

# 続連載「EQUATRAN-M」技術計算用 方程式解法言語

## (II)

### EQUATRAN-Mで微分方程式を解く

佐渡友 秀 夫\*

宮 原 暁 中\*\*

前回<sup>1)</sup>はEQUATRAN-Mの拡張された機能のうち主にグラフ描画について説明した。今回は微分方程式の解法機能について解説する。

EQUATRAN-Mの微分方程式解法機能は、常微分方程式の初期値問題を解くことを基本としているが、もともとからある代数方程式の解法と組み合わせるとたいいていの微分方程式を解くことができる。

#### 1. 気流中の粒子の運動 (連立常微分方程式)

まず、簡単な連立常微分方程式の例として気流中の粒子の運動を取りあげる。

##### <例題 II.1: 気流中の粒子の運動>

$H$  [m] の高さから水平流速  $v$  [m/s] の気流中に粒径  $D_p$  [m] の球形固体粒子を落下させたときの飛跡を求めよ。なお、空気の密度  $\rho$  は  $1.3\text{kg/m}^3$ 、粘度  $\mu$  は  $1.9 \cdot 10^{-5}\text{kg/m}\cdot\text{s}$  とし、粒子の密度  $\rho_p$  は  $2700\text{kg/m}^3$  とする。

解) 流体抵抗を考慮した粒子の2次元運動は、時間を  $t$  [s]、水平、垂直方向速度を  $u_h, u_v$  [m/s] として次式で表される<sup>2)</sup>。

$$m \frac{du_h}{dt} = -C \cdot A \left( \frac{\rho u^2}{2} \right) \cdot \frac{u_h - v}{u} \quad (\text{II-1})$$

$$m \frac{du_v}{dt} = -m \cdot g \frac{(\rho_p - \rho)}{\rho_p} - C \cdot A \left( \frac{\rho u^2}{2} \right) \cdot \frac{u_v}{u} \quad (\text{II-2})$$

$$u = \sqrt{(v - u_h)^2 + u_v^2} \quad (\text{II-3})$$

ここで、 $A$  は粒子の投影面積 ( $= \pi D_p^2 / 4$ ) [m<sup>2</sup>]、 $m$  は粒子の質量 ( $= \rho_p \cdot \pi D_p^3 / 6$ ) [kg]、 $g$  は重力加速度 [m/s<sup>2</sup>]、 $C$  は抵抗係数 [-] である。なお、 $C$  は  $Re$  数 ( $= \rho \cdot u \cdot D_p / \mu$ ) の関数として

$$\left. \begin{aligned} Re < 1000 \quad C &= \left( \frac{24}{Re} \right) (1 + 0.125 Re^{0.72}) \\ Re \geq 1000 \quad C &= 0.44 \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-4})$$

で表される<sup>3)</sup>。また、粒子の水平、垂直方向の位置をそれぞれ  $x$  [m] と  $y$  [m] で表すと、その時間微分が速度である。

$$dx/dt = u_h, \quad dy/dt = u_v \quad (\text{II-5})$$

この問題では  $u_h, u_v, x, y$  に関する4元連立常微分方程式を  $t=0$  における状態 (初期条件)

$$u_h = 0, \quad u_v = 0, \quad x = 0, \quad y = H$$

から始めて時間  $t$  について数値積分すれば、飛跡  $(x, y)$  を求めることができる (このように微分方程式の数だけ初期条件が与えられる問題を初期値問題という)。

これを解くためのリストが表 II-1 である。3~14行目のように主要な変数は VAR 文で定義し説明項をつけておく。こうすることによってリストが自己説明的になり、入出力時に変数の意味がわかりやすくなる。ここで、 $=$  により変数の値や式を、 $\#$  で積分の初期値を設定してもよい。式は

\* Hideo Sadotomo 三井東圧化学(株)システム部 主席部員

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

表Ⅱ-1 例題Ⅱ.1のリスト

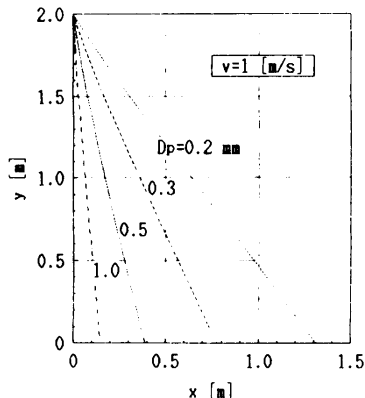
```

1: /* 単一球形粒子の二次元運動 */
2:
3: VAR H = 2      "初期高さ"      [m] ..
4: .x # 0        "水平方向距離"   [m] ..
5: .y # H        "垂直方向距離"   [m] ..
6: .uh # 0       "水平方向速度"   [m/s] ..
7: .uv # 0       "垂直方向速度"   [m/s] ..
8: .u            "粒子速度"       [m/s] ..
9: .v = 1        "気流速度"       [m/s] ..
10: .g = 9.8     "重力加速度"     [m/s^2] ..
11: .Dp          "粒子径"         [m] ..
12: .rho = 1.3   "流体密度"       [kg/m^3] ..
13: .rop = 2700 "粒子密度"       [kg/m^3] ..
14: .mu = 1.9E-5 "流体粘度"      [kg/m*s] ..
15:
16: A = _pi*Dp^2/4
17: m = rop*_pi*Dp^3/6
18: C = 24/Re*(1+0.125*Re^0.72) WHEN Re< 1000 ..
19:   = 0.44                      WHEN Re>=1000
20: Re = rho*u*Dp/mu              /* Reynolds No. */
21:
22: m*uh' = -C*A*(rho*u^2/2)*(uh-v)/u
23: m*uv' = -m*g*(rop-rho)/rop-C*A*(rho*u^2/2)*uv/u
24: u = sqrt((uh-v)^2 + uv^2)
25: x' = uh ; y' = uv
26: base = (y<=0)
27: INTEGRAL t[0.5.0] STEP 0.01 BREAK base
28:
29: INPUT Dp
30: TREND uh,uv,x,y STEP 0.1
31: OUTPUT1 x,y,Dp,v STEP 0.02
    
```

そのまま書かれているのでとくに説明しなくも理解されよう。2, 3補足するならば, 16, 17行目の $-\pi$ は円周率 $\pi$ を与える組み込み定数であり, 18, 19行目は(Ⅱ-4)式を表す条件付きの式である。また, EQUATRAN-Mでは22行目のように常微分 $du_h/dt$ を $uh'$ と記す。27行目のINTEGRAL文で, これらの常微分方程式を $t$ について0から5sまで0.01sきざみで数値積分することを指示

表Ⅱ-2 例題Ⅱ.1の計算結果

[ 入力データ ]				
Dp	= 0.0005	: 粒子径 [m]		
t	1:uh	2:uv	3:x	4:y
0	0	0	0	2.000000
0.100000	0.1268306	-0.9147985	0.006362504	1.953155
0.200000	0.2566138	-1.681371	0.02550857	1.821995
0.300000	0.3843581	-2.283322	0.05761728	1.622404
0.400000	0.5010299	-2.732718	0.1020057	1.370431
0.500000	0.6018591	-3.056394	0.1572910	1.080053
0.600000	0.6857786	-3.283743	0.2218115	0.7623591
0.700000	0.7538792	-3.440681	0.2939184	0.4256451
0.800000	0.8082131	-3.547726	0.3721282	0.07588006
t = 0.83	で base により中断しました			



図Ⅱ-1 単一球形粒子の二次元運動

している。その間に論理変数 base が真になったら ( $y \leq 0$ つまり, 粒子が地面に達したら) 積分を中断することをも BREAK 項で指示している。DpはINPUT文で読み込むことにした。

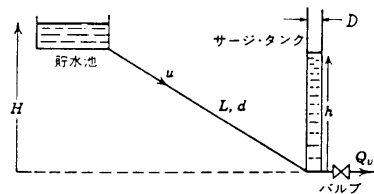
$H = 2$  m,  $v = 1$  m/s とし  $D_p = 0.0005$  m についての計算結果をトレンド表示したのが表Ⅱ-2であり,  $D_p$ をいろいろ変えて計算した結果をグラフ表示したのが図Ⅱ-1である。粒径によって飛距離が異なり, これが風節の原理である。

## 2. サージタンクの動的シミュレーション

プロセスに外乱が加えられたときの動的な挙動を調べることは, プロセスを運転する立場から重要なことである。そのためには動的シミュレーションが有効である。

### <例題Ⅱ.2: サージタンクの動的挙動<sup>5)</sup>>

図のように高さ $H$  [m] にある貯水池から内径 $d$  [m], 長さ $L$  [m] のパイプを通してタービンに水を送る。非常時にバルブを急に閉じたときパイプに過度の圧力上昇がかわらないよう直径 $D$  [m] のサージタンクが設置されている。



遮断が行われる間の時間  $0 \leq t \leq t_c$  でのバルブを通る流量  $Q_v$  [m<sup>3</sup>/s] はタンクの水位を  $h$  [m] として

$$Q_v = k(1 - t/t_c)(h - h_s)^{1/2} \quad (\text{Ⅱ-6})$$

で近似される。ここで,  $k$ はバルブの特性値で  $1.08 \text{ m}^{2.5}/\text{s}$ ,  $h_s$ は定常時水位とする。

非常遮断時におけるサージタンクの水位の変動を調べよ。

解) 水の密度一定とし, サージタンク内の加速の効果を無視するとパイプ中のエネルギー収支から

$$g(H-h) - \frac{1}{2}f\frac{L}{d}u|u| = L\frac{du}{dt} \quad (\text{Ⅱ-7})$$

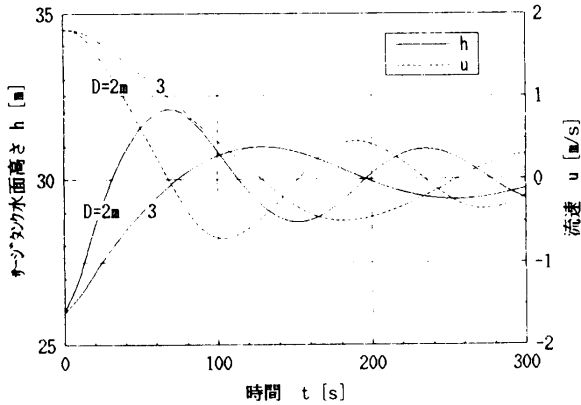
が得られる。ここで,  $u$ はパイプ中の平均流速

表Ⅱ-3 例題Ⅱ.2のリスト

```

1: /* サージタンクの動的シミュレーション */
2:
3: VAR H=30 "貯水池高さ [m]"
4: L=600 "パイプ長 [m]"
5: d=0.6 "パイプ径 [m]"
6: h "サージタンク水面高さ [m]"
7: hs=26 "定常時水面高さ [m]"
8: D "サージタンク径 [m]"
9: u "流速 [m/s]"
10: Qv "流量 [m3/s]"
11: t "時間 [s]"
12: tc=6 "遮断時間 [s]"
13: k=1.08 "ハルツ特性値 [m2.5/s]"
14: f=0.024 "摩擦係数 [-]"
15: g=9.8 "重力加速度 [m/s2]"
16:
17: /* バルブ遮断時 */
18: g*(H-h) - f*(L/d)*u*abs(u)/2 = L*u'
19: (_pi*d^2/4)*u = (_pi*d^2/4)*h' + Qv
20: Qv = k*(1-t/tc)*sqrt(h-hs) WHEN t<=tc
21: Qv = 0 WHEN t>tc
22:
23: /* 平常時 */
24: g*(H-h0) - f*(L/d)*u0*abs(u0)/2 = 0
25: (_pi*d^2/4)*u0 = Qv0
26: Qv0 = k*sqrt(h0-hs)
27:
28: u # u0 ; h # h0
29: INTEGRAL t [0,300] STEP 1
30: INPUT D
31: TREND u, u', h, h', Qv STEP 10
32: OUTPUT1 t, u, h STEP 10

```



図Ⅱ-2 サージタンクの動的シミュレーション

[m/s],  $f$ は摩擦係数 [-],  $g$ は重力加速度 [m/s<sup>2</sup>],  $t$ は時間 [s] である。また、連続性から

$$\frac{\pi d^2}{4} u = \frac{\pi D^2}{4} \cdot \frac{dh}{dt} + Q_v \quad (II-8)$$

が成り立つ。従って、 $t=0$ でバルブの遮断が始まるとして(II-6)式の条件の下に(II-7), (II-8)式から $u, h$ を $t$ について積分すればよい。

なお、 $t > t_c$ では $Q_v = 0$ である。 $t=0$ での初期条件は(II-7), (II-8)式において定常状態であることから $du/dt$ と $dh/dt$ をともに0と置いた式を解いて得られる。

サージタンクの動的シミュレーションを行うためのリストが表Ⅱ-3である。諸量はVAR文で定義したのでこれを参照願うとして、 $D=2.3$ mの場合について水位 $h$ と速度 $u$ の変動をグラフで表示したのが図Ⅱ-2である。 $D$ が大きいほど $h$ の変

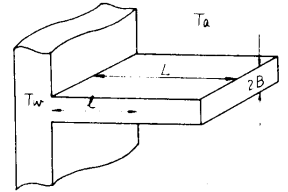
動が抑えられることがよくわかる。なお、この図は重ね描きの機能を使って描いたものである。

### 3. 冷却フィンの伝熱(境界値問題)

高階常微分方程式では境界条件が定義域の両端で与えられることが間々あり、これを二点境界値問題という。次に簡単な境界値問題の例をあげる。

#### <例題Ⅱ-3: 冷却フィンの伝熱<sup>(6)</sup>>

図のように壁面から突出した長さ $L$  [m], 厚さ $2B$  [m]のフィンでの伝熱を考える。壁温を $T_w$



[°C], 空気温度を $T_a$  [°C]とするとときフィンの長手方向温度分布を求めよ。

ただし、フィンの側面と先端面での伝熱は無視し、幅方向に温度分布はないものとする。なお、伝熱係数 $h=600$  kcal/m<sup>2</sup>·h·°C, 熱伝導度 $k=90$  kcal/m·h·°Cとする。

解) 壁面からの距離 $l$  [m]におけるフィンの温度を $T$  [°C]とすると、空気からの伝熱と壁への熱伝導とのつりあいの条件から次式が成り立つ。

$$\frac{d^2 T}{dx^2} = \frac{h \cdot L^2}{k \cdot B} T \quad (II-9)$$

$$T|_{x=0} = 1, \quad dt/dx|_{x=L} = 0 \quad (II-10)$$

なお、次の無次元化を行っている。

$$t = \frac{T - T_a}{T_w - T_a}, \quad x = \frac{l}{L}$$

これは2階常微分方程式の境界値問題の最も簡単な形である。

ここで、境界値問題の解法について説明しておく。一般にこの種の問題を数値的に解くには境界条件が与えられている両端(この場合は $x=0$ と $x=1$ )のうち一方の端に注目して(通常は $x=0$ )、他端で与えられている数だけの条件を仮に設定し、初期値問題の形に直す。これを解いてその結果が他端で与えられた条件を満足するように設定値を繰り返し修正すればよい。

ところで、(II-9)式は2階線形常微分方程式であるので繰り返し修正をする代わりに重ね合わせの原理が適用できる。しかも、同次式であるの

表Ⅱ-4 例題Ⅱ.3の解

```

1: /* 冷却フィンでの伝熱 */
2:
3: /* | | Ta
4: | | |
5: |-----|
6: |Tw| T | 2B
7: |-----|
8: | |<-- L -->
9: */
10: VAR T(3) "温度 [℃]"
11: Ta=260 "空気温度 [℃]"
12: Tw=180 "壁温度 [℃]"
13: t(3) "無次元温度 [-]"
14: L=0.06 "フィン長 [m]"
15: l "壁からの距離 [m]"
16: x=l/L "無次元距離 [-]"
17: B=0.002 "フィン厚 [m]"
18: h=600 "伝熱係数 [kcal/m^2・h・℃]"
19: k=90 "熱伝導度 [kcal/m・h・℃]"
20: /* 熱伝導式 */
21: t = (T-Ta)/(Tw-Ta)
22: t'(1.2) = h*L^2/(k*B)*t(1.2)
23: t(1) # 0 ; t'(1) # 1
24: t(2) # 1 ; t'(2) # 0
25: /* 重ね合せ式 */
26: C1*t(1) + C2*t(2) = t(3)
27: C1#0 + C2#1 = 1
28: C1cal*t'(1) + C2*t'(2) = 0
29:
30: INTEGRAL x [0,1] STEP 0.1
31: INPUT C1
32: OUTPUT C1cal, C2
33: TREND T STEP 0.1
    
```

[ 入力データ ]			
C1	= -3.457314		
x	1:T(1)	2:T(2)	3:T(3)
0	260.0000	180.0000	180.0000
0.1000000	251.8400	175.1520	203.3637
0.2000000	242.6910	160.0224	219.8650
0.3000000	231.4444	132.7775	231.5033
0.4000000	216.7372	90.11574	239.6888
0.5000000	196.7873	26.86709	245.4133
0.6000000	169.1770	-64.63313	249.3704
0.7000000	130.5606	-195.4732	252.0395
0.8000000	76.25828	-381.5087	253.7441
0.9000000	-0.3103548	-645.2840	254.6906
1.0000000	-108.4241	-1018.764	254.9938
[ 計算結果 ]			
C1cal	= -3.457314		
C2	= 1		

で任意の初期条件から計算した2つの解(これを  $t_1(x)$ ,  $t_2(x)$  とする) 一次結合として一般解  $t(x)$  が次のように得られる。

$$C_1 \cdot t_1(x) + C_2 \cdot t_2(x) = t(x) \quad (\text{II-11})$$

$C_1$ ,  $C_2$  は両端での境界条件を満足するように決められる。なお、任意の初期条件としては

$$t|_{x=0} = 0, \quad dt/dx|_{x=0} = 1$$

および

$$t|_{x=1} = 1, \quad dt/dx|_{x=1} = 0$$

としておく。本問の条件より (II-11) 式は

$$x=0 \text{ で } C_1 \cdot 0 + C_2 \cdot 1 = t(0) \quad (\text{II-12})$$

$$x=1 \text{ で } C_1 \cdot t_1'(1) + C_2 \cdot t_2'(1) = 0 \quad (\text{II-13})$$

となり、これから  $C_1$ ,  $C_2$  が求められる。

この問題を解くためのリストが表Ⅱ-4で、大変簡潔に書かれている。  $t(1)$ ,  $t(2)$ ,  $t(3)$  はそれぞれ  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t$  に対応している。22行目の  $t''$  は  $t$  の2階微分を意味しており、 $t(1)$ ,  $t(2)$  に対する式が1行で表現されている。

さて、一次結合の係数  $C_1$ ,  $C_2$  を決定するため

に、まずテキストを実行して  $x=1$  での  $t'(1)$ ,  $t'(2)$  を求め、同時に (II-12), (II-13) 式に対応する27, 28行目の方程式から  $C_1$ cal,  $C_2$  を得る。次に、GOコマンドで再びこの計算を起動し、今度は  $C_1$  として  $C_1$ cal の値を入力してやれば  $t(3)$  が求める解である。  $T_a=260^\circ\text{C}$ ,  $T_w=180^\circ\text{C}$  のときの計算結果として温度  $T$  の分布を33行目のTREND文で出力したのが表Ⅱ-4下部の  $T(3)$  の欄である。

この問題は線形なので2回の試行で正解に達した。非線形常微分方程式の境界値問題も同じように初期値を仮定して解くことができるが、試行の回数は当然増える。その例については次回説明することにしたい。

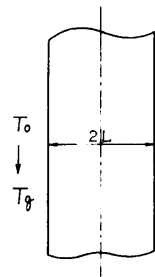
#### 4. 非定常伝熱 (偏微分方程式)

2つ以上の独立変数を含む場合には偏微分方程式となるが、次にその解き方について述べる。

##### <例題Ⅱ-4: 非定常一次元伝熱<sup>4)</sup>>

図のように最初  $T_0 = 200^\circ\text{C}$  の一定温度にある厚さ  $2L=0.3\text{m}$  の広い平板を考える。

いま、板の両面が突然  $T_g=600^\circ\text{C}$  のガスにより加熱されるとき、内部の温度変化を求めよ。ただし、板の物性は熱伝導度  $k=1.5\text{kcal/m}\cdot\text{h}\cdot^\circ\text{C}$ 、密度  $\rho=2000\text{kg/m}^3$ 、比熱  $C_p=0.25\text{kcal/kg}\cdot^\circ\text{C}$  で、伝熱係数  $h$  は  $20\text{kcal/m}^2\cdot\text{h}\cdot^\circ\text{C}$  とする。



解) 時間を  $t[\text{h}]$ 、表面からの距離を  $l[\text{m}]$ 、内部温度を  $T[^\circ\text{C}]$  とすると、無次元距離  $x(=l/L)$  を使って基礎式は次の偏微分方程式と初期条件、境界条件で表される。

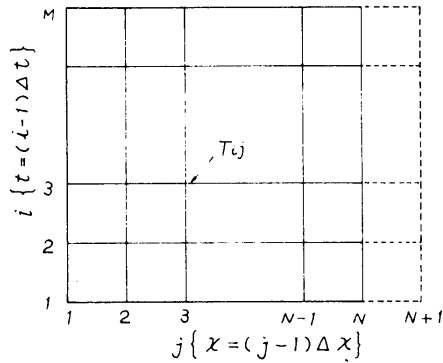
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{II-14})$$

$$\alpha = k / \rho \cdot C_p \cdot L^2$$

$$t=0 \text{ で } T=T_0 \quad (\text{II-15})$$

$$x=0 \text{ で } -\frac{k}{L} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} = h \cdot (T_g - T) \quad (\text{II-16})$$

$x=2$  (裏面) でも (II-17) 式と同様な境界条



図Ⅱ-3 差分格子

件が与えられるが、温度分布は板の中心 ( $x=1$ ) について対称になるから次の条件で置き換えられる。

$$x=1 \text{ で } \partial T / \partial x = 0 \quad (\text{II-17})$$

(II-14)~(II-17)式で表わされるような偏微分方程式を解く方法として、差分法がよく用いられる。図Ⅱ-3の差分格子に示すように $t$ 方向には適当な時間間隔 $\Delta t$ で $M$ 点とり、 $x$ 方向は $L$ を $N-1$ 等分した $\Delta x$ のきざみで差分化する。すなわち、

$$t = (i-1) \Delta t \quad (i=1, 2, \dots, M)$$

$$x = (j-1) \Delta x \quad (j=1, 2, \dots, N)$$

とし、格子点の温度を $T_{ij}$ で表す。各種の差分公式が提案されているが、計算の安定性を考慮してCrank-Nicolson法を採用すると、(II-14)式は次のように差分近似される<sup>7)</sup>。

$$T_{i+1,j} - T_{i,j} = \beta (T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1} + T_{i+1,j+1} - 2T_{i+1,j} + T_{i+1,j-1}) \quad (\text{II-18})$$

表Ⅱ-5 例題Ⅱ-4のリスト

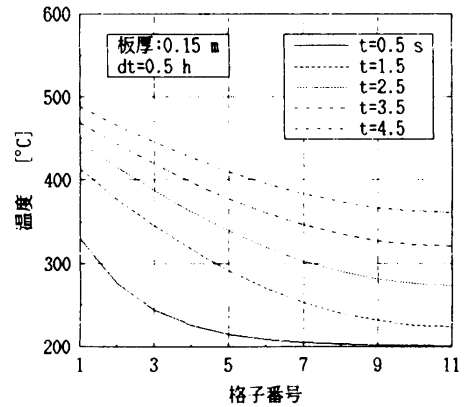
```

1: /* 非定常一次元伝熱 */
2:
3: LOCAL M=10, N=11
4: LOCAL M1=1:M-1, M2=2:M, ...
5: N1=1:N-2, N2=2:N-1, N3=3:N
6: VAR t "時間 [h]" ..
7: T(M,N) "温度 [°C]" ..
8: T0=200 "初期温度 [°C]" ..
9: Tg=600 "ガス温度 [°C]" ..
10: dt=0.5 "時間間隔 [h]" ..
11: dx=1/(N-1) "きざみ [-]" ..
12: L=0.15 "壁厚 [m]" ..
13: ro=2000 "密度 [kg/m3]" ..
14: Cp=0.25 "比熱 [kcal/kg·°C]" ..
15: k=1.5 "熱伝導度 [kcal/m·h·°C]" ..
16: h=20 "伝熱係数 [kcal/m2·h·°C]" ..
17:
18: alpha = k/(ro*Cp*L^2)
19: beta = alpha*dt/(2*dx^2)
20: /* 主方程式 */
21: T(M2,M2)-T(M1,M2) = beta *
22: ( T(M1,N3)-2*T(M1,M2)+T(M1,N1) ..
23: + T(M2,N3)-2*T(M2,M2)+T(M2,N1) )
24: /* 初期条件 */
25: T(1) = T0
26: /* 境界条件 */
27: -(T(M2,2)-T(M2,1)) = h*L*dx/k*(Tg-T(M2,1))
28: (1+2*beta)*T(M2,N) - (1-2*beta)*T(M1,N) ..
29: = 2*beta*(T(M1,N-1)+T(M2,N-1))
30:
31: OUTPUT T
32: OUTPUT1 L,dt,T(2),T(4),T(6),T(8),T(10)

```

表Ⅱ-6 例題Ⅱ-4の計算結果 (T[°C])

1 [cm]	0	3	6	9	15
計算結果	488.4	445.7	409.8	383.0	360.8
文献値 <sup>4)</sup>	488	436	412	380	364



図Ⅱ-4 非定常一次元伝熱

$$(i=1, 2, \dots, M-1; j=2, 3, \dots, N-1)$$

ここで、 $\beta = \alpha \Delta t / 2 \Delta x^2$ である。同様にして(II-15), (II-16), (II-17)式は

$$T_{1,i} = T_0 \quad (j=1, 2, \dots, N) \quad (\text{II-19})$$

$$-(T_{i,2} - T_{i,1}) = \gamma \cdot (T_g - T_{i-1}) \quad (i=2, 3, \dots, M) \quad (\text{II-20})$$

$$\gamma = h \cdot L \cdot \Delta x / k$$

$$(1+2\beta)T_{i+1,N} - (1-2\beta)T_{i,N} = 2\beta(T_{i,N-1} + T_{i+1,N-1}) \quad (i=1, 2, \dots, M) \quad (\text{II-21})$$

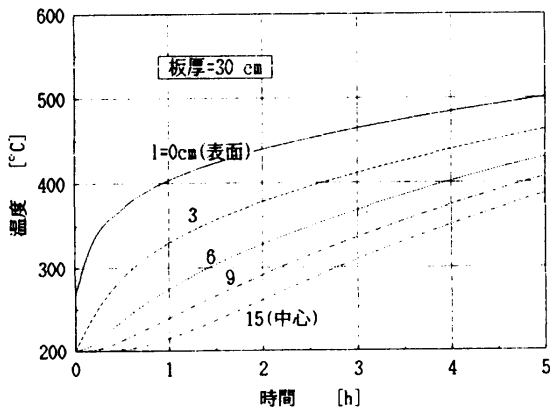
最後の式は板の中心の1つ先に $j=N+1$ の格子点を仮に考えて、(II-17)式の中心差分式

表Ⅱ-7 例題Ⅱ-4の別解リスト

```

1: /* 非定常一次元伝熱 (別解) */
2:
3: LOCAL N=11
4: VAR t "時間 [h]" ..
5: dt=0.05 "時間間隔 [h]" ..
6: T(N) "温度 [°C]" ..
7: T0=200 "初期温度 [°C]" ..
8: Tg=600 "ガス温度 [°C]" ..
9: L=0.15 "壁厚 [m]" ..
10: dx=1/(N-1) "きざみ [-]" ..
11: ro=2000 "密度 [kg/m3]" ..
12: Cp=0.25 "比熱 [kcal/kg·°C]" ..
13: k=1.5 "熱伝導度 [kcal/m·h·°C]" ..
14: h=20 "伝熱係数 [kcal/m2·h·°C]" ..
15:
16: alpha = k/(ro*Cp*L^2)
17: beta = alpha/dx^2
18: gamma = h*L*dx/k
19: /* 主方程式 */
20: T'(2:N-1) = beta*(T(3:N)-2*T(2:N-1)+T(1:N-2))
21: INTEGRAL t [0,5] STEP dt
22: /* 初期条件 */
23: T(2:N) # T0
24: /* 境界条件 */
25: -(T(2)-T(1)) = gamma*(Tg-T(1))
26: T'(N) = 2*beta*(T(N-1)-T(N))
27:
28: TREND T STEP 0.5
29: OUTPUT1 L,t,T(1),T(3),T(5),T(7),T(11) STEP 0.2

```



図II-5 非常定一次伝熱 (別解)

$$(T_{i,N+1} - T_{i,N-1}) / \Delta t = 0$$

と (II-18) 式を  $j=N$  に適用した式を組み合わせ得られる。

これを解くためのリストが表II-5で、よく使われる添字は4,5行目 LOCAL 文で定義して記述を簡略化した。4.5h 後の計算値を文献値と並べて表II-6に示すがよく一致している。得られた温度分布を時間毎に示したのが図II-4である。ところで、 $dt=0.5h$  という大きな時間きざみでも安定した計算ができているのは Crank-Nicolson 法の効果である (前進解法では  $dt=0.04h$  が限界)。別解) (II-14) 式を  $x$  方向のみ差分化し、 $t$  に関する常微分方程式として解く方法もある。つまり、 $x$  方向  $j$  点での温度を  $T_j (j=1, 2, \dots, N)$  として

$$\frac{dT_j}{dt} = \alpha \frac{T_{j+1} - 2T_j + T_{j-1}}{\Delta x^2} \quad (\text{II-22})$$

$(j=2, 3, \dots, N-1)$

$$-(T_2 - T_1) = \gamma \cdot (T_g - T_1) \quad (\text{II-23})$$

$$\frac{dT}{dt} = \alpha \frac{2(T_{N-1} - T_N)}{\Delta x^2} \quad (\text{II-24})$$

を次の初期条件の下で解く。

$$T_j = T_0 \quad (j=2, 3, \dots, N) \quad (\text{II-19})$$

リストを表II-7に、各位置での温度の時間変化を図II-5に掲げた。このように一つの問題にもいろいろなアプローチがあり、それらを簡便に試すことができることも EQUATRAN-M の強みである。

## 5. 回分蒸留計算 (繰返し計算との組合せ)

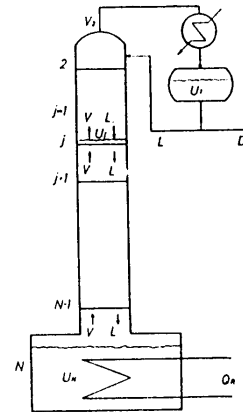
繰返し計算と組み合わせられた複雑でかつ大型の常微分方程式系の例として回分蒸留塔の計算を

取り上げる。

### <例題II-5: 回分蒸留計算—その1>

図の回分蒸留塔で20モル%のメタノール水溶液からメタノールを回収したい。理論段5段 (コンデンサ, リボイラを含め) の塔について留出組成の変化を求めよ。

なお、留出開始時に各段の液は仕込液と同じ組成にあるとする。



解) 回分蒸留塔の詳細モデルと計算法については文献<sup>8)</sup>を参照願うとして、ここでは簡単のため各段の蒸気, 液流量 ( $V, L$  [kmol/h]) は等モル流れとして扱う。

一般に  $N$  段の蒸留塔を考え、留出量  $D$  [kmol/h], 第  $j$  段の液ホールドアップを  $U_j$  [kmol], 第  $i$  成分の液, 蒸気モル分率を  $x_{ji}, y_{ji}$ , 時間を  $t$  [s] とする。物質収支から第  $i$  成分について、

- コンデンサ (全縮器として) まわりで

$$U_1 \frac{dx_{1i}}{dt} = -(D+L)x_{1i} + Vy_{2i} \quad (\text{II-25})$$

- 第  $j$  段 ( $j=2, \dots, N-1$ ) では

$$U_j \frac{dx_{ji}}{dt} = Lx_{j-1i} - (Vy_{ji} + Lx_{ji}) + Vy_{j+1i} \quad (\text{II-26})$$

- リボイラで

$$U_N \frac{dx_{Ni}}{dt} = Lx_{N-1i} - Vy_{Ni} + Dx_{Ni} \quad (\text{II-27})$$

なお、還流ドラム, 段上のホールドアップは一定とすると全体の物質収支から

$$\frac{dU_N}{dt} = -D \quad (\text{II-28})$$

表II-8 例題II.5のリスト

```

1: /* 回分蒸留計算 */
2:
3: LOCAL N=5 /* 段数 */
4: GLOBAL VAR P=760 "全圧 [mmHg]"
5: A12,A21 "Wilson 係数"
6: a(2),b(2),c(2) "Antoine定数"
7: /* methanol water */
8: a = ( 7.87868, 7.96681 )
9: b = ( 1473.11, 1668.21 )
10: c = ( 230.00, 228.00 )
11: A12 = 0.47525 ; A21 = 0.98356
12:
13: VAR t "時間 [h]"
14: T(N) "温度 [°C]"
15: x(N,2) "液相モル分率 [-]"
16: y(N,2) "気相モル分率 [-]"
17: xf(2) "仕込組成 [-]"
18: U1=2 "還流流量 [kmol/h]"
19: Uj=0.1 "段上滞留量 [kmol]"
20: UN "塔底滞留量 [kmol]"
21: D "留出量 [kmol/h]"
22: R "還流比 [-]"
23: L "下降液量 [kmol/h]"
24: V=D+L "上昇蒸気量 [kmol/h]"
25:
26: MACRO BUBPT /* 沸点計算 */
27: VAR PO(2) "蒸気圧 [mmHg]"
28: g(2) "気相組成 [-]"
29:
30: log10(PO) = a - b/(c + t) /* Antoine 式 */
31: /* Wilson 式 */
32: loge(g(1)) = -log(x(1)+A12*x(2))
33: +x(2)*(A12/(x(1)+A12*x(2))-A21/(A21*x(1)+x(2)))
34: loge(g(2)) = -log(x(1)+A21*x(2))
35: -x(1)*(A12/(x(1)+A12*x(2))-A21/(A21*x(1)+x(2)))
36:
37: P * y = PO * g * x
38: EQ:SUM(y) = 1
39: SUM(x) = 1
40: RESET t #50 [0,200] BY EQ
41: END BUBPT
42:
43: /* プロセス方程式 */
44: U1*x'(1,1) = -(D+L)*x(1,1) + V*y(2,1)
45: Uj*x'(2:N-1,1) = L*x(1:N-2,1) - V*y(2:N-1,1)
46: - L*x(2:N-1,1) + V*y(3:N,1)
47: UN*x'(N,1) = L*x(N-1,1) - (V*y(N,1)-D*x(N,1))
48: UN = -D
49: stg1: CALL BUBPT( t=T(1), x=x(1), y=y(1) )
50: stg2: CALL BUBPT( t=T(2), x=x(2), y=y(2) )
51: stg3: CALL BUBPT( t=T(3), x=x(3), y=y(3) )
52: stg4: CALL BUBPT( t=T(4), x=x(4), y=y(4) )
53: stg5: CALL BUBPT( t=T(5), x=x(5), y=y(5) )
54:
55: /* 留出過程の指定 */
56: UN # 20 ; L = R*D
57: x # xf ; INPUT xf /* INITIAL x */
58: INTEGRAL t [0,2] STEP 0.01 BY RKV
59: INPUT D, R
60: TREND x(1),y(1),T STEP 0.1
61: OUTPUT1 t,x(1,1),x(5,1),T(1),T(5),D,R STEP 0.1

```

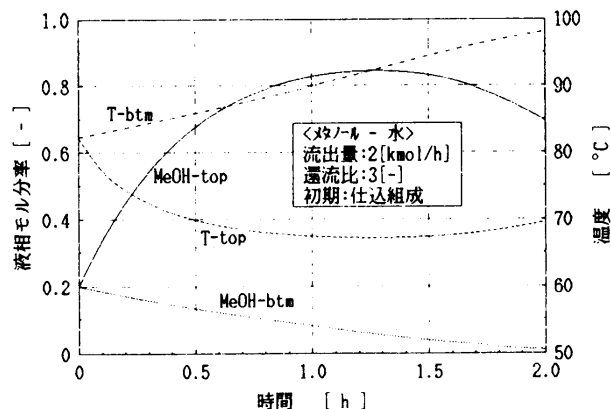
$$=L-V \quad (II-28')$$

LとDの関係は還流比R[-]によって表す。

$$R=L/D \quad (II-29)$$

$x_{ji}$ と $y_{ji}$ の関係は沸点計算により求められるから、本例題では(II-25)~(II-28)式の常微分方程式で表されるプロセス方程式を沸点計算と連立して解くことになる。その際、(II-25)~(II-27)式は第1成分についてのみ考えればよい。それは第2成分の組成はモル分率の定義( $\sum x_{ji}=1$ )から求められるからである。

これを解くためのリストが表II-8である。5~11行目は物性定数の設定で、26~41行目は沸点計算のマクロであるが、単蒸留計算の例題I-5の解(表I-8<sup>1)</sup>)と本質的に全く同じである。43~48行目がプロセス方程式で、(II-25)~(II-28)式



図II-6 回分蒸留計算(仕込組成から出発)

がそのまま記述されている。なお、45, 46行目では(II-26)式が配列表記で $j=2, \dots, N-1$ についてまとめて書かれている。沸点計算は各段毎にマクロをCALLして行う(49~53行目)。

各段上液の初期組成は題意により仕込組成 $xf$ に設定している(57行目)。なお、この問題では数値積分の安定性に配慮が必要なため、積分手法として可変きざみのRunge-Kutta法を選び、58行目のINTEGRAL文のBY項で指定している。

$U_1=2\text{kmol}$ ,  $U_j=0.1\text{kmol}$ ,  $U_N=20\text{kmol}$ ,  $D=2\text{kmol/h}$ ,  $R=3$ として計算した結果の留出と塔底の液組成および温度を図II-6に示した。1.2hまでは留出メタノールが徐々に濃くなっているが、これは仕込組成から出発したので塔内の組成を整

<例題II-6:回分蒸留計算—その2>

例題II-5において留出開始時の各段液が全還流定常状態組成の場合を計算せよ。

えるのに時間がかかっているためである。解)前問で初期状態が仕込み組成ということは、分離が全く行われていない状況に相当する。実際には全還流で塔内組成を整えるのが普通である。十分長い時間全還流を行えば定常状態に達するが、分離の面からみるとこれが理想的な留出の出発状態といえる。

全還流定常状態は前問プロセス方程式の一つの極限として計算できる。すなわち、全還流( $D=0$ )で、定常状態 $d/dt=0$ を解けばよい。すると、微分項がなくなり代数方程式系を解く問題に還元される。ただし、このとき(II-25)~(II-27)式のうち1つは従属になるので除かねばな

表Ⅱ-9 例題Ⅱ.6のリスト

```

1: /* 回分蒸留計算 (全還流定常状態) */
2:
43: /* プロセス方程式 */
44: /* U1*x'(1,1) = -(D+L)*x(1,1) + V*y(2,1) */
45: Uj*x'(2:N-1,1) = L*x(1:N-2,1) - V*y(2:N-1,1) ...
46: - L*x(2:N-1,1) + V*y(3:N,1)
47: UN*x'(N,1) = L*x(N-1,1) - (V*y(N,1)-D*x(N,1))
48: UN' = -D
49: stg1: CALL BUBPT( t=T(1), x=x(1), y=y(1))
50: stg2: CALL BUBPT( t=T(2), x=x(2), y=y(2))
51: stg3: CALL BUBPT( t=T(3), x=x(3), y=y(3))
52: stg4: CALL BUBPT( t=T(4), x=x(4), y=y(4))
53: stg5: CALL BUBPT( t=T(5), x=x(5), y=y(5))
54:
55: /* 全還流定常状態の指定 */
56: UN = 20 ; D = 0 ; V = 1
57: x' = 0
58: MB: U1*x(1,1) + Uj*SUM(x(2:N-1,1)) + UN*x(N,1) ...
59: = (U1+Uj*(N-2)+UN)*xf(1)
60: RESET x(5,1) # 0.5 [0,1] BY MB
61: INPUT xf
62: OUTPUT x(1),y(1),T
63: OUTPUT2 x

```

```

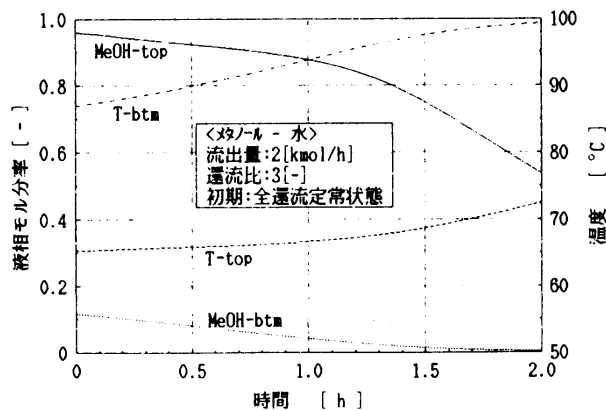
[ 入力データ ]
xf = : 仕込組成 [-]
1) 0.2 : 2) 0.8

[ 計算結果 ]
x = : 液相モル分率 [-]
1) 0.9592043 : 2) 0.9015874 : 3) 0.7607939 : 4) 0.4468975
5) 0.1165332

y = : 気相モル分率 [-]
1) 0.982982 : 2) 0.9592043 : 3) 0.9015874 : 4) 0.7607939
5) 0.4468975

T = : 温度 [°C]
1) 65.358671 : 2) 66.237132 : 3) 68.480524 : 4) 74.454058
5) 87.039128

```



図Ⅱ-7 回分蒸留計算 (全還流定常状態から出発)

らない。代わりに塔内平均の組成は仕込組成に等しいという条件がつく。

$$U_1 \cdot x_{1i} + \sum_{j=2}^{N-1} (U_j \cdot x_{ji}) + U_N \cdot x_{Ni} = \{U_1 + U_j \cdot (N-2) + U_N\} \cdot x_f \quad (\text{II-30})$$

リストと計算結果を表Ⅱ-9に示すが、リストの3～42行目は表Ⅱ-8と全く同じなので省略した。44行目をコメントとし58, 59行目を追加したのは説明した通りである。このリストにはINTEGRAL文がないこと、57行目でx'=0となっていることに注目願いたい。EQUATRAN-MではINTEGRAL文がない場合、'は微分記号と解釈されずたとえばx'という通常の変数名として扱われるこ

とになっている。なお、Vの値は任意であるのでここでは1を与えた。計算結果として各段のメタノール組成と温度をOUTPUT文で印刷すると同時にOUTPUT 2文で組成をリザルトファイルに出力しておく(62, 63行目)。全還流定常状態ではメタノールが塔頂で95モル%まで濃縮されている。

次にこの全還流定常状態から出発して留出過程を追跡する。そのためには、表Ⅱ-8のリストで計算結果をリザルトファイルから読み込むように修正する。57行目を

57: /\* x # xf; INPUT xf \*/ INITIAL x と変更し、データテキストにリザルトファイルを読み込むための文である。

実行結果を図Ⅱ-7に示すが、図Ⅱ-6と比較すると初めからメタノール濃度の高い留出物が得られることがよくわかる。

今回はEQUATRAN-Mによっていろいろな型の微分方程式を手軽に解けることを例示した。代数方程式の解法、グラフ表示機能と相まって大変強力なツールに成長したことをご理解いただけたと思う。さて次回は、反応解析へのEQUATRAN-Mの適用について解説する予定である。

#### 参考文献

- 1) 佐渡友, 宮原: ケミカルエンジニアリング, Vol.32, No.10, p.69(1987)
- 2) 森, 吉田編: 詳論化学工学 単位操作 I, p.333 朝倉, (1962)
- 3) 化学工学協会: 化学工学便覧, 改訂四版, p.1054 (1978)
- 4) 同上, p.266 (1978)
- 5) B. Carnahan et al, 藤田ら訳: 計算機による数値計算法, p.708, 日本コンピュータ協会 (1982)
- 6) R. B. Bird et al: Transport Phenomena, p.288 John Wiley (1960)
- 7) L. Lapidus: Digital computation for chemical engineers, p.162, McGraw-Hill (1962)
- 8) 佐渡友, 宮原: 化学工学論文集, Vol. 7, No. 1, p.33 (1981)