

**現象をモデル化（微分方程式化）は、まず物質収支式から。
物質収支式には「蓄積項」を考慮すること。**

前回の答え合わせから。

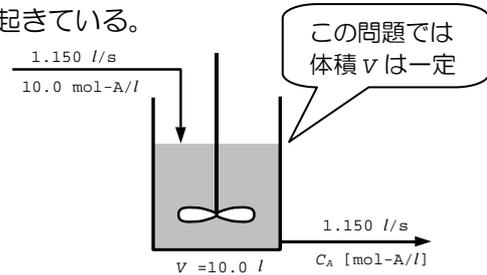
液相反応 (A→B) が完全混合型の反応装置 (10.0l) で起きている。

プロセスフローは次の通り

タンクにあらかじめ 2.00 mol-A/l の濃度の溶液が

10.0 l 仕込んであるとき (t=0 で C_A=2.00)、

溶液濃度 C_A の経時変化 (150sec まで) を求めよ。



A→B 反応速度=0.0050·C_A mol-A/(l·s)

物質収支式

$$\frac{d(V \cdot C_A)}{dt} = (1.150 \cdot 10.0) - (1.150 \cdot C_A) + (0) - (0.0050 \cdot C_A \cdot V)$$

蓄積項 = 入力項 - 出力項 + 生成項 - 消滅項

ここで V は 10.0 で一定

$$V \frac{dC_A}{dt} = (1.150 \cdot 10.0) - (1.150 \cdot C_A) + (0) - (0.0050 \cdot C_A \cdot V)$$

もちろん A 成分について考える

$$\frac{dC_A}{dt} = (1.150) - (0.1150 \cdot C_A) - (0.0050 \cdot C_A) = (1.150 - 0.120 \cdot C_A)$$

回分反応器問題

オイラー法の応用その1

2010-1-00 Takiyama

#include <stdio.h>

#include <math.h>

int main(void){

double h;

double t, CA;

double t0, CA0;

int i;

i=0;

t0=0.0;

CA0=2.0;

変数の初期化
初期値を間違えると×

printf("Please Input H=");

scanf("%lf", &h);

H は計算時間の刻み幅

printf(" I, t, V¥n");

t=t0;

CA=CA0;

Euler 法での
初期値入力

LABEL:

printf(" %d, %f, %f¥n", i, t, CA);

i=i+1;

t=t+h;

CA=CA+h*(1.150-0.120*CA);

if (t < 150)

{

goto LABEL;

}

ここが Euler 法
C_{A(i+1)} = C_{A(i)} + h · f(C_{A(i)})

return(0);

}

対象の微分方程式は C_A のみの関数

$$\frac{dC_A}{dt} = f(C_A)$$

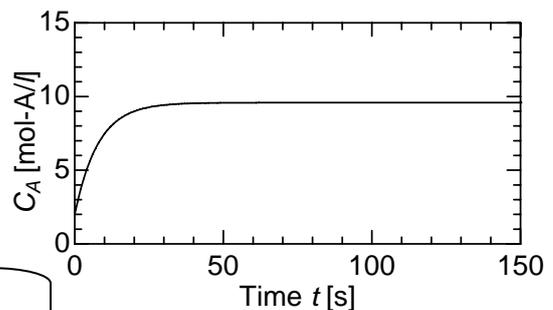
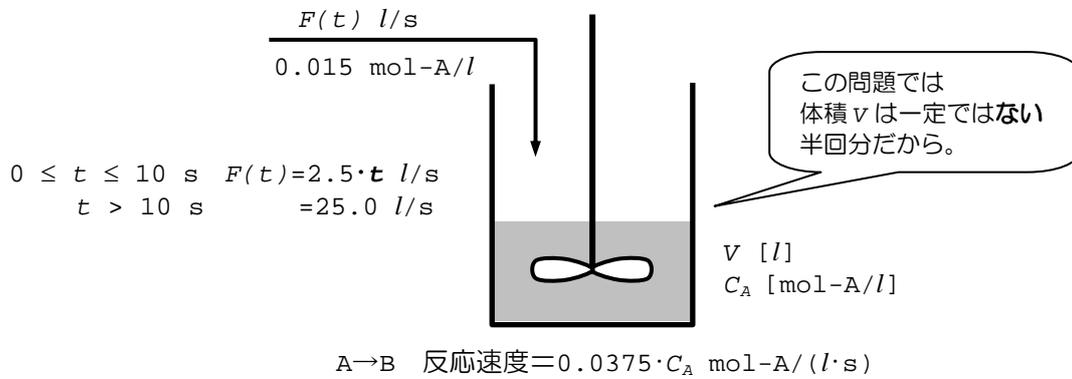


Fig.A 濃度の経時変化

◆□◆ モデル化のスペシャリストを目指すための試練その2 ◆□◆

次に示す半回分反応装置がある。溶液容積 v と濃度 c_A の経時変化を求めよ。
 ただし、入力流量は時間で変化し、はじめの10秒は $2.5 \times t$ l/s, 10秒以降は 25.0 l/s の一定量とする。初期条件は $t=0$ で $v=75$ l とし、求めるのは $t=60$ sec までとする。



ヒント：①この問題で v は一定ではない。
 ②微分方程式は1つとは限らない。(流量と濃度)

求める微分方程式は $\frac{dV}{dt}$ と $\frac{dC_A}{dt}$ の2つ。

これで、モデル化を含めた微分方程式の数値解析は免許皆伝！！