◆□◆　化学プロセス数学（実践編）　◆□◆

K科　H.Takiyama

現象をモデル化（微分方程式化）してプログラミングする。
プログラミングには数値解法を理解（Euler 法等を思い出し）しておきましょう。

前回の答え合わせから。
12.5 m^3 の水槽があり、これに 0.050 m^3/s の流量で水が注入されている。しかし、水槽に 1.2 m^3 の水がたまった時点で、水槽の底から水が漏れだした（この時間を t =0 とする）。水の漏れは時間の関数となっており、0.0025×t m^3/s であった。微分方程式を数値的に解き、水量の経時変化の概略をグラフで示せ。

■プログラム例

```
C23456*************************************************
C
C  オイラー法で解く水漏れ問題
C
C  12.5 m3 の水槽があり、これに 0.050 m3/s の流量で水が注入。
C  水槽に 1.2 m3 の水がたまった時点で、水槽の底から水が漏れる。
C  水漏れは時間の関数となっており、0.0025×t m3/s。
C
C23456*************************************************

C 変数宣言
      REAL H
      REAL T, V
      REAL T0, V0
      INTEGER I

C 変数初期化
      I=0
      T0=0.0
      V0=1.2

      WRITE(*,*) 'INPUT H='
      READ(*,*) H

      WRITE(*,*) ' I,      T,      V'

C オイラー法
      T=T0
      V=V0
 10

      WRITE(*,*) I, T, V

      I=I+1
      T=T+H
      V=V+H*(0.05-0.0025*T)

      IF(V. GT. 0.0) GOTO 10

      STOP
      END
```

変数の宣言
実数は REAL、整数は INTEGER

変数の初期化
初期値を間違えると×

問題では t=0 のとき
V=1.2

H は刻み幅

Euler 法での
初期値入力

ここが Euler 法
$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$

タンクが空にな
ったら計算終了

蓄積速度（蓄積量/時間）
＝流入速度－流出速度

$$\frac{dV}{dt} = 0.005 - 0.0025 \cdot t$$

Euler 法で考える

$$f(t) = \frac{dV}{dt}$$

$$f(t_{i+1}) = f(t_i) + h \cdot (0.005 - 0.0025 \cdot t_i)$$

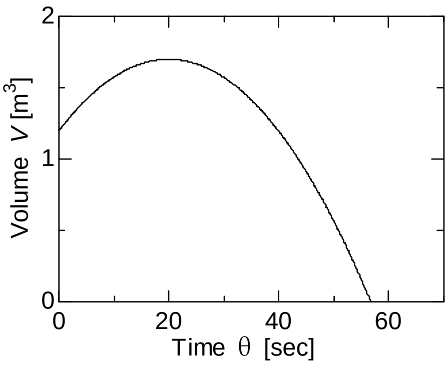
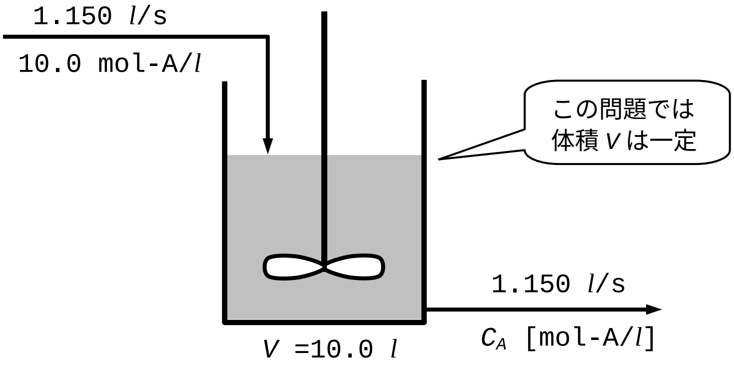


Fig.1　タンクの容量の経時変化

■物質収支とモデル化

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



A→B　反応速度＝0.0050·C_A mol-A/(l·s)

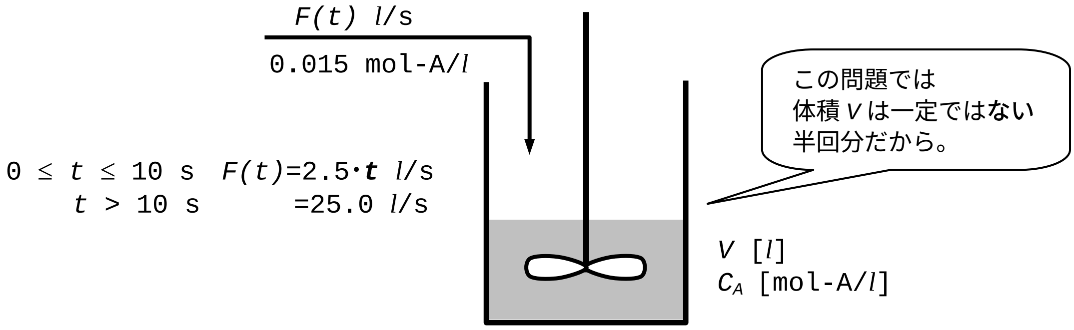
タンクにあらかじめ 2.00 mol-A/l の濃度の溶液が 10.0 l 仕込んであるとき（t=0 で C_A=2.00)、溶液濃度 C_A の経時変化（400sec まで）を求めよ。

ヒント （１）物質収支式を立てる。　蓄積＝入力ー出力＋生成ー消滅
（２）微分方程式でモデル化。
（３）実際にプログラミング

もちろん A 成分
について考える

◆□◆　モデル化のスペシャリストを目指すためのステップ１　◆□◆

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、入力の流量は時間で変化し、はじめの 10 秒は 2.5×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=60sec までとする。



A→B　反応速度＝0.0375·C_A mol-A/(l·s)

ヒント：微分方程式は１つとは限らない。（流量と濃度）

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！！

今日の疑問は明日に持ち越さず今日のうちに解決、これがプログラミングの極意！