

Experimenten

Bepaling van de snelheidsconstanten

In dit intermezzo wordt de kriskrassimulatie verder kwantitatief onderzocht.

De samenstelling van de evenwichtstoestand fluctueert nogal hebben we gezien maar met $k_{A \rightarrow B} / k_{B \rightarrow A} = K_{ev}$ is het mogelijk deze te berekenen. We moeten dan wel de twee snelheidsconstanten kennen.

Bovendien kan dan ook het transport tijdens het verloop van de simulatie gevolgd worden.

Experimenten

Bepaling van de snelheidsconstanten

De basis formule waarvan we gebruik maken is: $\Delta N = k N$

ΔN :aantal bolletjes dat per stap (tijdseenheid) door het poortje naar de andere kant gaat;

k : de snelheidsconstante of het percentage dat kan passeren;

N : het aantal bolletjes in ruimte A of B op dat moment.

In wiskundige termen staat hier een differentiaalvergelijking:

$\partial N(t)/\partial t = k N(t)$, die op veel terreinen voorkomt.

De oplossing daarvan is een e-macht: $N(t) = N_0 \exp(kt)$

We gaan dit toepassen op het verdelingsevenwicht:

Experimenten

Bepaling van de snelheidsconstanten

deeltje in **A** \longleftrightarrow deeltje in **B**

Voor de reactie van links naar rechts: $N_A(s) = N_{A,0} \exp(k_A s)$
met $s = 0, 1, 2, 3, 4$ etc : het aantal stappen dat de simulatie gevorderd is (1 staat voor 25 frames);

Voor de reactie van rechts naar links: $N_B(s) = N_{B,0} \exp(k_B s)$
met $s = 0, 1, 2, 3, 4$ etc : het aantal stappen dat de simulatie gevorderd is;

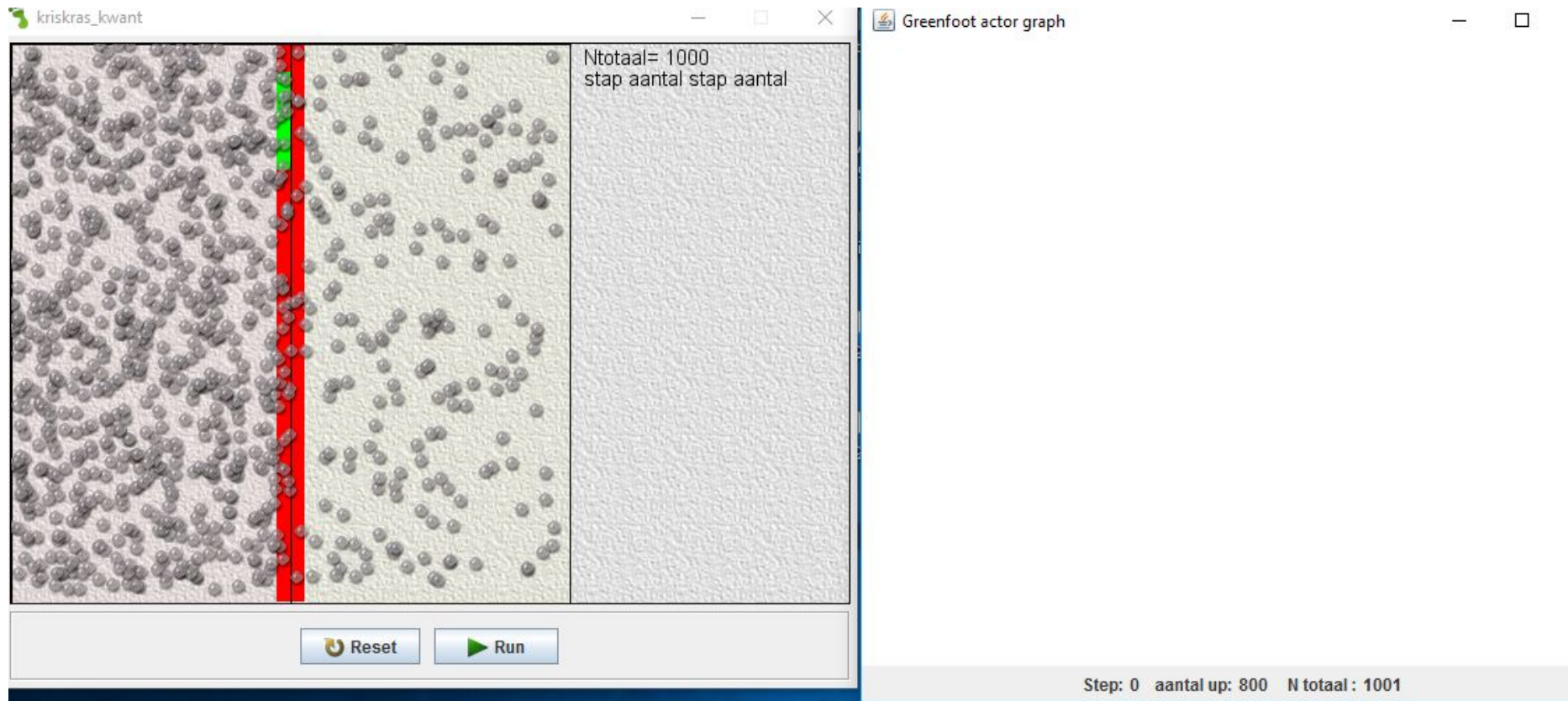
Experimenten

Bepaling van de snelheidsconstanten

- In de de bijlage(bij intermezzo) zijn een tweetal simulaties opgenomen waarbij poortje A alleen open is dan wel poortje B.
- De files zijn : 'kriskras_kwant_70' en 'kriskras_kwant_110' voor resp. poortje A en B.
- Tijdens de simulatie wordt om de zoveel frames het aantal op het scherm getoond; de eerste 30 zijn voldoende om een goede grafiek te krijgen.
- Neem de scores over in een spreadsheetprogramma; een voorbeeld werkblad is bijgevoegd.

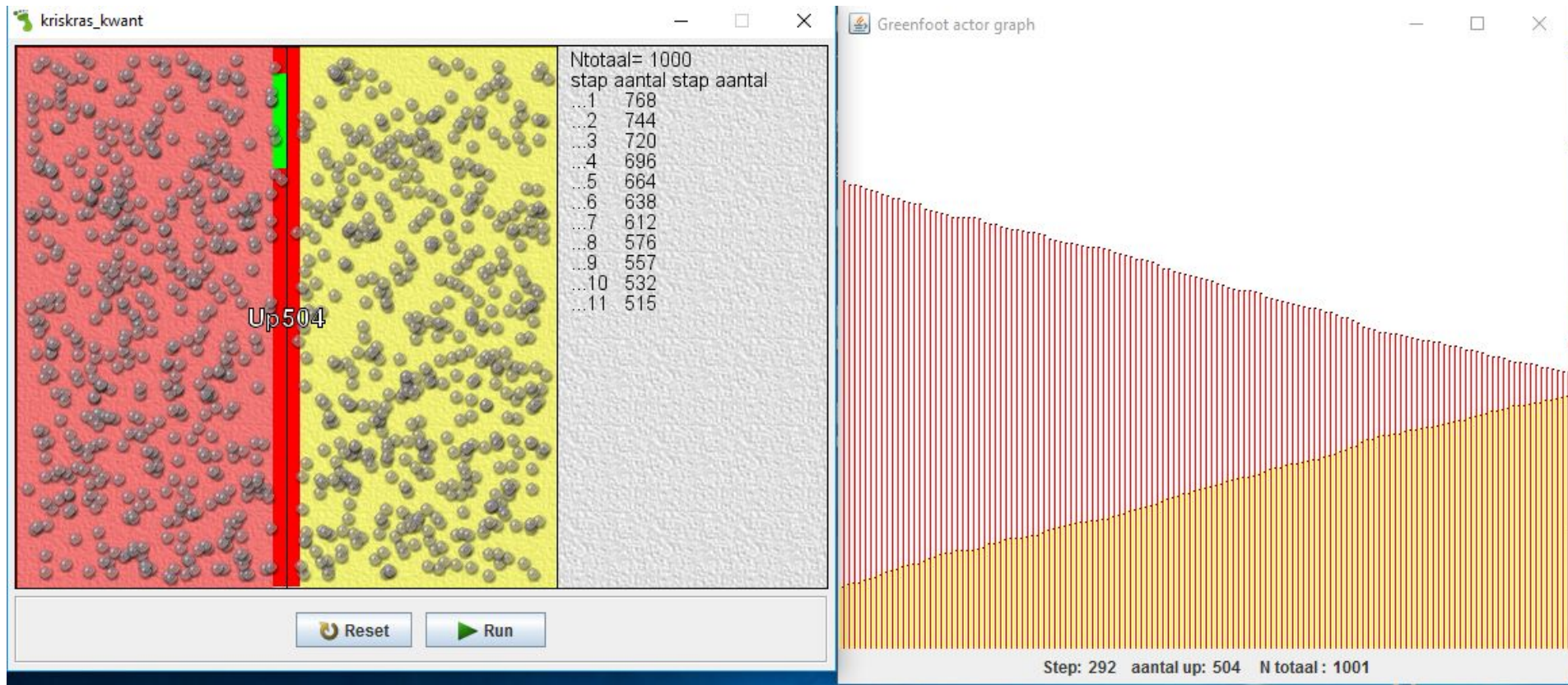
Kwantitatief: experimentele gegevens verwerken in Excel

Poortje A met 800 bolletjes bij de start in ruimte A



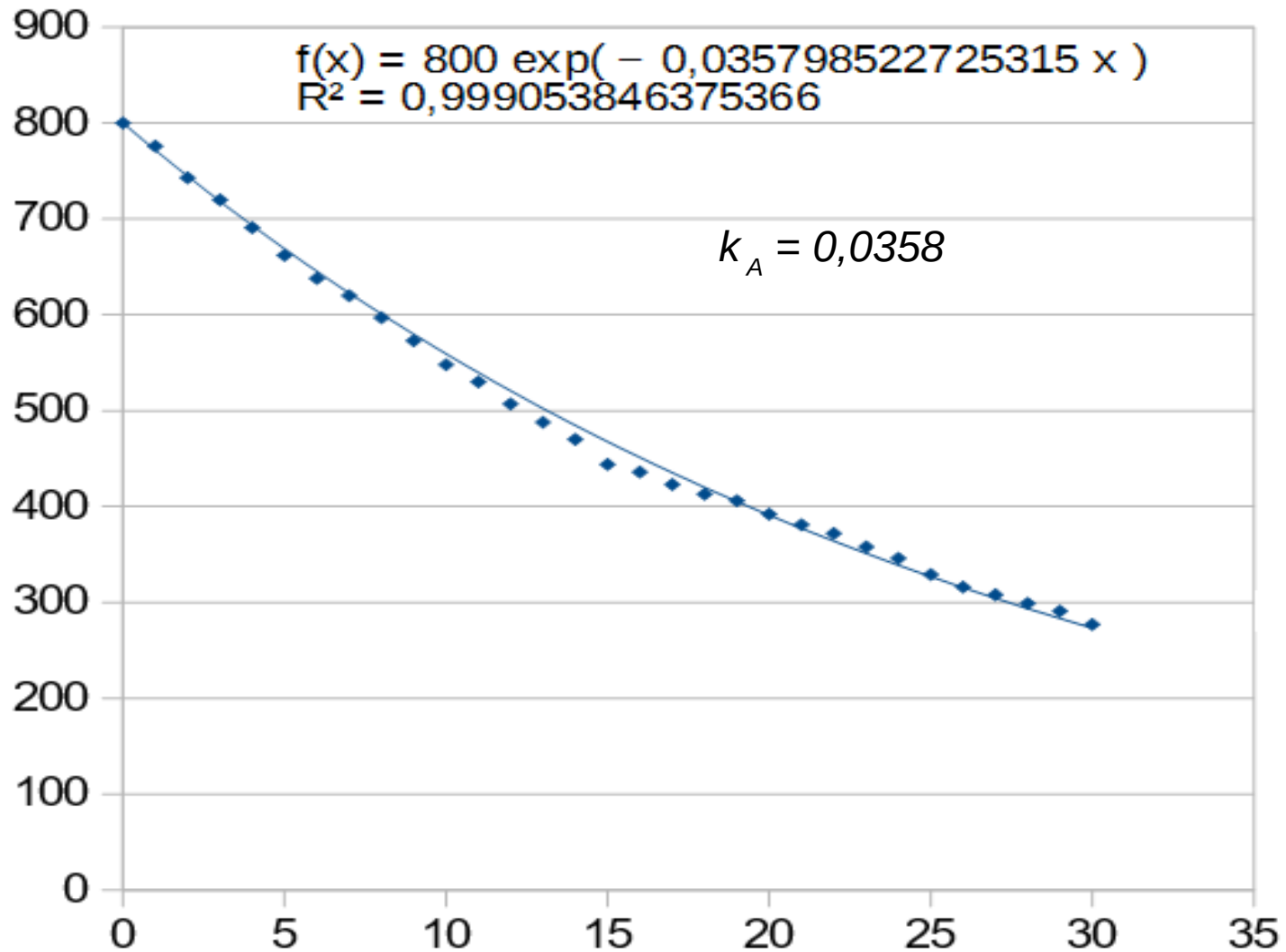
Kwantitatief: experimentele gegevens verwerken in Excel

Situatie in A na 11 stappen; ga door tot 26.
Neem deze waarden over in je spreadsheet en
bepaal de exponent van de e-macht



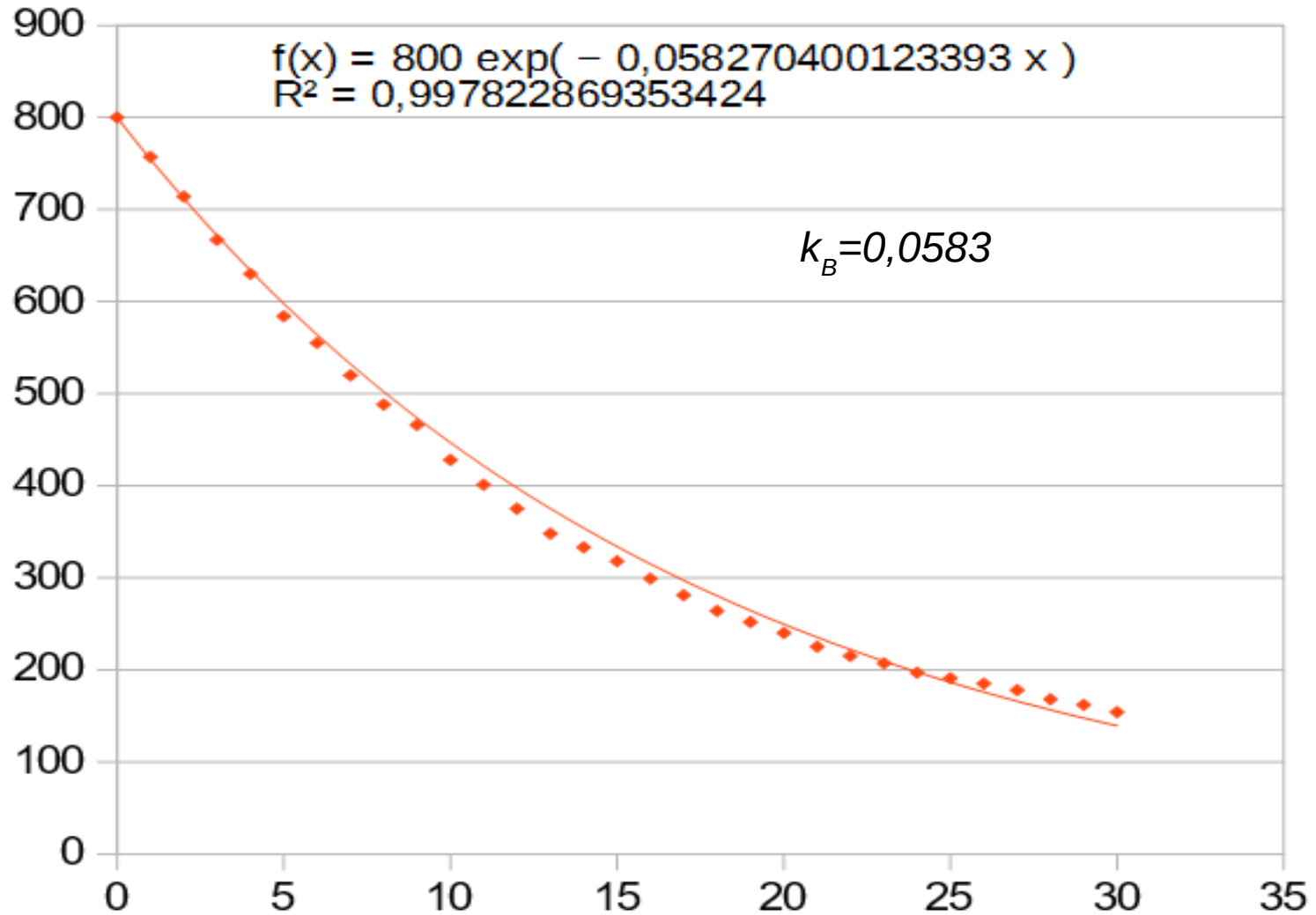
Resultaten

Aantal bolletjes in A tijdens verloop simulatie



Resultaten

Aantal bolletjes in B tijdens verloop simulatie



Resultaten

Beide poortjes open

In de bijlage is een simulatie opgenomen (kriskras_kwant_110_70).

Hierbij is de uitvoer na elke stap op het scherm weergegeven.

Het theoretisch verloop wordt beschreven door de formule:

$$N_A(s) = (N_{A,0} + \beta / \alpha) \exp(\alpha \cdot s) - \beta / \alpha$$

$N_A(s)$ = aantal bolletjes na s stappen

$N_{A,0}$ = aantal bij de start

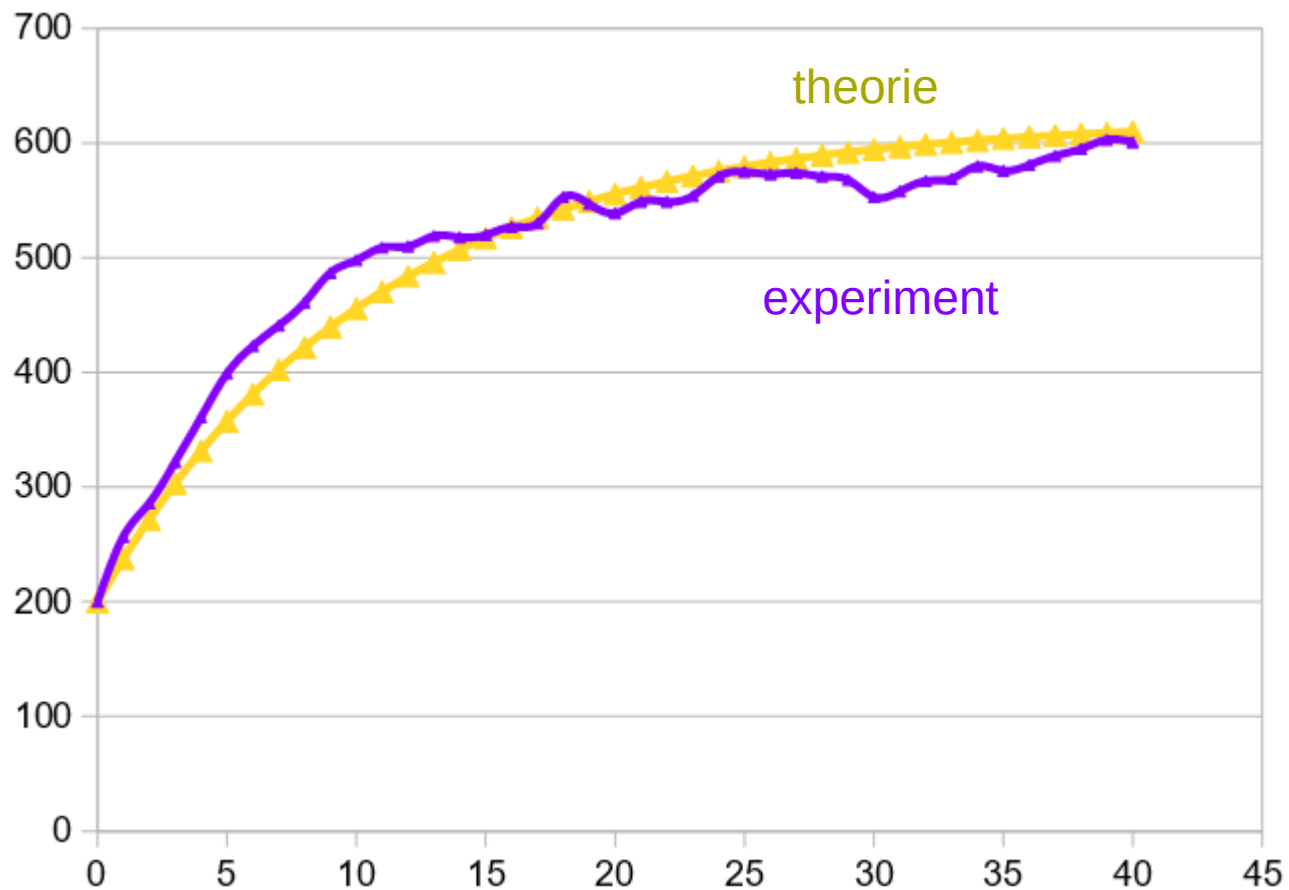
$$\beta = k_B N_T$$

$$\alpha = -(k_A + k_B)$$

$$N_T = N_A + N_B$$

Resultaten

De grafiek van het experiment met beide poortjes open en het theoretische verloop daarvan



Resultaten

Het transport vanuit A en B

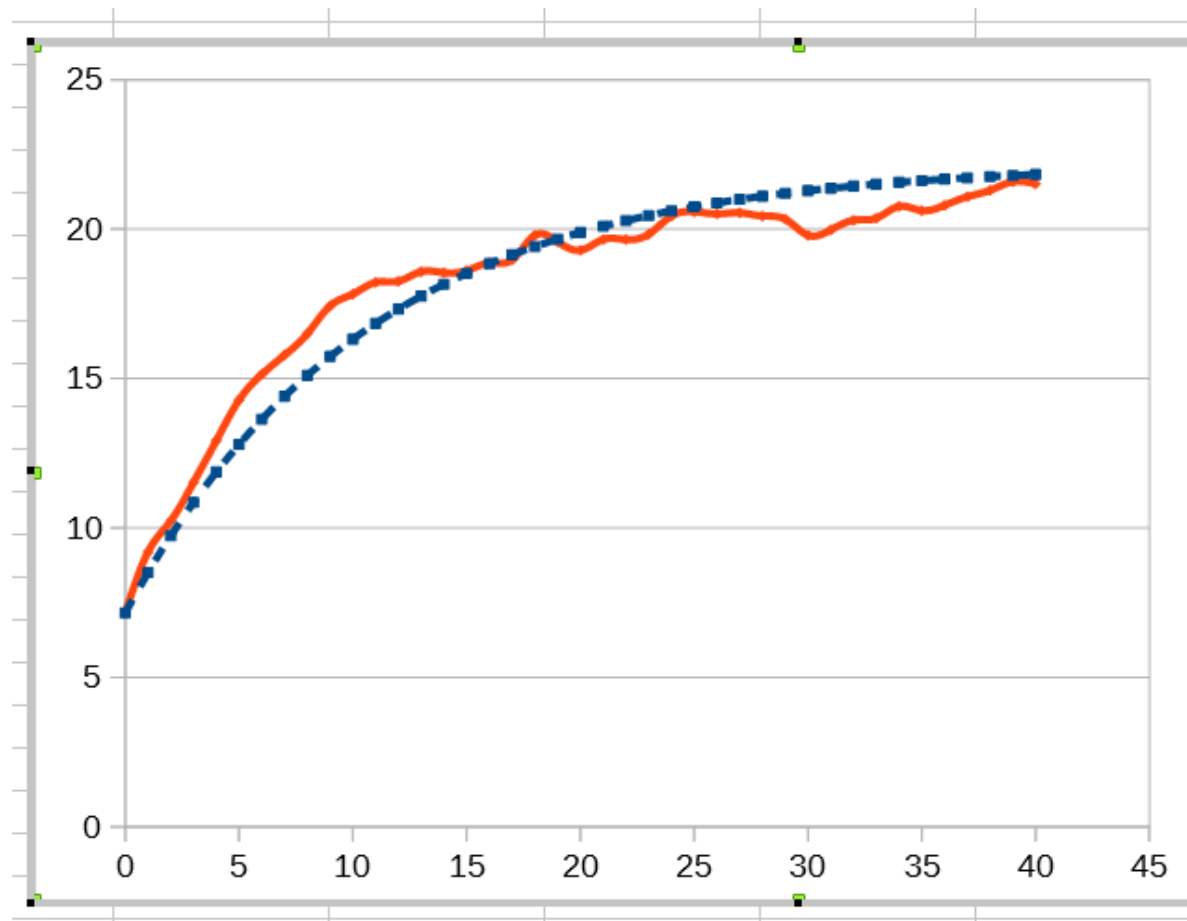
- Met de basisformule $\Delta N = k N$ is het transport voor elke stap (s) te berekenen :

vanuit A : $\Delta N_A = k_A N_A$

en vanuit B $\Delta N_B = k_B N_B$

Resultaten

transport door poortje A : *experiment* en *theorie*



Nog enkele opgaven

Tot slot een drietal opgaven over verdelingsevenwichten

vaardigheden die getoetst worden zijn:

- ✓ Evenwichtstoestand uit rekenen als K en startwaarden gegeven zijn;
- ✓ snelheidsconstanten uitrekenen als N en ΔN gegeven zijn; met deze waarden de constante berekenen en de evenwichtstoestand;
- ✓ nieuw evenwicht berekenen na toevoeging van een hoeveelheid aan een van beide ruimtes (verschuiving van een evenwicht)

diverse opgaven

Opgave 1

Bij een simulatie met het kriskrasmodel is het systeem zo gekozen dat de constante $K_{ev}=0.80$. De hoeveelheden links en rechts zijn gelijk 500.

- a) Bereken de hoeveelheden in A en B bij evenwicht.
- b) Doe hetzelfde bij startwaarden in A 700 en B 100.

diverse opgaven

Opgave 2

Bij een simulatie wordt gestart met in A 500 en in B 300 bolletjes. Na 1 stap zijn er 50 bolletjes door poortje A gegaan en 24 door poortje B.

- a) Was de startsituatie in evenwicht? Motiveer!
- b) Bereken de hoeveelheden in A en B na de doorgang van de bolletjes.
- c) Bereken de hoeveelheden in A en B bij evenwicht.

diverse opgaven

Opgave 3

Bij een simulatie starten we met 500 bolletjes in A en 300 in B. Er is op dat moment sprake van evenwicht.

Vervolgens voegt men er 100 aan B toe.

- a) In welke richting verschuift de verdeling(500/400) die als zich opnieuw evenwicht instelt? Naar links of naar rechts?
- b) Bereken de nieuwe verdeling bij evenwicht.