

以下の問いに答えよ。必要であればプログラムを記述し解答せよ。

1 メタノール(A)–水(B)系の圧力  $P=101.3\text{kPa}$  で、露点計算を行いたい。次の間に答えよ。

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」と「構造行列」を定義せよ。
- (2) 露点計算を行うための方程式系の解き出し方を一つ示せ。
- (3) 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、気相組成  $y_A=0.25$  と  $y_A=0.75$  で露点、およびそれぞれの気相に平衡な液相組成を、実際に計算せよ。

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

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

2 「モデル化」について次の間に答えよ。

- (1) 化学工学では数式を使ったモデル化が行われる。モデル化とは何かを、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。Simulation、パラメータ(変数)
- (2) 「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。
- (3) 化学工学の分野で、なぜ「モデル化」が重要なのかを述べよ。

3 常微分方程式の数値解法について次の間に答えよ。

- (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の1つに

修正オイラー法がある。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。(手法は問わない。)

$$\frac{dy}{dx} = x + y \qquad \text{ただし、} 0 \leq x \leq 1.0 \text{ の範囲内で } x = 0.0 \text{ のとき } y = 0.0 \text{ とする。}$$

また、きざみ幅は  $0.2$  とせよ。

4  $A+B \rightarrow R$  の定容系として進行する液相反応の速度が、ある温度で、

$$r = k \cdot C_A^{0.5} \cdot C_B^{1.5} \quad [\text{kmol}/(\text{m}^3 \cdot \text{min})] \quad k = 7.45 \times 10^{-3} \quad \text{と与えられる。}$$

いま、 $C_{A0}=2.0 \text{ kmol}/\text{m}^3$ 、 $C_{B0}=5.0 \text{ kmol}/\text{m}^3$ 、 $C_{R0}=0.0$  を含む原料を用いて、この反応を回分操作で進行させる。このとき、成分Aの反応率  $x_A=0.8$  を得るのに必要な時間  $\theta$  を求めたい。次の間に答えよ。

- (1) 反応率  $x_A$  の経時変化を示す微分方程式を、 $x_A$  の関数として定義せよ。
- (2)  $x_A$  の経時変化の概略を示せ。
- (3) 微分方程式を実際に解き、 $x_A=0.8$  を得るのに必要な反応時間  $\theta$  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。                    |          |   |   |   |   |   |       |