A köz – azaz KK – kívánatára egy példa

Boros Balázs és Tóth János

2008. október 9.

1. Teljesen valóságos példa

Vizvári Béla, Takács Nándor IV. éves vegyész és TJ közösen bruttó reakciók fölbontásával foglalkozik. Az alábbi példa így adódott.

$$\begin{array}{lcl}
\mathrm{Br_2 + H_2O} & \to & \mathrm{Br^- + BrO^- + 2H^+} \\
\mathrm{Br_2 + H_2O} & \to & \mathrm{Br^- + BrOH + H^+} \\
\mathrm{BrO^- + BrOH} & \to & \mathrm{Br^- + BrO_2^- + H^+} \\
\mathrm{BrO^- + H_2O} & \to & \mathrm{Br^- + H_2O_2} \\
\mathrm{BrO^- + SO_3^{--}} & \to & \mathrm{Br^- + SO_4^{--}} \\
\mathrm{BrO_2^- + S_2O_3^{--}} & \to & \mathrm{Br^- + SO_2 + SO_3^{--}} \\
\mathrm{H_2O_2 + SO_2} & \to & \mathrm{2H^+ + SO_4^{--}}
\end{array} \tag{1}$$

A fölbontást *Mathematicá*val állítottuk elő, onnan a `TeXForm` függvénnyel kaptuk az ide beírható képleteket.

A megkapott felbontást elemeztük a Boros Balázs által ismertetett fogalmakkal, azaz alkalmaztuk Papp Dávid programcsomagját, hogy megkapjuk a jellemző mennyiségeket. (A betűket most kicsit átírtam Balázs jelöléseinek megfelelően.) Így tehát

az anyagfajták (ezek száma $n = 12$):

$$\mathcal{A} = \left\{ \begin{array}{l} A_1 = \mathrm{Br^-},\ A_2 = \mathrm{Br_2},\ A_3 = \mathrm{BrO^-},\ A_4 = \mathrm{BrO_2^-},\ A_5 = \mathrm{BrOH},\ A_6 = \mathrm{H^+}, \\ A_7 = \mathrm{H_2O},\ A_8 = \mathrm{H_2O_2},\ A_9 = \mathrm{S_2O_3^{--}},\ A_{10} = \mathrm{SO_2},\ A_{11} = \mathrm{SO_3^{--}},\ A_{12} = \mathrm{SO_4^{--}} \end{array} \right\},$$

a komplexek (ezek száma $c = 13$):

$$\mathcal{C} = \left\{ \begin{array}{ll} C_1 = \mathrm{BrO^- + BrOH}, & C_2 = \mathrm{Br^- + BrO_2^- + H^+}, \\ C_3 = \mathrm{Br^- + BrOH + H^+}, & C_4 = \mathrm{Br^- + BrO^- + 2H^+}, \\ C_5 = \mathrm{Br_2 + H_2O}, & C_6 = \mathrm{BrO^- + H_2O}, \\ C_7 = \mathrm{Br^- + H_2O_2}, & C_8 = \mathrm{BrO_2^- + S_2O_3^{--}}, \\ C_9 = \mathrm{H_2O_2 + SO_2}, & C_{10} = \mathrm{BrO^- + SO_3^{--}}, \\ C_{11} = \mathrm{Br^- + SO_2 + SO_3^{--}}, & C_{12} = \mathrm{Br^- + SO_4^{--}}, \\ C_{13} = \mathrm{2H^+ + SO_4^{--}} & \end{array} \right\},$$

a reakciólépések (ezek száma $m = 7$) az (1) alattiak; komplexekkel kifejezve:

$$\mathcal{R} = \{(C_5, C_4), (C_5, C_3), (C_1, C_2), (C_6, C_7), (C_{10}, C_{12}), (C_8, C_{11}), (C_9, C_{13})\},$$

a komplexek mátrixa (ez $(n \times c)$-es méretű):

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{12\times 13},$$

a reakcióvektorokból álló sztöchiometriai mátrix (ez $(n \times m)$-es méretű):

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{12\times 7},$$

a differenciálegyenletben szereplő koncentrációvektor ($n = 12$ koordinátája van):

$$\begin{bmatrix} x_1 = c_{\mathrm{Br}^-} \\ x_2 = c_{\mathrm{Br}_2} \\ x_3 = c_{\mathrm{BrO}^-} \\ x_4 = c_{\mathrm{BrO}_2^-} \\ x_5 = c_{\mathrm{BrOH}} \\ x_6 = c_{\mathrm{H}^+} \\ x_7 = c_{\mathrm{H_2O}} \\ x_8 = c_{\mathrm{H_2O_2}} \\ x_9 = c_{\mathrm{S_2O_3^{--}}} \\ x_{10} = c_{\mathrm{SO_2}} \\ x_{11} = c_{\mathrm{SO_3^{--}}} \\ x_{12} = c_{\mathrm{SO_4^{--}}} \end{bmatrix},$$

a tömeghatás kinetika esetén a sebességfüggvények:

$$
\begin{aligned}
R_{(5,4)}(x) = \kappa_{(5,4)} x_2 x_7, \\
R_{(5,3)}(x) = \kappa_{(5,3)} x_2 x_7, \\
R_{(1,2)}(x) = \kappa_{(1,2)} x_3 x_5, \\
R_{(6,7)}(x) = \kappa_{(6,7)} x_3 x_7, \\
R_{(10,12)}(x) = \kappa_{(10,12)} x_3 x_{11}, \\
R_{(8,11)}(x) = \kappa_{(8,11)} x_4 x_9, \\
R_{(9,13)}(x) = \kappa_{(9,13)} x_8 x_{10},
\end{aligned}
$$

a differenciálegyenlet:

$$
\dot{x} = S \cdot (R \circ x) = S \cdot \begin{bmatrix} R_{(5,4)} \circ x \\ R_{(5,3)} \circ x \\ R_{(1,2)} \circ x \\ R_{(6,7)} \circ x \\ R_{(10,12)} \circ x \\ R_{(8,11)} \circ x \\ R_{(9,13)} \circ x \end{bmatrix} = S \cdot \begin{bmatrix} \kappa_{(5,4)} x_2 x_7 \\ \kappa_{(5,3)} x_2 x_7 \\ \kappa_{(1,2)} x_3 x_5 \\ \kappa_{(6,7)} x_3 x_7 \\ \kappa_{(10,12)} x_3 x_{11} \\ \kappa_{(8,11)} x_4 x_9 \\ \kappa_{(9,13)} x_8 x_{10} \end{bmatrix}.
$$