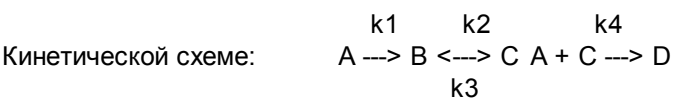


**Рассчитать стационарные концентрации продуктов в реакции, протекающей по схеме  $A \xrightarrow{k_1} B \xrightleftharpoons[k_3]{k_2} C, A + C \xrightarrow{k_4} D$**

**$\rightarrow k_4$  D в зависимости от  $k_4$  и  $[B]_0$ . Построить 2D графики решения.**



соответствует следующая система дифференциальных уравнений (СДУ):

$$\begin{aligned} d[A]/dt &= -k_1[A] - k_4[A][C] \\ d[B]/dt &= k_1[A] - k_2[B] + k_3[C] \\ d[C]/dt &= k_2[B] - k_3[C] - k_4[A][C] \\ d[D]/dt &= k_4[A][C] \end{aligned}$$

Зададим значения всех констант скоростей, кроме  $k_4$ :  $k_1 := 1$   $k_2 := 2$   $k_3 := 3$

Зададим функцию, зависящую от  $k_4$ , которая определяет вектор правых частей СДУ:

$$D(k_4, t, C) := \begin{pmatrix} -k_1 \cdot C_0 - k_4 \cdot C_0 \cdot C_2 \\ k_1 \cdot C_0 - k_2 \cdot C_1 + k_3 \cdot C_2 \\ k_2 \cdot C_1 - k_3 \cdot C_2 - k_4 \cdot C_0 \cdot C_2 \\ k_4 \cdot C_0 \cdot C_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} C_0 - [A] \\ C_1 - [B] \\ C_2 - [C] \\ C_3 - [D] \end{matrix}$$

$t_0 := 0$  - начальное время  $t_1 := 20$  - конечное время, д.б. заведомо больше времени протекания реакции

$N_p := 2000$  - число точек решения в интервале  $(t_0; t_1)$

Зададим функцию, которая возвращает матрицу решения в зависимости от  $k_4$  и  $[B]_0$ :

$$S(k_4, CB_0) := Rkadapt \left( \begin{pmatrix} 1 \\ CB_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, t_0, t_1, N_p, D(k_4) \right)$$

Зададим диапазон значений  $k_4$  and  $[B]_0$ : для которого мы хотим получить стационарные концентрации продуктов:

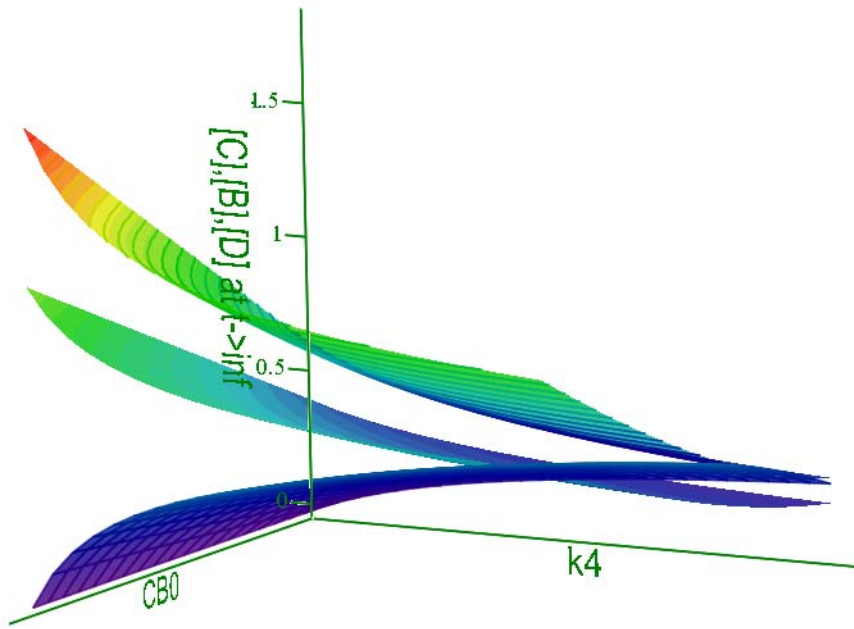
$$N := 25 \quad M := 19 \quad i := 0..N \quad j := 0..M \quad k_{4i} := \frac{5}{N} \cdot i \quad CB_{0j} := \frac{2}{M} \cdot j$$

Матрица  $(N \times M)$  матриц решений  $((N_p+1) \times 5)$  при различных значениях  $k_4$  и  $[B]_0$  рассчитывается следующим образом:

$$sol_{i,j} := S(k_{4i}, CB_{0j})$$

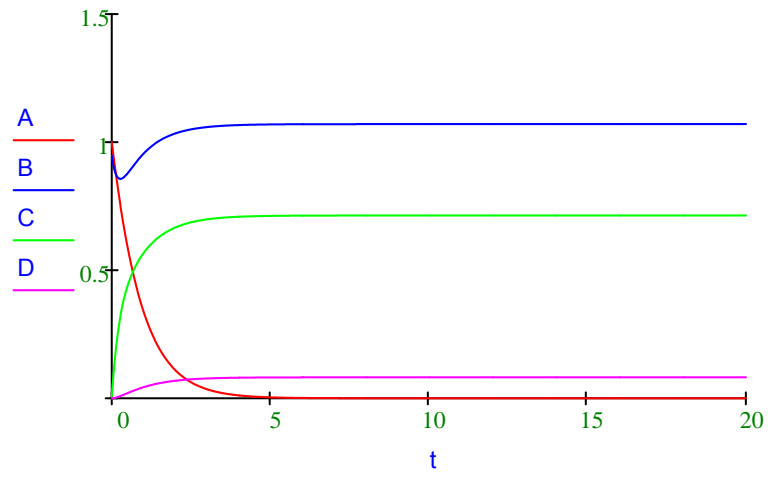
Теперь остается построить 2D графики стационарных концентрации продуктов B, C и D в зависимости от  $k_4$  и  $[B]_0$ :

$$endB_{i,j} := [(sol_{i,j})^{(2)}]_{N_p} \quad endC_{i,j} := [(sol_{i,j})^{(3)}]_{N_p} \quad endD_{i,j} := [(sol_{i,j})^{(4)}]_{N_p} \quad I := 1 \quad J := 9 \quad \text{Частное решение при } k_4 = k_{4I} = 0.2 \text{ и } [B]_0 = CB_{0J} = 0.947 :$$



$$t := (\text{sol}_l, J)^{\langle 0 \rangle} \quad \underline{\underline{A}} := (\text{sol}_l, J)^{\langle 1 \rangle} \quad B := (\text{sol}_l, J)^{\langle 2 \rangle} \quad \underline{\underline{C}} := (\text{sol}_l, J)^{\langle 3 \rangle} \quad \underline{\underline{D}} := (\text{sol}_l, J)^{\langle 4 \rangle}$$

$$\text{Bend} := [(\text{sol}_l, J)^{\langle 2 \rangle}]_{Np} = 1.07 \quad \text{Cend} := [(\text{sol}_l, J)^{\langle 3 \rangle}]_{Np} = 0.714 \quad \text{Dend} := [(\text{sol}_l, J)^{\langle 4 \rangle}]_{Np} = 0.082$$



endB , endC , endD

k4-Axis:

from  $k4_0 = 0$  to  
 $k4_N = 5$

CB0-Axis:

from  $CB0_0 = 0$  to  
 $CB0_M = 2$