

# 続連載「EQUATRAN-M」技術計算用 方程式解法言語

(I)

## 拡張された EQUATRAN-M 技術計算の 世界

佐渡友 秀 夫\*

宮 原 昱 中\*\*

パソコン用に開発された技術計算用方程式解法言語「EQUATRAN-M」(イコートラン-エム)を本誌1985年8月号～1986年4月号にかけて9回連載で紹介した。化学技術者が日頃よく出会う問題を例にしてEQUATRAN-Mが問題解決のための強力なツールであることを示した。連載を機に、読者や本ソフトウェアの利用者の方から質問や要望を多数いただき技術計算のための汎用ソフトへの関心の高さを痛感した。これらの要望を全面的に反映して言語仕様と機能の増強を行った結果、EQUATRAN-Mの適用範囲は飛躍的に拡大した。この度、編集部からの要請に応え、続連載として適用事例に沿い拡張部分に焦点を当てて紹介する。

### 1. EQUATRAN-Mの拡張された機能

EQUATRAN-Mは与えられた連立方程式を変形し、計算方法と手順(アルゴリズム)を発生、必要な入力値・初期値を要求して数値計算を実行し、答えを表示または印刷する機能をもっている。従って、EQUATRAN-Mによれば、技術者や研究者は解こうとする問題を定式化するだけでプログラミングせずに解を得ることができるわけである。

EQUATRAN-Mの基本的な規則と機能の概要については前連載の第1, 2回に述べたので詳しくはそちらを参照願いたい。新しい読者のため

にその要点をまとめておく。

- 広い意味での代数方程式を対象とし非線形連立系でも繰り返し計算によって解を求める。
- 多変数最適化問題を扱える。
- 入力変数と出力変数の逆転が自在である。
- 関数関係を数表で与えることができる。
- 式の表現が自然であり、ベクトルやマトリクスを含む式も記述できる。
- マクロやパラメータにより方程式の表現は柔軟で拡張性がある。
- フルスクリーンエディタを内蔵しているので方程式とかデータの入力や修正が簡単である。

さて、EQUATRAN-Mの拡張された機能としては

- ①常微分方程式の初期値問題が数値的に解ける。もちろん代数方程式と連成できるので、相当複雑な連続系のシミュレーションでも手軽にケーススタディできる。
- ②計算結果のグラフ表示が簡単にできる。線図表示やデータのプロットはもとより連続系のシミュレーション結果も図示できるので、計算結果の整理に大変威力を発揮する。
- ③ファイルを通して他のプログラムとの連携がとれるので、計算結果を相互に利用できる。
- ④転置行列や高階常微分の導入、組み込み関数の追加など方程式の表現力が豊かになった。
- ⑤入力や出力する変数に説明文や単位をつけたり、実行時に繰り返し計算の範囲指定ができるなど

\* 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

操作性が向上した。

⑥計算実行速度、メモリ使用効率などの性能が向上した。

等々がある。この拡張によってEQUATRAN-Mの適用範囲がいかに広がったか感じ取ってもらえると思うが、詳細についてはおいおい事例を使って説明することにしたい。説明に当って参照する例題、図表の所在を明らかにするため、本連載の連載番号はローマ数字を使うこととし前連載の算用数字と区別する。

なお、本ソフトは現在200本以上が企業や大学の技術者・研究者に利用されており、幸い大変好評である。

## 2. EQUATRAN-Mでグラフを描く

まず、拡張機能のうち最も便利でわかりやすいグラフ機能について説明する。

### <例題 I. 1: 蒸気圧線図の作成>

温度  $t$  [°C] におけるアセトン、メタノール、水の蒸気圧  $P^{\circ}$  [mmHg] は Antoine 式 (I-1) で表され、その定数は表 I-1 で与えられる。温度に対する蒸気圧の線図を描け。

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

表 I-1 Antoine 式の定数<sup>1)</sup>

	アセトン	メタノール	水
$a$	7.02447	7.87863	7.96681
$b$	1161.00	1473.11	1668.21
$c$	224.0	230.0	228.0

解) 何点かの温度について蒸気圧を計算し、片対数グラフにプロットして滑らかに線を引けばよい。これを行うためのEQUATRAN-Mのリストが表 I-2で、得られたグラフが図 I-1である。

表 I-2で3, 4行目のVAR文のPOとtについて” ”で囲まれた変数の内容説明文がある。これを変数の説明項といい入力/出力時に注釈として表示される。また、PO, a, b, cは成分数3に対応する大きさをもった配列変数であり、したがって7行目は3つの成分の蒸気圧式を表している(例題 I.1を参照)。14行目のREPEAT文は拡張された機能の一つで、温度tを0°Cから120°Cまで20°Cずつ増やして計算を進めることを指示して

表 I-2 例題 I.1のリスト

```

1: /* 蒸気圧線図 */
2:
3: VAR PO(3) "蒸気圧 [mmHg]", ...
4: t "温度 [°C]", ...
5: a(3), b(3), c(3)
6:
7: log10(PO) = a - b/(c + t) /* Antoine 式 */
8:
9: /* acetone methanol water */
10: a = (7.02447, 7.87863, 7.96681)
11: b = (1161.00, 1473.11, 1668.21)
12: c = (224.00, 230.00, 228.00)
13:
14: REPEAT t [0, 120] STEP 20
15: OUTPUT1 t, PO(1), PO(2), PO(3) STEP 20

```

蒸気圧線図

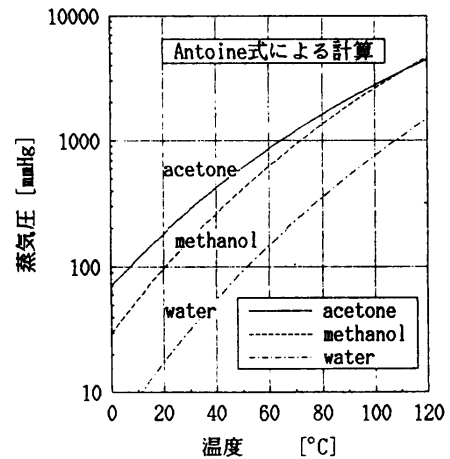


図 I-1 例題 I.1のグラフ

いる。その結果は15行目のOUTPUT 1文で20°Cごとにファイル(正しくはリザルトファイルといっている)に出力される。

ここで、計算結果をグラフ表示する手順を説明しておく。計算が終了した段階で、'GRAPH'(または'GR')コマンドを与えて改行キーを押す(以下☒と書く)とグラフモードに切り替わり、ファイル選択画面になる。ここで先ほどのリザルトファイル名を指定するとグラフ設定画面(A画面)が現れ、しかるべき設定をしたのが図 I-2である。実際に指定したのは、変数名とコメント内容、横軸の長さ、対数軸の選択だけ(アンダーラインで示す)で、そのほかの上・下限値などは自動的に設定される。さらに☒するとB画面に切り替わり、Y方向の変数名にPO(2)とPO(3)を追加指定したのが図 I-3である。

次に、'FIGURE'(または'FIG')☒とすると図 I-1のように描画が行われる。軸の名称には説明項がそのまま表示されている。グラフの中にコメントと凡例が書かれているが、その位置の指定はカーソルを使って自在である。また、蒸気圧曲線

[タイトル・コメント]

タイトル	/* 蒸気圧線図 */		
	87/07/13		

コメント内容	Antoine式による計算	コメント (Y/N)	Y
		横軸 (X/Y)	X
		横軸の長さ (%)	60
		縦軸の長さ (%)	100

[軸・罫線]

変数名	軸の名称	対数(Y/N)
X	t	N
Y1	PO(1)	Y
Y2		

	下限値	上限値	大目盛	小目盛	罫線間隔
X	0	120	20	10	20
Y1	10	10000	10	1.0	10
Y2					

図 I-2 グラフ設定画面 (A画面)

[ X方向 ]

変数名	t
-----	---

[ Y方向 ]

変数名	凡例内容	凡例 (Y/N)	Y
1	PO(1)	acetone	Y
2	PO(2)	methanol	N
3	PO(3)	water	
4			
5			

	線	マーク	色	Y軸 (1/2)		
	種類	パターン	タイプ	サイズ*		
1	2	1	0	2	6	1
2	2	2	0	2	5	1
3	2	4	0	2	4	1
4						
5						

図 I-3 グラフ設定画面 (B画面)

に成分名を上書きすることもできる。グラフ設定画面に戻るにはESCで、実際には両画面を行き来しながらグラフのデザインを決める。でき上がったグラフはCOPYでプリンタに出力できる。

このように、グラフの縦横の長さ、グラフの向き、対数軸、目盛り、罫線が自由に設定できる。また、一度に5本まで線が描け(線の種類は透明、折れ線、スプライン、多項式近似曲線から選択)、実線や破線などのパターン、○や△などのマークとその大きさ、色を指定して線を区別することができる。その上、グラフの重ね書きも可能である。これだけの仕掛が用意されているとグラフを描くのが実に楽しく、報告書のでき映えも一段と冴えるというものである。

### 3. 計算結果のグラフ表示

繰り返し計算や最適化計算を含む煩雑な計算の結果も簡便にグラフとして表示することができる。

#### <例題 I.2: 気液平衡関係の図示>

アセトン-メタノール系の気液平衡関係を求めこれを図示せよ。ただし、活量係数 $\gamma_i$ は液相モル分率 $x$ の関数としてWilson式(I-2)で表され、そのパラメータは $\Delta_{12}=0.65675$ ,  $\Delta_{21}=0.77204$ である<sup>3)</sup>。

$$\ln \gamma_1 = - \ln(x_1 + \Delta_{12}x_2) + x_2 \left( \frac{\Delta_{12}}{x_1 + \Delta_{12}x_2} - \frac{\Delta_{21}}{\Delta_{21}x_1 + x_2} \right)$$

$$\ln \gamma_2 = - \ln(\Delta_{21}x_1 + x_2) - x_1 \left( \frac{\Delta_{12}}{x_1 + \Delta_{12}x_2} - \frac{\Delta_{21}}{\Delta_{21}x_1 + x_2} \right) \quad (I-2)$$

解) 蒸気圧として例題 I-1の式と定数を用いる。これは例題2.1と同じ問題なので解き方についての説明は省略する。リストと計算結果の一部を表 I-3に、 $x$ - $y$ ,  $x$ - $t$  線図を図 I-4に示す。

表 I-3のリストにおいて、11~27行目の沸点計算の部分はRESET文による繰り返し計算を含む

表 I-3 例題 I.2の解

```

1: /* 気液平衡関係 */
2:
3: VAR P "全圧 [ mmHg ]", ...
4: PO(2) "蒸気圧 [ mmHg ]", ...
5: t "温度 [ °C ]", ...
6: x(2) "液相モル分率 [ - ]", ...
7: y(2) "気相モル分率 [ - ]", ...
8: g(2) "活量係数 γ [ - ]", ...
9: a(2), b(2), c(2) "Antoine定数"
10:
11: log10(PO) = a - b/(c + t) /* Antoine 式 */
12: /* acetone methanol */
13: a = ( 7.02447, 7.87863 )
14: b = ( 1161.00, 1473.11 )
15: c = ( 224.00, 230.00 )
16:
17: /* Wilson 式 */
18: A12 = 0.65675 ; A21 = 0.77204
19: log(g(1)) = -log(x(1)+A12*x(2)) - ...
20: +x(2)*(A12/(x(1)+A12*x(2))-A21/(A21*x(1)+x(2)))
21: log(g(2)) = -log(A21*x(1)+x(2)) - ...
22: -x(1)*(A12/(x(1)+A12*x(2))-A21/(A21*x(1)+x(2)))
23:
24: P * y = PO * g * x
25: EQ: SUM( y ) = 1
26: SUM( x ) = 1 ; x(1) = x1
27: RESET t#50 [0,200] BY EQ
28:
29: REPEAT x1 [0, 1] STEP 0.1
30: INPUT P ; OUTPUT t, x, y, g STEP 0.1
31: OUTPUT1 x(1), y(1), t, P STEP 0.1

```

[ 入力値(=) または 初期値(≠) ]

P	= 760	: 全圧 [ mmHg ]
t	# 50	[ 0, 200 ] : 温度 [ °C ]

[ 計算結果 ]

t	= 57.02343	: 温度 [ °C ]
x	=	: 液相モル分率 [ - ]
1) 0.4	=	2) 0.6
y	=	: 気相モル分率 [ - ]
1) 0.511329	=	2) 0.488671
g	=	: 活量係数 γ [ - ]
1) 1.242545	=	2) 1.110241

気液平衡関係

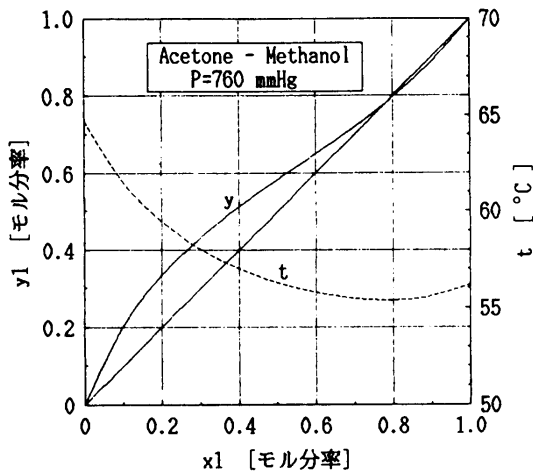


図 I-4 例題 I.2 のグラフ

が、さらに29行目の REPEAT 文の指定により液相アセトンのモル分率  $x_1$  を 0 から 0.1 おきに 1 まで変えた各ケースについて沸点計算することになる。なお、表 I-3 を例題 2.1 の解 (表 2.2) と比較してもらおうと拡張機能が明らかになる。つまり、表 I-3 のリストは基本的には表 2.2 のリストに 29 ~ 31 行目を追加・修正しただけである<sup>注)</sup>。といっても細かいところでの改善はある。例えば、VAR 文の説明項に書いた変数の意味と単位が [入力値または初期値] と [計算結果] の欄に変数とともに表示されるので、ドキュメント性が大変良くなった。また RESET 文での許容誤差の指定はそのデフォルト値が十分小さく設定されたので特別な場合以外は不要になった等である。

図 I-4 において、図の両縦軸にモル分率と温度の軸を設定しており、この系では最低共沸が存在することが組成と温度の両面からわかる。

4. データのプロットと最小二乗近似

実験の結果をプロットし最小二乗近似により整理したいことがよくあるが、結構面倒なものである。EQUATRAN-M ではそれが簡単に行える。

<例題 I.3: 水蒸気分子熱の最小二乗近似>  
1atm における水蒸気の熱容量  $c_p$  [J/g・°C] の測定値が温度  $t$  [°C] に対して表 I-4 に与えら

注) 前連載の表 2.2 のリスト中 23, 25 行目を次の通り訂正。

$$(x(1) + A21 * x(2)) \rightarrow (x(1) + A12 * x(2))$$

れている<sup>4)</sup>。これを温度と分子熱  $C_p$  [cal/mol・°C] の関係としてプロットし 2 次式で最小二乗近似した結果と比較せよ。

表 I-4 水蒸気の熱容量

$t$	$c_p$	$t$	$c_p$
100	2.017	300	1.996
120	1.996	350	2.021
160	1.975	400	2.051
200	1.971	450	2.084
250	1.980	500	2.112

解) 最小二乗法については例題 7.4 ~ 7.7 で例示されているが、正規方程式の簡単な作り方を説明する。いま  $n$  をデータ数、 $i$  をデータ番号とし  $C_{pi} = a + b \cdot t_i + c \cdot t_i^2$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) (I-3) で近似することを考える。ここで、

$$C_p = \begin{matrix} C_{p1} \\ C_{p2} \\ \cdot \\ \cdot \\ C_{pn} \end{matrix}, X = \begin{matrix} 1 & t_1 & t_1^2 \\ 1 & t_2 & t_2^2 \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & t_n & t_n^2 \end{matrix}$$

$$\alpha = (a \quad b \quad c)^T \quad (I-4)$$

とし、(I-3) 式を全データにつままとめた形

表 I-5 例題 I.3 のリストとデータテキスト

```

1: /* 水蒸気分子熱の最小二乗近似 */
2:
3: LOCAL m=3, n=10
4: VAR t(n) "温度 [°C]" ..
5: ,cp(n) "熱容量 [J/g・°C]" ..
6: ,Cp(n) "分子熱 [cal/mol・°C]" ..
7: ,X(n,m) "X表" ..
8: ,A(n,m) "A表 =X*X" ..
9: ,x(m) "近似式係数" ..
10: ,y(m) "=X Cp" ..
11: ,z(n) "近似結果" ..
12:
13: /* 観測データ */
14: INPUT t, cp
15: Cp = cp * 0.23846 * 18.02
16:
17: /* X 表の作成 */
18: X(,1) = 1 ; X(,2) = t ; X(,3) = t^2
19: /* A 表の作成 */
20: A(1) = SUM(X*X(,1))
21: A(2) = SUM(X*X(,2))
22: A(3) = SUM(X*X(,3))
23: y = SUM(X*Cp)
24: /* 正規方程式を解く */
25: SUM(A*x) = y
26: /* 近似結果の計算 */
27: z = x(1) + x(2)*t + x(3)*t^2
28:
29: OUTPUT x,t,Cp,z
30: OUTPUT1 x(1),x(2),x(3),t,Cp,z

```

```

1: /* 水蒸気分子熱のデータ */
2:
3: t = ( 100, 120, 160, 200, 250, ..
4:      300, 350, 400, 450, 500)
5: cp = (2.017, 1.996, 1.975, 1.971, 1.980, ..
6:       1.996, 2.021, 2.051, 2.084, 2.122)

```

水蒸気分子熱の最小二乗近似

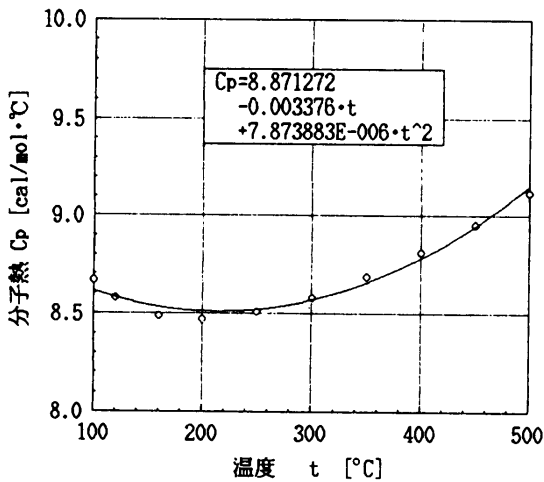


図 I-5 例題 I.3 のグラフ

$$C_p = X\alpha \quad (I-5)$$

の両辺に転置行列  $X^T$  をかけると次の正規方程式が得られる。

$$X^T C_p = X^T X \alpha$$

これを解けば  $\alpha$  が求まる (I-3) 式の係数である。

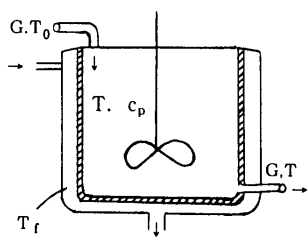
この方法で正規方程式を作り係数を求めるためのリストとデータテキストが表 I-5 である。リストでは  $\alpha$  の代わりに  $x$  を用い、 $X^T$  を  $X^-$  で表現している (マトリクスの転置が書けるようになった!)。なお、データは 14 行目の INPUT 文でデータテキストから読み込まれ、15 行目で単位変換されている。データと近似曲線を図示したのが図 I-5 で、データを  $\circ$  で示し、近似曲線を実線で描いた。2 次式でよく近似されている。コメント欄には計算結果の近似式係数がリザルトファイルから渡されて表示されている。

## 5. 常微分方程式の数値解法

EQUATRAN-M で常微分方程式が解けるようになったので、プロセスのダイナミックシミュレーションも手軽に行える。簡単な例でそれを示そう。

### <例題 I.4: 攪はん槽によるスラリの加熱>

図のような連続的にスラリを供給し、加熱・昇温するためのジャケットつき攪はん槽を設計する。槽の直径を変えた場



合のスタートアップ時の昇温速度を調べよ<sup>5)</sup>。ただし、スラリの密度  $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ 、比熱  $c_p = 1.0 \text{ kcal/kg} \cdot \text{°C}$ 、供給温度  $T_0 [\text{°C}]$  で、槽の高さ  $L$  は  $1.5 \text{ m}$ 、総括伝熱係数  $U = 400 \text{ kcal/m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{°C}$  とする。

解) 槽の直径  $D [\text{m}]$ 、容積  $V [\text{m}^3]$ 、伝熱面積  $A [\text{m}^2]$ 、スラリの流量  $G [\text{kg/h}]$ 、温度  $T [\text{°C}]$ 、ジャケットの温度  $T_j [\text{°C}]$  とすると、熱収支から

$$V \cdot \rho \cdot c_p \cdot T' = -G \cdot c_p (T - T_0) + U \cdot A (T_j - T) \quad (I-6)$$

が成り立つ。ここで、 $t$  を時間  $[\text{h}]$  とすると  $T'$  は微分  $dT/dt$  を意味する。 $V$  と  $A$  は

$$V = (\pi \cdot D^2 / 4) \cdot L \quad (I-7)$$

表 I-6 例題 I.4 のリスト

```

1: /* 攪はん槽によるスラリの加熱 */
2:
3: VAR t          "時間 [h]" ..
4:   ,T(3)       "スラリー温度 [°C]" ..
5:   ,T0=30      "初期温度 [°C]" ..
6:   ,Tj         "ジャケット温度 [°C]" ..
7:   ,cp=1.0     "比熱 [kcal/kg·°C]" ..
8:   ,rho=1000   "密度 [kg/m³]" ..
9:   ,D(3)       "攪はん槽直径 [m]" ..
10:  ,L=1.5       "攪はん槽高さ [m]" ..
11:  ,A(3)        "伝熱面積 [m²]" ..
12:  ,V(3)        "内容積 [m³]" ..
13:  ,G           "流量 [kg/h]" ..
14:  ,U=400       "伝熱係数 [kcal/m²·h·°C]"
15:
16:  V*rho*cp*T' = -G*cp*(T-T0) + U*A*(Tj-T)
17:
18:  V = (_pi*D^2/4)*L
19:  A = _pi*D*L + _pi*D^2/4
20:  D = (1.0, 1.2, 1.5)
21:
22:  T # T0
23:  INTEGRAL t [0,2] STEP 0.1
24:
25:  TREND T [0,120] STEP 0.1
26:  INPUT G, Tj ; OUTPUT A, V
27:  OUTPUT1 t, T(1),T(2),T(3),G,Tj STEP 0.1
    
```

表 I-7 例題 I.4 のトレンドグラフ

[ 入力データ ]			
G	= 1000	: 流量 [kg/h]	
Tj	= 120	: ジャケット温度 [°C]	
t	1:T(1)	2:T(2)	3:T(3)
0	30.00000	.	1
0.100000	44.71144	.	321
0.200000	55.92464	.	321
0.300000	64.47144	.	3 21
0.400000	70.98590	.	32 1
0.500000	75.95128	.	3*21
0.600000	79.73594	.	*3 1
0.700000	82.62064	.	31
0.800000	84.81939	.	31
0.900000	86.49330	.	31
1.000000	87.77269	.	31
1.100000	88.74633	.	1
1.200000	89.48845	.	12
1.300000	90.05410	.	13
1.400000	90.48524	.	12
1.500000	90.81386	.	12
1.600000	91.06434	.	123
1.700000	91.25526	.	123
1.800000	91.40078	.	123
1.900000	91.51169	.	12-3
2.000000	91.59623	.	1 23
[ 計算結果 ]			
A	=	伝熱面積 [m²]	
1) 5.497787	2) 6.78584	3) 8.835729	
V	=	内容積 [m³]	
1) 1.178097	2) 1.69646	3) 2.650719	

攪はん槽によるスラリの加熱

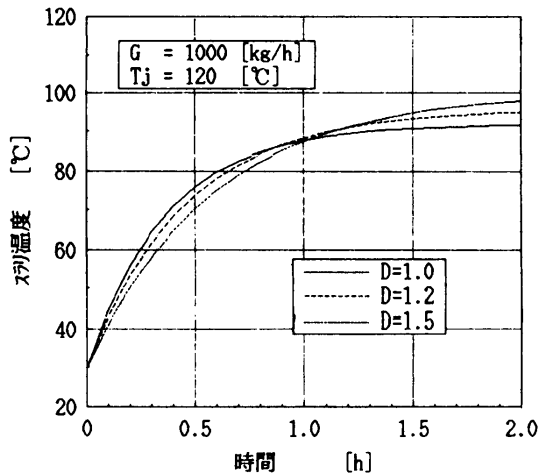


図 I-6 例題 I.4 のグラフ

$$A = \pi \cdot D \cdot L + \pi \cdot D^2/4 \quad (I-8)$$

で計算される。つまり、(I-6) の常微分方程式を (I-7)、(I-8) 式と連立させ、D を与えて t につき数値積分すればよい。

これらの式を EQUATRAN-M の記法で書いたリストが表 I-6 である。16 行目が (I-6) 式を表しており、微分記号「 $\dot{\phantom{x}}$ 」がそのまま使われていることに注意願いたい。18, 19 行目の  $\pi$  は組み込み定数で円周率  $\pi$  のことである。ここでは、D, T を配列変数として 3 つのケースを連立常微分方程式の形にして同時に解いている。22 行目の # により T の初期状態を与え、23 行目の INTEGRAL 文で t を独立変数にして 0 ~ 2 h まで 0.1h のきざみで数値積分することを指示している。25 行目の TREND 文では 0.1h ごとの積分経過の出力を指示しており、 $\boxed{EM}$  で表示範囲を指定するとキャラクタグラフが表示される。なお、数値積分手法は 3 種類用意されているが、とくに指定しなければ固定きざみの Runge-Kutta 法が用いられる。

$G=1000\text{ kg/h}$ ,  $T_j=120^\circ\text{C}$  としたとき  $D=1.0, 1.2, 1.5\text{ m}$  についてのスラリー温度 T の変化を表 I-7 のトレンドグラフおよび図 I-6 のグラフに示した。槽の直径 D が小さいほど温度 T は早く立ち上がり定常状態に達することがよくわかる。

## 6. 定積分の計算

定積分は被積分関数を数値積分するのだから、常微分方程式の数値積分と全く同じである。

### <例題 I.5: 単蒸留の計算<sup>2)</sup>>

メタノール-水混合物を単蒸留する。メタノールのモル分率  $x_0$  の液を L [mol] 仕込み、D [mol] だけ留出させたときの液組成  $x_e$  は留出率を  $\beta (=D/L)$  として

$$\ln(1 - \beta) = \int_{x_0}^{x_e} \frac{dx}{(y-x)} \quad (I-9)$$

で表される。ここで、x, y は液相、気相中メタノールのモル分率である。いま、 $x_0 = 0.397$  のとき  $x_e = 0.296$  になるまでの液組成と留出率の関係を求めよ。

解) (I-9) 式の右辺を

$$I = \int_{x_0}^{x_e} \frac{dx}{(y-x)} \quad (I-10)$$

とおけば、両辺を x で微分して

$$I' = \frac{1}{(y-x)} \quad (I-11)$$

表 I-8 例題 I.5 の解

```

1: /* 単蒸留の計算 */
2:
3: VAR P=760 "全圧" [ mmHg ], ...
4: P0(2) "蒸気圧" [ mmHg ], ...
5: t "温度" [ °C ], ...
6: x(2) "液相モル分率" [ - ], ...
7: y(2) "気相モル分率" [ - ], ...
8: g(2) "活量係数" [ - ], ...
9: a(2), b(2), c(2) "Antoine定数"
10:
11: log10(P0) = a - b/(c + t) /* Antoine 式 */
12: /* methanol water */
13: a = ( 7.87863, 7.96681 )
14: b = ( 1473.11, 1668.21 )
15: c = ( 230.00, 228.00 )
16:
17: /* Wilson 式 */
18: A12 = 0.47525 ; A21 = 0.98356
19: loge(g(1)) = -loge(x(1)+A12*x(2)) ...
20: +x(2)*(A12/(x(1)+A12*x(2))-A21/(A21*x(1)+x(2)))
21: loge(g(2)) = -loge(A21*x(1)+x(2)) ...
22: -x(1)*(A12/(x(1)+A12*x(2))-A21/(A21*x(1)+x(2)))
23:
24: P # y = P0 # g # x
25: EQ:SUM( y ) = 1
26: SUM( x ) = 1 ; x(1) = x1
27: RESET t#50 [0,200] BY EQ
28:
29: VAR beta "留出率" [ - ], ...
30: L=11.5 "仕込量" [ mol ], ...
31: D=beta*L "留出量" [ mol ]
32: loge(1-beta) = I
33: I' = 1/(y(1)-x(1)) ; I # 0
34: INTEGRAL x1 [x0, xe] STEP 0.01
35: x0 = 0.397 ; xe = 0.296
36:
37: TREND y(1), beta, D STEP 0.01
38: OUTPUT1 x(1), y(1), beta, D STEP 0.01
    
```

x1	1:y(1)	2:beta	3:D
0.3970000	0.7331290	0	0
0.3870000	0.7272356	0.02913635	0.3350680
0.3770000	0.7212041	0.05709481	0.6565903
0.3670000	0.7150245	0.08394691	0.9653895
0.3570000	0.7086859	0.1097593	1.262231
0.3470000	0.7021765	0.1345939	1.547830
0.3370000	0.6954834	0.1585090	1.822854
0.3270000	0.6885926	0.1815588	2.087926
0.3170000	0.6814889	0.2037942	2.343633
0.3070000	0.6741553	0.2252632	2.590526
0.2970000	0.6665735	0.2460109	2.829126
0.2960000	0.6658009	0.2480477	2.852549

単蒸留の計算

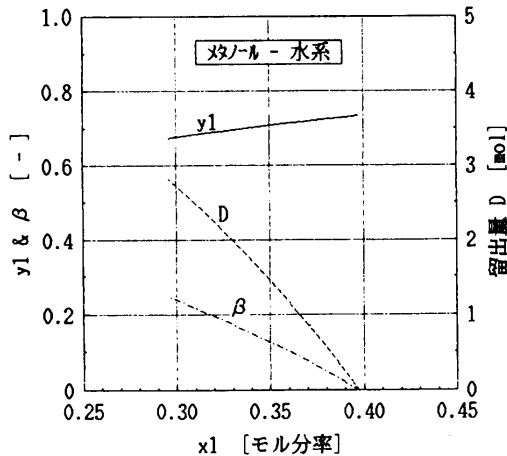


図 I-7 例題 I.5 のグラフ

を得る。この微分方程式を  $x=x_0$  において  $I=0$  の初期条件下で  $x=x_e$  まで解けばよい。

ここで、 $y$  は気液平衡関係から求まるが、その計算は例題 I.2 の通りである。なお、蒸気圧は Antoine 式 (定数は例題 I-1)、活量係数は Wilson 式で表す。この系の Wilson パラメータは  $\Lambda_{12}=0.47525$ ,  $\Lambda_{21}=0.98356$  である<sup>3)</sup>。

この問題を解くためのリストが表 I-8 である。27 行目までは例題 I.2 のリスト (表 I-3) をコピーして定数とパラメータを改めたものである。実質的に追加したのは 29 行目以下で、34 行目の INTEGRAL 文で積分を指示している。なお、 $x_0 > x_e$  であるからこの積分は逆向き積分といわれる。

また、29~31 行目の VAR 文では変数に数値や式を定義しており、これも拡張された仕様の一つである。

計算結果は表 I-8 のトレンド出力と図 I-7 のグラフに示した。37 行目の TREND 文でこんどは表示範囲の指定がないので数値のみ出力する。最終の  $\beta$  の値は 0.248 で文献の値は 0.264 と少し差があるが、これは図積分との違いによるのだろう。

このように、計算結果のグラフ表示が楽しくでき、常微分方程式も EQUATRAN-M の思想に則りらくらく解けその結果をたちどころに図示できるようになった。代数方程式はもともと得意とし、偏微分方程式も差分化すれば扱えるので、EQUATRAN-M は名実ともに方程式解法言語になったといえよう。

次回は微分方程式の扱いについて詳しく解説する予定である。

参考文献

- 1) 化学工学協会：化学工学便覧，改訂四版，p. 27 (1978)
- 2) 同上 p. 593
- 3) 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)
- 4) International Critical Table, vol. 5, p. 82 McGraw-Hill (1929)
- 5) Marshall, Pigford (河野訳)：化学工学における微分方程式の応用，p. 17, 工業数学研究会 (1960)