

分離技術シリーズ 19

ケミカルエンジニアのための 易しい応用数学

竹内 雍 共著
古谷 英 二

分離技術会

序

40年以上も前のことであるが、筆者はアメリカの大学に一年間客員准教授として招かれ、工学系大学院で専門の分離操作のほか化学工学応用数学の講義をする機会を得た。その折、英語で書かれた教科書の方が日本語のものよりはるかに理解しやすいと思い、何時かはケミカルエンジニアに必要な応用数学の易しい教科書を執筆したいと思った。その後は明治大学の学部・大学院で化学工学と物理化学を教育するかたわら研究と教育に専念した。そして、何れの分野を専攻する研究者や技術者にとっても数学の知識は問題解決の重要な手段ではあるが、目的そのものではないことを痛感した。それでも、ケミカルエンジニアは化学プロセスの設計・運用などに携わる過程で、かなり幅広い数学的知識が必要とされる結果、「ものづくり」を指向しながら応用数学の手法習得という呪縛から逃れられないことも多いと思った。最近、ようやく暇になったので本書をまとめた次第である。

「分かり易い応用数学」と題した以上は、実例を多く挙げ、高度な事項は専門書や学術論文に譲ることにした。なお、「ケミカルエンジニアのための」と記したが、関連する学部や大学院の教科書としても用いて頂けると期待している。

本書の内容はおよそ次の通りである。第1章は実験から得られたデータの取り扱いやグラフ表示と定式化、第2章は図微分や図積分、次元解析といったデータ処理の方法を述べている。第3章は分離プロセスや反応プロセスの解析と設計に代数方程式を用いる例とそれを解く過程で現れる定数やパラメータの意味の説明、第4章は反応やものの移動の速さを扱う過程で現れる常微分方程式の取り扱いを述べている。第5、6章ではやや高級な手法というべき偏微分方程式の解析解を説明している。実際には解析的に解けない非線形微分方程式を扱うことも多いので、そのような場合は大胆な近似を行ったり、数値計算に頼ることになる。そこで、第7章として微分方程式の数値解法を取り上げ、差分式を用いて解く方法を古谷英二氏に執筆頂いた。同氏は大学院博士課程の時代に本書の内容のあらましを英語で自習し、その結果、数値計算にも習熟された方である。次の第8章では、階段接触操作の解析に差分方程式を用いる手法

を多段抽出や多段蒸留を例に説明した。第9章は、種々の数学的手法を駆使して気体や液体混合物の輸送や加熱を行ったり、充填塔による成分分離を行う操作(例としてガス吸収と吸着を挙げて)の解析や設計の方法を示したものである。順序が逆になったが、この章はいわば基礎的の化学工学、つまり物質収支の計算、熱およびエネルギー計算、流体輸送動力の計算、分離プロセスの解析と設計というケミカルエンジニアに必須の事項を取り上げたものである。なお蛇足ながら、「むすび」として化学工学、あるいは化学プロセスの解析や設計の手法が上記の応用数学の手法とどのように関わりを持つかを一覧表に示した。そして章末問題の略解を付録に示してある。

本書は月刊誌「ケミカルエンジニアリング」(化学工業社刊)に13回にわたって連載された記事に加筆したものであるが、本書の刊行を熱心に勧めて頂いた分離技術会事務局長(化学工業社社長)三澤忠則氏に深謝の意を呈す。併せて引用させて頂いた各著者にも厚くお礼申し上げます。なお、著者の浅学非才のゆえに思わぬ誤りを犯しているかも知れないので、識者の叱正を期待する次第である。

2011年1月

竹 内 雍

目 次

第 1 章 実験データの整理法	1
1.1 はじめに - 実験データの取り扱いと統計的処理	1
1.1.1 実験データの信頼性	1
1.1.2 相関分析と回帰分析	2
1.2 実験データのまとめ方 - グラフ表示と定式化	3
1.2.1 $y = bx$ の例	3
1.2.2 $y = ax^n$ の例 - 全対数グラフの利用	4
1.2.3 $y = a \exp(bx)$ の例 - 半対数グラフの利用	5
1.2.4 $y = x/(a + bx)$ の例	6
1.2.5 最小自乗法による一次式の求め方	7
1.2.6 $y = a + bx + cx^2$ の例	9
1.2.7 $y = ax + bx^n$ の例	9
章末問題	10
第 2 章 データ処理のための種々の方法	12
2.1 はじめに - 基礎的事項の解説	12
2.2 関微分と関積分	12
2.2.1 関微分	12
2.2.2 関積分	14
2.2.3 数値微分と数値積分	16
2.3 次元解析	17
2.3.1 はじめに	17
2.3.2 次元解析の原理	17
2.3.3 次元解析と π 定理	18
2.3.4 次元解析の応用	19
2.3.5 無次元数について	21
章末問題	21
第 3 章 代数方程式とその応用	23
3.1 はじめに	23

3.2	未知数とその次数による代数方程式の分類	24
3.2.1	一元一次方程式	24
3.2.2	二元一次方程式	24
3.2.3	三元連立一次方程式	25
3.2.4	多元連立一次方程式	28
3.2.5	一元二次方程式	28
3.2.6	三次方程式	29
3.2.7	指数関係を表す式	31
	章末問題	32
第4章	常微分方程式とその応用	33
4.1	はじめに	33
4.2	微分方程式に関する用語と定義	33
4.3	一階常微分方程式の形と解き方	35
4.3.1	変数分離形	36
4.3.2	一階線形常微分方程式	40
	章末問題	43
第5章	偏微分方程式とその応用(その1) - 変数変換による解法 -	45
5.1	はじめに	45
5.2	偏微分方程式の数学的基礎と解き方	45
5.2.1	陰関数と陽関数	46
5.2.2	二つの独立変数を持つ関数への拡張	46
5.2.3	変数変換について	47
5.3	偏微分方程式の応用と解き方	48
5.3.1	平板における一次元熱伝導 - 熱伝導の式の誘導と解き方	48
5.3.2	変数変換による簡略化	52
	章末問題	54
第6章	偏微分方程式とその応用(その2) - ラプラス変換による解法 -	55
6.1	はじめに	55
6.2	ラプラス変換(演算子法)の基礎	55
6.2.1	ラプラス変換とは?	55
6.2.2	ラプラス変換の基本的性質 - 関数の微分, 積分, 合成など	56

6.2.3	ラプラス逆変換	56
6.3	化学プロセスの解析や設計へのラプラス変換の応用	59
6.3.1	半無限固体における熱伝導	59
6.3.2	直線型吸着平衡系の固定層吸着破過曲線	60
	章末問題	63
第7章	微分方程式の数値解法	64
7.1	はじめに	64
7.2	ルンゲ・クッタ法	64
7.3	ルンゲ・クッタ法による高次常微分方程式の解法	67
7.4	テイラー展開を用いた差分方程式の誘導	68
7.5	差分式を利用した微分方程式の数値解法	69
7.5.1	初期値問題となる微分方程式の解き方	69
7.5.2	初期値問題と境界値問題を含む偏微分方程式の解き方	70
7.6	偏微分方程式の数値解法とその手順	73
7.6.1	基礎式と無次元化	74
7.6.2	諸式の差分化と数値計算	76
7.6.3	計算例	77
7.7	おわりに	80
	章末問題	80
第8章	差分方程式とその応用	82
8.1	はじめに	82
8.2	差分と差分方程式	82
8.2.1	差分の表わし方と差分方程式	82
8.2.2	差分作用素の性質	83
8.2.3	第二次および高次の差分	83
8.2.4	関数の積や商の差分	83
8.2.5	前進差分，中心差分および後進差分	84
8.3	差分表や差分方程式の作り方と応用	84
8.3.1	はじめに	84
8.3.2	連続抽出操作への応用	85
8.3.3	多段蒸留塔を用いた二成分の分離，特に濃縮部の物質収支	87

章末問題	90
第9章 化学プロセスの解析や設計への数学的手法の応用	92
9.1 はじめに	92
9.2 円管内の流れ	92
9.2.1 円管内層流における流速分布	93
9.2.2 円管内乱流について	95
9.3 熱交換における伝熱量の計算	95
9.4 分離操作の解析と設計 ガス吸収について	99
9.4.1 はじめに	99
9.4.2 拡散について	99
9.4.3 ガス吸収の速さ	101
9.4.4 向流接触型ガス吸収装置における物質収支	102
9.4.5 物質移動速度と必要な塔高さ	105
9.5 分離操作の解析と設計 吸着操作について	108
9.5.1 はじめに	108
9.5.2 曲線平衡を示す単一成分系の固定層吸着操作 - 破過曲線と 破過時刻の推算	108
9.5.3 図積分による移動単位数と算出と総括物質移動係数の算出	112
9.5.4 移動単位数の解析解	113
9.5.5 吸着材内のものの動きの解析と操作設計法(r - ζ 法の紹介)	115
章末問題	117
むすび	119
付録；演習問題略解	121
記号一覧	129
索引	133