

# 「EQUATRAN-M」技術計算用連立方程式解法言語

(7)

## EQUATRAN-M を統計計算に活用する

工 東 光 夫\*

宮 原 昱 中\*\*

前回までは EQUATRAN-M の概要と基本的な使い方、主要な機能の紹介の後、各種化工計算の基礎から単位操作、プロセスシミュレーションに至る幅広い応用についてひと通り網羅したつもりである。そこで今回は視点を変えて EQUATRAN-M を統計計算に適用してみよう。

一口に統計と言ってもその内容は多様であり、確率・分布、多変量解析<sup>1)</sup>から品質管理<sup>2)</sup>あるいは実験計画法なども含まれる。ここでは多変量解析法を重点に、簡単な検定や基本統計量の算出法を紹介した後重回帰分析を中心にさまざまな近似をとりあげ、最後に主成分分析について述べることにする。

### 1. 基本統計量の算出

平均や分散、相関係数や偏相関係数などの基本統計量について EQUATRAN-M でどのように算出するか以下に例をあげて説明する。

#### <例題 7.1: 汙過工程の改造効果の検定>

汙過を行っている工程で、従来の方法では製品の収量の平均値が 108.50kg であった。収量を上げる目的で汙過装置の改造を行ったところ表 7-1 のようなデータが得られた。改造の効果があったといえるだろうか<sup>3)</sup>。

表 7-1 改造後の収量

(単位: kg)

108.4	109.3	109.6	108.9	109.9
110.4	109.6	110.0	109.2	109.4

解) いま従来法の平均を  $\mu$ 、改造後の分散を  $V$ 、データ数を  $n$  とする。もし収量に差がなければ次式より  $t_0$  を求めると、 $t_0$  は自由度  $(n-1)$  の  $t$  分布に従う。

$$t_0 = \frac{\bar{x} - \mu}{\sqrt{V/n}}$$

ここに  $\bar{x}$  は改造後の収量の平均値である。

したがって

$$t_0 > t(n-1, \alpha)$$

であれば有意水準  $\alpha$  で収量に差があると判定する。表 7-2 にリストと計算結果を示す。ここでは  $\alpha = 5\%$  および  $1\%$  で比較を行った。ただし検定の性質から片側検定のため  $\alpha$  の値を 2 倍にして  $t$  の値を求めてある (7~11 行目, 26~27 行目)。その結果有意水準  $1\%$  で収量に差がある、つまり改造効果があったと判定できる。

統計計算ではこの例のような  $t$  表を始めとして種々の分布表を使うことが多いが、EQUATRAN-M の TABLE 文により容易に組み込むことができる。また余裕をみて表を作っておけば、LOCAL 文で与えるデータ数に多少の増減があるケースにもそのまま使えて便利である。

\* Mitsuo Kudo 三井東圧化学(株)システム部主査

\*\* Koreatsu Miyahara 三井東圧化学(株)システム部次長

表 7-2 例題 7.1 の解

```

1: /* ろ過工程の改造効果の検定 */
2: LOCAL n=10
3: VAR yield(n), free(10), t10(10), t02(10)
4: TABLE t10 = table1( free )
5: TABLE t02 = table2( free )
6:
7: /* t-表 */
8: t10 = ( 1.943, 1.895, 1.860, 1.833, 1.812, ...
9:         1.796, 1.782, 1.771, 1.761, 1.753 )
10: t02 = ( 3.143, 2.998, 2.896, 2.821, 2.764, ...
11:         2.718, 2.681, 2.650, 2.624, 2.602 )
12: free = ( 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15 )
13:
14: /* 収量 [kg] */
15: yield = ( 108.4, 109.3, 109.6, 108.9, 109.9, ...
16:          110.4, 109.6, 110.0, 109.2, 109.4 )
17:
18: /* 従来法と改造法の平均 */
19: mu = 108.5 ; yav = SUM( yield ) / n
20:
21: /* 分散 */
22: V = SUM( ( yield - yav )^2 ) / ( n-1 )
23:
24: /* t の値 */
25: t0 = ( yav - mu ) / SQRT( V/n )
26: t5 = table1( n-1 )
27: t1 = table2( n-1 )
28:
29: OUTPUT V, yav, t0, t5, t1

```

[ 計算結果 ]  
V = 0.326778  
yav = 109.47  
t0 = 5.365936  
t5 = 1.933  
t1 = 2.821

<例題 7.2: ロータメータと流量の回帰分析>

あるプラントでロータメータの読み  $h$  [cm] と流量  $f$  [cc/min] を測定したところ表7-3 のようであった。このデータをもとに  $h$  と  $f$  の相関係数、次式で示される回帰式の偏回帰係数

表 7-3 ロータメータの読みと流量

No.	$f$ [cc/min]	$h$ [cm]
1	112	2.90
2	115	3.48
3	152	4.80
4	199	5.31
5	161	6.22
6	209	5.18
7	237	6.93
8	231	7.72
9	233	8.10
10	259	7.85
11	287	7.75
12	240	7.87
13	281	8.48
14	311	9.53
15	392	10.6
16	357	11.7

$b_0$  と  $b_1$

$$f = b_0 + b_1 h$$

および回帰式による  $f$  の計算値を求めよ<sup>4)</sup>。

解) 相関係数を  $r$  とすると、 $r$  は次式で表わせる。

$$r = S_{fh} / \sqrt{S_f S_h} \quad (7-2)$$

$$S_f = \sum_{i=1}^n (f_i - \bar{f})^2 \quad (7-3)$$

表 7-4 例題 7.2 の解

```

1: /* ロータメータと流量の回帰分析 */
2: LOCAL n=16
3: VAR f(n), h(n), fcal(n), span(n), fmin(n), fmax(n)
4: VAR free(10), t5(10)
5:
6: /* t-表 (両側確率 0.05) */
7: TABLE t5 = ttable( free )
8: free = ( 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20 )
9: t5 = ( 2.201, 2.179, 2.160, 2.145, 2.131, ...
10:        2.120, 2.110, 2.101, 2.093, 2.086 )
11:
12: /* f: 流量 [cc/min], h: ロータメータの読み [cm] */
13: f = ( 112, 115, 152, 199, 161, 209, 237, 231, ...
14:       233, 259, 287, 240, 281, 311, 392, 357 )
15: h = ( 2.90, 3.48, 4.80, 5.31, 6.22, 5.18, 6.93, ...
16:       7.72, 8.10, 7.85, 7.75, 7.87, 8.48, 9.53, ...
17:       10.6, 11.7 )
18:
19: /* 平均値 */
20: fav = SUM( f ) / n
21: hav = SUM( h ) / n
22:
23: /* 偏差平方和 */
24: sf = SUM( ( f - fav )^2 )
25: sh = SUM( ( h - hav )^2 )
26:
27: /* 相関係数 */
28: sfh = SUM( ( f - fav ) * ( h - hav ) )
29: r = sfh / SQRT( sf * sh )
30:
31: /* 偏回帰係数 */
32: b1 = SUM( f * ( h - hav ) ) / sh
33: b0 = fav - b1 * hav
34:
35: /* 流量の計算値 */
36: fcal = b0 + b1 * h
37:
38: /* 残差平方和 */
39: s = SUM( ( f - fcal )^2 )
40:
41: /* 流量の母平均の信頼限界 */
42: sfav = sqrt( ( sf - ( SUM( f * ( h - hav ) ) )^2 / ...
43:              sh ) / ( n - 2 ) )
44: span = sfav * sqrt( 1/n + ( h - hav )^2 / sh )
45: fmin = fcal - t * span
46: fmax = fcal + t * span
47: t = ttable( n - 2 )
48:
49: OUTPUT fav, hav, r, b0, b1, fcal, s
50: OUTPUT t, fmin, fmax

```

[ 計算結果 ]  
fav = 236  
hav = 7.15125  
r = 0.946963  
b0 = 13.794529  
b1 = 31.072256  
fcal =  
1) 103.904072    2) 121.92598    3) 162.941358    4) 178.788209  
5) 207.063962    6) 174.748815    7) 229.125263    8) 253.672346  
9) 265.479803    10) 257.711739    11) 254.604513    12) 258.333184  
13) 277.28726    14) 309.913129    15) 343.160443    16) 377.339925  
s = 9768.973023  
t = 2.145  
fmin =  
1) 74.561013    2) 95.598794    3) 142.875121    4) 160.773519  
5) 191.821116    6) 156.238326    7) 214.896907    8) 239.095763  
9) 250.197576    10) 242.930084    11) 239.984099    12) 243.516532  
13) 261.00327    14) 289.728814    15) 317.956533    16) 346.409813  
fmax =  
1) 133.24713    2) 148.253166    3) 183.007595    4) 196.802898  
5) 222.306807    6) 193.259305    7) 243.35362    8) 268.248928  
9) 280.762029    10) 272.493394    11) 269.224927    12) 273.149836  
13) 293.57125    14) 330.097443    15) 368.364353    16) 408.270036

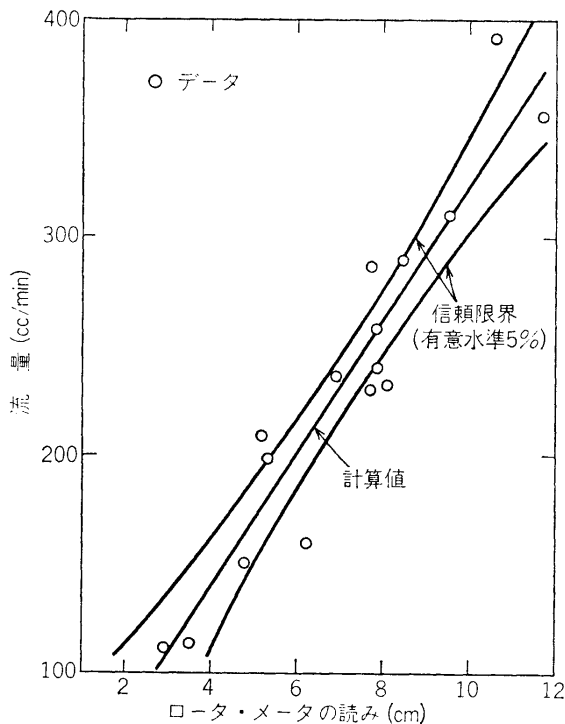


図 7-1 流量の計算値と信頼限界

$$S_h = \sum_{i=1}^n (h_i - \bar{h})^2 \quad (7-4)$$

$$S_{fh} = \sum_{i=1}^n (f_i - \bar{f})(h_i - \bar{h}) \quad (7-5)$$

ここに  $n$  はデータ数,  $\bar{f}$  および  $\bar{h}$  はそれぞれ流量およびロータメータの読みの平均値である。

また偏回帰係数  $b_1, b_0$  は

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^n \{f_i(h_i - \bar{h})\}}{S_h} \quad (7-6)$$

$$b_0 = \bar{f} - b_1 \bar{h} \quad (7-7)$$

により与えられる<sup>4)</sup>。

リストと計算結果を表 7-4 に示す。なおこのリストでは残差平方和 (38 行目) と流量の母平均の 95% 信頼限界 (41~46 行目) も求めている。7~10 行目は信頼限界を求めるのに使う表である。図 7-1 にデータ, 計算値および信頼限界を示す。

<例題 7.3: 攪拌槽実験データの解析>

通気攪拌槽において, 液相物質移動容量係数  $kLa$  に及ぼす操作変数の影響について検討するため, 攪拌回転数  $n_r$ , ガス線速度  $U_g$  を変えて純酸素の水中への吸収速度を測定した。異なった 2 つのタイプの攪拌槽 A と B で得たデータ

を表 7-5 と表 7-6 に示す。このような攪拌槽では次式

$$kLa = \alpha(U_g)^{\beta}(n_r)^{\gamma} \quad (7-8)$$

で相関できることが知られている。それぞれの攪拌槽でこの関係が成立するかどうか検討せよ<sup>5)</sup>。

表 7-5 A槽のデータ

$kLa$ [1/h]	$U_g$ [m/h]	$n_r$ [rpm]
3.51	2.49	55
5.93	3.52	60
8.84	4.51	66
9.87	6.32	73
17.6	8.26	78
19.2	8.34	85
26.1	9.45	92
29.7	11.2	99
39.5	12.3	105
43.1	12.4	111
33.9	13.0	107
38.5	13.4	101
32.1	15.1	96
33.3	15.2	92
26.9	15.6	87
24.1	16.1	83
21.3	17.9	78
19.2	19.7	72
20.9	20.2	67
15.7	21.0	63

表 7-6 B槽のデータ

$kLa$ [1/h]	$U_g$ [m/h]	$n_r$ [rpm]
3.53	9.49	55.1
5.93	16.1	59.7
8.85	24.8	66.0
9.87	27.4	73.0
17.6	47.0	78.3
19.3	50.4	84.8
26.0	70.1	91.8
29.7	72.2	99.5
39.6	90.9	105
42.9	124	111
33.8	95.6	107
38.5	99.5	101
32.1	101	95.6
33.4	83.9	91.8
26.8	67.4	87.4
24.0	63.4	83.1
21.3	66.0	78.3
19.1	53.5	72.2
20.9	55.1	66.7
15.6	34.5	62.8

解) (7-8) 式の両辺の対数をとって整理すると

$$\ln kLa = \ln \alpha + \beta \ln U_g + \gamma \ln n_r \quad (7-9)$$

となるので、表7-5と表7-6のデータをもとに  $\ln U_g$  および  $\ln n_r$  の中から  $\ln kLa$  と相関の強いものを選び出せばよい。ただし  $\ln U_g$  と  $\ln n_r$  の間にも相関があると考えられるので、 $\ln kLa$  と  $\ln U_g$  および  $\ln kLa$  と  $\ln n_r$  の相関係数の大小では判断できない。そこで、 $\ln n_r$  の影響を除いた  $\ln U_g$  と  $\ln kLa$  の相関係数、同様に  $\ln U_g$  の影響を除いた  $\ln n_r$  と  $\ln kLa$  の相関係数、すなわち偏相関係数の大小を調べればよい。変数3

表 7-7 例題7.3の解 (A槽)

```

1: /* 攪はん槽の実験データの解析 (A槽) */
2: LOCAL n=20,m=3
3: VAR kla(n),Ug(n),nr(n),r(m,m),x(m,n),S(m,m)
4:
5: /* 液相物質移動容量係数 [1/h] */
6: kla = ( 3.51, 5.93, 8.84, 9.87, 17.6, 19.2,...
7:         26.1, 29.7, 39.5, 43.1, 33.9, 38.5,...
8:         32.1, 33.3, 26.9, 24.1, 21.3, 19.2,...
9:         20.9, 15.7 )
10: /* ガス線速度 [m/h] */
11: Ug = ( 2.49, 3.52, 4.51, 6.32, 8.26, 8.34,...
12:        9.45, 11.2, 12.3, 12.4, 13.0, 13.4,...
13:        15.1, 15.2, 15.6, 16.1, 17.9, 19.7,...
14:        20.2, 21.0 )
15: /* 羽根タービンの回転数 [rpm] */
16: nr = ( 55, 60, 66, 73, 78, 85, 92, 99,...
17:        105, 111, 107, 101, 96, 92, 87, 83,...
18:        78, 72, 67, 63 )
19:
20: /* log 変換の平均 */
21: klaav = SUM( loge( kla ) ) / n
22: Ugav = SUM( loge( Ug ) ) / n
23: nrav = SUM( loge( nr ) ) / n
24:
25: /* 偏差 */
26: x(1) = loge( kla ) - klaav
27: x(2) = loge( Ug ) - Ugav
28: x(3) = loge( nr ) - nrav
29:
30: /* 偏差平方和 */
31: SUM( x(1)*x ) = S(1)
32: SUM( x(2)*x ) = S(2)
33: SUM( x(3)*x ) = S(3)
34:
35: /* 相関係数行列 */
36: r(1,1) = 1
37: r(1,2) = S(1,2) / sqrt( S(1,1) * S(2,2) )
38: r(1,3) = S(1,3) / sqrt( S(1,1) * S(3,3) )
39: r(2,1) = S(2,1) / sqrt( S(1,1) * S(2,2) )
40: r(2,2) = 1
41: r(2,3) = S(2,3) / sqrt( S(2,2) * S(3,3) )
42: r(3,1) = S(3,1) / sqrt( S(1,1) * S(3,3) )
43: r(3,2) = S(3,2) / sqrt( S(2,2) * S(3,3) )
44: r(3,3) = 1
45:
46: /* 偏相関係数 */
47: r12p3 = ( r(1,2) - r(1,3)*r(2,3) ) /
48:          sqrt( ( 1-r(1,3)^2 ) * ( 1-r(2,3)^2 ) )
49: r13p2 = ( r(1,3) - r(1,2)*r(2,3) ) /
50:          sqrt( ( 1-r(1,2)^2 ) * ( 1-r(2,3)^2 ) )
51:
52: OUTPUT S,r,r12p3,r13p2

```

[ 計算結果 ]

```

S =
( 1) 8.348927 5.854608 2.3318
( 2) 5.854608 6.708085 1.065301
( 3) 2.3318 1.065301 0.808707
r =
( 1) 1 0.782318 0.897388
( 2) 0.782318 1 0.45738
( 3) 0.897388 0.45738 1
r12p3 = 0.94772
r13p2 = 0.974116

```

表 7-8 例題7.3の解 (B槽)

```

1: /* 攪はん槽の実験データの解析 (B槽) */
2: LOCAL n=20,m=3
3: VAR kla(n),Ug(n),nr(n),r(m,m),x(m,n),S(m,m)
4:
5: /* 液相物質移動容量係数 [1/h] */
6: kla = ( 3.53, 5.93, 8.85, 9.87, 17.6, 19.3,...
7:         26.0, 29.7, 39.6, 42.9, 33.8, 38.5,...
8:         32.1, 33.4, 26.8, 24.0, 21.3, 19.1,...
9:         20.9, 15.6 )
10: /* ガス線速度 [m/h] */
11: Ug = ( 9.49, 16.1, 24.8, 27.4, 47.0, 50.4,...
12:        70.1, 72.2, 90.9, 124., 95.6, 99.5,...
13:        101., 83.9, 67.4, 63.4, 66.0, 53.5,...
14:        55.1, 34.5 )
15: /* 羽根タービンの回転数 [rpm] */
16: nr = ( 55.1, 59.7, 66.0, 73.0, 78.3, 84.8,...
17:        91.8, 99.5, 105., 111., 107., 101,...
18:        95.6, 91.8, 87.4, 83.1, 78.3, 72.2,...
19:        66.7, 62.8 )

```

(以下省略)

[ 計算結果 ]

```

S =
( 1) 8.320904 8.234544 2.333009
( 2) 8.234544 8.289685 2.341584
( 3) 2.333009 2.341584 0.812546
r =
( 1) 1 0.991479 0.897234
( 2) 0.991479 1 0.902229
( 3) 0.897234 0.902229 1
r12p3 = 0.955599
r13p2 = 0.047923

```

の影響を除いた変数1と変数2の偏相関係数  $r_{12 \cdot 3}$  は

$$r_{12 \cdot 3} = \frac{r_{12} - r_{13} \cdot r_{23}}{\sqrt{(1-r_{13}^2)(1-r_{23}^2)}} \quad (7-10)$$

変数2の影響を除いた変数1と変数3の偏相関係数  $r_{13 \cdot 2}$  も同様に求められる。表7-7に攪拌槽Aについてのリストと計算結果、表7-8に攪拌槽Bのデータ部分のみのリストと計算結果を示す。表7-7においても36~44行目は相関係数  $r_{ij}$ , 47~50行目が偏相関係数  $r_{i \cdot j}$  である。

結果よりA槽では  $\ln U_g$  および  $\ln n_r$ , B槽では  $\ln U_g$  のみが  $\ln kLa$  に寄与していることがわかる。

## 2. 重回帰分析と近似

ここでは重回帰分析を中心に EQUATRAN-M を用いた種々の近似の例を紹介する。

### <例題 7.4: 希薄塩酸の蒸気圧>

希薄塩酸水溶液の蒸気圧が電気化学的に測定されており<sup>6)</sup>, これを表7-9に示す。他の塩酸濃度, 他の温度について知るため次式で近似し

表 7-9 希薄塩酸の蒸気圧データ

塩酸濃度 [wt%HCl]	塩酸蒸気圧 [mmHg]					
	0°C	10°C	20°C	30°C	40°C	50°C
0.0364	$2.10 \times 10^{-9}$	$6.37 \times 10^{-9}$	$1.84 \times 10^{-8}$	$5.01 \times 10^{-8}$	$1.32 \times 10^{-7}$	$3.35 \times 10^{-7}$
0.1820	$4.46 \times 10^{-8}$	$1.35 \times 10^{-7}$	$3.88 \times 10^{-7}$	$1.06 \times 10^{-6}$	$2.79 \times 10^{-6}$	$7.00 \times 10^{-6}$
0.3633	$1.65 \times 10^{-7}$	$1.01 \times 10^{-6}$	$1.43 \times 10^{-6}$	$3.88 \times 10^{-6}$	$1.01 \times 10^{-5}$	$2.52 \times 10^{-5}$
0.724	$6.16 \times 10^{-7}$	$1.85 \times 10^{-6}$	$5.28 \times 10^{-6}$	$1.43 \times 10^{-5}$	$3.72 \times 10^{-5}$	$9.37 \times 10^{-5}$
1.790	$3.87 \times 10^{-6}$	$1.15 \times 10^{-5}$	$3.26 \times 10^{-5}$	$8.38 \times 10^{-5}$	$2.20 \times 10^{-4}$	$5.41 \times 10^{-4}$
3.513	$1.81 \times 10^{-5}$	$5.33 \times 10^{-5}$	$1.49 \times 10^{-4}$	$3.96 \times 10^{-4}$	$1.01 \times 10^{-3}$	$2.45 \times 10^{-3}$
6.796	$1.20 \times 10^{-4}$	$3.45 \times 10^{-4}$	$9.44 \times 10^{-4}$	$2.43 \times 10^{-3}$	$6.05 \times 10^{-3}$	0.0143
9.859	$4.68 \times 10^{-4}$	$1.32 \times 10^{-3}$	$3.51 \times 10^{-3}$	$8.88 \times 10^{-3}$	0.0211	0.0497

たい。

$$\ln P = A - B/T \quad (7-11)$$

ここに  $P$  は蒸気圧 [mmHg],  $T$  は温度 [K],  
 $A$  および  $B$  は

$$A = a_1 + a_2x + a_3x^2 + a_4x^3 + a_5x^4 + a_6x^5 \quad (7-12)$$

$$B = b_1 + b_2y + b_3y^2 + b_4y^3 + b_5y^4 + b_6y^5 \quad (7-13)$$

であり, 塩酸濃度を  $w$  [wt%HCl] とするとき,

$$x = \sqrt{w} \quad (7-14)$$

$$y = w + 1 \quad (7-15)$$

とする<sup>7)</sup>.  $a_1 \sim a_6, b_1 \sim b_6$  を求めよ.

解) 係数について線形であるのでここでは正規方程式により求めることにする. EQUATRAN-M で正規方程式を解く例はすでに紹介してある<sup>8)</sup>.  
ここでは蒸気圧データを 2次元の配列変数により表現して回帰係数を求めてみる. リストと結果を表7-10に示す. ここに 2次元配列  $P$  は蒸気圧データであり, そのため正規方程式 (46~57行目) は 2重に SUM を用いて表わされる.

このような問題を大型機の汎用プログラムで解こうとすると変数変換にきめ細かい配慮が充分なされていない場合にはユーザ自身が変換用のプログラムを書かねばならず, かえって手間がかかってしまう. EQUATRAN-M の便利さが理解されよう.

<例題 7.5: Antoine 式による蒸気圧の近似>

表7-11 にエタノールの蒸気圧データ<sup>9)</sup>を示す. これより Antoine 式

$$\log P = A - B/(t+C) \quad (7-16)$$

表 7-10 例題 7.4 の解

```

1: /*希薄塩酸の蒸気圧(塩酸濃度 9.859% 以下)*/
2: LOCAL n=8
3: VAR P(n,8),logP(n,6),v(n),t(6),x(n),T(6),...
4:   A(n),B(n),Pcal(n,6),y(n)
5:
6: /* 蒸気圧の近似式 */
7: A=a1+a2*x+a3*x^2+a4*x^3+a5*x^4+a6*x^5
8: B=b1+b2*y+b3*y^2+b4*y^3+b5*y^4+b6*y^5
9: logP = loge( Pcal )
10: logP(,1) = A - B / T(1)
11: logP(,2) = A - B / T(2)
12: logP(,3) = A - B / T(3)
13: logP(,4) = A - B / T(4)
14: logP(,5) = A - B / T(5)
15: logP(,6) = A - B / T(6)
16:
17: /* 変数変換 */
18: T = t + 273.15
19: x = sqrt( v )
20: y = v + 1
21:
22: /* 測定温度 [ °C ] */
23: t = ( 0, 10, 20, 30, 40, 50 )
24: /* 水溶液中塩酸濃度 [ wt% HCl ] */
25: v = ( 0.0364, 0.1820, 0.3633, 0.7240, ..
26:   1.790, 3.513, 6.796, 9.859 )
27: /* 塩酸の蒸気圧 [ mmHg ] */
28: P(1) = ( 2.10E-9,6.37E-9,1.84E-8,5.01E-8,...
29:   1.32E-7,3.35E-7 )
30: P(2) = ( 4.46E-8,1.35E-7,3.88E-7,1.06E-6,...
31:   2.79E-6,7.00E-6 )
32: P(3) = ( 1.65E-7,1.01E-6,1.43E-6,3.88E-6,...
33:   1.01E-5,2.52E-5 )
34: P(4) = ( 6.16E-7,1.85E-6,5.28E-6,1.43E-5,...
35:   3.72E-5,9.37E-5 )
36: P(5) = ( 3.87E-6,1.15E-5,3.26E-5,8.38E-5,...
37:   2.20E-4,5.41E-4 )
38: P(6) = ( 1.81E-5,5.33E-5,1.49E-4,3.96E-4,...
39:   1.01E-3,2.45E-3 )
40: P(7) = ( 1.20E-4,3.45E-4,9.44E-4,2.43E-3,...
41:   6.05E-3,0.0143 )
42: P(8) = ( 4.68E-4,1.32E-3,3.51E-3,8.88E-3,...
43:   0.0211 ,0.0497 )
44:
45: /* 正規方程式 */
46: SUM( SUM((loge(P)-logP) ) ) ) = 0
47: SUM( SUM((loge(P)-logP) ) * x ) ) = 0
48: SUM( SUM((loge(P)-logP) ) * x^2 ) ) = 0
49: SUM( SUM((loge(P)-logP) ) * x^3 ) ) = 0
50: SUM( SUM((loge(P)-logP) ) * x^4 ) ) = 0
51: SUM( SUM((loge(P)-logP) ) * x^5 ) ) = 0
52: SUM( SUM((loge(P)-logP)/T ) ) ) = 0
53: SUM( SUM((loge(P)-logP)/T ) * y ) ) = 0
54: SUM( SUM((loge(P)-logP)/T ) * y^2 ) ) = 0
55: SUM( SUM((loge(P)-logP)/T ) * y^3 ) ) = 0
56: SUM( SUM((loge(P)-logP)/T ) * y^4 ) ) = 0
57: SUM( SUM((loge(P)-logP)/T ) * y^5 ) ) = 0
58:
59: OUTPUT a1,a2,a3,a4,a5,a6,b1,b2,b3,b4,b5,b6
60: OUTPUT P,Pcal

```

表 7-10 例題 7.4 の解の続き

```
[ 計算結果 ]
a1 = 8.067994
a2 = 27.857194
a3 = -32.868771
a4 = 20.934117
a5 = -6.290952
a6 = 0.705381
b1 = 8838.01838
b2 = 110.271581
b3 = -187.882872
b4 = 64.662332
b5 = -8.226453
b6 = 0.34375
P =
( 1) ( 2) ( 3) ( 4) ( 5)
1) 2.100000E-009 6.370000E-009 1.840000E-008 5.010000E-008 1.320000E-007
2) 4.460000E-008 1.350000E-007 3.880000E-007 1.060000E-006 2.790000E-006
3) 1.650000E-007 1.010000E-006 1.430000E-006 3.880000E-006 1.010000E-005
4) 6.160000E-007 1.850000E-006 5.280000E-006 1.430000E-005 3.720000E-005
5) 3.870000E-006 1.150000E-005 3.260000E-005 8.380000E-005 0.00022
6) 1.810000E-005 5.330000E-005 0.000149 0.000396 0.00101
7) 0.00012 0.000345 0.000944 0.00243 0.00605
8) 0.000468 0.00132 0.00351 0.00888 0.0211
( 6)
1) 3.350000E-007
2) 7.000000E-006
3) 2.520000E-005
4) 9.370000E-005
5) 0.000541
6) 0.00245
7) 0.0143
8) 0.0497
Pcal =
( 1) ( 2) ( 3) ( 4) ( 5)
1) 2.098156E-009 6.557546E-009 1.896183E-008 5.112061E-008 1.293610E-007
2) 4.567112E-008 1.424458E-007 4.111061E-007 1.106344E-006 2.794909E-006
3) 1.791563E-007 5.572572E-007 1.604193E-006 4.306874E-006 1.085612E-005
4) 8.282865E-007 1.943577E-006 5.565542E-006 1.487374E-005 3.732452E-005
5) 3.803338E-006 1.163612E-005 3.298516E-005 8.729216E-005 0.000217
6) 1.745847E-005 5.368329E-005 0.000153 0.000406 0.001015
7) 0.000117 0.000348 0.000962 0.002488 0.006052
8) 0.000458 0.001327 0.003571 0.009006 0.021407
( 6)
1) 3.090691E-007
2) 6.867078E-006
3) 2.584287E-005
4) 8.847863E-005
5) 0.00051
6) 0.002395
7) 0.013937
8) 0.048229
```

の係数 A, B および C を決定せよ。ここに P は蒸気圧 [mmHg], t は温度 [°C] である。

表 7-11 エタノールの蒸気圧

温度 [°C]	78.4	97.5	126.0	151.8	183.0	203.0	218.0	230.0	242.0
蒸気圧 [atm]	1	2	5	10	20	30	40	50	60

解) 係数 C が既知ならば A と B について線形になるので単に正規方程式をたてて解けばよいが、C も未知数であることからここでは次のようにする。すなわち C の値を仮定して正規方程式を解いて A と B を求める。この A と B を用いてデータと計算値の残差平方和 SS

$$SS = \sum_{i=1}^n (\log P_i - \log P_i^{(A)})^2 \quad (7-17)$$

を求める。次に再び C の値を仮定し直して SS を求める。これをくり返して SS が最小になるまで続けられればよい。EQUATRAN-M では C を独立変

表 7-12 例題 7.5 の解

```
1: /* Antoine 式による蒸気圧の近似 */
2: LOCAL n=9
3: VAR t(n),p(n),logP(n),pcal(n)
4:
5: /* Ethanol の蒸気圧 t~p
6: t : 温度 [°C], p : 圧力 [atm] */
7: t = ( 78.4, 97.5, 126.0, 151.8, 183.0, ..
8: 203.0, 218.0, 230.0, 242.0 )
9: p = ( 1, 2, 5, 10, 20, 30, 40, 50, 60 )
10:
11: /* 計算値 */
12: logP = A - B / ( t + C ) - log10( 760 )
13: pcal = 10^( logP )
14:
15: /* A,B に関する正規方程式 */
16: SUM( log10( p ) - logP ) = 0
17: SUM( ( log10( p ) - logP ) / ( t + C ) ) = 0
18:
19: /* C に関する最適化 */
20: FIND( C # 230 [ 0, 500 ] ) MINIMIZE ss
21: ss = SUM( ( log10( p ) - logP )^2 )
22:
23: OUTPUT A,B,C,p,pcal,ss

[ 計算結果 ]
A = 7.818852
B = 1434.732376
C = 212.125284
p =
1) 1 2) 2 3) 5 4) 10
5) 20 6) 30 7) 40 8) 50
pcal =
1) 0.999149 2) 2.014967 3) 4.952683 4) 9.900483
5) 20.274769 6) 30.331578 7) 40.03345 8) 49.312503
9) 60.076753
ss = 0.000141
```

数, SS を目的関数とする最適化機能である FIND を用いて表わせる。リストと計算結果を表 7-12 に示す。

このように非線形な係数を含む場合でも EQUATRAN-M は手軽な表現で済むのが大きな特長である。

<例題 7.6 : 三成分系液液平衡の近似>

エタノール、ベンゼンおよび水の三成分系は、常圧の気液平衡条件下で表 7-13<sup>10,11)</sup> に示す。

表 7-13 エタノール-ベンゼン-水系液液平衡データ

[単位: モル%]

水 層			ベンゼン層		
エタノール	ベンゼン	水	エタノール	ベンゼン	水
0*	0.059*	99.941*	0*	98.78*	1.22*
4.8	0.1	95.1	2.0	96.3	1.7
7.7	0.2	92.1	4.6	93.3	2.1
22.5	2.1	75.4	23.2	66.4	10.4
27.7	4.8	67.5	28.1	55.5	16.4
33.1	13.3	53.6	33.9	33.0	33.1
34.8**	19.3**	45.9**			

\* 水-ベンゼン系の相互溶解度は文献<sup>11)</sup> による  
 \*\* プレートポイントは共役線により推定したものでその他は文献<sup>10)</sup> による

液液平衡を形成する。このデータをもとに水層、ベンゼン層各々におけるベンゼン濃度〔モル分率〕を水の濃度〔モル分率〕の関数として近似せよ。

ただし、(1)水-ベンゼン系相互溶解度は必ず通り、(2)プレートポイントでは滑らかかつ連続であるようにせよ。

解) この三成分系液液平衡データをプロットすると図7-2のようになる。そこで水層、ベンゼン層共に水の濃度の3次式で近似することにする。いま水の濃度を  $x$ 〔モル分率〕、ベンゼンの濃度を  $y$ 〔モル分率〕とすれば、 $y$  をデータ数、 $n_1$  をプレートポイントを表わすデータ番号として

$$\text{ベンゼン相} \quad y_{ci} = a_1 + a_2x_i + a_3x_i^2 + a_4x_i^3 \quad (i=1, 2, \dots, n_1) \quad (7-18)$$

$$\text{水相} \quad y_{ci} = b_1 + b_2x_i + b_3x_i^2 + b_4x_i^3 \quad (i=n_1, n_1+1, \dots, n) \quad (7-19)$$

で近似する。しかも制約条件を有することから、ラグランジュの未定乗数法により解くこととする<sup>8)</sup>。このとき目的関数を  $Q$  とすると、

$$Q = \sum_{i=1}^n (y_{ci} - y_i)^2 - \lambda_1(y_{c1} - y_1) - \lambda_2(y_{cn} - y_n) - \mu(y_{n_1(a)} - y_{n_1(b)}) - \nu(y'_{n_1(a)} - y'_{n_1(b)}) \quad (7-20)$$

ここに  $y_i$  は  $i$  番目のデータ、 $'$  は微係数、(a)、(b)はそれぞれ (7-18)、(7-19) 式からの計算値を

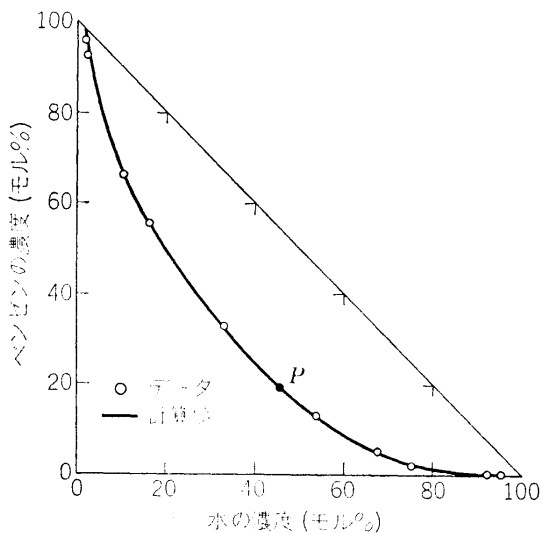


図 7-2 溶解度データと計算値

表 7-14 例題 7.6 の解

```

1: /* 3成分系溶解度曲線の近似 */
2: /* Ethanol - Benzene - Water 系の溶解度曲線
3: x - y : Water - Benzene 液液平衡データ */
4: /* n : データ数, n1 : プレートポイント */
5: LOCAL n=13,n1=7
6: VAR x(n),y(n),yc(n)
7:
8: /*Benzene相,Water相とも 3次関数で近似する*/
9:
10: /* ラグランジュの未定乗数法による係数の決定
11: L1,L2,Mu,Nu : ラグランジュ乗数 */
12:
13: /* Benzene 相 */
14: yc(1:n1)=a1+a2*x(1:n1)+a3*x(1:n1)^2+..
15:          a4*x(1:n1)^3
16: /* Water 相 */
17: yc(n1:n)=b1+b2*x(n1:n)+b3*x(n1:n)^2+..
18:          b4*x(n1:n)^3
19:
20: /* プレートポイントでの微係数 */
21: a2+2*a3*x(n1)+3*a4*x(n1)^2 = ..
22: b2+2*b3*x(n1)+3*b4*x(n1)^2
23:
24: /* 2成分系相互溶解度 */
25: yc(1:n) = y(1:n)
26:
27: /* ラグランジュの未定乗数法 */
28: SUM(yc(1:n1)-y(1:n1)) + L1 - Mu = 0
29: SUM((yc(1:n1)-y(1:n1))*x(1:n1)) + ..
30: L1*x(1) - Mu*x(n1) - Nu = 0
31: SUM((yc(1:n1)-y(1:n1))*x(1:n1)^2) + ..
32: L1*x(1)^2 - Mu*x(n1)^2 - 2*Mu*x(n1) = 0
33: SUM((yc(1:n1)-y(1:n1))*x(1:n1)^3) + ..
34: L1*x(1)^3 - Mu*x(n1)^3 - 3*Mu*x(n1)^2 = 0
35:
36: SUM(yc(n1:n)-y(n1:n)) + L2 + Mu = 0
37: SUM((yc(n1:n)-y(n1:n))*x(n1:n)) + ..
38: L2*x(n) + Mu*x(n1) + Nu = 0
39: SUM((yc(n1:n)-y(n1:n))*x(n1:n)^2) + ..
40: L2*x(n)^2 + Mu*x(n1)^2 + 2*Mu*x(n1) = 0
41: SUM((yc(n1:n)-y(n1:n))*x(n1:n)^3) + ..
42: L2*x(n)^3 + Mu*x(n1)^3 + 3*Mu*x(n1)^2 = 0
43:
44: /* データ */
45: x = (0.0122,0.017,0.021,0.104,0.164,0.331,..
46:      0.459, 0.536,0.675,0.754,0.921,0.951,..
47:      0.99941)
48: y = (0.9878,0.963,0.933,0.664,0.555,0.330,..
49:      0.193,0.133,0.048,0.021,0.002,0.001,..
50:      0.00059)
51:
52: OUTPUT a1,a2,a3,a4,b1,b2,b3,b4,x,y,yc

```

[ 計算結果 ]			
a1 =	1.039765		
a2 =	-4.375387		
a3 =	9.614153		
a4 =	-8.852851		
b1 =	1.3619		
b2 =	-4.247682		
b3 =	4.470654		
b4 =	-1.584316		
x =			
	1) 0.0122	2) 0.017	3) 0.021
	4) 0.104	5) 0.164	6) 0.331
	7) 0.459	8) 0.536	9) 0.675
	10) 0.754	11) 0.921	12) 0.951
	13) 0.99941		
y =			
	1) 0.9878	2) 0.963	3) 0.933
	4) 0.664	5) 0.555	6) 0.33
	7) 0.193	8) 0.133	9) 0.048
	10) 0.021	11) 0.002	12) 0.001
	13) 0.00059		
yc =			
	1) 0.9878	2) 0.968118	3) 0.95204
	4) 0.678753	5) 0.541734	6) 0.323802
	7) 0.200888	8) 0.125573	9) 0.044404
	10) 0.021651	11) 0.004261	12) 0.002971
	13) 0.00059		

表わす。  $\lambda_1, \lambda_2, \mu$  および  $\nu$  はラグランジュ定数であり、  $\lambda_1, \lambda_2$  は相互溶解度に対する、また  $\mu, \nu$  はプレートポイントでの制約条件にそれぞれ対応する。EQUATRAN-Mによるリストと計算結果を表7-14に示す。(7-18)、(7-19)式による計算値

を結ぶと図7-2の曲線を得る。

以上は回帰係数について線形であったが、次に非線形な例について述べる。

<例題7.7: TBP 蒸留曲線の近似>

石油精製分野でよく使われる TBP 蒸留曲線は経験的に次式で表わされる<sup>12)</sup>。

$$V = \left\{ 1 - e^{-\left(\frac{T-T^*}{T_f-T^*}\right)^\alpha} \right\} \times 100 \quad (7-21)$$

ここに、 $V$ は温度 $T$ における留出容積百分率、 $\alpha$ と $\beta$ は TBP 蒸留曲線のデータより定まる定数、 $T^*$ は初留点  $T_i$  と終点  $T_f$  により次式

$$T^* = \frac{T_i - T_f}{\beta} \quad (7-22)$$

で定義される無次元温度である。表7-15に与えた TBP 蒸留データ<sup>13)</sup>に(7-21)式をあてはめ、 $\alpha$ と $\beta$ を求めよ。

TBP [°F]	容積分率[%]
-160	0.1
155	5
242	10
377	20
499	30
609	40
707	50
805	60
907	70
1054	80
1219	90
1369	95
1467	100

解)  $\alpha$ と $\beta$ を未知数とし、目的関数を  $F$  とすると、

$$F = \sum_{i=1}^n (V_i - V_i^{cal})^2 \quad (7-23)$$

を最小にすればよい。ここに $n$ はデータ数、 $V_i$ および  $V_i^{cal}$  は $V$ の第 $i$ 番目のデータと計算値である。リストと計算結果を表7-16に示す。リストの内容は自明であろう。なおデータと計算値のプロットを図7-3に示す。

表 7-16 例題7.7の解

```

1: /* TBP 蒸留曲線の近似 */
2: LOCAL n=13
3: VAR Tf(n),Tc(n),V(n),Vcal(n),ta(n)
4:
5: /*データ: Tf: TBP [°F], V: 容積分率 [%]*/
6: Tf = ( -160, 155, 242, 377, 499, 609, 707,...
7:       805, 907, 1054, 1219, 1303, 1467 )
8: V = ( 0.1, 5, 10, 20, 30, 40, 50, 60,...
9:       70, 80, 90, 95, 100 )
10:
11: Tc = ( Tf - 32 ) / 1.8
12: ti = Tc(1) ; tf = Tc(n)
13: ta = ( Tc - ti ) / ( tf - ti )
14:
15: Vcal = ( 1-exp(-( ta/alpha )^beta ) ) * 100
16:
17: /* 目的関数 */
18: F = SUM( ( V - Vcal )^2 )
19:
20: /* 最適化 */
21: FIND ( alpha # 0.5 [ 0, 2 ] ...
22:       beta # 2.0 [ 1, 5 ] ) ..
23: MINIMIZE F UNTIL 0.1%
24:
25: OUTPUT Vcal,alpha,beta

```

[ 計算結果 ]

Vcal =  
1) 0                    2) 5.078814            3) 9.29961            4) 18.581758  
5) 29.395574          6) 40.414823          7) 50.584745          8) 60.484535  
9) 69.950651          10) 81.283782          11) 89.843259          12) 93.332915  
13) 97.153671  
alpha = 0.610476  
beta = 2.572392

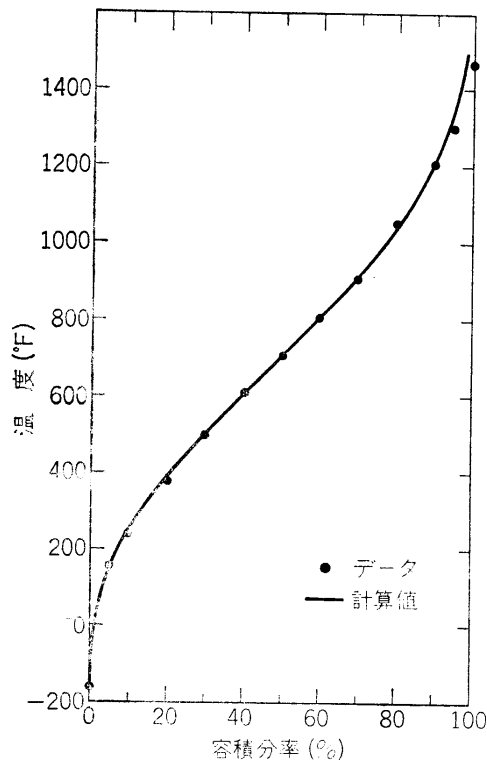


図 7-3 TBP 蒸留曲線のデータと計算値

### 3. 主成分分析

主成分分析<sup>14)</sup>は、変数が多くしかもそれらが互いに複雑に関連し合っているとき、変数を固有ベクトルで定まる軸(主成分という)に要約して現象のイメージをつかみやすくする手法である。



<例題 7.8：高度化成肥料の中間製品の解析>

高度化成肥料工場で中間製品の成分変動を解析するため1時間ごとにサンプリングをして30時間分の分析値を得た。その中から成分A, B, C, DおよびEについての相関係数は表7-17のようであった<sup>15)</sup>。この相関係数を用いて主成分分析を行なえ。

表 7-17 高度化成肥料中間製品の成分間の相関係数

A	B	C	D	E
1	0.916	0.982	0.834	-0.924
0.916	1	0.826	0.831	-0.827
0.982	0.826	1	0.792	-0.920
0.834	0.831	0.792	1	-0.853
-0.924	-0.827	-0.920	-0.853	1

解) 主成分分析においては、固有値および固有ベクトルを求めることが主要課題である。理論的な背景や詳細な検討は成書<sup>14)</sup>にゆずり、EQUATRAN-Mによるリストと計算結果を表7-18に示すのでこれを見てみよう。

相関係数行列Aは26~30行目で定義されている。このAに対し、7~11行目は固有値・固有ベクトルを求めるためのマクロである。13~17行目はマクロコール文であり、19~23行目の RESET文との組が5つあるので、5つの固有値・固有ベクトルをすべて求めることを意味している。

ところで、EQUATRAN-Mでは最初からすべての固有値を求めることはできないので、少しずつ範囲を区切って1ヶづつ見出す方法をとらざるを得ない。しかし、相関係数行列から求まる固有値の総和は変数の数nに等しい。すなわち、

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = n \quad (7-24)$$

であることを利用して適当な初期値から出発してどれか1つ固有値を見つけることはできるので、あとはその両側についてそれぞれ探してゆけば良い。これをくり返してすべての固有値・固有ベクトルが見つかるまで続ける。

このようにしてすべての固有値・固有ベクトルが求まったら、各固有値の寄与率(33~34行目)、各変数の各主成分との相関係数すなわち因子負荷

表 7-18 例題 7.8の解

```

1: /* 高度化成肥料の中間製品の主成分分析 */
2: GLOBAL n=5
3: VAR A(n,n),x1(n),x2(n),x3(n),x4(n),x5(n),...
4:   l(n),c(n),r(n,n),x(n,n)
5:
6: /* 固有値と固有ベクトルを求める */
7: MACRO Eigen
8: eq : SUM( A * x ) = lambda * x
9: vc : SUM( x^2 ) = 1
10: RESET x(n) BY vc UNTIL 0.001%
11: END Eigen
12:
13: ev1 : CALL Eigen( A=A,x=x1,lambda=l(1) )
14: ev2 : CALL Eigen( A=A,x=x2,lambda=l(2) )
15: ev3 : CALL Eigen( A=A,x=x3,lambda=l(3) )
16: ev4 : CALL Eigen( A=A,x=x4,lambda=l(4) )
17: ev5 : CALL Eigen( A=A,x=x5,lambda=l(5) )
18:
19: RESET l(5)#0.0006[0.0001,0.001] by ev5 eq(5)
20: RESET l(4)#0.06 [ 0.04 , 0.1 ] by ev4 eq(4)
21: RESET l(3)#0.19 [ 0.18 , 0.2 ] by ev3 eq(3)
22: RESET l(2)#0.25 [ 0.2 , 0.4 ] by ev2 eq(2)
23: RESET l(1)#4.5 [ 3 , 5 ] by ev1 eq(1)
24:
25: /* 成分間の相関係数 */
26: A = ( 1 , 0.916 , 0.982 , 0.834 , -0.924 )..
27:   ( 0.916 , 1 , 0.826 , 0.831 , -0.827 )..
28:   ( 0.982 , 0.826 , 1 , 0.792 , -0.920 )..
29:   ( 0.834 , 0.831 , 0.792 , 1 , -0.853 )..
30:   ( -0.924 , -0.827 , -0.920 , -0.853 , 1 )
31:
32: /* 寄与率 */
33: p = sum( l )
34: c = l / p
35:
36: /* 因子負荷量 */
37: r(,1) = sqrt( l ) * x(1)
38: r(,2) = sqrt( l ) * x(2)
39: r(,3) = sqrt( l ) * x(3)
40: r(,4) = sqrt( l ) * x(4)
41: r(,5) = sqrt( l ) * x(5)
42:
43: x(,1) = x1
44: x(,2) = x2
45: x(,3) = x3
46: x(,4) = x4
47: x(,5) = x5
48:
49: OUTPUT l,x1,x2,x3,x4,x5,p,c,r

```

[ 計算結果 ]

```

l =
1) 4.485251      2) 0.251091      3) 0.188073      4) 0.074948
5) 0.000638
x1 =
1) -0.464802    2) -0.438555      3) -0.451529      4) -0.428887
5) 0.451448
x2 =
1) -0.281969    2) 0.287459       3) -0.522354      4) 0.733677
5) 0.163504
x3 =
1) 0.183552     2) 0.771689       3) -0.113383      4) -0.409701
5) 0.436
x4 =
1) 0.239919     2) -0.246632      3) 0.438648       4) 0.331526
5) 0.761112
x5 =
1) -0.783073    2) 0.262122       3) 0.563917       4) -0.004069
5) 0.008553
p = 5.000001
c =
1) 0.89705      2) 0.050218       3) 0.037615       4) 0.01499
5) 0.000128
r =
( 1)      ( 2)      ( 3)      ( 4)      ( 5)
1) -0.984376 -0.92879 -0.956287 -0.908315 0.956095
2) -0.141292 0.144042 -0.261746 0.367638 0.08193
3) 0.079602 0.334661 -0.049171 -0.177877 0.189082
4) 0.065682 -0.067519 0.120087 0.090761 0.208367
5) -0.019786 0.006623 0.014248 -0.000103 0.000216

```

量も求めておく(37~41行目)。

表7-18より、大きい方から2つの固有値の寄与率は合わせて約95%であり、5つの変数の有する情報の95%を第1主成分と第2主成分で要約できる。そこでA~Eの因子負荷量を第1主成分を横軸  $z_1$ 、第2主成分を縦軸  $z_2$  とする座標にプロッ

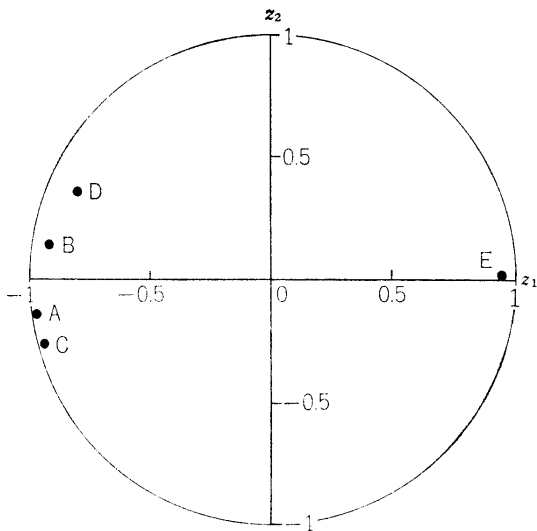


図 7-4 因子負荷量のプロット

トすると図 7-4 のようになり、A~D が近い位置にあるのに E だけが離れて特異である点が読みとれる。

以上、EQUATRAN-M の統計計算への活用法について述べてきた。ここで紹介したのは統計計算の一部に過ぎないが、EQUATRAN-M の守備範囲の広さは充分理解して頂けたと思う。なお、次回は今まで紹介していない電気、機械、計測な

どの分野についてとりあげる予定である。

#### 参考文献

- 1) 渡, 岸:「多変量解析プログラム集」, 工学図書 (1981).
- 2) 安部: 数理科学, No. 262, p. 10, APRIL (1985).
- 3) 石川, 藤森, 久米:「化学者および化学技術者のための統計的方法」, 東京化学同人, p. 141 (1982).
- 4) D. M. Himmelbrau: Process Analysis by Statistical Methods, John Wiley & Sons, Inc., p. 122 (1970).
- 5) 化学工学協会編:「BASIC による化学工学プログラミング」, 培風館, p. 190 (1985).
- 6) J. J. Fritz, C. R. Fuget: *Ind. Eng. Chem., Chem. Eng. Data Ser.*, 1, No. 1, p. 10 (1956).
- 7) J. N. Stone: *Chemical Engineering*, Sep. 16, p. 102 (1985).
- 8) 宮原, 林田, 須藤: 分離技術, 15, No. 5, p. 281 (1985).
- 9) R. H. Perry et al.: *Chemical Engineers' Handbook*, 5th. ed., McGraw-Hill, p. 3-62 (1973).
- 10) 平田訳:「気液平衡データブック」, 講談社, p. 1064 (1974).
- 11) *Technical Data Book-Petroleum Refining*, American Petroleum Institute 2nd. ed. Chap. 9, (1970).
- 12) H. Dhulesia: *Hydrocarbon Processing*, September, p. 179 (1984).
- 13) R. H. Perry et al.: *Chemical Engineers' Handbook*, 6th. ed., McGraw-Hill, p. 13-80 (1984).
- 14) 奥野ら:「多変量解析法」, 日科技連出版社(1971).
- 15) 安部: 化学工学, 47, No. 3, p. 155 (1983).