<2 週>化学プロセスの中でおきる過渡現象の微分方程式での記述と解法について学ぶ

例 1)ガスを扱う耐圧実験装置の漏れチェック(警告 : ガラスなど耐圧製の無い装置では絶対してはいけない)

加圧に耐える実験装置の継ぎ目などで漏れがあることを考える。ガスがその継ぎ目の漏れ部分の非常に狭い流路を流出する。流路は狭いので、ガスの流れは層流であり、ガスが漏れる流量 M[mol/s]は、内部の圧 P[Pa](絶対圧)と周囲の圧 P_{ATM}[Pa]の差に比例すると考える。出口を閉じた実験装置にガスを充填して加圧したのち、入口も閉鎖して、その中の圧力 P の経時変化を求める。なお、内部の圧力変化はゆっくりしているので、内部の温度 T は[K]一定であるとする。

1.ある瞬間の装置内のガスの物質量 n[mol]が与えられているとする。理想気体を仮定すると、$PV=nRT$ より、内部の圧力は $P=nRT/V$ となる。

2.適宜検査面を作る
装置外壁を検査面とする

3.その瞬間の濃度勾配、温度勾配等から、検査面での物質、熱の流入・流出速度を求める
流入速度 ＝0 (1)
流出速度 ＝$F = k(P - P_{ATM})$ [mol/s] (2)

4.非常に短い時間 Δt の間、物質、熱の流入・流出速度は一定であると仮定する
蓄積速度= 流入速度 - 流出速度 ＝$0 - M = -k(P - P_{ATM})$ [mol/s] (3)
(k は漏れの定数[mol/s/Pa])

5.その短い時間 Δt の間に検査面内部に蓄積した物質量 Δn[mol]を求める
蓄積量= 蓄積速度×$\Delta t = -M\Delta t = -k(P - P_{ATM})\Delta t$ [mol] (4)

6.Δn の物質蓄積に伴う圧力の変化 ΔP を計算する
$\Delta P = \Delta nRT/V = -k(P - P_{ATM})\, RT\Delta t / V$ [Pa] (5)

7.ΔC を Δt で割って、$\Delta t \to 0$ の極限をとると微分方程式 dP/dt=･･･が得られる
$\Delta P / \Delta t = -k(P - P_{ATM})\, RT/V$ (6)
$\mathrm{d}P/\mathrm{d}t = -k(P - P_{ATM})\, RT/V$ ($\Delta t \to 0$ の極限) (7)

例 2)流体中に置かれた金属球の温度変化(伝熱係数を求める実験など)
温度 T_0[K]の金属球を時間 t[s]=0 で温度 T_1[K]の流体中に漬けたとする。金属球内の熱伝導は極めて良好であり、球内の温度は一様のまま温度が変化し、充分時間が経過したら周囲温度 T_1 に達するものとする。金属球の直径を D [m]、金属の体積あたり熱容量を C [J/(m^{3}K)]、球表面での伝熱係数を h [W/(m^{2}K)]として、金属球の温度 $T(t)$の経時変化を与える式を導く。

1.ある瞬間の金属球の温度 $T(t)$が与えられているとする。
$T(t)$ [K]

2.適宜検査面を作る
球表面を検査面とし、球内の熱の蓄積を考える

3.その瞬間の周囲との温度差から、検査面での熱の流入・流出速度[W]を求める。
ここでは流入側を正としている。球の単位表面積あたりの熱流入速度 w [W/m^2]は次式で与えられる。

w=( ) 式 1

球の表面積は( )[m^2]であるので、球への合計の熱流入速度 W[W]は、次式で与えられる。

W=( ) 式 2

4.非常に短い時間Δt[s]の間、熱の流入速度は一定であると仮定する。したがって、熱流入速度は式 2 で与えられる。

5.その短い時間Δt の間に検査面内部に蓄積した熱量ΔQ[J]を求める

ΔQ =( ) 式 3

6.ΔQ の物質、熱の蓄積に伴う濃度、温度の変化ΔT を体積、熱容量などから計算する
検査面内部の金属体積 V [m^3]と熱容量 C [J/(m^{3}K)]を用いる。

ΔT =( ) 式 4

7.ΔT をΔt で割って、Δt→0 の極限をとると微分方程式 dT/dt=・・・が得られる

ΔT / Δt =( ) 式 5

いろいろな過渡現象の微分方程式の解法（１次の場合）

式 1 で与えられる微分方程式(1)を代表的な条件で解く。

$$\frac{dC}{dt}=\frac{C_{IN}-C}{\tau} \qquad (1)$$

例 1　ステップ応答(C_{IN} が階段状に変化するとき)

$C_{IN}=0$　　　　　　($t<0$)

$C_{IN}=C_1$ (=一定)　　　($t>0$)

C の初期条件 $C(0)$

解析的な解き方

式 1 を次のように変形し、0〜t まで積分すると、C は $C(0)$〜$C(t)$に変化する。

$$\int_{C(0)}^{C(t)}\frac{d\left(C_1-C_{OUT}\right)}{\left(C_1-C_{OUT}\right)}=-\frac{1}{\tau}\int dt \qquad (2)$$

$$\left[ln\left(C_1-C\right)\right]_{C(0)}^{C(t)}=-\frac{1}{\tau}\left[t\right]_0^t \qquad (3)$$

$$C_1-C(t)=\left(C_1-C(0)\right)exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \qquad (4)$$

例 2　インパルス応答(極めて短い時間の間にある量を注入する)

$C_{IN}(t)=0$

$t=0$　で M[mol]のトレーサーを投入する。

投入前のかくはん槽内トレーサー濃度はゼロとする：$C\ (t)=0$　at $t<0$

トレーサーは瞬時に混合するので、投入と同時に完全混合槽内濃度は M/V となる。

$C\ (0)=M/V$ (5)

その後は流入濃度がゼロであるので、

$dC/dt=(C_{IN}-C)/\tau=-C/\tau$ (6)

$C(t)=(M/V)\exp(-t/\tau)=C(0)\exp(-t/\tau)$ (7)

用語解説：　ディラックのデルタ(δ)関数　Dirac’s　δ　function

$t=0$ を除いて全てゼロであり、$t=0$ における値は∞であり、−∞〜∞まで積分すると 1 になる関数。

$$\delta(t)=0 \qquad t\neq 0 \qquad (8)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(t)dt=1 \qquad (9)$$

極めて短い時間にインパルスでトレーサーを注入する場合を表す関数として使われる。

δ 関数を-∞〜t まで積分して得られる関数は単位階段関数になる。

$$\int_{-\infty}^{t}\delta(t)dt=u(t) \qquad (10)$$

ここで

$u(t)=0$　　　　($t<0$)

$\quad =1$　　　　($t>1$)　　(11)