

反応工学

反応器設計

(BR, CSTR)

河瀬元明



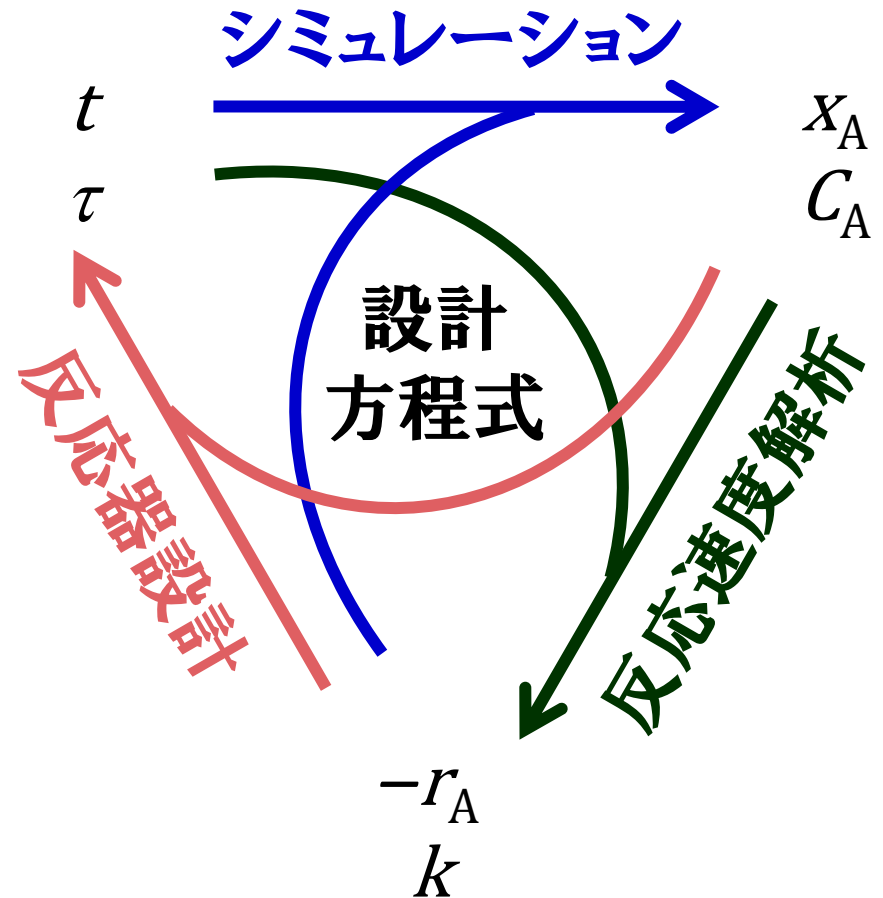
反応器設計

設計方程式

反応装置の設計, シミュレーション, 反応速度解析といった反応器の問題を数学の問題に変換

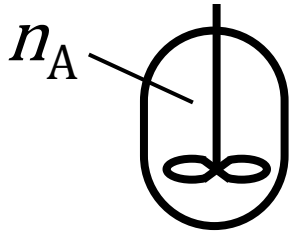
理論的考察から実用的計算まで可能

理想的条件での実験 ～ 現実の複雑系の予測



6.3.2 設計方程式

BR



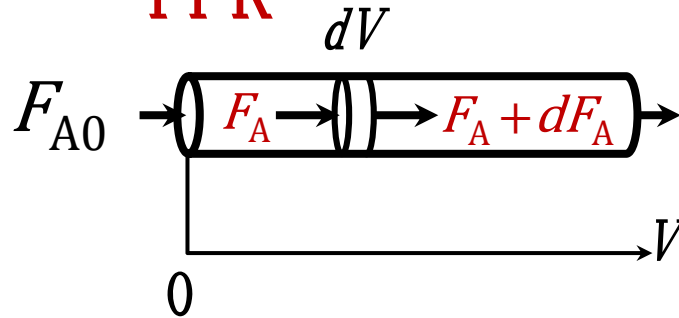
$$\frac{dn_A}{dt} = r_A V$$

$$t = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{-r_A}$$

BRの r_A は反応
時間 t によって値
が異なる

r_A depends on t .

PFR



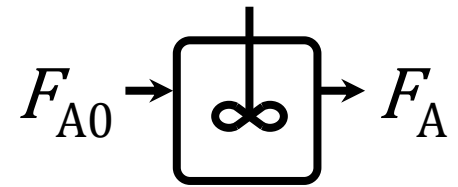
$$dF_A = r_A dV$$

$$\tau = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{-r_A}$$

PFRの r_A は位置
 V によって値が異
なる

r_A depends on V .

CSTR



$$F_A - F_{A0} = r_A V$$

$$\tau = C_{A0} \frac{x_A}{-r_A}$$

CSTRの r_A は
出口 C_A で決まる
一つの値

r_A is at outlet C_A .

Levenspielプロット

BR

$$\frac{dn_A}{dt} = r_A V$$

$$t = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{-r_A}$$

PFR

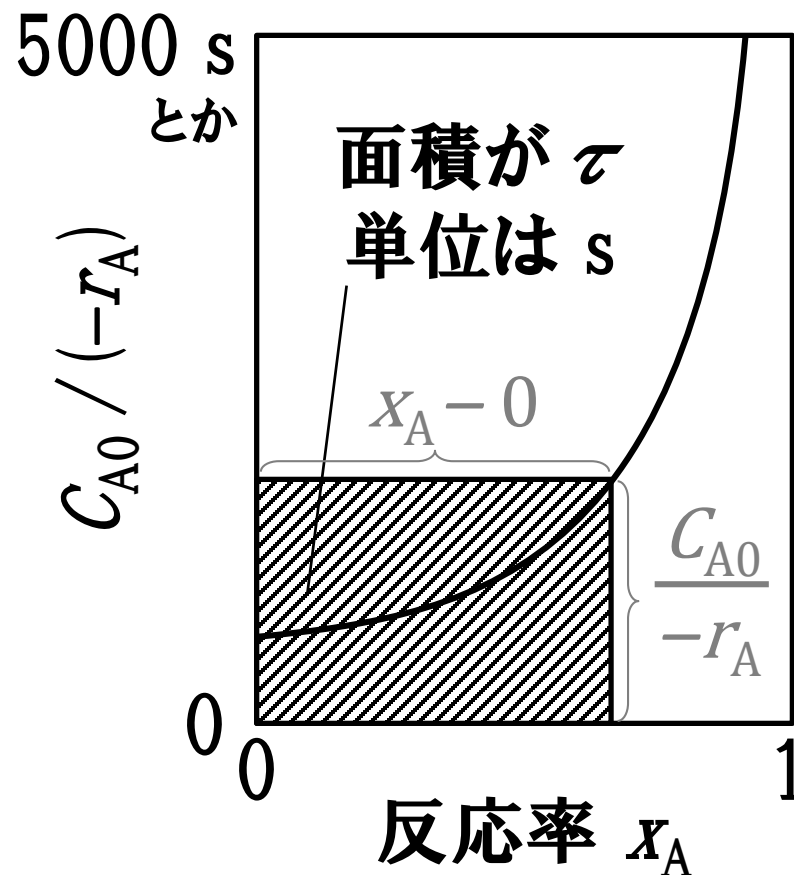
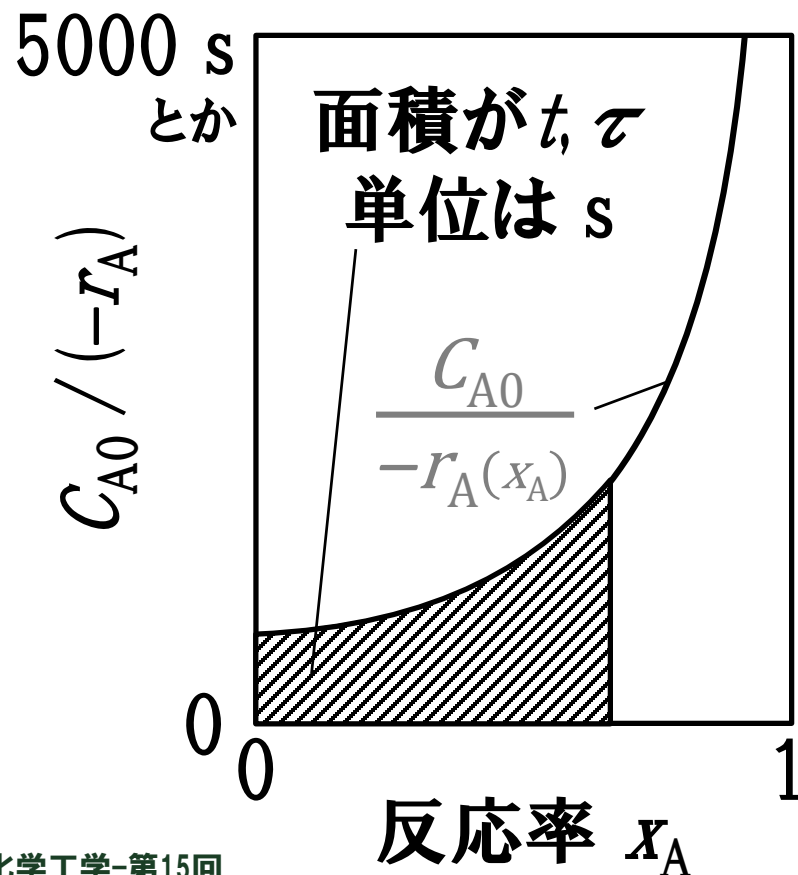
$$dF_A = r_A dV$$

$$\tau = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{-r_A}$$

CSTR

$$F_A - F_{A0} = r_A V$$

$$\tau = C_{A0} \frac{x_A}{-r_A}$$



6.5.1 回分反応器の設計

回分反応器

反応器体積
を決める

設定された反応率 → 反応時間

設計方程式 x_A vs. t

$$t = \text{func.}(x_A)$$

反応時間以外の必要時間 → 年間バッチ数

反応率と必要な生産速度 → 必要な原料仕込み量

反応量論 $n_C = (c/a) n_{A0} x_A$ $n_{A0} = (a/c) n_C / x_A$

原料仕込み量と原料モル濃度 → 反応器体積

濃度の定義 $C_{A0} = n_{A0} / V$ $V = n_{A0} / C_{A0}$

(6.5.2 CSTR, 6.5.3 PFR) 流通式反応器の設計

流通式反応器

反応器体積

設定された反応率 → 空間時間

を決める

設計方程式 x_A vs. τ

$$\tau = \text{func.}(x_A)$$

反応率と必要な生産速度 → 必要な原料モル流量

反応量論 $F_C = (c/a) F_{A0} x_A$

$$F_{A0} = (a/c) F_C / x_A$$

原料モル流量と原料モル濃度 → 入口体積流量

濃度の定義 $C_{A0} = F_{A0} / v_0$

$$v_0 = F_{A0} / C_{A0}$$

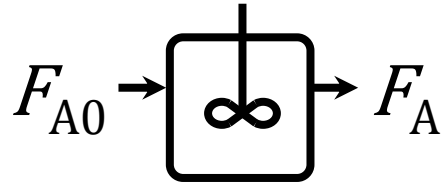
空間時間と体積流量から反応器体積が決定される。

空間時間の定義 $\tau = V / v_0$

$$V = v_0 \tau$$

6.5.2 CSTRの設計

CSTR



$$F_A - F_{A0} = r_A V$$

$$\tau = C_{A0} \frac{x_A}{-r_A}$$

CSTRの r_A は
出口 C_A で決まる
一つの値

r_A is at outlet C_A .

演習問題14.1 CSTR設計

$A + B \rightarrow C$, $r = kC_A$, $k = 0.04 \text{ min}^{-1}$, 定容系の液相反応をCSTRで行い, $C_{A0} = 3 \text{ kmol m}^{-3}$, $x_A = 0.950$ で操作した。

- (a) 必要な空間時間 τ を求めよ。
- (b) 成分Cを一日に 300 kmol 生産するのに必要な反応器入口体積流量 v_0 を求めよ。

演習問題14.1 解

(a) 定容系CSTRの**設計方程式**は $F_A - F_{A0} = r_A V$,

$C_A - C_{A0} = r_A \tau = -k C_A \tau$, 符号反転, 条件代入すると

$$0.95 C_{A0} = 0.05 C_{A0} (0.04 \text{ min}^{-1}) \tau$$

$$\tau = (0.95/0.05)/0.04 \text{ min} = 475 \text{ min}$$

(b) **生産速度**は $F_C = 300 \text{ kmol/d} = (12.5/60) \text{ kmol/min}$

$$F_C = F_{A0} x_A \text{ だから}$$

$$F_{A0} = (12.5/60)/0.95 = 0.219 \text{ kmol/min 必要}$$

$$F_{A0} = C_{A0} v_0 \text{ だから}$$

$$v_0 = (0.219 \text{ kmol min}^{-1}) / (3.00 \text{ kmol m}^{-3}) = 0.0731 \text{ m}^3/\text{min}$$

$$\therefore V = v_0 \tau = (0.0731 \text{ m}^3/\text{min})(475 \text{ min}) = 34.7 \text{ m}^3 (!!)$$

CSTRで $x_A = 95\%$ は厳しい

演習問題14.2 CSTR運転

反応器体積 $V = 9.87 \text{ m}^3$ の CSTR を用いて,

$A + B \rightarrow 2 C$, $r = k C_A C_B$, $k = 7.19 \times 10^{-6} \text{ m}^3 / (\text{mol} \cdot \text{s})$ で表される液相反応を行う。

体積流量 $v_0 = 0.658 \text{ m}^3 / \text{min}$ で $C_{A0} = 588 \text{ mol} / \text{m}^3$, $C_{B0} / C_{A0} = 2.00$, $C_{C0} = 0$ の原料混合物を供給したところ, 反応器出口において濃度 $C_C = 962 \text{ mol} / \text{m}^3$ であった。 C_{B0} / C_{A0} を同じにしたまま C_{A0} を変更して, 成分 C の生産速度を2倍にしたい。 C_{A0} を何倍にすればよいか。(その他の条件は変えないものとする。)

演習問題14.2 解 CSTR運転

体積流量は同じだから、 C_C を2倍にする。量論関係より、

$$C_A = C_{A0} - C_C/2, \quad C_B = C_{B0} - (C_{A0} - C_A) = 2.00 C_C / 2$$

と表せるから、設計方程式に代入すると

$$\frac{C_{A0} - C_A}{\tau} = \frac{C_C - C_{C0}}{2\tau} = k C_A C_B$$
$$2.00 C_{A0}^2 - \frac{3.00 C_C}{2} C_{A0} + \frac{C_C^2}{4} - \frac{C_C}{2k\tau} = 0$$

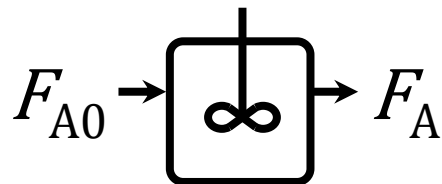
$C_C = 2 \times 962 \text{ mol/m}^3$ を代入して解くと、

$$C_{A0} = 1085.1 \text{ mol/m}^3$$

こたえ $1085.1 / 588 = 1.85$ 倍

6.5.2 CSTRの設計

CSTR



$$F_A - F_{A0} = r_A V$$

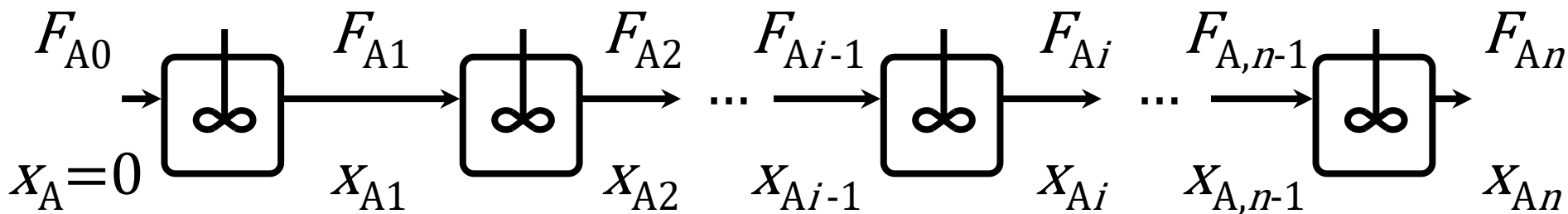
$$\tau = C_{A0} \frac{x_A}{-r_A}$$

CSTRの r_A は
出口 C_A で決まる
一つの値

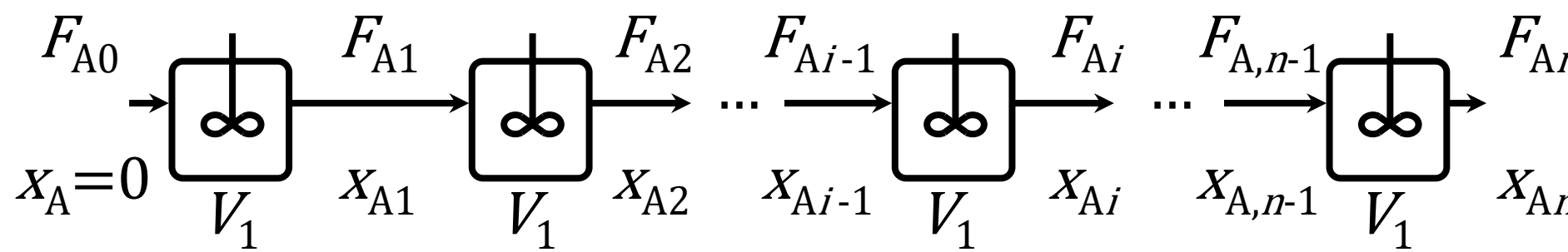
r_A is at outlet C_A .

直列CSTRの設計

通常の反応ではCSTRは流通式反応器でもっとも性能が悪い。これを補うためにしばしば直列接続のシステムで用いられる。通常各槽の反応器体積は同一。



6.5.2 直列CSTRの設計



第1槽
$$F_{A1} - F_{A0} = r_{A1} V_1$$

第2槽
$$F_{A2} - F_{A1} = r_{A2} V_1$$

⋮

第*i*槽
$$F_{Ai} - F_{A,i-1} = r_{Ai} V_1$$

⋮

第*N*槽
$$F_{AN} - F_{A,N-1} = r_{AN} V_1$$

定容系反応，
1次反応なら

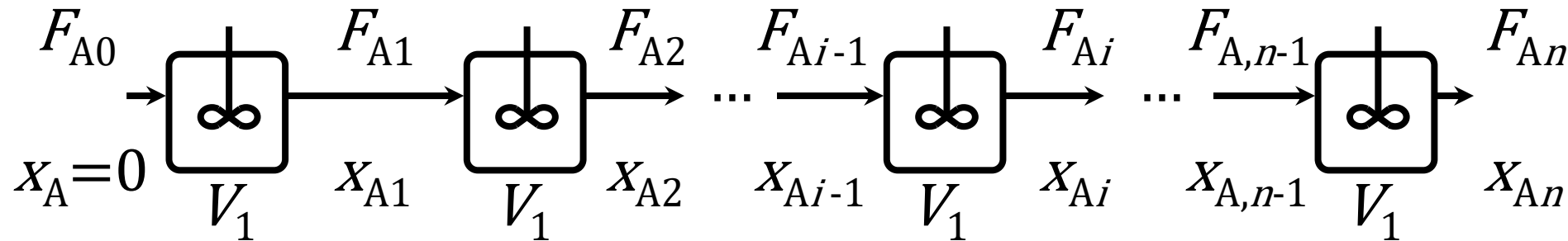
$$C_{A0} - C_{A1} = k C_{A1} \tau_1$$

$$C_{A1} - C_{A2} = k C_{A2} \tau_1$$

$$C_{A,i-1} - C_{Ai} = k C_{Ai} \tau_1$$

$$C_{A,N-1} - C_{AN} = k C_{AN} \tau_1$$

6.5.2 直列CSTRの設計



第1槽 $C_{A0} - C_{A1} = kC_{A1}\tau_1,$

$$C_{A1}/C_{A0} = 1/(1+k\tau_1)$$

第2槽 $C_{A1} - C_{A2} = kC_{A2}\tau_1,$

$$C_{A2}/C_{A1} = 1/(1+k\tau_1)$$

⋮

第*i*槽 $C_{A,i-1} - C_{Ai} = kC_{Ai}\tau_1,$

$$C_{Ai}/C_{A,i-1} = 1/(1+k\tau_1)$$

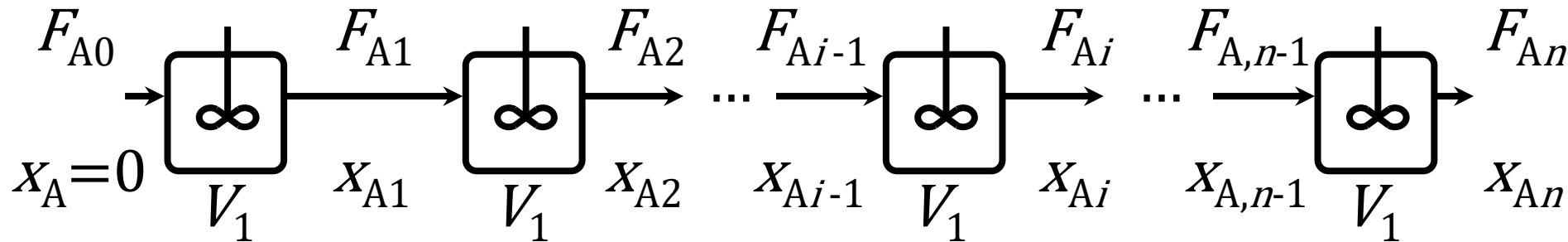
⋮

第*N*槽 $C_{A,N-1} - C_{AN} = kC_{AN}\tau_1,$

$$C_{AN}/C_{A,N-1} = 1/(1+k\tau_1)$$

辺々掛け合わせると $C_{AN}/C_{A0} = 1/(1+k\tau_1)^N$

6.5.2 直列CSTRの設計



F_{A0} 基準の反応率 x_A

第1槽出口 $x_{A1} = (F_{A0} - F_{A1}) / F_{A0}$

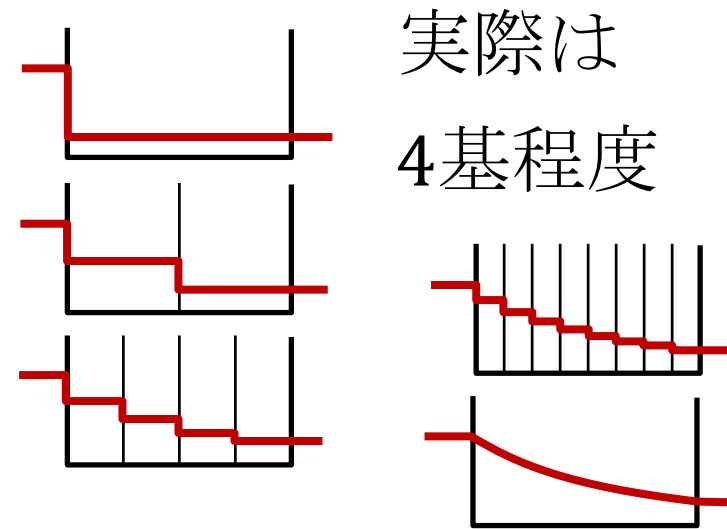
第2槽出口 $x_{A2} = (F_{A0} - F_{A2}) / F_{A0}$

:

第*i*槽出口 $x_{Ai} = (F_{A0} - F_{Ai}) / F_{A0}$

:

第*N*槽出口 $x_{AN} = (F_{A0} - F_{AN}) / F_{A0}$



実際は
4基程度

無限個に分割す
るとPFRになる

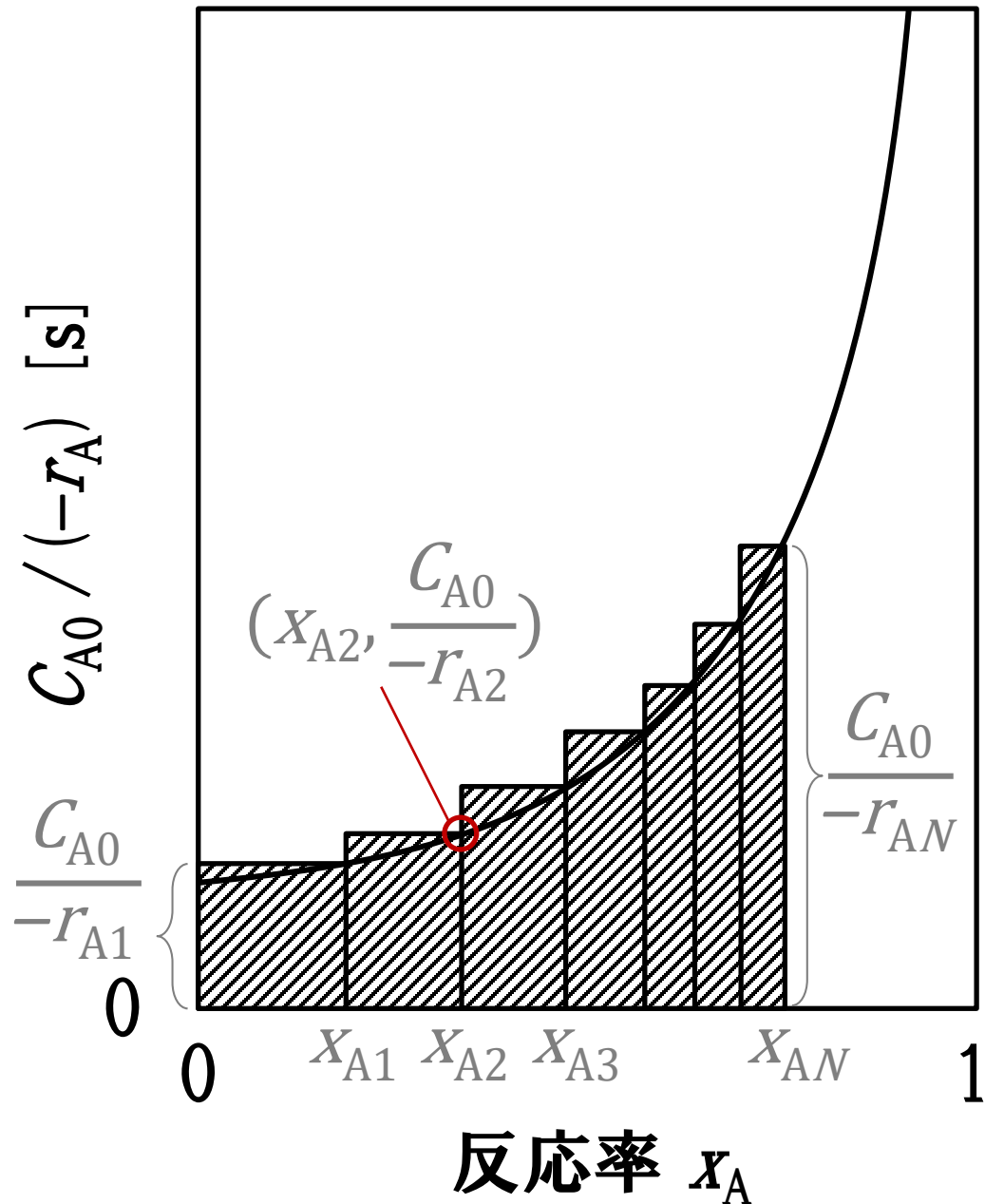
$$x_{AN} = 1 - 1/(1 + k\tau_1)^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1 - \exp(-kN\tau_1)$$

直列CSTRのLevenspielプロット

CSTR第*i* 槽

$$F_{Ai} - F_{A,i-1} = r_{Ai} V_1$$

$$\tau_1 = C_{A0} \frac{X_{Ai} - X_{A,i-1}}{-r_{Ai}}$$



演習問題14.3 反応器形式と性能

$A \rightarrow 2 C$, $r = -r_A = k C_A$ で表される液相反応を等温条件で行う。以下の各反応器（反応器システム）でこの反応を行った場合、出口反応率（濃度ではない）の大小関係はどのよ

うになるか。

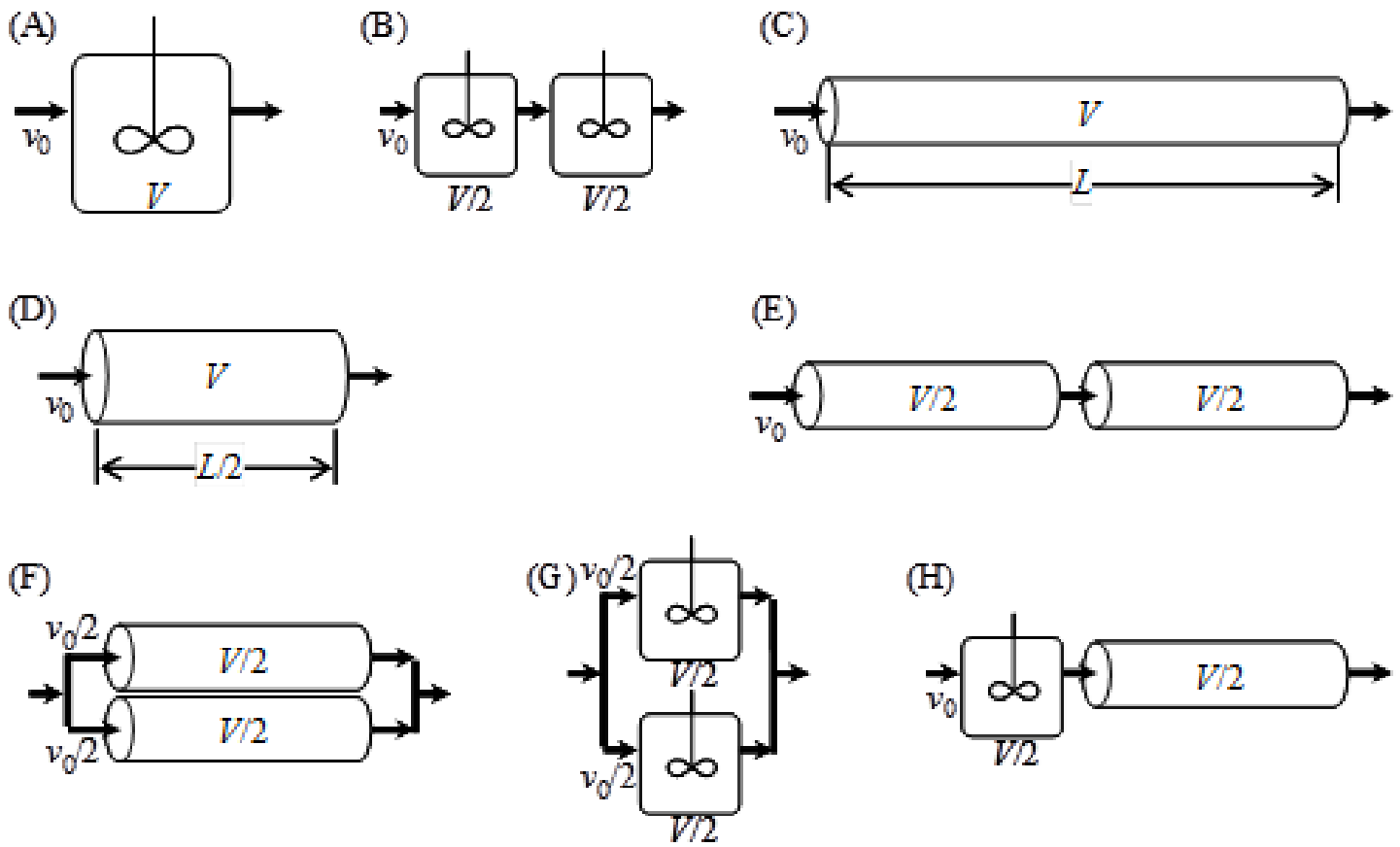
等号，不等

号を用いて，

「 $C > A$

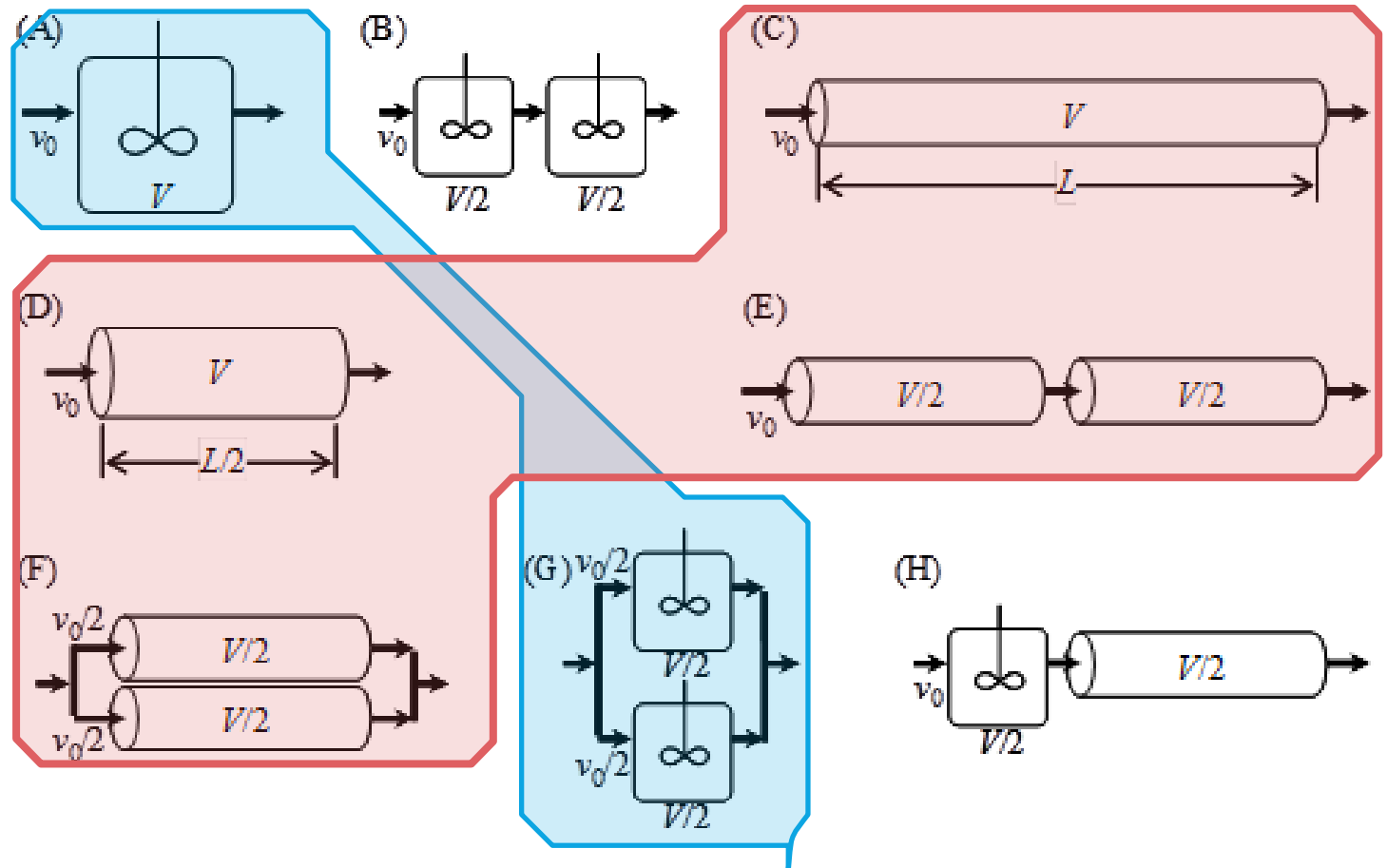
$= B$ 」のよ

うに答えよ。



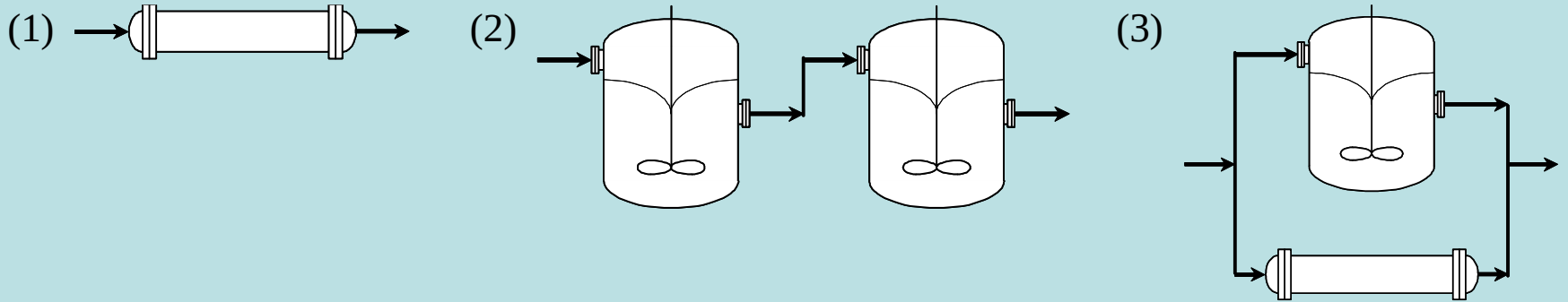
演習問題14.3 解 反応器形式と性能

PFRやCSTRでの反応率が形状によらず反応器体積だけで決まること, PFRでの反応率がCSTRでの反応率よりも高いことに留意すると, $C = D = E = F > H > B > A = G$



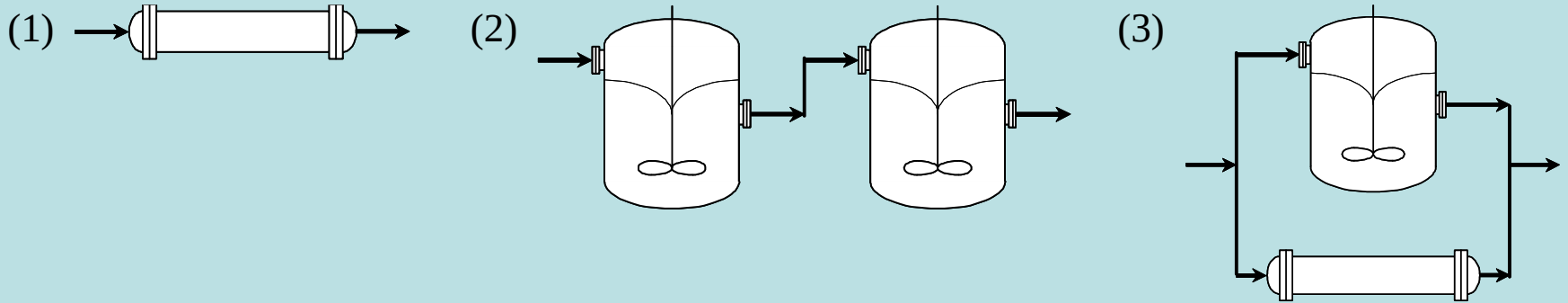
演習問題14.4 反応器形式と性能

$A \rightarrow C$ の反応速度が $r = k C_A / (1 + K C_A)$ で表されるとき、
同じ反応率を得るのに最も合計反応器体積が小さくなるの
は次の反応器のうちどの形式のものか？



演習問題14.4 解 反応器形式と性能

$A \rightarrow C$ の反応速度が $r = k C_A / (1 + K C_A)$ で表されるとき、
同じ反応率を得るのに最も合計反応器体積が小さくなるの
は次の反応器のうちどの形式のものか？



PFRがもっとも高い原料濃度で反応させられ、もっとも性能
が良いから、(1)。

6.5.1 回分反応器の設計

回分反応器

反応器体積
を決める

設定された反応率 → 反応時間

設計方程式 x_A vs. t

$$t = \text{func.}(x_A)$$

反応時間以外の必要時間 → 年間バッチ数

反応率と必要な生産速度 → 必要な原料仕込み量

反応量論 $n_C = (c/a) n_{A0} x_A$ $n_{A0} = (a/c) n_C / x_A$

原料仕込み量と原料モル濃度 → 反応器体積

濃度の定義 $C_{A0} = n_{A0} / V$ $V = n_{A0} / C_{A0}$

演習問題14.5 BR設計

$A + B \rightarrow C$, $r = kC_A$, $k = 0.04 \text{ min}^{-1}$, 定容系の液相反応を回分反応器で行い, $C_{A0} = 3 \text{ kmol m}^{-3}$, $x_A = 0.95$ で操作した。

- (a) 1回の反応に要する時間 t を求めよ。
- (b) 成分Cを一日に 300 kmol 生産するのに必要な反応器体積 V を求めよ。ただし, 反応以外に原料の仕込み, 生成物の抜き出しおよび反応器の洗浄に 90 min 必要とする。

演習問題14.5 解

(a) 定容系BRの設計方程式は $dn_A/dt = r_A V$,

$dC_A/dt = r_A = -kC_A$ 。積分すると $kt = -\ln(1 - x_A)$ 。

$$t = 74.893 \text{ min}$$

(b) 1バッチの操作時間は, $74.9 + 90 = 164.9 \text{ min}$

$(24 \times 60 \text{ min}) / (164.9 \text{ min}) = 8.7$ だから 1日8バッチ

生産速度は $\frac{2.85 \text{ kmol}}{164.9 \text{ min}} \frac{V}{\text{m}^3} = 24.9 \frac{\text{kmol}}{\text{day}} \frac{V}{\text{m}^3} = 300 \frac{\text{kmol}}{\text{day}}$

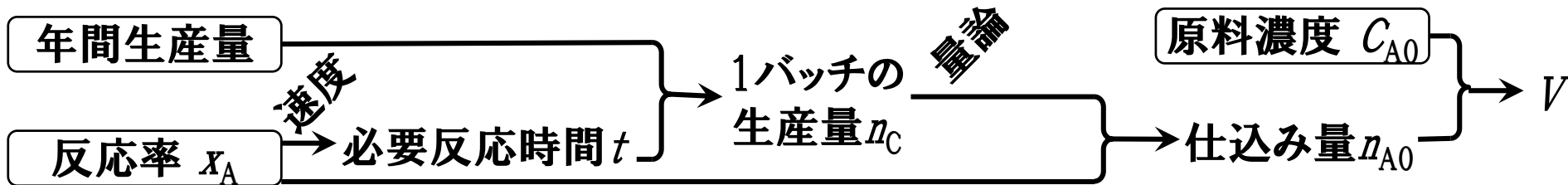
だから, 1バッチあたり $300/8 = 37.5 \text{ kmol}$ 生産。1バッチ

でのCの生成量は $n_C = n_{A0} x_A$ だから $n_{A0} = 39.47 \text{ kmol}$ 必要。

$n_{A0} = C_{A0} V$ だから $V = (39.47) / (3.00 \text{ kmol m}^{-3}) = 13.2 \text{ m}^3$

6.5 反応器設計

回分反応器の設計



流通反応器の設計

