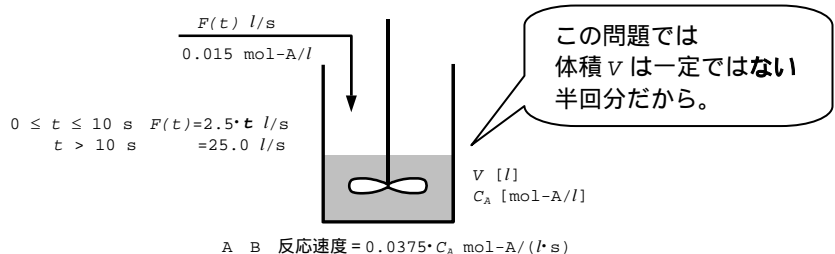


モデル化を含めた微分方程式の数値解析の最終章 一歩手前

前回の答え合わせから。

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。



物質収支式

$$\frac{d(V \cdot C_A)}{dt} = (0.015 \cdot F) - (0) + (0) - (0.0375 \cdot C_A \cdot V)$$

この問題で V は一定ではない。

$$V \frac{dC_A}{dt} + C_A \frac{dV}{dt} = (0.015 \cdot F) - (0.0375 \cdot C_A \cdot V)$$

ここで F と $\frac{dV}{dt}$ の関係をどう考えるか。 体積の増加量=流量なので $F = \frac{dV}{dt}$

$$V \frac{dC_A}{dt} = -C_A \frac{dV}{dt} + (0.015 \cdot F) - (0.0375 \cdot C_A \cdot V)$$

$$V \frac{dC_A}{dt} = -C_A \cdot F + (0.015 \cdot F) - (0.0375 \cdot C_A \cdot V)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = F \cdot (-C_A + 0.015) / V - (0.0375 \cdot C_A)$$

10[s]まで
それ以降は

$F = 2.5 \times t$
 $F = 25$

10[s]まで
それ以降は

$dV/dt = F = 2.5 \times t$
 $dv/dt = F = 25$

```

/*****
半回分反応器問題
オイラー法の応用
                2010-1-00   Takiyama
*****/
#include <stdio.h>
#include <math.h>

int main(void){
    double h;
    double t, V, CA;
    double t0, V0, CA0;
    int i;

    i=0;
    t0=0.0;
    V0=75.0;
    CA0=0.0;

    printf("Please Input H=");
    scanf("%lf", &h);

    printf(" I,      t,      V,      CA¥n");

    t=t0;
    V=V0;
    CA=CA0;
    
```

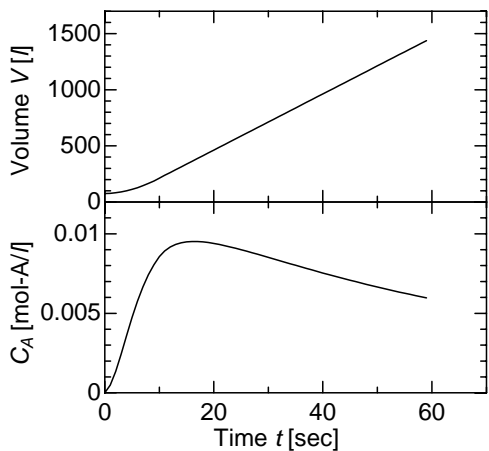


Fig.A 半回分反応装置での溶液容積と濃度の経時変化

```

LABEL:

printf(" %d,    %f,    %f,    %f\n", i, t, V, CA);

i=i+1;
t=t+h;

if (t < 10.0)
{
    V=V+h*(2.5*t);
    CA=CA+h*(2.5*t*(0.015-CA)/V-0.0375*CA);
}
else
{
    V=V+h*(25.0);
    CA=CA+h*(25.0*(0.015-CA)/V-0.0375*CA);
}

if (t < 60)
{
    goto LABEL;
}

return(0);
}

```

10[s]まで $dV/dt=F=2.5 \times t$
 それ以降は $dV/dt=F=25$

モデル化問題をもう1つ

量論式 $A \xrightarrow{k_1} R \xrightarrow{k_2} S$ の液相反応を等温回分操作するときの成分 A, R, S の濃度 C_A, C_R, C_S の時間 =0 から 200min までの経時変化を求めよ。

ただし、原料組成は $C_{A0}=4\text{mol/l}$, $C_{R0}=C_{S0}=0$ である。

この反応の速度は

$$\begin{aligned}
 r_A &= dC_A/dt = -k_1 C_A \text{ mol/l}\cdot\text{min} & k_1 &= 0.05 \\
 r_R &= dC_R/dt = k_1 C_A - k_2 C_R \text{ mol/l}\cdot\text{min} & k_2 &= 0.005 \\
 r_S &= dC_S/dt = k_2 C_R \text{ mol/l}\cdot\text{min}
 \end{aligned}$$

で、 $C_S=C_{A0}-C_A-C_R$ である。

解析解が求めれば、数値解と比較もできる。

物質収支が理解できれば、熱収支もたやすく理解できるはず。