

■課題の考え方

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。

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

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

Raoult の法則

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

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

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のみの関数
 よって
 $f(T) = P - p_A - p_B$
 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。
 これは NEWTON 法による解法がそのまま利用できる。
 すなわち、平衡温度の初期値を入力し、 $f(T)=0$ となる
 T を求める。

気相組成は

$$y_A = p_A/P$$

■解答例

```
C23456*****
C
C   NEWTON 法の応用
C
C*****
```

```
REAL T, NEWT, F, DF, YA

WRITE(*,*) 'Input Initial Value T0 = '
READ(*,*) T
```

```
10 CONTINUE
```

C $F = (\text{全圧}) - (\text{A の分圧}) - (\text{B の分圧})$ で
 C F が 0 になる温度 T を求める -> Newton 法が使える。

$$F=101.3-\exp(15.33-3785.0/T)*0.4-\exp(15.68-4247.0/T)*0.6$$

- c 6カラム目に&等の記号が付くと行が続いている
 c ことをあらわす。

$$DF=-0.4*\exp(15.33-3785.0/T)*(3785.0/T**2.0)$$

$$\& \quad -0.6*\exp(15.68-4247.0/T)*(4247.0/T**2.0)$$

$$NEWT=T-(F/DF)$$

```

IF (F**2.0 .GT. 0.0001) then
  WRITE (*,*) 't=',T, ' ', 'f(t)=',F
  T=NEWT
  GOTO 10
ELSE
  YA=(exp(15.33-3785.0/T)*0.4)/101.3
  WRITE (*,*) 'f(t)=0'
  WRITE (*,*) T
  WRITE (*,*) 'yA= ',YA
END IF

STOP
END

```

試験前の演習問題

1. データ x, y, z に数値を読み込み、大きい順番にその数値を出力するプログラム。
 “どうやって順番をつけますか？”
2. 自然数 n に値を読み込み、 n の階乗 ($n!$) を計算し出力するプログラム。
 変数宣言 real (実数)
 integer (整数)

昨年の期末試験問題

<http://www.tuat.ac.jp/~indcryst/takihome/sub02.htm>