

方程式解法ソフトEQUATRAN-M(イコートラン-エム)の新しい機能について

小 口 梧 郎*

方程式解法ソフトについては、本誌ではすでにEQUATRAN-Mがとり上げられており¹⁾、さらに昨年第6号では低価格な方程式解法ソフトとしてEureka: The Solverの紹介と、EQUATRAN-Mとの比較が行われている²⁾。これらのほかにも両者の中間的性格(機能、価値とも)をもつTK! Solver^{注)}があり、方程式解法ソフトは日本でもようやく普及の時期を向かえつつある。

前記のEQUATRAN-Mについての紹介、比較はバージョン1をもとに行われているが、その後、大幅に機能を強化されたバージョン2が発表されているので、本稿では補足の意味でEQUATRAN-Mの新バージョンの機能と応用例を紹介する。

1. EQUATRAN-Mの新しい機能

EQUATRAN-Mの基本的な機能は、通常の数学的記法で入力された連立方程式を解析し、計算手順を自動生成し、さらにこれを実行(数値計算)して答を出力することであるが、とくに次の点が特長としてあげられよう。

- 配列(ベクトル、マトリクス)を含む式を記述できる。
- 多変数の最適化問題を扱える。
- 関数関係を数表で与えることができる。
- 条件付きの式(場合分けのある式)が扱える。
- マクロ、パラメータにより柔軟で拡張性のある記述が可能。
- 数百の変数を含む大規模な問題が扱える。

* 三井東圧化学(株)システム部

- 最適化された計算手順を生成するため高速。
バージョン2では、これらの機能が全般的に強化されているほか、2つの大きな拡張が行われている。

(1) 常微分方程式

高階の常微分方程式がそのままの形で記述でき、これを初期値問題として数値的に解く機能が加えられた。リスト1に簡単な例を示す。3行目に2階の常微分方

リスト1 常微分方程式の例

```
1: /* 常微分方程式 */
2:
3:     x'' - 0.2*(1-x^2)*x' + x = 0
4:     x # 8
5:     x' # 0
6:
7:     INTEGRAL t[0,20] STEP 0.1
8:     OUTPUT1 t,x,x' STEP 0.1
```

程式が書かれているが、このように微分は、微分記号「 ∇ 」を使って表す。初期条件は、4, 5行目のような「#式」を用いて与えるか、あるいは計算の実行時に入力することもできる。積分の独立変数と積分範囲は別にINTEGRAL文(7行目)を書いて指定する。INTEGRAL文では同時に積分きざみや積分手法の指定が行える。

常微分方程式は連立のものはもちろん、一般の代数方程式と連成していてもよい。また、むだ時間要素なども関数として用意されているので、複雑な連続系の動的シミュレーションが手軽に行えるようになった。

リストの8行目のOUTPUT1文は、計算結果や

注) 日本ユニバック情報システム(株)より日本語版が
でている

積分計算の過程をファイルに出力するもので、このファイルは別の計算の入力データとして、あるいは次に述べるグラフ作成のためのデータとして利用されるほか、他のプログラムとの結合のために使用することができる。

(2) グラフ作成機能

ケーススタディの結果や数値積分の過程をグラフに作成する機能である。前述のように、計算結果はいったんファイルに書き出されてからグラフにするので、1つの計算結果から何種類ものグラフを作ったり、あるいは複数の計算結果を重ね書きしたグラフを描くこともできる。グラフのX軸、Y軸は出力した変数の中から自由に選ぶことができ、リスト1の計算結果からたとえば図1のグラフができる。

描けるグラフは線図のみだが、対数グラフが可能なほか、近似線やスプライン曲線補間など工学用に必要な機能が豊富である。また、縦横比や大きさが自由に決められるほか、グラフ中に凡例やコメントを書き込むなどの編集機能があって完成度の高いグラフが得られるので、計算結果の整理はもちろん、報告書用としても十分使用できよう。

2. 応用例

EQUATRAN-Mの新しい機能を利用した応用例を2つ紹介する。いずれも「化学工学便覧」に例題としてとり上げられている問題である。

(1) McCabe-Thieleの図計算法

最初の例は[例題 7.5]で、ベンゼンとトルエンとを分離する精留塔の理論段数をMcCabe-Thieleの

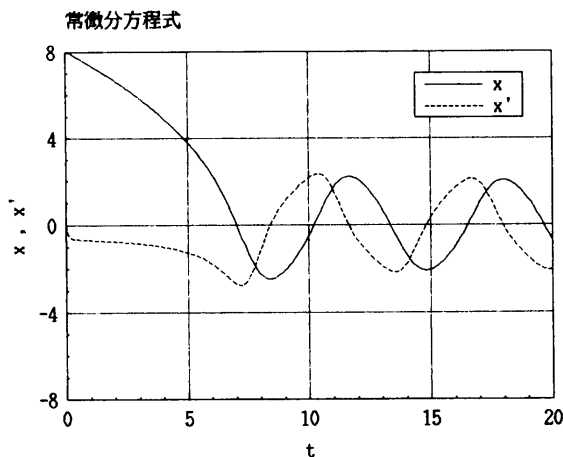


図1 グラフの作成例

図計算法によって決定する³⁾。新しい機能の1つであるREPEAT文による繰返しとグラフ機能を利用すると図計算法をなぞることができる。すなわち、塔頂から平衡曲線と操作線とを交互にたどりながら缶出濃度に達するまで計算を繰返し、その過程をグラフに表示する。この計算のためのリストをリスト2に示す。

リストの25行目は平衡曲線の方程式であり、ここでは簡単のために比揮発度を一定とした。操作線の方程式は濃縮部・回収部を含めて26~29行目のように表現することができる。階段作図の各頂点のxとyは、19~22行目の条件付きの式で表されている。ここで使われているPREVという組込み関数は、繰返しの計算における前回の計算値を与える関数で、たとえば22行目のPREV(x, xD)はxの前回値を返す。xDは初回に返される関数値となる。ところで条件付きの式では、WHEN項(この例ではopや!op)の論理値が真の方の式が採用される。opは平衡曲線との交点を求めるのか操作線との交点を求めるのかを与える制御用の変数になっていて、23行目の式で交互に1(真)と0(偽)をとるように定義されている(!は否定を表す演算子である)。したがって、たと

リスト2 McCabe-Thieleの図計算法

```

1:  /* McCabe-Thiele の図計算法 */
2:
3:  VAR x      "液相のモル分率  [ - ]" ..
4:  ,y        "気相のモル分率  [ - ]" ..
5:  ,R        "還流比          [ - ]" ..
6:  ,q=1/3    "原料中の液の割合 [ - ]" ..
7:  ,alp=2.46 "比揮発度         [ - ]" ..
8:  ,xF=0.44  "原料のモル分率  [ - ]" ..
9:  ,xD       "留出のモル分率  [ - ]" ..
10: ,xW       "缶出のモル分率  [ - ]" ..
11: ,F=100    "原料量             [mol/h]" ..
12: ,D        "留出量             [mol/h]" ..
13: ,W        "缶出量             [mol/h]" ..
14: ,op       "計算制御変数" ..
15:
16:  F = D + W
17:  F*xF = D*xD + W*xW
18:
19:  y = PREV( y, 0 ) WHEN !op ..
20:  = yo      WHEN op ..
21:  x = xe    WHEN !op ..
22:  = PREV( x, xD ) WHEN op ..
23:  op = !PREV( op, 0 )
24:
25:  y = alp*xe/(1+(alp-1)*xe)
26:  yo = MIN( yc, yr )
27:  yc = R/(R+1)*x + 1/(R+1)*xD
28:  yr = (R+q*F/D)/(R+1-(1-q)*F/D)*x..
29:  - (F/D-1)/(R+1-(1-q)*F/D)*xW
30:
31:  REPEAT N[0,100] STEP 0.5 BREAK btm
32:  btm = x<xW & op /* 終了条件 */
33:  INPUT R,xD,xW
34:  OUTPUT1 R,xD,xW,x,y,xe,yo STEP 0.5
35:  OUTPUT N,D,W

```

例えば19~20行目の式では、 y は平衡計算のとき（opが0）には前回の値のままであり、収支計算のとき（opが1）には操作線の方程式から計算されるべきことが指定されているわけである。

31行目がREPEAT文であり、段数 N を0から100まで0.5きざみで繰り返して計算することを指定している。この文のBREAK btmの項は中断条件といって、変数btmの値が真になった時点で繰り返しが中断される。btmは次行で缶出濃度に達したときに真になるように与えられている。

これを実行すると、リスト3のように計算結果が得られる。さらに計算結果から x と y 、 x と y_0 、 x_e と y および x と x の関係をグラフにすると図2の階段作図が得られる。

REPEAT文による繰り返しの機能は、本来、ある変数の値を等間隔に変えながらケーススタディをするために用意されているものである。この例のように手続的に使用するのには方程式解法ソフトの使い方としてはやや邪道に類するともいえるが、便利なことも

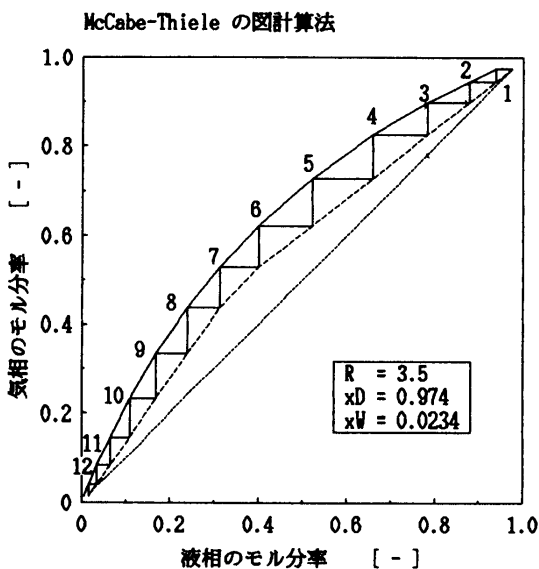


図2 リスト2による計算結果(グラフ)

リスト3 リスト2による計算結果

```

[ 入力データ ]
R          = 3.5           : 還流比           [ - ]
xD         = 0.974        : 留出のモル分率  [ - ]
xW         = 0.0234       : 缶出のモル分率  [ - ]
N = 13     で btm により中断しました

[ 計算結果 ]
N          = 13
D          = 43.824953    : 留出量           [ mol/h ]
W          = 56.175047    : 缶出量           [ mol/h ]

```

多い。

(2) 吸収塔の塔高計算

つぎの問題は[例題 6.4]で、空気中に含まれる SO_2 を水で吸収分離するための吸収塔の所要塔高を決定する⁴⁾。この問題のための基礎式を原典から拾い出しておく。まず、塔内の液およびガス中の SO_2 濃度をそれぞれ x および y として、装置全体の物質収支から、

$$G_M \left(\frac{y_B}{1-y_B} - \frac{y_T}{1-y_T} \right) = L_M \left(\frac{x_B}{1-x_B} - \frac{x_T}{1-x_T} \right) \quad (1)$$

が得られる。添字 B, T はそれぞれ塔底、塔頂を表す。 G_M と L_M は空気および水の空塔モル速度である。同様に任意の断面の上方の部分の物質収支から次式を得る。

$$G_M \left(\frac{y}{1-y} - \frac{y_T}{1-y_T} \right) = L_M \left(\frac{x}{1-x} - \frac{x_T}{1-x_T} \right) \quad (2)$$

必要な塔高 Z は、次式で与えられる。

$$Z = G_M \int_{y_T}^{y_B} \frac{y_B}{y_T} \frac{(1-y)_M}{k'_u a (1-y)^2 (y-y_i)} dy \quad (3)$$

また、タイラインの傾きを与える式から

$$\frac{y_i - y}{x_i - x} = - \frac{k'_x a (1-y)_M}{k'_v a (1-x)_M} \quad (4)$$

の関係が成り立つ。ここで添字 i は平衡曲線上の濃度を、 $(1-y)_M$ 、 $(1-x)_M$ はそれぞれ $(1-y)$ と $(1-y_i)$ および $(1-x)$ と $(1-x_i)$ の対数平均を表す。

この問題では吸収塔の容量係数 $k'_v a$ と $k'_x a$ は次の実験式によって与えられている。

$$k'_y a = 0.0988 G^{0.7} L^{0.25} \quad (5)$$

$$k'_x a = 0.655 L^{0.82} \quad (6)$$

GとLはガスと液の空塔質量速度である。平衡曲線はSO₂の水に対する溶解度のデータとして表の形で与えられている。

リスト4によってこの問題を解くことができる。3

リスト4 吸収塔の塔高計算

```

1:  /* 吸収塔の塔高計算 */
2:
3:  VAR L      "塔内水量      [kg/m2·h]" ..
4:    ,G      "塔内ガス量    [kg/m2·h]" ..
5:    ,LT=3300 "塔頂水量      [kg/m2·h]" ..
6:    ,GB=2000 "塔底ガス量    [kg/m2·h]" ..
7:    ,Lmd    "水量          [kgmol/m2·h]" ..
8:    ,Gmd    "空気量        [kgmol/m2·h]" ..
9:    ,Wma=29  "空気の分子量      " ..
10:   ,Wms=64  "SO2の分子量      " ..
11:   ,Wmh=18  "水の分子量       " ..
12:   ,x      "液濃度        [mol/mol]" ..
13:   ,y      "ガス濃度        [mol/mol]" ..
14:   ,xT=0    "塔頂液濃度      [mol/mol]" ..
15:   ,yT=0.005 "塔頂ガス濃度  [mol/mol]" ..
16:   ,xB      "塔底液濃度      [mol/mol]" ..
17:   ,yB=0.2  "塔底ガス濃度  [mol/mol]" ..
18:   ,P = 2   "操作圧力        [atm]" ..
19:   ,Z      "塔高          [ m ]" ..
20:
21:  TABLE xit=SOLS02(pt) /*SO2 溶解度*/
22:  VAR xit(14),pt(14)
23:  xit=( 0,0.0562,0.141,0.281,0.422,..
24:        0.562,0.843,1.40,1.96,2.80,..
25:        4.20, 6.98,13.9,20.7)*0.001
26:  pt=(0, 0.000789,0.00224,0.00618,..
27:       0.0107,.0155,0.0259,0.0474,0.0684,..
28:       0.104,0.164,0.284,0.595,0.905)
29:
30:  Gmd = GB/(Wma + yB/(1-yB)*Wms)
31:  Lmd = LT/Wmh
32:  Gmd*(yB/(1-yB) - yT/(1-yT)) ..
33:  = Lmd*(xB/(1-xB) - xT/(1-xT))
34:  Gmd*(y/(1-y) - yT/(1-yT)) ..
35:  = Lmd*(x/(1-x) - xT/(1-xT))
36:  (yi-y)/(xi-x) = -(kxda/kyda)*(ylm/xlm)
37:  kyda = 0.0988*G^0.7*L^0.25
38:  kxda = 0.655*L^0.82
39:  ey:  ylm = (yi-y)/loge((1-y)/(1-yi))
40:      xlm = (xi-x)/loge((1-x)/(1-xi))
41:  L = Lmd*(Wmh + x/(1-x)*Wms)
42:  G = Gmd*(Wma + y/(1-y)*Wms)
43:  Z' = Gmd*ylm/kyda/(1-y)^2/(y-yi)
44:  Z # 0
45:  xi = SOLS02(P*yi)
46:
47:  RESET yi#0.03[0,1] BY ey
48:  INTEGRAL y[yT,yB] STEP 0.002
49:  OUTPUT1 y,x,yi,xi STEP 0.002
50:  OUTPUT  Z,xB

```

～19行目の変数定義文（VAR文）の説明項（”で囲まれた部分）を参照すれば各式の意味は自明であろう。21～28行目は平衡曲線を与える表をそのまま使って関数SOLS02を定義している。(3)式の定積分はこれを微分形に直せば、常微分方程式の初期値問題に変換することができる。リストの43～44行目はその微分方程式と初期条件を、また48行目のINTEGRAL文は積分範囲を与えている。47行目のRESET文は平衡濃度を求める収束計算の方法（繰り返し変数と収束の判定式）を指定するためのものである。収束計算は各積分のきざみ点ごとに行われる。

計算結果をリスト5に、また計算結果から操作線と平衡曲線をグラフにして図3に示した。原典では計算を容易にするために、いくつかの仮定（ $k'_y a$ と G_M とが比例する、あるいはタイラインの傾きが一定）をして近似解を求めているが、リスト4による厳密解とほぼ一致している。

ところでEQUATRAN-Mで原典と同じ簡略計算の方法を使うことももちろん可能である。しかし奇妙(?)なことに簡略計算の方が厳密なものより必要な式の記述はずっと増加する。塔内の平均値を計算するための方程式などが必要になるからである。この問題に限らず、方程式解法ソフトを使う場合には、慣用

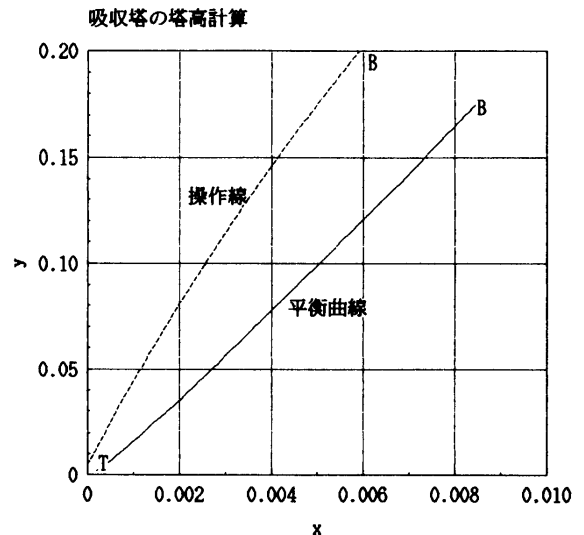


図3 リスト4による計算結果(グラフ)

リスト5 リスト4による計算結果

```

[  計算結果  ]
Z          = 2.832172      : 塔高          [ m ]
xB         = 0.005903724 : 塔底液濃度    [ mol/mol ]

```

的な計算法によるよりも、原点の式に逆のぼった方が簡明になることがよく経験される。

本稿では、方程式解法ソフトの使用法としてはやや対照的な2つの例題をとり上げてみた。EQUATRAN-Mの新バージョンの使用例はほかにも多く紹介されているので参照していただきたい⁵⁻⁷⁾。

参考文献

- 1) 宮原他：分離における数値計算，分離技術，No. 5，p.281 (1985)
- 2) 伊藤章：方程式解法ソフトEureka：The Solver使用記，分離技術，No. 6，p.401 (1987)
- 3) 化学工学協会編：化学工学便覧（改訂四版）p.596，丸善（1978）
- 4) 同上，p.502
- 5) 三井東圧EQM研究会：パソコンのための方程式解法ソフトEQUATRAN-M入門，省エネルギーセンター（1987）
- 6) 宮原他：続連載「EQUATRAN-M」技術計算用方程式解法言語，ケミカルエンジニアリング，10月号（1987）～5月号（1988）
- 7) 小口他：連載「化学工業における数値計算」，Information，8月号（1986）～1月号（1987）