

パソコンによる示範教育システム

—— 新しい気液平衡式による McCabe-Thiele 法の学習 ——

宇 野 克 志*・笹 村 泰 昭*

Teaching System using Personal Computer combined with Video Projector

—— Study of McCabe-Thiele Method with New
Vapor-Liquid Equilibrium Equation ——

Katsushi UNO and Yasuaki SASAMURA

要 旨

McCabe-Thiele 法による棚段式連続精留塔の理論段数を数値計算するために、新しい 2 成分系気液平衡式を提出した。

必要に応じて、計算の途中経過をグラフィック画面に表示できるプログラムを開発した。

Abstract

New binary vapor-liquid equilibrium equation is proposed for the McCabe-Thiele method, which calculates the number of theoretical plates required in continuous fractionating column.

The program is developed to express the intermediate result of calculation on the graphic display according to need.

1. ま え が き

本校 CAI 室には示範教育システムとして、パソコンによるカラーディスプレイ上の画面を大型スクリーンに投影できる信号変換アダプターとビデオプロジェクターを備えている¹⁾。本報はこれらのシステムを有効に生かすための教材の開発を目的として、化学工学における分離操作の中から、McCabe-Thiele 法による棚段式連続精留塔の理論段数の求め方について検討したものである。

化学工学の単位操作は全て分離操作であるが、これらの分離装置の操作及び設計計算を行うには相平衡を定量的に表わせる関係式が不可欠であ

る。蒸留計算に使用される気液平衡式の研究は古くから行われ、主に、液相活量係数から気液の組成を推算する方式により、非常に精度の良い式が開発されている²⁾。しかしながら、いずれの式も非線型式で、試行法による長い演算時間を必要とするため、パソコンなどの演習用としては不向きである。

この度、2 成分系混合物の気液平衡関係を表現するために新しく提出した式は、従来の式に較べて簡略で、データに対する再現性が高く、更に、演算時間が極端に短かいなど、多くの特徴を持っている。本報の学習プログラムはこの式の特徴とパソコンの機能を有効に利用したものである。

すなわち、古くから図解法により求められてきた McCabe-Thiele 法による連続精留塔の理論段数を非常に精度よく数値計算し、しかも、一連の

* 助教授 工業化学科

計算の途中、必要に応じて計算を一時的に停止したり、特に重要な文字や数値を配色や点滅などの機能を活用して強調してみた。

これらは、教師が説明を加えたり、また、学生が独習できるように配慮した工夫である。

2. 新しい気液平衡式

新しく提出した2成分系の気液平衡式(1)は、古くから理想溶液の平衡関係を表わすために使用されているラウールの式⁹⁾を拡張したもので、 $B=C=1$ とくと、 A は相対揮発度に相応する。

$$Y = \frac{A \cdot X}{A \cdot X + (1-X)(1-X+B \cdot X^2)} \quad (1)$$

(1)式において、 A 、 B 、 C は2成分系に固有の値で、定数探索のためのルーチン(例えば、Simplex法⁹⁾、Marquardt法⁹⁾など)があれば、文献値から簡単に決定することができる。この場合、初期値を $A=10$ 、 $B=5$ 、 $C=1$ とくと、ほとんどの系について収束し、データに対する精度も非常に良いことを確かめている。²⁷⁾

一方、この式を利用するとき、定数はデータに対する最適化により決定されるので、データ数が多く、更に、適当な間隔に分散しているものを選ぶことが望ましい。また、 C の値がほぼ2以上となる非溶解部分を含む系では、式の性質上、振動し、精度は極端に低下する。

3. McCabe-Thiele 法の概要と計算手順

この方法の詳細については、化学工学の単位操作に関する成書⁹⁾を参照されたい。本項では、その概要と計算順序を説明する。

ここで使用する記号は、後のプログラムの記号と同じである。 X 、 Y はそれぞれ、液相及び気相のモル分率による濃度を示すが、2成分系なので低沸点成分を指すものとする。 D 、 F 、 W はそれぞれ、留出量、供給液量、缶出量で、単位は kg-mole/hr であり、 X 、 Y の下付添字になっている記号は、それぞれのモル分率濃度である。

- (1) Marquardt 法を用いて、(1)式に対する気液平衡データの最適化を行い、定数 A 、 B 、 C を決める。
- (2) 操作条件、 X_w 、 X_F 、 X_D 、 R_{FAC} 、 Q を入力する。 R_{FAC} は後に説明する。 Q は(1モルの原料を供給状態から飽和蒸気にする熱量)を(原料のモル蒸発潜熱)で除した値である。

- (3) (2)式により、 Q -線を計算する。

$$Y = \frac{Q}{Q-1} \cdot X - \frac{X_F}{Q-1} \quad \dots\dots\dots (2)$$

- (4) 気液平衡統と Q -線の交点 (X_P 、 Y_P) を求める。
- (5) 精留塔を運転する場合、還流比 R は最も重要な操作条件である。(3)式の濃縮操作線が点 (X_P 、 Y_P) と対角線上の点 (X_D 、 X_D) を結ぶ直線で示されるときは、無限の段数を必要とし、実際の塔では運転できない。

$$Y = \frac{R}{R+1} \cdot X + \frac{X_D}{R+1} \quad \dots\dots\dots (3)$$

このときの(3)式の勾配より求まる R を、最小還流比 R_M と呼んでおり、実際の操作還流比 R はこれより大きな値である。 R は操作条件として頭初から入力するのが普通であるが、本報のプログラムで紹介する2成分系の事例の中には予測できないものもあるので、最小還流比に対する倍率 R_{FAC} (> 1) を入力することにした。

$$R = R_M \cdot R_{FAC} \quad \dots\dots\dots (4)$$

- (6) (3)式により、濃縮操作線を求める。
- (7) Q -線と濃縮操作線の交点 (X_{OP} 、 Y_{OP}) を求める。
- (8) 点 (X_{OP} 、 Y_{OP}) と対角線上の点 (X_w 、 X_w) を結ぶ、回収操作線を求める。
- (9) Fig. 2 の方法により段数を求める。即ち、対角線上の点 (X_D 、 X_D) を開始点として、この濃度と平衡にある液相濃度を気液平衡式(1)より計算する。(1)式は簡単に微分できるので、Newton-Raphson 法が便利である。次に、濃縮操作線より気相濃度を計算する。点 (X_{OP} 、 Y_{OP}) を越えたら、回収操作線より計算する。このようにして計算を繰り返し、最終的には気液平衡式より計算される液相濃度が缶出液濃度 X_w より小さくなった時に計算を終了する。この繰り返し回数 (N =整数) が所要実段数である。
- (10) 実際の装置の段数は整数であるが、Fig. 2 でも明らかなように、計算上は最終的に $X_N = X_w$ になっていない。この部分は前回の X_{N-1} との比例配分 $(X_{N-1} - X_w) / (X_{N-1} - X_N)$ を行い、前回までの繰り返し計算回数に、この端数を加えた実数を理論段数とする。なお、塔底でリボイラー、塔頂で全縮器を使用しているときは、この段数から、それぞれ、1を差し引く。

Tab. 1

Example of Binary Mixtures

1. Methanol - Water
OLEVSKII, V.M., GOLUBEV, I.F.: TR. GIAP., NO. 6, 45 (1956)
2. Ethanol - Ethylbenzene
ELLIS, S.R.M., CLARK, M.B.: BRIT. CHEM. ENG., VOL. 6, 92 (1961)
3. Carbon Tetrachloride - Cyclohexane
RODGER, A.J., C.C. HSU: J. CHEM. ENG. DATA, VOL. 14 (3), 362 (1969)
4. Benzene - Toluene
ROLLET, A.P., ELKAIM, G.: COMPT. REND., VOL. 242, 2560 (1956)
5. Isopropanol - Water
KOJIMA, K., K. OCHI, Y., NAKAZAWA: KAGAKU KOGAKU, VOL. 32, 441 (1968)

画面 3

Methanol - Water

Data from OLEVSKII, V.M. & GOLUBEV, I.F., TR. GIAP., NO. 6, 45 (1956)
Number of Data = 15

Vapor-Liquid Equilibrium Equation
proposed by Katsushi UNO

$$Y = \frac{A \cdot X}{A \cdot X + (1-X) \cdot (1-X+B \cdot X^C)}$$

where X : Mole Fraction of more Volatile Component in Liquid
Y : Mole Fraction of more Volatile Component in Vapor

Please wait a minute,
while on determining the parameters of the above equation.

Residual Sum of Squares = 0.000091

A = 7.60616
B = 3.50203
C = 1.10321

Please push space key down.

Input operational conditions

XW = ? 0.1 RFAC = ? 3
XF = ? 0.5 Q = ? 0.5
XD = ? 0.9

Q-Line

$Y = (Q/(Q-1))X - XF/(Q-1)$
 $Y = -1.0000X + 1.0000$
XP = 0.3194 YP = 0.6806

Minimum Reflux Ratio RM
 $RM = (XD - YP)/(YP - XP) = 0.6073$
Operating Reflux Ratio R
 $R = RM \cdot RFAC = 1.8218$

XOP = 0.4139 YOP = 0.5861

Upper Operating Line
 $Y = (R/(R+1))X + XD/(R+1)$
 $Y = 0.6456X + 0.3189$

Lower Operating Line
 $Y = 1.5489X - 0.0549$
Please push space key down.

画面 4

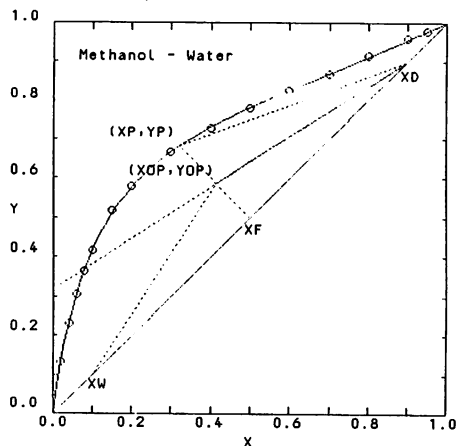


Fig. 1 Graphical Solution of McCabe-Thiele

画面 5

$X_W = 0.100$
 $X_F = 0.500$
 $X_D = 0.900$
 $R_M = 0.607$
 $RFAC = 3.00$
 $R = 1.8218$
 $Q = 0.500$

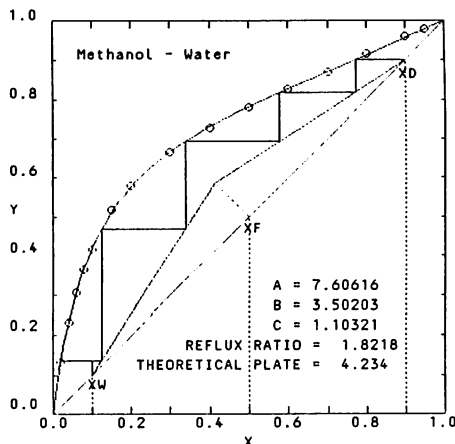


Fig. 2 Graphical Solution of McCabe-Thiele

4. プログラムの使用法と実行例

パソコンは NEC PC-9801 E, ディスプレイは高解像度カラーディスプレイ NEC PC-KD 551を使用した。

プログラムを LOAD し, RUN すると, 最終的に作図が終了するまでに, 全面的には 5 回, ディスプレイ上の画面が入れ代ることになっている。この間, 次の画面の準備ができると, 操作の指示があるので, データの入力やスペースキーを押すことによって, 画面を進める。

プログラムは教育用の教材を目的としているので, 気液平衡データなどをその都度選定し, 入力するのは難かしいと考え, 予め, Tab.1 に示した 2 成分系の特徴ある系を 5 例選び, DATA 文で読み込んである。系の選択を指示されたときは, 表の番号を入力し, リターンキーを押す。これらの系は, いずれも, 1atm (0.101325 MPa) における定圧気液平衡値である。なお, 別に用意したデータを打込みたいときは, 系の選択の際に 0 を打込むと, 入力の指示がある。

選定した系の特徴

- 1 メタノール-水
極く普通の非理想系溶液
- 2 エタノール-エチルベンゼン
両成分の蒸気圧差が大きく, 分離のための段数が少ない
- 3 四塩化炭素-シクロヘキサン
両成分の蒸気圧差が小さく, 分離のために多くの段数を必要とする。
- 4 ベンゼン-トルエン

理想系に近い溶液

5 イソプロピルアルコール-水

共沸点があり, 蒸留以外の分離操作を必要とする。

以上の系の中から, メタノール-水を例に, このプログラムの要点をハードコピーしたのが, 画面 3, 4, 5 の 3 面である。

画面 3 は系を選択したあと, Marquardt 法により, 気液平衡式の定数が決まるまでの画面で, 計算中は残差の平方和がたえず 5 色の色代りに表示され, 確実に収束してゆく様子を見ることができ。収束判定値にもよるが, 演算時間は約 40 秒程度で, 最も長い四塩化炭素-シクロヘキサンで 1 分 30 秒である。

画面 4 は操作条件を入力後, 画面の指示に従ってスペースキーを押すと, その度に, 先に述べた順序により計算が行われ, 左側の計算値と図中の点や線が同色で表示されるようになっている。これは, 一連の計算の途中, 現在どの部分の計算が行われているかを確認できるように工夫したものである。

更に, 計算を進めて, この画面の最後のスペースキーを押すと, 入力した操作条件から求めた操作線で作図計算が可能か否かが判定される。即ち, 計算範囲に共沸点があるとき, 平衡線と濃縮操作線が交差するとき, または, 還流比が負になるときには段数計算ができないので, 計算手順(2)へ戻り, 改めて, 操作条件の入力の指示がある。

なお, 図中の○印は気液平衡データで, 曲線は決定した定数を使って, 0.02 間隔で計算した平衡線である。

画面 5 と Fig.2 の 4 面は選定した 2 成分系混合液 5 例の最終画面である。

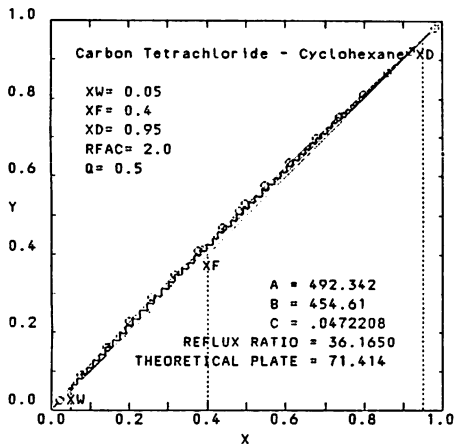


Fig. 2 Graphical Solution of McCabe-Thiele

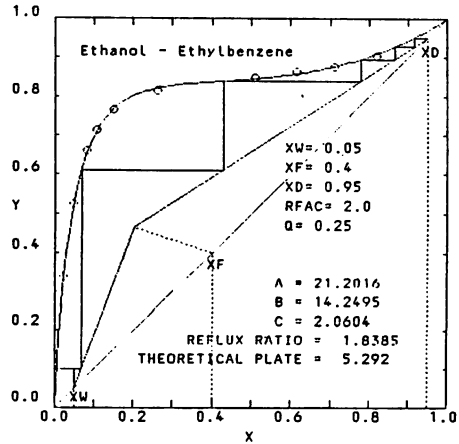


Fig. 2 Graphical Solution of McCabe-Thiele

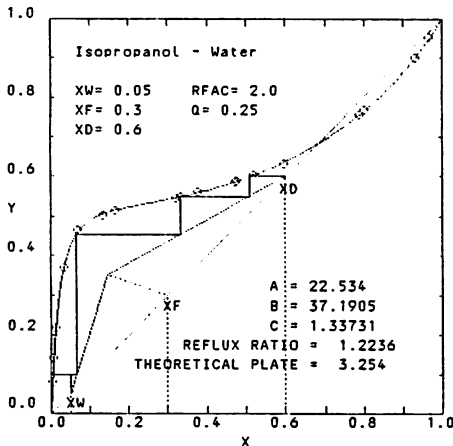


Fig. 2 Graphical Solution of McCabe-Thiele

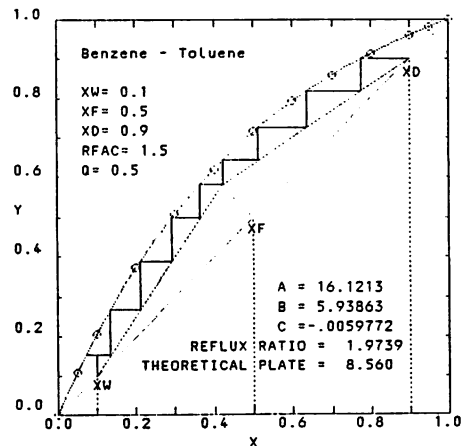


Fig. 2 Graphical Solution of McCabe-Thiele

5. ま と め

パソコンを使用した示範教育システムを有効に活用するための教材の開発を行った。学習テーマとして、化学工学の単位操作の中から、McCabe-Thiele法による棚板式連続精留塔の理論段数の求め方を選び、パソコンと周辺装置の機能をフルに活用して教育効果を高めるための検討を行った。

その結果

- (1) 新しく提出した気液平衡式は簡便で、データに対する再現性が高く、古くから図解法によって求められてきた理論段数が非常に精度よく数値計算できること。
- (2) 計算結果を随時、グラフィック画面に表示し、必要に応じて計算を一時停止したり、特

に重要な文字や数値を配色や点滅などの機能によって強調できること。など多くの成果を得た。

すなわち、パソコンと周辺装置の性能の向上はかなり複雑な計算を可能にし、高解像度カラーディスプレイによる結果のグラフィック表示は、極く僅かな数値の差でも鮮明な画像を期待できることなどの認識を深めた。

複雑な図式解法の多い化学工学単位操作の学習には、非常に有効な教育方法と思う。

終りに、この研究に貴重な助言を載いた、本校工業化学科平沼充安教授に心からお礼申しあげますとともに、この研究が、文部省からの「教育方法等改善経費」及び「特定研究経費(パソコンネットワークによる示範教育システムの研究)」により行われたことを記して、重ねて謝意を表します。

```

1000 ' FILE NAME      "KIYO21.DIS"
1010 ' McCabe-Thiele の 階段作図
1020 LPRINT "      Date = ";DATE$;LPRINT "      Time = ";TIME$
1030 *MAIN : CONSOLE 0,25,0,1:WIDTH 80,25:SCREEN 3:CLS 3
1040 WINDOW (-.95,-1.07)-(1.03,.16) : COLOR 6
1050 DIM XH(6,30),YH(6,30),XE(30),YE(30),X(103),Y(103),KNA$(6),LNA$(6),KND(6)
1060 LOCATE 20,0 : PRINT "      PROGRAM  DISTILLATION      "
1070 COLOR 5 : LOCATE 25,10 : PRINT"McCabe-Thiele Method for the Number";
1080 LOCATE 25,12 : PRINT"of Stages required in Distillation";
1090 COLOR 2 : LOCATE 0,24:PRINT "      Date = ";DATE$;: PRINT "      Time = ";TIME$;
1100 FOR K=1 TO 5 : READ KNA$(K),KND(K) : ND=KND(K)
1110 FOR I=1 TO ND:READ XH(K,I):NEXT I:FOR I=1 TO ND:READ YH(K,I):NEXT I,K
1120 COLOR 4 : LOCATE 52,24 : PRINT "Please push space key down.":COLOR 7
1130 WHILE INKEY$<>" " :WEND : CLS 3
1140 '
1150 DATA Methanol - Water ,15
1160 LNA$(1)="OLEVSKII,V.M. & GOLUBEV,I.F.,TR.GIAP.,NO.6,45(1956)"
1170 DATA 0.020, 0.040, 0.060, 0.080, 0.100, 0.150, 0.200, 0.300, 0.400, 0.500
1180 DATA 0.600, 0.700, 0.800, 0.900, 0.950
1190 DATA 0.134, 0.230, 0.304, 0.365, 0.418, 0.517, 0.579, 0.665, 0.729, 0.779
1200 DATA 0.825, 0.870, 0.915, 0.958, 0.979
1210 DATA Ethanol - Ethylbenzene ,10
1220 LNA$(2)="ELLIS,S.R.M. & CLARK,M.B.,BRIT.CHEM.ENG.,VOL.6,92(1961)"
1230 DATA 0.024, 0.048, 0.082, 0.108, 0.150, 0.260, 0.510, 0.616, 0.710, 0.820
1240 DATA 0.340, 0.525, 0.660, 0.713, 0.765, 0.815, 0.849, 0.863, 0.875, 0.903
1250 DATA Carbon Tetrachloride - Cyclohexane ,18
1260 LNA$(3)="RODGER,A.J. & C.C.HSU,J.CHEM.ENG.DATA,VOL.14(3),362(1969)"
1270 DATA 0.022, 0.077, 0.140, 0.199, 0.258, 0.316, 0.376, 0.438, 0.482, 0.497
1280 DATA 0.548, 0.610, 0.676, 0.737, 0.799, 0.860, 0.919, 0.980
1290 DATA 0.024, 0.091, 0.162, 0.227, 0.290, 0.350, 0.409, 0.470, 0.513, 0.529
1300 DATA 0.576, 0.636, 0.696, 0.753, 0.810, 0.866, 0.922, 0.981
1310 DATA Benzene - Toluene ,13
1320 LNA$(4)="ROLLET,A.P. & ELKAIM,G.,COMPT.REND.,VOL.242,2560(1956)"
1330 DATA 0.000, 0.050, 0.100, 0.200, 0.300, 0.400, 0.500, 0.600, 0.700, 0.800
1340 DATA 0.900, 0.950, 1.000
1350 DATA 0.000, 0.108, 0.206, 0.372, 0.508, 0.621, 0.714, 0.792, 0.857, 0.913
1360 DATA 0.960, 0.981, 1.000
1370 DATA Isopropanol - Water ,18
1380 LNA$(5)="KOJIMA,K. & K.OCHI & Y.NAKAZAWA,KAGAKUKOUGAKU,VOL.32,441(1968)"
1390 DATA 0.005, 0.007, 0.013, 0.036, 0.068, 0.133, 0.165, 0.320, 0.334, 0.375
1400 DATA 0.472, 0.476, 0.520, 0.595, 0.788, 0.802, 0.930, 0.966
1410 DATA 0.081, 0.141, 0.219, 0.369, 0.465, 0.504, 0.515, 0.546, 0.549, 0.562
1420 DATA 0.586, 0.589, 0.603, 0.633, 0.755, 0.768, 0.901, 0.952
1430 '
1440 LOCATE 10,1 : PRINT "Example of Binary Mixtures"
1450 FOR K=1 TO 5 : LOCATE 10,2*K+2 : COLOR K+1 : PRINT USING " # "; K ;
1460 PRINT KNA$(K) : NEXT K : COLOR 7 : LOCATE 10,15
1470 INPUT "May I start ? ——> No. of Binary Mixture (1 - 5) ";KDATA
1480 CLS 3 : IF KDATA > 0 THEN 1540 ELSE INPUT "Name of Binary Mixture ";KNA$(0)
1490 INPUT "Number of Data ";ND : KND(0)=ND:INPUT "Name of Article ";LNA$(0)
1500 PRINT "X DATA INPUT":FOR I=1 TO ND:PRINT"No.":I;" ":INPUT XH(0,I):NEXT I
1510 PRINT "Y DATA INPUT":FOR I=1 TO ND:PRINT"No.":I;" ":INPUT YH(0,I):NEXT I
1520 COLOR 6 : LOCATE 20,24 : PRINT "Please push space key down.":COLOR 7
1530 WHILE INKEY$<>" " :WEND : CLS 3
1540 K=KDATA : KNAME$=KNA$(K) : LNAME$=LNA$(K) : ND=KND(K)
1550 FOR I=1 TO ND : XE(I)=XH(K,I) : YE(I)=YH(K,I) : NEXT I
1560 PRINT "      " ;KNAME$ : PRINT "Data from ";LNAME$
1570 PRINT USING "      Number of Data = ##";ND :PRINT
1580 COLOR 5 : LOCATE 17,4 : PRINT "Vapor-Liquid Equilibrium Equation"
1590 LOCATE 21,5 : PRINT "proposed by Katsushi UNO" : PRINT : COLOR 2
1600 PRINT "      A*X
1610 PRINT "      Y = ————— "
1620 PRINT "      A*X + (1-X)*(1-X*B*X^C) " : PRINT : COLOR 7
1630 PRINT " where      X : Mole Fraction of more Volatile Component in Liquid"
1640 PRINT "      Y : Mole Fraction of more Volatile Component in Vapor"
1650 COLOR 4 : LOCATE 20,14 : PRINT "Please wait a minute,"
1660 PRINT"      while on determining the parameters of the above equation."
1670 GOSUB *MARQAT
1680 COLOR 5 : LOCATE 25,19 : PRINT USING "A = ###.#####" ;A
1690 LOCATE 25,20 : PRINT USING "B = ###.#####" ;B

```

```

1700 LOCATE 25,21 : PRINT USING "C = ###.#### " : C
1710 COLOR 6 : LOCATE 20,23 : PRINT "Please push space key down.":COLOR 7
1720 WHILE INKEY$<>" " : WEND : CONSOLE 0,25,0
1730 LPRINT " " : KNAME$
1740 CLS 3 : GOSUB *XYLINE : LOCATE 0,0 : PRINT "Input operational conditions"
1750 LOCATE 0,2:INPUT "XW= " : XW:INPUT "XF= " : XF:INPUT "XD= " : XD : LOCATE 14,2
1760 INPUT "RFAC= " : RFAC:LOCATE 14,3 : INPUT "Q= " : Q
1770 COLOR 2 : LOCATE 0,24 : PRINT "Please wait a minute.":COLOR 7
1780 KSIGN=1 : GOSUB *REFLUX : IF KSIGN < 0 THEN 1840
1790 GOSUB *OPLINE : IF KSIGN < 0 THEN 1840 ELSE GOSUB *DANZU
1800 LPRINT " No. X Y"
1810 FOR L=0 TO NDAN : LPRINT USING " ## " : L;
1820 LPRINT USING " #.#### " : X(L);Y(L) : NEXT L
1830 LPRINT SPC(10);USING "Number of Theoretical Plates = ###.#### " : RDAN
1840 LOCATE 0,23 : INPUT " Do you repeat a lesson (Y/N) ?",SGM$
1850 IF SGM$="Y" OR SGM$="y" THEN 1730 ELSE 1860
1860 LPRINT " Date = " : DATE$ : LPRINT " Time = " : TIME$
1870 END
1880 '
1890 *DANZU
1900 CONSOLE 0,25,0 : CLS 3 : ML=19
1910 LOCATE ML,2 : PRINT USING " XW= ###.### " : XW
1920 LOCATE ML,4 : PRINT USING " XF= ###.### " : XF
1930 LOCATE ML,6 : PRINT USING " XD= ###.### " : XD
1940 LOCATE ML,8 : PRINT USING " RM= ###.#### " : RM
1950 LOCATE ML,10 : PRINT USING " RFAC= ###.### " : RFAC
1960 LOCATE ML,12 : PRINT USING " R= ###.#### " : R
1970 LOCATE ML,14 : PRINT USING " Q= ###.### " : Q
1980 LOCATE 41,3:PRINT KNAME$
1990 LINE (0,0)-(1,-1),7,B:LINE (0,0)-(1,-1)
2000 FOR I=0 TO 1 STEP .1
2010 LINE (0,-1)-(.01,-1):LINE (1,-1)-(.99,-1)
2020 LINE (1, 0)-(1,-.02):LINE (1,-1)-(1,-.98)
2030 NEXT I
2040 LOCATE 0,24:PRINT "Please push space key down.":WHILE INKEY$<>" " : WEND
2050 FOR J=1 TO ND:XI=XE(J):YI=YE(J):CIRCLE (X1,-Y1),.008,4:NEXT J
2060 LOCATE 0,24:PRINT "Please push space key down.":WHILE INKEY$<>" " : WEND
2070 FOR K=0 TO 1 STEP .01 : X1=K : GOSUB *UNOVL
2080 IF K=0 THEN PSET (X1,-Y1)
2090 LINE -(X1,-Y1) : NEXT K
2100 LOCATE 0,24:PRINT "Please push space key down.":WHILE INKEY$<>" " : WEND
2110 FOR I=0 TO 10 STEP 2:LOCATE 37+I*4,22:PRINT USING "##";I/10;:NEXT I
2120 FOR I=0 TO 10 STEP 2:LOCATE 34,21-I*2:PRINT USING "##";I/10;:NEXT I
2130 LOCATE 51,23:PRINT " X "
2140 LOCATE 36,24:PRINT "Fig. 2 Graphical Solution of McCabe-Thiele";
2150 LOCATE 34,11 : PRINT "Y";
2160 LOCATE 61,15:PRINT "A =";A
2170 LOCATE 61,16:PRINT "B =";B
2180 LOCATE 61,17:PRINT "C =";C
2190 LOCATE 52,18:PRINT USING "REFLUX RATIO = ###.####":R
2200 LINE (XW,-XW)-(XOP,-YOP),6:LINE (XOP,-YOP)-(XD,-XD),6
2210 LOCATE 0,24:PRINT "Please push space key down.":WHILE INKEY$<>" " : WEND
2220 LINE (XW,-XW)-(XW,0),5,,&H3333 : LOCATE 38+XW*40,22-XW*20 : PRINT "XW"
2230 LINE (XF,-XF)-(XF,0),5,,&H3333 : LOCATE 38+XF*40,22-XF*20 : PRINT "XF"
2240 LINE (XOP,-YOP)-(XF,-XF),5,,&H3333
2250 LINE (XD,-XD)-(XD,0),5,,&H3333 : LOCATE 38+XD*40,22-XD*20 : PRINT "XD"
2260 KDAN=0:NDAN=0:K=1:X(0)=XD:Y(0)=XD:X1=XD:Y1=XD:PSET (X1,-Y1),2:INDK=1
2270 WHILE X1>XW
2280 IF K>103 THEN PRINT "OVER !!!":END
2290 XQ=.5 : GOSUB *NEWTON : X(K)=X1
2300 IF X(K)>XOP THEN Y(K)=ACON*X(K)+BCON : KDAN=KDAN+1 : GOTO 2330
2310 Y(K)=AREC*X(K)+BREC
2320 IF INDK<>2 THEN DANK=(KDAN)+(X(K-1)-XOP)/(X(K-1)-X(K)) : INDK=2
2330 NDAN=NDAN+1:WHILE INKEY$<>" " : WEND:LINE -(X1,-Y1),2:Y1=Y(K)
2340 IF X1>XW THEN LINE -(X1,-Y1),2 ELSE PSET (XW,-Y(K-1)),2
2350 K=K+1
2360 WEND
2370 LINE -(XW,-XW),2:RDAN=(NDAN-1)+(X(K-2)-XW)/(X(K-2)-X(K-1)):Y(K-1)=X(K-1)
2380 LOCATE 0,24:PRINT " "
2390 LOCATE 47,19:PRINT USING "THEORETICAL PLATE = ###.####":RDAN : RETURN

```

```

2410 *XYLINE
2420 LOCATE 41,3:PRINT KNAME$
2430 LINE (0,0)-(1,-1),7,B:LINE (0,0)-(1,-1)
2440 FOR I=0 TO 1 STEP .1:LINE (0,-1)-(.01,-1):LINE (1,-1)-(.99,-1)
2450 LINE (1, 0)-(1,-.02):LINE (1,-1)-(1,-.98):NEXT I
2460 FOR J=1 TO ND:X1=XE(J):Y1=YE(J):CIRCLE (X1,-Y1),.008,4:NEXT J
2470 FOR K=0 TO 1 STEP .01 : X1=K : GOSUB *UNOVL
2480 IF K=0 THEN PSET (X1,-Y1)
2490 LINE -(X1,-Y1) : NEXT K
2500 FOR I=0 TO 10 STEP 2:LOCATE 37+I*4,22:PRINT USING "#.#":I/10::NEXT I
2510 FOR I=0 TO 10 STEP 2:LOCATE 34,21-I*2:PRINT USING "#.#":I/10::NEXT I
2520 RETURN
2530 '
2550 *UNOVL : IF X1<=0 THEN Y1=0:RETURN
2560 Y1=A*X1/(A*X1+(1-X1)*((1-X1)+B*X1^C)) : RETURN
2570 '
2580 *NEWTON
2590 IF XQ < APS THEN XQ=APS
2600 FQ=A*XQ+(1-XQ)*(1-XQ+B*XQ^C) : FP=A*XQ/FQ-Y1
2610 FD=A*(1-XQ^2+(1-C+XQ)*B*XQ^C)/FQ^2 : X1=XQ-FP/FD
2620 IF ABS((X1-XQ)/X1)<.00001 THEN RETURN ELSE XQ=X1 : GOTO 2590
2630 '
2640 *OPLINE :LOCATE 38+XW*40,22-XW*20:PRINT "XW"
2650 LOCATE 38+XD*40,22-XD*20:PRINT "XD":LOCATE 38+XF*40,22-XF*20:PRINT "XF"
2660 LOCATE 34,11:PRINT "Y":LOCATE 51,23:PRINT " X "
2670 LOCATE 36,24:PRINT "Fig. 1 Graphical Solution of McCabe-Thiele";
2680 LOCATE 0,24:PRINT "Please push space key down.":WHILE INKEY$<>" ":WEND
2690 LINE (XP,-YP)-(XF,-XF),2,,&H3333:COLOR 2 : LOCATE 31+XP*40,21-YP*20
2700 PRINT "(XP,YP)":LOCATE 0,6 : PRINT"Q-Line":PRINT "Y=(Q/(Q-1))X-XF/(Q-1)"
2710 PRINT USING "Y= ###.####X +":ASEN::PRINT USING "###.####":BSEN
2720 PRINT USING "XP= ###.####":XP; : PRINT USING " YP= ###.####":YP
2730 LOCATE 0,24:PRINT "Please push space key down.":WHILE INKEY$<>" ":WEND
2740 LINE (XD,-XD)-(XP,-YP),5,,&H3333 : COLOR 5 : LOCATE 0,11
2750 PRINT "Minimum Reflux Ratio RM":PRINT USING"RM=(XD-YP)/(YP-XP)=###.####":RM
2760 PRINT "Operating Reflux Ratio R":PRINT USING"R=RM*RFAC=###.####":R
2770 LOCATE 29+XOP*40,21-YOP*20:PRINT "(XOP,YOP)": LOCATE 0,16
2780 PRINT USING "XOP= ###.####":XOP; : PRINT USING " YOP= ###.####":YOP
2790 LOCATE 0,24:PRINT "Please push space key down.":WHILE INKEY$<>" ":WEND
2800 IF XD<YP THEN 2910
2810 LINE (XD,-XD)-(XOP,-YOP),6:LINE (XOP,-YOP)-(.0,-BCON),6,,&H3333:COLOR 6
2820 LOCATE 0,18 : PRINT"Upper Operating Line" : PRINT "Y=(R/(R+1))X+XD/(R+1)"
2830 PRINT USING "Y= ###.####X + ":ACON::PRINT USING "###.####":BCON
2840 LOCATE 0,24:PRINT "Please push space key down.":WHILE INKEY$<>" ":WEND
2850 LINE (XOP,-YOP)-(XW,-XW),4,,&H3333 : COLOR 4
2860 LOCATE 0,22 : PRINT "Lower Operating Line"
2870 PRINT USING "Y= ###.####X - ":AREC::PRINT USING "###.####":BREC:: COLOR 7
2880 LOCATE 0,24:PRINT "Please push space key down.":WHILE INKEY$<>" ":WEND
2890 IF ABS(XP-XQ)<APS AND ABS(YP-YQ)<APS THEN 2900 ELSE 2910
2900 IF XW>XP AND XW>XOP THEN 2910 ELSE RETURN
2910 CLS 3:PRINT "_____ "
2920 COLOR 3:PRINT "???" ???":COLOR 7
2930 LPRINT SPC(10);"Please redo from start"
2940 PRINT SPC(10);"Please redo from start": KSIGN=-1 : RETURN
2950 '
2960 *REFLUX
2970 IF KSIGN = 0 THEN 3020
2980 X1=XD : GOSUB *UNOVL : YD=Y1 : IF YD>XD THEN 3010 ELSE 2990
2990 CLS 3 : LOCATE 25,10 : PRINT " Azeotropic Mixture ";
3000 WHILE INKEY$<>" " : WEND : KSIGN=-1 : RETURN
3010 IF Q = 0 THEN 3060 ELSE IF Q = 1 THEN 3050 ELSE 3040
3020 ASEN=0 : BSEN=0 : RM=0 : R=0 : ACON=1 : BCON=0
3030 XP=0 : YP=0 : XOP=XF : YOP=XF : RETURN
3040 ASEN=Q/(Q-1) : BSEN=XF/(Q-1) : GOSUB *REGULA : GOTO 3070
3050 ASEN=XF : BSEN=0 : XP=XF : X1=XP : GOSUB *UNOVL : YP=Y1 : GOTO 3070
3060 ASEN=0 : BSEN=XF : YP=XF : Y1=YP : XQ=.5 : GOSUB *NEWTON : XP=X1
3070 RM=(XD-YP)/(YP-XP) : R=RM*RFAC : ACON=R/(R+1) : BCON=XD/(R+1)
3080 IF Q=0 THEN YOP=XF : XOP=(YOP-BCON)/ACON:GOTO 3110
3090 IF Q=1 THEN XOP=XF : YOP=ACON*XOP+BCON : GOTO 3110
3100 XOP=(BSEN+BCON)/(ASEN-ACON) : YOP=ACON*XOP+BCON
3110 AREC=(YOP-XW)/(XOP-XW):BREC=XW*(XOP-YOP)/(XOP-XW) : GOSUB *CHECK : RETURN

```

PROGRAM-(3)

```

3130 *REGULA
3140 IF Q>1 THEN XYP=XD ELSE IF Q<0 THEN XYP=XW ELSE XYP=XF
3150 XP=XYP : YP=XYP : XY12=-1 : XY21=ASEN : XY22=-1
3160 XY1=A*XP/(A*XP+(1-XP)*(1-XP+B*XP^C))-YP : XY2=ASEN*XP-BSEN-YP
3170 XY11=A*(1-XP^2+(1-C+C*XP)*B*XP^C)/(A*XP+(1-XP)*(1-XP+B*XP^C))^2
3180 DY=(XY11*XY2-XY21*XY1)/(XY21*XY12-XY11*XY22) : DX=-(XY1+XY12*DY)/XY11
3190 LPRINT "XP,DX,YP,DY";XP;DX;YP;DY : XP=XP+DX : YP=YP+DY
3200 IF ABS(DX) =< APS AND ABS(DY) =< APS THEN RETURN
3210 IF XP =< 0! THEN XP=APS
3220 IF XP >= 1! THEN XP=1!-APS
3230 GOTO 3160
3240 '
3250 *CHECK
3260 XYQ=XD : AINF=(XD-YP)/(XD-XP) : BINF=YP-AINF*XP
3270 LPRINT "XW,XF,XD,RFAC,Q,AINF,BINF";XW;XF;XD;RFAC;Q;AINF;BINF
3280 XQ=XYQ : YQ=XYQ : XY12=-1 : XY21=AINF : XY22=-1
3290 XY1=A*XQ/(A*XQ+(1-XQ)*(1-XQ+B*XQ^C))-YQ : XY2=AINF*XQ+BINF-YQ
3300 XY11=A*(1-XQ^2+(1-C+C*XQ)*B*XQ^C)/(A*XQ+(1-XQ)*(1-XQ+B*XQ^C))^2
3310 DY=(XY11*XY2-XY21*XY1)/(XY21*XY12-XY11*XY22) : DX=-(XY1+XY12*DY)/XY11
3320 LPRINT "XQ,DX,YQ,DY";XQ;DX;YQ;DY : XQ=XQ+DX : YQ=YQ+DY
3330 IF ABS(XP-XQ)<APS AND ABS(YP-YQ)<APS THEN 3360
3340 IF ABS(DX) =< APS AND ABS(DY) =< APS THEN 3360
3350 IF XQ>0! AND XQ<1! THEN 3290 ELSE XYQ=XYQ-(XD-XF)/10! : GOTO 3280
3360 LPRINT "XP,XQ,YP,YQ";XP;XQ;YP;YQ : RETURN
3370 '
3380 *MARQAT
3390 DIM BPM(3),BPMX(3),IB(3),XM(3),DXM(3),OMG(3),AM(3,3)
3400 DIM AMM(3,4),FM(30),FMX(30),AJ(30,3)
3410 NP=3:NP1=NP+1:APS=.000001:TOL=APS:AINC=10:DEC=.1:FLAM=1:DH=.001:EPS=.0001
3420 RESTORE 3430 : FOR I=1 TO NP : READ BPM(I),IB(I):NEXT I
3430 DATA 10,1,5,1,1,1
3440 CR=1:IG=0:IFN=0:GOSUB *FUNC
3450 IBC=0:FOR I=1 TO NP:IBC=IBC+ABS(IB(I)):NEXT I:IF IBC=0 THEN RETURN
3460 IG=IG+1:PM0=PM:FLAM=FLAM*DEC:IF FLAM<TOL THEN FLAM=TOL
3470 FOR J=1 TO ND:FMX(J)=FM(J):NEXT J
3480 FOR JM=1 TO NP:BPMX(JM)=BPM(JM):IF IB(JM)=0 THEN 3510
3490 DELM=(ABS(BPM(JM))+DH)*DH:BPM(JM)=BPM(JM)+DELM:GOSUB *FUNC
3500 FOR I=1 TO ND:AJ(I,JM)=(FM(I)-FMX(I))/DELM:NEXT I:BPM(JM)=BPM(JM)-DELM
3510 NEXT JM
3520 FOR I=1 TO NP:IF IB(I)=0 THEN 3570
3530 XM(I)=0:FOR J=1 TO ND:XM(I)=XM(I)+AJ(J,I)*FMX(J):NEXT J
3540 FOR J=1 TO NP:AM(I,J)=0:IF IB(J)=0 THEN 3560
3550 FOR K=1 TO ND:AM(I,J)=AM(I,J)+AJ(K,I)*AJ(K,J):NEXT K
3560 NEXT J:GOTO 3580
3570 FOR J=1 TO NP:AM(I,J)=0:NEXT J:AM(I,1)=1:XM(I)=0
3580 NEXT I
3590 FOR I=1 TO NP:OMG(I)=SQR(AM(I,1)):NEXT I
3600 FOR I=1 TO NP:XM(I)=XM(I)/OMG(I)
3610 FOR J=1 TO NP:AM(I,J)=AM(I,J)/(OMG(I)*OMG(J)):NEXT J:NEXT I
3620 FOR I=1 TO NP:AMM(I,NP1)=-XM(I)
3630 FOR J=1 TO NP:AMM(I,J)=AM(I,J):NEXT J:AMM(I,1)=AMM(I,1)+FLAM:NEXT I
3640 FOR I=1 TO NP:II=I+1:FOR J=II TO NP1:AMM(I,J)=AMM(I,J)/AMM(I,1):NEXT J
3650 FOR J=1 TO NP:IF I=J THEN 3670
3660 FOR K=II TO NP1:AMM(J,K)=AMM(J,K)-AMM(I,K)*AMM(J,1):NEXT K
3670 NEXT J : NEXT I
3680 FOR I=1 TO NP:DXM(I)=AMM(I,NP1)/OMG(I):BPM(I)=BPMX(I)+DXM(I):NEXT I
3690 GOSUB *FUNC : IF IFN >= 100 THEN RETURN
3700 IF PM<PM0 THEN 3730
3710 FLAM=FLAM*AINC :IF FLAM > 1E+10 THEN PRINT " OVER " : RETURN
3720 GOTO 3620
3730 KO=0:FOR J=1 TO NP:IF ABS(DXM(J))/(ABS(BPM(J))+DH)>EPS THEN KO=KO+1:NEXT J
3740 IF KO=0 THEN RETURN ELSE 3460
3750 '
3760 *FUNC
3770 A=BPM(1):B=BPM(2):C=BPM(3) : IFN=IFN+1:PM=0 : CR=CR+1 : IF CR>7 THEN CR=2
3780 FOR K=1 TO ND:X1=XE(K):GOSUB *UNOVL:FM(K)=YE(K)-Y1:PM=PM+FM(K)^2:NEXT K
3790 LOCATE 15,17:COLOR CR:PRINT USING"Residual Sum of Squares = ##.##### ":PM
3800 RETURN

```

参 考 文 献

- 1) 中津正志, 他: 高専情報処理教育研究協議会講演
予稿集, 第4号, p 7 (1984)
- 2) 宇野克志, 笹村泰昭: 上記, 第5号, p 13 (1985)
- 3) レビュー「相平衡推算の現状と最近の進歩」: 化学
工学, 42, No.11, 583 (1978)
- 4) 例えば, 亀井三郎編, 化学機械の理論と計算 (第
2版): 229 (1980) 産業図書
- 5) Nelder, J. A., Mead, R., The Computer Journal :
7, 308 (1965)
- 6) Marquardt, D. W., J. S. I. A. M., 11, 431 (1963)
- 7) 宇野克志, 遠藤俊二, 笹村泰昭: 化学 pc 研究会,
JAPC, 7, No. 2, 82 (1985)
(昭和 60 年 11 月 29 日受理)