

Άσκηση: Ε7 σελίδα: 55 (Βιβλίου)

Αρχικά, εφαρμόζουμε τα ισοζύγια μάζας για τα συστατικά A,B,Γ:

$$V \frac{d[A]}{dt} = -r_1 V - r_3 V \Rightarrow$$

$$V \frac{d[A]}{dt} = -k_1 [A] V - k_3 [A] V \Rightarrow$$

$$\frac{d[A]}{dt} = -[A](k_1 + k_3) \Rightarrow$$

$$\frac{d[A]}{[A]} = -(k_1 + k_3) dt \Rightarrow$$

$$\ln[A] = -(k_1 + k_3)t + C \Rightarrow$$

Από την αρχική συνθήκη έχουμε για $t=0 \rightarrow [A]=[A_0]$, $C=\ln[A_0]$

$$\ln[A] = -(k_1 + k_3)t + \ln [A_0] \Rightarrow$$

$$\ln[A] - \ln [A_0] = -(k_1 + k_3)t \Rightarrow$$

$$\ln \left(\frac{[A]}{[A_0]} \right) = -(k_1 + k_3)t \xrightarrow{e}$$

$$\boxed{[A] = [A_0] e^{-(k_1+k_3)t}}$$

Το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό B θα είναι:

$$V \frac{d[B]}{dt} = +r_1 V - r_2 V \Rightarrow$$

$$V \frac{d[B]}{dt} = +k_1 [A] V - k_2 [B] V \Rightarrow$$

$$\frac{d[B]}{dt} + k_2 [B] V = k_1 [A_0] e^{-(k_1+k_3)t} \Rightarrow$$

Σε αυτό το σημείο παρατηρούμε ότι η παραπάνω διαφορική εξίσωση είναι γραμμική, 1^{ης} τάξης μη ομογενής και έχει τη μορφή:

$$\frac{dy}{dx} + p(x)y = q(x)$$

Όπου $p(x), q(x)$ στην γενική περίπτωση μπορεί να είναι πολυώνυμα συναρτήσει της μεταβλητής x είτε απλά σταθερές (όπως συμβαίνει στην δική μας περίπτωση).

Η Λύση της συγκεκριμένης διαφορικής εξίσωσης είναι η εξής:

$$y(x) = e^{-\int p(x)dx} \cdot \left[\int (q(x) \cdot e^{\int p(x)dx}) dx + C \right]$$

Συνεπώς, παρατηρούμε ότι:

- $x=t$
- $y(x)=B(t)$
- $p(x)=k_2$
- $q(x)=k_1[A_0]e^{-(k_1+k_3)t}$

$$[B(t)] = e^{-\int k_2 dt} \cdot \left[\int (k_1[A_0]e^{-(k_1+k_3)t} \cdot e^{\int k_2 dt}) dt + C' \right] \Rightarrow$$

$$[B(t)] = e^{-k_2 t} \cdot \left[\int (k_1[A_0]e^{-(k_1+k_3)t} \cdot e^{k_2 t}) dt + C' \right] \Rightarrow$$

$$[B(t)] = e^{-k_2 t} \cdot \left[\int (k_1[A_0]e^{(k_2-k_1-k_3)t}) dt + C' \right] \Rightarrow$$

$$[B(t)] = e^{-k_2 t} \cdot \left(\frac{k_1[A_0]e^{(k_2-k_1-k_3)t}}{k_2 - k_1 - k_3} + C' \right) \Rightarrow$$

Από την αρχική συνθήκη έχουμε για $t=0 \rightarrow [B]=[B_0]=0$, $C=-k_1[A_0]/(k_2-k_1-k_3)$

$$\boxed{[B(t)] = \frac{k_1[A_0]}{k_2 - k_1 - k_3} (e^{-(k_1+k_3)t} - e^{-k_2 t})}$$

Το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό Γ θα προκύψει πολύ απλά αθροίζοντας κατά μέλη τις παρακάτω διαφορικές εξισώσεις:

$$\left\{ \begin{array}{l} V \frac{d[A]}{dt} = -k_1[A]V - k_3[A]V \Rightarrow \\ V \frac{d[B]}{dt} = +k_1[A]V - k_2[B]V \Rightarrow \\ V \frac{d[\Gamma]}{dt} = +k_1[A]V + k_2[B]V \Rightarrow \end{array} \right\}$$

$$V \frac{d[A]}{dt} + V \frac{d[B]}{dt} + V \frac{d[\Gamma]}{dt} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{d([A] + [B] + [\Gamma])}{dt} = 0 \Rightarrow$$

$$[A] + [B] + [\Gamma] = C'' \Rightarrow$$

Από την αρχική συνθήκη έχουμε για $t=0 \rightarrow [A]=[A_0]$, $[B]=0$, $[\Gamma]=0$

$$[A] + [B] + [\Gamma] = [A_0] \Rightarrow$$

$$[\Gamma] = [A_0] - [A] - [B] \Rightarrow$$

$$[\Gamma] = [A_0] - [A_0]e^{-(k_1+k_3)t} - \frac{k_1[A_0]}{k_2 - k_1 - k_3} (e^{-(k_1+k_3)t} - e^{-k_2t})$$

Για να προσδιορίσουμε το βέλτιστο χρόνο t ώστε να μεγιστοποιηθεί η συγκέντρωση του συστατικού B, αρκεί να υπολογίσουμε $\frac{d[B]}{dt} = 0$.

$$\frac{d[B]}{dt} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{d[\frac{k_1[A_0]}{k_2 - k_1 - k_3} (e^{-(k_1+k_3)t} - e^{-k_2t})]}{dt} = 0 \Rightarrow$$

$$-(k_1 + k_3)e^{-(k_1+k_3)t} + k_2e^{-k_2t} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{(k_1 + k_3)}{k_2} = e^{(-k_2+k_1+k_3)t} \Rightarrow$$

$$t = 8.12 \text{ min}$$