

「EQUATRAN-M」技術計算用連立方程式解法言語

(2)

EQUATRAN-M のより進んだ機能

佐渡友 秀 夫*

宮 原 昱 中**

前回は EQUATRAN-M の基本的な機能と使い方を説明したが、今回は複雑な問題を扱う際に役立つ高度な表記法、技術者・研究者の固有技術を生かす効率的な計算法の指定について詳しく述べる。

1. くり返し計算法の指定

線形連立方程式を解くにはくり返し計算をせず直接的に解くことができるが、一般に非線形方程式についてはくり返し計算を必要とする。EQUATRAN-M は与えられた非線形方程式を含む方程式群を解釈し、自動的に計算手順を生成して答を求めることを例題 1.1 で示した。多くの場合はこれでうまくいくが時には収束に達しないことがある。収束しない原因はいくつかあるが、最も大きなものは情報が不足していることである。どの変数をくり返し修正の対象に選びいかなる値の範囲で反復修正するか、どの方程式で収束の判定をし、そのときの許容誤差をいか程にとるかは適切なくり返し計算をする上で重要なことである。また、方程式の形が問題になることもある。そのときは方程式を少し変形すると容易に収束することをよく経験する。EQUATRAN-M は標準的な場合に妥当であろうとの基準に従いこれらを自動的に決定する。問題を与える側（ユーザー）は専門

家としてその問題の物理的・化学的性質に通じており、どの変数と方程式を選ぶのが適切か、変数の取りうる範囲と概略値の目途、また必要ならば方程式の好ましい変形についての知識をもっている。EQUATRAN-M ではこの専門家の知識を活かして効率的な計算を実行するよう指示ができる。特に、くり返し変数が2つ以上になるとこの情報は非常に効果的である。

<例題 2.1：気液平衡関係>

アセトン-メタノール系の気液平衡関係を求めよ。ただし、蒸気圧 P^0 [mmHg] は Antoine 式(2-1)で(定数は表 2-1)、活量係数 γ_1 は液相モル分率 x の関数として Wilson 式(2-2)で表わされ、そのパラメータは $A_{12}=0.65675$, $A_{21}=0.77204$ である¹⁾。

$$\log_{10} P^0 = a - b / (c + t) \quad (2-1)$$

$$\begin{aligned} \ln \gamma_1 = & -\ln(x_1 + A_{12}x_2) \\ & + x_2 \left(\frac{A_{12}}{x_1 + A_{12}x_2} - \frac{A_{21}}{A_{21}x_1 + x_2} \right) \\ \ln \gamma_2 = & -\ln(A_{21}x_1 + x_2) \\ & - x_1 \left(\frac{A_{12}}{x_1 + A_{12}x_2} - \frac{A_{21}}{A_{21}x_1 + x_2} \right) \end{aligned} \quad (2-2)$$

表 2-1 Antoine 式の定数

	アセトン	メタノール
a	7.02447	7.87868
b	1161.00	1473.11
c	224.0	230.0

* Hideo Sadotomo 三井東圧化学(株) システム部主席部長

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

解) 全圧と液組成を与えて解く場合の考え方は例題 1.1 と全く同じであるが, 本系のような非理想系では活量係数が導入される分だけ非線形性が強くなり収束しにくい。つまり, (1-2) 式の代りに次式が使われる。

$$P y_i = \gamma_i P_i^{\circ} x_i \quad (i=1, 2) \quad (2-3)$$

ここでは, 変域と概略値がつかみ易い温度 t をくり返し変数とし, t の影響を最もよく反映する方程式 $\sum_{i=1}^2 y_i = 1$ が満足されるか否かで収束の判定をする。本例題のリストを計算結果とともに表 2-2 に示す。なお, リストではパラメータ A の代りに A を当てている。

くり返し計算に関する情報は第 30 行の RESET 文で与えられる。

RESET 文の一般形は,

```
RESET 変数名【#初期値】【[下限, 上限]】
BY ラベル【UNTIL 許容誤差】
```

【 】は省略可能であることを示している。

表 2-2 で説明すると, くり返し変数 t の初期値を 50°C, 変域を 0~200°C とし, EQ とラベルされた方程式

表 2-2 例題 2.1 の解

```
1: /* 気液平衡関係 */
2:
3: /* P : 全圧          [ mmHg ]
4:    P0 : 分圧         [ mmHg ]
5:    t  : 温度         [ °C ]
6:    x  : 液相モル分率 [ - ]
7:    y  : 気相モル分率 [ - ]
8:    g  : 活量係数     [ - ] */
9:
10: VAR P0(2), x(2), y(2), g(2), a(2), b(2), c(2)
11:
12: log10(P0) = a - b/(c + t) /* Antoine 式 */
13:
14: /* acetone methanol */
15: a = ( 7.02447, 7.87868 )
16: b = ( 1161.00, 1473.11 )
17: c = ( 224.00, 230.00 )
18:
19: /* Wilson parameter */
20: A12 = 0.85675 ; A21 = 0.77204
21:
22: loge(g(1)) = -loge(x(1)+A12*x(2)) ...
23: +x(2)*(A12/(x(1)+A21*x(2))-A21/(A21*x(1)+x(2)))
24: loge(g(2)) = -loge(A21*x(1)+x(2)) ...
25: -x(1)*(A12/(x(1)+A21*x(2))-A21/(A21*x(1)+x(2)))
26: P * y = P0 * g * x
27: EQ:SUM(y) = 1
28:    SUM(x) = 1
29:
30: RESET t#50 [0.200] BY EQ UNTIL 0.01%
31: INPUT P,x(1) ; OUTPUT t,x,y,g
```

```
[ 入力値(=) または 初期値(≠) ]
P          = 760
x(1)      = 0.2
t         = 50
```

```
[ 計算結果 ]
t = 59.816269
x =
1) 0.2          2) 0.8
y =
1) 0.310069    2) 0.889932
g =
1) 1.372293    2) 1.048962
```

(第 27 行) の左辺と右辺の式の値の誤差が 0.01% 以下になるまで修正反復しなさいということになる。なお, 下限と上限を省略すると -10000 と 10000 が, 許容誤差として 0.1% が設定される (省略値は変更可能である)。例題 1.1 のように EQUATRAN-M がくり返し計算手順を発生したときも省略値がとられる。もちろん, 本例題も RESET 文の指定なしでも解けるが, 迅速で確実な収束を得るためには持てる情報 (知識) を正しく与えてやりたい注)。

2. 条件により式が異なるとき

工学の問題では基準となる変数の値により適用されるべき式が異なることがよくある。特に, 流れの問題では Reynolds 数 (Re) により別な式に整理される。

<例題 2.2: 管内流れの圧力損失>

内径 D [m], 管長 l [m] なる円管内を流体が流量 Q [m³/s] で流れるとき圧力損失 ΔP [Kg/cm²] は

$$\Delta P = 4f(\rho \bar{u}^2 / 2g_c)(l/D) \quad (2-4)$$

$$Q = (\pi D^2 / 4) \bar{u} \quad (2-5)$$

ここで, \bar{u} は平均流速 [m/s], g_c は重力換算係数であり, f は管摩擦係数で $Re (= \rho \bar{u} D / \mu)$ の関数として次式で与えられる²⁾。

$$f = 16/Re \quad Re \leq 3 \times 10^3$$

$$1/\sqrt{f} = 4 \log_{10}(Re \sqrt{f}) - 0.4 \quad 3 \times 10^3 < Re < 3 \times 10^6 \quad (2-6)$$

解) (2-6) 式で $1/\sqrt{f} = F$ と置き換えると

$$F = \begin{cases} \sqrt{Re}/4 & Re < 3 \times 10^3 \\ 4 \log_{10}(Re/F) - 0.4 & 3 \times 10^3 < Re < 3 \times 10^6 \end{cases}$$

となる。そこで, 常温の水 (密度 $\rho = 1,000 \text{ kg/m}^3$, 粘度 $\mu = 0.001 \text{ kg/m}\cdot\text{s}$) について, Q を与えて ΔP を求める場合を記述したのが表 2-3 である。 Re の値に応じいずれかの式で F を求めてくれる。なお, 本例題で ΔP を与えて逆に Q を求めるには INPUT 文と OUTPUT 文で Q と dP を入れ替えるだけでよいし, ΔP と Q を与えて D を決めるのにも同様である。操作型問題 (装置条件を与えて操作状態をシミュレー

注) 同様に, 例題 1.1 の解も表 2-2 に倣って RESET 文を指定することにより収束性は改善される。

表 2-3 例題 2.2 の解

```

1: /* 円管内流動 */
2:
3: /* Q 流量 [m3/s]
4:    Re レイノルス数 [-]
5:    dP 圧力損失 [Kg/m2]
6:    u 流速 [m/s]
7:    D 管径 [m]
8:    l 配管長 [m]
9:    f 管摩擦係数 [-]
10: */
11: pi = 3.14159 ; gc = 9.8
12: ro = 1000 /* (kg/m3) */
13: mu = 0.001 /* (kg/m/s) */
14:
15: Q = pi*D^2*u/4
16: dP = 4*f*(ro*u^2/(2*gc))*(l/D)
17: Re = ro*u*D/mu
18: 1/sqrt(f) = F
19: EQ:F = sqrt(Re)/4 when Re<=3.0E3 ...
20:    = 4.0*log10(Re/F)-0.4 when Re>3.0E3 & Re<3.0E6
21:    reset F # 20 [0,1000] by EQ
22:
23: input Q, D, l
24: output f, Re, u, dP

[ 入力値(=) または 初期値(#) ]
Q
D
l
F

[ 計算結果 ]
f = 0.002797
Re = 1.273241E+006
u = 12.732406
dP = 9252.377355
    
```

表 2-4 論理演算記号

==	等しい	!=	等しくない
<	小さい	>	大きい
<=	小さいか等しい	>=	大きい等しい
&	論理積		論理和
!	否定		

トする) と設計型問題 (操作条件から装置のサイズを決める) の使い分けは EQUATRAN-M の得意とするところである。

このように、条件変数の値により支配する方程式が異なるときも、WHEN 文によりまとめて扱うことができる。

```

変数名=式1    WHEN 条件式1
    =式2    WHEN 条件式2
    
```

WHEN 文のときだけ等号の左辺は式でなく変数であること、条件式は論理式でそれが成り立つときに対応する式が採用されることに注意されたい。なお、論理演算記号を表 2-4 にまとめておく。

3. 数表や線図の組み込み

2つの変数の間の関係が式によって表現される場合もあれば、数表や線図で与えられることもある。通常、実測値は後者の形で得られ、データから近似式を作って使うこともあるが、表形式でデータを与え直線補間をして利用できると大変便利である。

表 2-5 例題 2.3 の解

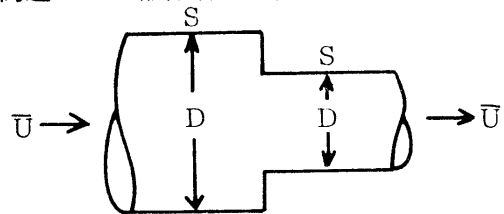
```

1: /* 縮流管での圧損 */
2:
3: /* D : 管径 [m]
4:    S : 断面積 [m2]
5:    u : 流速 [m/s]
6:    c : 縮流係数 [-]
7:    dP : 圧力損失 [Kg/m2]
8: */
9: var S(10), c(10)
10: TABLE c = cont( S )
11: S=(0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0)
12: c=(0.61,0.61,0.63,0.65,0.67,0.70,0.73,0.77,0.84,1.0)
13:
14: pi = 3.14159 ; gc = 9.8
15: ro = 1000
16:
17: dP = ((1/cont(S2/S1))-1)^2*ro*u^2/(2*gc)
18: u2 = Q/S2
19: S1 = pi*D1^2/4 ; S2 = pi*D2^2/4
20: INPUT D1, D2, Q ; OUTPUT u2, dP

[ 入力値(=) または 初期値(#) ]
D1 = 0.1
D2 = 0.05
Q = 0.02

[ 計算結果 ]
u2 = 10.185925
dP = 1988.51416
    
```

<例題 2.3 : 縮流管での圧力損失>



図のような管路で断面積 S が急激に縮小している部分では次式で示す圧損が生ずる。

$$\Delta P = \left\{ \left(\frac{1}{c} \right) - 1 \right\}^2 \rho \bar{u}^2 / (2gc) \quad (2-7)$$

ただし、縮流係数 c [-] は次表で与えられる³⁾。

縮流係数 c

S_2/S_1	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
c	0.61	0.61	0.63	0.65	0.67	0.70	0.73	0.77	0.84	1.00

例題 2.2 の系で管径が $D_1=0.1\text{m}$ から $D_2=0.05\text{m}$ になるときの圧損を求めよ。

解) リストと計算例を表 2-5 に示す。縮流係数表の S_2/S_1 を S として第 10~12 行で数表の定義をし、縮流係数をあたかも cont という名前の関数のごとくに第 17 行で使用している。

数表を定義するには 2 つの変数をデータ数だけの配列として宣言しておき、TABLE 文で数表名をつけて関係づける。

いま、一般に 2 つの変数を X と Y で説明すると、

```

VAR X(n), Y(n)
TABLE Y=数表名(X) 【REV】
    X = (数値1, 数値2, …, 数値n)
    Y = (数値1', 数値2', …, 数値n')
    
```

と定義し(数値1と数値1', 数値2と数値2', ……が対応している), 実際にXに属する任意のxに対するYの値(Y)を求めるには

$$y = \text{数表名}(x)$$

とするか, 直接式の中に組み入れて使う. なお, 数表の宣言の後に REV を付すとYの値を与えてXの値を逆引きすることを可能にする(ただし, あるYの値に対応するXの値が1つだけのとき意味がある).

さらに, 二次元の数表も表現できるので, パラメータ変数を介した複数本の線図が扱える. このように EQUATRAN-M の数表機能は応用範囲が広い.

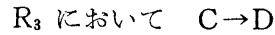
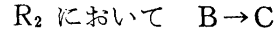
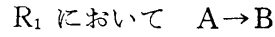
4. 大きな問題の表現 (配列変数)

前回配列変数の表記法を紹介し, ベクトルを用いると多成分の問題が簡潔に表現できることを示した. ところで化学プロセスを考えてみると各ストリーム(機器間を結ぶ配管に相当する)の流れはそこに含まれる成分毎の流量から構成され, それらのストリームが組合されてプロセスを形成している. 従って, ストリームを成分流量を要素とするベクトルとして捉えると便利である. EQUATRAN-M ではベクトルの集まりをマトリクス(二次元配列)として表記できるので, プロセスの物質収支問題はマトリクスを用いると方程式の表現が極めて簡単明瞭になる. プロセス物質収支に限らず, 大きな問題を扱うには配列変数による記法が必須である.

<例題 2.4: プロセスの物質収支>

図2-1のような仮想プロセスの物質収支を考える⁴⁾. ()内の数字はストリーム番号で, ストリームに記されている数字は成分番号であり, 添字のsは量的に少ないことを示している.

Rは反応器で,



なる逐次反応がおき, 反応器入口での原系成分のモル分率をxとすると転化率bはいずれも

$$b = 0.80x + 0.10 - x(x - 0.5)(x - 1) \quad (2-7)$$

で与えられる. また, Sは分離器で供給される成分のうち下側へ出る割合は次表の通りである. いま, A成分のみからなるフレッシュフィードが1,000kg/h 供給されるとき全系の物質収支を求めよ.

	分離率			
	A	B	C	D
S ₁	0.10	0.90	0.90	0.90
S ₂	0.89	0.11	0.89	0.89
S ₃	0.88	0.88	0.12	0.88
S ₄	0.91	0.09	0.91	0.91
S ₅	0.08	0.92	0.92	0.92

解) このプロセスは反応器, 分離器の他にストリームの合流点で構成されているが, それぞれを支配している方程式の流れに沿って記述したのが表2-6である. 各ストリームの成分流量をfとして二次元配列で定義している. 第1添字はストリーム番号に, 第2添字は成分番号に対応する. 添字が1つだけ書かれているのは第1添

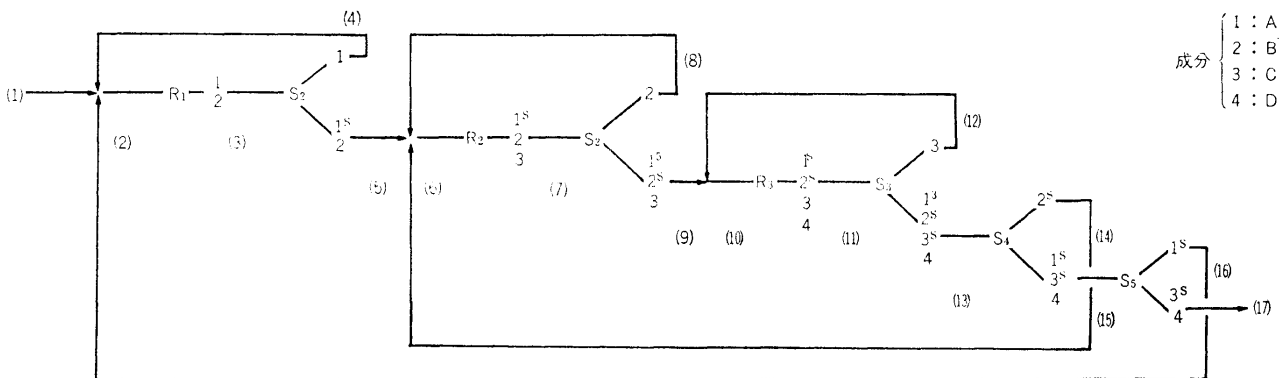


図 2-1 プロセスフローダイアグラム

表 2-6 例題 2.4 のリスト

```

1: /* 化学プロセスの物質収支 */
2: /* 矢木,西村「化学プロセス工学」p.155 丸善(1969) */
3:
4: VAR f(17,4) /* 各ストリーム成分流量 [kg/h] */
5:
6: f(1) + f(4) + f(16) = f(2)
7: R1:b1 = 0.80*x1 + 0.10 - x1*(x1-0.5)*(x1-1)
8: x1 = f(2,1)/SUM(f(2))
9: f(3,1) = f(2,1)*(1-b1)
10: f(3,2) = f(2,2) + f(2,1)*b1
11: f(3,3:4) = f(2,3:4)
12:
13: S1:f(3) = f(4) + f(5)
14: f(5) = f(3)*(0.10,0.90,0.90,0.90)
15:
16: f(5) + f(8) + f(14) = f(6)
17:
18: R2:b2 = 0.80*x2 + 0.10 - x2*(x2-0.5)*(x2-1)
19: x2 = f(6,2)/SUM(f(6))
20: f(7,2) = f(6,2)*(1-b2)
21: f(7,3) = f(6,3) + f(6,2)*b2
22: f(7,1:4) = f(6,1:4)
23:
24: S2:f(7) = f(8) + f(9)
25: f(9) = f(7)*(0.89,0.11,0.89,0.89)
26:
27: f(9) + f(12) = f(10)
28: R3:b3 = 0.80*x3 + 0.10 - x3*(x3-0.5)*(x3-1)
29: x3 = f(10,3)/SUM(f(10))
30: f(11,3) = f(10,3)*(1-b3)
31: f(11,4) = f(10,4) + f(10,3)*b3
32: f(11,1:2) = f(10,1:2)
33:
34: S3:f(11) = f(12) + f(13)
35: f(13) = f(11)*(0.88,0.88,0.12,0.88)
36:
37: S4:f(13) = f(14) + f(15)
38: f(15) = f(13)*(0.91,0.09,0.91,0.91)
39:
40: S5:f(15) = f(16) + f(17)
41: f(17) = f(15)*(0.08,0.92,0.92,0.92)
42:
43: FEED: f(1) = {1000,0,0,0}
44:
45: reset b1#0.5 [0,1] by R1
46: reset b2#0.5 [0,1] by R2
47: reset b3#0.5 [0,1] by R3

```

字（この場合ストリーム番号）を示しており、例えば第 6 行の方程式は (1), (4), (16) のストリームが合流したものが (2) のストリームになることを意味する。この関係は各成分毎に成り立つわけで、この方程式が各成分についての 4 つの式を統合して表現していることがわかる。さて、転化率 b を与える式は x の 3 次方程式であり非線形である。転化率は定義により 0 と 1 の間の値をとり、値の物理的な意味を掌握し易いのでこれをくり返し変数に選ぶ。そして、 b_1, b_2, b_3 の影響を最も見やすい R1, R2, R3 とラベルをつけた方程式で収束の判定をする。計算結果は表 2-7 の通りである^{注)}。

ここで、EQUATRAN-M での配列変数の記法と演算の規則についてまとめておく。

◦配列変数の宣言

どれだけの大きさで次元をもつ配列であるかを式の中に現われる前に宣言しておく。

注) 本例題の計算結果の b_1, b_2, b_3 は文献 4) のそれと違っているが本結果は正しいと著者の了解を得ている。

表 2-7 例題 2.4 の許算結果

```

/* 化学プロセスの物質収支 */
[ 計算結果 ]
f =
( 1)      ( 2)      ( 3)      ( 4)
1) 1000      0      0      0
2) 1208.057795 111.18524 3.053841 93.141841
3) 209.735681 1109.507355 3.053841 93.141841
4) 188.762113 110.950736 0.305384 9.314184
5) 20.973568 998.55662 2.748457 83.827657
6) 25.896491 1291.717464 129.96074 210.630055
7) 25.896491 296.092157 1125.586047 210.630055
8) 2.848614 263.52202 123.814465 23.169306
9) 23.047877 32.570137 1001.771582 187.460749
10) 26.190769 37.01152 1278.630805 344.480585
11) 26.190769 37.01152 314.612753 1308.498037
12) 3.142892 4.441382 276.859223 157.019836
13) 23.047877 32.570137 37.75353 1151.4788
14) 2.074309 29.638825 3.397818 103.633092
15) 20.973568 2.931312 34.355713 1047.845708
16) 19.295683 0.234505 2.748457 83.827657
17) 1.677885 2.696807 31.607256 964.018052
x1 = 0.853486
b1 = 0.826386
x2 = 0.778986
b2 = 0.770776
x3 = 0.75824
b3 = 0.753946

```

VAR 変数名 (n_1) 【, 変数名 (n_2), ……】
 または
 VAR 変数名 (n_3, n_4) 【, 変数名 (n_5, n_6) ……】
 ($n_1, n_2, ……$, は正整数)

VAR 文はいくつあっても構わないし、一次元配列と二次元配列が混在して宣言されてもよい。

例 VAR p(4), q(3), B(2, 3)

(n_1) という大きさの一次元配列は n_1 個の要素からなるベクトルを意味し、(n_3, n_4) という大きさをもつ二次元配列は、 n_4 の大きさのベクトルが n_3 個集まったものと見なす。つまり、上例の B は
 (B(1, 1), B(1, 2), B(1, 3))
 (B(2, 1), B(2, 2), B(2, 3))

を表わしている。

◦配列変数の表記

配列変数の要素は添字をつけて示す。配列の一部分(部分配列)の表わし方には次のような記法がある。

例 p(1:3) → (p(1), p(2), p(3))
 B(1, 1:3) → (B(1, 1), B(1, 3))

添字を省略すると全体を意味し

例 p → (p(1), p(2), p(3), p(4))
 B(1) → (B(1, 1), B(1, 2), B(1, 3))
 B(, 2) → (B(1, 2), B(2, 2))

このように二次元配列で添字を 1 つだけ書くと第 1 添字を意味するが、第 1 添字の省略もできる。

◦配列変数の組込み関数への適用

配列変数を引数とする組込み関数は、配列の各要素を引数とする配列となる。

例 exp(q) → (exp(q(1)), exp(q(2)), exp(q(3)))
 ただし、特例として SUM (総和) と PROD (総積) では演算結果の次元が 1 つ下がる。

例 SUM(B) → $(\sum_{i=1}^3 B(1, i), \sum_{i=1}^3 B(2, i))$

◦配列変数の演算

配列の演算 (+ - * / \) は各要素毎の演算で定義

される（加減算とべき乗は数学の規則と同じであるが乗除算は異なることに注意）。そのために、配列同志は同じ大きさであることが必要条件である。なお、スカラーとベクトル、ベクトルとマトリクスのように次元が異なる場合には、低い方の次元を拡張し高い方のそれに合せて演算する。

例 $q * B \rightarrow (q(1) * B(1, 1), q(2) * B(1, 2), q(3) * B(1, 3))$
 $(q(1) * B(2, 1), q(2) * B(2, 2), q(3) * B(2, 3))$

このように配列変数の演算を定義すると、 $Ax=b$ という n 元連立一次方程式は次のように書ける。

VAR A (n, n), b (n), x (n)
 SUM (A * x) = b

。配列定数の表記

定数からなる配列は定数の並びを () でくくって表わされ、直接式の中に書きこんだり（例：表2-6の第14行）、配列変数と等号で結んで配列要素の値を設定できる（例：表2-2の第15~17行）。二次元配列についても同様である（例：表2-10の第21~23行）。

5. 表現の簡略化（マクロとパラメータ）

表2-6のリストでは反応器の部分に同じような方程式が現われ繁雑である。同じ構造の方程式群を予めマクロとして定義しておき、必要に応じて利用できるると便利である。

```
MACRO mname
  方程式群
END mname
```

と定義し、実際に使うときに、

```
CALL mname [(a1=b1, [ , a2=b2, .....])] ]
```

と呼べば mname というマクロの内容が文中に展開される。() の中はパラメータであり、これによってマクロ定義文で使われている a_1, a_2 というシンボルは b_1, b_2 という文字列に置き換えられる。パラメータで置き換えられなかったシンボルに対しては、マクロの CALL ごとに別個の変数名が自動的に割り当てられる。

表2-6の反応器をマクロ化した例を表2-8に示す。CALLされた結果、INはf(2)にOUTはf(3)に、またxはx1に……置換されるので、マクロが展開されたとき例えば最初の行は

表 2-8 例題2.4のマクロ化

```
1: /* 化学プロセスの物質収支 */
2:
3: MACRO react
4: EQ:b = 0.80*x + 0.10 - x*(x-0.5)*(x-1)
5:   x = IN(r)/sum(IN)
6:   OUT(r) = IN(r)*(1-b)
7:   OUT(p) = IN(p) + IN(r)*b
8:   OUT(d) = IN(d)
9: END react
10:
11: R1:CALL react(IN=f(2),OUT=f(3), ...
12:             x=x1,b=b1,r=1,p=2,d=3.4 )
13:   reset b1#0.5 [0,1] by R1.EQ
```

$b1=0.80 * x1+0.10-x1*(x1-0.5)*(x1-1)$ となり、表2-6の7行目と全く同じになる。反応器R2, R3でも同様にCALLすればよい。

くり返し構造をもつプロセスや多段装置（蒸留塔、多重効用缶、熱交換器など）ではマクロ表現が大変重宝である。また、単位操作毎にマクロを用意しておけば他のプロセスへも流用でき、仕事の効率向上に大いに役立つ。

マクロと並んで表現を汎用化する機能としてパラメータがある。

<例題 2.5：気液平衡関係（多成分系）>

例題2.1のアセトン-メタノール系に水を加えた3成分系の気液平衡関係を求めたい。一般に、N成分系に対するWilson式は次式で与えられる。

$$\ln \gamma_k = -\ln \left(\sum_{j=1}^N x_j A_{kj} \right) + 1 - \frac{\sum_{i=1}^N x_i A_{ik}}{\sum_{j=1}^N x_j A_{ij}} \quad (2-8)$$

水の Antoine 定数は

$$a = 7.96681, \quad b = 1668.21, \quad c = 228.0$$

また、Wilson パラメータは次表である¹⁾。

表 2-9 Wilson パラメータ

	アセトン	メタノール	水
アセトン	1.0	0.65675	0.16924
メタノール	0.77204	1.0	0.43045
水	0.40640	0.94934	1.0

解) 表2-2を参考にしながら成分数を一般にNとして汎用化する。Wilson式をマクロで定義し他にも流用できるようにする。リストと計算結果を表2-10に示した。10行目がパラメータ表現で、本例題ではN=3としているがN=4とすれば4成分系に拡張できる。

表2-10 例題2.5の解

```

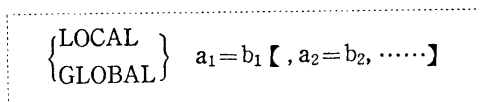
1: /* 気液平衡関係 (3成分系) */
2:
3: /* P : 全圧 [ mmHg ]
4:    P0 : 分圧 [ mmHg ]
5:    t : 温度 [ °C ]
6:    x : 液相モル分率 [ - ]
7:    y : 気相モル分率 [ - ]
8:    g : 活量係数 [ - ]
9: */
10: LOCAL N=3 ; GLOBAL x=x, A=A, g=g
11: VAR P0(N),x(N),y(N),g(N),a(N),b(N),c(N),A(N,N)
12:
13: log10(P0) = a - b/(c + t) /* Antoine 式 */
14:
15: /* acetone methanol water */
16: a = ( 7.02447, 7.87868, 7.96681 )
17: b = ( 1161.00, 1473.11, 1668.21 )
18: c = ( 224.00, 230.00, 228.00 )
19:
20: /* Wilson parameter */
21: A = ( 1.0, 0.65675, 0.16924 ) ...
22:     ( 0.77204, 1.0, 0.43045 ) ...
23:     ( 0.40640, 0.94934, 1.0 )
24: MACRO gamma
25:   loge(g(k)) = -loge(SUM(x*A(k))) + 1 ...
26:               - SUM(x*A(k)/SUM(x*A))
27: END gamma
28:
29: CALL gamma (k=1)
30: CALL gamma (k=2)
31: CALL gamma (k=3)
32: P * y = P0 * g * x
33: EQ:SUM(y) = 1
34: SUM(x) = 1
35:
36: RESET t#50 [0,200] BY EQ UNTIL 0.01%
37: INPUT P,x(1:2) ; OUTPUT t,x,y,g

```

[入力値(=) または 初期値(#)]
P = 760
x(1:2) (2) = 0.2,0.3
t # 50

[計算結果]
t = 63.123876
x =
1) 0.2 2) 0.3 3) 0.5
y =
1) 0.525119 2) 0.321266 3) 0.153626
g =
1) 2.085076 2) 1.141384 3) 1.354379

パラメータ指定には LOCAL と GLOBAL があり、その形式は次の通りである。



{ } はどちらかを選ぶ記号である。

いずれも、ソーステキストで書かれているシンボル a₁, a₂ をコンパイル時に文字列 b₁, b₂ で置換すること指示しているが、LOCALは主文またはマクロの中だけ、GLOBAL は主文にもマクロにも共通に有効である。表2-10のGLOBAL文ではxというシンボルは主文もマクロも共通にxという文字で置き換えることを指示している。これは、一見無意味に見えるが、主文のxとマクロ内のxとが同一変数として扱われる効果がある(A, gも同様)。

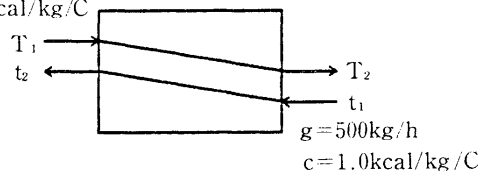
6. 最適化計算

プロセスの設計をする際、費用と利益の関係から最適計算を要求されることが多い。

<例題 2.6 : 熱交換器の最適設計>

G=1000kg/h

C=0.45kcal/kg/°C



図のようなプロセス流体からボイラー供給水を予熱する向流熱交換器を設計したい。回収熱量 Q [kcal/h] は(2-9)式で与えられ、熱量単価は0.01円/kcal、一方設備単価は伝熱面積 A [m²] の関数で表わされ $5 \times 10^4 A^{0.6}$ 円/y とする。ボイラー供給水の出口温度 t_2 は60°C以上としたい。なお、総括伝熱係数 U は400kcal/m²/h/deg とし、年間8,000h 操業とする。

$$\begin{aligned}
 Q &= GC (T_1 - T_2) \\
 &= g c (t_2 - t_1) \\
 &= UA \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln\{(T_1 - t_2)/(T_2 - t_1)\}} \quad (2-9)
 \end{aligned}$$

解) 年間の利益(目的関数)は熱回収による利得から設備費用を減じたもので、次式となる。

$$F = 0.01 \times 8,000 \times Q - 5 \times 10^4 \times A^{0.6} \quad (2-10)$$

つまり、 A をいろいろ変えて(2-9)式から Q を求め F が最大になる A を $t_2 \geq 60$ の条件下で探すことになる。(2-9)式を解くに当たって T_2 をくり返し変数に選ぼう。リストと計算結果を表2-11に示す。

表 2-11 例題2.6の解

```

1: /* 熱交換器の最適設計 */
2:
3: /* Q : 回収熱量 [kcal/h]
4:    T : 高温側流体温度 [°C]
5:    t : 低温側流体温度 [°C]
6:    A : 伝熱面積 [m2]
7: */
8: G = 1000 ; g = 500 /* 流量 [kg/h] */
9: C = 0.45 ; c = 1.0 /* 熱容量 [kcal/kg/deg] */
10: U = 400 /* 総括伝熱係数 [kcal/m2/h/deg] */
11: T1 = 80 ; t1 = 25
12:
13: Q = G*C*(T1-T2)
14: Q = g*c*(t2-t1)
15: EQ:Q = U*A*dT
16: dT = ((T1-t2)-(T2-t1))/loge((T1-t2)/(T2-t1))
17: RESET T2 # 50 [25,80] BY EQ
18:
19: F = 0.01*8000*Q - 5.0E4*A^0.6 /* 目的関数 */
20: cond=IF(t2>=60) /* 制約条件 */
21: FIND A #5 [0,20] MAXIMIZE F UNDER cond UNTIL 0.1%
22:
23: OUTPUT A,T2,t2,Q,F

```

[入力値(=) または 初期値(#)]
A # 5
T2 # 50

[計算結果]
A = 13.109118
T2 = 27.380877
t2 = 72.357211
Q = 23678.605525
F = 1.660128E+006

EQUATRAN-M の最適化計算機能は等号制約条件も不等号制約条件も考慮しているので極めて一般的である。

最適化計算を指定するには、

FIND x 【#初期値】〔下限, 上限〕 $\begin{cases} \text{MAXIMIZE} \\ \text{MINIMIZE} \end{cases}$ F
 【UNDER C】 【UNTIL K%】

ここで、x は独立変数、F は目的関数、C は制約条件、K が最適化の精度（上、下限の中の K%—省略値は 1）を表わす。C は論理値化の組込み関数 IF を用いて

$C = \text{IF}$ （論理式）

のように書く。論理式については 2. で説明した。

独立変数が 2 つ以上のときは、独立変数名、初期値、下限、上限を追加すればよい（例：表 1-12）。

6. その他の機能

この他に操作性を考慮した便利な機能が用意されている。表 2-12 がオプション一覧表（OPTION コマンド）で、主なものを説明する。

○ 計算結果の印刷

「計算結果」の項を P（プリンター）に指定すれば、計算結果は画面表示と同時に印刷される。

○ 計算結果のファイル出力

P の代わりに D（ディスク）とすれば、計算結果がファイルに出力され別なプログラムで利用できる。

○ コンパイル診断メッセージ

コンパイルエラーがでたとき、変数や方程式の数、一度しか現れない変数名などの情報が提供され、誤りを見付けるのに役立つ。

表 2-12 オプション一覧表

[コンパイル オプション]			
ソースリスト-1	(S/P/D/N)	N	S ... Screen
ソースリスト-2	(S/P/D/N)	N	P ... Printer
診断メッセージ	(S/P/D/N)	N	D ... Disk
			N ... No
[ゴー オプション]			
一括入力データ	(Y/N)	Y	Y ... Yes
計算結果	(S/P/D/N)	S	N ... No
トレース	(S/P/D/N)	N	
ダンプ	(S/P/D/N)	N	
[その他 オプション]			
作業ドライブ	(A/B/C/D)	A	
ページ単位表示	(Y/N)	Y	
エラー時ビープ音	(Y/N)	Y	

○ 計算途中結果のダンプ

収束の過程でくり返し変数の値、判定式の値が表示されるので、未収束の原因調査に便利。

これで EQUATRAN-M の主な機能の紹介は終るが、大型コンピュータで培われてきた要求仕様と完成度の高さがパソコンの使い易さと融合した大変ユニークで便利なツールであることがわかりただけだと思う。なお、より詳細なロジック等については文献⁵⁾を参照願いたい。次回からは、実用例に基づき EQUATRAN-M の活用法を説明する。

参考文献

- 1) 平田, 大江, 長浜: 電子計算機による気液平衡データ, 講談社 (1975).
- 2) 化学工学協会: 化学工学便覧, 改訂四版, p. 119, (1978).
- 3) 同上, p. 123.
- 4) 矢木, 西村: 化学プロセス工学, p. 155, 丸善, (1969).
- 5) 小口: 日経コンピュータ, 1985年9月30日号 (予定)