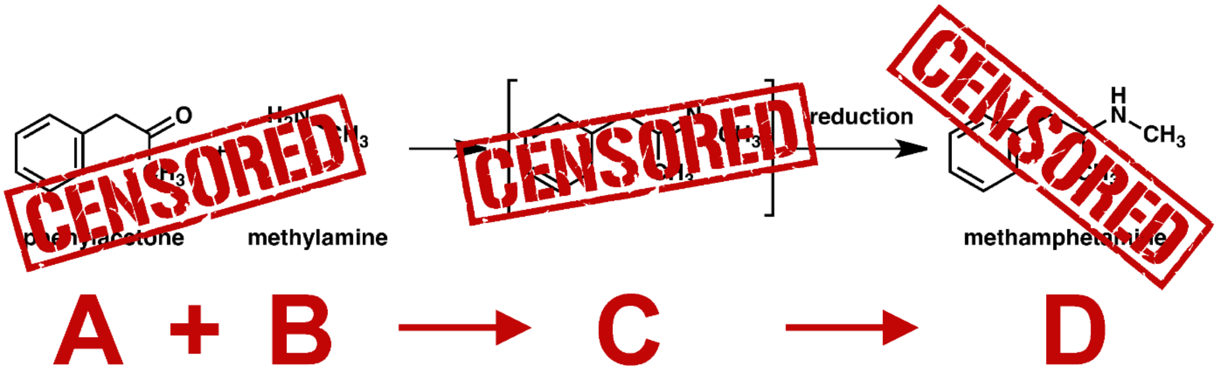
Rozwiazywanie zagadnień równowagi chemicznej

Słynna metoda syntezy wykorzystywana przez Waltera W. na jednym z ostatnich etapów wykorzystywała podstawową metodę syntezy metamfetaminy **składnika D**:



W tej reakcji najbardziej krytyczny jest proces metylacji fenyloacetonu…. METYLACJA FENYKLOACETONU!!! To powszechny proces!!! Można go znaleźć na Wikipedii. Nie możecie cenzurować wszystkich nazwy, których nie rozumiecie!

…No dobra, niech wam będzie…

W tej reakcji najbardziej krytyczny jest proces A + B → C, który prowadzi się aż do ustalenia równowagi chemicznej wyrażonej równaniem:

$$K = \frac{[C]}{[A][B]},$$

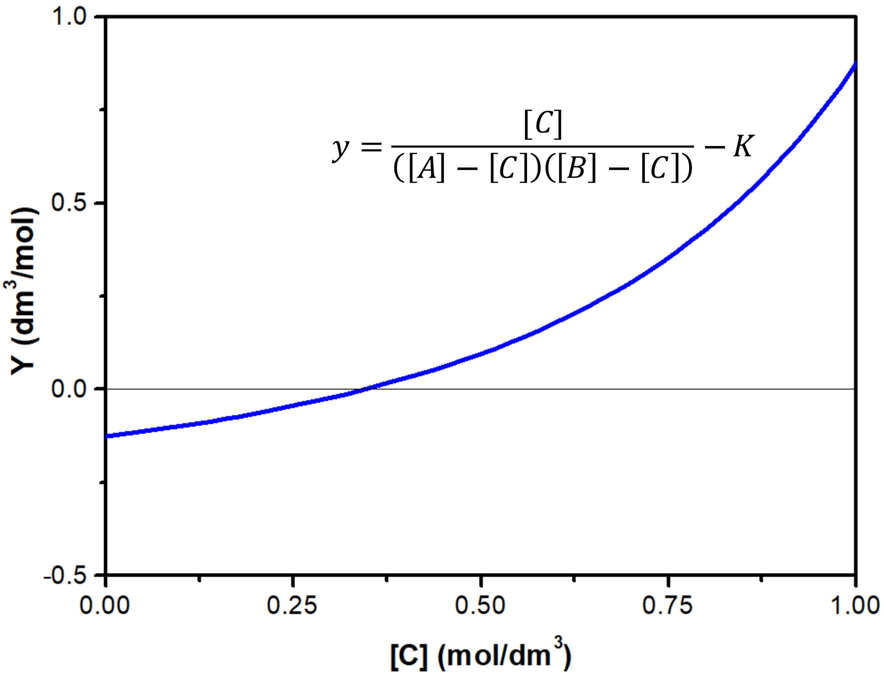
Przy założeniu znanego początkowego stężenia składnika A i B wynoszących odpowiednio $[A_0]$ i $[B_0]$ równanie to można sprowadzić do formy równania nieliniowego:

$$y([C]) = \frac{[C]}{([A] - [C])([B] - [C])} - K,$$

Dla PRZYKŁADOWYCH wartości [A] = [B] = 2 mol/dm^3 i K = 0,1265 dm^3/mol, równanie to można narysować na wykresie przedstawionym na poniższym rysunku.

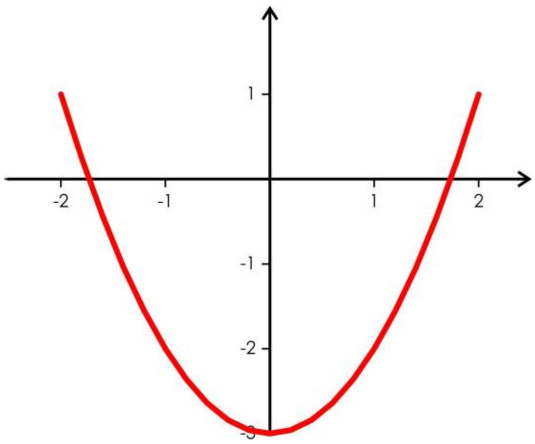
Rozwiązanie problemu polega na znalezieniu miejsca zerowego wspomnianej funkcji. Do dzieła!

PS. Nie szukamy rozwiązania analitycznego! Szukamy metody znalezienia przybliżonej wartości [C], dla której funkcja y jest dostatecznie bliska zeru!



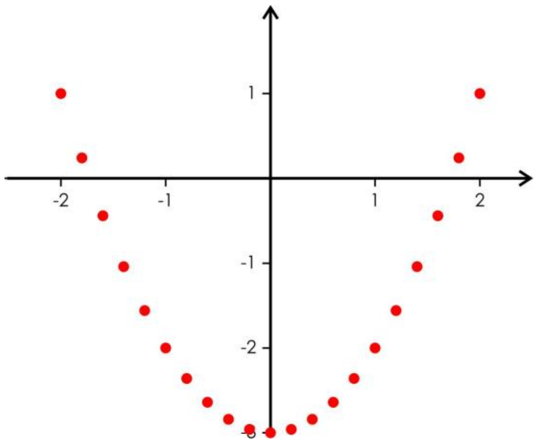
Funkcje rzeczywiste i dyskretne

O to funkcja $y(\mathrm{x}) = x^2 - 3$:



Funkcja ta jest funkcją ciągłą i jej dziedziną są wszystkie liczby rzeczywiste. Czyli możemy policzyć wartość funkcji dla każdej liczby rzeczywistej. Oznacza to bardzo wiele liczb. Mniej więcej nieskończoność liczb całkowitych, pomiędzy którymi znajduje się nieskończoność liczb rzeczywistych. Jak łatwo się domyślić, praca na takiej ilości liczb zajęła by bardzo dużo czasu. Ba, nawet gdybyśmy chcieli przechować w pamięci komputera dokładną wartość pojedynczej liczby niewymiernej, np.: $\sqrt{2}$, potrzebowalibyśmy na to nieskończoną liczbę pamięci, nie mówiąc już o tym, że najpierw potrzebowalibyśmy tyle samo czasu by ją policzyć.

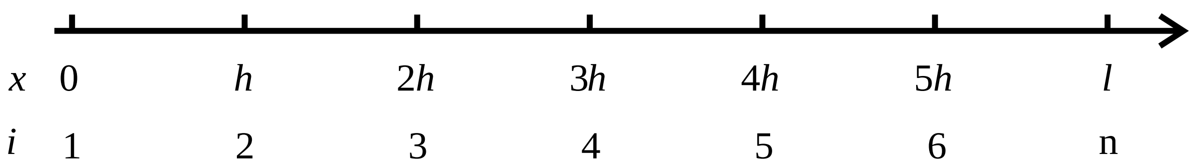
Ponieważ ludzie dysponują jedynie ograniczoną liczbą czasu[1], a komputery mają ograniczoną pojemność, konieczne było zastosowanie pewnych uproszczeń. Pierwszym z nich jest zapisywanie liczb jedynie w uproszczonej formie. I tak nasz pierwiastek może zostać przechowany w pamięci komputera jako: $1.41421356237310 \cdot 10^{0}$. Drugim z nich, jest rezygnacja z próby obliczenia wszystkich wartości funkcji. Obliczamy i zapisujemy jedynie wartości w pewnych charakterystycznych punktach:



Tak zapisane funkcje nazywamy **dyskretnymi**!

Te charakterystyczne punkty, dla których liczymy i przechowujemy wartości naszej funkcji są nazywane **węzłami** sieci przestrzennej. W przypadku struktur dwu i trójwymiarowych rzeczywiście wygląda to jak sieć, jednak w interesującym nas przypadku jednowymiarowym jest to oś współrzędnych, jak na rysunku poniżej. Każdy z tych węzłów musimy dokładnie scharakteryzować. Oprócz informacji o położeniu punktu na osi, zazwyczaj oznaczanej symbolem x, każdemu z nich przypisuje się także numer pozwalający na łatwe odnoszenie się do konkretnego węzła. W zapisie matematycznym numer ten zazwyczaj znajduje się w dolnym indeksie. I tak: Położenie pierwszego węzła zapisuje się jako: x_1. A wartość naszej funkcji w dowolnym *i-tym* węźle zapiszemy jako:

$$y_i = y(x_i) = x_i^2 - 3.$$



Kolejnym bardzo przydatnym parametrem jest odległość między węzłami, zazwyczaj nazywana krokiem przestrzennym i zapisywana jako: h lub Δx (delta jak zmiana parametru x).

[1] Nie dotyczy pań w dziekanacie.

Pochodne – iloczyny różnicowe

Jak doskonale pamiętacie, pochodne informują nas jak szybko zmienia się wartość funkcji wraz z zmianą wartości jego argumentów. Jedna z popularnych definicji mówi, że jest to wartość tangensa konta nachylenia, prostej stycznej do funkcji w danym punkcie. Istnieje wiele sposobów wyprowadzenia wzoru na pochodną. Jeden z nich rozpoczyna się od szeregu Taylora:

$$f(x+h) = f(x) + \frac{h}{1!} f'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \ldots + \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(x) + \mathrm{R}_n(x,a) \ .$$

Jeżeli dokonamy aproksymacji pierwszego rzędu, czyli uprościmy równanie jedynie do członu zawierającego pierwszą pochodną, otrzymamy równanie, które w prosty sposób można będzie przekształcić do wyrażenia na pierwszą pochodną:

$$f(x+h) = f(x) + \frac{h}{1!} f'(x),$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Takie wyrażenie nosi nazwę **iloczynu różnicowego w przód**, a otrzymaną wartością jest **pochodna prawostronna**. Dlaczego w przód? Ponieważ matematycy szybko wpadli na pomysł, że do liczenia pochodnej można wykorzystać także ujemnych wartości kroku przestrzennego, h i po przekształceniach otrzymać równanie na **pochodną lewostronną**, daną **ilorazem różnicowym w tył:**

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}.$$

Dlaczego? Ponieważ można. Ponieważ czasami takie wyrażenie spisuje się lepiej niż iloraz różnicowy w przód.

Jakby tego było mało, możemy poprawić dokładność naszych obliczeń wykorzystując także drugą pochodną z szeregu Taylora. Po nieco bardziej skomplikowanych obliczeniach otrzymujemy 2 bardzo ważna wyrażenia. Na **pochodną centralną** oraz wyrażenie na **drugą pochodną** funkcji:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h},$$

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}.$$

Wszystkie powyższe wyrażenia, wykorzystuje się nie tylko do obliczania pochodnych dla funkcji dyskretnych, ale również do obliczenia przybliżonej wartości pochodnej dla zwykłych funkcji arytmetycznych (np. jeżeli nie mamy czasu ich liczyć w tradycyjny sposób).