

浅野 康一 著

パソコンで解く 化学工学

フロッピーディスク付

丸善株式会社

7002
6

パソコンで解く

化学工学

江苏工业学院图书馆
藏书章

浅野 康一 著

丸善株式会社

著者の略歴

1960年 東京工業大学化学工学課程卒業
現職 東京工業大学教授 (工学部化学工学科)
工学博士

パソコンで解く 化学工学

平成 3 年 1 月 10 日 発行

© 1991

著 者 者 あさ の こう いち
浅 野 康 一

発 行 者 海 老 原 熊 雄

発 行 所 丸 善 株 式 会 社

郵便番号 103 東京都中央区日本橋二丁目 3 番10号

印刷 株式会社 精興社・製本 株式会社松岳社

ISBN 4-621-03547-9 C 3058

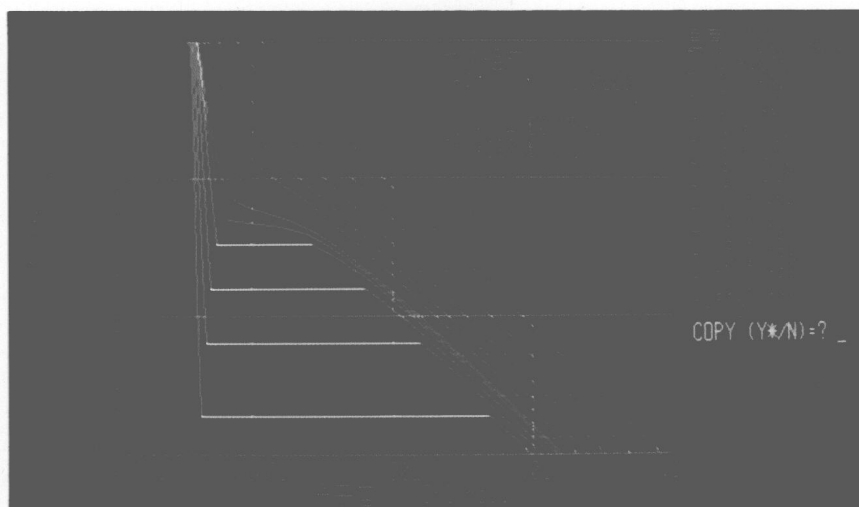
フロッピーディスクに関するご注意

- 付属フロッピーディスクのご利用に際しては 必ず3～5ページの取扱い方を参照して下さい。オリジナルプログラムは必ずバックアップをとり、コピーしたものをご使用下さい。
- 製造上の原因によるトラブルによって使用不能の場合は、トラブルの具体的な状態を明記の上、購入日より1か月以内に小社宛ご返送下さい。新しい製品と交換いたします。
- 上記以外の交換には一切応じかねますので予めご了承下さい。
- 操作方法、プログラムの内容等に関するお問合せは文書にて下記宛ご送付下さい。電話によるお問合せには応じかねますので予めご了承下さい。

〒103 東京都中央区日本橋 3-9-2

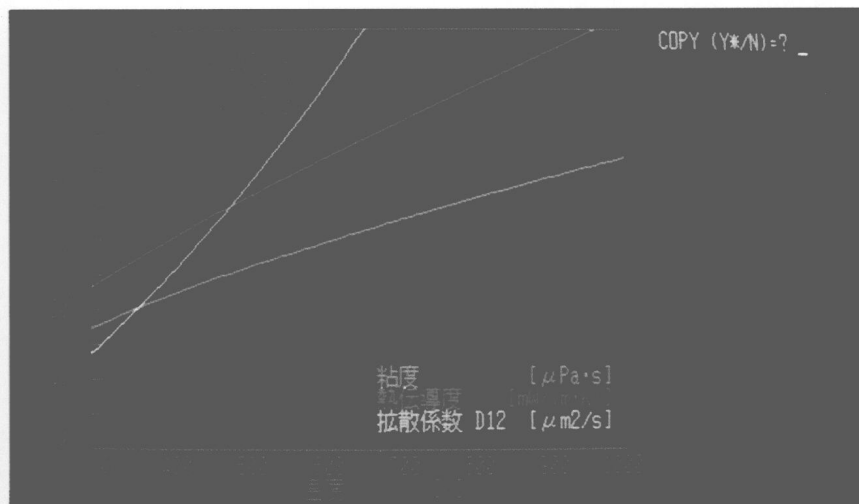
丸善株式会社出版事業部営業部

- 無断複製を禁ずる。



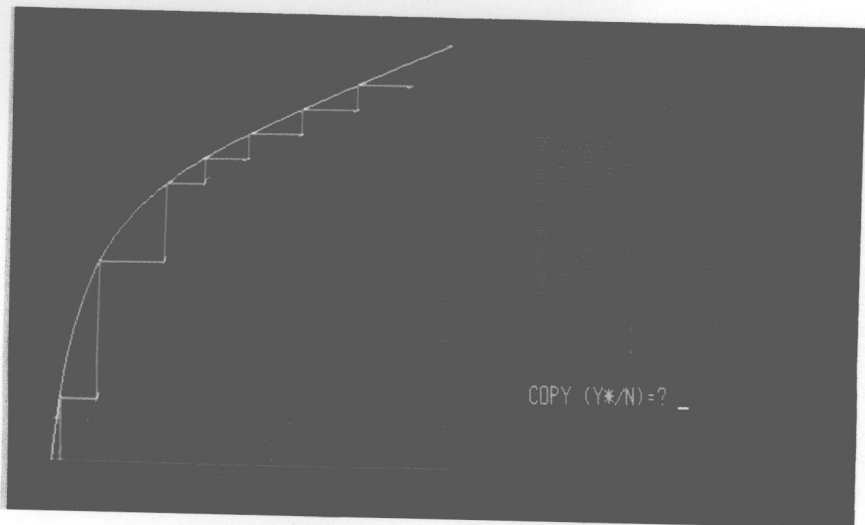
① 高压混合気体の PVT (プログラム名: PVT. BAS)

メタンについての計算例。赤線は気相、青線は液相、黄線は両相共存状態を表す。赤線にみられる直線からのずれは非理想性を表す。



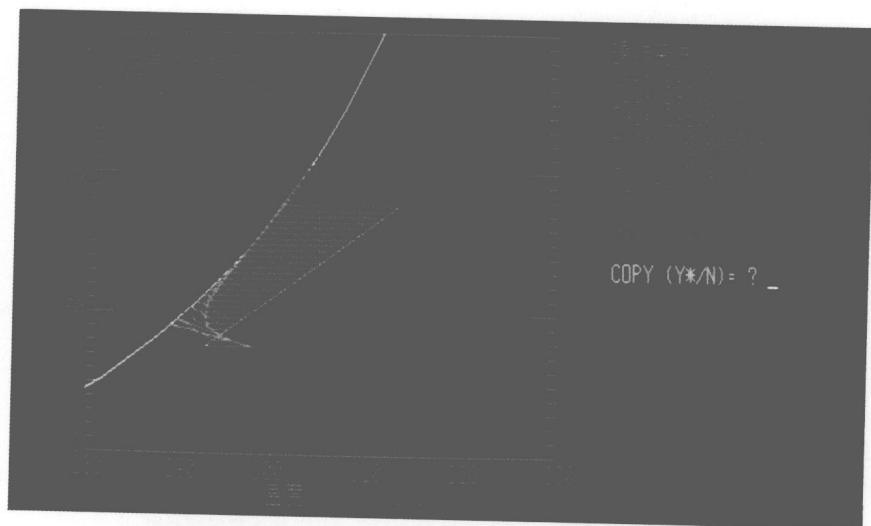
② 常圧混合気体の輸送物性 (プログラム名: GASPPPTY. BAS)

空気 95%, CO₂ 5% の混合気体についての計算例。青線は粘度 [$\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$], 赤線は熱伝導度 [$\text{mW}/(\text{m}\cdot\text{K})$], 黄線は第 1 成分と第 2 成分間の 2 成分拡散係数 (純物質のときは表示されない) を表す。



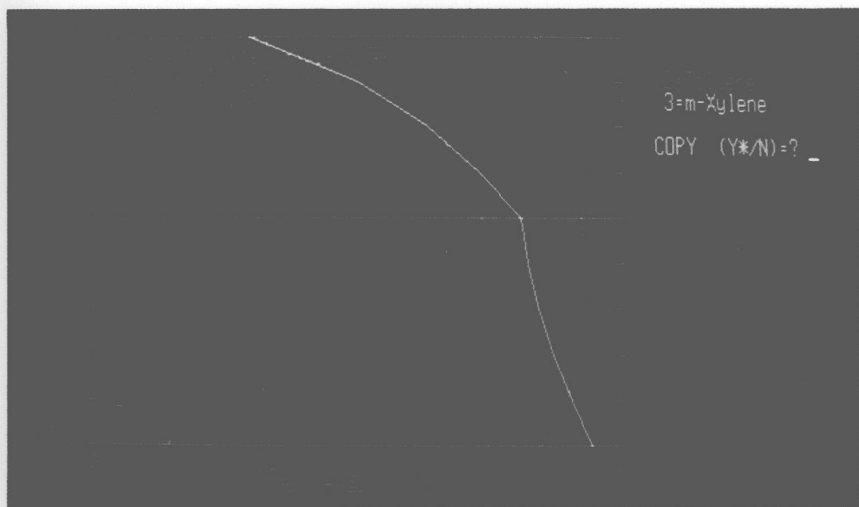
③ 2成分系の理論段数の計算 (プログラム名: MCABE. BAS)

メタノール/水系についての計算例。黄線は平衡線、赤線は操作線、青線は各段における組成変化を表す。

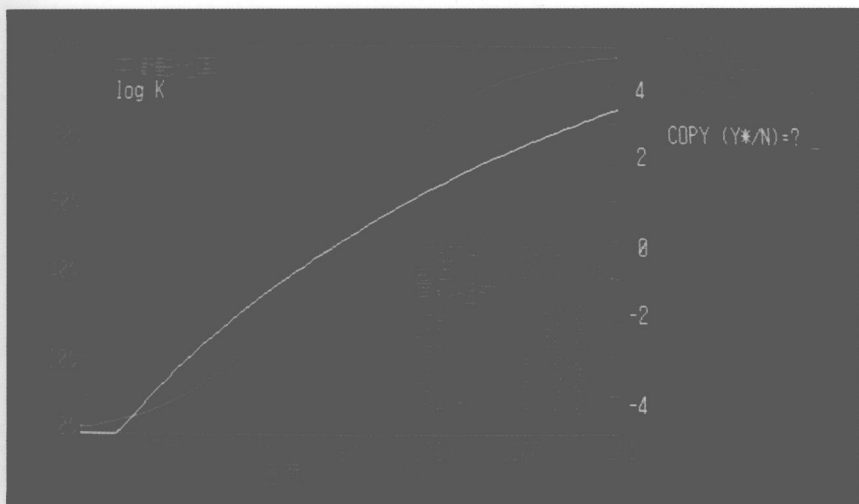


④ 冷水塔内における空気の状態変化 (プログラム名: MICKLEY. BAS)

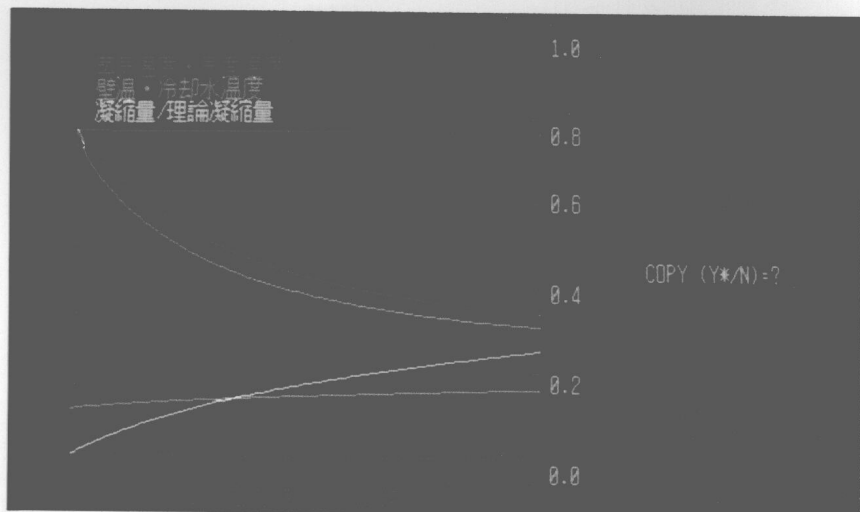
表記の操作条件に対する計算例。黄線は飽和エンタルピー曲線、赤線は操作線、水色の線は塔内における空気のエントルピーを表す。なお、青線は Mickley 法による計算過程を示す。



⑤段塔による多成分系の蒸留 (プログラム名: MCDISTL. BAS)
ベンゼン/トルエン/*m*-キシレン系についての計算例。縦軸は段数、横軸は各成分の液のモル分率を示す。各成分の濃度分布は沸点の低いものの順にカラーコードで指定される色で表示される。

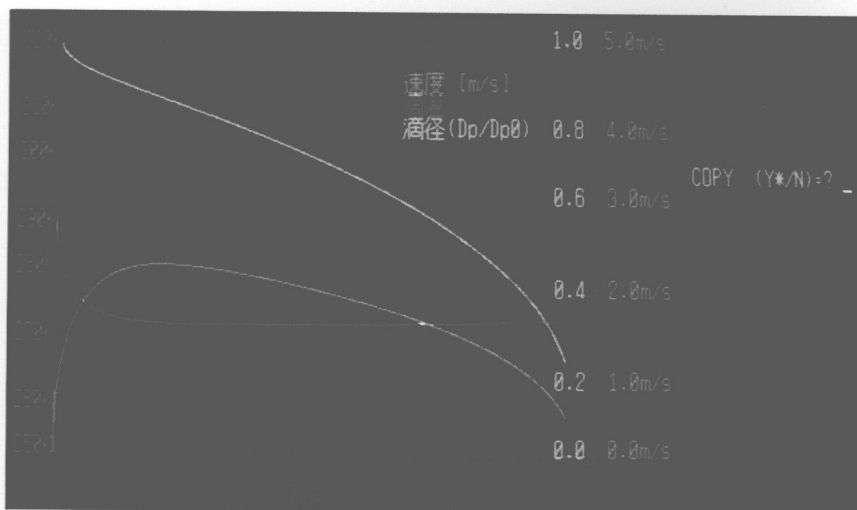


⑥気相反応の平衡転化率 (プログラム名: CHEMEQ. BAS)
メタンの水蒸気改質についての計算例。黄線は平衡定数($\log K$)、赤線は第1成分(メタン)の平衡転化率を表す。反応式を入力するとデータベース「THDATA. DOC」(69物質のデータ収録)より必要な熱化学物性データを自動的に検索する。



⑦垂直平板上における非凝縮性ガスを含む凝縮過程のシミュレーション (プログラム名: GASCOND. BAS)

水蒸気 95 wt %, 空気 5 wt % の混合蒸気についての計算例。赤線は蒸気温度および気液界面温度, 青線は伝熱面温度および冷却水温度の長手方向の変化を表す。黄線は Nusselt の理論凝縮量で規格した凝縮液流量を表す。



⑧揮発性液滴の蒸発過程のシミュレーション (プログラム名: DROP. BAS)

空気によるペンタン滴の自由落下蒸発のシミュレーション。赤線は滴温, 青線は滴速度, 黄線は滴径(初期液径で規格化)の落下距離による変化を表す。ペンタン/空気系など 4 個の系の物性データ収録。

まえがき

最近のパーソナルコンピュータの普及とその性能の向上には著しいものがあり、昨今では研究室や現場でのデータ処理にパソコンは欠かせないものになっている。これと対応してパソコンを積極的に利用しようとする技術者や研究者の数も飛躍的に増加して、多くの成書がこの方面で出版されている。しかしながら、これらの多くはプログラミング言語そのものの解説や数値計算法を主体にするもので、研究室や現場で実際に遭遇する問題の解決に役立つものはきわめて数少ないようである。

ところで、化学工学で対象とする問題はきわめて多種多様の物質とその状態変化を取り扱っているので、データ処理に際してさまざまな種類の物性値が必要であり、また、その検索に多大な労力が割かれている。このため、他の分野におけるパソコンの利用法と異なり、単に物理法則を計算機の言葉に翻訳するだけでは十分とはいえず、プログラムの開発と並行して計算機で利用できる形式の物性値のデータベースの構築が不可欠である。この意味で最近化学工学会が編集したプログラム集 "PRODECE" は、実用性においてきわめて優れたものといえるが、システムが全体としてやや大き過ぎるのと、価格が高価なため、利用者が手軽に利用できるという状況ではない。

本書は、現場や研究室の実務にパソコンを積極的に利用しようと考えている現場の若手技術者、大学あるいは研究所の若手研究者・大学院生を対象にして、化学工学とプログラミングの接点について平易に解説したものである。予備知識としては、学部専門課程の初期段階で習得する化学工学の基礎的知識と BASIC 言語に関する初歩的な文法知識を想定している。1章は総論、2章はグラフィックスの基本とディスクの入出力などパソコンのプログラミングの基本的テクニックについての解説である。3章以降は、実際に使用するプログラム集とその解説になっている。各章は内容別に物性・平衡(3章)、単位操作(4章)、反応工学(5章)、移動現象論(6章)に分類されているが、いずれも独立した内容の3~5個のプログラムから構成されており、各プログ

ラムごとにその基本原理、プログラム概要ならびに使用法を簡潔に解説してある。なお、執筆に際してはとくに下記の諸点に留意した。

1. 計算に必要な物性値等は、あらかじめデータベースとしてディスクに登録し必要に応じて自動的に検索できるようにした。
2. 現象の視覚的な理解が容易になるように計算の最終結果はできる限りグラフィック形式で表現するように工夫した。
3. 読者が本書をミニハンドブックとして使用することを想定して、プログラムの操作性について十分に配慮した。
4. プログラム拡張や応用を目的とする読者のために各プログラムごとにその概要、使用したテクニックについての解説を設けた。

また、プログラムは、普及性と他機種への移植の便宜を考慮して PC-9801 シリーズの MS-DOS による BASIC で記述してある。

最後に、本書を執筆する機会をご教示いただきました東京工業大学工学部化学工学科の小出耕造教授に厚く御礼申し上げます。また、原稿の校正ならびにプログラムのデバッグと移植にご協力いただきました東京工業大学工学部化学工学科小菅人慈助教教授ならびに谷口泉博士に深く感謝いたします。また、出版に際しましていろいろとご配慮をいただきました丸善株式会社出版事業部の恩田英紀氏に感謝いたします。

1990 年 12 月

浅 野 康 一

目 次

1章 序 論

1-1 パソコンの特徴とプログラミング	1
1-2 本書のプログラムの使い方	3

2章 プログラミングの基本テクニック

2-1 分かり易いプログラムの作り方	7
2-2 Newton 法	9
2-3 文字変数の使い方と化学式の処理	12
2-4 グラフの拡大と縮小	16
2-5 3次元グラフの基礎	19
2-6 ディスクに対するデータの書き込みと読み取り	21

3章 物性および平衡計算

3-1 高圧混合気体の PVT	25
原理 25/ プログラム概要 28/ 使用法 31/ プログラムリスト 33	
3-2 常圧混合気体の輸送物性の推算	42
原理 42/ プログラム概要 44/ 使用法 47/ プログラムリスト 49	
3-3 2成分系の気液平衡	56
原理 56/ プログラム概要 60/ 使用法 62/ プログラムリスト 64	
3-4 多成分系の気液平衡	72
原理 72/ プログラム概要 73/ 使用法 75/ プログラムリスト 77	

4章 単位操作計算

4-1	2成分系連続精留塔の理論段数(McCabe-Thiele 法)	85
	原理 85/ プログラム概要 89/ 使用法 91/ プログラムリスト 92	
4-2	液・液抽出	97
	原理 97/ プログラム概要 101/ 使用法 103/ プログラムリスト 106	
4-3	冷水塔内の空気の状態変化(Mickley 法)	114
	原理 114/ プログラム概要 118/ 使用法 120/ プログラムリスト 122	
4-4	段塔による多成分蒸留(マトリックス法).....	127
	原理 127/ プログラム概要 131/ 使用法 134/ プログラムリスト 136	

5章 反応工学計算

5-1	熱化学物性データベース	145
	原理 145/ プログラム概要 146/ 使用法 149/ プログラムリスト 151	
5-2	反応熱の温度依存性	154
	原理 154/ プログラム概要 156/ 使用法 158/ プログラムリスト 160	
5-3	反応器の物質収支と熱収支	167
	原理 167/ プログラム概要 170/ 使用法 172/ プログラムリスト 174	
5-4	理論燃焼温度	182
	原理 182/ プログラム概要 183/ 使用法 185/ プログラムリスト 187	
5-5	気相反応の平衡転化率	192
	原理 192/ プログラム概要 195/ 使用法 197/ プログラムリスト 199	

6章 移動現象論

6-1	平板層流境界層の速度・温度・濃度分布	207
	原理 207/ プログラム概要 212/ 使用法 214/ プログラムリスト 216	
6-2	非凝縮性ガスを含む蒸気の凝縮過程のシミュレーション	220
	原理 220/ プログラム概要 223/ 使用法 225/ プログラムリスト 228	
6-3	揮発性液滴の運動と蒸発過程のシミュレーション	236
	原理 236/ プログラム概要 238/ 使用法 241/ プログラムリスト 243	

参考文献	251
付 録 熱化学物性データ	253
索 引	255

1 序 論

1-1 パソコンの特徴とプログラミング

パーソナルコンピュータは、ここ 10 年間で最もめざましく普及した OA 機器の一つで、最近ではその略称であるパソコンという言葉まで日本語として市民権を獲得するほどの普及ぶりである。これに付随して最近のパソコンの性能の向上には著しいものがあり、現在の汎用パソコンの主流になっている 16 ビットパソコンの性能は、その処理速度や記憶容量の点からいえば一昔前の大型コンピュータにも匹敵するほどの性能を備えるようになっている。しかしながら、この点に関する一般の認識はきわめて不十分で、その利用の実態は旧態然としたものがある。

パソコンの特徴として誰しもすぐ思い浮かべるのは、

- 1) 低価格性
- 2) 小型・軽量で設置に特殊の設備を必要としない
- 3) 操作性に優れている

などの特徴であるが、実際の利用面で意外と見落されがちなのは、パソコンが総合情報処理装置としての機能を発揮するうえで不可欠な機能である：

- 4) 文字処理ができる
- 5) グラフィックス処理が容易にできる
- 6) ハードコピーの容易さ

などの特徴である。

たとえば、一例としてパソコンによる実験データの整理について考えてみよう。事務計算の場合と異なり、一般に科学技術計算では、生データのみを入力してただちに目的とするデータ処理ができるのはきわめて稀なケースであって、多くの場合データ

処理に先立ちハンドブック等で必要な物性値などを事前に検索し、別途入力することが必要である。また、パソコンの計算結果がそのまま最終結果になることも例外的であって、これらの計算結果をもう一度整理して図表化したものを最終結果とするのが普通である。すなわち、パソコンによる情報処理は、一般に次のような作業手順：

- 1) 処理すべき1次データの入力
- 2) 物性値など2次データの検索と入力
- 3) データ処理
- 4) CRT やプリンターに対する計算結果の出力
- 5) 計算結果から目的とするグラフの作成などの2次処理

からなっている。

ところで、これまでのパソコンによるデータ処理は、パソコンを電卓の延長としてのイメージでしかとらえていないため、そのほとんどは「ステップ3」に重点がおかれ、「ステップ2」から「ステップ5」までを含めて総合的観点からデータ処理を行っているものはきわめて少数である。しかしながら、これではパソコンによるデータ処理の前後に処理速度も遅く不確実な手作業が含まれるため、せっかくのパソコンの優れた性能の半分も活用できない。また、全体としての省力化につながらない。

最近のパソコンは、本体メモリおよび補助記憶装置のいずれにおいても最低でも1Mバイト程度の大容量になっており、1Mバイトのフロッピーディスク1枚に数百ページのテキスト1冊が収容できることなどを考え併せると容易に理解できるように、これまでハンドブック等で検索していた物性値などをメモリに取り込み内部検索に切り替える余裕は十分にある。したがって、データ処理を効果的に行うためにはこれら物性値などの自動検索も含めてパソコンで処理することが望ましい形態といえる。また、パソコンの優れたグラフィック機能を利用して計算結果を手作業に比べて各段に速い速度でCRTディスプレイに視覚的に表現することも可能である。さらに、ハードコピー機能を使ってこれらの図表をプリンターに直接印刷することも容易である。したがって、プログラミングのやり方次第で入力した生データから、いきなり最終目的とする図表を作成することもそれほど難しい問題ではない。むしろ、そのほうが総合情報処理装置としてのパソコンの使い方としてより望ましい姿といえる。すなわち、パソコンは入力データから最終図表の印刷までを一貫して総合的に処理する新しいタイプの汎用事務機器という性格を有しており、パソコンのプログラミングはこのような観点から行われるのが望ましい。なお、図1-1はこのようなパソコンによるデータ処理の手順を模式的に示したものである。

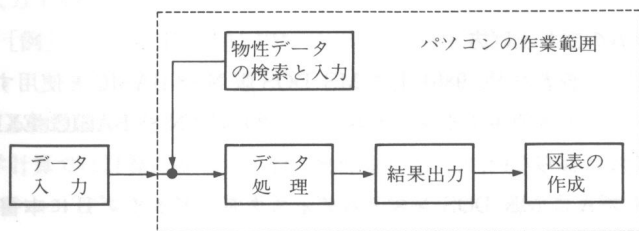


図 1-1 パソコンによるデータ処理のフローとその作業範囲

ところで、パソコンのプログラム言語としては一般に BASIC が利用されており、単にプログラミングといえば暗黙のうちに BASIC によるプログラミングを意味するほどの普及ぶりである。BASIC は、インタプリタ型言語でコンピュータを直接動かす機械語に翻訳する過程が逐次的に行われるため、FORTRAN などのコンパイラ型言語に比べ処理速度は遅いという欠点があるが、プログラムを実際に走らせながらデバッグ作業ができるという長所を有しているので、少数ではあるが多種多様のデータを処理しなければならないパソコンのプログラム言語としては捨て難いものがある。このような理由から、本書のプログラムはすべて BASIC で記述した。

1-2 本書のプログラムの使い方

本書は、NEC の PC 9801 シリーズのパソコンの使用を前提とし、ハードウェアとしては、2 ドライブの本体*、カラー CRT ディスプレイおよびプリンターを標準装備に想定している。また、プログラムは MS-DOS をオペレーティングシステム(OS)とする BASIC 言語(N88BASIC)で記述してあるので、基本的には MS-DOS を OS に採用している他社のパソコンと BASIC レベルで移植可能である**。

* 5 章の反応工学計算では、プログラムを立ち上げたのち計算に使用する熱化学物性データをディスクから自動的に読み込む形式になっているので、1 ドライブの機種を使用する場合、プログラム中にある「OPEN 文」は、以下（アンダーライン部分のみ）：

OPEN "A: THDATA.DOC" FOR OUTPUT AS #1 (SUBROUTINE DATA LOAD)

OPEN "A: THDATA.DOC" FOR INPUT AS #1 (SUBROUTINE DATA SAVE)

のように修正する。また、ステップ 5 でプログラムを立ち上げるときにドライブ番号を B から A に変更する。

** 本書のプログラムは、もともと富士通の 16 β という機種で開発したものを PC 9801 シリーズ用に移植したものであるので、両者に関してはグラフィックス関係など一部の特殊な BASIC コマンドを修正すれば基本的には互換性がある。

A. プログラムの立ち上げ方

以下の手順は、読者が PC 9801 上で MS-DOS 版 N 88 BASIC を使用することを想定している。このとき使用するシステムディスクには“N 88 BASIC. EXE”というファイルがなくてはならない。

- 1) ドライブ A に MS-DOS システムディスクを、ドライブ B に本書添付のディスクを入れ、電源を入れる。あるいは両方のディスクを入れてからリセットボタンを押す。
- 2) MS-DOS のシステムが読み込まれたら、日付と時刻の表示と入力要求があるので、それに従って入力する。(変更の必要がなければリターンキーを 2 回押すだけでよい。)

- 3) A > というプロンプトに続いて

A > N 88 BASIC RETURN

と入力して MS-DOS 配下の BASIC に切り替える。なお、入力するコマンドをミスタイプしたときは、RETURN を押す前に BS キーで削除して訂正する。

- 4) プログラム中に登録した化学式を読み込むため、CAPS キーを押して英大文字を入力できるようにする。

- 5) FILES”B : ” RETURN

と入力して、CRT ディスプレイにプログラムの一覧を表示する。(ただし、このステップは省略してもよい。)

- 6) パソコンのメモリにプログラム「ABC」を読み込むため、

LOAD”B : ABC” RETURN

と入力する。

[例] LOAD”B : PVT. BAS” RETURN

- 7) RUN RETURN

と入力すると目的のプログラムがスタートする。プログラムを途中で止めるには STOP キーを押せばよい。

- 8) 他のプログラム「DEF」に切り替えるときは、

NEW RETURN

と入力し、続いて

LOAD”B : DEF” RETURN