

Praca dyplomowa inżynierska

Diagramy bifurkacyjne i wykresy fazowe dla reakcji chemicznych



Autor: Adrianna Buczak

Nr albumu: 276719

Promotor: dr inż. Mariusz Zalewski

Rok akademicki: 2019/2020

Wprowadzenie

Procesy wykazujące oscylacje są szeroko rozpowszechnione w przyrodzie. Część z nich może przebiegać w sposób uporządkowany, jak ma to miejsce w przypadku drgań harmonicznym wahadła, jednak w dużej części są to przemiany przejawiające zachowania chaotyczne. Charakterystyczną cechą takich zjawisk jest ich duża wrażliwość na warunki początkowe. Dzięki zastosowaniu odpowiednich zależności matematycznych możliwe jest w sposób numeryczny określenie zależności zachowania układu od warunków prowadzenia procesu.

Cel i zakres pracy

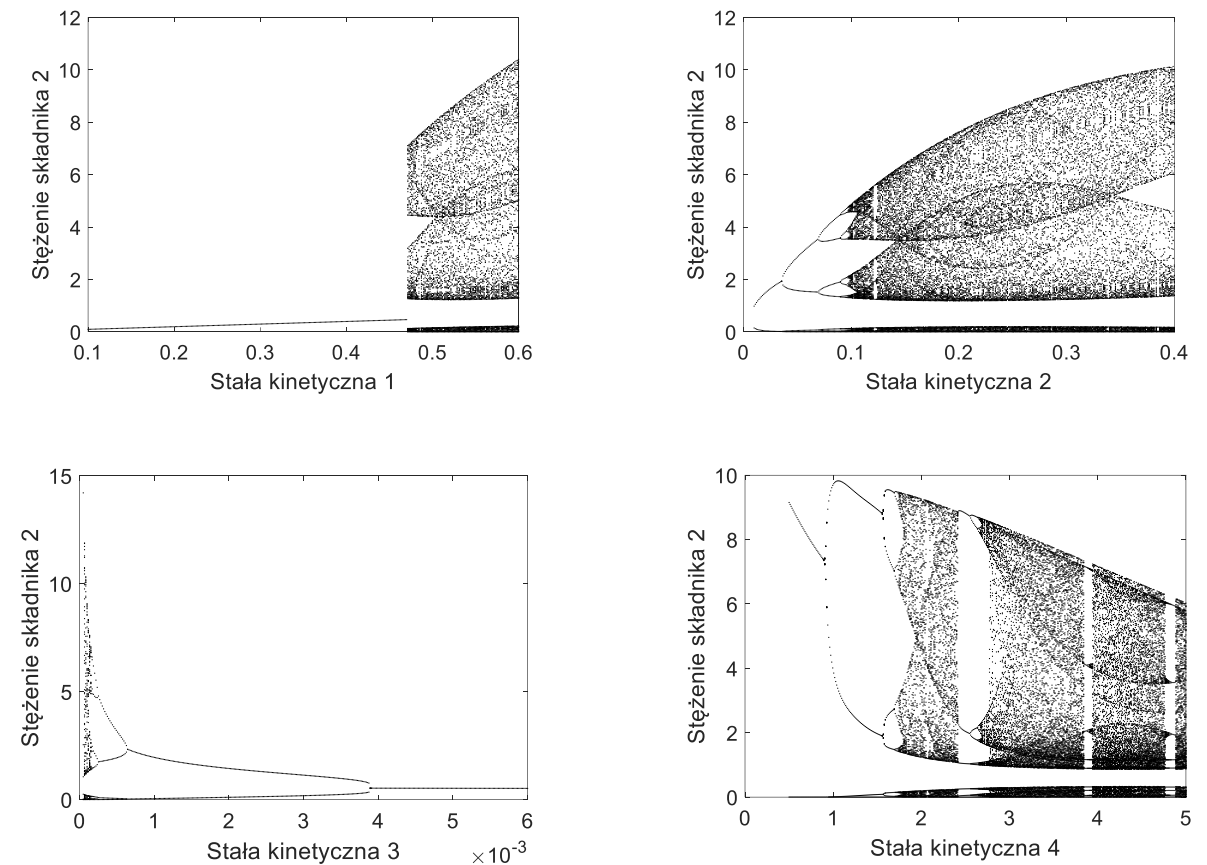
Celem pracy było przygotowanie programu generującego wykresy fazowe i diagramy bifurkacyjne przy zadanej kinetyce reakcji oscylacyjnych. W środowisku programu Matlab sporządzono skrypt do realizacji obliczeń numerycznych dla układów równań różniczkowych zwyczajnych opisujących zmienność stężeń odpowiednich składników reakcji w czasie. Dla przykładowych reakcji chemicznych wykazujących przebieg oscylacyjny sporządzono trajektorie czasowe parametrów układu, wykresy fazowe oraz diagramy bifurkacyjne przedstawiające zależność stężenia składnika reakcji od wartości stałej kinetycznej.

Budowa skryptu

Program został napisany tak, aby miał możliwie szerokie i uniwersalne zastosowanie dla różnych modeli matematycznych przemian chemicznych. W tym celu oparty został na zadaniu kinetyki reakcji w osobnej funkcji, a następnie wywołaniu funkcji właściwej. Po uruchomieniu programu należy zgodnie z komunikatami wprowadzić kolejno informacje o liczbie równań różniczkowych opisujących kinetykę układu, liczbie stałych kinetycznych w nich obecnych wraz z wartościami oraz parametry początkowe procesu. Zadane wartości stałych szybkości reakcji posłużą do symulacji trajektorii zmian odpowiednich stężeń w czasie oraz wykresów fazowych reprezentujących wzajemną zależność stężeń odpowiednich składników.

Symulacje dla reakcji oscylacyjnych

Na początku tej części pracy przeprowadzono symulację numeryczną dla dziwnego atraktora Rösslera. Następnie skupiono się na analizie reakcji enzymatycznej z inhibicją przez sprzężenie zwrotne opracowanej przez Throna w 1991 roku wykazującej oscylacje periodyczne oraz jej modyfikacji zaproponowanej w 1998 roku przez Baiera i Sahle'a. Reakcja zmodyfikowana okazała się przebiegać chaotycznie w pewnym zakresie wartości stałych kinetycznych.



Rys.1. Otrzymane diagramy bifurkacyjne zależności stężenia formy przejściowej Y od wartości kolejnych stałych kinetycznych w reakcji zmodyfikowanej

W końcowej części pracy przeprowadzono porównanie przebiegu czasowych trajektorii zmian stężeń składników w reakcji zachodzącej w sposób chaotyczny przy niewielkiej zmianie parametrów początkowych. Otrzymane rezultaty potwierdziły wrażliwość układu na wprowadzone zmiany oraz wykazały narastanie rozbieżności w czasie.

Wnioski

Dzięki wykonaniu symulacji komputerowych możliwe jest prześledzenie zachowania układu w zależności od wartości stałych kinetycznych oraz ewentualne odpowiednie ich dobranie do prowadzonego procesu. Wyniki obliczeń numerycznych pozwalają zwizualizować zachodzące w układzie zmiany, co może okazać się nieocenione przy projektowaniu procesów opartych na reakcjach o przebiegu periodycznym.