

# 方程式解法ソフトによる 化学工学演習

伊 東 章

Akira Ito

## ケミカルエンジニアの道具：計算尺から パソコンへ

化学プロセスシミュレータや3次元CADなど、現在のケミカルエンジニアの仕事はパソコン上の各種ソフトを自在に使いこなすことでおこなわれる。一方、彼らを育て送り出す役割の大学の化学工学の教育現場では、計算尺が電卓に進歩したものの、未だに図式解法や手計算、手書きの製図に終始している。これは化学工学の教科書自身がパソコンが道具となった現状に対応していないことが原因であるが、エンジニアの現場と教育との乖離がますます広がっているようである。

また、化学工学に限らず大学教育一般について最近「魅力ある授業」が学生から求められている。化学工学演習では膨大な手計算を課すことになるが、もはや現在の学生に「計算力の修行」を強要することはむつかしく、化学工学科目の選択者を減らす一因となっている。

大学改革の流れのなか、化学工学の教育現場としても、現代のエンジニアの仕事法を反映し、かつ学生の手計算の負担を軽減した化学工学の授業・演習の新しいありかたを考えてゆく必要に迫られている。

## BASIC or プロセスシミュレータ？

ひとむかし前はプログラミング言語「BASICによる化学工学演習」の構成が盛んに試みられた<sup>1,2)</sup>。しかし表計算ソフトの利用などでエンジニアが自分でプログラミングをおこなうことは実

\* 新潟大学工学部 化学システム工学科 助教授

際にはまれであろう。これを反映して、プログラミング言語による化学工学演習は普及しないまま止まっているようである。

もちろんエンジニアの現場はプロセスシミュレータが大きな役割を演じている。これはパソコン画面上でプロセスを構成するだけで物性値から収支計算までおこなってくれるパワフルな道具である。これを教育現場で使えば教育効果がありそうにも思われた。しかし筆者の経験<sup>3)</sup>からすると、プロセスシミュレータはあまりにブラックボックス的で、これによる教育の効果には疑問を持っている。初級学生を目をひくためと、基礎は習得している修士課程学生の演習には有効だが、学部化学工学演習に全面的に導入することは現実的ではないと思われる。

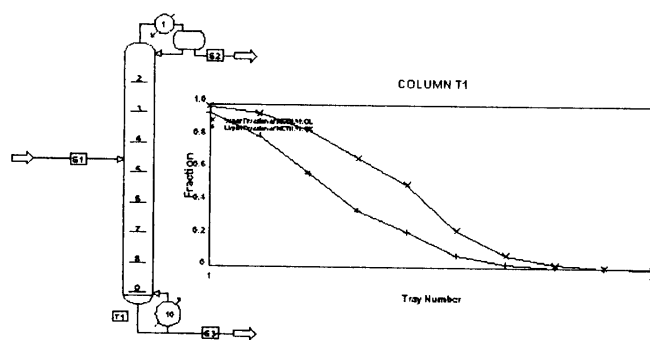


図1 プロセスシミュレータ(ProII/Provision)

## ネットワーク上で利用する方程式解法 ソフト

化学工学演習の要点は基礎式である連立非線形方程式および微分方程式をたて、それを解くこと

である。図式解法は計算機の無い時代にこれらをなんとか解こうとした先輩ケミカルエンジニアの偉大な工夫であった。しかし現在はパソコンを道具として方程式を直接解くことができる。この種の方程式解法ソフトは、プログラミングをするのではなく、モデルを作成して解くべき式を書き下ろすだけでその方程式系を解析し、解を求めてくれるものである。プログラミング言語とプロセスシミュレータの中間に位置するものとして、方程式解法ソフトの化学工学演習への導入が教育効果の面で注目される。

方程式解法ソフトは以前から市販されていたものである<sup>4)</sup>が、価格のこともあり電卓のように教室の学生全員が手元で使えるような環境はなかなか実現しなかった。やっと最近になり国産の方程式方程式解法ソフト EQUATRAN-G<sup>5)</sup>(オメガシミュレーション)(以下 EQG)にネットワーク対応版がでた。現在はどこの大学にもネットワークで結ばれたパソコン教室がある。そのような環境なら全端末で EQUATRAN を使うことができる。新潟大学の化学システム工学科では LAN 対応 EQG を導入して、化学工学演習を試行中である。そのなかから例題を紹介する。

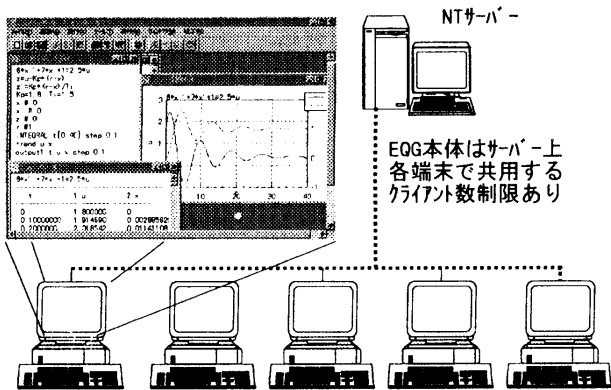


図2 学生各人が使える LAN 対応の方程式解法ソフト

## 方程式解法ソフト支援による化学工学演習

### 精 留

図式解法の代表である McCabe-Thiele 法は多変数の連立方程式を解く問題である。EQG によりこれを解くこと自身は簡単なので、実験との対比と操作変数を変えてのシミュレーションに演習

の力を置く。

【演習】 4段のオルダーショウ型蒸留器でメタノール/水系の精留を、還流比を変えておこなう。物質収支から各段気液組成をあらわす連立方程式を書き、これを解いて実測の流出液組成  $x_D$  と比較しなさい。

表1, 図3に EQG 上の記述と結果の図表示を示す。EQG の配列機能により多数の式をまとめて書くことができる。

表1 「精留」ソースリスト

```
VAR x(5), y(5), a(5)
zF=0.3; R=3
y(2:5)=(R/(R+1))*x(1:4)+(1/(R+1))*xD
a=4.609*x^2-9.886*x+7.748
y=a*x/(1+(a-1)*x)
y(1)=xD; y(5)=zF
```

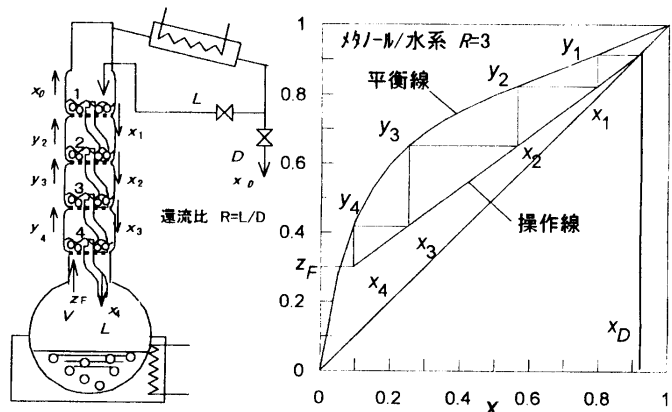


図3 「精留」実験と計算の比較

### 吸 収

吸収も図式解法をもちいる代表的例題である。しかしよく考えてみると積分ないし微分方程式の積分を図上でおこなっているものである。計算機の無い時代の工夫としてはすばらしいものであり、尊重されなくてはならないが、積分の道具があれば基礎式を直接扱うことも容易である。

【演習】  $SO_2$  を 2 vol% 含んだ廃ガスを充填塔で水で洗浄することにより、出口濃度を 1/20 にしたい。この充填塔高さを設計しなさい。

吸収操作の代表的問題なので詳細は省略するが、普通は H.T.U. と移動単位数  $N$  を導入して図式積

分を利用する。ここでは基礎式の直接積分で解を求める。気相、液相のSO<sub>2</sub>モル分率をそれぞれ  $y$ ,  $x$  とした基礎式は以下のようである。

$$G \frac{dy}{dz} = -k_y a (y - y_i) \quad (1)$$

$$L \frac{dx}{dz} = -k_x a (x_i - x) \quad (2)$$

$$k_y a (y - y_i) = k_x a (x_i - x) \quad (3)$$

$$\text{平衡関係: } x_i = 0.0329 y_i + 0.003735 \sqrt{y_i} \quad (4)$$

以上をそのまま記述したのが表2, 計算結果を図示したのが図4である。従来の教え方に比べて非常に簡単である。特に平衡関係は非線形なので通常の方法では積分が困難である。なお, H.T.U. や  $N$  が出てこないのは教育上問題があるかもしれない。

表2 「吸収」ソースリスト

```

y1=0.02; x1=0.000536
kya=309; kxa=5468; G=46.9; L=1659
G*y'=-kya*(y-yi)
L*x'=-kxa*(xi-x)
kya*(y-yi)=kxa*(xi-x)
xi=0.0329*yi+0.003735*SQRT(yi)
x # x1
y # y1
INTEGRAL z [0,2] step 0.01
trend x, xi, yi, y
    
```

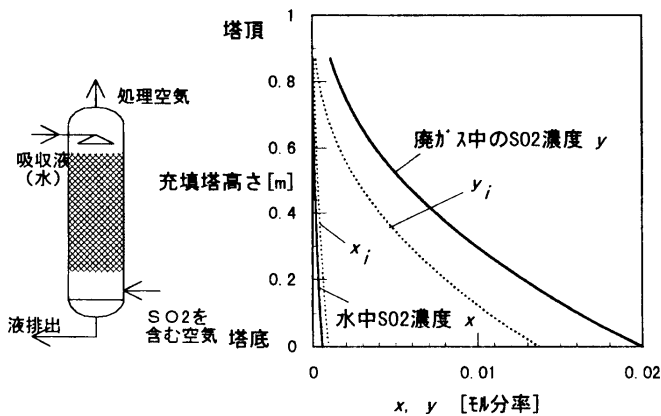


図4 「吸収」計算結果 吸収塔内濃度分布

### 反応工学

反応装置の解析も微分方程式が主役なので、方程式解法ソフトで演習ができれば演習そのものは「定式化」に集中でき効率的である。

【演習】<sup>6)</sup> 気相触媒反応の反応速度と反応速度定数:

$$-r = k p_A p_B \quad (5)$$

$$k = 2.44 \times 10^4 \exp(-75.37 \times 10^3 / RT) \quad (6)$$

が与えられている。触媒層入口からの触媒容積  $V$  に対して、転化率  $x$  と温度が連立常微分方程式:

$$dx/dV = -r p_B / z_{A0} F_0 \quad (7)$$

$$dT/dV = (Q r p_B - (UA/S)(T - T_w)) / C_p F_0 \quad (8)$$

で表せる。伝熱係数  $(UA/S)$  を変化させて計算をおこない、触媒層の温度が一定温度を越えない条件を探し、そのときの触媒層の容積  $V$  を設計する。

式をそのまま記述するだけでよい(表3)。EQGのグラフ機能により計算結果をわかりやすく表示できる(図5)。

表3 「反応工学」ソースリストと計算結果

```

F0=40000; UAS=8
zA0=0.05; zB0=0.2; P=101.3; DA=(1-1-1)/1
Cp=31.4; Q=-142400; Tw=673; RB=1100
pA=zA0*(1-x)*P/(1+DA*zA0*x)
pB=(zB0-zA0*x)*P/(1+DA*zA0*x)
k=22400*exp(-75370/8.314/T)
r=-k*pA*pB
x'=-r*RB/(zA0*F0)
T'=(Q*r*RB-UAS*(T-Tw))/(Cp*F0)
x # 0
T # 673
INTEGRAL V[0,2] step 0.05
TREND x, T
output1 V, x, T step 0.05

計算結果例 F0=40000; UAS=8e6
    
```

V	1:x	2:T
0	0	673.0000
0.10000000	0.2320226	712.8071
0.20000000	0.5260068	743.3337
0.30000000	0.7411176	745.1796
0.40000000	0.8430365	727.5061
0.50000000	0.8902307	709.4480
0.60000000	0.9160088	696.4883
0.70000000	0.9325017	688.1395
0.80000000	0.9442821	682.9569
0.90000000	0.9533046	679.7632
1.00000000	0.9605165	677.7752

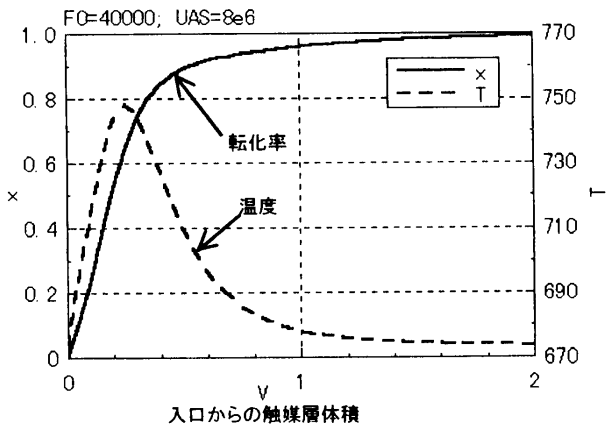


図5 「触媒層温度分布」計算結果の図示

### 混 合

トレーサー応答法による装置内混合過程の演習を実験装置と計算演習の組み合わせによりおこなう。

【演習】 完全混合，押し出し流れ，混合流れを模した装置内のトレーサーのインパルス入力にたいする出口での応答を測定する。完全混合槽列モデル

$$E(\theta) = \frac{N^N}{(N-1)!} \theta^{N-1} \exp(-N\theta) \quad (9)$$

および分散モデルによる理論応答曲線と比較して，混合のパラメータを決定せよ。

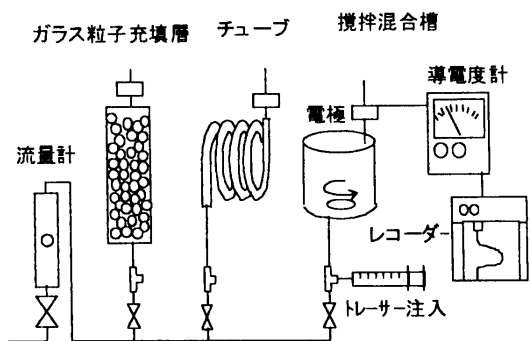


図6 「混合」実験装置

計算力の落ちてきている今の学生にとっては，(9)式のパラメータを変化させての繰り返し計算はたいへんな労力を要するようである。表計算なりEQGにより学生の計算労力への負担を軽くすることも，学習効率をあげることになるのではないか。レポート作成の過程でも計算に余計な労力を使わせないことにより，考察にも力点をおかせることとしたい。EQGによる記述(表4)と計算結

果およびデータとの比較例を示す(図7)。EQGではREPEAT命令により繰り返し計算が容易である。

表4 「槽列モデル」のリストと計算結果

```
GLOBAL N=10
VAR x(N)
x(1)=1; x(2:N)=x(1:N-1)+1
F=PROD(x)/x(N)
E=(N^N/F)*t^(N-1)*exp(-N*t)
REPEAT t[0,2] step 0.25
TREND E
```

計算結果 N=10

t	1:E
0	0
0.250000	0.008629007
0.500000	0.3626558
0.750000	1.144405
1.000000	1.251100
1.250000	0.7651491
1.500000	0.3240717
1.750000	0.1065187
2.000000	0.02908153

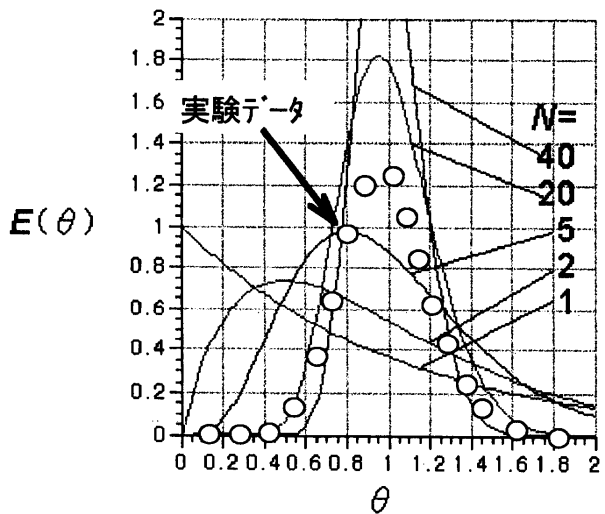


図7 完全混合槽列モデルの理論応答曲線と実験との比較

### 制 御

プロセス制御や動特性の分野はラプラス変換など高等な数学が必要なため，教育上の工夫が必要である。ここで数学的処理を強調しすぎると学生の興味を遠ざけてしまいがちである。微分方程式を簡便に扱う道具があれば，複雑な数学上の手続きを経なくても，連立微分方程式の直接積分の演習によりプロセス制御・動特性の学習が容易にな

る。以下の実習例のように、積分の道具を前提とし、微分方程式だけで構成される新たなプロセス解析の教育課程も考えられて良いのではないか。

**【演習】** この演習では液面制御実験と組み合わせさせておこなう。実験は、一定速度で流出しているタンクの液面をポンプで液を補給することで一定に保つもので、液面レベルを制御するためのポンプ流量を操作量とする比例-積分(PI)フィードバック制御系である<sup>1)</sup>。実験装置で限界感度法により制御パラメータを決定する。

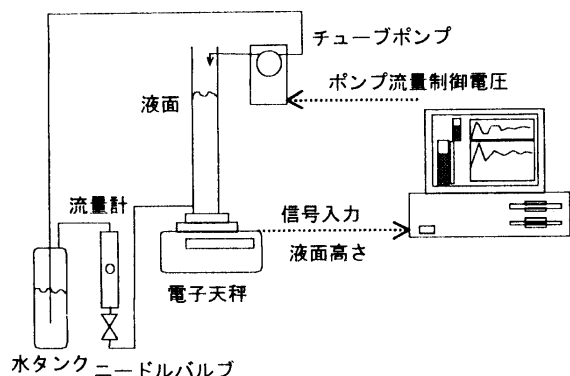


図8 液面制御実験

次に、このプロセスが図のような制御系であるとして、数値モデル上で目標値  $r$  の単位ステップ変化に対する制御量  $x$  および操作量  $u$  の応答をシミュレートしてみる。モデルにおける比例感度  $K_p$  と積分時間  $T_i$  を設定して制御の様子をみる。

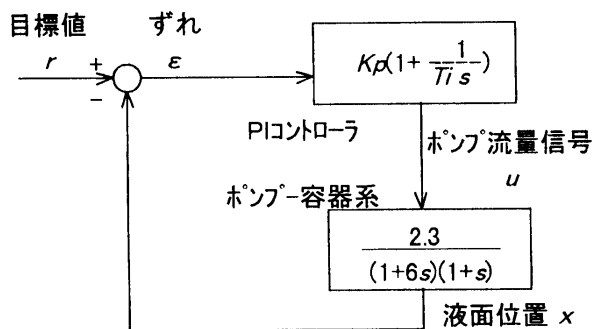


図9 制御系のモデル

モデルについて操作量  $u$  と制御量  $x$  の間の伝達関数を微分方程式で書くと次式(′ は時間  $t$  微分)。

$$6x'' + 7x' + 1 = 2.5u \quad (10)$$

調節計の動作も次の微分方程式で表せる。

$$T_i u' = K_p (T_i \epsilon' + \epsilon) \quad (11)$$

ここで  $z = u - K_p \epsilon$  とおくと、上式は、

$$z' = K_p \epsilon / T_i = K_p (r - x) / T_i \quad (12)$$

$t = 0$  における初期条件は  $x = x' = z = 0$ ,  $t = 0$  で  $r$  が 0 から 1 にステップ状に変化する。

EQG の記述と計算結果例を表 5, 図 10 に示す。EQG の自動グラフ表示機能により結果の図示も容易であり、パラメータを変えた試行が演習できる。さらに実験と対比することで理解が深まる。

表5 「制御シミュレーション」のソース

```
6*x''+7*x'+1=2.5*u
z=u-Kp*(r-x)
z'=Kp*(r-x)/Ti
Kp=1.8; Ti=1.5
x # 0
x' # 0
z # 0
r # 1
INTEGRAL t [0, 40] step 0.1
trend u, x
output1 t, u, x step 0.1
```

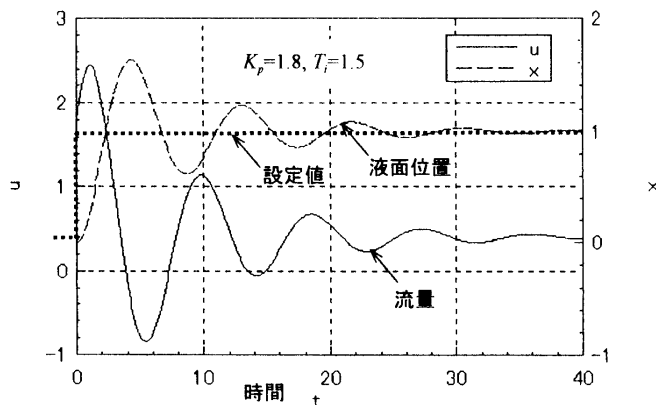


図10 制御モデルのグラフ表示

### インターネット上の資料との連携

エンジニア教育の重要事項として問題解決に自ら必要な資料・データを探すことの訓練がある。演習実施に際しては全てを問題文中に与えるのではなく、物性値などは便覧類から調査するように指定するのが望ましい。しかし、現実には全員に化学工学便覧を用意するわけにもいかない。そこで、学生実習用パソコンがネットワークに接続されていることを利用して、ネットワーク・インターネット上に化学工学便覧を置くことを試行してい

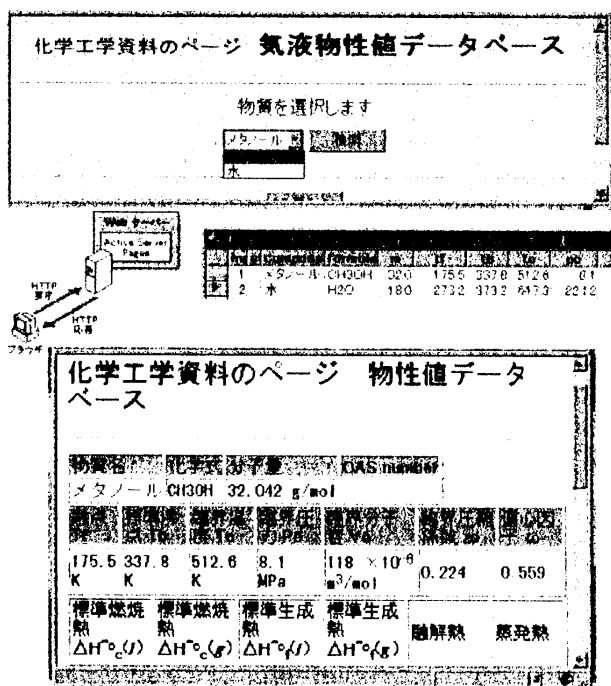


図11 インターネット上の便覧

る<sup>3)</sup>(図11)。この Web 上の便覧は全国どこからでも参照可能なので、どこの大学の演習にも利用できるし、化学工学教育の共通化にもつながる。

## むすび

ここで紹介できなかった抽出、膜分離、カスケー

ドなどの演習は Web<sup>3)</sup>を参照されたい。例題をみておわかりのように計算機上の演習こそ実験を同時におこなうなどして、数式と実際の現象との対応を把握させることが肝要である。

化学工学教育に危機意識を抱いている教官は過去、FORTRAN, BASIC, CAD, プロセスシミュレータなど最新の「道具」を教育に活用しようと試みてきている。しかしそれらも化学工学教育を根底から変革するには至らなかったようにみえる。ここで提言した方程式解法ソフト支援もまた結局はこれらの轍をふむことになるのかもしれないのだが、化学工学コースに優秀な学生をひきつけるために、現代的で魅力のある化学工学演習の開発に継続した努力をしてゆきたいものである。

## 参考文献

- 1) 化学工学協会編：“BASICによる化学工学プログラミング”，p.234, 培風館（1985）
- 2) 化学工学協会編：“化学工学プログラミング演習”，培風館（1976）
- 3) 伊東 章：“化学工学資料のページ”，[http://irws.eng.niigata-u.ac.jp/~chem/itou/resource/res\\_home.html](http://irws.eng.niigata-u.ac.jp/~chem/itou/resource/res_home.html)
- 4) 伊東 章：分離技術，Vol.17, p.409（1987）
- 5) <http://www.omegasim.co.jp/product/eqg/indexj.htm>
- 6) 久保田宏，関沢恒男：“反応工学概論”，p.149, 日刊工業新聞社（1972）