

# EQUATRAN-M で非線形方程式を解く

本連載では、化学工業で遭遇する数値計算上の問題に対して、方程式解法ソフトを用いたアプローチについて紹介している。今回は前回に引き続き、非線形連立方程式を解く問題に帰結する例題をいくつか取り上げ、方程式解法ソフトのひとつである EQUATRAN-M を用いた解法を示すことにする。今回の例題には、やや複雑であるが実用的な問題として、プロセスの物質収支計算、反応平衡計算、そして管路網の計算の3つを選んだ。

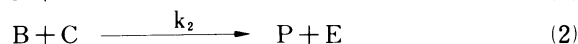
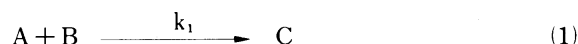
## 物質収支計算

化学プロセスの設計や解析を行う場合には、各機器廻りの物質収支や熱収支計算（単位操作計算）をプロセス全体（あるいはその一部分）に拡張することによってプロセス全体の物質と熱の流れを明らかにする、いわゆるプロセスフローシミュレーションが不可欠である。この計算では、各々の単位操作について物質収支式・熱収支式とこれらの基礎となる物性計算式などを組み合わせた大きな連立方程式を解くことが必要となる。これらの方程式には多くの非線形な関係が含まれており、さらに物質や熱のリサイクルがあると方程式全体を繰り返し計算によって解くことが必要となるため、数値計算の手法や収束の速度に気をを使うところである。もちろん、プロセスフローシミュレーションを行うための専用プログラム（フローシートシミュレータという）は多く開発されており、<sup>1)2)</sup> これらを用いればプロセス全体にわたって詳細なシミュレーションが可能である。しかし、一般にパッケージソフトは主として既に確立したプロセスのシミュレーションを目的としているため、詳細なモデル化が可能な半面

フレキシビリティに乏しく、たとえば、新しいプロセスの研究開発段階で必要とされるような個々の単位操作のモデルは簡単でよいが、計算条件が一定しないシミュレーションには不向きである。

ここでは、このような単位操作計算を簡略化した物質収支計算の例として、Williams-Otto のプロセス<sup>3)</sup> と呼ばれる仮想的なプロセスをとりあげる(図1)。

原料 A, B が反応器にリサイクルと共にフィードされ、次の反応が進行する。



ここで P が製品であり、E は副生成物、C は中間生成物、G はタールである。反応器を出た液は、冷却後デカンタでタール G だけをすべて除去して、蒸留塔で製品 P を分離する。未反応の A, B, 中間生成物 C, 副生成物 E は一部反応器にリサイクルされ、残りは燃料として消費される。(1)~(3)式に対応した重量基準の反応速度  $r_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) [kg/hr] は、反応温度  $t$  [°C]、密度  $\rho$  [kg/m<sup>3</sup>]、反応器容積  $V$  [m<sup>3</sup>] とすると

$$r_1 = k_1 x_A x_B V \rho \quad (4)$$

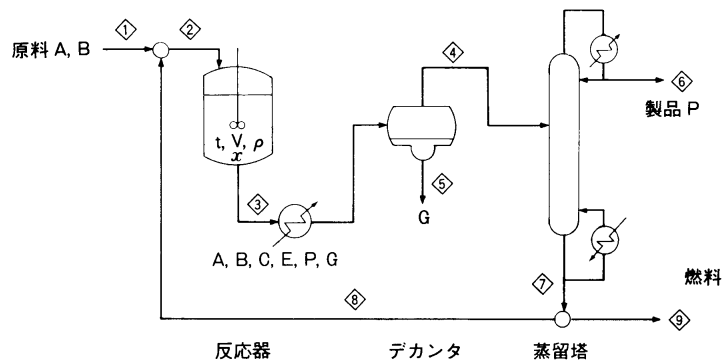
$$r_2 = k_2 x_B x_C V \rho \quad (5)$$

$$r_3 = k_3 x_C x_P V \rho \quad (6)$$

と表わされる。ここで、 $x_A, x_B, x_C, x_P$  [-] は反応器での各成分の重量分率、 $k_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) [1/hr] は反応速度定数で次式で与えられる。

図1 Williams-Ottoのプロセス

成分番号	成分	分子量
1	A	100
2	B	100
3	C	200
4	E	200
5	P	100
6	G	300



$$k_1 = 5.9755 \times 10^9 \exp \{-6500/(t+273)\} \quad (7)$$

$$k_2 = 2.5962 \times 10^{12} \exp \{-8000/(t+273)\} \quad (8)$$

$$k_3 = 9.6283 \times 10^{15} \exp \{-11000/(t+273)\} \quad (9)$$

蒸留塔の塔頂製品 P 中の不純分は無視でき、塔底からは P が E の 10% 相当量が出るとして、物質収支を計算する。リサイクル比 (ストリーム④のストリーム④に対する比) は系内での副生成物 E の蓄積を防ぐため、ストリーム④の E の濃度が指定した値になるように決定するものとする (なお、本例題では原典の計算条件を変更して使用している)。

このプロセスでは、原料④のフィード量、反応器の  $t$ ,  $\rho$ ,  $V$  およびリサイクル比が与えられれば、各ストリームの流量が決まるはずであるが、反応速度  $r_i$  が組成の関数であるため全体が非線形となり収束計算が必要となる。そこで、全体の連立方程式の中で非線形項を形成している変数である  $r_1, r_2, r_3$  (あるいは  $x_A, x_B, x_C, x_P$ ) およびリサイクル比 (ratio) を仮定した収束計算を行うものとするれば、残りの式を線形な連立方程式として解くことができる。

このような物質収支計算に現われる連立方程式は、未知数として各ストリームの各成分流量を含むため、すぐに数百元といった大規模な方程式になるが、一方その係数行列は通常 zero 要素が多いスパースな形をしている。一般的に用いられる Gauss の消去法では記憶域と計算時間の面で効率が悪いので、

- (i) non-zero 要素だけをコンパクトに表現する
- (ii) non-zero 要素の発生をなるべく抑えるような

ピボットリングを行う

いわゆるスパース行列のための解法<sup>4)</sup>が用いられる。

本例題を EQUATRAN-M の文法に従って記述したソーステキストのリストと計算結果を図 2 に示す。各ストリームの成分流量は  $f(i, j)$  の 2 次元配列 ( $i$  がストリーム番号,  $j$  が A, B, C, E, P, G に対応した成分番号) で記述している。EQUATRAN-M では、2 次元までの配列変数について添字をつけてその要素を表わすことができるほか、添字を省略することによりその要素全体を表現することができる。したがって、リスト中の  $f(i)$  はストリーム  $i$  の各成分流量からなるベクトルを意味しており、たとえば混合器廻りのバランスの式は 23 行目のようにベクトルどうしの演算として素直に表現することができる。また、ピリオド“.”とコロン“:”により添字の集合を表現することができるので、42 行目の  $f(6, 1:4.6)$  はストリーム④の第 1~4 成分および第 6 成分の流量を表わす。2 次元配列について関数 SUM を適用すると 2 次元目の要素の合計が得られるので、15 行目の  $SUM(f)$  は各ストリームのトータル流量を表わすことになる。各変数の意味は 2~13 行目の VARIABLE 文の説明項 (“ ” の中) で明らかであろう。収束計算の指定は 48~52 行の RESET 文で行っている。たとえば、48 行目は  $x_A$  を独立変数として、27 行目の式ラベル eq 1 の第 1 番目の要素の式によって収束の判定を行うことを指定している。

プロセスフローシミュレーションを (パッケージソフトを用いず) 方程式解法ソフトによって行うことのメリットは、① 数式モデルの記述が自由に行えるので新しい

図2 Williams-Ottoのプロセス  
(EQUATRAN-Mのソーステキストと計算結果)

```

1: /* 物質収支 (Williams-Ottoの仮想プロセス) */
2: VAR f(9,6) "各ストリーム成分流量 [kg/hr]"
3: x(6) "反応器出口組成 [wt-fr]"
4: fr(6) "反応生成量 [kg/hr]"
5: Mw(6) "分子量 [kg/mole]"
6: r1 " (1)の反応速度 [kg/hr]"
7: r2 " (2)の反応速度 [kg/hr]"
8: r3 " (3)の反応速度 [kg/hr]"
9: ratio "リサイクル比 [ - ]"
10: t = 60 "反応温度 [ C ]"
11: V = 10 "反応器容積 [ m3 ]"
12: rho = 830 "反応器密度 [ kg/m3 ]"
13: fsum(9) "トータル流量 [kg/hr]"
14: /* 成分番号 A=1,B=2,C=3,E=4,P=5,G=6 */
15: fsum = SUM(f)
16: Mw = (100,100,200,200,100,300)
17: /* 反応速度定数 */
18: k1 = 5.9755E9 * EXP(-6500/(t+273))
19: k2 = 2.5962E12 * EXP(-8000/(t+273))
20: k3 = 9.8283E15 * EXP(-11000/(t+273))
21: /* 原料及び混合器 */
22: f(1) = (5000,10000,0,0,0,0)
23: f(1) + f(8) = f(2)
24: eq2: f(2,4)/fsum(2) = 0.3
25: /* 反応器 */
26: f(2) + fr = f(3)
27: eq1: x = f(3)/fsum(3)
28: fr(1) = -r1
29: fr(2) = -r1-r2
30: fr(3) = (r1-r2)*Mw(3)/Mw(2)-r3
31: fr(4) = r2*Mw(4)/Mw(2)
32: fr(5) = r2*Mw(5)/Mw(2)-r3*Mw(5)/Mw(3)
33: fr(6) = r3*Mw(6)/Mw(3)
34: r1 = k1*x(1)*x(2)*V*rho
35: r2 = k2*x(2)*x(3)*V*rho
36: r3 = k3*x(3)*x(5)*V*rho
37: /* デンタ */
38: f(3) = f(4) + f(5)
39: f(5,1:5) = 0 : f(4,6) = 0
40: /* 蒸留塔 */
41: f(4) = f(6) + f(7)
42: f(6,1:4,6) = 0
43: f(7,5) = 0.1*f(7,4)
44: /* 分凝点 */
45: f(7) = f(8) + f(9)
46: f(8)/f(7) = ratio
47:
48: RESET x(1) # 0.15 [0.1] BY eq1(1) /* 成分 A */
49: RESET x(2) # 0.40 [0.1] BY eq1(2) /* 成分 B */
50: RESET x(3) # 0.05 [0.1] BY eq1(3) /* 成分 C */
51: RESET x(5) # 0.05 [0.1] BY eq1(5) /* 成分 P */
52: RESET ratio # 0.55 [0.1] BY eq2 /* リサイクル比 */
53:
54: OUTPUT f,fsum,fr,x,ratio
55: OUTPUT k1,k2,k3,r1,r2,r3

```

```

[ 計算結果 ]
f
( 1 )      ( 2 )      ( 3 )      ( 4 )
1) 5000      10000      0      0
2) 8897.480555 14529.71564 343.219808 9746.511282
3) 3161.542176 7547.31689 571.86529 16239.432024
4) 3161.542176 7547.31689 571.86529 16239.432024
5) 0      0      0      0
6) 0      0      0      0
7) 3161.542176 7547.31689 571.86529 16239.432024
8) 1897.480555 4529.71564 343.219808 9746.511282
9) 1264.061621 3017.60125 228.645681 6492.920742
( 5 )      ( 6 )
1) 0
2) 974.651128 0
3) 3845.956332 1125.465502
4) 3845.956332 0
5) 0 1125.465502
6) 2222.013129 0
7) 1623.943202 0
8) 974.651128 0
9) 649.292074 0
fsum
1) 15000 = 2) 32491.578213 3) 32491.578213 4) 31366.112711
5) 1125.465502 6) 2222.013129 7) 29144.099582 8) 17491.578213
9) 11652.521369
fr
1) -3735.938379 = 2) -6982.39875 3) 228.645681 4) 6492.920742
5) 2871.305204 6) 1125.465502
x
1) 0.09730578 = 2) 0.2322888 3) 0.01759813 4) 0.4998043
5) 0.1183615 6) 0.03463868
ratio
= 0.601756 = リサイクル比 [ - ]
k1 = 19.913823
k2 = 95.683508
k3 = 43.399592
r1 = 3735.938379 : (1)の反応速度 [kg/hr]
r2 = 3246.460371 : (2)の反応速度 [kg/hr]
r3 = 750.310334 : (3)の反応速度 [kg/hr]

```

表1 平衡定数 $K_1, K_2$ のテーブル

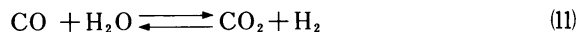
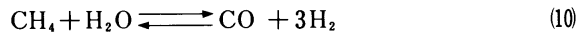
温度 t [°C]	500	600	700	800	900	1000
log $K_1$	-2.10	-0.323	1.08	2.22	3.17	3.97
log $K_2$	0.657	0.394	0.185	0.0155	-0.125	-0.244

対象に簡単に対応できる、②必要に応じた詳細さのモデル化が可能である、③計算条件の変更(たとえば入力と出力の関係の逆転)に簡単に対応できる、ことである。このような事情は、プロセスフローシミュレーションに限らず、他のパッケージソフトを使用している場合にも多いのではなかろうか。

## 化学平衡計算

化学プロセスでは温度、圧力などの反応条件により反応生成物の組成が可逆的に変化する平衡反応が多くみられ、複数の反応が同時に起こる(複合反応)場合には多変数の非線形連立方程式を解く問題に帰着する。このような例として、メタンの改質反応における化学平衡計算を取りあげる。

(10), (11)式で示される平衡反応が生じており、各反応の平衡定数 $K_1, K_2$ は各成分の分圧 $p_i$ を用いて(12), (13)式で表わされる。



$$K_1 = p_{\text{CO}} \cdot p_{\text{H}_2}^3 / (p_{\text{CH}_4} \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}) \quad (12)$$

$$K_2 = p_{\text{CO}_2} \cdot p_{\text{H}_2} / (p_{\text{CO}} \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}) \quad (13)$$

原料の $\text{CH}_4, \text{H}_2\text{O}$ のモル数を $a, b$ , (10)式の $\text{CH}_4$ 転化率を $x$ , (11)式の $\text{CO}$ 転化率を $y$ , 平衡時の全モル数を $N$ , 全圧を $P$ とすると、分圧 $p_i$ は(14)~(18)式で表わされる。

$$p_{\text{CH}_4} = a(1-x)P/N \quad (14)$$

$$p_{\text{H}_2\text{O}} = \{b - ax(1+y)\}P/N \quad (15)$$

$$p_{\text{CO}} = ax(1-y)P/N \quad (16)$$

$$p_{\text{H}_2} = ax(3+y)P/N \quad (17)$$

$$p_{\text{CO}_2} = axyP/N \quad (18)$$

平衡定数 $K_1, K_2$ は温度 $t$ の関数として、500~1000°Cの範囲で表1に与えられている。上記の条件で、 $a, b, t, P$ が既知であれば(12), (13)式の $x, y$ を未知数とする非線形連立方程式となる。

非線形連立方程式の解法として逐次解法の一つであるNewton-Raphson法が広く用いられ、EQUATRAN-Mはこの改良法が使われている。Newton-Raphson法は収束の次数が2次のため収束速度は非常に速いが、初期値が

図3 メタンの改質反応  
(EQUATRAN-Mのソーステキスト)

```

1: /* 化学平衡(メタンの改質反応) */
2: /*
3: CH4 + H2O = CO + 3H2 (1)式
4: CO + H2O = CO2 + H2 (2)式
5: VAR f0(5) 原料各成分のmol数 [ mol ]
6: f (5) 平衡各成分のmol数 [ mol ]
7: p (5) 平衡各成分の分圧 [ atm ]
8: x (1)式のCH4転化率 [ - ]
9: y (2)式のCO転化率 [ - ]
10: N 平衡後全mol数 [ mol ]
11: t 温度 [ °C ]
12: P 全圧 [ atm ]
13: K1 (1)式の平衡定数 [ atm^2 ]
14: K2 (2)式の平衡定数 [ - ]
15:
16: GLOBAL CH4=1,H2O=2,CO=3,H2=4,CO2=5
17:
18: TABLE LK1 = ktab1_1(tc) /* 温度とlog10(K1)のテーブル */
19: TABLE LK2 = ktab1_2(tc) /* 温度とlog10(K2)のテーブル */
20: VAR tc(6) = ( 500, 600, 700, 800, 900, 1000 )
21: VAR LK1(6) = (-2.10,-0.323,1.08, 2.22, 3.17, 3.97 )
22: VAR LK2(6) = (0.657, 0.394,0.185,0.0155,-0.125,-0.244 )
23:
24: f(CH4) = f0(CH4) * ( 1 - x )
25: f(H2O) = f0(H2O) - f0(CH4) * x * ( 1 + y )
26: f(CO) = f0(CO) * x * ( 1 - y )
27: f(H2) = f0(CH4) * x * ( 3 + y )
28: f(CO2) = f0(CH4) * x * y
29: N = SUM(f)
30: p = f * P / N
31:
32: LOG10(K1) = ktab1_1(t)
33: LOG10(K2) = ktab1_2(t)
34: eq1 = K1 = p(CO) * p(H2)^3 / ( p(CH4) * p(H2O) )
35: eq2 = K2 = p(CO2) * p(H2) / ( p(CO) * p(H2O) )
36:
37: RESET x # 0.4 [ 0, 1 ] BY eq1
38: RESET y # 0.5 [ 0, 1 ] BY eq2
39: INPUT t,f0,P
40: OUTPUT t,f,x,y,N,K1,K2
41: OUTPUT1 t, x,y, K1,K2

```

悪いときには収束しないこともある。初期値は、その変域も含めて問題の物理的な考察から妥当な値を与えることが重要である。本例題では、転化率の定義から  $x, y$  について  $0 \leq x, y \leq 1$  が自明であり、さらに(14)~(18)式で示される各成分の分圧が負にならないように考慮すればよい。

図3にEQUATRAN-Mのソーステキストを示す。37~38行目のRESET文で  $x, y$  についての収束計算の指定と初期値、変域、収束判定の式を定めている。18~22行目は表1の  $\log K_1, \log K_2$  と  $t$  の関係をそのまま数表として定義したもの(TABLE文)である。32~33行目でこの数表を引くと  $\log K_1, \log K_2$  は温度に対して直線補間により求められる。数表は方程式とは言えないが実用上は大変便利なものであり、方程式解法ソフトの機能としては必須と言ってもよい。前回紹介したTK! Solverにも同様な機能がある。16行目のGLOBAL文は「パラメータ」を定義している。パラメータとはソーステキスト中の任意のシンボルを別の文字列で置き換える機能であり、この場合は成分番号を示す配列の添字を成分名で書き表わすことによってリストを読みやすくする目的で使われている。39行目のINPUT文は計算の実行時に変数( $t, f_0, P$ )に値を読み込む指定であり、これによってケーススタディが可能となる。これらの値は、対話型で入力する方法とあらかじめ全ケースのデータをテキス

図4 メタンの改質反応  
(データテキストと計算結果の一部)

```

1: /* 化学平衡の入力データ */
2: f0 = ( 1, 3, 0, 0, 0 )
3: P = 10
4: t = 600 : >60
5: t = 650 : >60
6: t = 700 : >60
7: t = 750 : >60
8: t = 800 : >60
9: t = 850 : >60
10: t = 900

[ 入力データ ]
t = 600 : 温度 [ °C ]
f0 = 1) 1 : 原料各成分のmol数 [ mol ]
      2) 3 : 原料各成分のmol数 [ mol ]
      3) 0 : 原料各成分のmol数 [ mol ]
      4) 0 : 原料各成分のmol数 [ mol ]
      5) 0 : 原料各成分のmol数 [ mol ]
P = 10 : 全圧 [ atm ]

[ 計算結果 ]
t = 600 : 温度 [ °C ]
f = 1) 0.6471133 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      2) 2.360239 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      3) 0.06601286 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      4) 1.345534 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      5) 0.2868739 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
x = 0.3528867 : (1)式のCH4転化率 [ - ]
y = 0.8129347 : (2)式のCO転化率 [ - ]
N = 4.705773 : 平衡後全mol数 [ mol ]
K1 = 0.4753352 : (1)式の平衡定数 [ atm^2 ]
K2 = 2.477422 : (2)式の平衡定数 [ - ]

[ 入力データ ]
t = 650 : 温度 [ °C ]

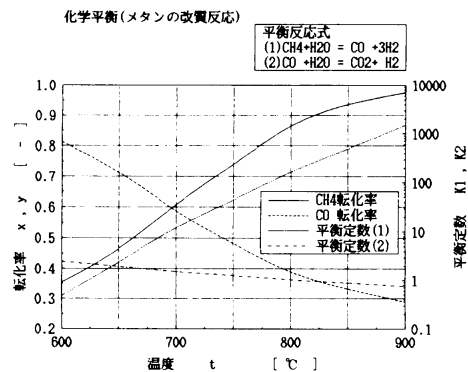
[ 計算結果 ]
t = 650 : 温度 [ °C ]
f = 1) 0.5352076 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      2) 2.203713 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      3) 0.1332979 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      4) 1.725872 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      5) 0.3314945 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
x = 0.4647924 : (1)式のCH4転化率 [ - ]
y = 0.7132098 : (2)式のCO転化率 [ - ]
N = 4.929585 : 平衡後全mol数 [ mol ]
K1 = 2.390562 : (1)式の平衡定数 [ atm^2 ]
K2 = 1.947601 : (2)式の平衡定数 [ - ]

[ 入力データ ]
t = 700 : 温度 [ °C ]

[ 計算結果 ]
t = 700 : 温度 [ °C ]
f = 1) 0.391591 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      2) 2.033854 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      3) 0.2506717 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      4) 2.182964 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
      5) 0.3577373 : 平衡各成分のmol数 [ mol ]
x = 0.608409 : (1)式のCH4転化率 [ - ]
y = 0.5879882 : (2)式のCO転化率 [ - ]
N = 5.216818 : 平衡後全mol数 [ mol ]
K1 = 12.022644 : (1)式の平衡定数 [ atm^2 ]
K2 = 1.531087 : (2)式の平衡定数 [ - ]

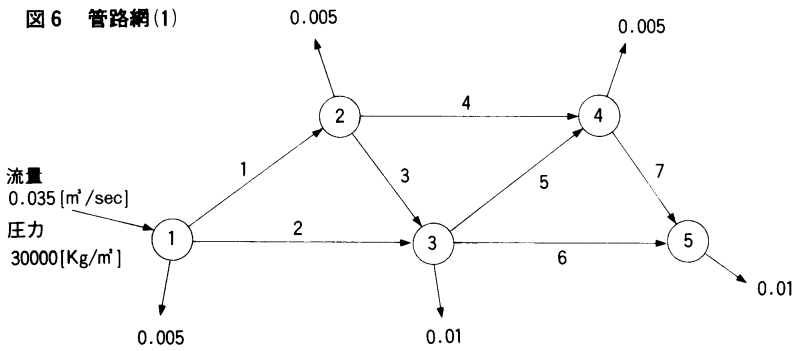
```

図5 メタンの改質反応  
(計算結果のグラフ出力)



トの形で用意する方法があり、このテキストをデータテキストと呼ぶ。図4に本例題のためのデータテキストのリストと計算結果の一部を示した。計算は温度を600~900°Cの範囲で50°Cおきに行っている。図5に計算結果をグラフによって示した。EQUATRAN-Mバージョン2

図6 管路網(1)



配管番号	管径 [m]	配管長 [m]
1	0.15	400
2	0.15	500
3	0.1	300
4	0.15	500
5	0.1	400
6	0.15	500
7	0.1	300

では計算結果をグラフに出力する機能が用意されており、図5はこの機能による出力である。図3のソーステキスト41行目のOUTPUT1文は、グラフ作成に必要な計算結果をファイルに出力するための文である。

## 管路網の計算

1

化学プラントには、冷却水、プロセス用水、排水、消火用水などの多くの管路網が張り巡らされている。また、化学工場以外でも、上下水道網、地域冷暖房の熱媒網、都市ガスマ網など、似たような例はたくさんある。

ここでは、このような複雑な管路網を扱う前に、この問題の性質を理解するため、図6のような簡単な管路網<sup>5)</sup>について考えてみる。すなわち、7本の配管が同一平面上で5つの節点で結合されており、ある液体が節点1に0.035 [m³/sec] で流れ込んで各節点に分配されている。入口の圧力を30000 [Kg/m²] とするとき各節点の圧力  $P_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 5$ ) [Kg/m²] と各配管を流れる流量  $Q_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 7$ ) [m³/sec] を求める。

各配管で圧力損失を  $\Delta P_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 7$ ) [Kg/m²] とすると、次の2つの基礎式が成り立つ。すなわち、各節点に流入する流量（流入を正、流出を負としたとき）の和は0に等しい（物質収支式）。

$$\sum_{\text{各節点のまわり}} Q_i = 0 \quad (19)$$

そして、任意の2節点間の圧力差はそれらを結ぶ管路での圧力損失の和に等しい（圧力バランスの式）。

$$\sum_{\text{閉管路}} \Delta P_i = 0 \quad (20)$$

また、圧力損失と流量の関係はFanningの式より、次

のように表わすことができる（文献5ではWilliams-Hazenの式が使われている）。

$$\begin{aligned} \Delta P &= 4f \left( \frac{\rho \bar{u}^2}{2g_c} \right) \left( \frac{L}{D} \right) = 32f \left( \frac{\rho}{\pi^2 g_c} \right) \left( \frac{L}{D^5} \right) Q^2 \\ &= CQ^2 \end{aligned} \quad (21)$$

ここで、 $\bar{u}$  は平均流速 [m/sec]、 $D$  は管径 [m]、 $L$  は配管の長さ [m]、 $\rho$  は流体の密度 [kg/m³]、そして  $g_c$  は重力換算係数 [kg·m/Kg·sec²] である。また、 $f$  は管摩擦係数 [-] でレイノルズ数 (Re) [-] の関数である。層流域 ( $Re \leq 3 \times 10^3$ ) では

$$f = 16/Re \quad (22)$$

が成り立ち、乱流域 ( $Re > 3 \times 10^3$ ) では板谷の式<sup>6)</sup>で次のように表わすことができる。

$$f = 0.0785 / \{0.7 - 1.65 \log Re + (\log Re)^2\} \quad (23)$$

ただし、レイノルズ数は

$$Re = \frac{\rho \bar{u} D}{\mu} = \frac{4\rho}{\pi \mu D} Q \quad (24)$$

である。ここで、 $\mu$  は流体の粘度 [kg/m·sec] である。

なお、(23)式は平滑管に対する式であるが、粗面管の場合はそれに対応した式を用いればよい。

さて、(19)、(20)式を本問題に適用すると

$$\text{節点 1} \quad 0.035 = Q_1 + Q_2 + 0.005 \quad (25)$$

$$\text{節点 2} \quad Q_1 = Q_3 + Q_4 + 0.005 \quad (26)$$

$$\text{節点 3} \quad Q_2 + Q_3 = Q_5 + Q_6 + 0.01 \quad (27)$$

$$\text{節点 4} \quad Q_4 + Q_5 = Q_7 + 0.005 \quad (28)$$

$$\text{節点 5} \quad Q_6 + Q_7 = 0.01 \quad (29)$$

$$\text{閉管路 1} \quad \Delta P_1 - \Delta P_2 + \Delta P_3 = 0 \quad (30)$$

$$\text{閉管路 2} \quad \Delta P_3 - \Delta P_4 + \Delta P_5 = 0 \quad (31)$$

$$\text{閉管路 3} \quad \Delta P_5 - \Delta P_6 + \Delta P_7 = 0 \quad (32)$$

となる。なお、流量Qおよび圧力損失ΔPは図6の矢印方向を正、逆向きを負とする。矢印は節点の番号の小さい方から大きい方に向けて付ける約束にする。すると(21)式は

$$\Delta P = CQ|Q| \quad (21)'$$

さらに(24)式は

$$Re = \frac{4\rho}{\pi\mu D} |Q| \quad (24)'$$

としておかなければならない。

以上の式群を連立して解けばよいのであるが、すべての出入の流量が与えられているので(25)~(29)式には従属な式が含まれている。そこで、(25)式を取り除くことにする。また、(21)'式から明らかなように、圧力損失と流量の関係は非線形になっており、繰り返し収束計算が必要である。なお、ついでながら、管路網の問題は電気回路の問題に対比できる。つまり、電圧が圧力に、電流が流量に相当し、(19)、(20)式はちょうどキルヒホッフの法則にあたる。しかし、電気回路の場合は電圧降下(圧力損失に相当)は電流に比例する(オームの法則)ので、線形連立方程式として簡単に解くことができる。

さて、これらの式群をEQUATRAN-Mの文法に従って入力したものが図7のソーステキストである。29行目から35行目までは(26)~(32)式をそのまま入力したものである。3、4行目では前節で説明したパラメータを指定しており、nは7に、mは5に置き換えられて処理される。こうしておく問題の拡張に便利である。

15~25行目はマクロと呼ばれるものを定義している。マクロは方程式やその他の文をひとまとめにして名前を付けたものであり、ここでは流量から圧力損失を計算する機能をpdropというマクロにしている。マクロの中の式は、27行目のようにCALL文で呼び出されることによって初めて有効になる。このとき、CALL文のうしろのパラメータによってマクロ内の変数と外側の変数との対応づけを行うことができる。マクロはサブルーチンのように繰り返し呼び出して用いたり、あるいはこの例の

図7 管路網(1)  
(EQUATRAN-Mのソーステキスト)

```

1: /* 管路網の計算 (1) */
2:
3: GLOBAL n = 7 ... /* 配管の数 */
4:          m = 5 ... /* 節点の数 */
5: GLOBAL VAR rho = 1000 /* 比重 [kg/m3] ...
6:          mu = 0.001 /* 粘度 [kg/m*sec] ...
7:          gc = 9.80665 /* 重力換算係数 [kg*m/Kg*sec2] ...
8:
9: VAR Q (n) /* 流量 [m3/sec] ...
10: P (m) /* 圧力 [Kg/m2] ...
11: dP (n) /* 圧力損失 [Kg/m2] ...
12: D (n) /* 管径 [m] ...
13: L (n) /* 配管長 [m] ...
14:
15: MACRO pdrop
16: VAR Re(n) /* レイノルズ数 [-] ...
17: f (n) /* 摩擦係数 [-] ...
18: C (n)
19: eq: dP = C * ABS(Q) * Q
20: C = 32 * f * ( rho / (.pi^2*gc) ) * ( L/D^5 )
21: Re = 4*rho*ABS(Q) / (.pi*mu*D)
22: f = 16 / Re
23: f = 0.0785 / ( 0.7-1.65*LOG10(Re) + (LOG10(Re))^2 ) WHEN Re<=3E3
24: RESET Q # 0.01[-0.1,0.1] BY eq
25: END pdrop
26:
27: CALL pdrop( Q = Q, D = D, L = L, dP = dP )
28:
29: Q(1) = Q(3) + Q(4) + 0.005
30: Q(2) = Q(3) + Q(5) + Q(6) + 0.01
31: Q(4) + Q(5) = Q(7) + 0.005
32: Q(6) + Q(7) = 0.01
33: dP(1) - dP(2) + dP(3) = 0
34: dP(3) - dP(4) + dP(5) = 0
35: dP(5) - dP(6) + dP(7) = 0
36:
37: P(1) = 30000
38: P(2,3,4,5) = P(1,2,3,4) - dP(1,3,5,7)
39:
40: D = ( 0.15, 0.15, 0.1, 0.15, 0.1, 0.15, 0.1 )
41: L = ( 400, 500, 300, 500, 400, 500, 300 )
42:
43: OUTPUT Q, P, dP

```

図8 管路網(1)  
(計算結果)

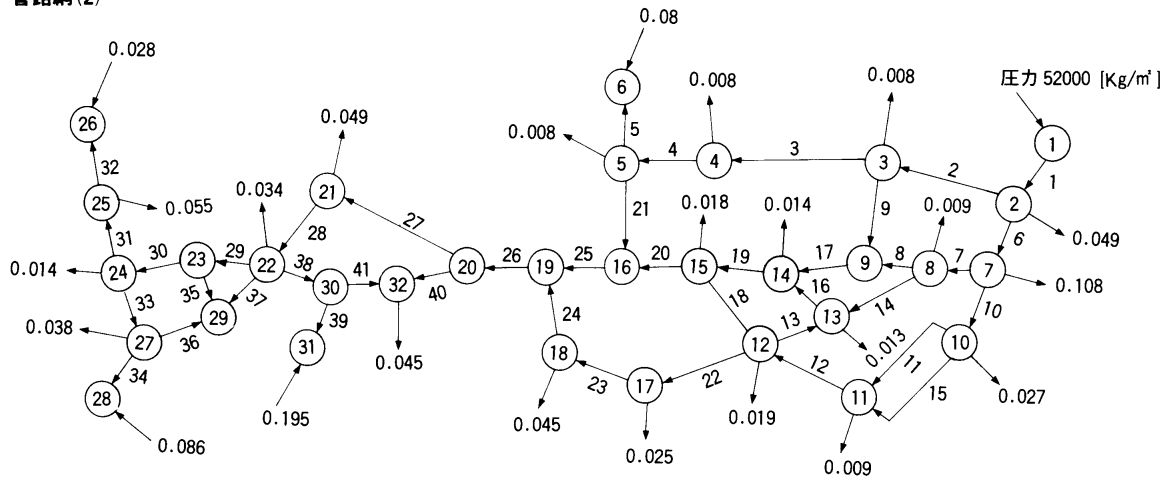
[ 計算結果 ]			
Q	流量 [m3/sec]	P	圧力 [Kg/m2]
1) 0.01490663	2) 0.01509337	3) 0.002881315	4) 0.007025312
5) 0.0008863988	6) 0.007088289	7) 0.002911711	
1) 30000	2) 28341.241387	3) 27879.633463	4) 27801.476545
5) 27331.223245			
dP	圧力損失 [Kg/m2]		
1) 1658.758613	2) 2120.366537	3) 461.607924	4) 539.764842
5) 78.156918	6) 548.410218	7) 470.2533	

ように、このマクロの部分を入れ替えることによって異なった圧力損失の計算法に置き換えることができる。

fの計算はレイノルズ数によって適用する式を使い分けなければいけないが、EQUATRAN-Mでは22、23行目のように条件付きの式で表現することができる。すなわち、 $Re \leq 3 \times 10^3$ のときは22行目の式で、 $Re > 3 \times 10^3$ のときは23行目の式で計算される。24行目のRESET文で収束計算の独立変数にQ(初期値0.01, 変域-0.1~0.1)を、収束の判定をする式に19行目の式を指定している。38行目では圧力損失から各節点の圧力を求めている。配列変数の添字をピリオド“.”でつなぐことで4つの式を1行で表現している。

これを実行してみると、EQUATRAN-Mは収束計算の独立変数にQの全要素ではなしに、Q(1)、Q(3)、Q(5)を選択して収束計算に入る。なるほど(26)~(29)式を見ると、3変数を仮定すると他の流量は計算でき、ΔPも決定できる。つまり、各閉管路の中から1つずつの配管の

図9 管路網(2)



配管番号	管径 [m]	配管長 [m]	高低差 [m]	配管番号	管径 [m]	配管長 [m]	高低差 [m]	配管番号	管径 [m]	配管長 [m]	高低差 [m]
1	0.3	80	-0.3	15	0.2	1280	-8.7	29	0.2	520	5.7
2	0.3	1000	1.2	16	0.2	400	-4.2	30	0.2	650	-4.2
3	0.3	1700	-12.3	17	0.3	450	-3	31	0.2	270	4.2
4	0.25	680	-1.2	18	0.2	800	-1.5	32	0.3	10	69.9
5	0.3	900	53.7	19	0.3	600	1.2	33	0.2	220	-14.1
6	0.3	570	-7.2	20	0.3	600	-3.6	34	0.3	20	0
7	0.3	400	0.3	21	0.3	120	3.9	35	0.3	250	-11.1
8	0.3	180	-1.5	22	0.3	1100	-12.6	36	0.2	470	7.2
9	0.3	300	-9.6	23	0.3	820	1.5	37	0.2	500	-4.8
10	0.2	580	-9.3	24	0.3	800	4.8	38	0.3	30	-0.6
11	0.2	1280	-8.7	25	0.3	95	-1.2	39	0.3	170	0.3
12	0.2	470	14.1	26	0.3	95	-3.9	40	0.3	520	-15
13	0.3	530	3.9	27	0.25	930	-5.1	41	0.3	420	3
14	0.3	900	-0.3	28	0.25	700	-12.3				

流量を独立変数にすればよいことがわかる。

計算結果は図8のようになる。この条件では、5番の配管はほとんど不要であることがわかる。

## 管路網の計算

2

次に、図9のような大規模な管路網<sup>5)</sup>を考えてみることにする。基本的な考え方は既に説明した通りであるが、今度の場合は各節点の間に高低差が存在するので、それを考えに入れなければならない。つまり、2節点間の圧力差は圧力損失と位置エネルギー差を加えたものになる。高低差を  $\Delta h$  [m] とすると

$$\Delta P = CQ|Q| + \frac{g}{g_c} \rho \Delta h \quad (33)$$

である。ここで  $g$  は重力加速度 [m/sec<sup>2</sup>] である。

この問題のための EQUATRAN-M のソーステキスト

は図10のようになる。はじめの部分は図7のソーステキストが利用できるので、EQUATRAN-Mに内蔵されたスクリーンエディタを使って編集すればよい。先ほどパラメータにしておいた  $n$  や  $m$  がこういう時に生きてくる。20行目の式には位置エネルギー項が加えられている。30~60行目の式は各節点のまわりの流量について収支をチェックしながら機械的に作成することができる。62~71行目は10個の閉管路についての圧力バランスの式である。今度は閉管路が10個あるので、10変数による収束計算をすることになるが、図11のように解が得られる。

このように、管路網が複雑になっても、前項と同様に比較的簡単に対応することができる。

### おわりに

以上、いくつかの問題を方程式解法ソフトで解いた事例を紹介した。これらの問題はもちろんプログラムを書

図10 管路網(2) (EQUATRAN-Mのソーステキスト)

```

1: /* 管路網の計算 (2) */
2:
3: GLOBAL n = 41 ... /* 配管の数 */
4: m = 32 /* 節点の数 */
5: GLOBAL VAR rho = 1000 /* 比重 [kg/m3] */
6: mu = 0.001 /* 粘度 [kg/m*sec] */
7: sc = 0.80865 /* 重力換算係数 [kg*m/kg*sec2] */
8:
9: VAR Q(n) /* 流量 [m3/sec] */
10: P(m) /* 圧力 [kg/m2] */
11: dP(n) /* 圧力差 [kg/m2] */
12: D(n) /* 管径 [m] */
13: L(n) /* 配管長 [m] */
14: dh(n) /* 高低差 [m] */
15:
16: MACRO pdrop
17: VAR Re(n) /* レイノルズ数 [-] */
18: f(n) /* 摩擦係数 [-] */
19: C(n)
20: eq: dP = C * ABS(Q) * Q + rho * dh
21: C = 32 * f * (rho / (pi * D^5)) * (L / D^5)
22: Re = 4 * rho * ABS(Q) / (pi * mu * D)
23: f = 16 / Re
24: C = 0.0785 / (0.7 - 1.65 * LOG10(Re) + (LOG10(Re))^2) WHEN Re <= 3E3
25: RESET Q = -0.01[-0.3,0.3] BY eq
26: END pdrop

```

```

27:
28: CALL pdrop (Q = Q, D = D, L = L, dP = dP, dh = dh)
29:
30: Q(1) = Q(2) + Q(6) + 0.049 /* 2 */
31: Q(2) = Q(3) + Q(9) + 0.008 /* 3 */
32: Q(3) = Q(4) + 0.008 /* 4 */
33: Q(4) = Q(5) + Q(21) + 0.008 /* 5 */
34: Q(5) = -0.08 /* 6 */
35: Q(6) = Q(7) + Q(10) + 0.108 /* 7 */
36: Q(7) = Q(8) + Q(14) + 0.009 /* 8 */
37: Q(8) + Q(9) = Q(17) /* 9 */
38: Q(10) = Q(11) + Q(15) + 0.027 /* 10 */
39: Q(11) + Q(15) = Q(12) + 0.009 /* 11 */
40: Q(12) = Q(13) + Q(18) + Q(22) + 0.019 /* 12 */
41: Q(13) + Q(14) = Q(16) + 0.013 /* 13 */
42: Q(16) + Q(17) = Q(19) + 0.014 /* 14 */
43: Q(18) + Q(19) = Q(20) + 0.018 /* 15 */
44: Q(20) + Q(21) = Q(25) /* 16 */
45: Q(22) = Q(23) + 0.025 /* 17 */
46: Q(23) = Q(24) + 0.045 /* 18 */
47: Q(24) + Q(25) = Q(26) /* 19 */
48: Q(26) = Q(27) + Q(40) /* 20 */
49: Q(27) = Q(28) + 0.049 /* 21 */
50: Q(28) = Q(29) + Q(37) + Q(38) + 0.034 /* 22 */
51: Q(29) = Q(30) + Q(35) /* 23 */
52: Q(30) = Q(31) + Q(33) + 0.014 /* 24 */
53: Q(31) = Q(32) + 0.055 /* 25 */
54: Q(32) = -0.028 /* 26 */
55: Q(33) = Q(34) + Q(36) + 0.038 /* 27 */
56: Q(34) = -0.088 /* 28 */
57: Q(35) + Q(36) + Q(37) = 0 /* 29 */
58: Q(38) = Q(39) + Q(41) /* 30 */
59: Q(39) = -0.195 /* 31 */
60: Q(41) + Q(40) = 0.045 /* 32 */
61:
62: dP(2) + dP(9) - dP(8) - dP(7) - dP(6) = 0
63: dP(3) + dP(4) + dP(21) - dP(20) - dP(19) - dP(17) - dP(9) = 0
64: dP(7) + dP(14) - dP(13) - dP(12) - dP(11) - dP(10) = 0
65: dP(11) - dP(15) = 0
66: dP(8) + dP(17) - dP(18) - dP(14) = 0
67: dP(19) - dP(18) + dP(13) + dP(18) = 0
68: dP(20) + dP(25) - dP(24) - dP(23) - dP(22) + dP(18) = 0
69: dP(27) + dP(28) + dP(38) + dP(41) - dP(40) = 0
70: dP(29) + dP(35) - dP(37) = 0
71: dP(30) + dP(33) + dP(36) - dP(35) = 0
72:
73: P(1) = 52000
74: P(2, 3, 4, 5, 6) = P(1, 2, 3, 4, 5) - dP(1, 2, 3, 4, 5)
75: P(7, 8, 9) = P(2, 7, 8) - dP(6, 7, 8)
76: P(10, 11) = P(10, 11) - dP(10, 11)
77: P(12, 13, 14) = P(11, 12, 13, 14) - dP(12, 13, 14)
78: P(15, 16) = P(12, 15) - dP(12, 16)
79: P(17, 18, 19, 20, 21) = P(12, 17, 18, 19, 20) - dP(22, 23, 24, 26, 27)
80: P(22, 23, 24, 25, 26) = P(21, 22, 23, 24, 25) - dP(28, 29, 30, 31, 32)
81: P(27, 28) = P(24, 27) - dP(33, 34)
82: P(29) = P(27) - dP(35)
83: P(30, 31) = P(22, 30) - dP(38, 39)
84: P(32) = P(30) - dP(41)
85:
86: D = (0.3, 0.3, 0.3, 0.25, 0.3, 0.3, 0.3, 0.3, 0.3, 0.2, ...
87: 0.2, 0.2, 0.3, 0.3, 0.2, 0.2, 0.3, 0.2, 0.3, 0.3, ...
88: 0.3, 0.3, 0.3, 0.3, 0.3, 0.3, 0.25, 0.25, 0.2, 0.2, ...
89: 0.2, 0.3, 0.2, 0.3, 0.3, 0.2, 0.2, 0.3, 0.3, 0.3, ...
90: 0.3)
91:
92: L = (80, 1000, 1700, 680, 900, 570, 400, 180, 300, 580, ...
93: 1280, 470, 550, 900, 1280, 400, 450, 800, 600, 800, ...
94: 120, 1100, 820, 800, 95, 95, 930, 700, 520, 650, ...
95: 270, 10, 220, 20, 250, 470, 500, 30, 170, 520, ...
96: 420)
97:
98: dh = (-0.3, 1.2, -12.3, -1.2, 53.7, -7.2, 0.3, -1.5, -9.6, -9.3, ...
99: -8.7, 14.1, 0.9, -0.3, -8.7, -4.2, -3, -1.5, 1.2, -3.6, ...
100: 3.9, -12.6, 1.5, 4.8, -1.2, -3.9, -5.1, -12.3, 5.7, -4.2, ...
101: 4.2, 69.9, -14.1, 0, -11.1, 7.2, -4.8, -0.8, 0.3, -15, ...
102: 3)
103:
104: OUTPUT Q, P, dP

```

いて解くこともさほど難しくはない。しかし、われわれの目的は（趣味での場合は別として）プログラムをすることではない。いかに迅速にかつ信頼性の高い結果を得ることができるかが重要である。プログラミングやデバッグ、あるいはプログラムのドキュメント化など、本来必要のない仕事に費やしていた時間を省き、有効に活用できるところに方程式解法ソフトの存在意義があると言える。

なお、今回示した例以外に、化学工業で見られる非線形連立方程式を解く問題は多く、たとえば多重効用缶の設計、熱交換器の設計およびそのネットワーク問題、多段蒸留塔の設計などを方程式解法ソフトで扱った例が文献<sup>7)</sup>に紹介されている。

(はやしだ ゆたか, よこやま かつみ 三井東圧化学(株))

図11 管路網(2) (計算結果)

＜参考文献＞

- 1) 安岡正幸; 最近のプロセスシミュレーター, 化学工場, 第26巻, 第8号, (1982) P 58-64
- 2) 宮原量中; 化学工学の数値計算, コンピュートロル, No.12, (1985) P 49-54
- 3) Williams, T. J. and R. E. Otto; A Generalized Chemical Processing Model for the Investigation of Computer Control, AIEE Trans. 79 (Communication and Electronics), (1960) P 458
- 4) R. P. Tewarson; Sparse Matrices, Academic Press, 1973
- 5) 田中武二他; わかりやすいプログラミング 3 (フォートランの文法と実際), 産報, 1969, P 125-180
- 6) 伊藤二郎; 化学技術者のための流体工学, 科学技術社, 1972, P 49
- 7) 宮原量中他; 「EQUATRAN-M」——技術計算用連立方程式解法言語(1)~(9), ケミカルエンジニアリング, 第30巻第8号~第31巻第4号, (1985~6)

[ 計算結果 ]			
Q	: 流量 [m3/sec]		
1) 0.206	2) 0.04846334	3) -0.04983328	4) -0.05783328
5) -0.08	6) 0.1085367	7) -0.02599624	8) -0.07568586
9) 0.09029662	10) 0.0265329	11) -0.0002335509	12) -0.009467102
13) -0.05519469	14) 0.04068902	15) -0.0002335509	16) -0.02747507
17) 0.01461076	18) 0.00221713	19) -0.0286431	20) -0.04164718
21) 0.01416672	22) 0.02348046	23) -0.001519541	24) -0.04651954
25) -0.02748046	26) -0.074	27) -0.01044234	28) -0.05944234
29) 0.006935889	30) 0.009433004	31) 0.027	32) -0.028
33) -0.021567	34) -0.086	35) -0.002497116	36) 0.016433
37) -0.01393589	38) -0.08644234	39) -0.195	40) -0.06355766
41) 0.1085577			
P	: 圧力 [kg/m2]		
1) 52000	2) 50916.039715	3) 48471.934131	4) 62996.170645
5) 68998.194022	6) 16071.776515	7) 55055.034187	8) 54917.159146
9) 58919.137286	10) 62648.238724	11) 71349.01499	12) 57467.151955
13) 54400.490146	14) 59854.035736	15) 58911.989576	16) 63079.762079
17) 69695.688506	18) 68197.953903	19) 64322.301749	20) 68476.624474
21) 73753.523402	22) 89082.966756	23) 83244.112915	24) 87144.366116
25) 82124.424525	26) 12228.055542	27) 1.021302E+005	28) 1.022005E+005
29) 94345.735576	30) 89789.460711	31) 92149.386613	32) 84533.186621
dP	: 圧力差 [kg/m2]		
1) 1083.980285	2) 2444.105584	3) -14524.236514	4) -4000.023378
5) 50924.417508	6) -4138.984472	7) 137.875041	8) -2001.97814
9) 8447.203156	10) -7593.204537	11) -8700.776267	12) 13881.663026
13) 3066.661819	14) 516.669	15) -8700.776267	16) -5453.54559
17) -2834.89845	18) -1444.837612	19) 942.04616	20) -4167.772503
21) 3916.431944	22) -12228.536542	23) 1497.734603	24) 3875.652154
25) -1242.53967	26) -4154.322725	27) -5276.898928	28) -15329.443354
29) 6838.853841	30) -3900.2532	31) 5019.94159	32) 9895.368983
33) -14985.788077	34) -70.337286	35) -11101.622661	36) 7784.418617
37) -5262.76882	38) -706.493955	39) -2359.925902	40) -18056.564147
41) 5256.272091			