

1 実験データの整理方法について次の問に答えよ。

- (1)  $n$  個のデータ  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$  が与えられているとき、隣接する2点  $x_{i-1}$  と  $x_i$  との間にある  $x$  に対する  $y$  の値を直線の式で求める方法を補間法と呼ぶが、 $x$  に対し求めたい  $y$  の値の計算式を示せ。
- (2) ここに、粒径の揃っていない粒子群がある(粒子の形は立方体)。このとき、群としての代表的な粒子の大きさ(代表径)を決定し、評価したい。粒径  $L_i$  (立方体の一片の長さ)の粒子が  $n_i$  個存在しているとし、その代表径を求める式を定義せよ。ただし、その考え方も示せ。
- (3) (2)の問題で、形も不規則であった場合、どのような方法が考えられるかを示せ。

2 圧力  $P$  一定で、ある成分の液相組成  $x_i$  を与えたときの沸点温度  $T$  を計算によって求めたい。

ただし、2成分系である( $i$ は1 or 2)。次の問に答えよ。

- (1) 方程式系の自由度とは何かを説明せよ。
- (2) この問題を解くための全ての「方程式」を定義せよ。
- (3) 「構造行列」を定義せよ。
- (4) この方程式系の解き出し方を示せ。

活量係数式は Margules 式

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 [A + 2 \cdot (B - A) \cdot x_1]$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 [B + 2 \cdot (A - B) \cdot x_2]$$

飽和蒸気圧は Antoine 式  $\ln p_i^o = a_i - b_i \cdot (T + c_i)$  を使用すること。 $A, B, a_i, b_i, c_i$  は定数

3 連続攪拌槽型反応装置で液相反応  $A \rightarrow R$  が起きている。反応器に入る原料は流量が  $F_{in}$  [ $m^3/s$ ]、密度が  $\rho$  [ $kg/m^3$ ]、 $A$  成分の濃度が  $C_{Ain}$  [ $mol/m^3$ ] である。反応槽の体積は  $V$  [ $m^3$ ] で  $A$  の消費速度(反応速度)は  $k \cdot C_A$  で示される( $C_A$  は反応槽内  $A$  濃度)。この現象をモデル化するとき、次の問に答えよ。

- (1) 反応槽が完全混合であるとき、装置を図示し、全ての変数を規定せよ(足りない変数がある場合には定義して補う)。
- (2)  $A$  の濃度の経時変化を示す微分方程式を示せ。ただし、その式を導く過程も記述せよ。

4 代数方程式の解法として  $f(x) = 0$  を  $x = g(x)$  と変形できるとき、Wegstein 法が使用できる。この手法を説明せよ。

5 常微分方程式の数値解法について次の問に答えよ。

- (1) 初期条件が  $x = x_0$ 、 $y = y_0$  であるとき、 $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$  を数値的に求める手法を1つ挙げて説明せよ。
- (2) 次の微分方程式を修正オイラー法によって解き、厳密解と比較せよ。

$$\frac{dy}{dx} = 1 - 2 \cdot y \quad \text{ただし、} 0 \leq x \leq 0.5 \text{ の範囲内で } x = 0 \text{ のとき } y = 0 \text{ とする。}$$

また、きざみ幅は 0.1 とせよ。