

今まで学習した全ての知識を活用して、実際の化学工学の問題を解決してみましょう。

ベンゼン(A)ートルエン(B)系の圧力 $P=101.3\text{kPa}$ で
 液相組成 $x_A=0.4$ モル分率のときの平衡温度 T と気相組成 y を Newton 法で求めよ。
 初期値やしきい値は任意に与えよ。

ただし、活量係数は1 (理想系を仮定) する。

Raoult の法則

$$p_A = P_A^o \cdot x_A$$

$$p_B = P_B^o \cdot x_B = P_B^o \cdot (1 - x_A)$$

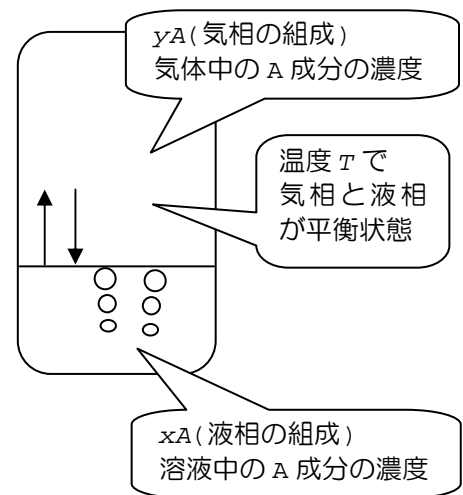
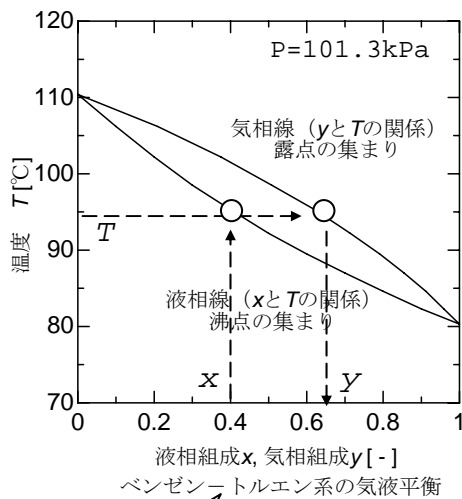
飽和蒸気圧

$$\ln P_A^o = 15.33 - 3785/T$$

$$\ln P_B^o = 15.68 - 4247/T$$

二成分系なので、 x_A+x_B は常に 1.0

- p_A : 気相中の成分 A の分圧
- p_B : 気相中の成分 B の分圧 (だから、全圧 $P = p_A + p_B$)
- x_A : 液相中の成分 A のモル分率
- x_B : 液相中の成分 B のモル分率 (2成分系だから $x_A + x_B=1.0$)
- P_A^o : 成分 A のある温度 T での飽和蒸気圧 [kPa]
- P_B^o : 成分 B のある温度 T での飽和蒸気圧 [kPa]
- T : 温度 (計算時はケルビンを使う。)



x_A (液体の組成) を入力して沸点を求める問題 = 沸点計算

平衡状態であれば、
 (全圧 P) = (A成分の分圧 p_A) + (B成分の分圧 p_B)
 p_A も p_B も組成が判っていれば温度 T のみの関数

よって
 (全圧 P) - (A成分の分圧 p_A) - (B成分の分圧 p_B) を関数として
 この関数を 0 にする温度を求める。

$$\begin{aligned}
 f(T) &= P - p_A - p_B \\
 &= P - P_A^0 \cdot x_A - P_B^0 \cdot x_B \\
 &= P - P_A^0 \cdot x_A - P_B^0 \cdot (1 - x_A) \\
 &= P - \exp(15.33 - 3785/T) \cdot x_A - \exp(15.68 - 4247/T) \cdot (1 - x_A)
 \end{aligned}$$

なる式を考えれば、 $f(T)$ は温度 T のみの関数となり、 $f(T) = 0$ と
 なる T が判れば、それが平衡温度。
 $f(T)$ の微分は大丈夫？

提出する課題

1. ベンゼン(A)–トルエン(B)系の圧力 $P=101.3\text{kPa}$ で液相組成 $x_A=0.8$ モル分率のときの平衡温度 T と気相組成 y を Newton 法で求めよ。(送信は T と y だけで良い。)
2. データ x, y, z に数値を読み込み、大きい順番にその数値を出力するプログラム。(プログラムを送信) “どうやって順番をつけますか?”

発展問題

1. ベンゼンの沸点が 80.19°C ($x_A=1.0$ の時)、トルエンの沸点が 110.7°C ($x_A=0.0$) の時、気液平衡データを示せ。(x_A を変化させて Fig.1 を検証せよ。)

補足説明 数値の入力について

先週の問題で、ある変数に数値を代入する場合、より確実な方法は Val を使う

```

. . . . .
H = InputBox("Please Input Height[cm]?")
W = InputBox("Please Input Weight[kg]?")
. . . . .

```

↓

```

. . . . .
H = Val(InputBox("Please Input Height[cm]?"))
W = Val(InputBox("Please Input Weight[kg]?"))
. . . . .

```