

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。

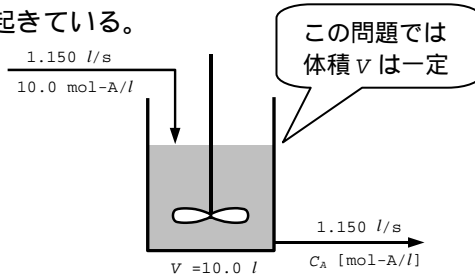
液相反応 (A → B) が完全混合型の反応装置 (10.0 l) で起きている。

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 (400sec まで) を求めよ。



この問題では
体積 V は一定

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 l で一定

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

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

もちろん A 成分
について考える

C23456*****

C

C オイラー法で解く濃度変化

C

C23456*****

C 変数宣言

```
REAL H
REAL T, CA
REAL T0, CA0
INTEGER I
```

対象の微分方程式は C_A の
みの関数

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

C 変数初期化

```
I=0
T0=0.0
CA0=2.0
```

変数の初期化
初期値を間違えると ×

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

H は計算時間の刻み幅

```
WRITE(*,*) ' I, T, CA'
```

C オイラー法

```
T=T0
CA=CA0
10 WRITE(*,*) I, T, CA

I=I+1
T=T+H
CA=CA+H*(1.150-0.120*CA)

IF(T.LT.400) GOTO 10
STOP
END
```

Euler 法での
初期値入力

ここが Euler 法

$$C_{A(i+1)} = C_{A(i)} + h \cdot f(C_{A(i)})$$

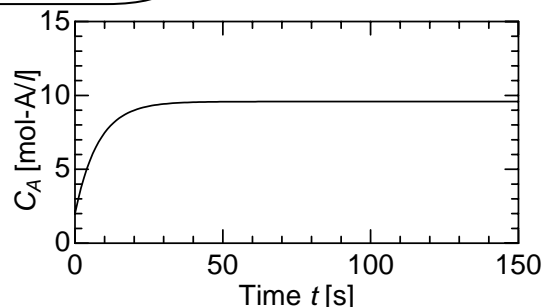
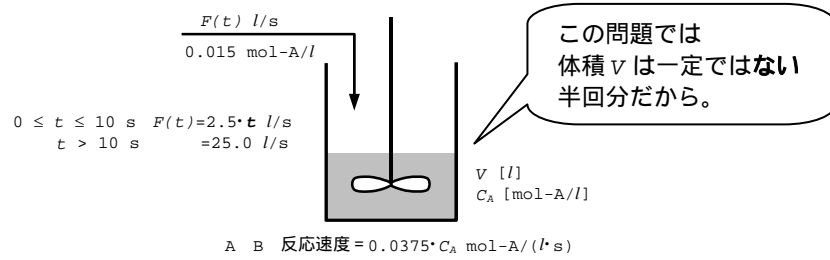


Fig.A 濃度の経時変化

スペシャル問題の解答例

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 $2.5 \cdot t$ 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
$$\frac{d(V \cdot C_A)}{dt} = (0.015 \cdot F) - (0) + (0) - (0.0375 \cdot C_A \cdot V)$$

蓄積項 = 入力項 - 出力項 + 生成項 - 消滅項

この問題で V は一定ではない。

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

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

ここで F と $\frac{dV}{dt}$ の関係をどう考えるか。

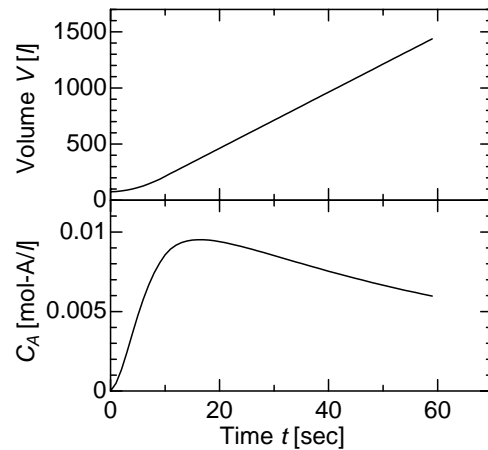


Fig. B 体積と濃度の経時変化

スペシャル問題をもう 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 $t=0$ から 200min までの経時変化を求めよ。
 ただし、原料組成は $C_{A0}=4$ mol/l, $C_{R0}=C_{S0}=0$ である。

この反応の速度は

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

で、 $C_S = C_{A0} - C_A - C_R$ である。

解析解も求めれば、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。