$$\frac{V(dn_d / dt)}{V(dn_a / dt)} = \frac{k_2 n_c n_b - k_3 n_d n_b}{-k_1 n_a n_b}$$

$$\frac{dn_d}{dn_a} = \frac{k_3}{k_1}\frac{n_d}{n_a} - \frac{k_2}{k_1}\frac{n_c}{n_a}$$

elde edilir.

$(k_1/k_2) = 8$ ve $(k_2/k_3) = 30 \Rightarrow (k_1/k_3) = 240$ elde edilir.

$$\frac{dn_d}{dn_a} = \frac{n_d}{240 n_a} - \frac{n_c}{8 n_a} \tag{8}$$

(7) eşitliği (8)'de yerine yazılırsa;

$$\frac{dn_d}{dn_a} = \frac{n_d}{240 n_a} - \frac{(n_a^{1/8} - n_a)}{7 n_a} \tag{9}$$

elde edilir. (9) denklemi **birinci mertebe lineer bir diferansiyel denklemdir.** Çözümü,

$$n_d = \frac{240}{48517}\,(29\, n_a - 239\, n_a^{1/8} + 210\, n_a^{1/240}) \tag{10}$$

şeklindedir.

Toplam kütle denkliği:

$$n_a + n_c + n_d + n_e = 1 \tag{11}$$

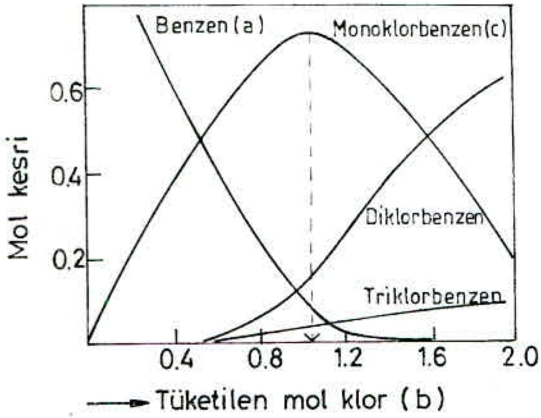
I-III tepkimelerde stokiyometrik katsayılar 1 olduğundan, toplam mol sayısı 1'e eşittir. Tüketilen klor miktarı, oluşan HCl miktarına eşit olduğundan toplam kütle denkliği üzerine etkisi yoktur.

Tüketilen toplam klor miktarı:

$$n_b = n_c + 2n_d + 3n_e \tag{12}$$

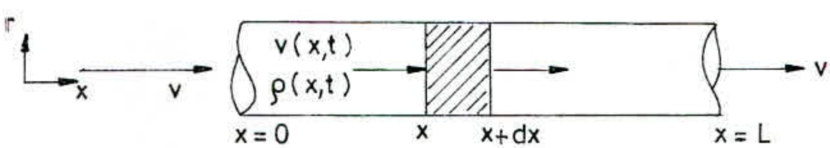
1 mol C_6H_5Cl için 1 mol Cl_2
1 mol $C_6H_4Cl_2$ için 2 mol Cl_2
1 mol $C_6H_3Cl_3$ için 3 mol Cl_2

n_a'nın değişik değerleri için, n_e (11), n_b (12), n_c (7), n_d (10) eşitliklerinden hesaplanabilir. Grafikten görüleceği gibi maksimum monoklorbenzen üretmek için gerekli klor miktarı 1 moldür.



1.2. Kısmi Türevli Diferansiyel Denklemlerle İlgili Model Oluşturma

Örnek 1.15 : Sabit A kesitli L uzunluğundaki bir borudan akan akışkanın özelikleri (hız, yoğunluk, vb.) eksenel yönde değişmektedir. Bu sistem için geçerli eşitliği çıkarınız.



Çözüm :

Akışkanın hızı, yoğunluğu x yönünde değişir. Akış türbülent olduğundan r yönünde (radyal) değişim yoktur. Bu sistemde dx diferansiyel uzunluğunda seçilecek diferansiyel hacim elemanı için (mikroskopik model) **Kütlenin Korunumu Yasası** uygulanırsa;

$$\begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sisteme}\\ \text{Giriş Hızı}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sistemden}\\ \text{Çıkış Hızı}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sistemde}\\ \text{Birikim Hızı}\end{bmatrix}$$

x konumunda hacim elemanına kütlenin giriş hızı : $vA\rho\,|_x$

x+dx konumunda hacim elemanına kütlenin çıkış hızı: $vA\rho\,|_{x+dx}$

Taylor açılımına göre;

$$vA\rho\,|_{x+dx} = vA\rho\,|_x + dx\,\frac{\partial}{\partial x}(vA\rho)$$

Hacim elemanında birikim hızı : $\dfrac{\partial(Adx\rho)}{\partial t}$

$$vA\rho\,|_x - \left[\, vA\rho\,|_x + \frac{\partial(vA\rho)}{\partial x}\,dx \,\right] = \frac{\partial(Adx\rho)}{\partial t} \qquad (1)$$

Burada A sabittir. Eşitlik düzenlenir ve her iki taraf Adx ile bölürse;

$$-\frac{\partial(v\rho)}{\partial x} = \frac{\partial\rho}{\partial t}$$

$$\frac{\partial(v\rho)}{\partial x} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0 \qquad (2)$$

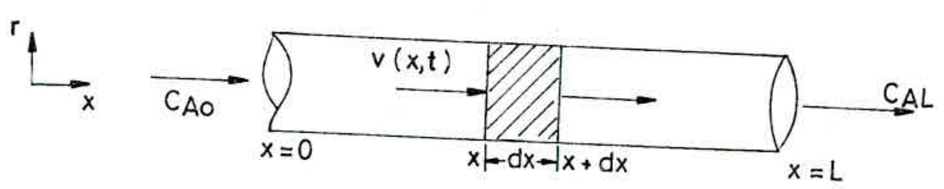
Kısmi Türevli Diferansiyel Denklemi bulunur.

Örnek 1.16 : L uzunluğunda, D çapındaki silindirik bir tepkime kabında birinci mertebe

$$A \xrightarrow{k} B$$

tepkimesi olmaktadır. Piston akış olduğunu varsayarak, sistemi modelleyen eşitliği çıkarınız.

Çözüm :



$C_A = C_A(x,t)$

Sınır koşulu 1 : $x = 0$; $C_A(0,t) = C_{A0}(t)$
Sınır koşulu 2 : $x = L$; $C_A(L,t) = C_{AL}(t)$

Eksenel yönde v, ρ , C_A değerleri zamanla değişmektedir. dx kalınlığındaki diferansiyel hacim elemanına kütlenin korunumu yasası uygulanırsa;

[Kütlenin Giriş Hızı] = [Moleküler Yayınmayla] + [Yığın Hareketiyle]

Giriş hızı : $(N_A A + vAC_A)|_x$

[Kütlenin Çıkış Hızı] =[Moleküler Yayınmayla] + [Yığın Hareketiyle]

Çıkış hızı : $(N_A A + vAC_A)|_{x+dx}$

$$= (N_A A + vAC_A)|_x + \left[\frac{\partial}{\partial x}(N_A A + vAC_A)\right]dx$$

Üretim hızı : $-kC_A A dx$

Birkim hızı : $\frac{\partial}{\partial t}(AC_A dx)$

A bileşeni için kütle denkliği yazılırsa;

$$(N_A A + vAC_A)|_x - \left[(N_A A + vAC_A)|_x + \frac{\partial}{\partial x}(N_A A + vAC_A)\,dx\right] - kC_A A dx = \frac{\partial}{\partial t}(AC_A dx) \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(N_A A + vAC_A)\,dx - kC_A A dx = \frac{\partial}{\partial t}(AC_A dx)$$

Eşitliğin tüm terimleri Adx ile bölünürse;

$$-\frac{\partial}{\partial x}(N_A + vC_A)\,dx - kC_A dx = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (2)$$

(2) eşitliğinde N_A yerine Fick yasasından: $N_A = -D_A \frac{\partial C_A}{\partial x}$

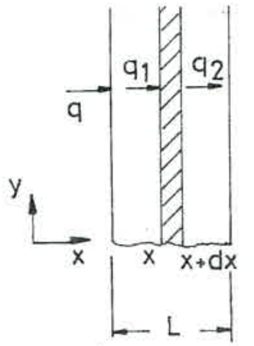
yazıldığında,

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(-D_A \frac{\partial C_A}{\partial x} + vC_A\right) - kC_A = \frac{\partial C_A}{\partial t}$$

$$D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} - \frac{\partial (v C_A)}{\partial x} - k C_A = \frac{\partial C_A}{\partial t} \qquad (3)$$

Kısmi Türevli Diferansiyel denklemi elde edilir.

Örnek 1.17 :Aşağıdaki şekilde L kalınlığında sonsuz bir levha görülmektedir. Başlangıçta, bu levhanın her noktasında sıcaklık aynı olup, bir yüzeyi aniden sıcak bir yüzeyle temas ettirildiğinde; sıcaklığın değişimini veren eşitliği çıkarınız. Levhanın fiziksel özelikleri (ρ, C_p, k) sabit alınabilir.



Çözüm :

dx kalınlığındaki levhada t anında **Enerjinin Korunumu Yasasına** göre enerji denkliği yazılırsa;

$$\begin{bmatrix}\text{Enerjinin}\\ \text{Giriş Hızı}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Enerjinin}\\ \text{Çıkış Hızı}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\text{Enerjinin}\\ \text{Üretim Hızı}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Enerjinin}\\ \text{Birikim Hızı}\end{bmatrix}$$

$$q_1 \big|_x - q_2 \big|_{x+dx} = \frac{dQ}{dt} \qquad (1)$$

Fourier Yasasından,

$$-kA\frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_x - \left(-kA\frac{\partial T}{\partial x}\right)\bigg|_{x+dx} = \frac{\partial(\rho C_p A dx T)}{\partial t} \qquad (2)$$

$$-kA\frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_x - \left[-kA\frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_x + \frac{\partial}{\partial x}\left(-kA\frac{\partial T}{\partial x}\right)dx\right] = (\rho C_p A dx)\frac{\partial T}{\partial t}$$

$$kAdx\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = (\rho C_p A dx)\frac{\partial T}{\partial t}$$

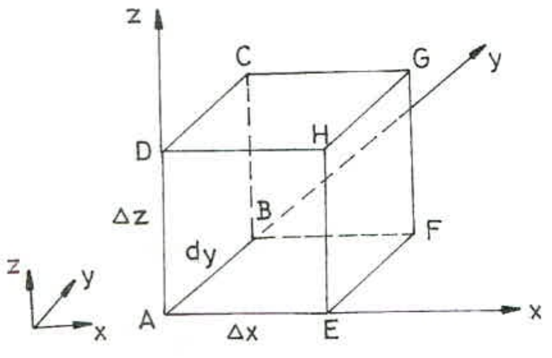
$$\frac{k}{\rho C_p}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

$$\alpha\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

Kısmi Türevli Diferansiyel Denklemi elde edilir.

Örnek 1.18 :Küp şeklindeki metal bir blok içinde her üç yönde de sıcaklık değişimi olmaktadır. Ancak, x = 0' daki yüzey yalıtılmıştır. Sistemi kontrol eden eşitliği çıkarınız.

Çözüm :



Metal blok içinde boyutları dx, dy, dz olan hacim elemanı alınsın.

Hacim Elemanında Enerji Denkliği yazılırsa;

$$\begin{bmatrix}\text{Enerjinin}\\ \text{Giriş Hızı}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Enerjinin}\\ \text{Çıkış Hızı}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\text{Enerjinin}\\ \text{Üretim Hızı}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Enerjinin}\\ \text{Birikim Hızı}\end{bmatrix}$$