

実践編では、「現象のモデル化（微分方程式化）」をプログラミングを通して学びました。

前回の答え合わせから。

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。

/* ***** */

回分反応器問題
液相逐次反応

***** /

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
```

```
int main(void){
    double h;
    double k1,k2;
    double t, t0;
    double CA, CA0;
    double CR, CR0;
    double CS, CS0;
    double CS2;
    int i;
```

変数宣言

プログラムで使用する変数は全て宣言する。
double は小数、int は整数型を宣言している。

;}
1文1文の最後には必ずセミコロンを付ける。

```
    i=0;
    t0=0.0;
    k1=0.05;
    k2=0.005;
    CA0=4.0;
    CR0=0.0;
    CS0=0.0;
    CS2=0.0;
```

変数初期化

使う変数には通常 0 (零) が代入されているが、
初期化をしておく方が Better。

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

典型的な入力文

何を入力させるかを printf 文で出力し、
scanf で数値を受け取る。&マークを忘れずに。
%lf は用意した変数 h には小数が入ることを明言

```
    printf(" I,      t,      CA,      CR,      CS,      CS2¥n");
```

MAC では "¥" ではなく
バックスラッシュ "\"

```
    t=t0;
    CA=CA0;
```

プログラムの「ある場所」を示したい場合、
場所の名前 + コロン

```
    LABEL: }
```

```
    printf(" %d,  %f,  %f,  %f,  %f,  %f¥n", i, t, CA, CR, CS, CS2);
```

```
    i=i+1;
    t=t+h;
    CA=CA+h*(-k1*CA);
    CR=CR+h*(k1*CA-k2*CR);
    CS=CS+h*(k2*CR);
    CS2=CA0-CA-CR;
```

おいらの極意はここだけ。

"将来の値" は "現在の値" に "今の方向" × "歩幅"
を加算したもの。

```
    if (t <= 200)
    {
```

```
        goto LABEL;
```

```

}
return(0);
}

```

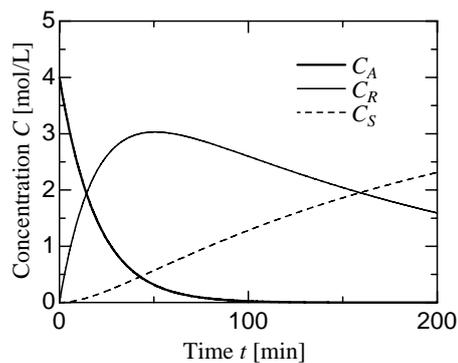


Fig.1 練習問題での濃度変化

>> 応用問題 <<

平成 16 年度の期末試験

4 A+B 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、

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

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 θ を求めたい。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、 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 θ を求めよ。

答え
25.9 min

>> チャレンジ問題 <<

ココまで来ると、3年生の前期実験（気液平衡と単蒸留）計算の意味がクリアになったはず。

メタノール(A) - 水(B)系の圧力 $P=101.3\text{kPa}$ で気相線（露点の集まり）を描きたい。

ただし、ただし、活量係数 γ_A 、 γ_B と飽和蒸気圧はそれぞれ次式で与えられ、

$$\begin{aligned} \ln \gamma_A &= (0.8517 - 0.7738 \cdot x_A) \cdot (1 - x_A)^2 & \ln P_A^0 &= 17.5977 - 4383.0/T \\ \ln \gamma_B &= (0.4648 + 0.7738 \cdot (1 - x_A)) \cdot x_A^2 & \ln P_B^0 &= 18.1621 - 5054.0/T \end{aligned}$$

メタノールの沸点は 337.7K、水の沸点は 373.2K とする。

ヒント 非理想型の場合には

$$\begin{aligned} p_A &= y_A \cdot P = \gamma_A \cdot P_A^0 \cdot x_A \\ p_B &= y_B \cdot P = (1 - y_A) \cdot P = \gamma_B \cdot P_B^0 \cdot x_B = \gamma_B \cdot P_B^0 \cdot (1 - x_A) \end{aligned}$$

これで講義は全て終了です。
現象を再現できること（シミュレーション）に興味は持てましたか？

一見複雑そうな問題も、

- (1) 頭のデジタル化
- (2) 論理の展開に不連続点（曖昧性）を無くす。

これで解決できるはず。