

# Modelo reacción química en cadena

Stéphane BINOIS

Traducción: Oswaldo Rodriguez (UAO, Cali Colombia)

March 7, 2018

## Contents

<b>1</b>	<b>Reacción en cadena</b>	<b>1</b>
1.1	Ecuaciones de cinética química . . . . .	1
1.2	Simulación de la reacción bajo Scilab . . . . .	1
<b>2</b>	<b>Análisis de estabilidad del sistema</b>	<b>3</b>

## 1 Reacción en cadena

### 1.1 Ecuaciones de cinética química

El objetivo de este TP es observar la evolución de las concentraciones de reactivos y los productos de una reacción en cadena.

Si consideremos las reacciones (de orden 1)  $A \rightarrow B \rightarrow C$  de las constantes  $k_1$  y  $k_2$ .

Entonces, podemos escribir las diferentes ecuaciones cinéticas:

$$\begin{cases} \dot{[A]} = -k_1[A] \\ \dot{[B]} = k_1[A] - k_2[B] \\ \dot{[C]} = k_2[B] \end{cases} \quad (1)$$

Cuya solución analítica esta dada por:

$$\begin{cases} [A](t) = A_0 e^{-k_1 t} \\ [B](t) = \frac{k_1 A_0}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} + (k_2 B_0 - k_1(B_0 + A_0)) e^{-k_2 t} \\ [C](t) = A_0 - [A](t) - [B](t) \end{cases} \quad (2)$$

### 1.2 Simulación de la reacción bajo Scilab

**Pregunta 1** *Al escribir las funciones en un archivo apropiado y los comandos en otro archivo, se hace la simulación de la evolución de las concentraciones de las tres especies*

químicas a partir de las expresiones teóricas de estas concentraciones (sistema 2). Podemos tomar  $A_0 = 1$ ,  $B_0 = C_0 = 0$ ,  $k_1 = 10$  y  $k_2 = 1$ . (Un buen tiempo de simulación es entonces  $tf=6$ ).

**Pregunta 2** Implementar el sistema dinámico (sistema 1).

```
//funcion que define el sistema de EDO
function xdot=chaine(t,x)
    xdot(1)=-k1*x(1);
    xdot(2)=k1*x(1)-k2*x(2);
    xdot(3)=k2*x(2);
endfunction

//funcion de la solucion exacta del sistema de EDO
function a=aexact(t)
    a=a0*exp(-k1*t);
endfunction
function b=bexact(t)
    b=1/(k2-k1)*(k1*a0*exp(-k1*t)+(k2*b0-k1*(a0+b0))*exp(-k2*t));
endfunction
function c=cexact(t)
    c=a0-aexact(t)-bexact(t);
endfunction

//Parametros
a0=1;
b0=0;
k1=1;
k2=10;
pas=0.1;
tf=6;
X0=[a0;b0;0];
t=0:pas:tf;

//Solucion exacta
A=aexact(t);
B=bexact(t);
C=cexact(t);
xset("window",0)
xbase()
leg='A@B@C';
plot2d([t',t',t'],[A',B',C'],[7,9,3],'121',leg);
xlabel('Concentración teórica de las especies A B y C','t')
```

```
//Solucion numerica del sistema EDO
X=ode(X0,0,t,chain);
xset("window",1)
xbase()
leg='A@B@C';
plot2d([t',t',t'],[X(1,:)','X(2,:)','X(3,:)'],[7,9,3],'121',leg);
xtitle('Concentración calculada por ODE de las especies A B y C','t')
```

```
//comparacion de soluciones
xset("window",2)
xbase()
leg='A@B@C';
plot2d([t',t',t'],[X(1,:)'-A',X(2,:)'-B',X(3,:)'-C'],[7,9,3],'121',leg);
xtitle('Diferencias entre las concentraciones calculadas por ODE y las concentraciones')
```

**Pregunta 3** *Las gráficas de la evolución de las concentraciones de acuerdo con los dos sistemas anteriores se muestran a continuación. También se hace el gráfico de las diferencias entre los resultados de los dos sistemas.*

**Pregunta 4** *Reanude la simulación variando las concentraciones iniciales así como las constantes de reacción.*

**Pregunta 5** *Encuentre de nuevo las gráficas de la simulación con la variación de los parámetros y compárelas con las gráficas anteriores. Qué se puede concluir?*

## 2 Análisis de estabilidad del sistema

Concentración teórica de las especies A B y C

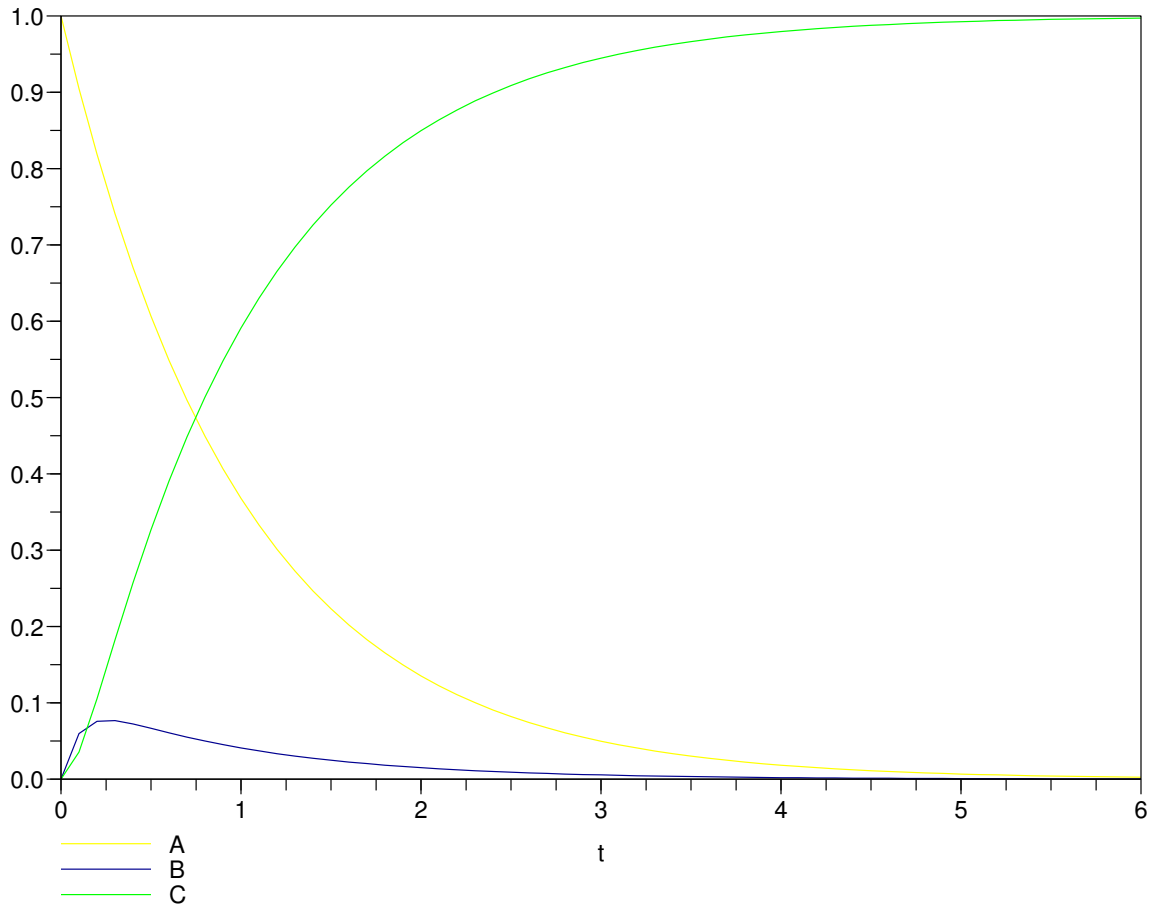


Figure 1: Concentración teórica de las especies

Concentración calculada por ODE de las especies A B y C

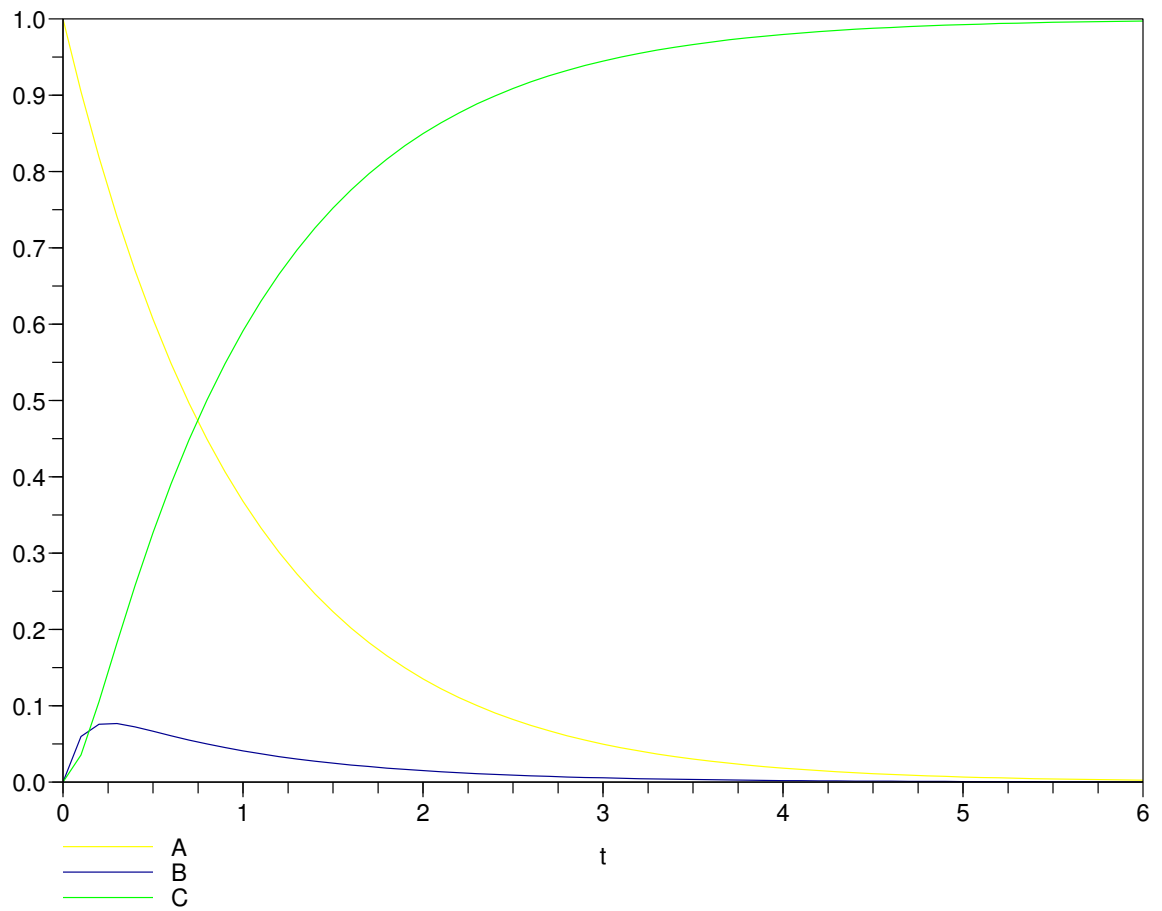


Figure 2: Concentración calculada con ODE de las especies

Diferencias entre las concentraciones calculadas por ODE y las concentraciones teóricas

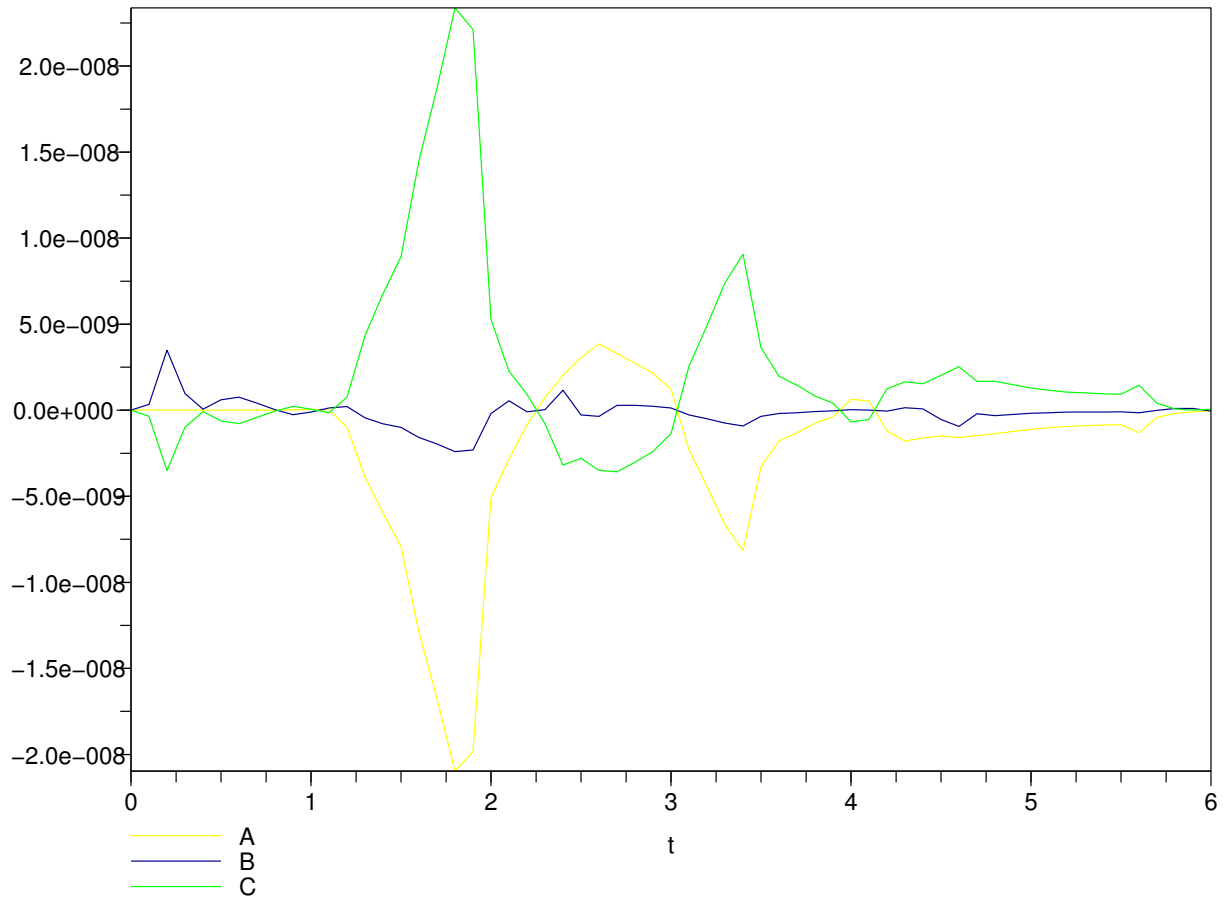


Figure 3: Diferencias