

Отчет по лабораторной работе №6 по Мат Моделированию

1-2. Содержательная постановка задачи

Автокаталитическая реакция

1. Исследовать временную изменчивость концентрации вещества $[P]$ при следующих начальных параметрах:
 - $[A]_0 = 1, [P]_0 = 0.9, k = 0.1$;
 - $[A]_0 = 0.9, [P]_0 = 1, k = 0.5$.
2. Нарисовать кривую в фазовом пространстве $[A], [P]$.

Модель Лотки

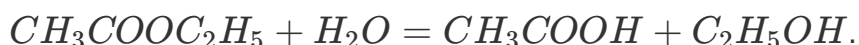
1. Исследовать временную изменчивость концентрации вещества $[X], [Y], [P]$ при следующих начальных параметрах:
 - $[A]_0 = 1, [X]_0 = 0.9, [Y]_0 = 0.05, k_1 = 0.1, k_2 = 1, k_3 = 2$;
 - $[A]_0 = 0.9, [X]_0 = 1.0, [Y]_0 = 0.25, k_1 = 0.1, k_2 = 2, k_3 = 1$.
2. Нарисовать кривую в фазовом пространстве $[X], [Y], [P]$.

3. Концептуальная постановка задачи

Модель автокаталитической реакции

Автокаталитической называют реакцию, в которой продукт действует как катализатор и которую можно рассматривать как необратимое ускорение.

Примером автокаталитической реакции служит гидролиз этил-ацетата в водном растворе:



Продукт реакции – уксусная кислота CH_3COOH и ион H^+ , образующийся при ее электролитической диссоциации, ускоряют реакцию. Скорость автокаталитической реакции вначале возрастает вследствие увеличения количества продукта, являющегося катализатором, а затем падает в результате израсходования исходных веществ.

Модель Лотки

Пусть в некотором объеме находится в избытке в-во A . Молекулы A с некоторой постоянной скоростью превращаются в молекулы в-ва X (реакция нулевого порядка). В-во X может превращаться в в-во Y , причем скорость этого превращения тем больше, чем больше концентрация Y . Молекулы Y в свою очередь распадаются и образует в-во P (реакция 1 порядка)

4. Математическая постановка задачи

Модель автокаталитической реакции

Пусть автокаталитическая реакция $A \rightarrow P$

описывается кинетическим уравнением $\frac{d[P]}{dt} = k[A]^2[P]$

Пусть начальные концентрации равны $[A]_{t=0} = a_0$, $[P]_{t=0} = p_0$

Требуется найти зависимость изменчивости $[P]$, $[A]$ от t

$S = [A] + [P] = \text{const}$ в силу закона сохранения в-ва

Задача отыскания P свелась к решению дифференциального уравнения

$$\begin{cases} \frac{d[P]}{dt} = k(S - [P])^2[P], t > 0 \\ [A]_{t=0} = a_0, [P]_{t=0} = p_0 \\ S = a_0 + p_0 \end{cases}$$

Далее A находится как $A = S - P$

Модель Лотки

Задача отыскания X, Y, P свелась к решению системы дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{d[X]}{dt} = k_1[A] - k_2[X][Y] \\ \frac{d[Y]}{dt} = k_2[X][Y] - k_3[Y] \\ \frac{d[X]}{dt} = k_3[Y] \\ [X]_{t=0} = x_0, [P]_{t=0} = p_0, [Y]_{t=0} = y_0 \end{cases}$$

Так как мы поддерживаем постоянную концентрацию вещества А, то можем считать, что $[A] = a_0$

5. Реализация

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import scipy as sc

def f(u, t, k, S):
    return k*(S-u)**2*u

def f2(u, t, k1, k2, k3, A0):
    return [k1*A0-k2*u[0]*u[1], k2*u[0]*u[1]-k3*u[1], k3*u[1]]

def avtocatal(A0, P0, k, tmax):
    t = np.linspace(0, tmax, tmax*10)
    S=A0+P0
    P = sc.integrate.odeint(f, P0, t, args=(k, S))
    A=S-P
    plt.figure()
    plt.plot(t, P, 'b', label='P')
    plt.plot(t, A, 'r', label='A')
    plt.plot([t[0], t[-1]], [1.9, 1.9], 'k')
    plt.xlabel("t")
    plt.ylabel('Concentrate')
    a=r'$[A]_0$'
    p=r'$[P]_0$'
    k_=r'$k$'
    plt.text(tmax*0.8, S/3*2, f"{a} = {A0}\n{p} = {P0}\n{k_} = {k}")
    plt.legend(loc='best')
    plt.grid()
    plt.figure()
    plt.plot(A, P)
    plt.xlabel("A")
    plt.ylabel('P')
    plt.grid()

def lotke(A0, X0, Y0, k1, k2, k3, tmax):
    t = np.linspace(0, tmax, tmax*10)
    sol = sc.integrate.odeint(f2, [X0, Y0, 0], t, args=(k1, k2, k3, A0))
    X=sol[:,0]
    Y=sol[:,1]
    P=sol[:,2]
```

```

plt.figure()
plt.plot(t,X, label='X')
plt.plot(t,Y, label='Y')
plt.plot(t,P, label='P')
plt.legend()
plt.grid()
a=r'$[A]_0$'
x=r'$[X]_0$'
y=r'$[Y]_0$'
k1_=r'$k_1$'
k2_=r'$k_2$'
k3_=r'$k_3$'
plt.text(tmax*0.8,max(P)/3*2,f"{a} = {A0}\n{x} = {X0}\n{y} = {Y0}\n{k1_} = {k1}\n{k2_} = {k2}\n{k3_} = {k3}")
plt.figure()
ax = plt.axes(projection='3d')
ax.plot3D(X,Y,P)
ax.set(xlabel="X", ylabel="Y", zlabel="P")

```

```

avtocatal(1.0,0.9,0.1,150)
avtocatal(0.9,1,0.5,100)

```

```

lotke(1.0,0.9,0.05,0.1,1.0,2.0,100)
lotke(0.9,1.0,0.25,0.1,2.0,1.0,100)

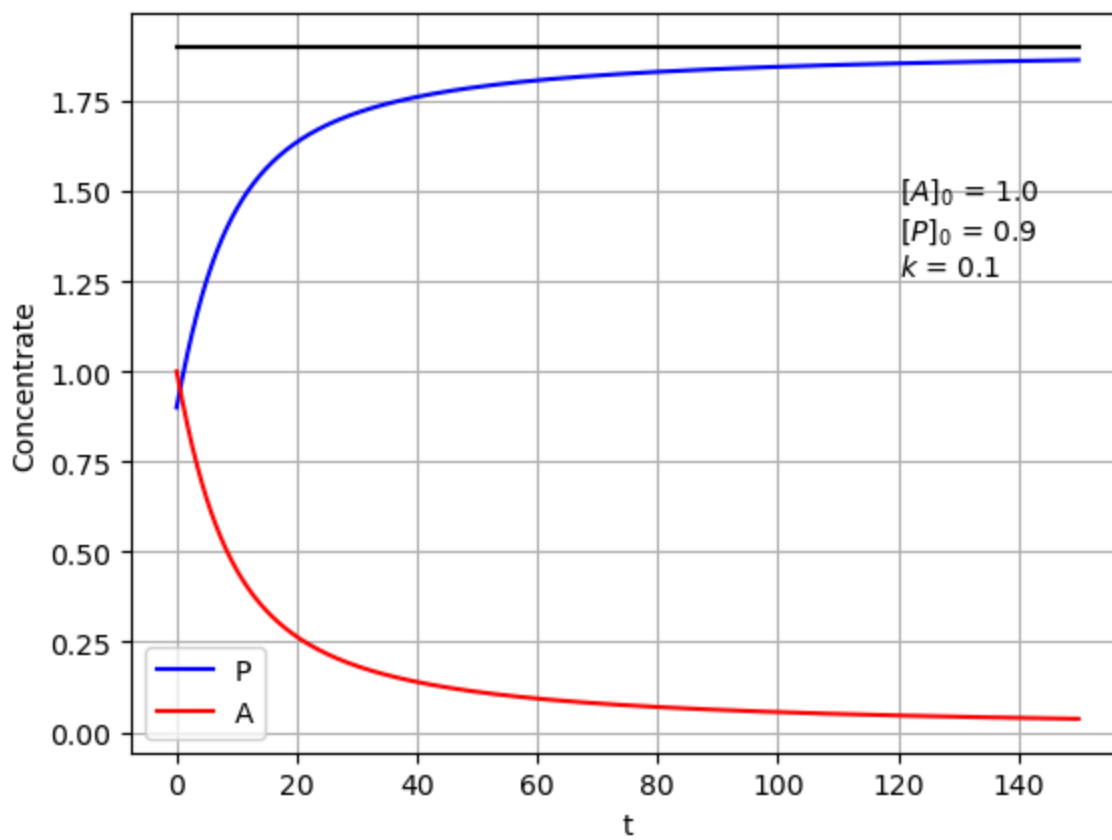
```

7. Численное исследование модели

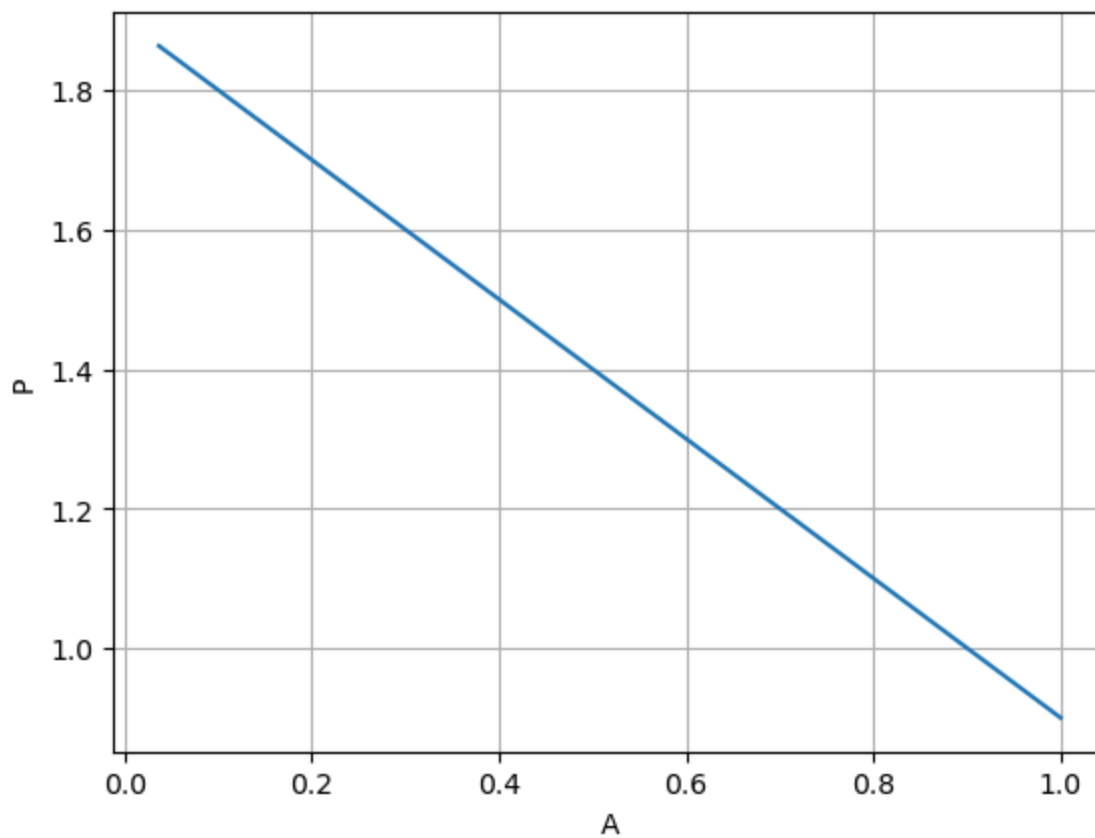
Модель автокаталитической реакции

Начальные условия 1

Временная изменчивость

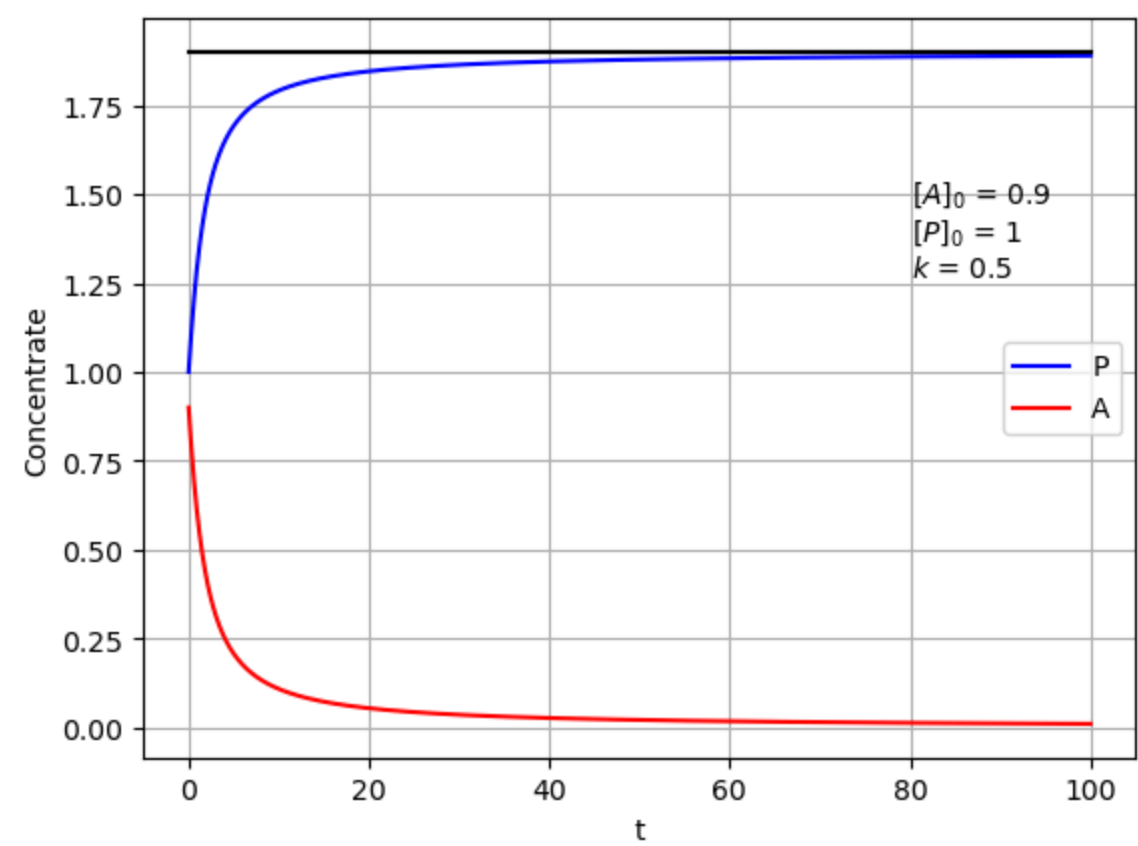


Кривая в фазовом пространстве

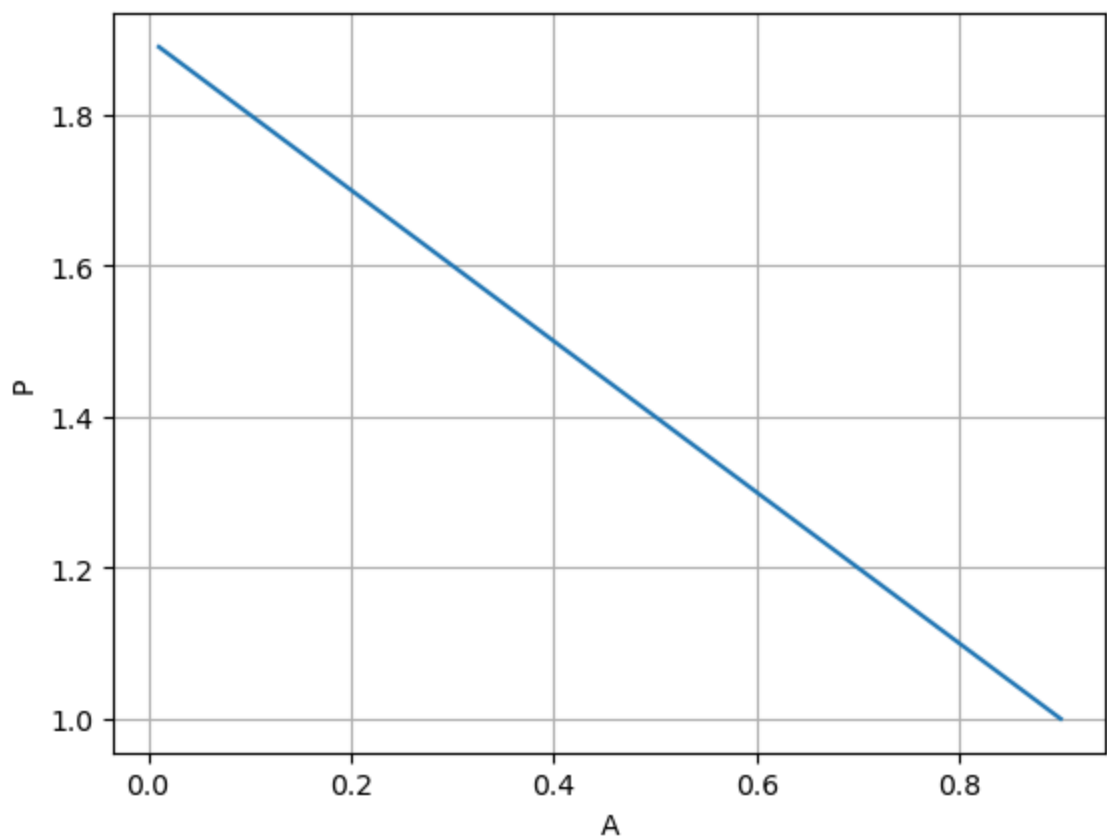


Начальные условия 2

Временная изменчивость



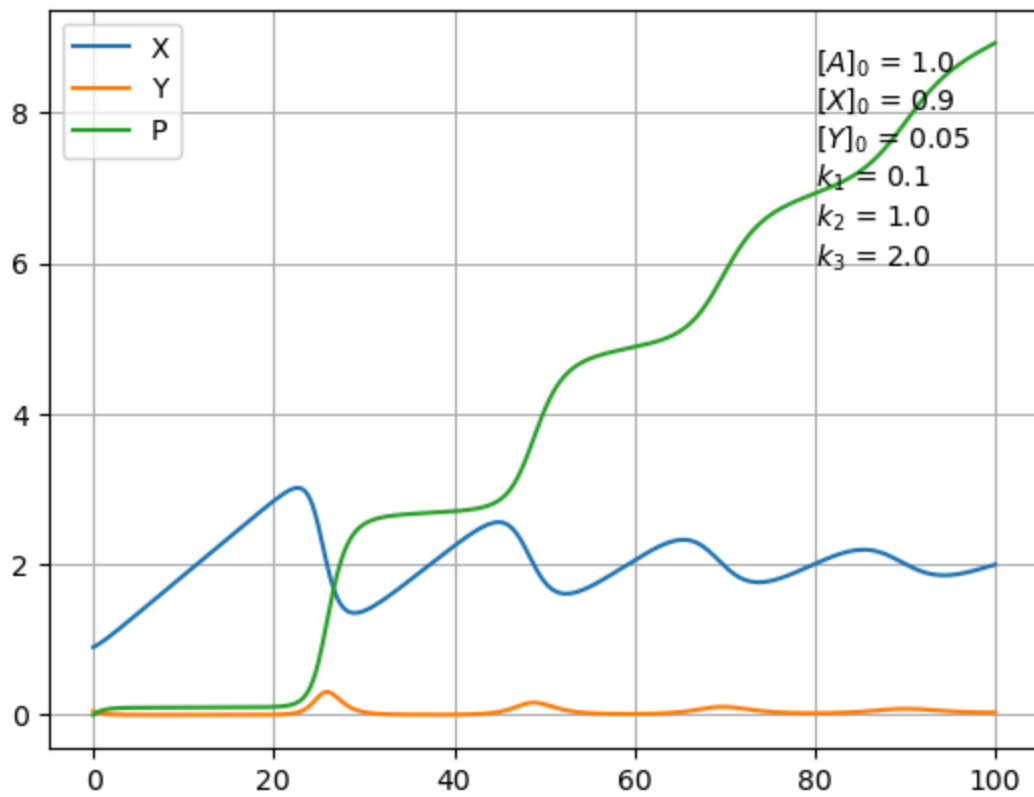
Кривая в фазовом пространстве



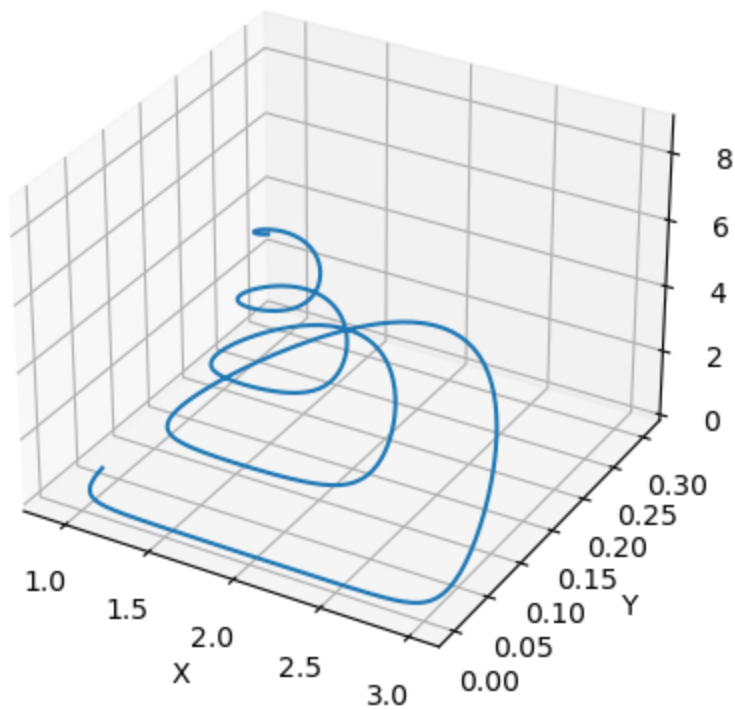
Модель Лотке

Начальные условия 1

Временная изменчивость

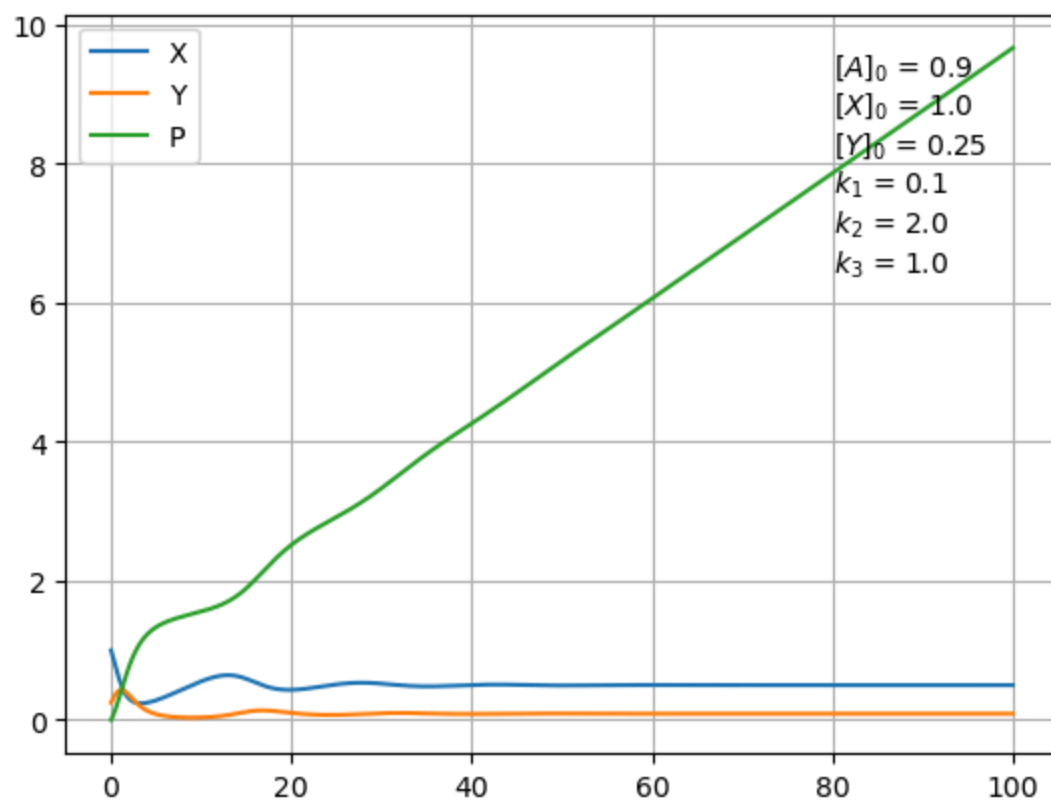


Кривая в фазовом пространстве



Начальные условия 2

Временная изменчивость



Кривая в фазовом пространстве

