

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。

メタノール(A) - 水(B)系の圧力  $P=101.3\text{kPa}$  で液相線を描きたい。次の問に答えよ。

ただし、ただし、活量係数  $\gamma_A$ 、 $\gamma_B$  と飽和蒸気圧はそれぞれ次式で与えられ、

$$\ln \gamma_A = (0.8517 - 0.7738 \cdot x_A) \cdot (1 - x_A)^2 \qquad \ln P_A^0 = 17.5977 - 4383.0/T$$

$$\ln \gamma_B = (0.4648 + 0.7738 \cdot (1 - x_A)) \cdot x_A^2 \qquad \ln P_B^0 = 18.1621 - 5054.0/T$$

メタノールの沸点は 337.7K、水の沸点は 373.2K とする。

( 1 ) 液相組成  $x_A=0.1$  モル分率のときの平衡温度を求めよ。

( 2 ) 液相組成を適宜変え、液相線の概略を示せ。  $x_A=0.1, 0.2, \dots, 0.9$

概略は Excel 等のグラフ機能を使用可

### プログラム例

```

C23456*****
C
C   NEWTON法の応用
C   気液平衡計算 ( メタノール - 水系 )
C
C
C*****
C 変数宣言
  REAL T, NEWT, F, DF
  REAL XA, YA, RA, RB
  XA=0.1
  WRITE(*,*) ' XA,           YA,           T'
  WRITE(*,*) ' 0.0           0.0           373.2'
C 液相組成を0.1から0.9に
20  CONTINUE
   T=300.0
   RA=EXP((0.8517-0.7738*XA)*(1.0-XA)**2.0)
   RB=EXP((0.4648+0.7738*(1.0-XA))*XA**2.0)
C ニュートン法
10  CONTINUE
C   F=(全圧)-(Aの分圧)-(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。
C ニュートン法の評価関数
   F=101.3-RA*exp(17.5977-4383.0/T)*XA
   &   -RB*exp(18.1621-5054.0/T)*(1.0-XA)
C ニュートン法の評価関数の微分値
   DF=-RA*   XA *exp(17.5977-4383.0/T)*(4383.0/T**2.0)
   &   -RB*(1.0-XA)*exp(18.1621-5054.0/T)*(5054.0/T**2.0)
   NEWT=T-(F/DF)
   IF (F**2.0 .GT. 0.0001) then
     T=NEWT
     GOTO 10
   ELSE
     YA=(RA*XA*exp(17.5977-4383.0/T))/101.3
     WRITE (*,*) XA,YA,T
   END IF
C 液相組成を変更
  XA=XA+0.1
  IF(XA.LT. 1.0) GOTO 20
  WRITE(*,*) ' 1.0           0.0           337.7'

```

STOP  
END

本日は Euler 法の理解

初期条件が  $x=x_0$ 、 $y=y_0$  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、 $y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$

C23456\*\*\*\*\*

```
C
C オイラー法で解く常微分方程式 (その1)
C
C dy/dx = 1-3y
C x0=0.0, y0=0.0
C
C 刻み幅 H をさまざま変化させ、厳密解と比較せよ。
C ただし x の範囲は 0.0 ~ 3.0
C
```

C23456\*\*\*\*\*

```
C 変数宣言
  REAL H
  REAL X, Y, ANS
  REAL X0, Y0
  INTEGER I

C 変数初期化
  I=0
  X0=0.0
  Y0=0.0

  WRITE(*,*) 'INPUT H='
  READ(*,*) H

  WRITE(*,*) ' I,      X,      Y,      ANS'
```

```
C オイラー法
  X=X0
  Y=Y0

10  ANS=(1.0-EXP(-3.0*X))/3.0
    WRITE(*,*) I, X, Y, ANS

    I=I+1
    X=X+H
    Y=Y+H*(1.0-3.0*Y)

    IF(X. LE. 3.0) GOTO 10

  STOP
  END
```

#### 課題

12.5 m<sup>3</sup> の水槽があり、これに 0.050 m<sup>3</sup>/s の流量で水が注入されている。しかし、水槽に 1.2 m<sup>3</sup> 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、 $0.0025 \times t$  m<sup>3</sup>/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。

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