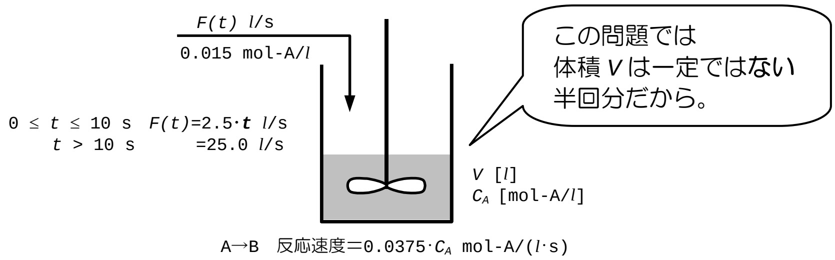
■■▪▪　化学プロセス数学（実践編 ラスト）2005 年度版　▪▪■■

K科　H.Takiyama

モデル化を含めた微分方程式の数値解析の最終章

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。



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

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

```
/*********************************************
  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;

         LABEL:

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

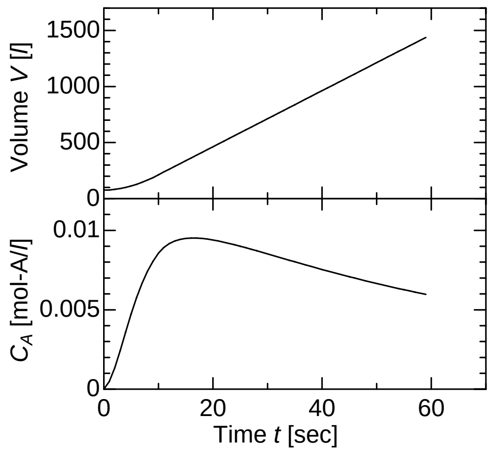


Fig.A 半回分反応装置での溶液容積と濃度の経時変化

```
        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);
}
```

平成 16 年度の期末試験

$\boxed{4}$ 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、

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

いま、C_{A0}=2.0 kmol/m^3、C_{B0}=5.0 kmol/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。

ヒント

$$\frac{dx_A}{dt} = k \cdot C_{A0} \cdot (1 - x_A)^{0.5} \cdot \left(\frac{C_{B0}}{C_{A0}} - x_A \right)^{1.5}$$

答え

25.9 min

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？