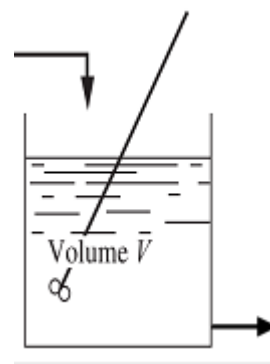


**BÀI TẬP MÔ PHỎNG LẦN 4 (PHƯƠNG TRÌNH VI PHÂN THƯỜNG ODE)****BÀI 1 (Slide 28 – 93280873-ODE)**

**Đề bài:** Dòng nhập liệu vào bình phản ứng với tốc độ  $F = 1 \text{ L/s}$  bằng với tốc độ dòng ra. Khối lượng riêng của chất lỏng là hằng số. Nồng độ của dòng nhập liệu là  $C_{Ai} = 10 \text{ mol/L}$ . Thể tích của bình là  $V = 10 \text{ L}$  và nồng độ ban đầu của A là  $10 \text{ mol/L}$ . Hãy biểu diễn nồng độ của A theo thời gian biết rằng nồng độ mol của A ở thời điểm ban đầu ( $t = 0$ ) là  $C_{A,t=0} = 1 \text{ mol/L}$ .

**Giải**

Cân bằng khối lượng cho cấu tử A như sau:  $V \frac{dC_A}{dt} = F_i C_{Ai} - F_o C_A$

Trong đó:  $C_A$  là nồng độ mol (mol/L) của A trong bình ở thời điểm  $t$  (s)

$F_i$ ,  $F_o$  lần lượt là tốc độ dòng nhập liệu đi vào bình phản ứng và tốc độ dòng ra khỏi bình phản ứng.

Với  $V = 10 \text{ L}$ ,  $F_o = F_i = 1 \text{ L/s}$ ,  $C_{Ai} = 10$  ta được phương trình vi phân:  $\frac{dC_A}{dt} = 1 - \frac{C_A}{10}$

**Giải phương trình vi phân này bằng giải tích:**

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{dt} &= 1 - \frac{C_A}{10} = \frac{10 - C_A}{10} \Rightarrow \frac{-10dC_A}{10 - C_A} = dt \Rightarrow \frac{d(10 - C_A)}{10 - C_A} = -\frac{1}{10} dt \\ \Rightarrow \int_{C_A(0)=1}^{C_A(t)} \frac{d(10 - C_A)}{10 - C_A} &= \int_0^t \left( -\frac{1}{10} \right) dt \Rightarrow \ln \frac{10 - C_A}{9} = \frac{-t}{10} \Rightarrow C_A = 10 - 9e^{-t/10} \end{aligned}$$

**Giải phương trình vi phân bằng phương pháp số (Runge Kutta Bậc 4)**

$$\frac{dC_A}{dt} = 1 - \frac{C_A}{10} = 1 - 0,1C_A \Rightarrow C'_A = f(t, C_A) = 1 - 0,1C_A$$

Quy trình thực hiện như sau:

$$t_{i+1} = t_i + h$$

$$C_{A,i+1} = C_{A,i} + h\Phi(t_i, C_{A,i})$$

$$\Phi(t_i, C_{A,i}) = \frac{K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4}{6}$$

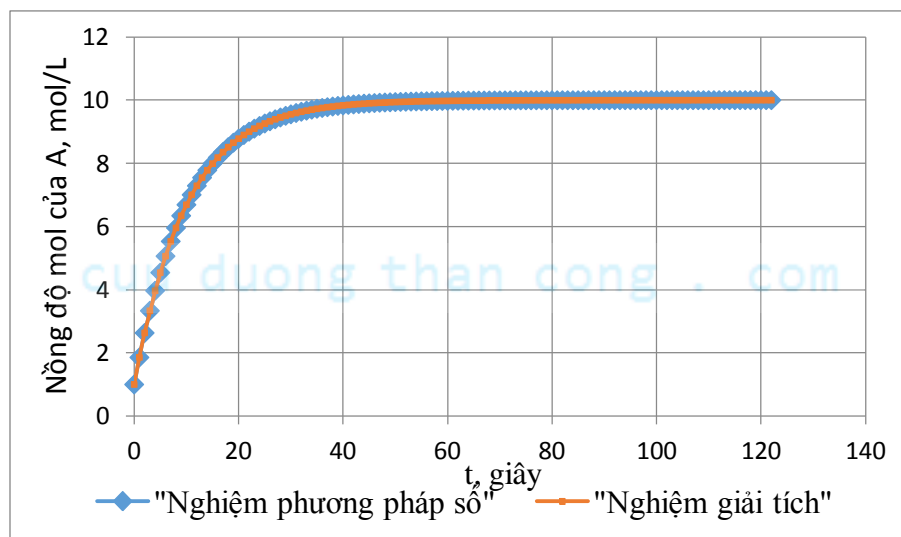
$$K_1 = f(t_i, C_{A,i}), \quad K_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, C_{A,i} + K_1 \frac{h}{2}\right)$$

$$K_3 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, C_{A,i} + K_2 \frac{h}{2}\right), \quad K_4 = f(t_i + h, C_{A,i} + K_3 h)$$

Từ đó ta lập và tính toán được kết quả như sau:

$h$	$t$	$C_{A,i}$	$C_{A,i+1}$	$\Phi(t_i, C_{A,i})$	$K_1$	$K_2$	$K_3$	$K_4$	$C_{A,i}$ (giải tích)
1	0	1.0000	1.85646	0.856463	0.9	0.855	0.85725	0.81428	1.0000
1	1	1.8565	2.63142	0.774959	0.81435	0.77364	0.77567	0.73679	1.8565
1	2	2.6314	3.33263	0.701212	0.73686	0.70001	0.70186	0.66667	2.6314
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
1	120	9.9999	9.99995	5.26E-06	5.5E-06	5.3E-06	5.3E-06	5E-06	9.9999
1	121	9.9999	9.99995	4.76E-06	5E-06	4.8E-06	4.8E-06	4.5E-06	9.9999
1	122	10.0000	9.99996	4.31E-06	4.5E-06	4.3E-06	4.3E-06	4.1E-06	10.0000

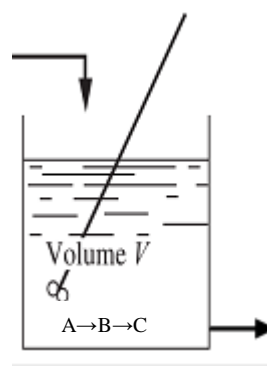
Nồng độ mol của A biểu diễn theo thời gian như sau:



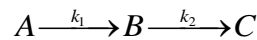
Nghiệm giải tích và phương pháp số (lấy bước nhảy 1 giây) là rất khớp với nhau.

**BÀI 2 (Slide 34-93280873-ODE)**

**Đề bài:** Trong bình khuấy trộn có phản ứng  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . Phản ứng  $A \rightarrow B$  có hằng số tốc độ phản ứng  $k_1 = 0,2 \text{ hr}^{-1}$  và phản ứng  $B \rightarrow C$  có hằng số tốc độ phản ứng  $k_2 = 0,1 \text{ hr}^{-1}$ . Ở thời điểm ban đầu ( $t = 0$ )  $C_{A0} = 1 \text{ mol/L}$  và  $C_B = C_C = 0 \text{ mol/L}$ . Hãy biểu diễn nồng độ của A, B, C theo thời gian.



**Giải:**



Nồng độ của cấu tử A, B, C biến đổi theo thời gian được biểu diễn qua hệ phương trình vi phân sau:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A = f_1(t, C_A, C_B) \\ \frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B = f_2(t, C_A, C_B) \\ C_C = C_{A0} + C_{B0} + C_{C0} - C_A - C_B \end{cases}$$

Quy trình giải hệ phương trình vi phân này theo phương pháp số:

$$t_{i+1} = t_i + h$$

$$C_{A,i+1} = C_{A,i} + h\Phi_A$$

$$\Phi_A = \frac{K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4}{6}$$

$$C_{A,i+1} = C_{A,i} + h\Phi_A$$

$$\Phi_B = \frac{L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4}{6}$$

$$K_1 = f_1(t_i, C_{A,i}, C_{B,i})$$

$$K_2 = f_1\left(t_i + \frac{h}{2}, C_{A,i} + K_1 \frac{h}{2}, C_{B,i} + L_1 \frac{h}{2}\right)$$

$$K_3 = f_1\left(t_i + \frac{h}{2}, C_{A,i} + K_2 \frac{h}{2}, C_{B,i} + L_2 \frac{h}{2}\right)$$

$$K_4 = f_1(t_i + h, C_{A,i} + K_3 h, C_{B,i} + L_3 h)$$

$$L_1 = f_2(t_i, C_{A,i}, C_{B,i})$$

$$L_2 = f_2\left(t_i + \frac{h}{2}, C_{A,i} + K_1 \frac{h}{2}, C_{B,i} + L_1 \frac{h}{2}\right)$$

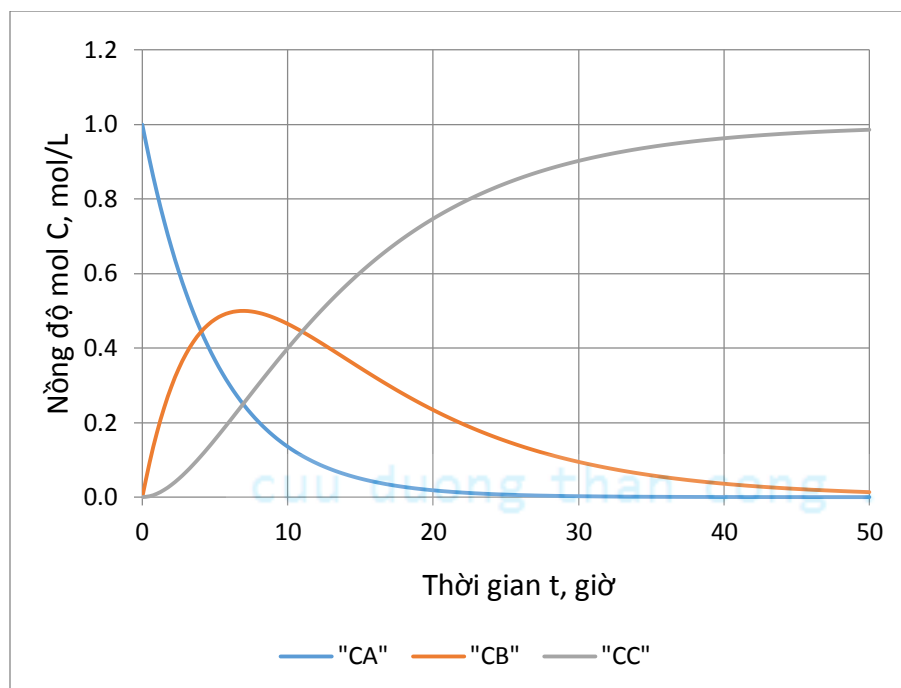
$$L_3 = f_2\left(t_i + \frac{h}{2}, C_{A,i} + K_2 \frac{h}{2}, C_{B,i} + L_2 \frac{h}{2}\right)$$

$$L_4 = f_2(t_i + h, C_{A,i} + K_3 h, C_{B,i} + L_3 h)$$

Từ đó ta lập và tính toán được kết quả như sau:

$h$	$t$	$C_{A,i}$	$C_{A,i+1}$	$\Phi_A$	$K_1$	$K_2$	$K_3$	$K_4$	
0.5	0	1.0000	0.9048	-0.1903	-0.2000	-0.1900	-0.1905	-0.1810	
0.5	0.5	0.9048	0.8187	-0.1722	-0.1810	-0.1719	-0.1724	-0.1637	
0.5	1	0.8187	0.7408	-0.1558	-0.1637	-0.1556	-0.1560	-0.1481	
...	...	...	...	...	...	...	...	...	
0.5	49	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0.5	49.5	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0.5	50	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
$h$	$t$	$C_{B,i}$	$C_{B,i+1}$	$\Phi_B$	$L_1$	$L_2$	$L_3$	$L_4$	$C_{C,i}$
0.5	0	0	0.092784	0.185568	0.2	0.185	0.185875	0.171656	0
0.5	0.5	0.092784	0.172213	0.158858	0.171689	0.158349	0.159134	0.146495	0.002379
0.5	1	0.172213	0.239779	0.135132	0.146525	0.134674	0.13538	0.124159	0.009056
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
0.5	49	0.014782	0.014066	-0.00143	-0.00147	-0.00143	-0.00143	-0.0014	0.985162
0.5	49.5	0.014066	0.013385	-0.00136	-0.0014	-0.00136	-0.00136	-0.00133	0.985883
0.5	50	0.013385	0.012737	-0.0013	-0.00133	-0.0013	-0.0013	-0.00127	0.98657

Nồng độ mol của A, B, C biểu diễn theo thời gian như sau:



Dựa vào đồ thị cho thấy nồng độ mol của A giảm dần theo thời gian phù hợp với lý thuyết vì A phản ứng sinh ra B nên lượng chất sẽ giảm dần theo thời gian, nồng độ A sẽ tiến dần về 0. Còn

đối với chất B thì lượng chất được tạo thành từ A ( $k_1 = 0,2 \text{ hr}^{-1}$ ) lớn hơn tốc độ phản ứng sinh ra C ( $k_2 = 0,1 \text{ hr}^{-1}$ ) nên lúc đầu khi lượng chất A còn nhiều nên lượng chất B sẽ tăng lên và đến khi đến đỉnh điểm cân bằng giữa lượng chất tạo thành và mất đi. Sau đó lượng chất sẽ giảm dần theo thời gian vì lúc này lượng chất phản ứng sinh ra C lớn hơn lượng chất tạo thành từ A. Nồng độ B sẽ tiến dần về 0. Đối với chất C lượng chất lúc đầu tăng chậm sau đó tăng nhanh, nồng độ C sẽ tiến dần về 1 mol/L khi đó A đã hoàn toàn chuyển thành C, trong bình chỉ còn C.

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com