## Opdracht 1 – Stof A(g) wordt stof B(g) *Versie 2016 05 30*

### Werkwijze

Deze opdracht begeleidt je stap voor stap door het modelbouw proces. Elke stap verwijst steeds naar een stukje tekst in de handleiding. Lees eerst deze stukjes tekst in de handleiding. Lees daarna verder over de te nemen modelbouwstap. Voer de stap uit op de computer zodra je een goed idee hebt van hoe dat te doen.

### Context

We maken een model van stof A(g) die door wordt omgezet in stof B(g). Stof A(g) zit in een vat. We nemen aan dat er bij aanvang een bepaalde concentratie van stof A(g) is ([A]>0), terwijl er nog geen stof B(g) is ([B]=0). Maar, vanaf het begin wordt de reactie actief (s>0), en verandert stof A(g) in stof B(g), totdat A geheel is omgezet in B ([A]=0 en [B]>0) en de reactie weer tot stilstand komt (s=0).

Naast het maken van het model, zijn er enkele korte schrijfopdrachten. *Schrijf de antwoorden in dit MSWORD document en* ***lever het na afloop online in***. Vergeet niet om ook je naam hieronder in te vullen.

|  |  |
| --- | --- |
| Voornaam | Achternaam |
|  |  |

### Stap 1 – Entiteit en eigenschappen *(Handleiding item 1)*

We houden het model zo simpel mogelijk, zodat belangrijke aspecten goed zichtbaar worden. Daarom gaan we uit van een vat (**entiteit**) met eigenschappen (**grootheden**). Begin met het plaatsen van de entiteit vat in het model.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| Het **vat** |  |

### Stap 2 – Grootheden (en afgeleiden) – Stof A(g) *(Handleiding item 2 & 3)*

**Grootheden** zijn eigenschappen van de objecten (entiteiten). In het model zijn drie eigenschappen van belang: concentratie van stof A(g): [A], concentratie van stof B(g): [B] en reactiesnelheid: s. We beginnen met stof A(g). Voeg de concentratie van deze stof toe als een eigenschap (grootheid)[[1]](#footnote-1) van het vat.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| Het vat heeft de concentratie van stof A(g) als eigenschap. |  |

### Stap 3 – Waardenbereik *(Handleiding item 4 & 5)*

Elke grootheid heeft een **huidige waarde** en een **verandering**. Het symbool voor dit laatste (∂, de afgeleide) is al automatisch toegevoegd (in stap 2). Nu nog de huidige waarde. De **waarden** die een grootheid kan aannemen, worden eerst vastgelegd in een **waardenbereik**. Elke grootheid krijgt dus een waardenbereik.

In de context beschrijving (boven) wordt gezegd dat er voor stof A(g) bij aanvang een bepaalde concentratie is, oftewel [A]>0, en dat na de reactie deze concentratie nul is geworden, dus [A]=0. Dit betekent dat het waardenbereik van stof A(g) twee waarden moeten hebben. Maak het bedoelde waardenbereik. Let op de waarde Ø. De waarde Ø toevoegen, vergt een speciale handeling.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| Het waardenbereik van [A] heeft twee waarden, namelijk Ø en >Ø (een positief interval: ‘Plus’). |  |

### Stap 4 – Reactiesnelheid – Grootheid en afgeleide *(Handleiding item 2 & 3)*

De tweede **grootheid** die we toekennen aan het vat is die van de reactiesnelheid. Deze geeft de stroom aan waarmee stof A(g) wordt omgezet in stof B(g), vandaar de naam: s(A→B). Voeg deze grootheid toe aan de entiteit vat het model.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| Het vat heeft als eigenschap s(A→B), de reactie (snelheid) waarmee stof A(g) wordt omgezet in stof B(g). |  |

### Stap 5 – Reactiesnelheid – Waardenbereik *(Handleiding item 4 & 5)*

De reactie snelheid heeft ook een **waardenbereik**. De reactie is actief zolang er een bepaalde concentratie van stof A(g) is. In dat geval geldt: s(A→B)>0. De reactie is niet actief als er geen stof A(g) is. In dat geval geldt: s(A→B)=0. Dit betekent dat het waardenbereik van s(A→B) twee waarden moeten hebben. Maak het bedoelde waardenbereik. Let op, de waarde Ø toevoegen, vergt een expliciete handeling.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| Het waardenbereik van s(A→B) heeft twee waarden, namelijk Ø en >Ø (een positief interval: ‘Plus’). |  |

### Stap 6 – Negatieve invloed *(Handleiding item 8)*

De **invloed** (I) staat aan het begin van de oorzaak-gevolg (causale) keten. Daar beginnen de veranderingen. In ons model is dat de reactie, weergegeven als de reactiesnelheid: s(A→B). De reactie heeft twee effecten: afname van de concentratie van stof A(g) en toename van de concentratie van stof B(g). Begin met de eerste: voeg de negatieve invloed van de reactie op stof A(g) toe aan het model.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| s(A→B) beïnvloed [A]. Daarom loopt de pijl van s(A→B) naar [A]. De invloed is negatief, daarom I-. |  |

### Stap 7 – Beginwaarden *(Handleiding item 5)*

Elke grootheid moet een **beginwaarde** hebben alvorens te kunnen simuleren.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| Er is een bepaalde concentratie van stof A(g) aanwezig. Daarom krijgt [A] de waarde ‘Plus’ (>0) toegekend. |  |
| s(A→B)is direct actief, daarom krijgt deze de waarde ‘Plus’ (>0) toegekend. |

### Stap 8 – Simulatie *(Handleiding item 6 & 7)*

Het model is nog niet af, maar het heeft nu een aantal ingrediënten en daarmee kan een **simulatie[[2]](#footnote-2)** worden uitgevoerd. Doe de simulatie en bestudeer het resultaat. Komt dit overeen met de gegevens hieronder? Indien dit niet het geval is, ga dan op zoek naar de verschillen, probeer deze te begrijpen en te verbeteren.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Simulatie ingrediënten** |
| Toestandsgraaf bestaat uit slechts één toestand (nr. 1). Toestand 1 is geselecteerd (de rode cirkel geeft dit aan) |  |
| In toestand 1, is s(A→B) actief, want: s(A→B)>0. Ook is er een bepaalde concentratie van stof A(g), want: [A]>0. Deze concentratie neemt af, immers: ∂[A]<0. De verandering van s(A→B) is onbekend, immers: ∂s(A→B)=? |  |

### Stap 9 – Terugkoppeling – Proportionaliteit *(Handleiding item 8 & 9)*

Zoals gezegd, het model is nog niet af. Wat nog ontbreekt, is de notie van **terugkoppeling**. Immers, zodra de reactie actief is, neemt de concentratie van stof A(g) af. Maar als concentratie van stof A(g) afneemt, dan wordt tegelijkertijd de reactie zelf ook minder actief. De reactiesnelheid is immers proportioneel met deze concentratie. Op het moment dat stof A(g) helemaal is omgezet, stopt de reactie zelfs.

Het idee van terugkoppeling kan worden vastgelegd met een **proportionaliteit** (P) die het effect van de **invloed** (I) als het ware tegenwerkt. Voeg in het model een proportionaliteit toe vanaf stof A(g) op de reactie s(A→B).

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| Veranderingen in [A] propageren naar veranderingen in s(A→B), daarom gaat de pijl van [A] naar s(A→B). En s(A→B) verandert in dezelfde richting als [A], daarom P+. |  |

### Stap 10 – Simulatie *(Handleiding item 6 & 7)*

Dit was een belangrijke toevoeging aan het model. Door de **simulatie** uit te voeren kunnen we het effect van de terugkoppeling bekijken. Komen de resultaten van jou model overeen met de gegevens hieronder? Indien dit niet het geval is, zoek dan de verschillen, probeer deze te begrijpen en te verbeteren.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Simulatie ingrediënten** |
| De toestandsgraaf heeft drie toestanden, namelijk 1, 2 en 3. Tezamen maken deze toestanden twee gedragspaden, namelijk [1,2] en [1,3]. Toestand 2 is geselecteerd. |  |
| In toestand 2 (welke is geselecteerd), is s(A→B) gestopt, immers: s(A→B)=0. Ook is er geen stof A(g), immers: [A]=0. Deze concentratie is stabiel, immers: ∂[A]=0. De verandering van s(A→B) is ook stabiel, immers: ∂s(A→B)=0. |  |

Vraag 1. Wat is het verschil tussen toestand 1 bij stap 10 en stap 8?

Zowel bij stap 8 als bij stap 10 begint de simulatie met één eerste toestand (toestand nr. 1). Bekijk de inhoud van deze toestanden (kijk voor stap 10 naar toestand 1 in je model en voor stap 8 naar het plaatje van toestand 1 eerder in dit document). Op precies welk aspect verschillen de gegevens van deze twee toestanden? Waarom is dit verschil er. Kun je het verschil verklaren?

Schrijf hier je antwoord op vraag 1…

Vraag 2. Wat is het verschil tussen toestand nr. 2 en 3 bij stap 10?

Na toestand 1 volgen er bij stap 10 twee nieuwe toestanden, namelijk nr. 2 en nr. 3. Bekijk de inhoud van deze toestanden in je model. Wat is precies het verschil tussen deze twee toestanden? Kun je dat verschil verklaren?

Schrijf hier je antwoord op vraag 2…

Vraag 3. Welke toestand is juist bij stap 10? Toestand nr. 2 of nr. 3?

Welke toestand is de juiste opvolger van toestand 1 bij stap 10? Is dat toestand 2 of 3? Leg uit waarom dat zo is.

Schrijf hier je antwoord op vraag 3…

### Stap 11 – Corresponderende waarden *(Handleiding item 11)*

Bij bestudering blijkt dat toestand 3 (zie stap 10) niet kan voorkomen in het echte systeem. Immers, de reactie stopt alleen als er geen stof A(g) meer is. Of anders gezegd, als er geen stof A(g) is, dan is er ook geen reactie. Blijkbaar mist er in het model nog relevante informatie over **waarden** voor bepaalde grootheden die perse samen moeten voorkomen. Met een **correspondentie** kan dergelijke informatie worden afgebeeld. Voeg daarom in het model een correspondentie toe tussen de 0-waarden van [A] en s(A→B).

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| De waarde [A]=0 correspondeert met de waarde s(A→B)=0. Dit wordt aangegeven door de waarde correspondentie: V. |  |

### Stap 12 – Simulatie *(Handleiding item 6 & 7)*

Doe opnieuw een **simulatie** en controleer de uitkomst. Komen de resultaten overeen met de gegevens hieronder? Indien dit niet het geval is, ga dan op zoek naar de verschillen, probeer deze te begrijpen en te verbeteren.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Simulatie ingrediënten** |
| De toestandsgraaf heeft twee toestanden, namelijk 1 en 2. Tezamen maken deze toestanden één gedragspad, namelijk [1,2]. |  |
| In toestand 2 (welke is geselecteerd), is de reactie A→B gestopt, immers: s(A→B)=0, en deze situatie is stabiel, immers: ∂s(A→B)=0. Ook is er geen stof A(g), immers: [A]=0, en dit verandert niet, immers: ∂[A]=0. |  |

### Stap 13 – Grootheid, afgeleide en waardenbereik – Stof B(g)

De derde belangrijke eigenschap (**grootheid**) van het vat is de concentratie van stof B(g): [B]. Deze stof is in het begin afwezig ([B]=0) en daarna aanwezig ([B]>0). De grootheid heeft dus twee **waarden** nodig in het **waardenbereik**. Voeg de grootheid en het bedoelde waardenbereik toe in het model. Vergeet daarbij niet om de grootheid ook een **beginwaarde** te geven.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| Het vat heeft ook de concentratie van stof B(g) als eigenschap.  Het waardenbereik van [B] heeft twee waarden, namelijk Ø en >Ø (een positief interval: ‘Plus’).  Aanvankelijk is er nog géén concentratie van stof B(g) in het vat, aangegeven door de waarde: [B]=0 |  |

### Stap 14 – Positieve invloed *(Handleiding item 8)*

Zoals eerder opgemerkt, de **invloed** (I) staat aan het begin van de oorzaak-gevolg (causale) keten, in ons model de reactie. Deze reactie vermindert niet alleen stof A(g), maar laat ook de concentratie van stof B(g) toenemen. Voeg een positieve invloed van de reactie op stof B(g) toe aan het model

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Model ingrediënten** |
| s(A→B)beïnvloed [B]. Daarom loopt de pijl van s(A→B) naar [B]. De invloed is positief, daarom I+. |  |

### Stap 15 – Simulatie *(Handleiding item 6 & 7)*

We kunnen opnieuw een **simulatie** doen. Komen de resultaten overeen met de gegevens hieronder? Indien dit niet het geval is, ga dan op zoek naar de verschillen, probeer deze te begrijpen en te verbeteren.

|  |  |
| --- | --- |
| **In woorden** | **Simulatie ingrediënten** |
| De toestandsgraaf heeft drie toestanden, namelijk 1, 2 en 3. Tezamen maken deze toestanden één gedragspad, namelijk [1,2,3]. |  |
| In toestand 3 (welke is geselecteerd), is de reactie A→B gestopt, immers: s(A→B)=0. Deze situatie is stabiel, immers: ∂s(A→B)=0. Ook is er geen stof A(g), immers: [A]=0, en dit verandert niet, immers: ∂[A]=0. Er is nu wel stof B(g), immers: [B]=Plus, en deze verandert niet, immers: ∂[B]=0. |  |

*Einde van deze opdracht*

1. Bij het creëren van een grootheid wordt het symbool voor de **verandering** (∂, de afgeleide) automatisch toegevoegd. [↑](#footnote-ref-1)
2. Let op, om een model te kunnen simuleren, moet je dat model eerst bewaren (opslaan). [↑](#footnote-ref-2)