

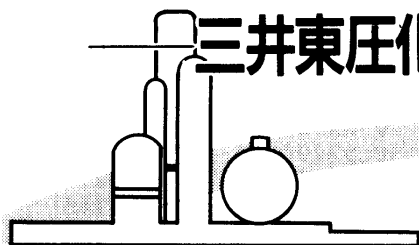
75

YD

使用実績10年を誇る

# 技術計算用簡易言語と化学工業への適用

## 三井東圧化学のEQUATRAN-Mの概要



宮原 晁 中  
山 田 明

研究を効率的に進める努力がなされている。CADD(コンピューター・エイデッド・ドラッグ・デザイン)などもその典型であり、AI(人工知能)も重点テーマになりつつある。このような最先端の課題でなくても従来から効率化のはかられているものにイオン平衡、化学平衡などの方程式の解法がある。

パソコンが普及して多くのプログラムが開発され、手軽に方程式が解けるようになったが、しかし既製のプログラムでは解けない問題は後を断たず、プログラムの修正を余儀なくされることもしばしばである。こんなとき、手軽に使える技術計算用簡易言語があればとだれしも願うものである。

ここで紹介するEQUATRAN-Mはこの目的にぴったりの汎用プログラムであり、化学者または化学技術者を煩雑な仕事から解放してくれ、より創造的仕事に専念させてくれるツールといえる。

### 1. EQUATRAN-Mとは

EQUATRAN-Mは、三井東圧化学で開発した方程式解法言語であるが、その源をたどれば大形コンピューター上に開発して社内使用10年の実績を持つEQUATRAN<sup>(1)</sup>であり、パソコンの操作性をとりいれ、併せて機能アップしたプログラムである<sup>(2)</sup>。連立方程式を記述すれば、これを變形、解ける順序に並べ替えてプログラム化する一連の作業を実施するたいへん便利なツールである。

方程式には、代数方程式だけでなく常微分方程式も含まれ、これらの混合系をも対象とする汎用ソフトであり、計算結果を必要に応じて図形出力する機能も備えている。方程式の記述には添字が二つまで許されており、たいていの問題は処理できる。組み込み関数29種、条件によって異なる関数(式)の記述、最適化問題、関数関係を表形式で与えることなど、10年の社内使用、1年の販売実績を活かして、便利さをその極限まで追求したものとなっている。

以下、イオン平衡、ナフサのクラッキング、エコシステムのシミュレーション、実験データの整理の例題を通じて、その機能の一端を紹介する。

### 2. 連立方程式の解法例

**【例題1】** 0.05Mの $\text{H}_2\text{CO}_3$ 水溶液50mlを0.1Mカ性ソーダ水溶液で滴定するとき、pHと滴定量との関係を図示せよ<sup>(3)</sup>。

**【解】** 表1、図1にEQUATRAN-Mへの入力リストと出力を示す。

/\* \*/で囲まれた部分は注釈行でこれを活用するとドキュメント性が一段と向上する。12行のVAR文は" "で囲まれた属性を与えたり、数値の設定(=)、初期値の仮定(#)、添字の範囲を規定するなどの宣言に用いる。属性は入力・出力のさいの単位などを明示するなど、これらのリフト

表1 例題1の入力リストと計算結果

(a) 例題1の入力リスト

(b) 例題1の計算結果

		Vb	pH
1:	/* 強塩基によるジプロトン酸の滴定 */		
2:	/* ----- */		
3:	/* 出典:H.Freiser,Q.Fernando共著 藤永.関戸訳 */		
4:	/* 『イオン平衡-分析化学における-』(化学同人)*/		
5:	/* pp.195-196 (1967) */	0	3.801202
6:	/* ----- */	0.002000000	5.240000
7:	/* H2CO3 = HCO3- + H+ :Ka1 */	0.004000000	5.580006
8:	/* HCO3- = CO3-- + H+ :Ka2 */	0.006000000	5.799450
9:	/* H2O = OH- + H+ :Kw */	0.008000000	5.972639
10:	/* NaOH --> OH- + Na+ */	0.01000000	6.123864
11:	/* ----- */	0.01200000	6.265143
12:	VAR A "CO3-- の容量モル濃度 [M] "...	0.01400000	6.404571
13:	ca = 0.05 "H2CO3 の分析濃度 [M] "...	0.01600000	6.549598
14:	cb = 0.10 "NaOH の分析濃度 [M] "...	0.01800000	6.709673
15:	H "H+ の容量モル濃度 [M] "...	0.02000000	6.901025
16:	HA "HCO3- の容量モル濃度 [M] "...	0.02200000	7.162350
17:	H2A "H2CO3 の容量モル濃度 [M] "...	0.02400000	7.655216
18:	Kw =1.e-14 "水のイオン積 [M2] "...	0.02600000	8.941945
19:	Na "Na+ の容量モル濃度 [M] "...	0.02800000	9.434185
20:	OH "OH- の容量モル濃度 [M] "...	0.03000000	9.694683
21:	pH "= - log10[H+] [-] "...	0.03200000	9.884909
22:	pKa1 = 6.30 "= - log10(Ka1) [-] "...	0.03400000	10.04341
23:	pKa2 =10.30 "= - log10(Ka2) [-] "...	0.03600000	10.18613
24:	Va = 0.05 "H2CO3 の添加量 [l] "...	0.03800000	10.32203
25:	Vb "NaOH の添加量 [l] "...	0.04000000	10.45757
26:	Vt "全添加量 [l] "	0.04200000	10.59860
27:	/* ----- */	0.04400000	10.75155
28:	(Na)+(H)=(OH)+(HA)+ 2*(A) /* 電荷均衡式 */	0.04600000	10.92357
29:	(H2A)+(HA)+(A)= ca*Va/Vt /* Cの質量均衡式 */	0.04800000	11.11944
30:	(Na) = cb*Vb/Vt /* Naの質量均衡式 */	0.05000000	11.32958
31:	Va+Vb = Vt	0.05200000	11.52397
32:		0.05400000	11.68166
33:	(HA)*(H)/(H2A) = 10^(-pKa1) /* 第1解離平衡式 */	0.05600000	11.80455
34:	e: (A)*(H)/(HA) = 10^(-pKa2) /* 第2解離平衡式 */	0.05800000	11.90160
35:	(H)*(OH) = Kw /* H2O解離平衡式 */	0.06000000	11.98027
36:		0.06200000	12.04564
37:	pH = -log10(H)	0.06400000	12.10113
38:		0.06600000	12.14903
39:	/* 収束計算の指定 */	0.06800000	12.19098
40:	RESET pH# 3.0 [0,14] BY e	0.07000000	12.22813
41:		0.07200000	12.26137
42:	/* 繰返し計算の指定 */	0.07400000	12.29133
43:	REPEAT Vb[0,0.0760] step 0.0001	0.07600000	12.31855
44:			
45:	/* 数値出力の指定 */		
46:	TREND pH step 0.0020		
47:			
48:	/* グラフ出力変数の指定 */		
49:	OUTPUT1 Vb,pH step 0.0001		

と出力がそのまま報告書の一部として使用できるようにとの配慮から設けられたものである。

変数には英数字(英字は大・小文字を区別)が使えるので、化学者が慣例として使用する記号が使える。28行はイオンのバランス、29行はCの保存則、33~35行はイオン平衡の式をそれぞれ示している。

EQUATRAN-Mの便利なところは39行以降にある。すなわち、28~38行まではこのままにしておき、39行~以降を変更していろいろな問題に対応できる。40行は収束計算の指定であり、pHを独

立変数に選びその初期値を3.0とし、pHが0~14の範囲を探索して34行のe:のついた式を収束のチェックに使うことを意味する。

本例題のように非線形方程式は、独立変数とその初期値の選び方が解法の成否を決定するが、EQUATRAN-Mでは、これらを簡単に試行できることが一つの特徴である。49行はグラフ出力用(OUTPUT 1)にVb, pHを、Vb 0.0001(l)きざみで出力することを指定している。46行(TREND文)は(REPEAT文で指定した)VbとpHのトレンドテ

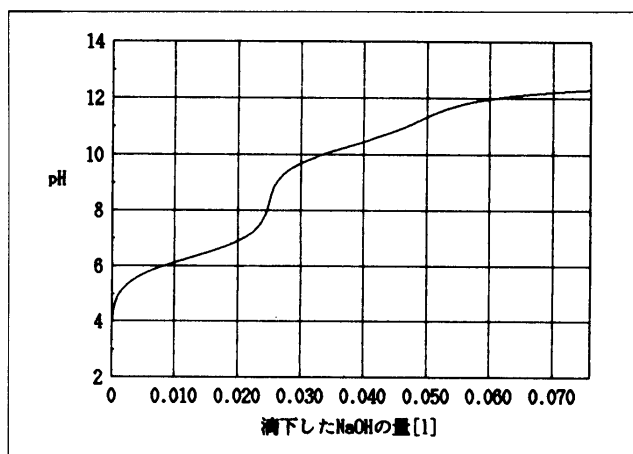


図1 例題1の結果のグラフ(滴定曲線)

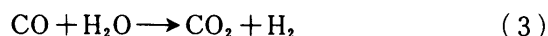
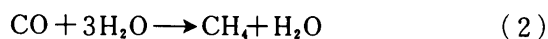
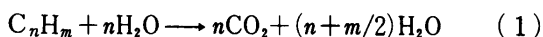
ーブルおよびトレンドグラフ(プリンターにより文字をプロットしてグラフとするもの)を出力する(ここではトレンドグラフの表示は省略). 43行はケーススタディーを指定(REPEAT文)するが, その内容は  $V_b$  を0から0.0001ごとに0.076まで変えながら次々と計算することを示す.

以上を実行するとグラフ出力用のデータが出力されるので, 続いてEQUATRAN-M内蔵のグラフ用プログラムを呼出し, いろいろな指定をする. 両軸の変数に何を選ぶか, 表示の文字, その上下限值, 目盛, けい線の間隔(暗黙値を使うこともできるが, 使用者が指定してより見やすいものに変えることもできる), グラフは折線, 滑らかな曲線の別, 線の種類(実線, 点線, 一点鎖線など)などの指定を表に次々に埋め込んでいく方式で実施する. 結果はディスプレイ上に表示されるので, そのハードコピー(大・小2種指定可)をとると図1の結果を得る.

このように, EQUATRAN-Mでは入力・出力をそのまま添付するだけで, コンパクトで上質でわかりやすい報告書にもなる.

以上でおわかりいただけたと思うが, いわゆるプログラミングの知識はほとんどなくてもEQUATRAN-Mは使えるので, 一般にいわれている数学嫌いの化学者にさえ便利に使えるものと思う.

**【例題2】** ナフサ(平均組成  $C_nH_m$ )を, スチームリフォーミングして生成するガスの組成を300~630℃にわたり求めよ(反応圧力10 atm). ただし, 反応などは次のとおりとする.



平衡定数は次のとおりである.

温度 [°C]	327	427	527	627
$K_{p_2}$ ((2)式)	$2.06 \times 10^6$	$3.87 \times 10^3$	33.2	0.718
$K_{p_3}$ ((3)式)	28.8	9.46	4.25	2.31

なお  $n=5.9$ ,  $m=13.4$  とし, スチームはCに対して1.7倍(モルベース)使うものとする<sup>(4)</sup>.

**【解】** リストと出力を表2, 図2に示す. 本例題ではさらに広い機能を駆使し能率よく問題に対処している. VAR文では  $x$  が5成分分を表わしており  $x(5)$  となっている. 12行のLOCAL文では, たとえば,  $CO=1$  とはまずリスト中のCOとあるところをすべて1と置き換えて考えることを示している.  $x(CO)$  は  $x(1)$  と書くよりその意味が明瞭になり, 式を立てる時のミスなどの軽減に役立つ. 30~32行はTABLE文であり表で与えられた数値を式化するときを使う.

31行は  $t2(1)=327, t2(2)=427, \dots, t2(4)=627$  を表わしており, このような簡便な表現が許されており, むしろ望ましい形である. 各点の間は一次内挿して関数値を得る. 32行で右辺  $\log e$  とあるが, これは組込み関数で自然対数  $\ln$  を表わす. 数値の前にこれが置かれているので, 32行は,

$$\log e K_{p2} = (\log e(2.06e6), \log e(3.87e3), \log e(33.2), \log e(0.718))$$

と同じであり, このことは  $K_{p2}$  の対数をとったものにつき一次内挿することを意味している.  $2.06e6=2.06 \times 10^6$  である. 41~45行は明らかであろう.

57~58行は注釈を要する. SUMは組込み関数で  $\sum x_i$  (全要素につき, ここでは五つの要素につき) を表わす.  $SUM(y(1.2.4.5))$  は  $y(1)+y(2)+y(4)+y(5)$  とも書くことができる. このように要素を指定するのも簡単にできるように工夫されている.  $y(1.2.4.5)$  は  $y(1:2.4:5)$  とも書け, これは1から2までと4から5までの要素を意味するので, 同じ内容を表現していることがわかる.

68行はトレンドテーブル用出力指定であり,  $t$  を50ごとに指定している.  $yd, y, a$  は全要素を意味し,  $yd(1) \sim yd(5), y(1) \sim y(5), a(1) \sim a(5)$  の意である.

71行のOUTPUT 1文はグラフ用出力指定. 61~

表2 例題2の入力リ

ストと計算結果

(a) 例題2の入力リスト

```

1: /* 軽質ナフサを原料とした都市ガス製造プロセス */
2: /* (スチームリフォーミング) */
3: /* 文献:城塚他著『エネルギー化学工学』(昭晃堂)*/
4: /* pp 115-118 (1981) */
5: /* ----- */
6: CnHm + nH2O ---> nCO + (n+m/2)H2
7: CO + 3H2 = CH4 + H2O (メタン化)
8: CO + H2O = CO2 + H2 (シフトコンバージョン)
9: /* ----- */
10: LOCAL Ne = 3 /* 反応式の数 */
11: Nc = 5 /* 成分の数 */
12: LOCAL CO = 1, H2 = 2, H2O = 3, CH4 = 4, CO2 = 5
13: /* 成分番号の設定 */
14:
15: /* ----- */
16: VAR a(Ne) "反応進行度 [mol] "
17: m = 13.4 "平均水素組成 [-] "
18: n = 5.9 "平均炭素組成 (CnHm) [-] "
19: P = 10.0 "反応圧力 [atm] "
20: r = 1.7 "スチーム比 (H2O/C) [-] "
21: t "反応温度 (300-630) [°C] "
22: x(Nc) "モル数 [mol] "
23: xo(Nc) "初期モル数 [mol] "
24: y(Nc) "モル分率 [-] "
25: yd(Nc) "モル分率 (トライアース) [-] "
26: /* ----- */
27:
28: /* メタン化反応 平衡定数の温度依存性 */
29: VAR t2(4), logeKp2(4)
30: TABLE logeKp2 = logeKpm(t2)
31: t2 = ( 327, 427, 527, 627 )
32: logeKp2 = loge(( 2.06e6, 3.87e3, 33.2, 0.718 ))
33:
34: /* シフトコンバージョンの 平衡定数の温度依存性 */
35: VAR t3(4), logeKp3(4)
36: TABLE logeKp3 = logeKps(t3)
37: t3 = ( 327, 427, 527, 627 )
38: logeKp3 = loge(( 28.8, 9.46, 4.25, 2.31 ))
39:
40: /* 化学量論式 */
41: x(CO) = xo(CO) + n*a(1) - a(2) - a(3)
42: x(H2) = xo(H2) + (n+m/2)*a(1) - 3*a(2) + a(3)
43: x(H2O) = xo(H2O) - n*a(1) + a(2) - a(3)
44: x(CH4) = xo(CH4) + a(2)
45: x(CO2) = xo(CO2) + a(3)
46:
47: /* 初期モル数 */
48: xo(CO)=0; xo(H2)=0; xo(CH4)=0; xo(CO2)=0
49: xo(H2O) = n*r
50: a(1) = 1 /* 計算簡略化のための仮定 */
51:
52: /* 平衡式(質量作用の法則) */
53: eq1: y(H2O)*y(CH4) = exp(logeKpm(t))*y(CO)*y(H2)^3*P^2
54: eq2: y(H2) * y(CO2) = exp(logeKps(t))*y(CO)*y(H2O)
55:
56: /* 生成ガス組成の計算 */
57: y = x/sum(x)
58: yd = y/sum(y(1.2.4.5)) /* トライアース生成ガス組成 */
59:
60: /* 収束条件の設定 */
61: RESET y(H2) #0.01 [0,1] BY eq2 UNTIL 0.001%
62: RESET y(H2O)#0.30 [0,1] BY eq1 UNTIL 0.001%
63:
64: /* 繰返し実行の指定 */
65: REPEAT t [300,630] step 50
66:
67: /* 結果の出力 */
68: TREND yd,y,a step 50
69:
70: /* グラフ出力の設定 */
71: OUTPUT1 t,yd(1),yd(2),yd(3),yd(4),yd(5) step 50

```

(つづく)

表2 例題2の入力リストと計算結果 (つづき)

(b) 例題2の計算結果

t	1:yd(1) 6:y(1) 1:a(1)	2:yd(2) 7:y(2) 2:a(2)	3:yd(3) 8:y(3) 3:a(3)	4:yd(4) 9:y(4)	5:yd(5) 0:y(5)
300.0000	0.0001402945 6.33697E-005 1.0000000	0.03052401 0.01378740 4.578346	1.213907 0.5483097 1.320800	0.7523045 0.3398086	0.2170312 0.09803087
350.0000	0.0004676278 0.0002155920 1.0000000	0.05599638 0.02581620 4.536775	1.169040 0.5389666 1.360302	0.7258868 0.3346581	0.2176492 0.1003435
400.0000	0.001559087 0.0007451312 1.0000000	0.09967788 0.04763884 4.459143	1.092366 0.5220721 1.430640	0.6804517 0.3252069	0.2183113 0.1043371
450.0000	0.004503591 0.002266899 1.0000000	0.1602978 0.08068651 4.335514	0.9866744 0.4966463 1.532843	0.6170407 0.3105898	0.2181578 0.1098106
500.0000	0.01095014 0.005873836 1.0000000	0.2313894 0.1241211 4.159939	0.8642223 0.4635833 1.656006	0.5419277 0.2906991	0.2157328 0.1157227
550.0000	0.02407104 0.01391510 1.0000000	0.3111114 0.1798487 3.907331	0.7298504 0.4219153 1.786512	0.4562230 0.2637355	0.2085946 0.1205853
600.0000	0.04659121 0.02912908 1.0000000	0.3912318 0.2446003 3.564187	0.5994739 0.3747944 1.884265	0.3677566 0.2299235	0.1944204 0.1215527
630.0000	0.06754907 0.04442906 1.0000000	0.4419009 0.2906516 3.278575	0.5203803 0.3422698 1.907323	0.3101305 0.2039822	0.1804196 0.1186674

62行は、本例題の式を解くには二つの値を仮定する必要があり、それぞれの変数をいくらに仮定するかを示している。ここでUNTIL 0.001%は収束の精度を暗黙値(10<sup>-6</sup>%)から変更して計算時間を節約している。

グラフについて若干説明しよう。グラフ用出力ではyd(1)~yd(5)を指定しているが、グラフにはその中のyd(3)を除く4本を描いている。この4本を区別するには線の種類を変えているが、これらがどれに対応するかを凡例で示すことがで

きる。凡例を枠外に示しているが、枠内の任意の位置に移動するように指示してもよい。また線のすぐわきに文字などをディスプレイ上で記述することもできるなど、EQUATRAN-Mは豊富なグラフ化機能を持っている。

### 3. 常微分方程式の解法例

#### 【例題3】 水圏エコシステムの汚染<sup>(5)</sup>

カナダのブリティッシュコロンビアのクーテネイ湖で汚染が進行しはじめたのでエコシステムのシミュレーションが必要になった。モデルでは物理的要因

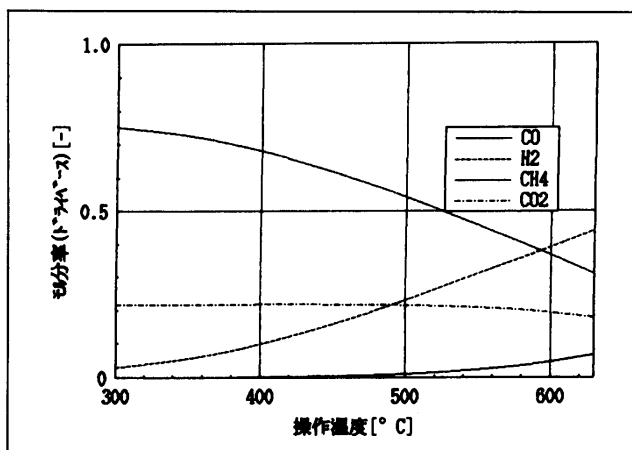


図2 例題2の結果のグラフ

表3 シミュレーションモデルにおける増加率と減少率

	増加率	減少率		
		自然	捕食	移住
植物プランクトン(A)	$A_1 e(T)PF$	$A_2 T$	$A_3 CT$	
動物プランクトン(C)	$C_1 f(T)AFg(P)$	$C_2 Tg(P)$	$C_3 BT$	
陸封サケ(B)	$B_1 CT$	$B_2 T$	$B_3 h(W)$	

(注) W:時間 [week(週)]  
T:温度 [°C]  
P:日照時間 [hr/day]  
F:湖内リン酸濃度 [ $\mu\text{g/l}$ ]

e, f, h:標準分布関数  
g:サイン関数  
添字の付いたものはすべて定数

表4 例題3の入力リスト

として河川流量、河川のリン酸濃度、湖の水温とリン酸濃度および日照時間を取りあげた。週単位で年間のシミュレーションを行う。

(1) クーテネイ湖

日照時間 [h/day]:  $P = 12.2 + 4.1 \sin\left[\frac{(38 - W)}{52} 2\pi\right]$  (4)

水温 [°C]:  $T = 4.0 + 14.0 \exp\left[-0.5 \left(\frac{W - 34}{9}\right)^2\right]$  (5)

ただし、 $W \leq 8$  のとき  $W = W + 52$

(2) クーテネイ川

流量 [m<sup>3</sup>/week]:  $RF = 604.8 \times 28.32 \{4500 + 52000 \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{W - 22}{4.5}\right)^2\right]\}$  (6)

リン酸塩濃度 [μg/l]:  $FCR = 1275 - 1020 \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{W - 24}{7.5}\right)^2\right]$  (7)

生物的要素として植物プランクトン、サケ、動物プランクトンを取りあげるが、それらの増加率、減少率を表3に示す。

一方、クーテネイ湖内リン酸塩濃度 (F) は、

$$\frac{dF}{dW} = F_1 - F_2 \frac{dC}{dW} - F_3 \frac{dA}{dW} \quad (8)$$

で与えられ、 $F_2$ 、 $F_3$  は定数であるが、 $F_1$  はVOLを湖の容積として、

$$F_1 = \frac{RF(FCR - F)}{VOL} \quad (9)$$

で与えられる。そのほかの詳細は文献のBASICプログラムから読み取って解くことにする。

【解】 リストと結果を表

4、図3に示す(9、16行の

10e-1、10e-9は10<sup>-1</sup>、10<sup>-9</sup>の意)。ただし、TRENDE文による数値データのリストは省略する。

新たに出た機能を説明する。条件付きの式が49、50行に出ているが説明は省略。exp、sinは組込み関数\_piは組込み定数で円周率πである。微分方程式は微分項を▽ (たとえばA▽)で示す(2階の場合A▽▽のように)。また微分方程式は左辺にA▽

```

1: /* 水圏エコシステムの汚染モデル */
2: /* 参考文献:高倉ら『農学・生物学のためのコンピュータ応用』
3: (オーム社) pp.166-170 (1983) */
4: /* ----- */
5: VAR
6: A # 0.2 "植物プランクトン濃度 [mg/l]"
7: B # 5.0 "陸封サケの生息密度 [kg/ha]"
8: C # 0.1 "動物プランクトン濃度 [no/l]"
9: C_ " [no/l]*10e-1"
10: F # 150.0 "クーテネイ湖内リン酸濃度 [micro.g/l]"
11: Fcr "クーテネイ川内リン酸濃度 [micro.g/l]"
12: Gp "= func(P)"
13: P "日照時間 [hr/day]"
14: Rf "クーテネイ川流量 [m^3/s]"
15: Rf_ " [l/s]*10e-9"
16: T "クーテネイ湖水温 [°C]"
17: Vol=2.6529e10 "クーテネイ湖容積 [l]"
18:
19: /* パラメータ */
20: a1 = 0.00014; b1 = 0.00048; c1 = 0.01
21: a2 = 0.002 ; b2 = 0.001 ; c2 = 0.03 ; f2 = 0.6
22: a3 = 0.006 ; b3 = 0.050 ; c3 = 0.001; f3 = 20.0
23: /* ----- */
24:
25: /* クーテネイ湖における生物的要素に関するモデル */
26: A' = A*(a1*exp(-0.5*((T-18.)/3)^2)*P*F ..
27: -a2*T-a3*T*C)
28: B' = B*(b1*C*T-b2*T ..
29: -b3*exp(-0.5*((W-40)/3)^2))
30: C' = C*(c1*exp(-0.5*((T-13.)/8)^2)*Gp*A*F ..
31: -c2*Gp*T-c3*T*B)
32: F' = f1 - f2*C' - f3*A'
33:
34: INTEGRAL W [0,52] STEP 0.1 BY RKV
35:
36: /* 物理的要因に関するモデル */
37: Fcr= 1275.- 1020.*exp(-0.5*((W-24)/7.5)^2)
38: Gp = 0.82 + 0.343*sin(((P-7.2)/10.4)*2*_pi)
39: P = 12.2 + 4.100*sin(((38-W)/52.0)*2*_pi)
40: Rf = 604.8*28.32*
41: (4500.+52000.*exp(-0.5*((W-22)/4.5)^2))
42: T = 4.0 + 14.00*exp(-0.5*((W-34)/9.0)^2)
43:
44: C_ = 0.1*C
45: f1 = Rf*(Fcr-F)/Vol
46: Rf_ = 1.0e-9*Rf
47:
48: Wa= W when W> 8 ..
49: = W+52 when W<=8
50:
51: /* グラフ出力変数の指定 */
52: OUTPUT1 W,A,B,C_,F,Fcr,P,Rf_,T STEP 0.2
53:
54: /* 数値出力の指定 */
55: TREND A,B,C_,F,T STEP 1.0

```

＝のように書く必要はない(32行)。独立変数を明示するためにINTEGRAL文があり、変数名、その積分のはじめと終わり、きざみ幅、解法の種類などを与える(といってもきざみ、解法の種類を与えるには専門的知識が必要なので暗黙値にしておけばよい。実行時間が節約できない以外、特に支障はないはず)。これらの結果をグラフに示す。縦

軸が左右両側にあるもの、2種以上のグラフを描いたもの、複雑な凡例を入れたものなどが得られる。

一般に微分方程式はその解をグラフ表示しないとほとんど解釈不可能であるが、EQUATRAN-Mではグラフ化までの一連の作業を簡単な操作で

表5 例題4の入力リスト

```

1: /* 定圧モル比熱の温度依存性 */
2: /* ----- */
3: LOCAL N = 8
4: VAR T(N) "温度データ [°K]",...
5: Cp(N) "定圧モル比熱データ [cal/mol/°K]"
6: /* ----- */
7:
8: T = ( 200, 250, 300, 350, 400, 450, 500, 550)
9: Cp = ( 8.27, 8.97, 9.59, 10.10, 10.62, 11.02, 11.30, 11.59)
10:
11: /* グラフ出力変数の指定 */
12: OUTPUT1 T, Cp
13:

```

行え、しかもその結果がそのまま報告書にできる

特徴がある。

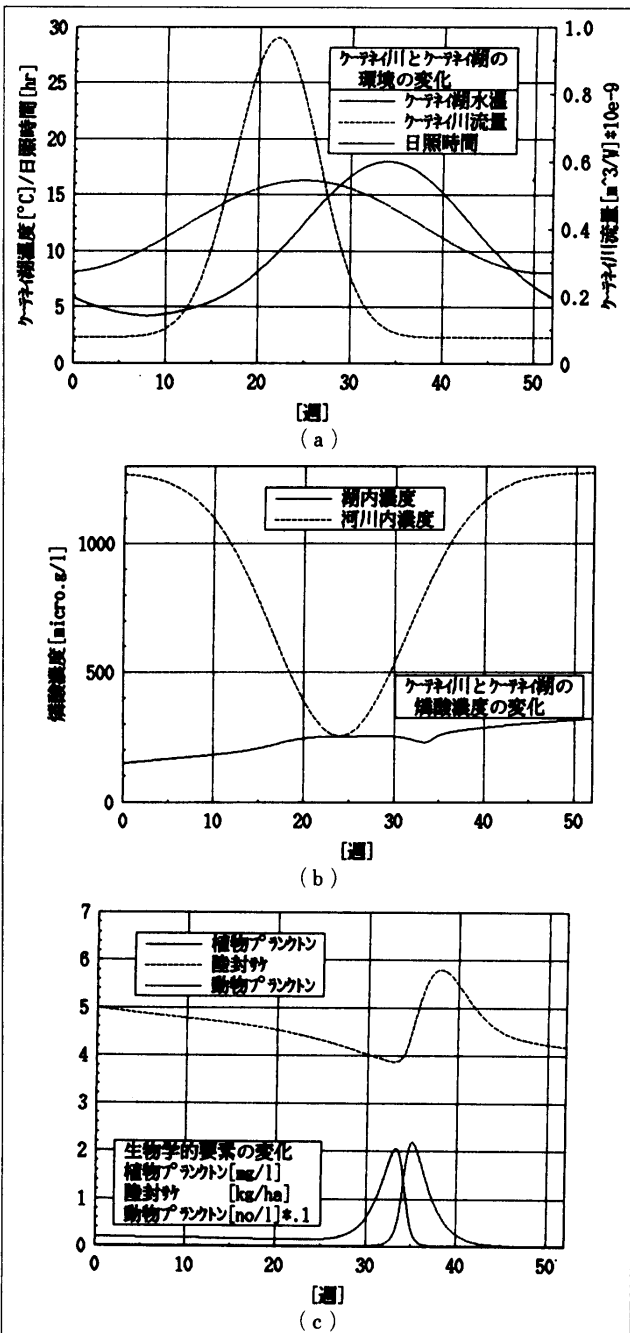


図3 例題3の結果のグラフ

#### 4. 実験データの整理

【例題4】 温度と定圧モル比熱データが下のように入力されている。

温度 [°K]	200, 250, 300, 350, 400, 450, 500, 550
比熱 [cal/mol°K]	8.27, 8.97, 9.59, 10.10, 10.62, 11.02, 11.30, 11.59

実験データのプロットと近似曲線を求めよ。

【解】 実験データのプロットと近似曲線を求める問題にはしばしば遭遇する。このような場合、EQUATRAN-Mのプロット機能を利用すると便利である。単にデータを入力するだけで1次、2次、3次の曲線近似までやってくれる。例題の結果を表5、図4に示す。図4は2次曲線近似機能を利用した結果である。近似曲線が1~3次でなく、生長曲線など非線形のパラメーターを含む場合にも、リスト中にその式と最適化の式を簡単に書くだけでほぼ同様の目的を達成できる(例題5参

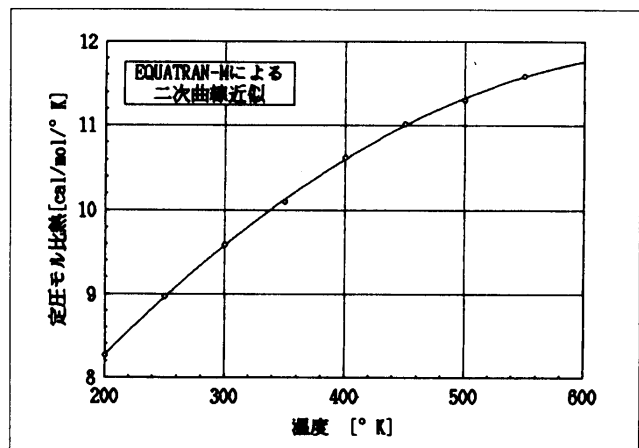


図4 例題4の結果のグラフ

表6 例題5の入力リストと計算結果

(a) 例題5の入力リスト

```

1:  /* 定圧モル比熱の温度依存性--FIND文の利用 */
2:  /* ----- */
3:  LOCAL N = 8
4:  VAR T(N)   "温度データ" [° K] "...
5:  Cp(N)     "定圧モル比熱データ [cal/mol/° K] "...
6:  Cpcal(N)  "定圧モル比熱計算値 [cal/mol/° K] "...
7:  /* ----- */
8:
9:  T = ( 200, 250, 300, 350, 400, 450, 500, 550)
10: Cp = ( 8.27, 8.97, 9.59, 10.10, 10.62, 11.02, 11.30, 11.59)
11:
12: Cpcal = a + b*T + c*T^2
13: f = sum((Cp-Cpcal)^2)
14:
15: FIND (a#4.5[2.0,7.0],b#0.02[0.0,0.1],c#-1.0e-5[-0.01,0.0]) ..
16: MINIMIZE f UNTIL 0.5 %
17:
18: /* グラフ出力変数の指定 */
19: OUTPUT a,b,c,f
20: OUTPUT1 T,Cp,Cpcal
    
```

(b) 例題5の計算結果

[ 計算結果 ]	
a	= 4.834474
b	= 0.0201408
c	= -1.428826E-005
f	= 0.003161441

照). この種のデータプロットと近似曲線の表示は EQUATRAN-M の最もひんぱんに使用される用途の一つの予想される。

グラフ化機能によると、渦巻型のグラフ(平面グラフ)も描けるので、位相面解析などにも使用できるし、二つ以上のグラフを重ねることもでき、技術計算に通常出るグラフの大部分をカバーしている。したがって、この“グラフ化→報告書”の部分だけでも有用であろう。

**【例題5】** 例題4で最小2乗の式も書いて解答を示せ。

**【解】** リストを表6に示す。結果のグラフは前例題と同じになるので省略した。一般には、12行に当たる近似式がパラメーター(ここでは a, b, c)につき非線形のときの使用例である。FIND文は最適化の機能であり、a, b, cの初期値(#で示す)、探索範囲([下限値, 上限値])、最大、最小の別、目的関数(f)、精度(UNTIL 0.5%)を与えるだけでよい。OUTPUT文はプリンターへの出力の指示。

× × ×  
以上、EQUATRAN-Mの機能の一端を例題を

通してきてきたが、それらはEQUATRAN-Mが簡単に使える便利なツールであることをアピールしたものと思う。ここに示した以外にも多くの機能を備えているが、それらは他の文献<sup>(6),(7)</sup>を参照していただきたい。文法を含め、わかりやすく述べられているので大いに参考になると確信する。冒頭にも述べたように、EQUATRAN-Mが煩雑な業務から化学者、化学技術者を解放して、より創造的の仕事にうちこめるようお手伝いできることを望みつつ本稿を終わることにする。

参考文献

- (1) Oguchi, G. and M. Mitsunaga: "A Powerful Language to Solve a set of Nonlinear Equations", Preprint of International Congress "Contribution of Computer to the Development of Chemical Engineering and Industrial Chemistry", Paris, Mar. 7~10, 1978.
- (2) 小口梧郎: 創造的技術者の生産性を高めるパソコン用方程式解法ソフト, 日経コンピュータ, p.207, 1985. 9. 30号.
- (3) H. Freiser, Q. Femando 共著, 藤永, 関戸訳: イオン平衡—分析化学における—, 化学同人, pp.195-196 (1967).
- (4) 城塚, 他: エネルギー化学工学, 昭晃堂, pp.115~118 (1981).
- (5) 高倉ら: 農学・生物学のためのコンピュータ応用 pp.166~170, オーム社 (1983).
- (6) 宮原, 他: EQUATRAN-M 技術計算用連立方程式解法言語ケミカルエンジニアリング, No. 8, p. 63, (1985), (~No. 4 (1986)まで9回連載).
- (7) 小口・佐渡友, 他: 化学工業における数値計算, INFORMATION, No. 8, p. 54, (1986), (~No. 1 (1987)まで6回連載).

(三井東圧化学 システム部  
次長 [ミヤハラ コレアツ]  
企画開発室 主務 [ヤマダ アキラ])