

1 Simulation について次の問に答えよ。

- (1) Simulation とは何かを、次のキーワードを使って 200 字程度で説明せよ。  
 キーワードには下線を引くこと。 キーワード：システム、モデル化、変数
- (2) Simulation の具体例を、その実施手順とともに記述せよ。
- (3) 「分布定数系」と「集中定数系」をそれぞれ説明し、その違いを明記せよ。

2 メタノール(A) - 水(B)系の圧力  $P=101.3\text{kPa}$  で、非理想系の気液平衡計算を行いたい。

次の問に答えよ。メタノールの沸点は  $337.7\text{K}$ 、水の沸点は  $373.2\text{K}$  とする。

- (1) この問題を解くための全ての「方程式」を定義せよ。
- (2) 「構造行列」を定義せよ。
- (3) この方程式系の解き出し方を示せ。
- (4) 活量係数  $\gamma_A$ 、 $\gamma_B$  と飽和蒸気圧がそれぞれ次式で与えられるとき、温度  $T=350\text{K}$  での液相  $x_A$  と気相  $y_A$  の組成を実際に計算せよ。

$$\ln \gamma_A = (0.8517 - 0.7738 \cdot x_A) \cdot (1 - x_A)^2 \qquad \ln P_A^0 = 17.5977 - 4383.0/T$$

$$\ln \gamma_B = (0.4648 + 0.7738 \cdot (1 - x_A)) \cdot x_A^2 \qquad \ln P_B^0 = 18.1621 - 5054.0/T$$

3 常微分方程式の数値解法について次の問に答えよ。

- (1) 初期条件が  $x = x_0$ 、 $y = y_0$  であるとき、 $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$  を数値的に求める手法を 1 つ挙げて

その手順を説明せよ。

- (2) 次の微分方程式を数値的に解き、厳密解と比較せよ。

$$\frac{dy}{dx} = e^{-x} - y \qquad \text{ただし、} 0 \leq x \leq 0.5 \text{ の範囲内で } x = 0.0 \text{ のとき } y = 0.0 \text{ とする。}$$

また、きざみ幅は 0.1 とせよ。

4  $A+B \rightarrow R$  の液相反応を等温の回分反応装置で進行させる。成分 A の反応率  $x_A=0.9$  を得るのに必要な時間  $t$  を求めたい。原料組成は  $C_{A0}=2.0\text{mol/l}$ 、 $C_{B0}=6.0\text{mol/l}$ 、 $C_{R0}=0.0$  で、この温度での反応速度は

$$-r_A = k \cdot C_A^{0.5} \cdot C_B^{1.5} \quad [\text{mol}/(\text{l} \cdot \text{min})] \qquad k = 6.15 \times 10^{-3} \quad \text{とする。次の問に答えよ。}$$

- (1) 反応率  $x_A$  の経時変化を示す微分方程式を定義せよ。
- (2)  $x_A$  の経時変化について、その概略を示せ。
- (3) 微分方程式を解き、 $x_A=0.9$  を得るのに必要な時間  $t$  を求めよ。

----- キリトリ -----

「化学プロセス数学」講義期末アンケート (5段階で評価してください)

- |                        |          |   |   |   |   |   |       |
|------------------------|----------|---|---|---|---|---|-------|
| (1) 授業の難易度はどの程度でしたか?   | 難しかった    | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 易しかった |
| (2) 演習・例題の解説は理解できましたか? | 理解できなかった | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 理解できた |
| (3) 講義のスピードはどうでしたか?    | 早かった     | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 遅かった  |
- (4) この講義の後半では Fortran を使って、実際の Simulation を行いました。感想をお聞かせ下さい。

(5) 「化学プロセス数学」について、講義の感想など、自由な意見を書いてください。