

今まで学習した全ての知識を活用して、実際の化学工学の問題を解決してみましょう。

ベンゼン(A)–トルエン(B)系の圧力 $P=101.3\text{kPa}$ で
 液相組成 $x_A=0.4$ モル分率のときの平衡温度 T と気相組成 y を Newton 法で求めよ。
 初期値やしきい値は任意に与えよ。

ただし、活量係数は1（理想系を仮定）する。

Raoult の法則

$$p_A = P_A^o \cdot x_A$$

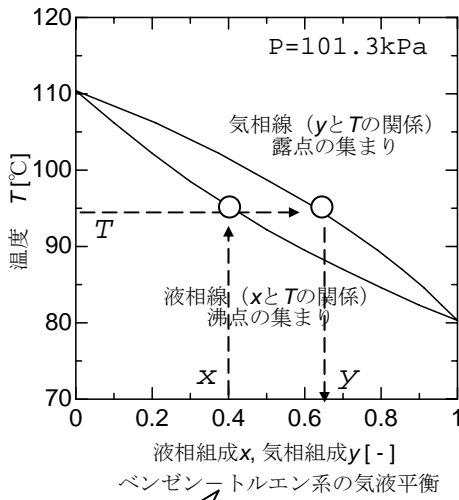
$$p_B = P_B^o \cdot x_B = P_B^o \cdot (1 - x_A)$$

二成分系なので、 x_A+x_B は常に 1.0

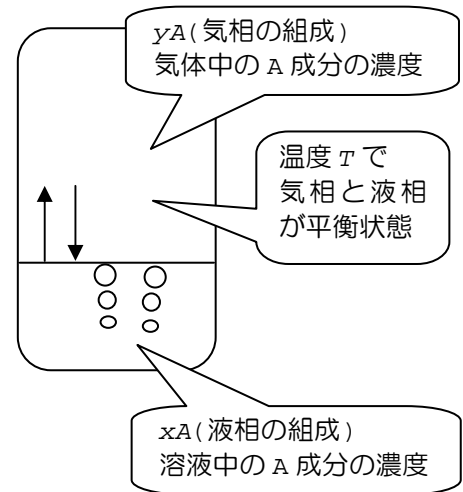
飽和蒸気圧

$$\ln P_A^o = 15.33 - 3785/T$$

$$\ln P_B^o = 15.68 - 4247/T$$



x_A (液体の組成) を入力して沸点を求める問題＝沸点計算



平衡状態であれば、
(全圧 P) = (A 成分の分圧 p_A) + (B 成分の分圧 p_B)
 p_A も p_B も組成が判っていれば温度 T のみの関数

よって

(全圧 P) - (A 成分の分圧 p_A) - (B 成分の分圧 p_B) を関数として
この関数を 0 にする温度を求める。

$$\begin{aligned} f(T) &= P - p_A - p_B \\ &= P - P_A^0 \cdot x_A - P_B^0 \cdot x_B \\ &= P - P_A^0 \cdot x_A - P_B^0 \cdot (1 - x_A) \\ &= P - \exp(15.33 - 3785/T) \cdot x_A - \exp(15.68 - 4247/T) \cdot (1 - x_A) \end{aligned}$$

なる式を考えれば、 $f(T)$ は温度 T のみの関数となり、 $f(T)=0$ となる T が判れば、それが平衡温度。

試験前の前の演習問題

1. ベンゼンの沸点が 80.19°C ($x_A=1.0$ の時)、トルエンの沸点が 110.7°C ($x_A=0.0$) の時、気液平衡データを示せ。(x_A を変化させて Fig.1 を検証せよ。)
2. データ x, y, z に数値を読み込み、大きい順番にその数値を出力するプログラム。
“どうやって順番をつけますか?”