razmerje q/p in vrednost r

Do sedaj smo se trudili ohraniti razmerje q/p okoli 1000, poglejmo, kaj se zgodi, če damo druga razmerja, glej sliko 4.



Slika 4: Prikaz poteka reakcij za različne vrednosti kvocienta q/p . Pozor, skale na x osi so različne.

Najprej opozorimo, da so grafi precej odvisni tudi od vrednosti r. Velja pa, da je pri večjem razmerju q/p vse bolj razpotegnjeno v času. Prav tako je produkta A^* precej manj, kar je intuitivno logično. Poglejmo sedaj še, kako vrednost r vpliva na potek reakcije, glej sliko 5



Slika 5: Prikaz poteka reakcij za tri različne vrednosti koeficienta r.

Vidimo, da za manjše r reakcija poteka počasneje, prav tako je večja količina A^* . Pri večjih r pa je količina A^* praktično 0.

1.5 Aproksimacija stacionarnega stanja

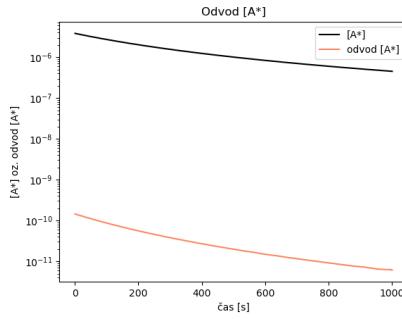
Izkaže se, da lahko sistem enačb na začetku dokaj dobro poenostavimo, tako da uvedemo aproksimacijo $\dot{[A^*]} = 0$. Prikaz, da je aproksimacija dobra je na sliki 6. Opazimo, da je odvod za več kot štiri rede velikosti manjši.

Iz druge enačbe zdaj lahko izrazimo $[A^*]$ ter ga nesemo v prvo in tretjo enačbo. Dobimo:

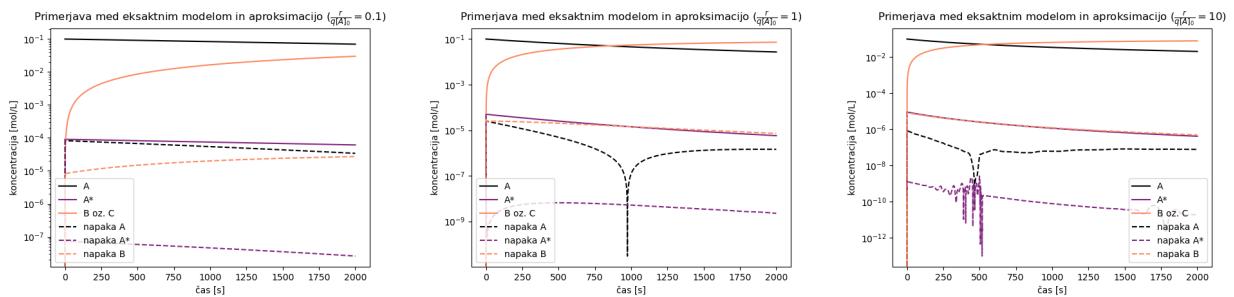
$$\dot{[A]} = -p[A]^2 + \frac{qp[A]^3}{q[A] + r} \quad (10)$$

$$\dot{[B]} = \dot{[C]} = \frac{rp[A]^2}{q[A] + r} \quad (11)$$

Narišimo si sedaj primerjavo med eksaktno formulo in aproksimacijo, glej sliko 7.

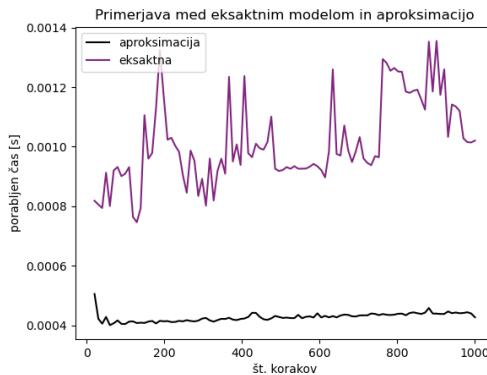


Slika 6: Primerjava vrednosti $[A^*]$ in njenega odvoda. Slika je narisana za parametre ($p=0.02$, $q=20$, $r=50$) in začetno koncentracijo $[A]_0=0.1$.



Slika 7: Primerjava eksaktne formule in napake za različna razmerja $\frac{r}{q[A]_0}$. Navidezni pol pri drugi in tretji sliki je posledica logaritemske skale in tega, da graf eksaktne formule sekata graf aproksimacije. Torej z drugimi besedami, da je pred polom večja vrednost aproksimacije, za njim pa večja vrednost eksaktne formule. Ostala nihanja so verjetno posledica numerične narave programa.

Kot vidimo je napaka precej manjša od vrednosti za vsa tri razmerja $\frac{r}{q[A]_0}$, torej je aproksimacija dobra. Ampak kljub temu pa se vprašamo, zakaj bi sploh vzeli aproksimacijo, tudi če je le malo slabša. Odgovor je na sliki 8.



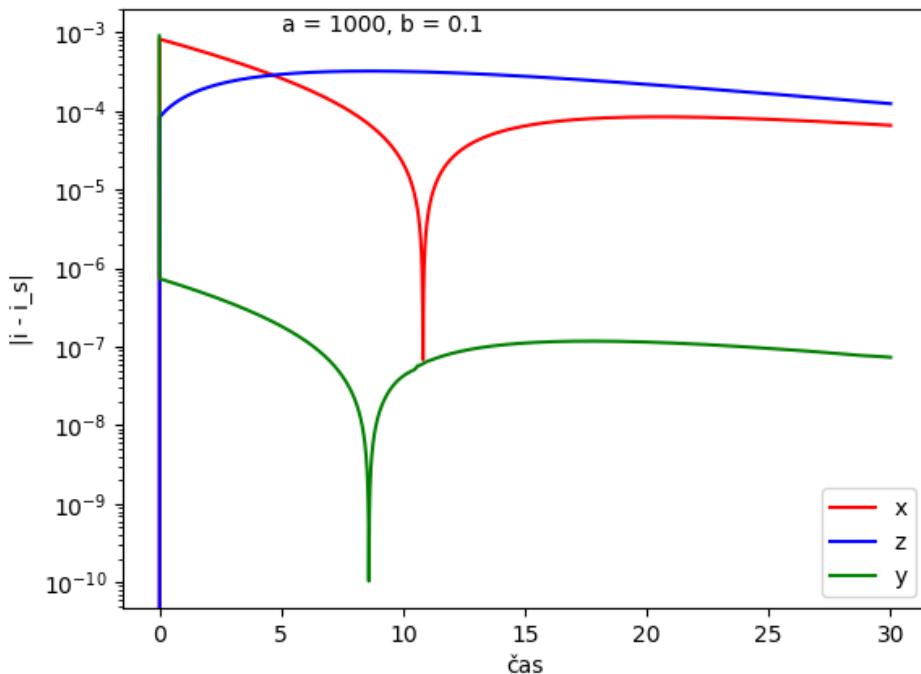
Slika 8: Prikaz časa, ki ga program potrebuje za izvedbo programa. Kljub temu, da sem ugasnila vse programe, ki na mojem računalniku delujejo vzporedno pa je očitno še vedno ostalo nekaj zunanjih porabe procesorja. Za vsako točko na grafu sem tudi izračunala povprečje 200 meritev časa. Vzela sem čas in ne število korakov, ker pythonova funkcija `odeint`, ki sem jo uporabljala, vrne le vrednosti za iteracije za posamezne točke, kar se mi je pa zdeleno manj relevantno kot porabljen čas.

Kljub nihanjem na grafu (zaradi vzporednega delovanja računalnika) lahko zelo očitno vidimo, da program z aproksimacijo deluje približno dvakrat hitreje kot z eksaktno formulo. Vidimo tudi, da je

Naloga 2:

- Odwračnost od $\frac{H_2}{Br_2}$.
- Odwračnost od parametrov
- Vpliv sredine koncentracije HBr
- Hitrost podeljne reakcije
- Elsahltrix vs. standardna reditev
- Dolvoditev enolodih klastov

Brez levnega delčka

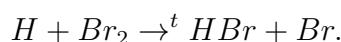
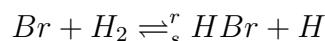
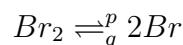


Slika 7: Na grafu je prikazana $|i - i_s|$, kjer je $i = x$, y ali z . $b = 0.1$, $a = 1000$.

Iz grafov 5 - 7 lahko vidimo, da so razlike med poenostavljenim modelom in prvotnim zelo majhne. Se pa večajo z zmanjševanjem parametra b , kar smo že prej napovedali.

2 Model reakcije $H_2 + Br_2 \rightleftharpoons 2HBr$

Poglejmo proces pridobivanja HBr iz Br_2 in H_2 .



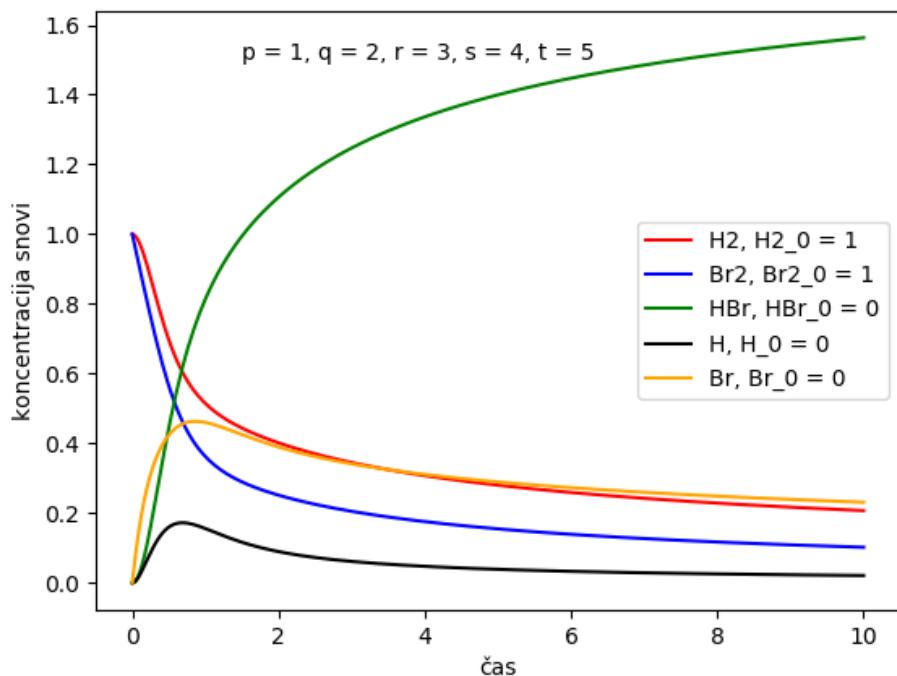
Uvedemo nove spremenljivke $u = [H_2]$, $v = [Br_2]$, $x = [HBr]$, $y = [H]$ in $z = [Br]$. Sistem diferencialnih enačb je potem

$$\dot{u} = sxy - ruz$$

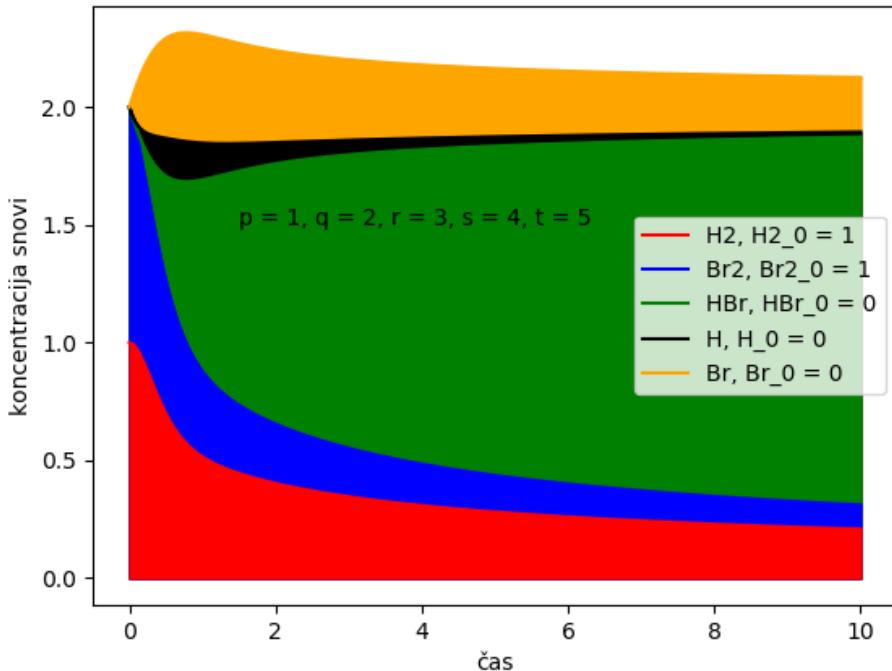
$$\dot{v} = qz^2 - pv - tvy$$

$$\begin{aligned}\dot{x} &= ruz + tvy - sxy \\ \dot{y} &= ruz - sxy - tvy \\ \dot{z} &= 2pv + tvy - 2qz^2 + sxy - ruz\end{aligned}$$

Zaradi preprostosti sem privzel, da so hitrosti reakcij $p = 1$, $q = 2$, $r = 3$, $s = 4$, $t = 5$. Zanimivo bi bilo videti, kakšne so realne vrednosti teh parametrov, ki pa imajo verjetno veliko temperaturno odvisnost. Če sedaj narišemo rešitve sistema diferencialnih enačb dobimo graf 8, oziroma predstavljen v alternativni obliki na sliki 9.



Slika 8: Na grafu je prikazana koncentracija različnih snovi v odvisnosti od časa.



Slika 9: Na grafu je prikazana koncentracija različnih snovi v odvisnosti od časa.

Poizkusimo narediti približek stacionarnega stanja. Privzemimo, da se koncentraciji H in Br (y in z) spremojnjata dovolj počasi $\dot{y} = \dot{z} \approx 0$. Iz zgornjih diferencialnih enačb za \dot{y} in \dot{z} lahko sedaj izrazimo zvezi za y in z

$$z = \sqrt{\frac{p}{q}v}$$

$$y = \frac{ruz}{sx + tv} = \sqrt{\frac{p}{q}v} \frac{ru}{sx + tv}.$$

Z nekaj računanja lahko sedaj pridemo do novega sistema enačb

$$\dot{x} = \sqrt{\frac{p}{q}} \frac{2rt}{s} \frac{u\sqrt{v}}{\frac{t}{s} + \frac{x}{v}} = k \frac{u\sqrt{v}}{m + \frac{x}{v}}$$

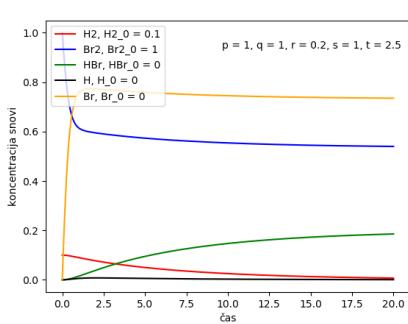
$$\dot{u} = \dot{v} = -\frac{k}{2} \frac{u\sqrt{v}}{m + \frac{x}{v}},$$

kjer sta

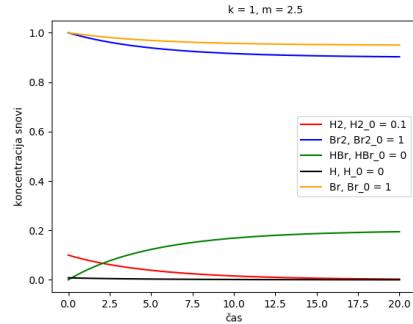
$$k = \frac{2tr}{s} \sqrt{\frac{p}{q}},$$

$$m = \frac{t}{s}.$$

Poglejmo sedaj potek koncentracij z upoštevanjem stacionarnega modela in jih primerjamo z natančnim modelom. Uporabili bomo vrednosti $m = 2, 5$ in $k = 1$ oziroma $t = 2,5$, $s = 1$, $p = 1$, $q = 1$, $r = 0,2$. Uporabil bom 3 različne začetne pogoje $\frac{[H_2(0)]}{[Br_2(0)]} = 0.1, 1, 10$.

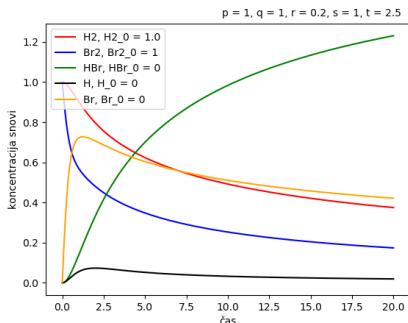


(a) Eksaktna

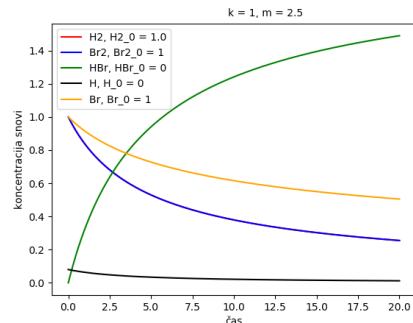


(b) Stacionarni približek

Slika 10: $\frac{[H_2(0)]}{[Br_2(0)]} = 0.1$

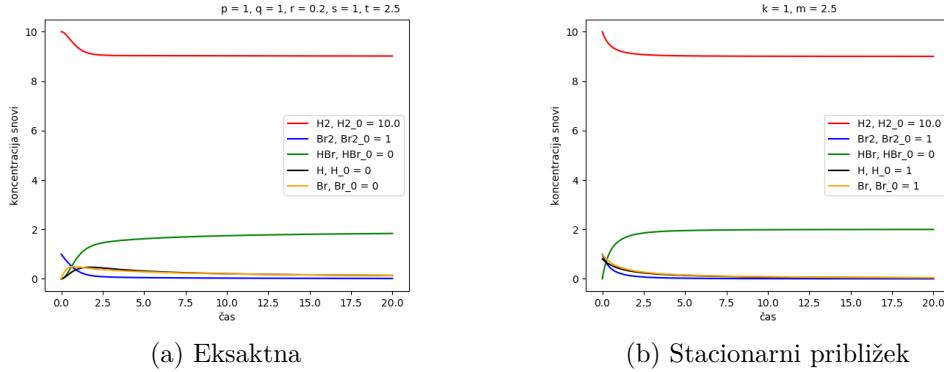


(a) Eksaktna



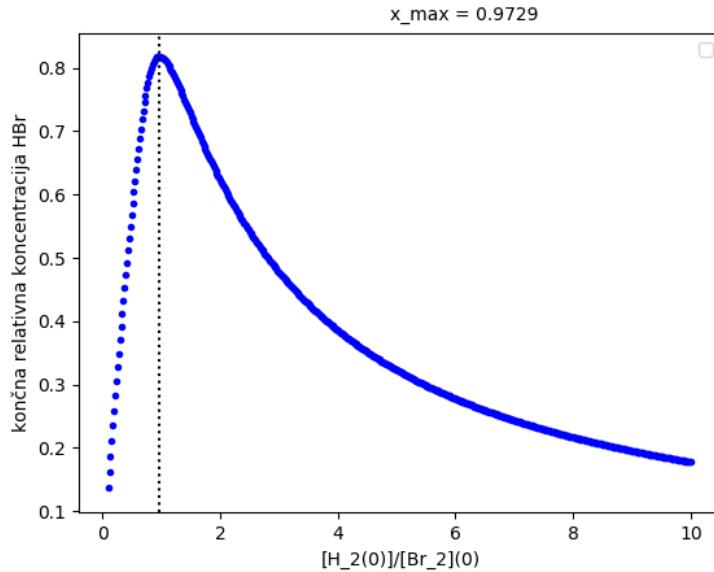
(b) Stacionarni približek

Slika 11: $\frac{[H_2(0)]}{[Br_2(0)]} = 1$



Slika 12: $\frac{[H_2(0)]}{[Br_2(0)]} = 0.10$

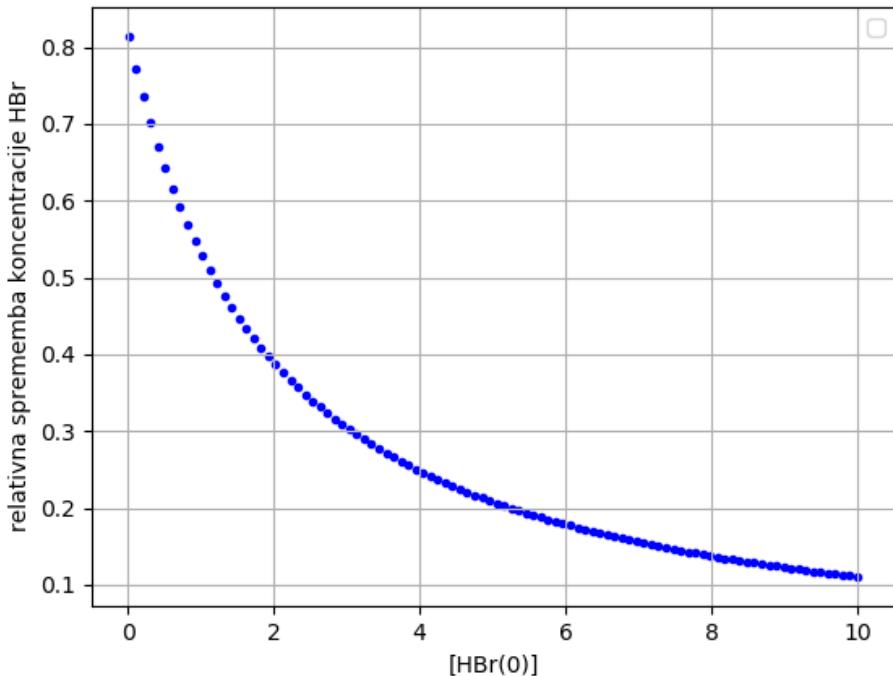
Iz grafov 10 - 12 vidimo, da je potek koncentracije HBr zelo podoben natančni rešitvi tudi v aproksimaciji stacionarnih stanj, se pa koncentracije drugih snovi lahko bistveno razlikujejo. Iz grafov tudi vidimo, da je začetno razmerje koncentracij $\frac{[H_2(0)]}{[Br_2(0)]}$ pomembno za končno vrednost koncentracije [HBr]. Ne sme biti ne preveliko ne premajhno. Odvisnost $[HBr]_{final}(\frac{[H_2(0)]}{[Br_2(0)]})$ lahko vidimo na grafu 13.



Slika 13: Na grafu je prikazana koncentracija HBr v odvisnosti od začetnih koncentracij $\frac{[H_2(0)]}{[Br_2(0)]}$.

Na grafu 14 vidimo, da povečevanje začetne koncentracije HBr nima po-

zitivnega vpliva na hitrost naraščanja koncentracije HBr. Na grafu je prikazana relativna sprememba koncentracije HBr od začetka do nekega časa T v odvisnosti od začetne koncentracije HBr $\frac{[HBr](T)-[HBr](0)}{[H_2](0)+[H](0)+[Br_2](0)+[Br](0)+[HBr](0)}$. Vidimo, da se pri veliki začetni koncentraciji koncentracija v času T spremeni za manj. To pomeni, da se je hitrost reakcije zmanjšala.



Slika 14: Na grafu je prikazana koncentracija HBr v odvisnosti od začetnih koncentracij $\frac{[H_2(0)]}{[Br_2(0)]}$.

Sedaj se pojavi vprašanje, kako določimo empirični konstanti k in m. Zvezo

$$\dot{x} = k \frac{u\sqrt{v}}{m + \frac{x}{v}}$$

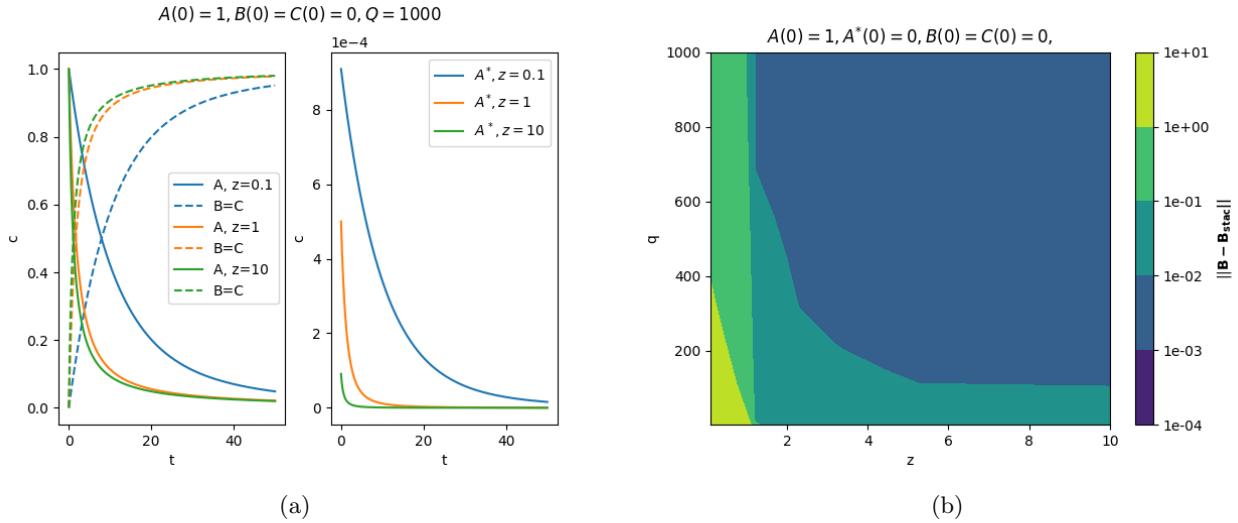
lahko prepišemo v obliko

$$\frac{x}{v} = k \frac{u\sqrt{v}}{\dot{x}} - m.$$

Ker lahko koncentraciji u = [H₂] in v = [Br₂] znamo meriti z nekimi optičnimi metodami in koncentracijo x = [HBr] preko pH vrednosti. Če sedaj rišemo graf $\frac{x}{v}(\frac{u\sqrt{v}}{\dot{x}})$ bomo dobili premico z naklonom k in začetno vrednostjo m.

Žiga Šimcgerj

parametre (slika 4(a)) vidim, da v približku stacionarnega stanja, ne dobim skokov koncentracij pri majhnih časih. Rešitve so v ostalih pogledih precej podobne kot eksaktna rešitev (slika 1). V ta namen sem pogledal natančnost stacionarne rešitve (slika 4(b)). Graf prikazuje razliko med eksaktno rešitvijo \mathbf{B} in stacionarno rešitvijo \mathbf{B}_{stac} koncentracije produkta B. Za merilo odstopanja sem vzel normo razlik med rešitvama v odvisnosti od parametrov Q in z. Pri dovolj velikem Q in z pademo v območje, kjer stacionarna rešitev zelo dobro opisuje eksaktno.



Slika 4: a) Časovni potek koncentracij v stacionarnem približku.b) Odstopanje med stacionarno in eksaktno rešitvijo produkta B v odvisnosti od parametrov $q = Q$ in z .

3 Model reakcije $H_2 + Br_2 \rightarrow 2HBr$

Pridobivanje HBr lahko opišemo z reakcijami



P,q,r,s,t so hitrosti reakcij. Za lažjo obravnavo lahko uvedem spremenljivke $z = [Br]$, $y = [H]$, $v = [Br_2]$, $x = [HBr]$, $u = [H_2]$. Sistem diferencialnih enačb, ki opisujejo reakcije, lahko zapišem kot

$$\dot{v} = -vp + qz^2 - tvy , \quad (13)$$

$$\dot{z} = -2qz^2 - rzu + 2pv + tyv + sxy , \quad (14)$$

$$\dot{u} = -ruz + sxy , \quad (15)$$

$$\dot{x} = rzu + tyv - sxy , \quad (16)$$

$$\dot{y} = rzu - sxy - tyv . \quad (17)$$

3.1 Stacionarni približek

V stacionarnem približku velja $\dot{y} = \dot{z} = 0$, iz česar sledi

$$z = \frac{\sqrt{pv}}{\sqrt{q}} , \quad (18)$$

$$y = \frac{\sqrt{pvr}u}{\sqrt{q}(tv + sx)} \quad (19)$$

Sedaj lahko vstavim z in y v ostale enačbe iz sistema in dobim

$$\dot{v} = \dot{u} = -\sqrt{\frac{pv}{q}} \frac{tru}{s(\frac{t}{s} + \frac{x}{v})}, \quad (20)$$

$$\dot{x} = \sqrt{\frac{pv}{q}} \frac{2tru}{s(\frac{t}{s} + \frac{x}{v})}. \quad (21)$$

Če primerjam enačbo 21 z enačbo iz navodil lahko vpeljem parametra k in m kot

$$k = \sqrt{\frac{p}{q}} \frac{2rt}{s}, \quad (22)$$

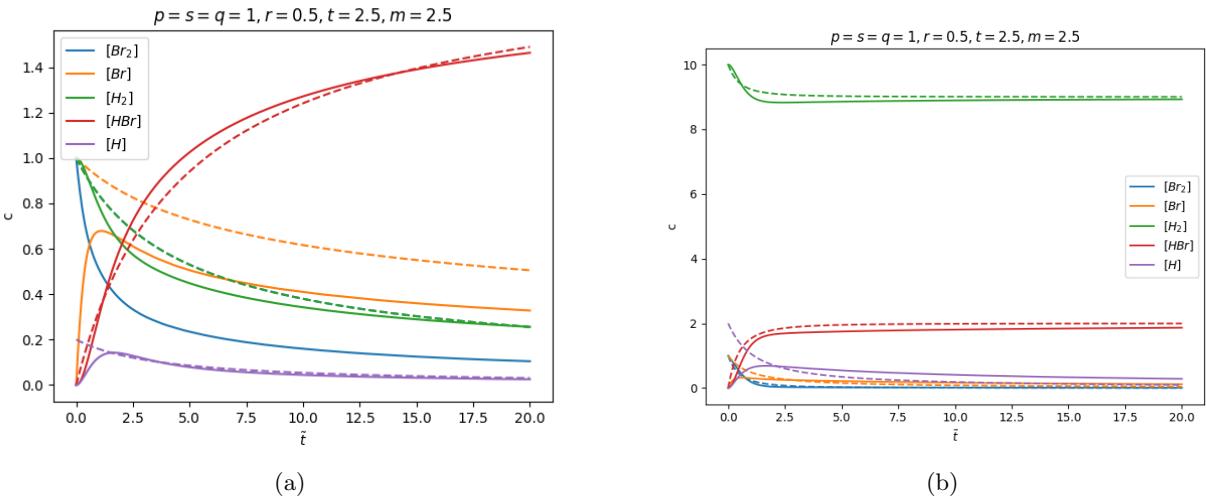
$$m = \frac{t}{s}, \quad (23)$$

sistem lahko še z reskaliranjem časa $\tau = kt$, $d/dt = k d/d\tau$, zapišem kot

$$\dot{v} = \dot{u} = -\frac{\sqrt{vu}}{(m + \frac{x}{v})}, \quad (24)$$

$$\dot{x} = \frac{\sqrt{vu}}{(m + \frac{x}{v})}. \quad (25)$$

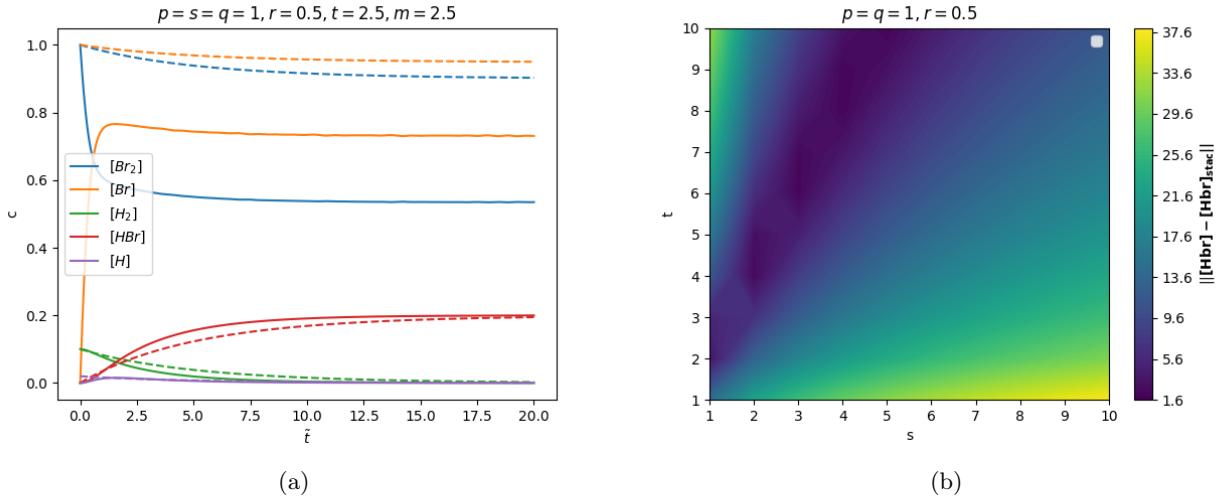
Vidim lahko, da imam opravka z dinamiko treh spremenljivk u, v, x in enim parametrom m. Reskaliranje časa je ekvivalentno temu, da zapišem $k = 1$. Za neničelne koncentracije začetnih elementov sem vzel samo H_2 in Br_2 , saj iz teh dveh pridobivamo ostale. Eksaktne rešitve in rešitve iz stacionarnega približka za različne vrednosti začetnih koncentracij $u(0)/v(0) = 10, 1, 0.1$ so prikazane na sliki 5 in 6(a). Manjsa razmerja začetnih koncentracij sem vzel zato, da sem dobil grafe, ki jih lahko lažje primerjam med sabo. V primeru razmerja 100 ali 0.01 je potrebno uporabiti logaritemsko skalo, da je kaj razvidno, kar mogoča težjo primerjavo.



Slika 5: a) Časovni potek koncentracij reakcij. Polna črta prikazuje eksaktne rešitve, črtkana črta prikazuje stacionarni približek. $[H_2](0)/[Br_2](0) = 1$. b) Časovni potek koncentracij reakcij. Polna črta prikazuje eksaktne rešitve, črtkana črta prikazuje stacionarni približek. $[H_2](0)/[Br_2](0) = 10$.

Iz grafov je razvidno, da stacionarni približek precej dobro opiše koncentracijo HBr. Približek je tudi dober za ostale koncentracije, razen za Br, kjer precej odstopa od eksaktne rešitve. Tako kot v prvi nalogi, je tudi v tem primeru razvidno, da približek ne prikaže začetnega skoka koncentracije, ampak iz stacionarnih enačb dobimo neko začetno vrednost elementa, ki ga nismo imeli ob začetnem času. V primeru, ko imamo večjo začetno koncentracijo Br_2 je približek stacionarnega stanja nenanatančen.

Zanimala me je natančnost približka v odvisnosti od parametrov t in s oziroma parametra m v stacionarnem modelu (slika 6(b)). Za merilo natančnosti sem vzel normo razlike med eksaktno rešitvijo koncentracije in



Slika 6: a) Časovni potek koncentracij reakcij. Polna črta prikazuje eksaktno rešitev, črtkana črta prikazuje stacionarni približek. $[H_2](0)/[Br_2](0) = 0.1$.

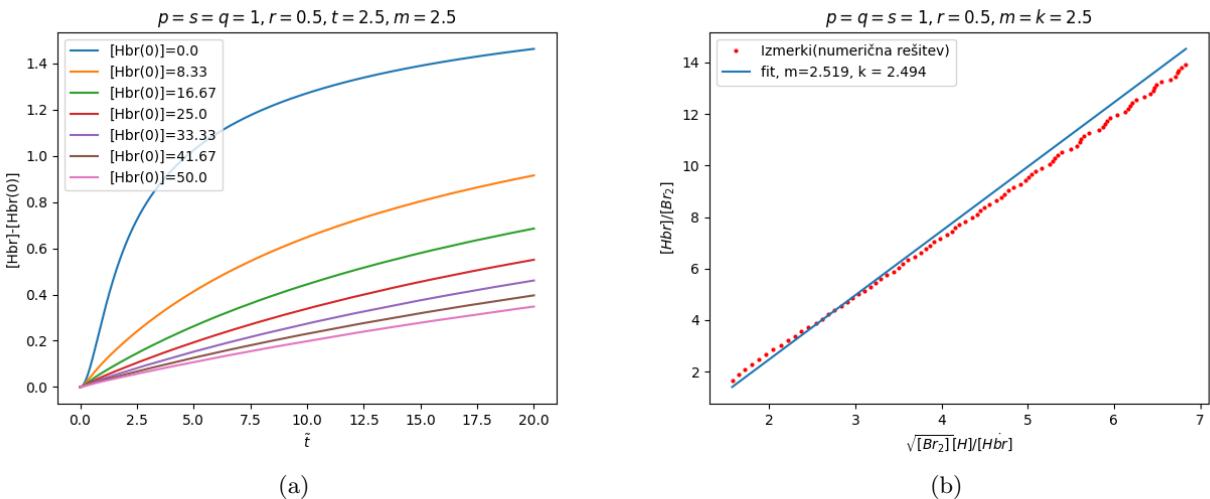
stacionarnim približkom. Iz grafa je razvidno, da mora biti razmerje, da dosežemo največjo natančnost, okrog $\frac{t}{s} \approx 2.5$. Ravno taka vrednost parametra m je bila podana v nalogi.

Zanimivo je pogledati, kako začetna koncentracija HBr vpliva na potek reakcije (7(a)), kjer je prikazan potek novo pridobljenega HBr v odvisnosti od začetnih koncentracij. Iz grafa je razvidno, da večanje koncentracije upočasnuje reakcij, kar je tudi pričakovano. Začetna koncentracija HBr povzroči počasnejše približevanje končni koncentraciji.

V zadnjem delu naloge je potrebno razmisiliti, kako izmeriti parametra k in m v praksi. Parameter k dodam enačbam dinamike, tako da inverzno reskaliram čas. V praksi bi si želeli meritve, ki ležijo na premici, saj je te najlaže izmeriti. Pri eksperimentu lahko merimo koncentracije H_2 , Br_2 in HBr . Enačbo 25 lahko prepišem v obliko

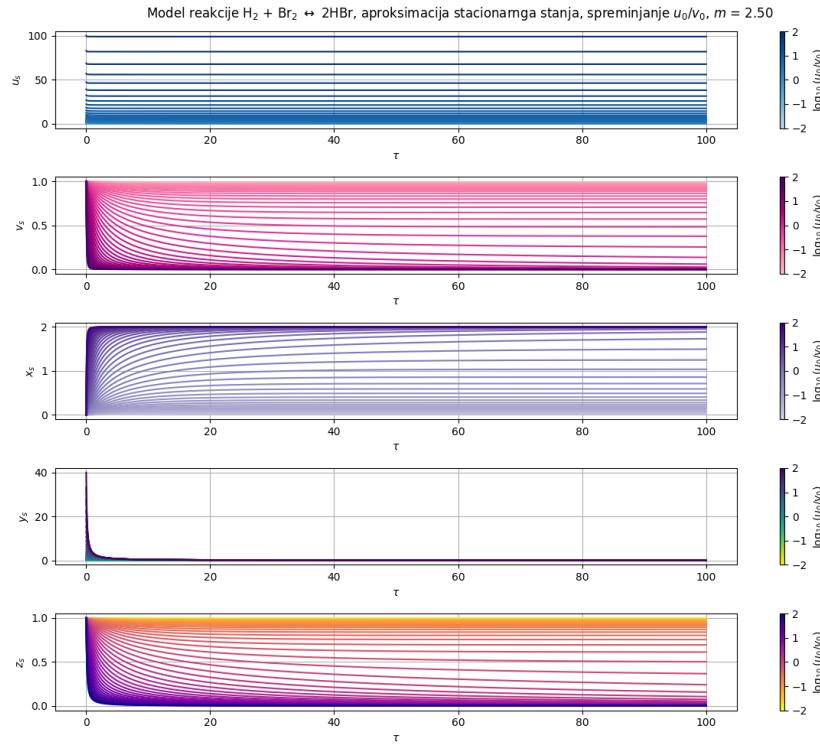
$$\frac{x}{v} = \frac{ku\sqrt{v}}{\dot{x}} - m, \quad (26)$$

kjer ima sedaj enačba obliko premice. Parameter k predstavlja naklon premice in m predstavlja premik. Ker imamo meritve x , lahko iz končnih differenc. V ta namen sem uporabil NumPyjevo funkcijo $diff$, ki izračuna končne diference naših meritov. Meritve u, v, x sem generiral z eksaktnim reševanjem sistema diferencialnih enačb, na katere sem prilagodil premico. Vrednost parametrov iz stacionarnega približka se dobro ujema z eksaktnimi.



Slika 7: a) Časovni potek koncentracije HBr pri različnih začetnih koncentracijah HBr. b) Eksaktne rešitve sistema in prilagojena premica, ki opisuje stacionarni približek.

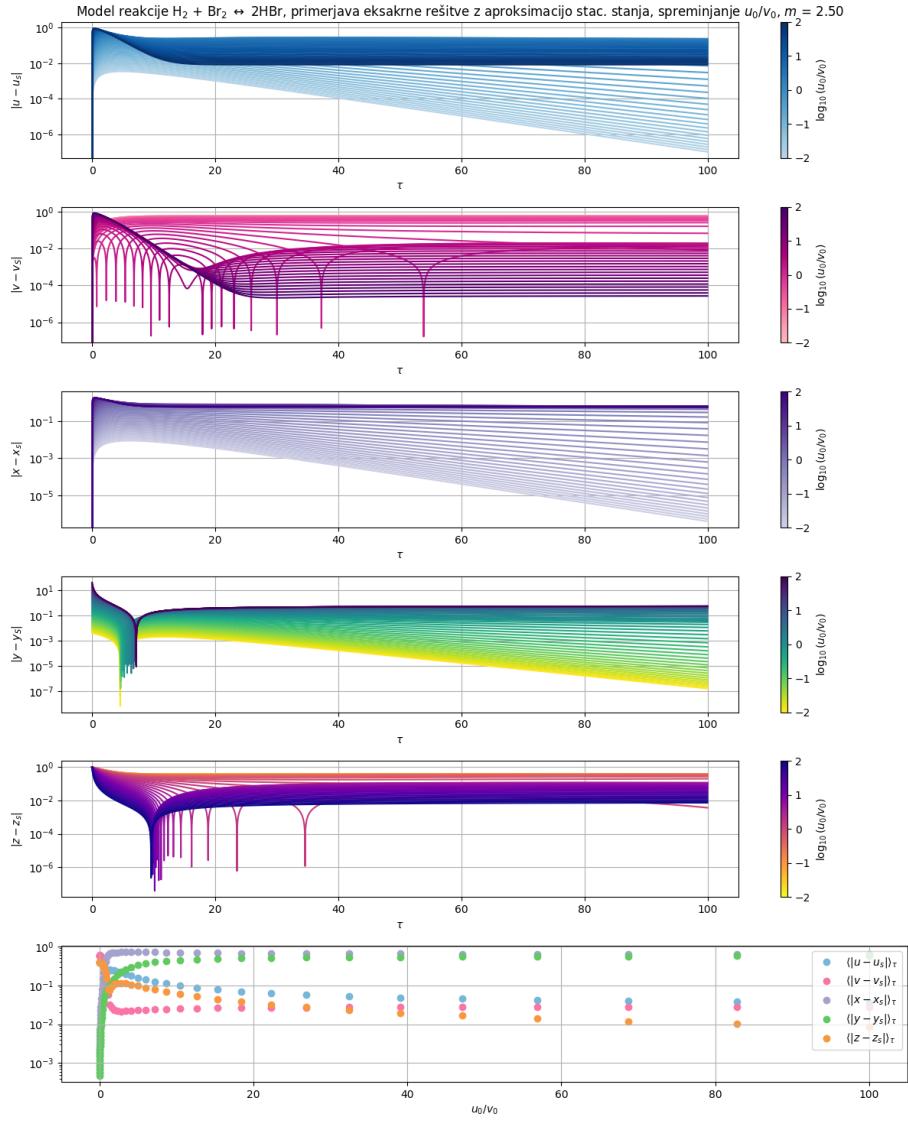
Mihša Plešec



Slika 8: Eksaktne rešitve modela reakcije $H_2 + Br_2 \rightleftharpoons 2 HBr$ pri parametrih $p = q = r = s = 1$, $l = 2.5$ ter začetnimi pogoji $x_{s0} = 0$.

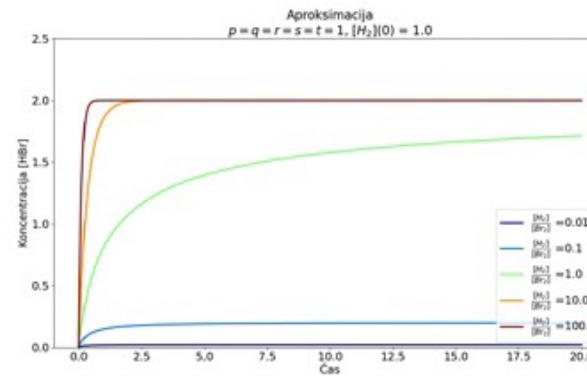
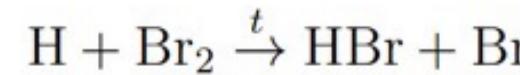
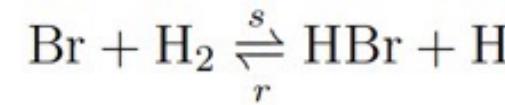
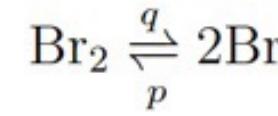
Na sliki 8 vidim, da je pri y na začetku zelo velik skok.

Primerjava stacionarnega približka in eksaktne rešitve, skupaj z odstopanjem je prikazana na slikah 9 in 10 (logaritemska skala).

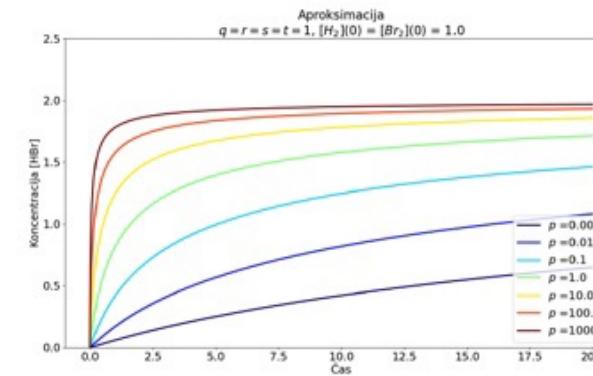


Slika 9: Primerjava stacionarnega približka in eksaktne rešitve pri parametrih $p = q = r = s = 1$, $l = 2.5$ ter začetnimi pogoji $x_0 = y_0 = z_0 = x_{s0} = 0$.

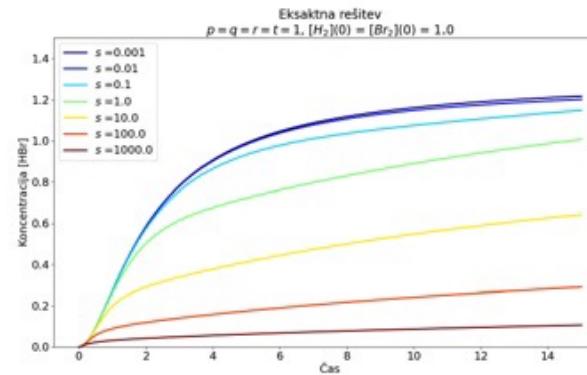
Tiametek: katal.



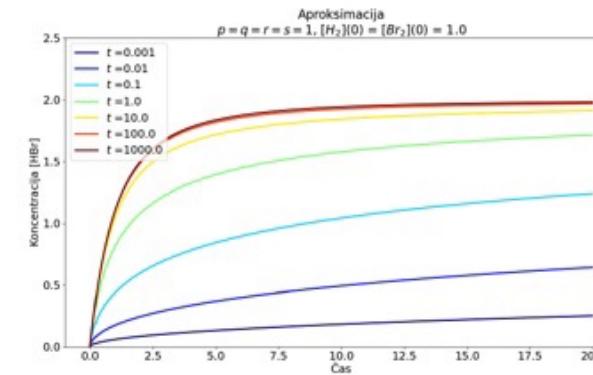
(a)



(b)



(c)



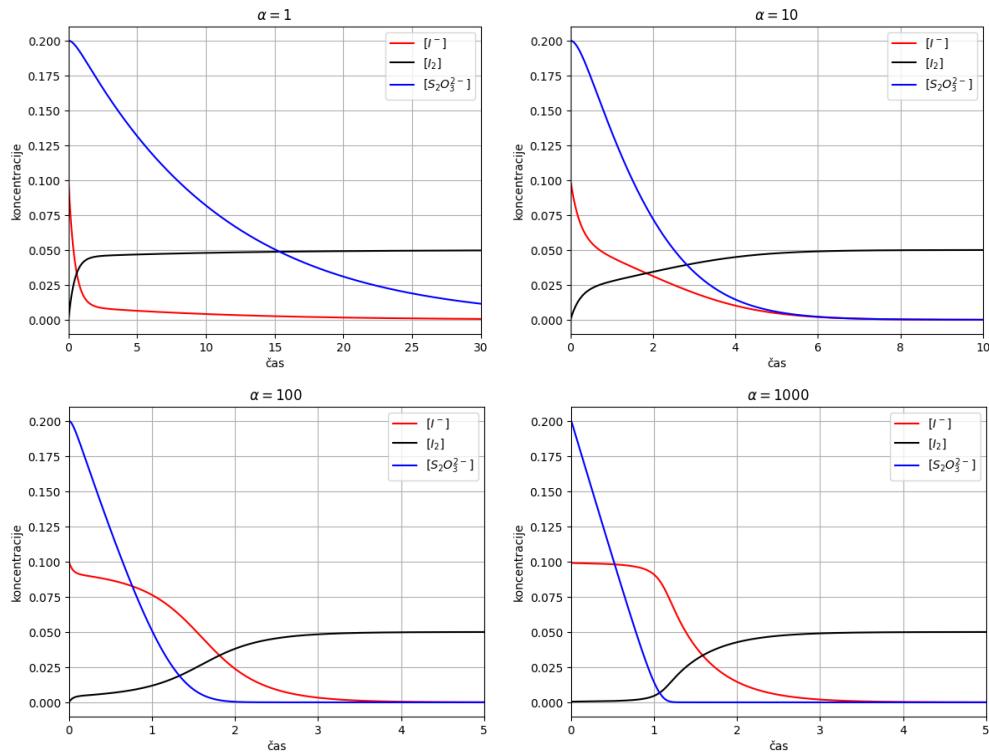
(d)

Slika 6: Enako, kot [5], le da tokrat upoštevamo aproksimacijo stacionarnega stanja

Naloga 3 :

- Od česa je odvisen dan prelaska?
- U kolikih se razdobljih prelazi (nastavljače se dani)
- Kako leter je prelaz?

Jem Golob



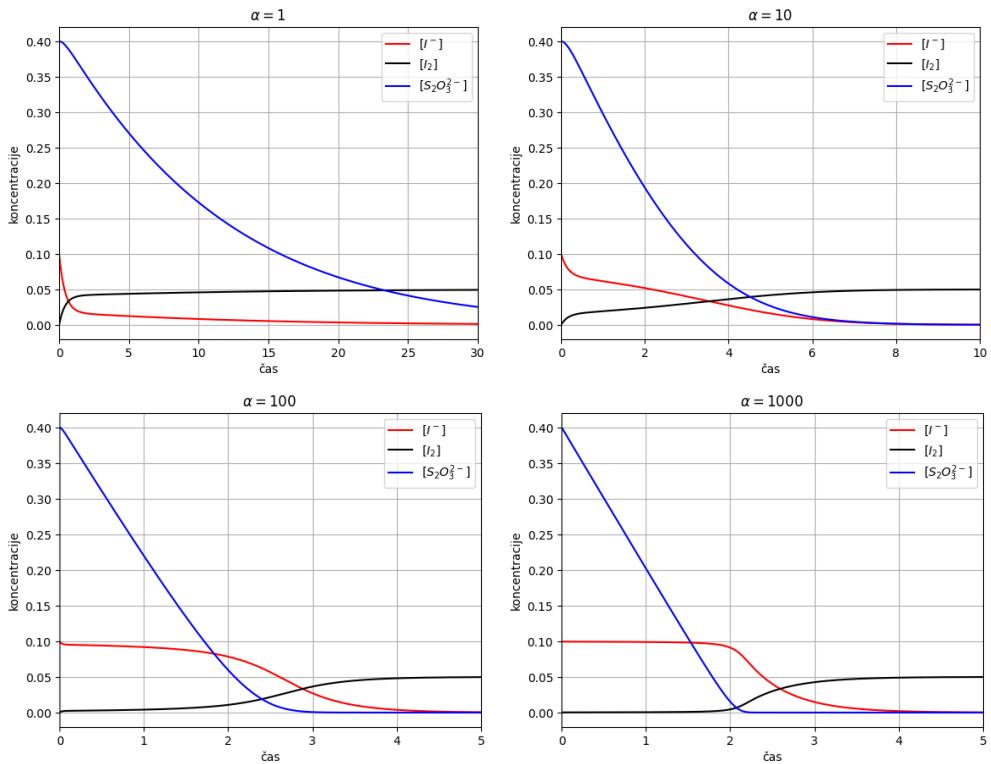
Slika 7: Reakcija jodove ure ob spremenjanju parametra α in začetnih parametrov za $S_2O_3^{2-} = 0.2$, $I^- = 0.1$ in $I_2 = 0$.

1.6 Prikaz rezultatov za jodovo uro

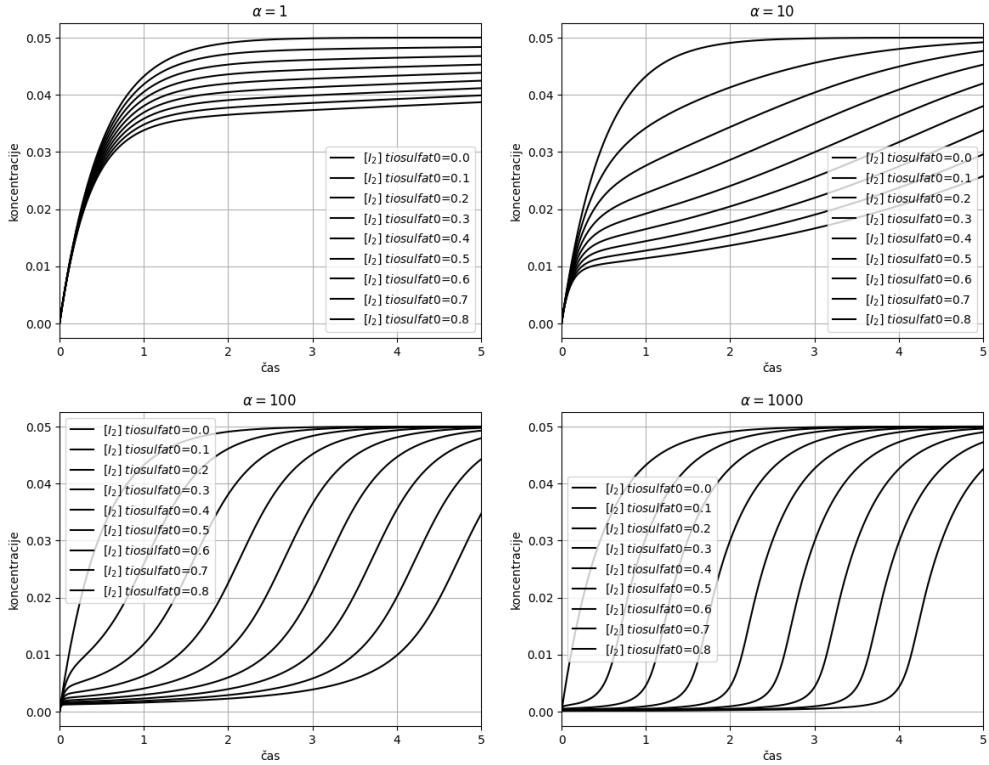
Najprej sem si ogledal spremenjanje rezultatov v odvisnosti od parametra α in začetnih parametrov (slika 7 in 8).

Preučil sem še obnašanje I_2 v odvisnosti od tiosulfata.

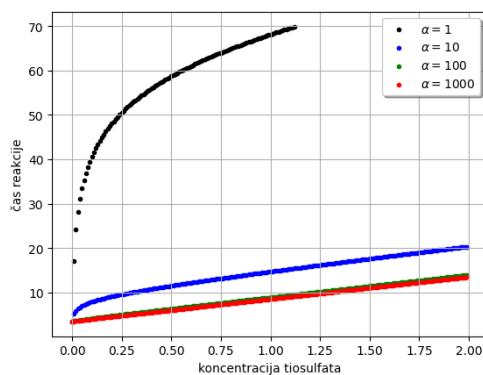
V zadnjem delu sem si še ogledal spremenjanje časa reakcije v odvisnosti od začetne koncentracije tiosulfata (slika 9). Za čas sem vzel, ko I^- pada na nič oziroma se I_2 ustali. Zanimivo je da za dovolj velike hitrosti in prave paramete α , reakcija lahko postane linearна (slika 10).



Slika 8: Reakcija jodove ure ob spremjanju parametra α in začetnih parametrov za $S_2O_3^{2-} = 0.4$, $I^- = 0.1$ in $I_2 = 0$.

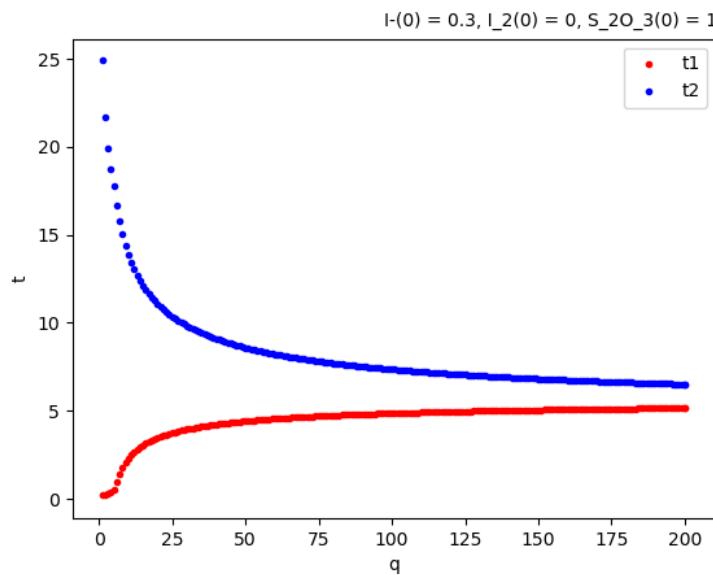


Slika 9: Spreminjanje I_2 v odvisnosti od tiosulfata in parametra α .

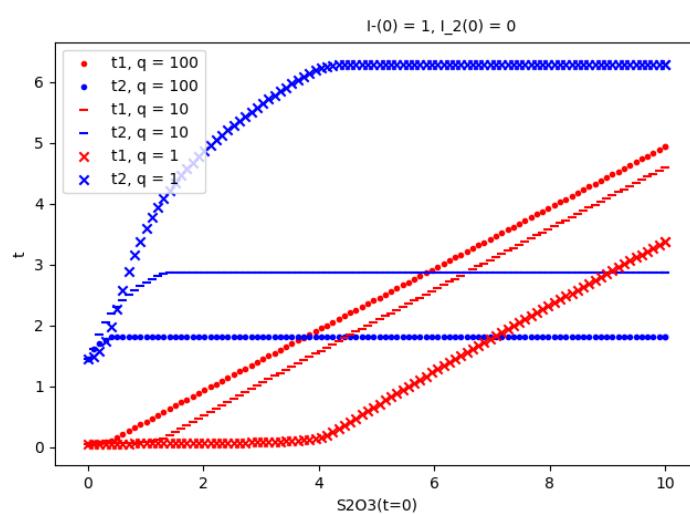


Slika 10: spreminjanje časa reakcije v odvisnosti od začetne koncentracije tiosulfata.

Blat Levinskej

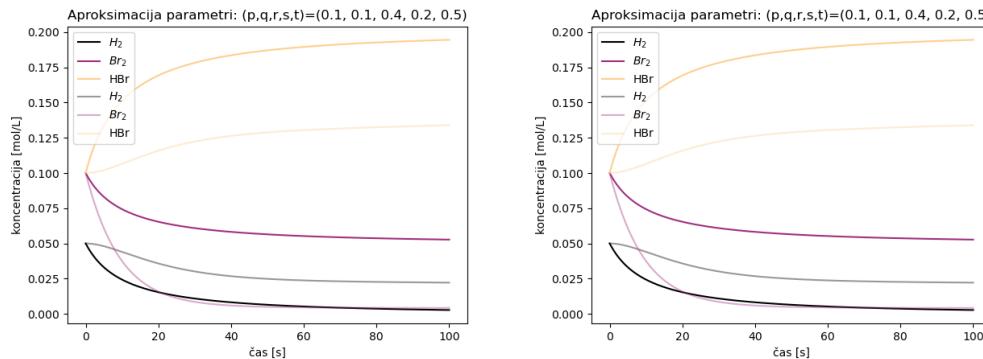


Slika 17: Na grafu sta prikazana karakteristična časa t_1 in t_2 v odvisnosti od hitrosti reakcije q .



Slika 18: Na grafu sta prikazana karakteristična časa t_1 in t_2 v odvisnosti od začetne koncentracije S_2O_3 .

Kot vidimo približek ni zelo dober, a kljub temu opazimo, da precej dobro opisuje spremenjanje količine HBr, le da je ta zamaknjena za neko konstanto (to odstopanje se nabere na začetku, ko naša aproksimacija še ne velja). Ravno zato pa ta empirična formula obstaja samo za $[HBr]$ in ne tudi za $[H_2]$ in $[Br_2]$. Poglejmo, če kaj vpliva, če dodamo začetni zmesi tudi HBr, glej sliko 15.



Slika 15: Primerjava eksaktnih enačb z aproksimacijo $\dot{y}, \dot{z} = 0$ pri dodatu HBr v začetno zmes (za majhno količino HBr in veliko). Svetla črta označuje eksaktne enačbe, močnejša pa aproksimacijo.

Vidimo, da sta sedaj skladni tudi koncentraciji H_2 in Br_2 , oz. zamaknjeni za konstanto. Pri zelo veliki začetni koncentraciji HBr pa se količina HBr zelo dobro ujema.

2.5 Merjenje konstant k in m

Konstanti k in m najlažje izmerimo tako, da najprej gledamo začetni koeficient, če nimamo na začetku nič HBr, enačba 20 se torej poenostavi v:

$$\dot{x} = \frac{k}{m} vu^{1/2} \quad (23)$$

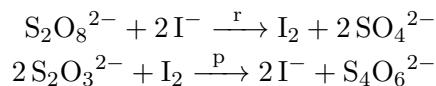
Če poznamo začetne vrednosti \dot{x} , v in u , lahko določimo razmerje $frackm$. Nato pa poskus ponovimo z veliko začetno koncentracijo HBr, torej se enačba 20 poenostavi v:

$$\dot{x} = \frac{kvvu^{3/2}}{x} \quad (24)$$

Če poznamo začetne vrednosti \dot{x} , v in u , lahko določimo k . S pomočjo razmerja $frackm$ nato določimo še m .

3 Kemijske ure

Kemijske ure so reakcije, ki stečejo s predvidljivim in ponavadi ostrom časovnim zamikom. Primer take reakcije je jodova ura, ki v eni izmed izvedb temelji na ravnotežju naslednjih reakcij:

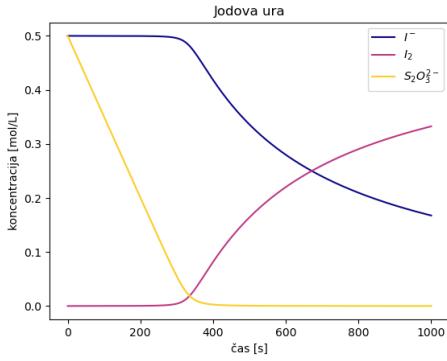


Spet označimo $I^- = x$, $I_2 = y$ in $S_2O_3^{2-} = z$. Če imamo $S_2O_8^{2-}$ v presežku, lahko napišemo:

$$\dot{x} = -r\alpha x^2 + pyz^2 \quad (25)$$

$$\dot{y} = r\alpha x^2 - pyz^2 \quad (26)$$

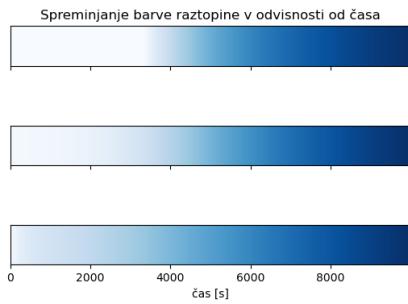
$$\dot{z} = -pyz^2 \quad (27)$$



Slika 16: Prikaz delovanja jodove ure za $p = 100$, $r = 0.1$ in $\alpha = 0.06$. Začetni pogoji so $x = 0.5\text{mol}/L$ in $z = 0.5\text{mol}/L$.

kjer je α nek skalar. Če upoštevamo, da je druga reakcija bistveno hitrejša od prve, dobimo potek reakcije kot je prikazan na sliki 16

Ko spremojamo parametre p , r in α lahko dobimo bolj ali manj oster prehod, vizualno je barva raztopine v kemijskem poskusu prikazana na sliki 17



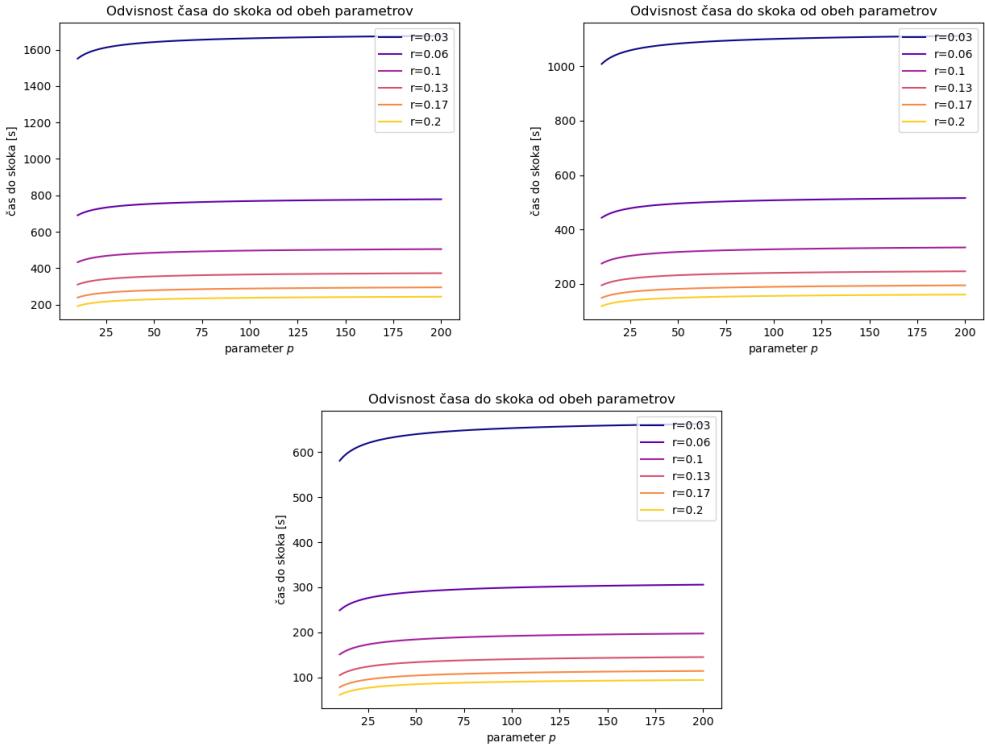
Slika 17: Vizualni barvni prikaz raztopine v odvisnosti od časa za različne parametre. Zgornji graf $(p, r, \alpha) = (100000, 100, 0.00006)$, srednji $(p, r, \alpha) = (1, 0.001, 6)$ in spodnji $(p, r, \alpha) = (0.1, 0.0001, 60)$. Takšno kombinacijo parametrov sem izbrala, da sem ohranila razmerje 1:1000 med r in p ter da se prehod zgodi približno ob enakem času.

3.1 Čas do skoka

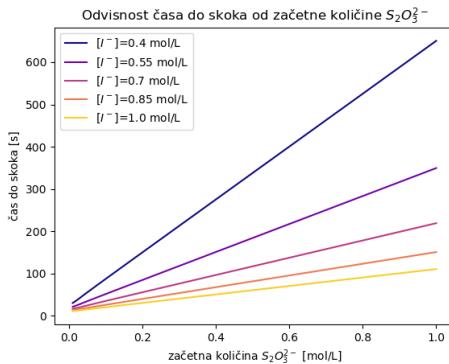
Med drugim lahko modulirano tudi čas do skoka (in tako nenadnegaobarvanja). Odvisnost od parametrov je prikazana na sliki 18.

Vidimo, da zvišanje r precej podaljša čas do skoka, znižanje p pa ga le malo zmanjša (pa še to samo pri majhnih vrednostih p). Seveda pa kot že rečeno na čas vpliva tudi parameter α (še ostala dva grafa na sliki 18). Vsi trije grafi izgledajo na videz enaki, tako lahko zelo lepo vidimo, kako nam parameter α le linearno raztegne čas do skoka.

Čas do skoka pa lahko spremenimo tudi s spremembou začetnih količin, slika 19. Začetna koncentracija I_2 ne vpliva na čas do skoka. Začetnih vrednosti I^- in $S_2O_3^{2-}$ pa vplivata linearno.



Slika 18: Odvisnost časa do skoka od parametrov p in q pri treh različnih α (levo $\alpha = 0.04$, nato $\alpha = 0.06$ in desno $\alpha = 0.1$). Glej skale na y-osi.



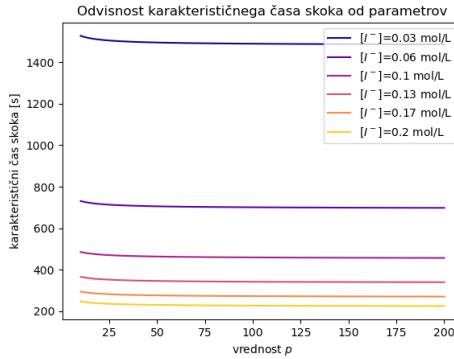
Slika 19: Odvisnost časa do skoka od začetnih vrednosti I^- in $S_2O_3^{2-}$, I_2 ne vpliva na čas do skoka.

3.2 Karakteristični čas skoka

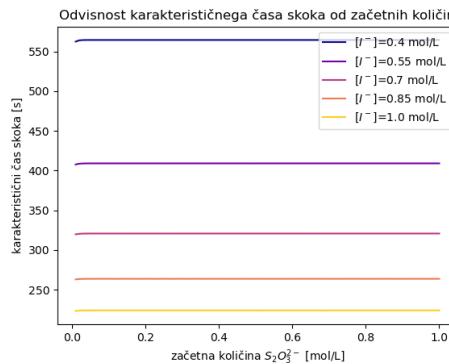
Poglejmo sedaj še karakteristični čas skoka, za ta čas sem vzela čas med tem, ko $[I^-]$ pade na 0.9 in tem ko pade na 0.3. Spet dobimo odvisnost od parametrov, glej sliko 20.

Vidimo, da od parametra p praktično ni odvisno, je pa odvisno od r tako kot za čas do skoka v prejšnjem podpoglavlju. Poglejmo sedaj še odvisnost od začetnih parametrov, glej sliko 21.

Tako kot pri času do skoka je odvisnost karakterističnega časa od I^- linearja, z razliko od prej pa je neodvisna od začetne koncentracije $S_2O_3^{2-}$.



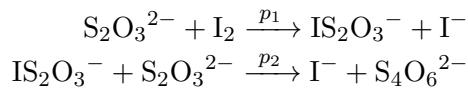
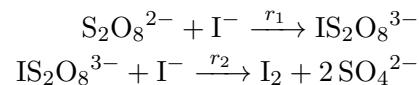
Slika 20: Odvisnost karakterističnega časa skoka od parametrov p in q .



Slika 21: Odvisnost karakterističnega časa skoka od začetnih vrednosti I^- in $S_2O_3^{2-}$.

3.3 Vmesne faze

Lahko pa se lotimo rahlo drugače, kemija nam pravi, da vsaka od zgornjih reakcij poteče preko kratkoživega vmesnega stanja:



Sedaj označimo spremenljivke $x = I^-$, $a = IS_2O_8^{3-}$, $y = I_2$, $z = S_2O_3^{2-}$ in $b = IS_2O_3^-$. Spet imamo $S_2O_3^{2-}$ v presežku, tokrat zaradi poenostavitve postavimo $\alpha=1$. Dobimo torej enačbe:

$$\dot{x} = -r_1x - r_2ax + p_1zy + p_2bz \quad (28)$$

$$\dot{a} = r_1x - r_2ax \quad (29)$$

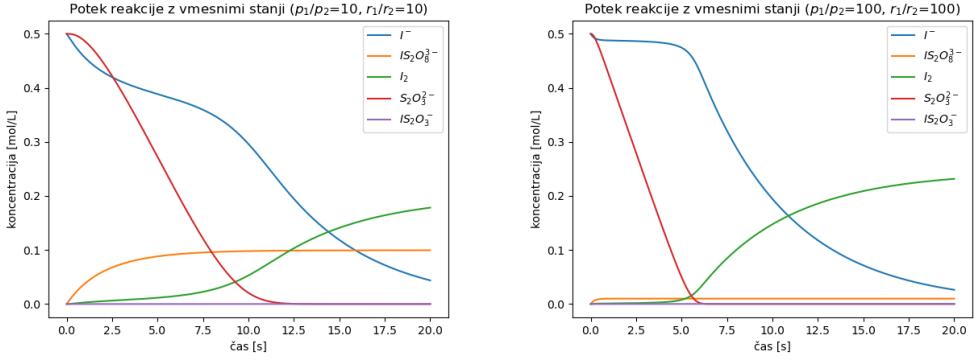
$$\dot{y} = r_2ax - p_1yz \quad (30)$$

$$\dot{z} = -p_1zy - p_2bz \quad (31)$$

$$\dot{b} = p_1zy - p_2bz \quad (32)$$

Prikaz poteka z upoštevanjem vmesnih reakcij je prikazan na sliki 22.

Na grafih sta prikazani dva različna razmerja hitrosti reakcij v sklopu. Če je razmerje p_1/p_2 manjše, potem pomeni, da je prvi del prve reakcije hitrejši, kar pomeni, da nastaja več vmesnih stanj, kar tudi



Slika 22: Prikaz poteka reakcije z upoštevanjem vmesnih stanj. Na levi sliki predpostavimo razmerji $p_1/p_2=10$, $r_1/r_2=10$; na desni pa $p_1/p_2=100$, $r_1/r_2=100$.

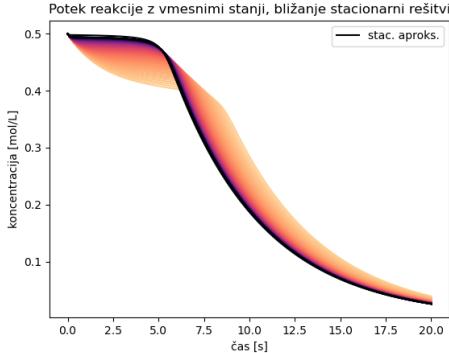
na grafu vidimo. Podobno se zgodi za r_1/r_2 . Če ta razmerja še bolj povečamo, pridemo v približek stacionarnega stanja ($\dot{a}, \dot{b} = 0$). Dobimo enačbe:

$$\dot{x} = -2r_1x + 2p_1yz \quad (33)$$

$$\dot{y} = r_1x - p_1yz \quad (34)$$

$$\dot{z} = -2p_1yz \quad (35)$$

Na sliki 23 je prikazano, kako koncentracija I^- konvergira k limiti, ki je približek stacionarnega stanja. Oblika te limitne krivulje pa je tudi enaka kot tista, ki smo jo dobili zgoraj, ko nismo upoštevali podkorakov vsake od dveh glavnih reakcij.



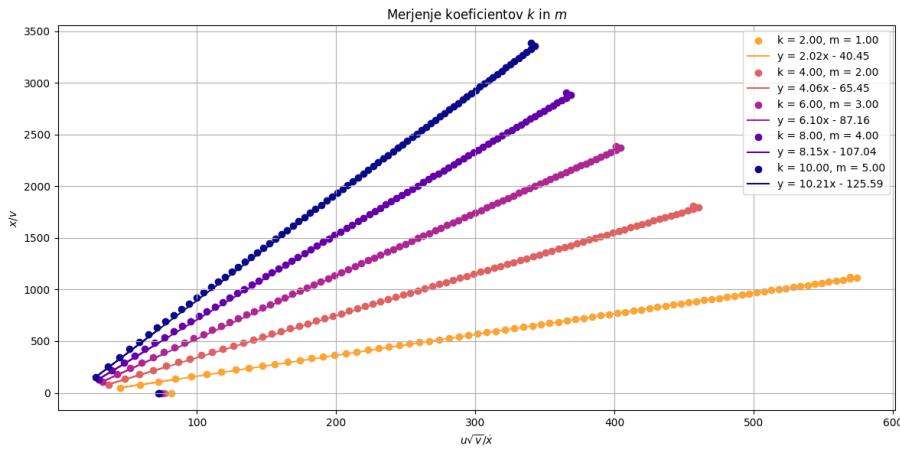
Slika 23: Prikaz poteka reakcije z upoštevanjem vmesnih stanj za koncentracijo I^- . Ko večamo razmerje r_1/r_2 in p_1/p_2 konvergiramo k limiti stacionarnega stanja.

Nihšča Plešec

narnem približku enačbo za \dot{x} prepišem v obliko

$$\frac{x}{v} = k \frac{u\sqrt{v}}{\dot{x}} - m,$$

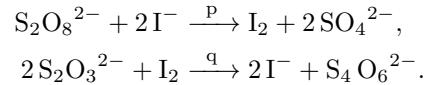
iz izmerjenih podatkov bi lahko na to odvisnost prilagajala premico. Ker pa na eksperimentu ne izmerim \dot{x} , si pomagam tudi z numeričnim odvajanjem. Na sliki 18 so prikazani podatki, ki sem jih dobila preko eksaktne rešitve, in prilagoditev premice preko katere sem izluščila k in m .



Slika 18: Pridobitev koeficientov k , m iz eksperimenta. Podatki, ki sem jih dobila preko eksaktne rešitve so prikazani s krogci, prilagoditve premice preko katere sem izluščila k in m pa z črto.

2.3 Jodova ura

Jodova ura v eni izmed izvedb temelji na ravnotežju naslednjih reakcij:



Druga reakcija je bistveno hitrejša od prve, mehanizem merjenja časa pa je enakomerno porabljanje tiosulfata $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$. Če je persulfat $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ v prebitku, lahko za aktivne spremenljivke vzamemo le $[\text{I}^-] = y$, $[\text{I}_2] = z$ in $[\text{S}_2\text{O}_3^{2-}] = x$. Tako dobim sistem diferencialnih enačb

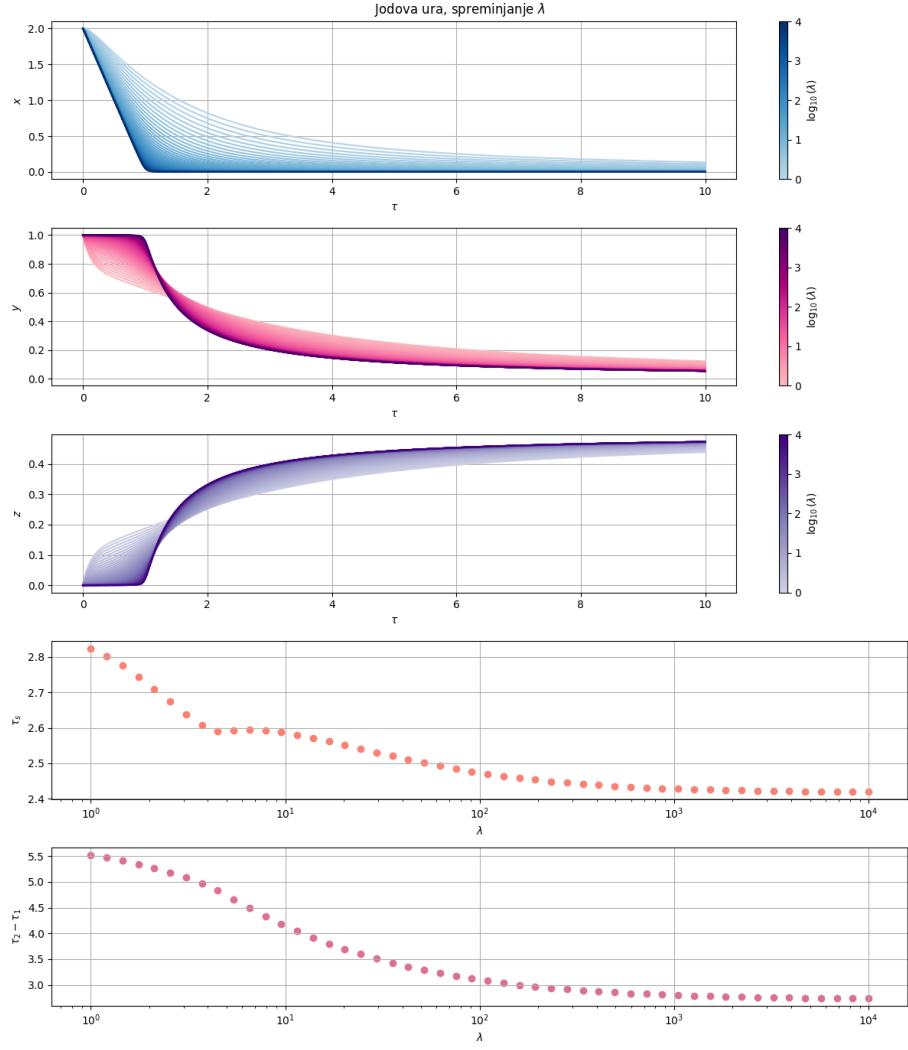
$$\begin{aligned} \dot{x} &= -q^2 x^2 z, \\ \dot{y} &= -py^2 + 2qx^2 z, \\ \dot{z} &= py^2 - qx^2 z, \end{aligned}$$

ki ga z $\tau = pt$ in $\lambda = q/p$ peroblikujem v

$$\begin{aligned}\dot{x} &= -\lambda x^2 x^2 z, \\ \dot{y} &= -y^2 + 2\lambda x^2 z, \\ \dot{z} &= y^2 - \lambda q x^2 z.\end{aligned}$$

Pri jodovi uri sem računala tudi njeno natančnost, ki je bila definirana kot razlika časov $\tau_2 - \tau_1$, ob katerih je funkcija y dosegla 90%, oziroma 10% začetne vrednosti, glede na končno vrednost. Srednji čas pa je čas med τ_2 in τ_1 , torej $(\tau_2 + \tau_1)/2$.

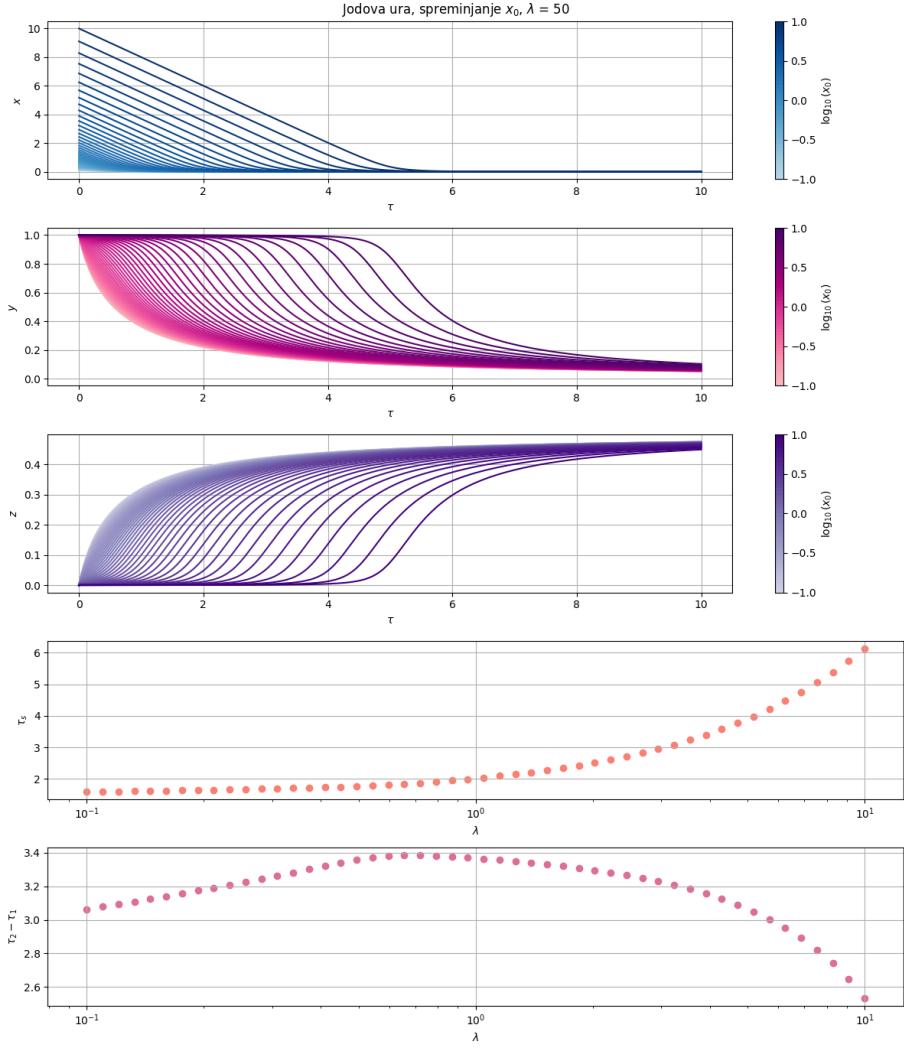
Zanimala me je odvisnost od parametra λ . Ta je za začetne pogoje $x_0 = 2$, $y_0 = 1$ in $z_0 = 0$ prikazana na sliki 19.



Slika 19: Rešitve modela jodove ure, ter srednji čas in natančnost v odvisnosti od parametra λ pri začetnih pogojih $x_0 = 2$, $y_0 = 1$ in $z_0 = 0$.

Na sliki [19] vidim, da je ura bolj natančna ob višjih λ . Nekoliko se zmanjša tudi srednji čas, vendar je to posledica slabe definicije.

Zanimala me je tudi odvisnost od začetnega pogoja x_0 . Ta je za $\lambda = 50$ (izbrana pri neki srednji natančnosti), začetna pogoja $y_0 = 1$ in $z_0 = 0$ prikazana na sliki [20].

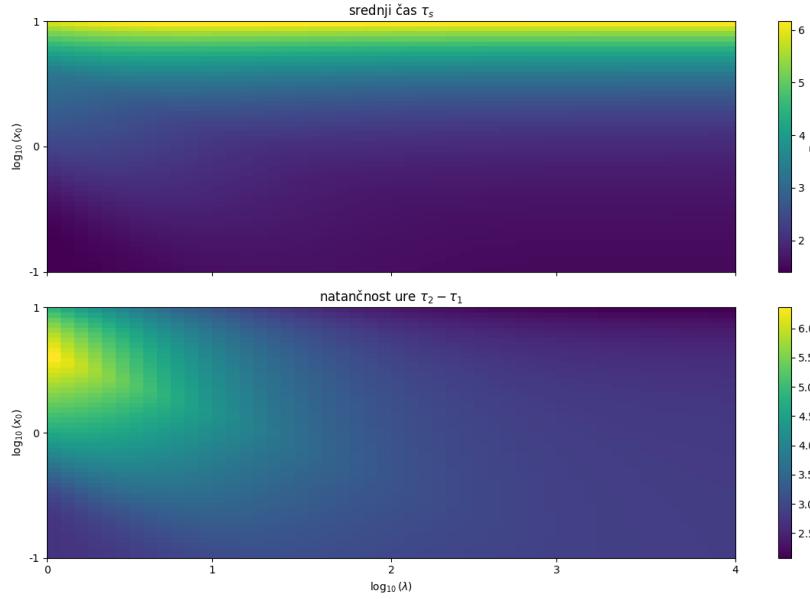


Slika 20: Rešitve modela jodove ure, ter srednji čas in natančnost v odvisnosti od začetnega pogoja x_0 pri parametru $\lambda = 50$ ter začetnima pogojema $y_0 = 1$ in $z_0 = 0$.

Na sliki 20 vidim, da je ura (skoraj povsod) bolj natančna ob višjih x_0 . Srednji čas pa se viša z x_0 .

Odvisnosti natančnosti ure in srednjega časa od λ in x_0 si lahko ogledam tudi v matrični obliki prikazani na sliki 21.

Dodatki:

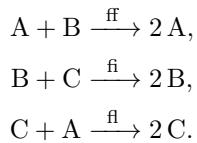


Slika 21: Srednji čas in natančnost v odvisnosti od začetnega pogoja x_0 in λ pri začetnima pogojem $y_0 = 1$ in $z_0 = 0$.

Na sliki 21 se dobro vidi, da srednji čas praktično ni odvisen od parametra λ .

2.4 Reakcija Belousov-Zhabotinsky

Poskusila sem narediti 2D prikaz reakcije Belousov-Zhabotinsky. To sem naredila tako, da sem 2D območje razdelila na točke. V vsaki od točk sem (kot posledico difuzije) povprečila koncentracijo s širimi najbližjimi sosedji. Nato pa sem implementirala diferencialno enačbo, ki je v tem (poenostavljenem) primeru

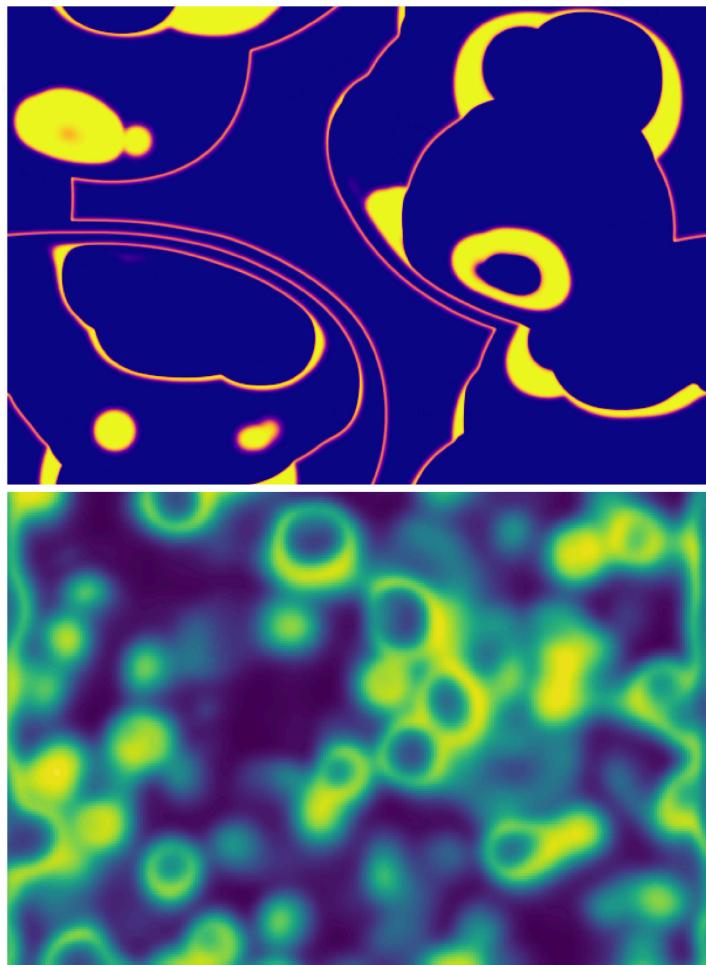


Reševala sem jo preko približka:

$$\begin{aligned} [A]_{t+\delta t} &= [A]_t + [A]_t (\alpha [B]_t - \gamma [C]_t) \\ [B]_{t+\delta t} &= [B]_t + [B]_t (\beta [C]_t - \alpha [A]_t) \\ [C]_{t+\delta t} &= [C]_t + [C]_t (\gamma [A]_t - \beta [B]_t) \end{aligned}$$

Našla pa sem tudi kodo na viru [\[1\]](#), ki da pravilno (in hitro) rešitev s katero sem želela primerjati svoj model. Moj model je zelo počasnejši, zato je točk

računanja manj, kot pri tisti iz vira [1]. Rešitve mojega modela prilagam v datotekah .gif, rešitve modela iz vira [1] pa v datotekah .mp4. Datoteka s končnico ”111”, označuje primer $\alpha = \beta = \gamma = 1$; ”113” primer $\alpha = \beta = 1$ in $\gamma = 3$; ter ”1211” primer $\beta = \gamma = 1$ in $\alpha = 1.2$. Primerjava med mojim modelom in modelom iz vira [1], pa je razvidna tudi na sliki [22], kjer velja $\alpha = \beta = 1$ in $\gamma = 3$.



Slika 22: 2D prikaz reakcije Belousov-Zhabotinsky preko: (spodaj) moje metode; (zgoraj) metode iz vira [1].

Je precej očitno, da je moj model zelo slabši.

3 Zaključek

V tej nalogi sem obravnavala kinematiko kemijskih reakcij. Za model binarne reakcije sem sistem integrirala eksaktno in v približku stacionarnega stanja, ter ju med sabo primerjala.

Pri modelu reakcije $H_2 + Br_2 \rightleftharpoons 2 HBr$ sem določila eksaktne rešitve, ter stacionarne približke in njih med seboj primerjala. Oblike rešitev sem si ogledala za več različnih parametrov. Pokazala sem tudi, kako bi parametra k in m dobila iz eksperimentalne meritve.

Pri modelu jodove ure sem ponovno opazovala rešitve, srednji čas in natančnost ure v odvisnosti od raznih parametrov.

Za konec sem si ogledala 2D prikaz reakcije Belousov-Zhabotinsky, kjer sem svoj model primerjala z modelom iz vira [1]. Izkazalo se je da je moj zelo slabši, žal pa nisem imela časa model izboljšati.

Literatura

- [1] Scipython (ogled: 9. 11. 2022). *Simulating the Belousov-Zhabotinsky reaction.* Pridobljeno s <https://scipython.com/blog/simulating-the-belousov-zhabotinsky-reaction/>