

反応工学

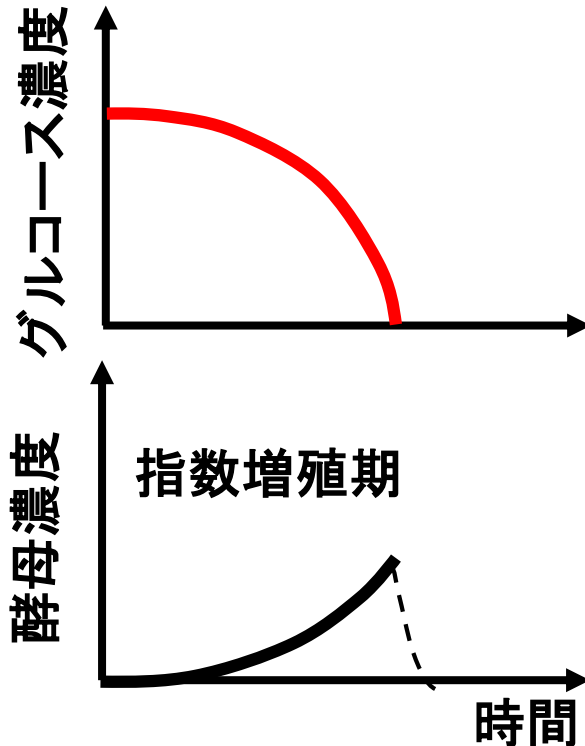
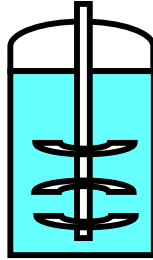
Reaction Engineering

講義時間(場所): 火曜2限(8-1A)・木曜2限(S-2A)
担当 : 山村

期末試験は2/12(火)で調整中

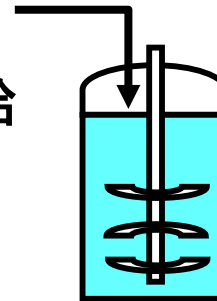
反応器内の濃度変化

回分型 (Batch Reactor)

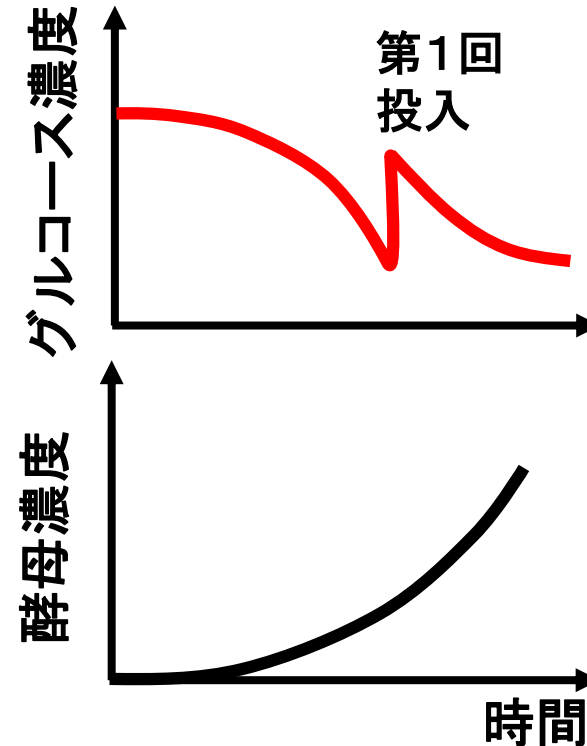


半回分型 (Semi-Batch Reactor)

グルコースを断続的に供給



教科書p.307



微生物反応の速度式(1)

パン酵母X

基質S

生成物(エタノール)P



反応速度r,
自触媒反応の1種

$Y_{X/S}$ [mol-微生物/mol-グルコース] は
酵母の収率係数

$Y_{P/S}$ [mol-代謝産物/mol-グルコース] は
エタノールの収率係数

(1) 個体維持に必要な基質
(グルコース)の量が無視小の場合:

$$r_X = Y_{X/S}r \quad (1)$$

$$r_S = -r \quad (2)$$

$$r_P = Y_{P/S}r \quad (3)$$

微生物反応の速度式(2)

Eqs (1),(2)より
$$-r_s = \frac{r_x}{Y_{x/s}}$$

(2) 個体維持を考慮する場合:

酵母濃度に比例して維持に消費される基質も増加するので

$$-r_s = \frac{r_x}{Y_{x/s}} + mC_x$$

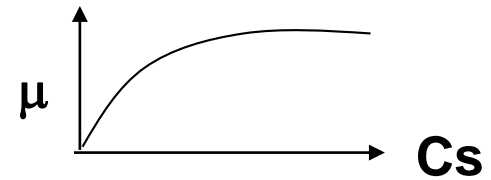
増殖を表す項 維持を表す項

m:維持係数

微生物反応の速度式(3) Monodモデル

酵母増殖の最も簡単なモデル:

$$r_X = \mu C_X \quad (4)$$



自触媒反応なので基質(グルコース)濃度 C_S と酵母濃度 C_X の関数

Monod(モノー)の実験式
(酵素反応と同じ形)

$$\mu(C_S) = \frac{\mu_{\max} C_S}{K_S + C_S} \quad (5)$$

(4)(5)より微生物の増殖速度 r_X はと基質反応速度 r_S は

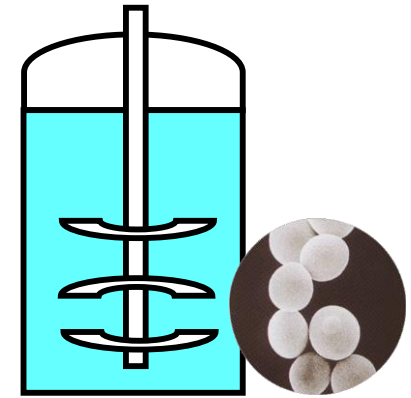
$$r_X = \mu C_X = \frac{\mu_{\max} C_S}{K_S + C_S} C_X \quad (6)$$

$$-r_S = \frac{r_X}{Y_{X/S}} + mC_X = \frac{1}{Y_{X/S}} \frac{\mu_{\max} C_S}{K_S + C_S} C_X + mC_X$$

回分型バイオリアクターの設計(1)

時間 Δt 間の酵母の物質収支を考える。

$$\begin{aligned} \text{モル数の変化} \Delta n_x &= \text{反応による生成量} r_x V \Delta t \\ &+ \text{反応器への流入量} F_{x0} \Delta t \\ &- \text{反応器からの流出量} F_x \Delta t \end{aligned}$$



体積 V

回分型反応器では $F_{x0} = F_x = 0$

時間 Δt が十分に小さければ、反応速度 r [mol/(m³s)] は一定と考えられるので、両辺を Δt で除すと

$$\frac{\Delta n_x}{\Delta t} = r_x V$$

$\Delta t \rightarrow 0$ の極限をとれば

$$\frac{dn_x}{dt} = r_x V$$

回分型バイオリアクターの設計(2)

定容系では $V=V_0$ だから、両辺を V_0 で除すと設計方程式は

$$\frac{dC_x}{dt} = r_x$$

簡単のため、Monodの式が成り立つ場合を考える

微生物の増殖速度 r_x は

$$r_X = \mu C_X = \frac{\mu_{\max} C_S}{K_S + C_S} C_X$$

設計方程式に代入して

$$\frac{dC_X}{dt} = r_X = \frac{\mu_{\max} C_S}{K_S + C_S} C_X$$

回分型バイオリアクターの設計(3)

基質の消費速度 r_S は

$$-r_S = \frac{r_X}{Y_{X/S}} + mC_X$$

設計方程式に代入して

$$\frac{dC_S}{dt} = r_S = -\left(\frac{r_X}{Y_{X/S}} + mC_X\right)$$

従って次式を連立して解けばよい

$$\begin{cases} \frac{dC_X}{dt} = r_X = \frac{\mu_{\max} C_S}{K_S + C_S} C_X \\ \frac{dC_S}{dt} = r_S = -\frac{r_X}{Y_{X/S}} - mC_X \end{cases}$$

回分型バイオリアクターの設計(4)

差分法(1次前進差分)を用いれば

$$C_X^{(n+1)} = C_X^{(n)} + \Delta t \cdot \frac{\mu_{\max} C_S^{(n)}}{K_S + C_S^{(n)}} C_X^{(n)}$$

$$C_S^{(n+1)} = C_S^{(n)} - \Delta t \cdot \frac{1}{Y_{X/S}^*} \frac{\mu_{\max} C_S^{(n)}}{K_S + C_S^{(n)}} C_X^{(n)} - \Delta t \cdot m C_X^{(n)}$$

$$\mu_{\max} = 0.84 h^{-1}$$

$$m = 0.05 h^{-1}$$

$$K_S = 0.074 mol / m^3$$

$$C_S^{(0)} = 10 mol / m^3$$

$$C_X^{(0)} = 0.1 mol / m^3$$

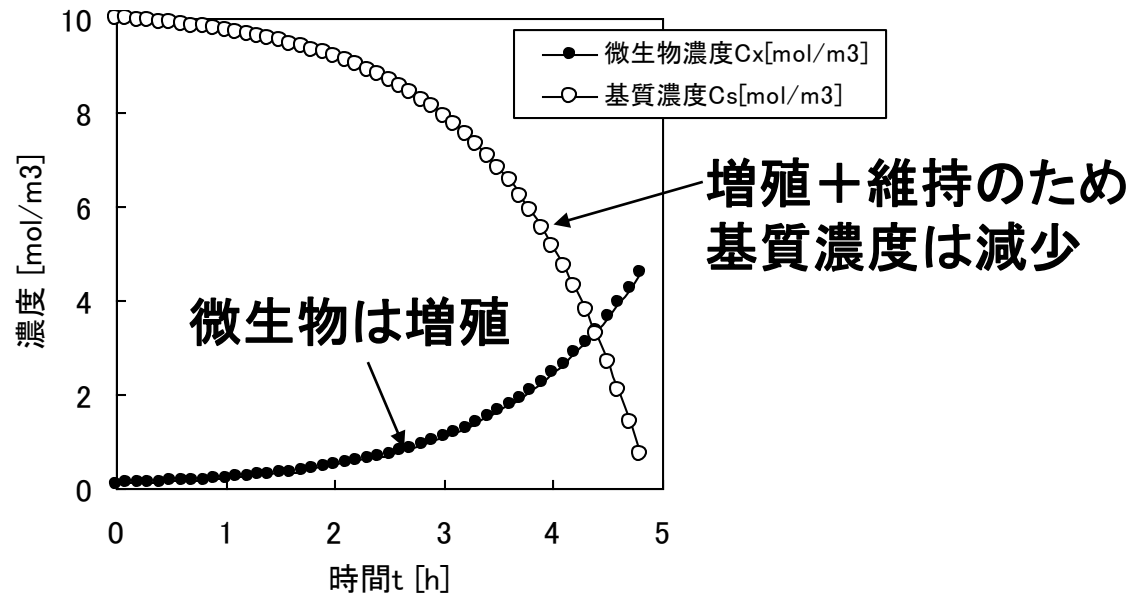
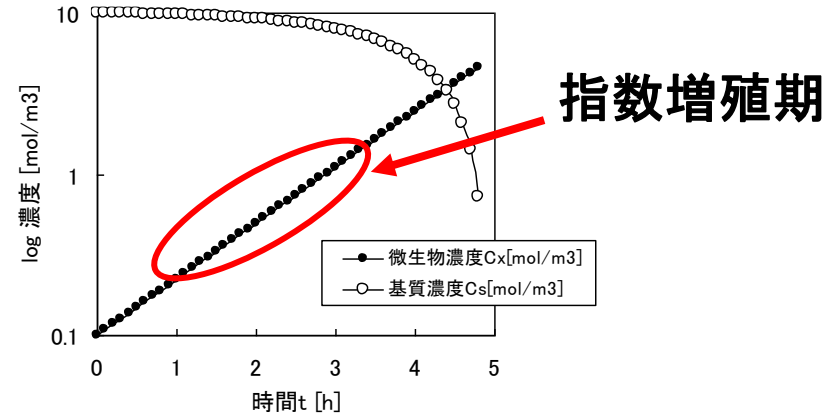
$$Y_{X/S}^* = 0.5$$

$$\Delta t = 0.1 h$$

の場合について解を求めると次ページ 9

回分型バイオリアクターの設計(5)

μ_{max}	0.84		
m	0.05		
K_s	0.074		
CS_0	10		
CX_0	0.1		
YX/S	0.5		
Δt	0.1		
t	CX	CX	
0	0.1	10	
0.1	0.108338	9.982823	
0.2	0.117372	9.964215	
0.3	0.127158	9.944055	
0.4	0.137761	9.922214	
0.5	0.149247	9.898553	
0.6	0.161691	9.872919	
0.7	0.175172	9.845149	
0.8	0.189776	9.815064	
0.9	0.205598	9.782471	
1	0.222739	9.747162	
1.1	0.241308	9.70891	
1.2	0.261424	9.66747	
1.3	0.283217	9.622578	
1.4	0.306826	9.573944	
1.5	0.332402	9.521259	
1.6	0.360108	9.464184	
1.7	0.390122	9.402355	
1.8	0.422637	9.335375	
1.9	0.457859	9.262817	



回分型バイオリアクターの設計(6)簡単な場合の解析解

仮定1 **維持**に必要な基質は、**増殖**に必要なそれに比べて非常に小さい

$$\frac{r_X}{Y_{X/S}} \gg mC_X$$

仮定2 **定数** K_S は基質濃度 C_S に比べて非常に小さい

$$C_S \gg K_S$$

この仮定が成り立つ場合、設計方程式は簡単になり

$$\begin{cases} \frac{dC_X}{dt} = r_X = \mu_{\max} C_X \\ \frac{dC_S}{dt} = r_S = -\frac{r_X}{Y_{X/S}} \end{cases}$$

回分型バイオリアクターの設計(7)簡単な場合の解析解

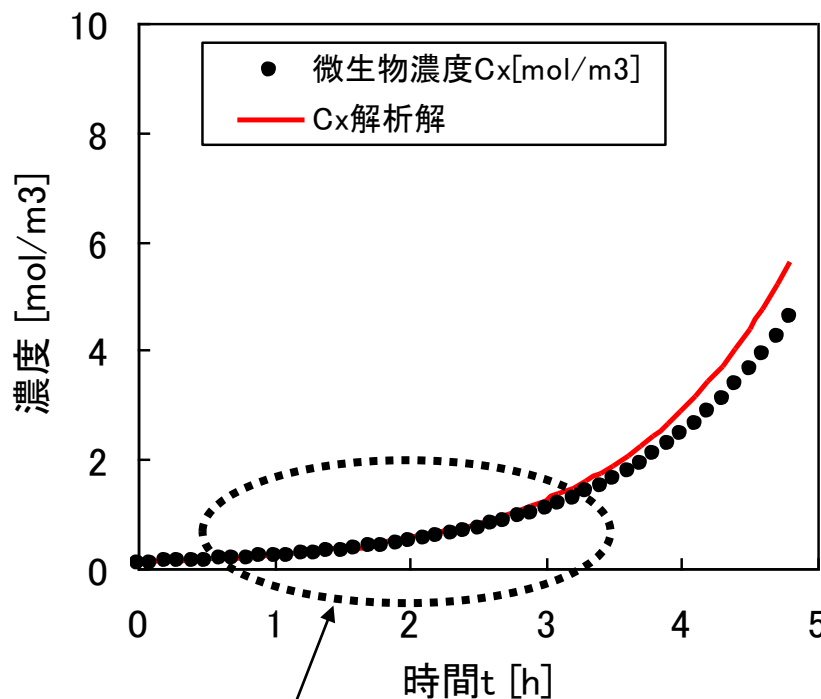
まず、微生物濃度 C_X に関する式を積分すると

$$\int_{C_{X0}}^{C_X} \frac{1}{C_X} dC_X = \int_0^t \mu_{\max} dt$$

$$\ln \frac{C_X}{C_{X0}} = \mu_{\max} t$$

$$\therefore \frac{C_X}{C_{X0}} = \exp(\mu_{\max} t)$$

指数増殖期を表している



培養初期では厳密解と解析解がよく一致

回分型バイオリアクターの設計(8)簡単な場合の解析解

次に基質濃度 C_S を考える。設計方程式から反応速度 r_x を消去すれば

$$Y_{X/S} \frac{dC_S}{dt} = -\frac{dC_X}{dt}$$

時間0～tまで積分すると

$$\int_0^t \left(Y_{X/S} \frac{dC_S}{dt} \right) dt = -\int_0^t \frac{dC_X}{dt} dt$$

積分区間に注意して変形すれば

$$\int_{C_{S0}}^{C_S} Y_{X/S} dC_S = -\int_{C_{X0}}^{C_X} dC_X$$
$$\therefore Y_{X/S} (C_S - C_{S0}) = -(C_X - C_{X0})$$

よって C_S は

$$C_S = C_{S0} - \frac{1}{Y_{X/S}} (C_X - C_{X0})$$

回分型バイオリアクターの設計(9)簡単な場合の解析解

$C_X = C_{X0} \exp(\mu_{\max} t)$ を代入して整理すれば

$$C_S = C_{S0} - \frac{1}{Y_{X/S}} (C_X - C_{X0})$$

$$\therefore C_S = C_{S0} - \frac{C_{X0}}{Y_{X/S}} [\exp(\mu_{\max} t) - 1]$$

全ての基質が消費されるまでの時間 t^* は

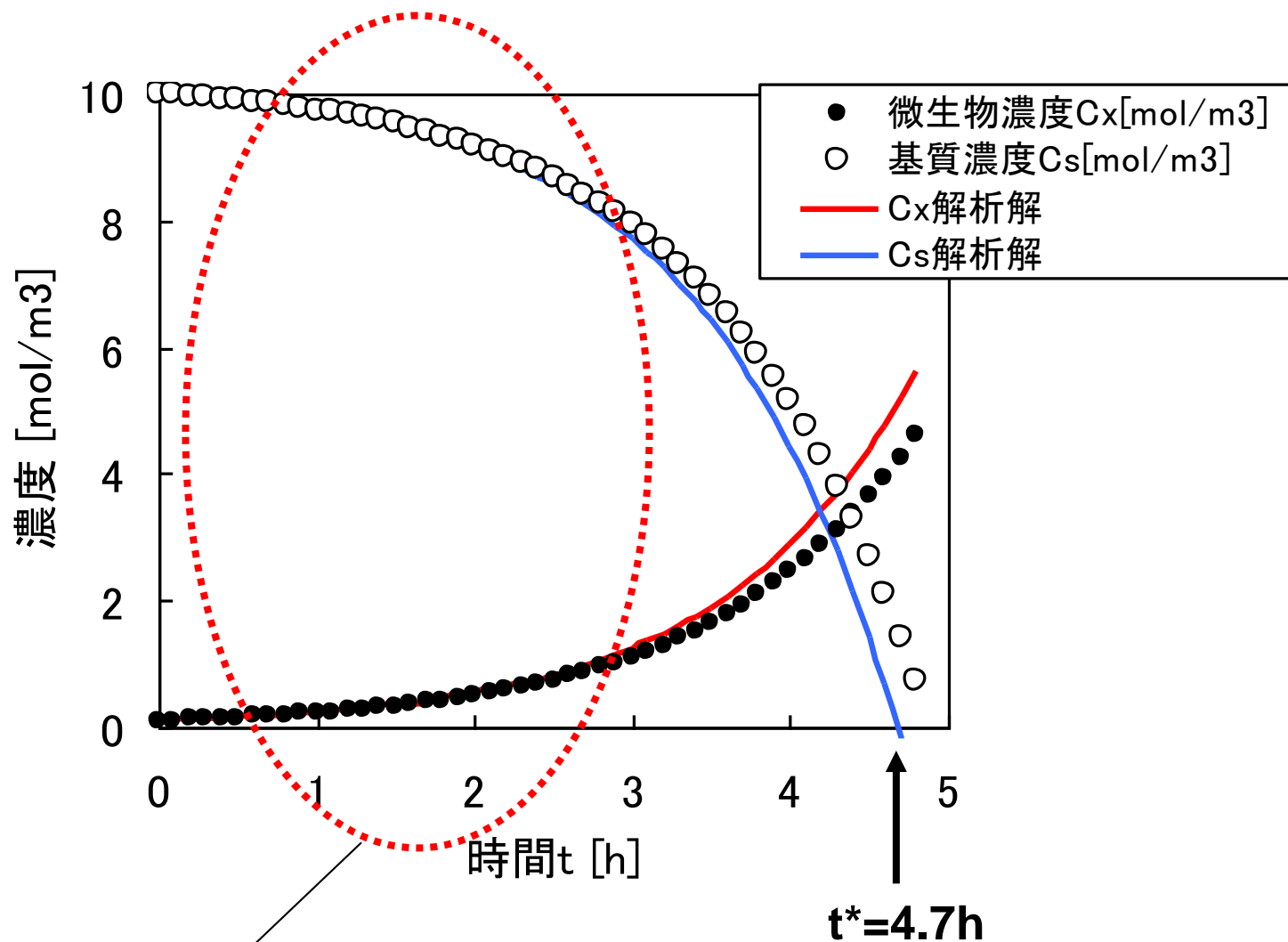
$$0 = C_{S0} - \frac{C_{X0}}{Y_{X/S}} [\exp(\mu_{\max} t^*) - 1]$$

$$\therefore t^* = \frac{1}{\mu_{\max}} \ln \left(1 + \frac{C_{S0} Y_{X/S}}{C_{X0}} \right)$$

$$\mu_{\max} = 0.84h^{-1}, C_S^{(0)} = 10mol/m^3, C_X^{(0)} = 0.1mol/m^3, Y_{X/S} = 0.5$$

のとき $t^* = 4.7h$

回分型バイオリアクターの設計(10)簡単な場合の解析解

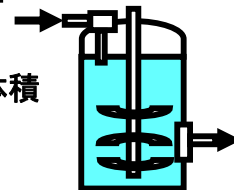


培養初期では厳密解と解析解がよく一致

ミッション:

- 単一反応、複合反応の反応速度を記述することができる
- 定常状態近似により反応速度式を導出することができる
- 律速段階近似により反応速度式を導出することができる
- 連続槽型反応器の設計方程式を導出することができる
- 回分反応器の設計方程式を導出することができる
- 管型反応器の設計方程式を導出することができる
- 自触媒反応器の最適設計ができる
- 回分ラボ実験データから実スケールの反応器体積を求めることができる
- 回分反応器を用いた簡単なバイオリアクターの設計ができる
- 回分反応器を用いた逐次並列反応の設計計算を行うことができる
- 非等温反応器の安定操作条件を算出することができる
- 晶析反応器の設計計算を行うことができる
- 未反応核モデルを用いて管型反応器内の粒子反応を設計できる

連続槽型バイオリアクターの設計 report 8 氏名 _____



液相(定容)連続槽型(1槽)反応器を用いてパン酵母の培養を行い、出口パン酵母のモル濃度 C_X を 45mol/m^3 としたい。パン酵母の増殖速度 $r_X[\text{mol}/(\text{m}^3\text{h})]$ は基質濃度 $C_S[\text{mol}/\text{m}^3]$ を用いて下のMonodモデルで表される。原料および生成物の体積流量は $v_0=0.08\text{m}^3/\text{h}$, 原料基質濃度 $C_{S0}=100\text{mol}/\text{m}^3$, 酵母の収率係数 $Y_{X/S}=0.5$, $K_S=2\text{mol}/\text{m}^3$, $\mu_{\max}=0.3\text{h}^{-1}$ であり、原料中に含まれるパン酵母は微量で $C_{X0}=0\text{mol}/\text{m}^3$ と近似できる。

$$r_X = \frac{\mu_{\max} C_S}{K_S + C_S} C_X$$

[問1] 定常状態での反応器の物質収支をとり次の設計方程式を導け。

ただし $V[\text{m}^3]$ は反応器体積である。 $0 = r_X V + C_{X0} v_0 - C_X v_0$

[問2] 問1の設計方程式にMonod式を代入することで、基質濃度 C_S が

次式で表されることを示せ。 $C_S = \frac{K_S}{\mu_{\max} (V/v_0) - 1}$

[問3] 出口基質濃度 C_S と出口パン酵母濃度 C_X との間には

$Y_{X/S}(C_S - C_{S0}) = -(C_X - C_{X0})$ の関係が成り立つ。このとき C_X は次式で表されることを示せ

$$C_X = Y_{X/S} \left[C_{S0} - \frac{K_S}{\mu_{\max} (V/v_0) - 1} \right]$$

[問4] 問3の結果を用いて、必要な反応器体積 $V[\text{m}^3]$ を求めよ。

[問5] 問3の結果を用いて、反応器体積 V と出口パン酵母濃度 C_X の関係を

右図にプロットし、 V が 0.272m^3 以上でなければ全ての酵母は増殖することなく反応器から流出(ウォッシュアウト)してしまうことを示せ。

