



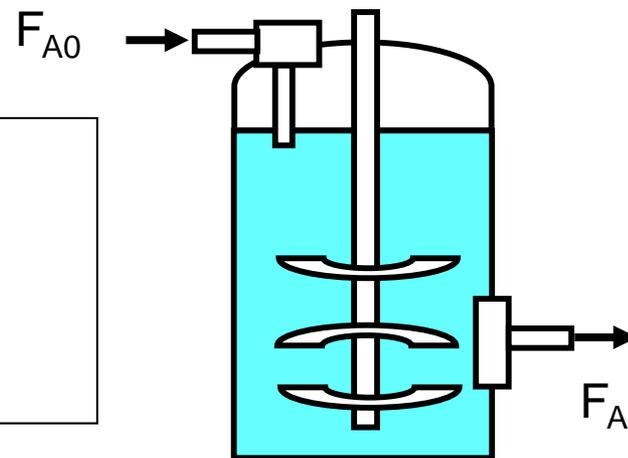
# 工業反応装置特論

講義時間:6限  
場所 :8-1A  
担当 :山村

# 連続槽型反応器の設計方程式(1)

時間 $\Delta t$ 間の成分Aの物質収支を考える。

$$\begin{aligned} \text{モル数の変化} \Delta n_A &= \text{反応による生成量} r_A V \Delta t \\ &+ \text{反応器への流入量} F_{A0} \Delta t \\ &- \text{反応器からの流出量} F_A \Delta t \end{aligned}$$



体積 $V[\text{m}^3]$

反応速度	$r$	$[\text{mol}/(\text{m}^3\text{s})]$
体積	$V$	$[\text{m}^3]$
時間	$\Delta t$	$[\text{s}]$
モル流量	$F_A$	$[\text{mol}/\text{s}]$

両辺を $\Delta t$ で除すと

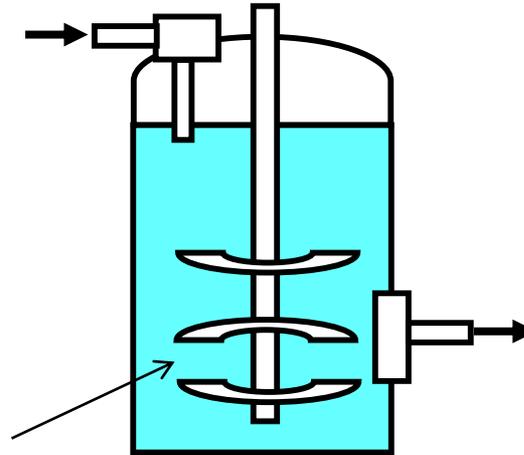
$$\frac{\Delta n_A}{\Delta t} = r_A V + F_{A0} - F_A$$

$\Delta t \rightarrow 0$ の極限をとれば

$$\frac{dn_A}{dt} = r_A V + F_{A0} - F_A$$

# 連続槽型反応器の設計方程式(2)

モル濃度  $C_{i0}$  [mol/m<sup>3</sup>] の成分を  
体積流量  $v_0$  [m<sup>3</sup>/s] で供給



モル濃度  $C_i$  [mol/m<sup>3</sup>] の成分を  
体積流量  $v$  [m<sup>3</sup>/s] で抜き出し

[仮定] 反応器内は十分攪拌されており  
モル濃度は出口濃度  $C_i$  [mol/m<sup>3</sup>] に等しい

反応器入口でのモル流量  $F_{i0}$  [mol/s]  
反応器出口でのモル流量  $F_i$  [mol/s] はそれぞれ次式で表せる

$$F_{i0} = C_{i0} v_0$$

$$F_i = C_i v$$

# 連続槽型反応器の設計方程式(3)

従って設計方程式は

$$\begin{aligned}\frac{dn_A}{dt} &= r_A V + F_{A0} - F_A \\ &= r_A V + C_{A0} v_0 - C_A v\end{aligned}$$

定容系を仮定して  $C_A \equiv n_A / V$ ,  $v = v_0$  を用いると

$$V \frac{dC_A}{dt} = r_A V + C_{A0} v_0 - C_A v_0$$

# 連続槽型反応器の設計方程式(4)

簡単のため1次反応を考えると  $r_A = -kC_A$

$$\therefore V \frac{dC_A}{dt} = -kC_A V + C_{A0}v_0 - C_A v_0$$

定常状態では

$$0 = -kC_A V + C_{A0}v_0 - C_A v_0$$

$$\therefore C_A = C_{A0} \frac{v_0}{kV + v_0} \quad (1)$$

# 連続槽型反応器の設計方程式(5)

反応 $A+B\rightarrow C$ を考える。成分Bについて  
AとBの量論係数は等しいので

$$n_B - n_{B0} = n_A - n_{A0}$$

定容系を考えて $V$ で除すと

$$C_B - C_{B0} = C_A - C_{A0}$$

(1)を代入すると

$$\begin{aligned} C_B &= C_{B0} + C_{A0} \frac{v_0}{kV + v_0} - C_{A0} \\ &= C_{B0} - C_{A0} \frac{kV}{kV + v_0} \quad (2) \end{aligned}$$

# 連続槽型反応器の設計方程式(6)

同様に成分Cについて

1molの成分Aが消費されて1molの成分Cが生じるから

$$n_C - n_{C0} = n_{A0} - n_A$$

定容系を考えるとVで除すと

$$C_C - C_{C0} = C_{A0} - C_A$$

(1)を代入すると

$$C_C = C_{C0} + C_{A0} \frac{kV}{kV + v_0} \quad (3)$$

Q1. Download “COCO” simulator from <http://www.cocosimulator.org/>

Q2. Open COCO and design a Continuous-Stirred-Tank-Reactor (CSTR).

1. Material selection

setting-property packages-add-TEA-select-New-odel set: Peng Robinson-add-H<sub>2</sub>O-OK-add-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O(Ethylene oxide)-OK-add-C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>(Ethylene glycol)-OK-OK-

2. Reactor/Reaction selection

Reaction packages-add-CORN Reaction Package Manager-select-New-New Reaction Packages-Edit-Compounds-Add-From database-OK-H<sub>2</sub>O-OK-add-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O(Ethylene oxide)-OK-add-C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>(Ethylene glycol)-OK-New Reaction Packages-Edit-Reactions-Create-rxn1-OK-Stoich--"1"(water)--"1"(Ethylene oxide)--"1"(Ethylene glycol)-Rate-0.0052\*C("Ethylene oxide")-Phase-Liquid-OK-Insert Unit Operations-Reactors-CSTR-select-Edit unit operation-Isotherml 328.15K-Reactor-Reactor volume 4.8-Reactions-add-rnx1-

3. Feed/Product streams selection

Insert stream-Edit/view streams-3400 kPa-55 C-Compound flows-Water-201 mol/s-Ethylene oxide-58 mol/-Insert stream-Edit/view streams-3400 kPa-55 C-

4. solve(F5)

Q3. Find the reaction volume that satisfies Flow Ethylene oxide of 11.5388 mol/s in stream 2.