■■▪▪ **化学プロセス数学（実践編その２）２００６年度版** ▪▪■■

K科　H.Takiyama

微分方程式の数値解法を理解し（Euler 法等を思い出し）、プログラミングする。同時に数値解法の「落とし穴」（誤差や桁落ち）について理解する。

でも、まずは Newton 法応用の解答例から。

ベンゼン(A)ートルエン(B)系の圧力 P=101.3kPa で
液相組成 xA=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。

液相組成 xA と分圧 *p*A との関係（Raoult の法則）

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

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

二成分系なので、x_A+x_B は常に 1.0

P^0_A は成分 A の飽和蒸気圧（温度に依存した物性値）

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

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

T は絶対温度

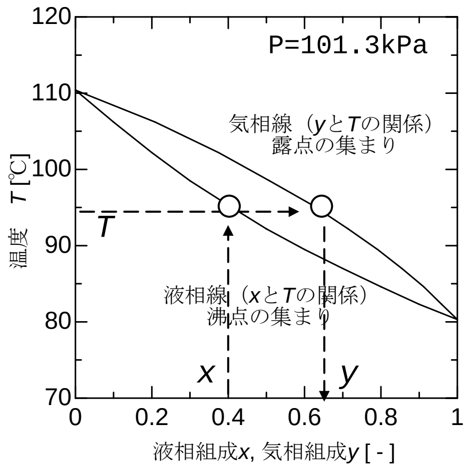

Fig.1 ベンゼンートルエン系の気液平衡

■プログラム例

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

     NEWTON法    演習の解答例
      ベンゼン(A)ートルエン(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

```
int main(void){
        double t, newt, f, df, ya;
```

変数宣言
double は小数

文の最後には
“;”を付ける

```
        printf("Please Input Initial Value T0 =");
```

画面出力文

```
        scanf("%lf", &t);
```

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);

        if (pow(f,2.0) > 0.00001)
```

べき乗は pow 関数

```
        {
                t=newt;
                goto LABEL;
        }
                ya=(exp(15.33-3785.0/t)*0.4)/101.3;
                printf("** Final Answer **¥n");
```

“¥n”は改行を出力

```
            printf("  t=%f [℃]¥n",t-273.15);
            printf("  f(t)=%f¥n",f);
            printf("  yA=%f¥n",ya);

            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-----------------------
```

■本日は Euler 法の理解

初期条件が x=x0、y=y0 であるとき dy/dx=f(x,y)を数値的に解く。

x の刻み幅を h とすると、

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} = f(x_i, y_i)$$

したがって一般化すると、 $y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$

```
/***************************************************
Euler Method (No1)
   dy/dx = 1-3y
   x0=0.0, y0=0.0

  刻み幅 Hをさまざま変化させ、厳密解と比較せよ。
   ただしxの範囲は0.0～3.0
***************************************************/
#include <stdio.h>
#include <math.h>

int main(void){

    double h;
    double x, y, ans;
    double x0, y0;
    int i;

    i=0;
    x0=0.0;
    y0=0.0;

    printf("Please Input H=");
    scanf("%lf", &h);

    printf(" I,       X,       Y,        ANS¥n");

    x=x0;
    y=y0;
```

文の最後には必ず
“;”を付ける

double は実数
int は整数で宣言　を示す。

プログラムの"=" は
右辺の"値"を左辺の"変数"に代入することを示す。
数学のイコールとは違う。

i は INTERGER で宣言したから 0
x0 は REAL で宣言したから 0.0

```
    LABEL:
```
「LABEL」という「場所」を定める。:コロンだ!

```
    ans=(1.0-exp(-3.0*x))/3.0;
    printf(" %d,    %f,    %f,     %f ¥n", i, x, y, ans);

    i=i+1;
    x=x+h;
    y=y+h*(1.0-3.0*y);
```
オイラー法の神髄はココだけ

```
    if (x <= 3.0)
    {
        goto LABEL;
    }
```
「LABEL」という「場所」に飛ぶ。

```
    return(0);
}
```

```
-------------------------実行開始----------------------
Please Input H=0.1
 I,        X,        Y,         ANS
 0,    0.000000,    0.000000,     0.000000
 1,    0.100000,    0.100000,     0.086394
 2,    0.200000,    0.170000,     0.150396
      . . . . . . .
 28,    2.800000,    0.333318,     0.333258
 29,    2.900000,    0.333323,     0.333278
-------------------------おしまい----------------------
```

■課題１

中間試験問題の $\boxed{４}$ を実際にオイラー法で解け。$\frac{dy}{dx}=\frac{1}{(x^2+x)}$ x0=1.0 のとき y0=0.0

$$y=\ln\left(\frac{x}{x+1}\right)+\ln 2$$

■課題２

12.5 m^3 の水槽があり、これに 0.050 m^3/s の流量で水が注入されている。しかし、水槽に 1.2 m^3 の水がたまった時点で、水槽の底から水が漏れだした(この時間を ***t*** =0 とする)。水の漏れは時間の関数となっており、0.0025 ×***t*** m^3/s であった。微分方程式を数値的に解き、水量の経時変化の概略をグラフで示せ。

蓄積速度（蓄積量/時間）

＝流入速度－流出速度

$$\frac{dV}{dt}=0.005-0.0025\cdot t$$

Euler 法で考える

$$f(t)=\frac{dV}{dt}$$

$$f(t_{i+1})=f(t_i)+h\cdot(0.005-0.0025\cdot t_i)$$

これで、気液平衡計算と微分方程式の数値解析は免許皆伝