

Projekt – Jämviktsekvationer

1 Inledning

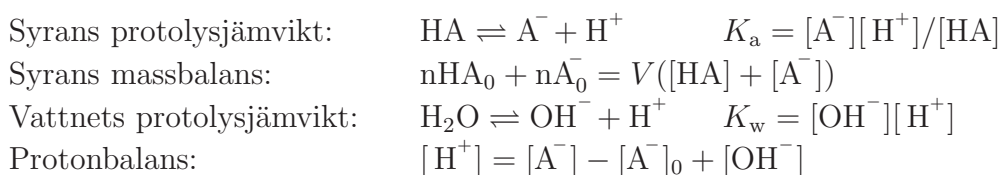
Jämviktsprojektet som ni gör under veckans studioövning består i att sätta upp jämviktsekvationer, dvs. icke-linjära ekvationssystem $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, och lösa dem med Newtons metod.

Björn har lagt in en extra föreläsning måndag 16/2 kl 15-16 på kemikursen där han går igenom kemibakgrunden. Han kommer till studioövningen och svarar på frågor som vanligt.

2 Uppgifter

Formuleringen av projektuppgiften "Fettlösliga fenoler" finner du på studiohemsidan. Läs den noga, det är där kemin beskrivs och det är där du finner uppgifterna.

För att underlätta lite sätter vi upp ekvationssystemet för uppgift 1 och ger på studiohemsidan koder i MATLAB för att beskriva funktion och derivatamatrix.



där V är volymen av vattenlösningen, $n\text{HA}_0$ är ämnesmängd tillsatt syra HA (i mol) och $n\text{A}_0^-$ är ämnesmängd tillsatt konjugerad bas A (i mol) samt $[\text{A}^-]_0 = n\text{A}_0^-/V$ dess koncentration.

Detta leder till ekvationssystemet

$$\begin{cases} K_a[\text{HA}] - [\text{A}^-][\text{H}^+] = 0 \\ n\text{HA}_0 + n\text{A}_0^- - V([\text{HA}] + [\text{A}^-]) = 0 \\ K_w - [\text{OH}^-][\text{H}^+] = 0 \\ [\text{H}^+] + n\text{A}_0^-/V - ([\text{A}^-] + [\text{OH}^-]) = 0 \end{cases}$$

Låter vi

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4), \quad x_1 = [\text{HA}], \quad x_2 = [\text{A}^-], \quad x_3 = [\text{OH}^-], \quad x_4 = [\text{H}^+]$$

kan dessa ekvationer skrivas

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

där

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} K_a x_1 - x_2 x_4 \\ n\text{HA}_0 + n\text{A}_0^- - V(x_1 + x_2) \\ K_w - x_3 x_4 \\ x_4 + n\text{A}_0^-/V - (x_2 + x_3) \end{bmatrix}$$

med Jacobimatrisen

$$\mathbf{Df}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} K_a & -x_4 & 0 & -x_2 \\ -V & -V & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -x_4 & -x_3 \\ 0 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

På studiohemsidan finns funktionerna `fun_protolys1` och `jac_protolys1`, som definierar funktionen $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ och Jacobimatrisen $\mathbf{Df}(\mathbf{x})$, samt skriptfilen `uppgift1`, som man kan bygga vidare på för att få ett effektivt sätt att administrera alla beräkningar.

För uppgift 2 och 3 är det lämpligt att skapa nya funktioner `fun_protolys2` och `jac_protolys2` som är en modifiering av de tidigare. Vidare är det lämpligt att skapa en skriptfil `uppgift2o3` för att administrera de nya beräkningarna.

3 Redovisning

Redovisas för kemi i ett Word-dokument som skickas in via Pingpong enligt instruktioner under Innehåll/Matte på kemikursens hemsida. För studiohandledaren visar ni upp skriptfiler med tillhörande funktionsfiler för lösning av jämviktsekvationerna.