

ベンゼン (A) - トルエン (B) 系の圧力 $P=101.3\text{kPa}$ で
 液相組成 $x_A=0.4$ モル分率のときの平衡温度 T と気相組成 y を Newton 法で求めよ。
 初期値やしきい値は任意に与えよ。

ただし、活量係数は 1 (理想系を仮定) する。

Raoult の法則

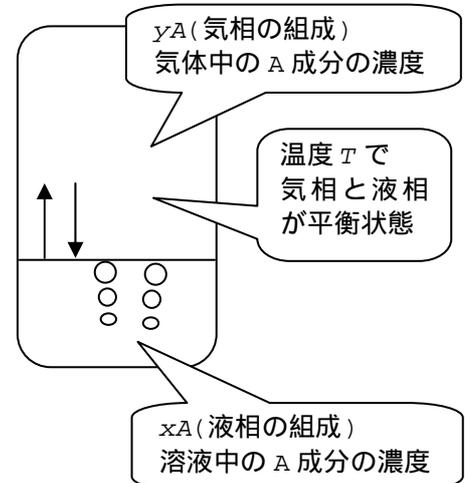
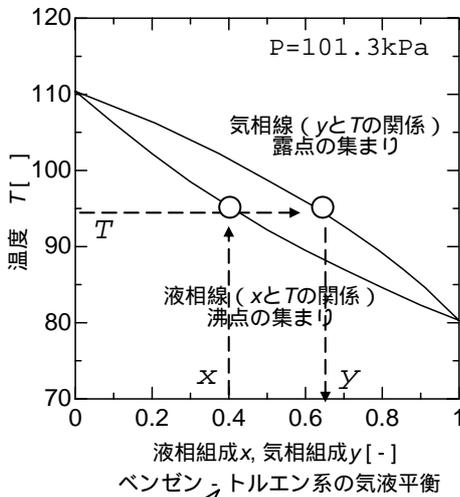
$$\ln P_A^0 = 15.33 - 3785/T$$

$$p_A = P_A^0 \cdot x_A$$

$$\ln P_B^0 = 15.68 - 4247/T$$

$$p_B = P_B^0 \cdot x_B = P_B^0 \cdot (1 - x_A)$$

二成分系なので、 x_A+x_B は常に 1.0



x_A (液体の組成) を入力して沸点を求める問題 = 沸点計算

平衡状態であれば、
 (全圧 P) = (A 成分の分圧 p_A) + (B 成分の分圧 p_B)
 p_A も p_B も組成が判っていれば温度 T のみの関数
 よって

$$\begin{aligned} f(T) &= P - p_A - p_B = P - P_A^0 \cdot x_A - P_B^0 \cdot x_B \\ &= P - P_A^0 \cdot x_A - P_B^0 \cdot (1 - x_A) \\ &= P - \exp(15.33 - 3785/T) \cdot x_A - \exp(15.68 - 4247/T) \cdot (1 - x_A) \end{aligned}$$

なる式を考えれば、 $f(T)$ は温度 T のみの関数となり、 $f(T)=0$ となる T が判れば、それが平衡温度。

```
/*   +++   +++   +++   +++   +++   +++   +++   +++
```

```
NEWTON法   演習の解答例  
ベンゼン(A) - トルエン(B)系の  
気液平衡計算プログラム
```

/*から*/
はコメント文
プログラムとは無関係

```
+++   +++   +++   +++   +++   +++   +++   */
```

```
#include <stdio.h>  
#include <math.h>
```

おまじない

変数宣言
double は小数

文の最後には
";"を付ける

```
int main(void){
```

```
    double t, newt, f, df, ya;  
    printf("Please Input Initial Value T0 =");  
    scanf("%lf", &t);
```

画面出力文

キーボード入力文

```
    LABEL:
```

```
        f=101.3-exp(15.33-3785.0/t)*0.4-exp(15.68-4247.0/t)*0.6;  
        df=-0.4*exp(15.33-3785.0/t)*(3758.0/(t*t))  
            -0.6*exp(15.68-4247.0/t)*(4247.0/(t*t));
```

"="は右の計算「値」
を右の変数に代入
する意味

```
            printf(" t=%f f(t)= %f ¥n", t,f);
```

```
    newt=t-(f/df);
```

べき乗は pow 関数

```
    if (pow(f,2.0) > 0.00001)  
    {  
        t=newt;  
        goto LABEL;  
    }
```

```
    ya=(exp(15.33-3785.0/t)*0.4)/101.3;  
    printf("*** Final Answer **¥n");  
    printf(" t=%f [ ]¥n",t-273.15);  
    printf(" f(t)=%f¥n",f);  
    printf(" yA=%f¥n",ya);
```

"¥n"は改行を出力

```
    return(0);
```

```
}
```

-----実行開始-----

```
Please Input Initial Value T0 =400  
t=400.000000 f(t)= -134.836777  
t=376.895557 f(t)= -27.275757  
t=369.258985 f(t)= -2.157152  
t=368.537972 f(t)= -0.009265  
t=368.534821 f(t)= 0.000039  
** Final Answer **  
t=95.384821 [ ]  
f(t)=0.000039  
yA=0.622024
```

-----おしまい-----

これで講義は全て終了です。思考のデジタル化（不連続性のない論理展開）を心がけましょう。