法政大学学術機関リポジトリ

HOSEI UNIVERSITY REPOSITORY

PDF issue: 2025-04-27

成分ファミリー法によるBWR状態方程式における異種分子間相互作用パラメータの相関

秋定, 諒亮 / AKISADA, Ryosuke

(発行年 / Year) 2013-03-24

(学位授与年月日 / Date of Granted) 2013-03-24

(学位名 / Degree Name) 修士(工学)

(学位授与機関 / Degree Grantor) 法政大学 (Hosei University) 2012 年度修士論文

成分ファミリー法による BWR 状態方程式における

異種分子間相互作用パラメータの相関

CORRELATION OF THE BINARY INTERACTION PARAMETER IN THE MODIFIED GENERALIZED BWR EQUATION OF STATE BY THE LAW OF CHEMICAL COMPONENT FAMILY

指導教員 西海英雄

法政大学大学院工学研究科物質化学専攻修士課程

11R2102

秋定諒亮

Ryosuke AKISADA

Abstract

Based on the relation suggested by Hudson and McCoubrey, we wrote correlation equation of the binary interaction parameter. We found that the binary interaction parameter was correlated as a function of the ratio of critical molar volume. We determined the optimal binary interaction parameter and divided into 4 chemical component families. Using the binary interaction parameter of correlation equation, we examined the prediction abilities of the VLE (vapor-liquid equilibria). *Key Words : modified generalized BWR equation of state, binary interaction parameter*

要旨

工業上、多くの熱力学物性値が必要であるが、広い温度域、圧力域にわたって測定され ている系は多くない。それらを実験によって全て得ることは、時間、労力、金銭の面で困 難である。そこで有効なのが、少ないデータを基にして多くの熱力学物性値を推算できる、 状態方程式を利用する方法である。

この方法をとる際、二成分系以上の熱力学物性値を推算するためには、異種分子間の相 互作用を補正する項が必要になる。それが異種分子間相互作用パラメータ *m*_{ii} である。

本研究ではこのパラメータを化学成分の違いにより分類した、成分ファミリーごとに相 関式を立て決定した。またこれらは Hudson-McCoubreyの理論に基づき、臨界体積の比の関 数として相関している。状態方程式は、BWR 状態方程式を改良した一般化修正 BWR 状態 方程式を利用した。相関式によって得られた異種分子間相互作用パラメータを使い、状態 方程式を利用して気液平衡関係の逆算を行うことで、相関式の妥当性を検討した。

| Abstract ·····2 |
|--|
| 目次 |
| 第1章 緒言 |
| 第2章 理論 |
| 2.1 熱力学の基礎 |
| 2.1.1 理想気体の状態方程式 |
| 2.1.2 理想気体 |
| 2.1.3 実在気体 |
| 2.1.4 圧縮係数 |
| 2.1.5 Euler の関係式 |
| 2.1.6 熱力学の基本式 |
| 2.1.7 Maxwell の関係式 |
| 2.2 状態方程式の種類と発展 |
| 2.2.1 van der Waals 状態方程式 |
| 2.2.2 二変数対応状態原理 |
| 2.2.3 三変数対応状態原理 ······14 |
| 2.2.4 Peng-Robinson 状態方程式 |
| 2.2.5 ビリアル展開型状態方程式 |
| 2.2.6 BWR 状態方程式 |
| 2.2.7 混合則の理論的背景 |
| 2.2.8 Hudson-McCoubrey の理論 |
| 2.2.9 混合則 |
| 第3章 実験 |
| 3.1 既往研究 |
| 3.1.1 異種分子間相互作用パラメータm ijとそのグループ化、および相関式32 |
| 3.1.2 m _{ij} の温度、組成依存性 |
| 3.2 N_System 36 |
| 3.2.1 プログラムと N_System について36 |
| 3.2.2 西海研データベースと N_System |
| 3.2.3 N_System (のプログラム)を開くまで40 |
| 3.2.4 bcomp.exe 使用法 |
| 3.2.5 bmij.exe 使用法 |
| 3.2.6 生データの"mix.txt"への登録方法 |

| 第4章 結果と考察 |
|--|
| 4.1 成分ファミリーの分類 |
| 4.2 相関式の立式 |
| 4.2.1 Hudson-McCoubrey の理論に沿って相関できたか |
| 4.2.2 F1, F5, F6 をまとめることは可能か |
| 4.3 気液平衡関係の逆算 |
| 4.3.1 合計 6 つの相関式による気液平衡関係の逆算 |
| 4.3.2 F1, F5, F6 に関して、個別のとき、まとめたときの気液平衡逆算の比較 90 |
| 第5章 結言 |
| 参考文献 |
| 謝辞 |
| 記号 |
| Appendix |

第1章 緒言

工業上、多くの熱力学物性値が必要であるが、広い温度域、圧力域にわたって測定されて いる系は多くない。それらを実験によって全て得ることは、時間、労力、金銭の面で困難 である。そこで有効なのが、少ないデータを基にして多くの熱力学物性値を推算できる、 状態方程式を利用する方法である。

この方法をとる際、二成分系以上の熱力学物性値を推算するためには、異種分子間の相 互作用を補正する項が必要になる。それが異種分子間相互作用パラメータ *mij* である。一般 に無極性物質より成る系では、このパラメータを定数として扱えるが、極性物質を含む系 では、温度依存性の他、組成依存性を持つ系が多いため、両者を考慮しなければならない。 本研究において、無極性物質より成る系は、このパラメータを化学成分の違いにより分類 した、成分ファミリーごとに相関式を立て決定した。またこれらは Hudson-McCoubrey の 理論に基づき、臨界体積の比の関数として相関している。極性物質を含む系は、温度依存 性と組成依存性の両者を持つアルコールを含む系、温度依存性のみを持つ水素を含む系、 水を含む系について、それぞれ相関式を立て決定した。状態方程式は、BWR 状態方程式を 改良した一般化修正 BWR 状態方程式を利用した。相関式によって得られた異種分子間相互 作用パラメータを使い、状態方程式を利用して気液平衡関係の逆算を行うことで、相関式 の妥当性を検討した。

第2章 理論

2.1 熱力学の基礎

2.1.1 理想気体の状態方程式

理想気体の状態方程式は、

$$PV = \mathbf{R}T$$

(2.1)

である。ここでRは気体定数、Pは圧力[Pa]、Vはモル体積[L/mol]、Tは温度[K]であり、後ろ3つはまとめてPVT関係と呼ばれることも多い。この3種の物性値は私たちにとって最も親しみ深い熱力学物性値である。またPVTの間に成り立つ関係を数学的に記した式は状態方程式と呼ばれる。

2.1.2 理想気体

理想気体とは、どんな条件においても式(2.1)が成り立つ気体のことである。また分子論的 には、気体の占めている容積に対して分子の大きさが無視できること、分子間の相互作用 が無視でき、分子同士が独立して運動していること、分子が完全弾性体であることなどの 仮定に基づいている。

理想気体は仮想的な気体であるが、圧力が大気圧以下のような低圧下では、実在する気 体でも種類に関係なく、理想気体の状態方程式に従う。

2.1.3 実在気体

実在気体では、分子間相互作用が働く。分子間に働く反発力が膨張を助けたり、引力が 収縮を助けたりするため、実在気体は理想気体の法則からずれる。

反発力は分子の直径に比べて短距離な場合にだけ重要な働きをする。一方で、引力の分 子間相互作用は比較的長距離なもので、分子直径の数倍の距離まで働く。この力は、分子 が互いにかなり接近しているが、接触していないところで重要で、分子が遠く離れると有 効に働かない。また温度が非常に低くて、分子が互いに相手を捕らえる程、平均速度が遅 い場合にも重要である。

理想気体との関係性と共に簡単にまとめると、低圧では、分子間相互作用はほとんど働 かず、気体は理想気体として振る舞う。高圧では、分子が接近しているので反発力が優勢 となり、気体は理想気体よりも圧縮されにくい。中間の圧力では、引力が優勢となり、理 想気体よりも圧縮されやすい。

2.1.4 圧縮係数

PVTを表す一つの方法として、次式で定義される圧縮係数(圧縮因子)Zが用いられる。

$$Z = \frac{PV}{RT}$$

(2.2)

ここでVはモル体積であることに注意が必要である。当然であるが、理想気体では圧縮係数Zは1となる。密度が高まるか、圧力が高まるにつれて理想気体の法則からずれる。これは、実在気体では引力、斥力が働くためであり、圧縮係数Zは1からずれる。この圧縮係数Zは後で述べるビリアル展開で使うので、覚えておいてほしい。

2.1.5 Euler の関係式

関数z = f(x, y)とその一次導関数が連続で微分可能なとき、微分の順序には関係なく、以下の交換関係が成り立つ。

$$\frac{\partial z}{\partial y} \left[\left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_y \right]_x = \frac{\partial z}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial z}{\partial y} \right)_x \right]_y$$

(2.3)

これを Euler の関係式という。また上式は、次のように簡略化して表すことも多い。

$$\frac{\partial^2 z}{\partial y \partial x} = \frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y}$$

(2.4)

2.1.6 熱力学の基本式

熱力学の第一法則と第二法則を結合すると

$$dU = TdS - PdV$$

(2.5)

以下に、エンタルピーH、ヘルムホルツエネルギーA、ギブスエネルギーGに関する基本 式を示す。

$$dH = TdS + VdP \tag{2.6}$$

$$dA = -SdT - PdV$$

$$dG = -SdT + VdP$$

(2.8)

(2.7)

(2.5)~(2.8)の4式を閉鎖系における熱力学の基本式と呼ぶ。

2.1.7 Maxwell の関係式

全微分の定義式を参考にして、P, V, T, Sについて下式を立てると、

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V} dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S} dV$$
(2.9)

$$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_P dS + \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_S dP$$
(2.10)

$$dA = \left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_{V} dT + \left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_{T} dV$$
(2.11)

$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P dT + \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T dP$$
(2.12)

と表される。

熱力学の基本式(2.5)~(2.8)と上式(2.9)~(2.12)を比較することで、以下の関係式が得られる。

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V} = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_{P}$$

$$P = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S} = -\left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_{T}$$
(2.13)

$$V = \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_{S} = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T}$$

$$(2.15)$$

$$S = -\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_V = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P$$

(2.16)

(2.14)

(2.15)と(2.16)におけるGの偏微分項に Euler の関係式を用いると、

$$\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial P} = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = -\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T$$

$$-\frac{\partial^2 A}{\partial V \partial T} = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T$$
(2.17)

(2.18)

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V$$
(2.19)

$$\frac{\partial^2 H}{\partial S \partial P} = \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P$$
(2.00)

(2.20)

(2.17)~(2.20)を Maxwell の関係式という。熱力学物性を求めるときにSが入っている項は 扱いにくいので歓迎されない。なぜならエントロピーを測定することは容易ではないから である。物性計算の際には Maxwell の関係式を用いて、Sを消去してから計算を行う。これ により全ての熱力学物性はPVTだけで表すことが可能となる。したがって、PVT関係を表し た状態方程式が正しく得られれば、全ての熱力学物性を実験に寄らず、計算により求める ことが可能となる。そのため、実用性を獲得する目的で現在までに多数の状態方程式が提 案されている。

2.2 状態方程式の種類と発展

実在流体のPVT関係を表現するため、あの著名な van der Waals 式から、数多くの状態方程 式が提案され、拡張され続けている。その数が数百とも言われる状態方程式であるが、一 般に、2種類に分類することができる。van der Waals 型(2定数型)状態方程式とビリアル 展開型状態方程式である。以下で、それらについて詳しく述べる。

2.2.1 van der Waals 状態方程式

van der Waals (ファン・デア・ワールス)は、理想気体の分子が接近してきたとき、引力 と斥力が働くため理想気体からずれると考え、以下の実在気体の状態方程式を提案した。

(1) 分子には大きさがあり、ある程度以上は入り込めない排除体積bがある。その分だけ理想気体の空間よりも小さい。すなわち、理想気体の状態方程式中のVをV-bと置き換える。

(2) 壁に衝突する分子はバルク(本体ガス)中から引力(分子間力)を受け、引き留められ るので、測定される圧力は真の圧力よりも小さい。引力の大きさは、バルク分子の密度と 壁に衝突する頻度に比例する。すなわち、密度の二乗に比例すると van der Waals は考えた。 よって、真の圧力は引力の補正をして、理想気体の状態方程式中のPをP+a/V²と置き換え る。

したがって、これらの値を理想気体の状態方程式に代入すると、実在気体の状態方程式が 得られる。

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = \mathbf{R}T$$

(2.21)

上式を変形すると、以下の van der Waals 状態方程式が導かれる。

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$$
(2.22)

a, bは物質によって定まる固有な定数で、aは引力に、bは斥力に関係する量である。

van der Waals 状態方程式は、理想気体から偏倚した実在気体のPVT関係を表現するために 提案された。臨界点の存在を予見している点や、次節に示す対応状態原理などの重要な知 見が含まれている点で、その後の科学技術の発展に与えた影響は大きく、van der Waals は 1910 年に第10回ノーベル物理学賞を受賞している。

van der Waals 状態方程式は、数学的に、気体ばかりではなく気液両相を表し得るため、多 くの研究者の関心を集め、後世において、気液物性を正確に表す状態方程式のベースとし て使われることになった。

van der Waals 状態方程式は、臨界点、あるいは液PVT関係を良好に表していない。これは、 van der Waals が実在気体について適用できると、述べているのにもかかわらず、彼に続く研 究者が、数学形において気液相に適用できたために、誤って状態方程式も気液相まで拡大 した結果、特に液相で大きな誤差が生じたことが、原因であると考えられる。van der Waals 定数*a*, *b*は第二ビリアル係数など、気相の性質から得られるので、それが液相まで適用でき ないのは当然であるかもしれない。

van der Waals 状態方程式の考え方は、直感的で明快だが、元来、気液のPVT関係に適用し ようとするものではない。しかし、気液に適用できる実用的な状態方程式を求め、van der Waals 状態方程式を改良しようとする多くの研究が行われ、RK 状態方程式、SRK 状態方程 式を経て、現在では実用性を満足する状態方程式として、後述の Peng-Robinson 状態方程式 が広く使用されるに至っている。

2.2.2 二変数対応状態原理

2.2.2.1 一般化 van der Waals 状態方程式

van der Waals は、臨界温度 T_c での等温線を観察して、臨界点においては次式が成り立つこ とを見出した。van der Waals 状態方程式をP = f(T, V)と表す。

- 1. 状態方程式は臨界点を通る: $P_c = f(T_c, V_c)$
- 2. 臨界点での接線勾配は $0: (\partial P/\partial V)_{T_c} = 0$
- 3. $T = T_c$ で曲線の凹凸が入れ替わる。(変曲点): $(\partial^2 P / \partial V^2)_{T_c} = 0$

van der Waals 状態方程式に、上記3つの臨界点の性質を適用する。

$$P_c = \frac{\mathrm{R}T_c}{V_c - b} - \frac{a}{V_c^2}$$

(2.23)

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T_c} = -\frac{RT_c}{(V_c - b)^2} + \frac{2a}{V_c^3} = 0$$
(2.24)
$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V}\right) = \frac{2RT_c}{2RT_c} = \frac{6a}{6a}$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right)_{T_c} = -\frac{2RT_c}{(V_c - b)^3} - \frac{6a}{V_c^4} = 0$$
(2.25)

未知数をa, b, Rの3つとして、(2.23)~(2.25)を解くと、次式を得る。

$$V_c = 3b$$

$$T_c = \frac{8a}{27bR}$$
(2.26)

(2.28)

$$P_c = \frac{a}{27b^2}$$

これらの式より得られる*a*, *b*, Rを式(2.22)に代入すると、一般化 van der Waals 状態方程式が 導かれる。

$$P_r = \frac{8T_r}{3V_r - 1} - \frac{3}{{V_r}^2}$$
(2.29)

ただし、添え字rを付す変数は、 $P_r = P/P_c$, $V_r = V/V_c$, $T_r = T/T_c$ で定義される無次元変数で、 対臨界値と呼ばれる。

式(2.29)には無次元数である対臨界値 P_r , V_r , T_r 以外の変数が含まれていない。すなわち対 臨界値が同じ状態では、各物質のPVTは同じ値となることを示している。言い換えれば、臨 界点を $P_r = 1$, $V_r = 1$, $T_r = 1$ として、相似形的にPVTを拡大縮小すれば、全ての物質のPVTは 同じ 1 枚の図で示される。よって、物質の熱力学物性には個性がないことを表している。 この考えが正しければ、対臨界値を用いることにより、あらゆる物質の熱力学物性を実験 せずに、計算だけで求めることができることになる。これを対応状態原理という。また、 式(2.29)は $P_r = f(T_r, V_r)$ と二変数で表されるので、二変数対応状態原理と呼ばれる。あらゆ る物質に適用できると言ったが、実は二変数対応状態原理は無極性で、かつ球状の物質に しか成り立たないことが、以下に述べるように統計力学と対比して明らかとなる。

2.2.2.2 ポテンシャルエネルギー

理想気体は周囲とは全く独立であった。しかし、密度が高くなると、周囲の物質と相互 作用(引力と斥力)を及ぼし合うようになる。それをミクロに表すのがポテンシャルエネ ルギーである。

ポテンシャルエネルギーは、粒子の相対位置によって決まるエネルギーで、二つの分子 間に生じる引力と斥力に関係する。よく使われる Lennard-Jones ポテンシャルエネルギーは、 以下の式で表される。

$$\phi = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right]$$

(2.30)

ここで、 ϵ はポテンシャル深さ、すなわち引力の大きさに関係し、 σ は衝突直径、すなわち斥力を表す。大括弧内の第一項が斥力、第二項が引力を意味している。また、 $\phi < 0$ は引力を、 $\phi > 0$ は斥力を表している。

相互の位置を示すのに1変数rのみであることからLennard-Jones ポテンシャルエネルギー は方向性のない、すなわち球状の無極性分子について適用されることが理解される。

2.2.3 三変数対応状態原理

二変数対応状態原理は、方向性のない球状の無極性流体にしか適用できない。球状分子 から偏倚している分子に適用するには、Pitzer による**偏心係数**ωと呼ばれるパラメータを導 入する。球状分子から偏倚していくと、蒸気圧に影響することに、Pitzer は着目した。

球状分子が $T_r = 0.7(1/T_r = 1.429)$ において、 $P^s/P_c \cong 0.1$ となることに注目し、球状分子の 偏心係数の値が 0 となるような、パラメータ ω を以下のように定義した。

$$\omega = -\log_{10} \frac{(P^s)_{T_r=0.7}}{P_c} - 1$$

(2.31)

直鎖炭化水素の分子量が大きくなるにつれて、すなわち球状分子から偏倚していくにつ れて、偏心係数ωが0からずれていくことがわかる。

 ω を導入した三変数一般化状態方程式 $P_r = f(T_r, V_r, \omega)$ は、方向性を持つ形の無極性分子、 例えば、 CO_2, N_2, O_2 、炭化水素などに広く適用される。

三変数対応状態原理を、水などの極性物質に適用すると、偏倚が大きくなることについ

ては、原理の適用範囲から言ってやむを得ない。極性物質の統一的扱いは、将来解決され るべき問題である。

20 世紀は大量生産の時代であったと言われるが、それを可能にしたのは三変数対応状態 原理だったとも言える。例えばエンジニアリング会社は、全く実験せずに、あるいは最小 限の実験を行うだけで、製油所(石油は大部分の成分が無極性物質である。)のような大規 模の工場を設計できるようになったのは、対応状態原理という理論的背景があってのこと である。

2.2.4 Peng-Robinson 状態方程式

van der Waals 状態方程式は、定性的に気液両相のPVT関係を表すが、蒸気圧などの物性推 算精度は低く、実用的ではない。その後、van der Waals 状態方程式を改良した種々の状態方 程式が提案された。現在、最も広く使われている Peng-Robinson 状態方程式は、van der Waals 状態方程式の引力項を経験的に修正した、三変数対応状態原理に基づく一般化状態方程式 である。

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b) + b(V - b)}$$
(2.32)

臨界点における条件より、次式を得る。

$$a(T_c) = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c}$$

$$b(T_c) = 0.07780 \frac{RT_c}{P_c}$$
(2.33)

(2.34)

状態方程式が石油成分の蒸留計算に用いられるようになり、蒸気圧を良好に表すことが 求められるようになった。そのため、次に示す温度関数 α 項[式(2.36)]が $a(T_c)$ 項[式(2.33)]に 乗じられて、a(T)と定義された。

$$a(T) = a(T_c) \cdot \alpha(T_r, \omega)$$
(2.35)

$$\alpha^{\frac{1}{2}} = 1 + \kappa \left(1 - T_r^{\frac{1}{2}} \right)$$
(2.36)

κはωの関数で、次式で表される。

$$\kappa = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \tag{2.37}$$

式(2.36)より明らかなように、 $T_r = 1$ すなわち臨界温度では、 $\alpha = 1$ となり、臨界点におけるaは式(2.33)を満足することがわかる。

bについては、全ての温度域で臨界点におけるb[式(2.34)]を用いるため、次のように記す。

$$b(T) = b(T_c)$$

(2.38)

2.2.5 ビリアル展開型状態方程式

2.2.5.1 ビリアル係数

圧縮係数Zは、次式で定義される。

$$Z = \frac{PV}{RT} = \frac{P}{\rho RT}$$
(2.39)

圧縮係数Zを1/Vで、ビリアル展開と呼ばれる無限級数に展開すると、次式で表される。

$$Z = \frac{PV}{RT} = 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2} + \cdots$$

(2.40)

また、密度ρで展開すると、次式で表される。

$$Z = \frac{PV}{RT} = \frac{P}{\rho RT} = 1 + B\rho + C\rho^{2} + \dots$$
(2.41)

B, C, D, …は、それぞれ第二、第三、第四、…ビリアル係数などと呼ばれる。

Bは第二ビリアル係数と呼ばれ、二体分子間の相互作用に関係する量であり、温度だけの 関数である。同様にC, D, …は、それぞれ第三、第四、…ビリアル係数と呼ばれ、三分子間、 四分子間、…の相互作用に関係する量である。このような相互作用を加えることで、気体か ら液体まで表すことができるというイメージがビリアル展開である。

2.2.5.2 第二ビリアル係数Bとポテンシャル関数 φとの関係

$$B = -\frac{N_{\rm A}}{2} \int_0^\infty \left[\exp\left(-\frac{\phi(r)}{kT}\right) - 1 \right] 4\pi r^2 dr$$
(2.42)

2.2.5.3 van der Waals 状態方程式とビリアル係数との関係

van der Waals 状態方程式をビリアル展開式で表すと、次式のようになる。

$$B = b - \frac{a}{RT}$$
(2.43)

$$C = b^2 \tag{2.44}$$

本結果は、第二ビリアル係数Bと1/Tが直線関係にあるとき、van der Waals 定数a, bの値 を求めることができることを示している。

2.2.6 BWR 状態方程式

2.2.6.1 15 定数一般化 BWR 状態方程式

1940年、Benedict, Webb, Rubin の3人は、ビリアル展開型の状態方程式として、以下の8 定数式を提案した。

$$P = \rho RT + \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2}\right)\rho^2 + (bRT - a)\rho^3 + a\alpha\rho^6 + c\rho^3 \frac{1 + \gamma\rho^2}{T^2} \exp(-\gamma\rho^2)$$
(2.45)

最後の項は、マクローリン展開すると密度の無限級数となり、経験的にではあるが、気液 相を表す状態方程式であることを示している。

これは 8 つの定数を含むが、1972 年、Starling は実用精度や低温域への適用を検討した、 一般化 11 定数式を提案した。この式は BWRS 状態方程式と呼ばれ、一定の成果を上げたが 不十分な点もあった。

1977 年、Nishiumi, Saito らは、適用温度範囲を拡大した 15 定数一般化 BWR 状態方程式 を提案した。

$$P = \rho RT + \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} + \frac{D_0}{T^3} - \frac{E_0}{T^4}\right)\rho^2$$
$$+ \left(bRT - a - \frac{d}{T} - \frac{e}{T^4} - \frac{f}{T^{23}}\right)\rho^3$$
$$+ \alpha \left(a + \frac{d}{T} + \frac{e}{T^4} + \frac{f}{T^{23}}\right)\rho^6$$
$$+ \left(\frac{c}{T^2} + \frac{g}{T^8} + \frac{h}{T^{17}}\right)\rho^3 (1 + \gamma \rho^2) \exp(-\gamma \rho^2)$$

(2.46)

上式の15定数を以下に示す。

$$\begin{split} B_{0} &= (0.443690 + 0.115449\omega)/\rho_{c} \\ A_{0} &= (1.28438 - 0.920731\omega) RT_{c}/\rho_{c} \\ C_{0} &= (0.356306 + 1.70871\omega) RT_{c}^{-3}/\rho_{c} \\ D_{0} &= (0.0307452 + 0.179433\omega) RT_{c}^{-4}/\rho_{c} \\ E_{0} &= (0.006450 - 0.022143\omega \exp(-3.8\omega)) RT_{c}^{-5}/\rho_{c} \\ b &= (0.528629 + 0.349261\omega)/\rho_{c}^{2} \\ a &= (0.484011 + 0.754130\omega) RT_{c}/\rho_{c}^{2} \\ d &= (0.0732828 + 0.463492\omega) RT_{c}^{-2}/\rho_{c}^{2} \\ \alpha &= (0.0705233 - 0.044448\omega)/\rho_{c}^{3} \\ c &= (0.504087 + 1.32245\omega) RT_{c}^{-3}/\rho_{c}^{2} \\ \gamma &= (0.544979 - 0.270896\omega)/\rho_{c}^{2} \\ e &= [4.65593 \times 10^{-3} - 3.07393 \times 10^{-2}\omega + 5.58125 \times 10^{-2}\omega^{2} - 3.40721 \\ &\times 10^{-3} \exp(-7.72753\omega - 45.3152\omega^{2})] RT_{c}^{-5}/\rho_{c}^{2} \\ f &= [0.697 \times 10^{-13} + 8.08 \times 10^{-13}\omega - 16.0 \times 10^{-13}\omega^{2} - 0.363078 \\ &\times 10^{-13} \exp(30.9009\omega - 283.680\omega^{2})] RT_{c}^{-24}/\rho_{c}^{2} \\ g &= [2.20 \times 10^{-5} - 1.065 \times 10^{-4}\omega + 1.09 \times 10^{-5} \exp(-26.024\omega)] RT_{c}^{-9}/\rho_{c}^{2} \\ h &= [-2.40 \times 10^{-11} + 11.8 \times 10^{-11}\omega - 2.05 \times 10^{-11} \exp(-21.52\omega)] RT_{c}^{-18}/\rho_{c}^{2} \end{split}$$

van der Waals 型一般化状態方程式の 2 つの定数に比べて、一般化 BWR 状態方程式は 15 定数と複雑な印象を与えるが、 $A_0 \sim E_0$, $a \sim h$, α , γ の 15 定数は、臨界温度 T_c , 臨界密度 ρ_c と Pitzer の偏心係数 ω の関数として一般化されており、思考上のシンプルさは、van der Waals 型一般化状態方程式と全く変わらない。

計算上も、コンピュータの使用を前提としている現代では特に問題にならない。

使用上は、問題としている系において、どちらの状態方程式のほうが推算性は良いのか、 あるいは、理論的にどちらが望ましいのかが重要である。

2.2.6.2 拡張 15 定数一般化 BWR 状態方程式

この状態方程式は、パラメータを増やすことによって、極性物質の挙動を表す改良が施 されており、非正規流体(非極性物質や無視できるほどの弱い極性を持った物質)はもと より、アルコール類などの極性物質を含む系、軽質と重質の混ざった非対称な系、さらに 低温域にまで適用できる。以下に拡張 15 定数一般化 BWR 状態方程式を示す。

$$\begin{split} P &= \rho RT + \left[B_0 RT - (A_0 + \Psi_A) - \frac{C_0}{T^2} + \frac{D_0}{T^3} - \frac{E_0 + \Psi_E}{T^4} \right] \rho^2 \\ &+ \left(bRT - a - \frac{d}{T} - \frac{e}{T^4} - \frac{f}{T^{23}} \right) \rho^3 \\ &+ \alpha \left(a + \frac{d}{T} + \frac{e}{T^4} + \frac{f}{T^{23}} \right) \rho^6 \\ &+ \left(\frac{c}{T^2} + \frac{g}{T^8} + \frac{h}{T^{17}} + T\Psi_s \right) \rho^3 (1 + \gamma \rho^2) \exp(-\gamma \rho^2) \end{split}$$

(2.48)

ここで、*Ψ*sは次式で表される。

$$\Psi_s = s_3 + \frac{s_1}{T^{s_2}}$$

(2.49)

上式中の 5 つのパラメータ Ψ_A , Ψ_E , s_3 , s_1 , s_2 は、極性あるいは量子効果による寄与を表し、無次元である s_2 を除く極性パラメータは、無次元パラメータ Ψ_A^* , Ψ_E^* , s_3^* , s_1^* と次の関係にある。

 $\Psi_A = \Psi_A^* RT_c V_c$ $\Psi_E = \Psi_E^* RT_c^5 V_c$ $s_3 = s_3^* RV_c^2$ $s_1 = s_1^* RT_c^{s_2} V_c^2$

(2.50)

拡張 15 定数一般化 BWR 状態方程式の 15 定数は、15 定数一般化 BWR 状態方程式のそれ と同様に定義される。

 $\Psi_{A}^{*}, \Psi_{E}^{*}$ は第二ビリアル係数データを、 $s_{3}^{*}, s_{1}^{*}, s_{2}$ は蒸気圧データを良好に表すように決定される。

2.2.6.3 BWR 状態方程式からの第二ビリアル係数

15 定数一般化 BWR 状態方程式の第二ビリアル係数Bは、式(2.41)と式(2.46)をρRTで割った式を比較することで、次式が得られる。

$$B = B_0 - \frac{A_0}{RT} - \frac{C_0}{RT^3} + \frac{D_0}{RT^4} - \frac{E_0}{RT^5}$$

(2.51)

2.2.7 混合則の理論的背景

状態方程式を用いて、混合物の物性を推算するためには、純物質の状態方程式の定数を 組成の関数として表す必要がある。これを**混合則**と呼び、以下に理論的根拠を示す。

2.2.7.1 異種分子間相互作用

極性分子は、分子内電荷の偏りにより双極子モーメントを持つ。極性分子が、無極性分 子や極性分子に接近すると、極性分子の双極子モーメントは、相手の分子中に電気的偏り (分極)をつくり、お互いに引力が生じる。この現象を**誘起双極子**と呼ぶ。

London は、無極性分子の H_2 が、なぜ2原子分子となるのかを量子力学から明らかにした。 それは、瞬間的に見ると核の H^+ と電子から成る双極子モーメントが生じて、お互いに誘起 力を及ぼし合い、無極性分子間にも引力が働くため、 H_2 分子が形成される。これを無極性 物質の相互作用に拡張し、**分散力** ϕ_{12} と呼ぶことにして、次式で定義する。

$$\phi_{12} = -\frac{3}{2} \frac{I_1 I_2}{I_1 + I_2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{r^6}$$
(2.52)

ここで、*r*は分子間距離、*I*はイオン化ポテンシャルエネルギー(外殻電子を引きはがすために必要なエネルギー)、*a*は分極率を指す。

同種分子間では、上式において1 = 2と置くことで、 ϕ_{11} , ϕ_{22} を得る。 異種分子間 Lennard-Jones ポテンシャルエネルギーは、次式で記される。

$$\phi_{12} = 4\varepsilon_{12} \left[\left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^6 \right]$$
(2.53)

(2.52)を(2.53)の引力項部分(6乗部分)と等置すると、次式を得る。

$$\frac{3}{2} \frac{I_1 I_2}{I_1 + I_2} \alpha_1 \alpha_2 = 4\varepsilon_{12} \sigma_{12}^{\ 6}$$
(2.54)

また同種分子間では、次式を得る。

$$\frac{3}{4}I_{1}\alpha_{1}^{2} = 4\varepsilon_{1}\sigma_{1}^{6}$$
(2.55)

式(2.55)から α_1 を求め、式(2.54)に代入して α_1 を消去する。同様な操作を行い α_2 を消去すると、以下の式を得る。

$$\varepsilon_{12} = \left(\frac{\sqrt{l_1 l_2}}{(l_1 + l_2)/2}\right) \frac{\sigma_1^{\ 3} \sigma_2^{\ 3}}{\sigma_{12}^{\ 6}} \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$$
(2.56)

ε₁₂は異種分子間の引力深さで、異種分子間引力に関係している。右辺のIを含む項は、幾何 平均と算術平均の比でほぼ1である。したがって、近似的に次式を得ることができる。

$$\varepsilon_{12} = \frac{\sigma_1^{\ 3}\sigma_2^{\ 3}}{\sigma_{12}^{\ 6}}\sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}$$
(2.57)

異種分子間斥力は、剛体球のそれと同じであると考えられるので、次式が成り立つ。

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}$$

(2.58)

上式を式(2.57)に代入すると、右辺において、純物質の物性 ε_1 , ε_2 , σ_1 , σ_2 だけから、異種分子間パラメータ ε_{12} を得られることがわかる。

一方、式(2.29)の基本定数は、 V_c , T_c の 2 つである。球状無極性分子の T_c 及び V_c は、 Lennard-Jones ポテンシャルエネルギーの ε , σ と次のような関係が成り立つことが知られている。

 $\varepsilon = k_T T_c$

(2.59)

$$\sigma^3 = k_V V_c \tag{2.60}$$

これらは、マクロな量(T_c , V_c)をミクロな量(ε , σ)に、あるいはその逆に変換できることを表している。上記関係は全ての物質に成り立つわけではないが、議論を展開していくためには有用な関係式である。

上記関係から、式(2.29)右辺の基本物性 T_c , V_c は、引力と斥力を表すミクロな性質 ε , σ に関係していると考えられる。そのことより、式(2.29)で表される二変数対応状態原理は、無極性で、かつ球状の物質にしか適用できないことがわかる。

ここで、式(2.59)と式(2.60)で示したように、ミクロの関係をマクロの関係に変換すると、 次式を得る。

$$V_{cij} = \left(\frac{V_{ci}^{\frac{1}{3}} + V_{cj}^{\frac{1}{3}}}{2}\right)^{3}$$

$$T_{cij} = m_{ij} \sqrt{T_{ci} T_{cj}}$$
(2.61)

(2.62)

2.2.8 Hudson-McCoubrey の理論

Reed および Hudson-McCoubrey は、London の分散力と Lennard-Jones ポテンシャルの引力 項部分を等しいと置き、 m_{ij} が V_{ci}/V_{cj} の関数として表されることを示した。

London の分散力は次式で定義される。

$$\phi_{12} = -\frac{3}{2} \frac{l_1 l_2}{l_1 + l_2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{r^6}$$
(2.52)

異種分子間 Lennard-Jones ポテンシャルエネルギーは、次式で定義される。

$$\phi_{12} = 4\varepsilon_{12} \left[\left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^6 \right]$$
(2.53)

異種分子間の引力深さε₁₂は、次式で近似される。

$$\varepsilon_{12} = \frac{\sigma_1^{3} \sigma_2^{3}}{\left(\frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}\right)^6} \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$$

(2.63)

球状無極性分子に対して、 $V_c \propto \sigma^6$, $T_c \propto \varepsilon$ の関係が適用できる。これを基にして式を変形 すると、次式を得る。

$$T_{cij} = 64 \left[\left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right)^{\frac{1}{6}} + \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right)^{-\frac{1}{6}} \right]^{-6} \sqrt{T_{ci}T_{cj}}$$
(2.64)

式(2.62)と式(2.64)を比較すると、次の関係が成り立つ。

$$m_{ij} = 64 \left[\left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right)^{\frac{1}{6}} + \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right)^{-\frac{1}{6}} \right]^{-6}$$

(2.65)

すなわち、異種分子間相互作用パラメータ m_{ij} は、成分の臨界容積比 V_{ci}/V_{cj} の値で決まる ことを示している。同種分子間では $m_{ij} = 1$ となり、 m_{ij} 軸(y軸)対称であることがわかる。 ただし、式(2.62)で定義される m_{ij} は、特に二成分系気液平衡データを良好に表すように決 定される、調整パラメータとして扱われることが多い。

2.2.9 混合則

一般的に、状態方程式を利用して混合物の熱力学物性値を推算するためには、純物質の 状態方程式中の定数をモル分率*x_i*の関数として表す必要がある。そのためには定数に対して 混合則を定めなければならない。

そこで、状態方程式を混合物に適応するための理論的背景を統計力学から証明した。統計力学から、第二ビリアル係数*B*を構成する定数*A*₀などに対して、二重和が成り立つことがわかっている。

$$B = B_0 - \frac{A_0}{RT} - \frac{C_0}{RT^3} + \frac{D_0}{RT^4} - \frac{E_0}{RT^5}$$
(2.51)

2.2.9.1 15 定数一般化 BWR 状態方程式の混合則

以下にA₀の例を示す。

$$A_0 = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} x_i x_j A_{0ij}$$

(2.66)

二重和を利用して、*A*₀などの定数が対応状態原理に従い、異種分子間にも適応できると 仮定した。*A*₀は以下のように書き換えられる。

$$A_0 = (1.28438 - 0.920731\omega_{ij}) RT_{cij} / \rho_{cij}$$
(2.67)

式(2.67)中の $\rho_{cij}, \omega_{ij}, T_{cij}$ は、次式から得られる。

$$V_{cij} = \left(\frac{V_{ci}^{\frac{1}{3}} + V_{cj}^{\frac{1}{3}}}{2}\right)^3$$
(2.61)

$$\omega_{ij} = \left(\frac{\omega_i + \omega_j}{2}\right) \tag{2.68}$$

$$T_{cij} = m_{ij} \sqrt{T_{ci} T_{cj}}$$

(2.62)

式(2.61)は、剛体球に対して成り立つが、引力を持つ、実際の分子にも近似的に適応した。 式(2.68)は、理論的根拠は特にないが、ωの違いが気液平衡計算に与える寄与が小さいので、 簡単な算術平均を用いている。式(2.62)は、ポテンシャル深さに対する幾何平均則を、マク ロな量である臨界温度に当てはめた式であり、異種分子間相互作用パラメータの定義式と 言える。

全ての定数に対して混合則を適応して、結果を以下に示す。 まず、二重和が成り立つため、以下の式が得られる。

$$B_{0} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} x_{i} x_{j} B_{0ij}$$
$$A_{0} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} x_{i} x_{j} A_{0ij}$$
$$C_{0} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} x_{i} x_{j} C_{0ij}$$
$$D_{0} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} x_{i} x_{j} D_{0ij}$$
$$E_{0} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} x_{i} x_{j} E_{0ij}$$

| (2.0) | (2. | 6 | 9 |) |
|-------|-----|---|---|---|
|-------|-----|---|---|---|

次に二重和を利用して、定数が対応状態原理に従い、異種分子間にも適応できると仮定した。式を書き換えた結果を以下に示す。

$$B_{0} = (0.443690 + 0.115449\omega_{ij})/\rho_{cij}$$

$$A_{0} = (1.28438 - 0.920731\omega_{ij})RT_{cij}/\rho_{cij}$$

$$C_{0} = (0.356306 + 1.70871\omega_{ij})RT_{cij}{}^{3}/\rho_{cij}$$

$$D_{0} = (0.0307452 + 0.179433\omega_{ij})RT_{cij}{}^{4}/\rho_{cij}$$

$$E_{0} = (0.006450 - 0.022143\omega_{ij}\exp(-3.8\omega_{ij}))RT_{cij}{}^{5}/\rho_{cij}$$

(2.70)

その他の定数は、以下のような純物質の値を用いた、経験的な混合則が用いられる。

$$b = \left[\sum_{i=1}^{N} (x_i b_i)^{\frac{1}{3}}\right]^3$$
$$a = \left[\sum_{i=1}^{N} (x_i a_i)^{\frac{1}{3}}\right]^3$$
$$d = \left[\sum_{i=1}^{N} (x_i a_i)^{\frac{1}{3}}\right]^3$$
$$c = \left[\sum_{i=1}^{N} (x_i c_i)^{\frac{1}{3}}\right]^3$$
$$\alpha = \left[\sum_{i=1}^{N} (x_i \alpha_i)^{\frac{1}{3}}\right]^3$$
$$\gamma = \left[\sum_{i=1}^{N} (x_i \gamma_i)^{\frac{1}{3}}\right]^3$$

(2.71)

$$e = \left[\sum_{i=1}^{N} (x_i e_i)^{\frac{1}{3}}\right]^3$$
$$f = \left[\sum_{i=1}^{N} (x_i f_i)^{\frac{1}{3}}\right]^3$$
$$g = \sum_{i=1}^{N} x_i g_i$$
$$h = \sum_{i=1}^{N} x_i h_i$$

(2.72)

極性パラメータに対しては、次の混合則が用いられる。

$$\Psi_{A} = \sum_{i=1}^{N} x_{i} x_{j} \Psi_{Aij} = \sum_{i=1}^{N} x_{i} x_{j} \Psi_{Aij}^{*} RT_{cij} V_{cij}
\Psi_{E} = \sum_{i=1}^{N} x_{i} x_{j} \Psi_{Eij} = \sum_{i=1}^{N} x_{i} x_{j} \Psi_{Eij}^{*} RT_{cij}^{5} V_{cij}
\Psi_{S} = \sum_{i=1}^{N} x_{i} \left(s_{3i} + \frac{s_{1i}}{T^{s_{2i}}} \right)$$
(2.73)

式(2.73)中のパラメータは次の関係にある。

$$\Psi_{Aij}^{*} = \frac{\Psi_{Ai}^{*} + \Psi_{Aj}^{*}}{2}$$
$$\Psi_{Eij}^{*} = \frac{\Psi_{Ei}^{*} + \Psi_{Ej}^{*}}{2}$$
$$s_{3} = s_{3}^{*} RV_{c}^{2}$$
$$s_{1} = s_{1}^{*} RT_{c}^{s_{2}} V_{c}^{2}$$

(2.74)

第3章 実験

3.1 既往研究

3.1.1 異種分子間相互作用パラメータmiiとそのグループ化、および相関式

Reed³および Hudson-McCoubrey⁴は、London の分散力と Lennard-Jones ポテンシャルの引 力部分を等しいと置いて、 m_{ii} が次式で表わされることを示した。

$$m_{ij} = 64 \left[\left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right)^{\frac{1}{6}} + \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right)^{-\frac{1}{6}} \right]^{-6}$$
(3.1)

式(3.1)は、 m_{ij} に影響を与える因子が V_{ci}/V_{cj} であることを示していると考えられる。この 考えに基づくと、BWR 状態方程式の m_{ij} が V_{ci}/V_{cj} の関数で表わされることが推測される。ま た、これは無極性物質に対して成り立ち、種々の仮定が含まれているので実験データを良 好に表現できるとは必ずしも望めない。

*m_{ij}*は気液平衡に大きな影響を与える。そこで、2 成分系の気液平衡を良く表わすように 各系の*m_{ij}を*決定し、*m_{ij}を縦軸に、V_{ci}/V_{cj}を横軸にとり、いろいろな系の<i>m_{ij}をプロットし* たところ、表 3.1 に示すような化学的に似た物質グループごとに規則性が見られ、相関式を まとめることができた。

| | Alkane | Cyclo- | Alkane | Alkene | Arene | Carbon | Nitrogen | Hydrogen | Acethylene |
|------------------|----------|--------|--------|--------|----------|---------|----------|----------|------------|
| | (C1~C10) | alkane | (C10~) | Тикене | 7 fielle | dioxide | Thuogen | sulfide | reculyche |
| Alkane(C1~C10) | A1 | A2 | A3 | B1 | B2 | B3 | B5 | B6 | B8 |
| Cycloalkane | | A2 | A3 | B1 | B2 | B3 | B5 | - | - |
| Alkane(C10~) | | | - | B1 | - | B3 | B5 | B6 | - |
| Alkene | | | | B1 | B2 | B4 | - | B6 | B9 |
| Arene | | | | | B2 | B3 | B5 | B7 | B4 |
| Carbon dioxide | | | | | | 1.000 | B5 | B6 | - |
| Nitrogen | | | | | | | 1.000 | B6 | - |
| Hydrogen sulfide | | | | | | | | 1.000 | - |
| Acethylene | | | | | | | | | 1.000 |

表 3.1 異種分子間相互作用パラメータによるグループ分け

相関式は2種類に分類することができる。

一つ目は、Hudson-McCoubreyの理論に基づく相関式

$$m_{ij} = 64 \left[\left\{ k_1 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\}^{\frac{1}{6}} + \left\{ k_1 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\}^{-\frac{1}{6}} \right]^{-6} + k_2$$
(3.2)

二つ目は、2次関数型の相関式で、式(3.2)でうまく表せないときに、こちらを使用した。

$$m_{ij} = k_3 + k_4 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}}\right) + k_5 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}}\right)^2$$
(3.3)

ただし、*V_{ci}/V_{cj}の*値は1を超えるように計算した。 表 3.2 に、相関式の相関係数を、グループごとに示した。

表 3.2 相関係数の一覧

(1) 式(3.2)の相関係数

| Sysytems | A1 | A2 | A3 |
|--|------|--------|------|
| k ₁ | 0.91 | 0.91 | 0.7 |
| k ₂ | 0 | -0.003 | 0 |
| Mximum values $of(V_{ci}/V_{cj})$ tested | 4.95 | 3.47 | 7.25 |

(2) 式(3.3)の相関係数

| System | B1 | B2 | B3 | B4 | B5 | B6 | B7 | B8 | B9 |
|--|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|--------|
| k ₃ | 1.027 | 0.949 | 0.972 | 1 | 1.026 | 0.962 | 0.991 | 0.929 | 1.083 |
| k_4 | -0.028 | 0.0685 | -0.019 | -0.019 | -0.036 | -0.011 | -0.011 | 0.013 | -0.095 |
| k ₅ | 0 | -0.028 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -0.0046 | 0 |
| Mximum values $of(v_{ai}/v_{ai})$ tested | 5.79 | 3.23 | 7.64 | 3.33 | 4.73 | 6.16 | 3.8 | 4.34 | 1.6 |

図 3.1 に m_{ij} と V_{ci}/V_{cj} の関係をグループごとに示した。



図 3.1 m_{ij}とV_{ci}/V_{cj}の関係

3.1.2 m_{ii}の温度、組成依存性

混合物の熱力学的物性値の推算には、分子間の相互作用を補正するパラメータであるm;;

の導入が必要になることは既に述べた。無極性物質から成る系ではm_{ii}を定数として扱え、

相関式から計算できることも既に述べた。しかしながら、極性物質を扱う場合はそう簡単ではない。極性物質は、無極性物質とは違い分散力のほかに、静電気的な相互作用や水素結合的な相互作用などを持つからだ。そのような相互作用を3 変数対応状態原理に基づく一般化状態方程式では表現する事が出来ない。したがって、式(2.26)は極性物質に適用することは出来なくなる。

しかしながら、Prigogene らはポテンシャルが無極性部分と極性部分の分から成り、かつ 前者が後者より十分に大きいときには異種分子間ポテンシャルが温度の影響を受けること を示している。Nohka らはこの結果と Hudson-McCoubery の理論を結び付け極性-非極性物質 間の*m_{ij}*は増加しやがて一定値に達する事を導いた。このことは状態方程式を無極性部分と 極性部分に分けることができ、かつ前者の影響が大きいと見なせる系においては、温度の 関数になることが期待できる。

本研究室でも、Nohka らが示したようにm_{ii}が増加して、やがて一定値に達する事という

結果を得ている。水素を含む系において、温度依存性を持つ結果を得ている。また、水、 アルコール類を含む系においては、温度依存性、あるいは温度依存性と組成依存性の両方 を示すという結果を得ている。
3.2 N_System

この章は、実験方法というよりも、N-Systemの使い方に終始する。

N-Systemの基本的な操作法については、西海研究室資料に記載されているので割愛する。 この章では基本的な操作法を習得しているという前提の下、さらに実務的な操作法につい て述べることとする。

3.2.1 プログラムと N_System について

3.2.1.1 プログラムについて簡単に

N-System はプログラム集である。プログラムのおおよその概念は以下の通りであり、簡単に言うなら、ある入力値に対して一定の操作を行い、その計算値を返すというものだ。



例えば、台形の面積を求めるプログラムを考えるとする。この時、上底と下底の長さが 入力データとなり、 {(上底)+(下底)}×(高さ)÷2という計算がプログラム本体となり、計 算結果が出力データとなる。このような決まりきった計算の流れをひとまとまりにして、 簡単に計算できようにパッケージ化したものがプログラムである。

N-System はフォートランというプログラミング言語により書かれており、フォートラン は大別するならコンパイラ言語に属するプログラミング言語である。コンパイラ言語とは、 人間が記述したソースコードを、機械が実行可能な形式であるオブジェクトコードに変換 してから実行するという2段階の操作が必要な言語の総称である。

本研究室では、様々な化学工学における計算を、とりわけ相平衡やエントロピーなどの 熱力学的計算をプログラム化しており、そのプログラム集を N-System と呼んでいる。

3.2.1.2 N_System の構成

N-System は C ドライブの直下に置かれたときに実行できるようにプログラムが組まれて おり、実行形式であるのでインストールは不要である。もし、個人のパソコンに導入した い場合は C ドライブの直下にコピーするだけで実行可能である。つまり、N-System の絶対 パスは C:¥N_System である。N-System 内には次のようなフォルダが用意されている。



bin:プログラム本体。(フォートランで書かれたプログラムをコンパイルしたもの) expdata:実験値などプログラムを動かした時に使用される生データ。基データ。 kekka:結果ファイルの保存場所。

Source Files: ソースファイル。(フォートランで書かれたプログラムでコンパイルされる以前のもの)

プログラム本体は"bin"フォルダ内にあり、開くと次のような画面が表示される。

| 늘 bin | | |
|--|------------------------|-------------|
| : ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に. | 入り(白) ツール(囗) ヘルプ(由) | |
| 🚱 戻る 🔹 🕑 🚽 🏂 🔎 検索 | ዀ วรมรั 🎹 🖌 🥵 วรมรั-同期 | |
| :アドレス(D) 🧰 C:¥N_System¥bin | | |
| | bcomp2exe | bcomp.exe |
| その他 | bcomphs.exe | bcop.exe |
| マイコンピュータ マイコンピュータ マイネットワーク | bmijexe | bpleos.exe |
| 詳細 《 | bpred2.exe | bpred.exe |
| bin ファイル フォルダ 更新日時: 2010年12月22日、18:46 | calb.exe | mathpac.exe |
| | prcomplexe | prmijexe |
| | prpred.exe | vir3eos.exe |

それぞれが単位プログラムである。本研究では、相関式から計算した推算値と実験値を比較するプログラムである"bcomp.exe"、2 成分系の m_{ij}を気液平衡関係にフィッティングして決定するプログラムである"bmij.exe"を多く使用した。

3.2.2 西海研データベースと N_System

現在、西海研究室で共有しているデスクトップパソコンには、"西海研 DB.xls"というフ ァイルがデスクトップにショートカット(リンク元: C:¥N_DataBase¥西海研 DB.xls)とし て置かれている。"西海研 DB.xls"は、西海研究室資料や卒論・修論類、そして N-System などの本研究室で頻繁に使用されるファイル、あるいはプログラムへのハイパーリンク集 である。ファイルを開くと、下記のような画面が表示される。

| | 23 | _ ~ | | | | | | | | 西海研DB.xls [互 | 換モード] - M |
|-----------|------------------|----------------------|----------------|-----------|-----------------|------------------|--------------------------|----------|-----|--------------|-----------|
| ファイル F | | 挿入 / | ページ レイアウト P | 数式 | データ | 校閲 R | 表示 | 開発 | | | |
| | み 切り取 □>> ¬ピー | (D | MS Pゴシック | , | - 11 | A A | = = | = | \$2 | ■ 折り返して全体を表 | 長示する 標準 |
| 貼り付け | け ダ 書式の | Dコピー/貼り付け | BIU | · 🗄 • | 🕭 - <u>A</u> | · # · | ≣≣ | ≣ | < • | 🔤 セルを結合して中央 | や揃え 👻 🕎 |
| | クリップボー | -F G | | フォント | | G. | | | Ē | 2置 | 5 |
| | E1 1 | - (| f _x | | | | | | | | |
| | A | | В | | NO | | ് വ ച് ചം. | | | D | |
| 1 | E . | 西海研デ | ータベー | ース | м_s Ľ — | ystemia ·すること | ,%£19 C:¥1 :₀ | ~ 1 | | | |
| 2 | 1 | ホームペーシ | 7 | | http | ://nishil | lab.k.hose | ei.ac. j | 2 | | |
| 3 | | | | | | | | | | | |
| 4 | 2 | 西海研資料 | | | 「西 | 海研資料 | 乳目次 | | | | |
| 5 | 3 | 反応工学 | | | <mark>「反</mark> | 応工学演 | 寅習」 [・ | I 目) | 欠 | | |
| 6 | 4 | 西海論文 | | | | | | | | | |
| 7 | 5 | 西海研学会教 | 発表 | | | | | | | | |
| 8 | 6 | 卒論・修論・1 | 専論 | | E | 〔(年度 | 頁) | | | | |
| 9 | | | | | Ē | 〔(あいう | えお順) | | | | |
| 10 | | | | | | | | | | | |
| 11 | 7 | N_System | | | 使月 | 例 | | | | | |
| 12 | | E | WR推算(bpre | ed) | PR | 推算(prpr | red) | | | | |
| 13 | | BWR | データ比較(b | comp) | PRE | 「一夕比! | 叉(prcom | ip) | | | |
| 14 | | BI | WR熟媒体(bo | op) | | | | | | | |
| 15 | | | | . | | _ 11 _ | | | | | |
| 16 | | BWR()语 | 記合物mijの決 | 定 bmij) | PR(| mi仍决定 | ≓ prmij) | | | | |
| 17 | | BWR(極性) | バラメータのミ | 央定 bpleo: | s) | | | | | | |
| 18 | | BWR純物質ト (bcomphs) | i/sとEOSとの | 比較 | mat | hpac | | | | | |
| 19 | | | | | ビリの上 | アルデー 比較(vir3e | -タと3EO eos) | S計算 | ₹Ē | | |
| 20 | | | | | PVT (cal | データか b) | らビリア | ル係 | 数 | | |
| 21 | | | | | | | | | | | |
| 00 | Main. | | | | | | | | | | |
| コマンド | · 1 | | | | | | | | | | |

メニューの7がN-Systemである。N-Systemは単位操作ごとにパッケージ化されており、 使用に際しては使い分けが必要である。(西海研究室資料に詳しく書かれているので、ここ では言及しない。)

3.2.3 N_System (のプログラム) を開くまで

3.2.3.1 N_System (のプログラム)を開くまで(基本)

N-System のプログラムの一つである BWR(混合物 mij の決定 bmij)の開き方を例にとる。 まず、BWR(混合物 mij の決定 bmij)をクリックする。次のような画面が現れる。

| Microso | ft Office |
|---------|---|
| ? | C¥N_System¥bin¥bmijexe を聞いています。 ファイルには、ウィルスや、コンピュータに問題を起こす可能性のあるものが含まれていることがあります。このファイルが信頼できる所のものか確かめてください。 このファイルを開きますか? |
| | OK キャンセル |

今、リンクから".exe"型のファイルを開こうとしているために表示されているが、この ファイルは安全であるため、無視して、"OK"をクリックする。すると、次のような画面が 現れる。

| 🕫 C:¥N_System¥bin¥bmij.exe | - 🗆 🗙 |
|--------------------------------------|----------|
| | <u>^</u> |
| データファイルの選択(c:¥N_System¥expdata中) | |
| 「.mix.txt(混合物) Z.mydata.txt(ユーリーテータ) | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | - |

ここまでが、基本的な開き方である。

3.2.3.2 N-System (のプログラム)を開くまで (DB 使わずに)

"西海研 DB.xls"はあくまでショートカット集であるので、当然だがファイルを直接開 くこともできる。N-System は、C ドライブの直下に置かれている(そうでなければ動かな い)ので、どのパソコンでも絶対パスは同じである。

3.2.1.2 で述べた通り、"bin"フォルダにプログラムは収められているので、使いたいプロ グラムを選択して、ダブルクリックするだけで実行できる。このとき、エラーは表示され ず、次のような画面が直接開く。

| 🕰 C:¥N_System¥bin¥bmij.exe | - 🗆 X |
|--|----------|
| | <u> </u> |
| データファイルの選択(c:¥N_System¥expdata中) 1:mix.txt(混合物) 2:mydata.txt(ユーザーデータ) | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | - |

頻繁に N-System を使用する場合、"西海研 DB.xls"を使用するよりも、プログラムその もののショートカットを作成し、デスクトップに置いておくことが、時間短縮の早道であ るように考えられる。

3.2.3.3 物質コード番号と文献番号

N-System では、物質には物質コード番号が付けられ、登録されている。例えば、メタン は1番、二酸化炭素は116番といった具合に番号がついている。N-System のほとんどのプ ログラムでは、番号を知るためのヘルプが用意されている。(物質コード番号の知り方は、 西海研究室資料を参照のこと。)しかし、何度も繰り返し演算を行う場合には、いちいち検 索をかけていると手間なので、Excelファイルとして一覧を用意しておくと便利である。一 覧は、Appendix にも載せたが、電子データとして残しておくので、そちらを参照してもら いたい。

"bcomp.exe"も"bmij.exe"も入力ファイルとして実験値を使用する。これらの計算に用 いる実験値は、"expdata"フォルダの"mix.txt"というファイルに収められている。ここに 登録されている実験値は、論文を収集して、登録したものである。当然だが、どんな系に ついても登録されているわけではない。1成分系気液平衡、2成分系気液平衡、あるいはそ れ以上の混合物の気液平衡の莫大なデータが登録されている。

使用したいデータを簡単に探し出せるようにするために、物質には物質番号がつけられ ており、気液平衡などの文献データには登録順に番号がついている。

3.2.4 bcomp.exe 使用法 (BWR 状態方程式による気液平衡の実験値と計算値の比較)

"bcomp.exe"で行える演算は、BWR 状態方程式による気液平衡の実験値と計算値の比較である。純物質であっても、混合物であってもほぼ同様の操作で比較することができる。

3.2.4.1 bcomp.exe による気液平衡計算

水素(物質コード番号:136)とトルエン(物質コード番号:102)の2成分系気液平衡の計算例を次に記す。

🔤 bcomp.exe - 🗆 🗙 データファイルの選択(c:¥N_System¥expdata中) 1:mix.txt(混合物) 2:pure.txt(純物質) 3:mydata.txt(ユーザーデータ)

1: 登録データを使用するため



0: ヘルプに入るため

実験データセット番号(02)を入力してください (0:実験データ処理 -1:物質コード番号 -2:純物質物性 -3:mij -4:終了) 0 1:タイトル 2:検索 3:データ表示 4:選択データコビー 5:データ入力 0:終了

2: 検索をかけたいので

| _ | 1:タイトル 2:検索 4:選択データコビー | 〒3:データ表示 - 5:データ入力 | 0:終了 | |
|---|---------------------------|-----------------------|------|--|
| 2 | 検索成分数 | (0:関係無し) | | |

2:2 成分ともに検索かけたい物質が決まっているので

| 2 | 検索成分数 | (0:関係無し) | |
|-----|-------|-----------------|--|
| 2 | | 物質コード番号 (0:ヘルプ) | |
| • • | | | |

136,102: 水素とトルエンの物質コード番号を入力

| 136 | 102 | |
|-----|--|--|
| | 成分数 = 2 物質コード番号 = 136 名称 =H2 物質コード番号 = 102 名称 =toluene | |
| 220 | H2-TOLUENE JAMES J. SIMNICK,HERBERT M. SEBASTIAN,HO-MU,AND CHAO 1(91)-1 | |
| | 1:タイトル 2:検索 3:データ表示 4:選択データコビー 5:データ入力 0:終了 | |

ヘルプから抜け出したいので。(水素とトルエンを含む系は一つしか表示されていないが、 他の系では必ずしもそうはならない。例えば、水素、メタン、トルエンを含む系の3成分 系の登録があったならば、それも表示されるからである。)



220: 水素とトルエンの文献番号は 220 番と分かったので。(また、ここまで行うと初期画面 に戻っている。もし、検索条件を変えたければもう一度、0 から繰り返す。)



Enter: 系の確認。間違っていれば、N

| 等温気液平衡 T[C],P[atm],V[1/ 系: 2 成分 成分番号: 1 H2 成分番号: 2 toluer H2-TOLUENE JAMES J. SIMNICK,HERBER | /mol] (コード番号:136) ne(コード番号:102) F M. SEBASTIAN,HO-MU,AND CHAO 1(91)-1 | |
|--|--|---|
| o.k. ? | Enter:yes N:no | |
| 等温気液平衡(2) 1:T,P 固定(フ | 成分系) ≀ラッシュ), 2:⊺,液組成× 固定 | - |

1: フラッシュ計算なので

| 等温気液平衡(2成4 | 分系) |
|--------------------------------|------------------------------------|
| 1:T,P 固定(フラ | ッシュ), 2:T,液組成× 固定 |
| 通常計算(画面ブロットな) Enter:yes N:r | J/mij相関値/チェック計算なし)? ™ F:終了 ▼ |

Enter: 通常計算なので

| 通常計算(画面ブロットなし/mij相関値/チェック計算なし)? Enter:yes N:no F:終了 |
|--|
| 1 H2 2 toluene T= 188.70[C] = 461.85[K] <x、y平均絶対偏倚= 0.6771e-02="" 14="" 計算点数:=""></x、y平均絶対偏倚=> |
| < 成分 1 Kidの絶対値平均偏倚: 4.27L&」 計算点数: /> < 成分 2 Kidの絶対値平均偏倚: 13.35[%] 計算点数: 7> |
| T= 229.00[C] = 502.15[K] < x、y平均絶対偏倚= 0.4955E-02 計算点数: 14> < 成分 1 K値の絶対値平均偏倚: 5.50[%]計算点数: 7> < 成分 2 K値の絶対値平均偏倚: 3.42[%]計算点数: 7> |
| T= 269.00[C] = 542.15[K] < x、y平均絶対偏倚= 0.1032E-01 計算点数: 12> < 成分 1 K値の絶対値平均偏倚: 5.01[%] 計算点数: 6> < 成分 2 K値の絶対値平均偏倚: 5.81[%] 計算点数: 6> |
| T= 302.00[C] = 575.15[K] < x、y平均絶対偏倚= 0.7014E-01 計算点数: 6> < 成分 1 K値の絶対値平均偏倚: 35.70[%] 計算点数: 3> < 成分 2 K値の絶対値平均偏倚: 29.29[%] 計算点数: 3> |
| 実験データセット番号(02)を入力してください (0:実験データ処理 -1:物質コード番号 -2:純物質物性 -3:mij -4:終了) |

-4: 終了する。(この時点で一通りの計算が終了している。)



Enter: どのキーでもよいが、押すと、プログラムは消える。そして、詳細な結果が"kekka" フォルダの"fort.7.txt"と、解析用の実験結果だけが書き込まれたものである"fort.8.txt" に出力される。

3.2.4.2 bcomp.exe の出力結果(fort.7.txt の概要)



2 0.929600 0.925922 0.093600 0.0812 60 0.1007E+00 0.8775E-01 12.85↓ 61 47 62 ↓ 188.70 0.14990E+03 8.178 3.6136 1 0.102300 0.108307 0.928400 0.9415 0.9075E+01 0.8693E+01 4.21↓ 63 64 28 2 0.897700 0.891693 0.071600 0.0584 65 66 72 0.7976E-01 0.6557E-01 17.78↓ 67 ↓ 188.70 0.20020E+03 8.427 4.6770 1 0.133100 0.139496 0.937400 0.9534 68 69 03 0.7043E+01 0.6835E+01 2.96↓ 70 l 2 0.866900 0.860504 0.062600 0.046! 71 72 73 74 97 0.7221E-01 0.5415E-01 25.01↓ ↓ 188.70 0.25040E+03 8.669 5.6810 1 0.164500 0.167787 0.943000 0.960: 86 0.5733E+01 0.5727E+01 0.10↓ 2 0.835500 0.832213 0.057000 0.039 75 76 14 0.6822E-01 0.4700E-01 31.11↓ 77 ↓ <---- x、y平均絶対偏倚 = 0.6771E-02 計算点数: 14 <---- x 平均絶対偏倚: 0.3405E-02 □ 計算点数: 7 78 ---->↓ 79 ---->↓ <---- y 平均絶対偏倚: 0.1014E-01 □ 計算点数: 7 ---->↓ <---□ 成分 1 K値の平均絶対偏倚 4.27[%] 計算点数: 7 --->↓ <---□ 成分 2 K値の平均絶対偏倚 13.35[%] 計算点数: 7 --->↓ 80 81 82 83 11 84 \downarrow ****H2-TOLUENE 85 の気液平衡*****↓ 86 87 データ源: JAMES J. SIMNICK, HERBERT M. SEBASTIAN, HO-MU, AND CHAO 1(91)-1 88 J. 89 1 90 | ↓ 188.70[C] = 461.85[K]↓ 91 T= 92 圧力単位 (垂直軸)= (atm)↓ 93 1 94 95 Τ 96 1 97 98 1 99 J. 100 101 | ↓ 102 \downarrow 103 ***** P-x diagram ***** 104 Ļ 105 * : experimental(liquid) 106 o : experimental(vapour) 107 : calculated 108 0.2504E+03 i o. i↓ 109 Х 110 0.2421E+03 i i↓ . . 111 0.2337E+03 i↓ 0.2254E+03 i↓ 112 . . 113 0.2170E+03 i↓ . . 0.2087E+03 i↓ 114 115 0.2003E+03 j↓ Х ο. 0.1920E+03 116 117 i↓ . . 0.1836E+03 i↓ 0.1753E+03 i↓ 118 . . i↓ 119 0.1669E+03 i. . . 0.1586E+03 120 i↓ 121 0.1502E+03 i↓ р х. ο. 0.1419E+03 122 i↓ r . . 123 0.1335E+03 i↓ е 0.1252E+03 124 125 S i↓ 0.1169E+03 S i↓ . . 0.1085E+03 126 i↓ u 127 0.1002E+03 ο. i↓ r Х 0.9181E+02 128 е i i↓ . . 129 0.8347E+02 i↓ -i

| 130 131 132 133 134 135 136 137 138 139 | 0.7512E+02 0.6677E+02 0.5843E+02 0.5008E+02 0.4173E+02 0.3339E+02 0.2504E+02 0.1669E+02 0.8347E+01 0.0000E+00 | × × × × | | | .× | x. | o. | |
|--|--|------------------|------|---------------------------|---------------|----------|----|------------|
| 140 141 142 143 | ţ | ++- 0 .1 | .2.3 | .4 .5 .6 mole fraction | +- .7 ↓ | +- .8 | .9 | +↓ 1.0↓ |

ここで扱った水素 - トルエン系は等温気液平衡であり、461.85K、502.15K、542.15K、 575.15K の4つの温度に対して、圧力・液組成・蒸気組成が、入力データとして用意されて いる。そのため、出力は温度ごとに行われている。これは他の系でも同様である。等圧気 液平衡でも同様で、その場合は圧力ごとに出力される。上図で示しているのは、出力デー タの一つである fort.7.txt である。(全データを載せると多すぎるので、)ここでは全データ ではなく、461.85K に対する出力データを掲載した。

上図からもわかる通り、fort.7.txt の構成は、(基データ) → (実験値と推算値の比較) → (平均絶対偏倚) → (グラフ) である。温度(あるいは圧力) が 2 つ以上の場合は、この 構成が温度(あるいは圧力)の数だけ繰り返されて出力される。

このファイルは、グラフから視覚的に推算値と実験値が合うかを見ることができる。また、平均絶対偏倚が表示されるので、どれほど推算性を持つかの一つの目安にもある。本研究室では、経験的に x, y 平均絶対偏倚が 0.03 を下回るなら、その温度において良好に推算できたと判断している。

3.2.4.3 bcomp.exe の出力結果(fort.8.txt の内容)

| 1 | C#N_Sy | stem¥kekka¥fo | rt8.txt - 秀丸 | | |
|---|-----------|-----------------------|--------------------------|------------------------------------|---------------------------------|
| | ファイル(E) 新 | 編集(<u>E</u>) 表示(⊻) | 検索(S) ウィンドウ(| ₩) マクロ(<u>M</u>) その他(<u>O</u>) | |
| | 0 🖸 | M 2 🛄 | 🔀 🔀 🔍 | | |
| | 1 | 成分 | 番号: 1 | H2 (| -ド番号:136)↓ |
| | 2 | 成分: | 蕃号: 2 H2-TOLL | toluene (⊐– JFNF | - F 畨号:IU2)↓ ↓ |
| | 4 | JAMES - | J. SIMNICK, | HERBERT M. SE | BASTIAN,HO-MU,AND CHAO 1(91)-1↓ |
| | 5 ↓ 6 | | o.k. ? | | Enter:ves N:no↓ |
| | 7 H: | 2, to | luene ,↓ | | |
| | 8 e: 9 | xp_x188.70 0.0113. | [U],exp_y18 0.6674. 2 | 88.70,PLatm] 20.0000↓ | at188./U[U]↓ |
| 1 | - 1 | , | | | |
| | 10 | 0.0187, | 0.7678, | 29.9000↓ | |
| | 11 | 0.0342, | 0.8425, | 49.7000 | |
| | 13 | 0.0704, 0.1023. | 0.9004, 0.9284. | 149.9000↓ | |
| | 14 | 0.1331, | 0.9374, | 200.2000↓ | |
| | 15 | 0.1645, al v188-7 | 0.9430, 0661 ogi v | 250.4000↓ 188 70 P[a+m | ן s+188 סטנין |
| | 17 | 0.0000, | 0.0000, | 5.8545↓ | j at100.70[0]↓ |
| | 18 | 0.0001, | 0.0146, | 5.9545↓ | |
| | 191 | 0.0002, | 0.0285, | 6.0545↓ | |
| | 201 | 0 0002 | 0 0421 | 6 15/51 | |
| | 21 | 0.0003. | 0.0421, 0.0553. | 6.2545↓ | |
| | 22 | 0.0004, | 0.0681, | 6.3545↓ | |
| | 23 | 0.0005, | 0.0805, | 6.4545↓ 6.5545↓ | |
| | 24 | 0.00000, | 0.0927, 0.6343. | 18.0818↓ | |
| | 26 | 0.0121, | 0.6663, | 20.0000↓ | |
| | 27 | 0.0203, | 0.7681, | 29.9000↓ | |
| | 29 | 0.0200, | 0.8310. | 42.53644 | |
| | | , | , | | |
| | 30 | 0.0363, | 0.8527, | 49.7000↓ | |
| | 31 | 0.0403, | U.864/, 0.8864 | 54./636↓ ee aanai | |
| | 33 | 0.0430, 0.0590. | 0.9015. | 79.2182↓ | |
| | 34 | 0.0680, | 0.9128, | 91.4455↓ | |
| | 35 | 0.0741, | 0.9188, | 99.8000↓ 102.6727↓ | |
| | 37 | 0.0708, | 0.9214, 0.9282. | 115.90004 | |
| | 38 | 0.0938, | 0.9338, | 128.1273↓ | |
| | 39 | 0.1020, | 0.9384, | 140.3545↓ | |
| 1 | 101 | 0 1083 | 0 0/15 | 1/10 00001 | |
| | 41 | 0.1100. | 0.9413, 0.9423. | 152.5818↓ | |
| | 42 | 0.1179, | 0.9457, | 164.8091↓ | |
| | 43 | 0.1255, | 0.9487, 0.0513 | 177.U364↓ 180.26361 | |
| | 45 | 0.1395. | 0.9534. | 200.2000 | |
| | 46 | 0.1403, | 0.9537, | 201.4909↓ | |
| | 4/ 18 | U.14/4, 0 1577 | U.955/, n q576 | 213.7182↓ 225 q4551 | |
| | 49 | 0.1611, | 0.9593, | 238.1727↓ | |
| | | | | 050 1000 | |
| | <u>50</u> | U.16/8, | 0.9609, | 250.4000↓ | |

fort.8.txt は、(実験値) → (推算値) という構成される。これも fort.7.txt 同様に、温度(あるいは圧力) が複数個ある場合は、温度(あるいは圧力) の数だけ繰り返され、出力される。Excel や Sigma Plot などで後処理用ために出力されるファイルである。

3.2.4.4 出力ファイルの後処理の流れ

計算後のファイルは、次に示すように系ごとにフォルダ分けして、保存した。必ずしも 保存する必要は無いが、系ごとに分けて保存しておくと、たくさんの系について演算を行 った時に、混乱を招きにくく、全体のまとめを行う際にも便利であるように思われる。

| <mark>踚 (BWR−EOS)推算になる系</mark> | | | |
|--|-----------------------------|-----------------|----------|
| ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入 | り(A) ツール(エ) ヘルプ(H) | | A |
| 🌀 戻る 🔹 🕥 🚽 🏂 🔎 検索 | 🎼 フォルタ 🏢 🧏 フォルター同期 | | |
| アドレス(D) 🛅 G:¥10study¥N-system実験¥ | 【推算性】PR、BWR¥(BWR-EOS)推算になる系 | | 🗸 🄁 移動 |
| ファイルとフォルダのタスク < | 122(06-016) | 123(cylC6-C16)) | <u>^</u> |
| このフォルダを Web に公開する このフォルダを共有する | 124(CO2-C20) | 125(CO2-C13) | ≡. |
| その他 🏾 🙁 | 127(CO2-C16) | 135(C1-C18) | |
| □【推算性】PR、BWR □ マイドキュメント □ 共有ドキュメント □ 共有ドキュメント | 136(C2-C18) | 137(C3-C18) | _ |
| २ २ २ २ | 138(C2'-C18) | 139(C'3-C18) | |
| 詳細 ② (BWR-EOS)推算になる系 | 140(C1-C20) | 141(C2-C20) | |
| ファイル フォルタ 更新日時: 2010年6月10日、17:58 | 142(C3-C20) | 143(02'-020) | |
| | 144(C3'-C20) | 145(C1-C16) | |
| | 146(C2-C16) | 250(1-C8'-EB) | × |

それぞれのフォルダの中身は以下の通りである。



上記のように、"fort.7.txt"、"fort.8.txt"、"fort.8.xls"、"Notebook.JNB"を基本とした。(何 を残し、何を残さないかは、個人の嗜好であるように思われるが、この計算で値が変わる ことはないので、一度計算したものは面倒ではあるが、最低限"fort.7.txt"、"fort.8.txt"く らいは残しておいた方が良いように思われる。)

"fort.8.xls"は"fort.8.txt"を Excel で読み込み、Excel VBA (Excel 搭載のプログラミン グ言語)で処理して、グラフを書きやすいように処理したファイルである。

"Notebook.JNB"は、Sigma Plot というソフトウェアで"fort.8.xls"を読み込み、グラフ 化したファイルである。

ここまでの操作が、一つの系について行われる操作である。以下にさらに詳しい方法を 載せた。

3.2.4.5 (fort.8.txt) \rightarrow (fort.8.xls)

テキストファイルは、単純に Excel にドラッグドロップしただけでは変換されない。以下 にその方法を示す。

| | X a +9 - 0+ - = | Book1 - Microsoft E | ixcel |
|---|-----------------------------------|--|-------|
| | 77112 赤-ム 挿入 | ページレイアウト 数式 データ 校開 表示 開発 | |
| | ↓ 上書き保存 □ 名前を付けて保存 | 最近使用したプック | 最近使用 |
| < | | fort71.xlsx | 2 |
| | 信報 | fort71.xlsx - () マイドキュメント - () | 2 |
| | 最近使用した | BWR用)fort.8→Sigmaplot変換プログラム.xls G:¥VBA Source-Experimental | 6 |
| | 77-11/2 9618/255t | Collメタンvsその他2成分系一覧.xlsm G:¥10study¥N-system実験¥【非個性物性】Opt.mij決定 | 2 |
| | EDRI | 【04】アルカンvsアルカン2成分系一覧.xlsm G:¥10study¥N-system実験¥【非極性物性】Opt.mij決定 | 2 |
| | 保存と送信 | 最適mij修論用まとめ、xlsx デスクトップ | |
| | へルプ | 【12】CCl4,CF4,CS2 vs.その他2成分系一覧.xlsx G:¥10study¥N-system実験¥【非磁性物性】Opt.mij決定 | 2 |
| | 175a> | 【11】アセチレン vs.その他2成分系一覧.xlsx G:¥10study¥N-system実験¥【非磁性物性】Opt.mij決定 | 2 |
| | ≥ 終了 | 【10】COvsその他2成分系一覧.xlsx G:¥10study¥N-system実験¥【非極性物性】Opt.mij決定 | 2 |
| | | 【09】N2vsその他2成分系一覧.xlsx G:¥10study¥N-system実験¥【非磴性物性】Opt.mij決定 | 2 |
| | | ② 【08】H2Svs.その他2成分系一覧.xlsm | 2 |

[ファイル]のタブの[開く]を選択する。

| ファイルを開く | | | | ? 🔀 |
|---|---|---|---------|---------|
| ファイルの場所(1): | C 715(N2+iC5) | ~ | (d) = 🚺 | × 📸 🎫 • |
| していたつアイル | C BWRcomp.only BWRmij→BWRcomp Tort8.txt | | | |
| ごうしょう ひんしょう ひんしょう ひんしょう ひんしょう ひんしょう ひんしょう ひんしゅう ひんしゅ ひんしゅう ひんしゅう ひんしゅ ひんしゅう ひんしゅ ひょう ひんしゅ ひんしゅ ひんしゅう ひょう ひょう ひんしゅう ひんしゅ ひんしゅ ひんしゅ ひんしゅう ひんしゅう ひんしゅう ひんしゅう ひんしゅう ひんしゅう ひんしゅう ひんしゅう ひんしゅう ひんしゅ ひょう ひんしゅ ひんしゅ ひんしゅ ひんしゅ ひょ ひんしゅ ひんしゅ ひょ ひんしゅ ひんしゅ ひんしゅ ひんしゅ ひょ ひんしゅ ひんしゅ ひょ ひんしゅ ひんしゅ ひんしゅ ひんしゅ ひんし ひんしゅ ひんしゅ ひんし ひんし ひんし ひんし ひんし ひんし ひんし ひん ひんし ひんし | | | | |
| 71 F#1X21 | | | | |
| 71 I)LI-9 | | | | |
| र्ग २१७-७ | | | | |
| | 7元(1).2(N): | | | |
| | ファイルの種類(I): すべてのファイル (**) | _ | ~ | |
| <u> ツール(L) ・</u> | | | 開((0) - | キャンセル |

必ず、"ファイルの種類"を"すべてのファイル(**)"にする。そうでなければ、テキ ストファイルは表示されない。"fort.8.txt"を選択し、開く。

| ቻትスト ファイル ウィザード − 1 / 3 | ? 🗙 |
|--|------|
| 選択したデータは区切り文字で区切られています。 D次へJ をクリックするか、区切るデータの形式を指定してください。 。元のデータの形式 | |
| データのファイル形式を選択してください: ● (ガンマやタブなどの区切り文字によってフィールドごとに区切られたデータ(D)) ○ スペースによって右または左に揃えられた固定長フィールドのデータ(W) | |
| 取り込み開始行(E): 1 | ~ |
| ファイル G¥10study¥N-system実験¥【推算性】PR、BWR¥(BWR-EOS)推算になる系¥715(N2+iC5)¥fort.8.txt のプレビ | |
| 1 成分番号: 1 N2 (コード番号:117) 2 成分番号: 2 i-C5H12(コード番号: 7) 3 N2(nitrogen)+I-C5H12(2-methylbutane,iso- 4 KRISHNAN,T.R., KAIRA,H., ROBINSON,D.B. J.CHEM.ENG.DATA, 22(| < |
| | 7(E) |

"カンマやタブの区切り文字によってフィールドに区切られたデータ"にチェックがついていることを確認する。

| テキスト ファイル ウィザー | -K - 2 / 3 | ? 🗙 | | | | | | | | | | | |
|--------------------|---|-------------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
| フィールドの区切り文字を指知 | フィールドの区切り文字を指定してください。[データのプレビュー] ボックスには区切り位置が表示されます。 | | | | | | | | | | | | |
| 区切9文字 | | | | | | | | | | | | | |
| ✓ タブ(T) | | | | | | | | | | | | | |
| セミコロン(M) | □ 連続した区切り文字は1 文字として扱う(R) | | | | | | | | | | | | |
| ✓ カンマ(C) | 文字列の引用符(Q): ″ | | | | | | | | | | | | |
| □ スペース(<u>S</u>) | | | | | | | | | | | | | |
| □ その他(Q): | | | | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | |
| ≓、 5の #1 18- × (D) | | | | | | | | | | | | | |
| J-30070E1-(E) | | | | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | |
| 成分番号: 1 | N2 (コード番号:117) | <u>></u> | | | | | | | | | | | |
| 成分番号: 2 | i-C5H12(コード番号: 7) | | | | | | | | | | | | |
| N2(nit KRISHNAN | trogen)+1-05H12(2-methylbutane jiso- T R KATRA H RORINSON D R L CHEM R | м 🗸 | | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | |
| (| | | | | | | | | | | | | |
| | キャンセル 〈 戻る(B) ↓ 次へ(N) 〉 完了 | Ð | | | | | | | | | | | |

"カンマ"にチェックを入れる。

| テキスト ファイル ウィザード - 3 ル | / 3 | |
|--|---|----|
| 区切ったあとの列のデータ形式を選択し 列のデータ形式 ③ G/標準(G) ○ 文字列(T) ○ 日付(D): YMD ○ 削除する(D) -データのプレビュー(P) | してください。 [G/標準]を選択すると、数字は数値に、日付は日付形式の値に、その他の値は文字 変換されます。 詳細(<u>A</u>)… | 列に |
| G/標準 | B/標準B/標準 B/標準B/標準 B/標準B/標準 | |
| 成分番号: 1 N2 成分番号: 2 i-C5H N2(nitrogen)+: KRISHNAN ✔ | (コード番号:117) 12 (コード番号: 7) I-C5H12(2-methylbutane T.R. KAIRA H. ROBINSON D.B. J.CHEM.EN | |
| | キャンセル く戻る(B) 次へ(N) > (<u>売了(</u> F |) |

この画面は、そのままで良いので"完了"をクリックする。

次のように表示されていれば、ファイルの変換は完了である。保存する際は、"名前を付けて保存する"を選択し、"Excel97-2003 有効ファイル"にして "fort.8.xls" として保存する。

| 🗶 🚺 | - 19 · (° · | - - | | | | | | | for |
|--------|-----------------------------|------------------|----------------|----------------|---------|-------|------|---------|-----|
| 771 | ル ホーム | 挿入 | ページ レイアウ | か 数式 | データ | 校閲 | 表示 | 開発 | |
| f | м | S Pゴシック | * | 11 · A | | = | \$/~ | 書 折り返し | バ全 |
| 貼り作 | jは | I <u>U</u> · | 🖂 🔹 🔕 | · <u>A</u> · 🚆 | • E = | 1 | • | 🔤 セルを結 | 皆し |
| クリッフ | オード 🖬 | | フォント | | G. | | 百 | 置 | |
| | A1 | • | f _x | 成分 |)番号: 1 | N2 | (⊐- | ·ド番号:11 | 17) |
| | A | В | С | D | E | F | - | G | |
| 1 | 成分 | 番号:1 № | J2 (⊐− | ド番号:11 | 7) | | | | |
| 2 | 成分 | 番号: 2 i | -C5H12(⊐ | ド番号: | 7) | | | | |
| 3 | | iso- | | | | | | | |
| 4 | KRISHI | T.R. | KAIRA | H. | ROBINSC | DD.B. | | | J.C |
| 5 | | 0 | | - . | | | | | |
| 07 | 0.1 | C ? LOELMA | | Enteriyes | N:no | | | | |
| / | NZ ovo v ⁰⁷⁷⁵ | 1-00H12 | | 277 59[2] | | | | | |
| a a | 0.0024 | 0.822 | ∩1827 | 211.00[[1] | | | | | |
| 10 | 0.0024 | 0.022 | 0.1627 | | | | | | |
| 11 | 0.0152 | 0.968 | 0.9894 | | | | | | |
| 12 | 0.0354 | 0.982 | 1.9167 | | | | | | |
| 13 | 0.0504 | 0.986 | 3.2129 | | | | | | |
| 14 | 0.0866 | 0.991 | 5.5606 | | | | | | |
| 15 | 0.143 | 0.994 | 9.1631 | | | | | | |
| 16 | 0.201 | 0.991 | 13.0965 | | | | | | |
| 17 | 0.24 | 0.985 | 15.9854 | | | | | | |
| 18 | 0.26 | 0.987 | 18.433 | | | | | | |
| 19 | 0.281 | 0.982 | 20.5014 | | | | | | |
| 20 | cal_x277.58 | cal_y277.58 | PLMPa] at: | 277.59[K] | | | | | |
| 21 | 0.0044 | 0.7004 | 0.0396 | | | | | | |
| 22 | 0.0041 | 0.7091 | 0.1390 | | | | | | |
| 23 | 0.0000 | 0.7703 | 0.1027 | | | | | | |
| 25 | 0.0121 | 0.8772 | 0.3396 | | | | | | |
| 26 | 0.016 | 0.904 | 0.4396 | | | | | | |
| 27 | 0.0166 | 0.9071 | 0.4551 | | | | | | |
| 28 | 0.0199 | 0.9208 | 0.5396 | | | | | | |
| 29 | 0.0238 | 0.9324 | 0.6396 | | | | | | |
| 30 | 0.0276 | 0.9408 | 0.7396 | | | | | | |
| 31 | 0.037 | 0.9545 | 0.9894 | | | | | | |
| 32 | 0.0397 | 0.9572 | 1.0627 | | | | | | |
| 33 | 0.07 | 0.9738 | 1.9167 | | | | | | |
| 34 | 0.0757 | 0.9754 | 2.0858 | | | | | | |
| 35 | 0.1085 | 0.9814 | 3.1089 | | | | | | |
| 37 | 01387 | 0.9010 | J.ZTZ9 4132 | | | | | | |
| 38 | 01664 | 0.9858 | 5 1 5 5 1 | | | | | | |
| 39 | 0,1768 | 0.9862 | 5,5606 | | | | | | |
| 40 | 0.1921 | 0.9866 | 6.1782 | | | | | | |
| 41 | 0.2161 | 0.9871 | 7.2012 | | | | | | |
| 42 | 0.2385 | 0.9874 | 8.2243 | | | | | | |
| 43 | 0.2578 | 0.9874 | 9.1631 | | | | | | |
| 44 | 0.2595 | 0.9874 | 9.2474 | | | | | | |
| | ▶ ▶ fort.8 | 200074 | 10.0705 | | | | | | |
| コマン | 18 🔚 🗌 | | | | | | | | |

次に、"fort.8.xls"は開いたまま、"(BWR 用)fort.8→Sigmaplot 変換プログラム.xls"を開き、 "ALT"+"F11"をクリックする。すると、次のような画面が開く。("(BWR 用)fort.8→Sigmaplot 変換プログラム.xls"は、ファイル操作を簡単にするために私が書いたプログラムであり、 研究室として残すかは分からない。プログラムコードは Appendix に載せたので必要ならプ ログラムにおこせばよい。)

詹 Microsoft Visual Basic for Applications - (BWR用)fort.8→Sigmaplot変換プログラム.xls - [Module... 🔲 🗖 🗙 ペ ファイル(E) 編集(E) 表示(Y) 挿入(I) 書式(Q) デバッグ(D) 実行(R) ツール(I) アドイン(A) ウィンドウ(W) _ 8 × : 國 🔤 - 🛃 | 🍐 🗈 🏝 🎒 1 ヴ (** | 🕨 💷 🕍 😻 😭 😽 😕 1 行, 1 桁 Ŧ (General) ▼ sort • <mark>βub</mark> sort() • Dim x() As Variant, y(100) As Double, z(100) As Double Dim i As Integer, j As Integer, n As Integer Dim o As Double, Count As Double, Count2 As Integer Dim Flag As Integer Dim k As Integer '最初の″exp_″までの数を数える Approve and a content of the co i区切り数を数える Count2 = 0# For o = n To 65536 If Cells(o, 1).Value Like "*cal*" Then Count2 = Count2 + 1 End If If Cells(o, 1).Value Like "*exp*" Then Count2 = Count2 + 1 ▶

(これは ExcelVBA の画面である。)

開いている Window が、手前から"Microsoft Visual Basic for Applications"、"fort.8.xls"の順になるように並び替える。つまり、丁度、次の画面のような状態にする。

| アイム 単入 パーシレイア)ト 気気、データ 収益、素、酸塩 ● </th <th></th> <th>, ⊮) - (° -</th> <th>- -</th> <th></th> <th></th> <th></th> <th></th> <th>fort</th> <th>.81 [互換]</th> <th>E-K]</th> <th>- Micros</th> <th>oft Excel</th> <th></th> <th></th> <th></th> <th></th> <th></th> <th></th> <th></th> <th></th> <th></th> <th>- 8</th> <th>23</th> | | , ⊮) - (° - | - - | | | | | fort | .81 [互換] | E-K] | - Micros | oft Excel | | | | | | | | | | - 8 | 23 |
|--|-------------|------------------|----------------------------------|--------------------------------|-------------|------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------|--------------------|-------------------|------------|--------------------|--------------------------|-------------------|---------|---------------|----------|------------|-----------------------|-------|-----|
| Image: Second control in the secon | 771 | ルホーム | 挿入 | ページ レイアウト 数式 | データ | 校閲 | 表示 | 、 開発 | | | | | | | | | | | | | ~ (|) — P | 23 |
| F12 ・ <th< td=""><td>貼り(クリッフ</td><td>が、一下 ら が、一下 ら</td><td>S Pゴシック 8 <i>I</i> <u>U</u> -</td><td>- 11 - A^</td><td>A* ≡ * ≡</td><td>- -</td><td>≫- 律律</td><td>言: 折り返し 国: セルを結 記置</td><td>って全体を表示 皆合して中央指</td><td>₹する 1え + 12</td><td>標準 99 - %</td><td>, │ *.68</td><td>.00 .00</td><td>条件付き 書式 ▼</td><td>テーブルとして 書式設定・ スタイル</td><td>セルの スタイル・</td><td>₩ 挿入</td><td>計 削除 マル</td><td>書式 *</td><td>Σ * </td><td>並べ替えと フィルター・ 編集</td><td></td><td></td></th<> | 貼り(クリッフ | が、一下 ら が、一下 ら | S Pゴシック 8 <i>I</i> <u>U</u> - | - 11 - A^ | A* ≡ * ≡ | - - | ≫- 律律 | 言: 折り返し 国: セルを結 記置 | って全体を表示 皆合して中央指 | ₹する 1え + 12 | 標準 99 - % | , │ *. 68 | .00 .00 | 条件付き 書式 ▼ | テーブルとして 書式設定・ スタイル | セルの スタイル・ | ₩ 挿入 | 計 削除 マル | 書式 * | Σ * | 並べ替えと フィルター・ 編集 | | |
| A B C D E F G H I J K L M N O P O 2 広分類号: 1 2 ⊢OSH12 (1→+番号: 7) C Microsoft Visual Basic for Applications (5WR)/JOrf.5+t3[enaplot2%分1/74.4s = [Module] Image: C | | F12 | - | (fx | | | | | | | | | | | | | | | | | | | ~ |
| 1 成分番号: 1 NC (□=F番号: 17) 3 bor bor 4 KRISH TR KARA H. 5 No bor bor bor 6 o.k ? Enteryee Nno bor c bor 7 N2 HOSH12 bor c bor c c c 9 00024 0822 01827 for a c | | A | В | C D | E | | F | G | Н | | I | J | | К | L | M | | N | 0 | | Ρ | Q | |
| 2 成方電行:2 FCSH12 (1→+ 留方:7) Microauft Visual Bails for Applications - (GWR用))fort 8→Signaplot 201571, xis - Module. 4 KRISHITR. KAIRA H. ROBIN Amage: Comparison of C | 1 | 成分 | 醫号: 1 ▶ | 42 (コード番号:11) | 7) | | | | | | | | | | | | | | | | | | - |
| 3 00000 00000 0000000 0000000 0000000 0000000 0000000 00000000 00000000 0000000 00000000 00000000 000000000 0000000000 0000000000000 000000000000000000000000000000000000 | 2 | 成分1 | 當号: 2 i | -C5H12 (コード 蕃号: | 7) | | | | | | | | | | | | | | | _ | | | - |
| ・ Nutrice Nutrice Nutrice ・ Product | 3 | KDICH | 150- T.D. | KATDA LI | DODIN | hia 🚰 | rosoft | Visual Bas | ic for App | licatio | ons – (B | WR用)for | t.8→S | Sigmapl | ot変換プログ | ブラム.xls - | Mod | ıle [| | | | | - |
| 0 0.k? Enteryes Nno 小パパロ mage パパロ mage < | - 4 | NRIS HI | 1.R. | NAUKA II. | ROBIN | : 20 - | ファイル(E) | 絙住(F) | 表示(\/) ; | 盖入(T) | ま式(の |) <i>∓/(w/</i> | (D) | 実行(β) | ₩-1L(T) | アドイン(A) | 1 th/2 | 。 下ウ(W) | | - | | | |
| 7 N2 PC5H12 PC5H12 PC5H12 8 exp,22775 exp,22775 pp(MPa] at 2775 pp(M PC PC PC PC 10 0.0024 0822 01827 PC | 6 | 0. | (? | Enterves | N:no | | パーロン(<u>に</u>) ポ(ロ) | AMESHC(<u>C</u>) | 4xxx(<u>₹</u>) : | ₩/\(<u>I</u>) | 8-20(2 | 2) 77(95 | (2) | 9613 (<u>15</u>) | > /v(<u>1</u>) | 71·12(<u>A</u>) | , ,,,, | 1 2(11) | | × – | | | - = |
| 8 exp.2775 5 (my.2775 5 (my.2775 5 (my.2) image: state integer image: state integer 9 0.0024 0.822 0.1827 (General) image: state integer 10 0.0051 0.831 0.4551 image: state integer image: state integer 12 0.034 0.896 32129 image: state integer image: state integer 14 0.0664 0.891 13.0665 image: state integer image: state integer 16 0.201 0.991 13.0665 image: state integer image: state integer 18 0.266 0.981 13.0665 image: state integer image: state integer 19 0.231 0.982 0.0396 image: state integer image: state integer 19 0.231 0.982 0.0396 image: state integer image: state integer 19 0.231 0.982 0.0396 image: state integer image: state integer 23 0.0041 0.0376 0.1827 image: state integer image: state integer 24 0.0041 0.2386 0.3386 image: state intege: state integer | 7 | N2 | H05H12 | Entoriyoo | 14.110 | : / 0/. | | | | | | | ~ * | | - | | | | | ^ <u> </u> | | | |
| 9 0.0024 0.822 0.1827 (General) sort 10 0.0051 0.931 0.4551 | 8 | exp_x277.5 | exp_y277.5 | P[MPa] at277.59[K] | | | 🔛 × 🖬 | 1 X 49 1 | 8 H 19 | C. | 00 0 | i 👱 👌 | <u> 1</u> | 👻 🖄 🛛 | 3 1行,1 | 「桁 | | | Ŧ | | | | |
| 10 0.0051 0.981 0.4551 11 0.0152 0.966 0.9894 0.011 12 0.0054 0.982 1.9167 0.011 13 0.0504 0.9864 3.2129 0.011 0.011 As Variant, y(100) As Double, Z(100) As Double 0.011 As Variant, y(100) As Double, Z(100) As Double 14 0.0666 0.981 5.5606 0.011 As Variant, y(100) As Double, Z(100) As Double, Z(100) As Double 0.011 As Variant, y(100) As Double, Z(100) As Double 15 0.143 0.984 9.1631 0.011 As Variant, y(100) As Double, Z(100) As Double, Z(100 | 9 | 0.0024 | 0.822 | 0.1827 | | (Ger | ieral) | | | | | • | sort | | | | | | - | | | | |
| 11 0.0152 0.9666 0.9694 ● 12 0.0354 0.9894 ● ● 13 0.0504 0.9866 3.2129 ● ● 14 0.0266 0.991 5.5606 ● | 10 | 0.0051 | 0.931 | 0.4551 | | | ub sort | 0 | | | | | | | | | | | _ | 7 | | | |
| 12 0.0354 0.9822 19107 13 0.0504 0.986 32129 14 0.0366 0.991 55506 15 0.143 0.994 9.1631 16 0.201 0.991 13.0955 17 0.24 0.982 15.5854 18 0.26 0.987 15.8584 19 0.221 0.982 205014 20 cal_27755cal_y27756P[MPa] at27759[K] If Galls(o, 1).Value Like "*exp#" Then to 1 for the state of the sta | 11 | 0.0152 | 0.968 | 0.9894 | | | | | (100) | | | (100) | | | | | | | - | | | | |
| 13 0.0504 0.9866 3.2129 Dim is As Double, Count 2 As Integer 14 0.0666 0.981 5.5506 Dim is As Integer 15 0.143 0.994 91631 Dim is As Integer 16 0.201 0.991 13.0865 ''Amon "exp." # Common State Dim is As Integer 18 0.224 0.985 15.58654 ''Amon "exp." # Common State Dim is As Integer 18 0.226 0.987 18.433 -''Entities (and the state Dim is As Integer 19 0.221 0.982 0.0396 -''Entites (and the state Dim is As Integer 20 cal_x277.55cal_v277.55cm/WPa Jat277.59G/W -''Entites (and the state The ison ison state -'''Entites (and the state 21 0.00 0.0396 -''' <ett (b)="" 2.0<="" bit="" td="" ±=""> Count 2 - ''' -'''' 23 0.0058 0.7763 0.1827 '''' ''''' ''''''' 24 0.0061 0.8281 0.2396 -'''''' ''''''''''''''''''''''''''''''''''''</ett> | 12 | 0.0354 | 0.982 | 1.9167 | | | im x() im i As | As Varian Integer | t, y(100) i As Inte | As Do | uble, z n As In | (100) As tever | Doubl | le | | | | | | | | | |
| 14 0.0866 0.981 55606 Dim Flag As Integer 15 0143 0.984 91631 Dim K As Integer 16 0.201 0.991 13.0865 "#?" #?" 17 0.24 0.985 15.9854 " "" 18 0.26 0.987 18.433 " " 19 0.281 0.982 20.5014 " " #?" "" 20 cal_277.55 [MPa] at 27.59 [M] If Cells(s, 1). Value Like "*exp*" Then " | 13 | 0.0504 | 0.986 | 3.2129 | | Ď | im o As | Double | Count As [| louble | , Count | 2 Ås Int | eger | | | | | | | | | | |
| 15 0.143 0.994 9.1631 16 0.201 0.994 13.0965 "#################################### | 14 | 0.0866 | 0.991 | 5.5606 | | | im Flag | As Integ | er | | | | | | | | | | | | | | |
| 16 0.201 0.981 13.0965 17 0.24 0.985 15.9854 "最初の"exp_" までの数を数える 18 0.26 0.987 18.433 " 19 0.281 0.982 20.5014 " 20 cal_x2775(cal_y2775F)(MPa] at 27759[K] " " " 21 0 0 0.0396 " " " 22 0.0041 0.6281 0.2386 " " " " 23 0.0058 0.7763 0.1827 " | 15 | 0.143 | 0.994 | 9.1631 | | L L | THE K MS | Inceger | | | | | | | | | | | _ | | | | |
| 17 024 0.985 15.9854 18 0.26 0.987 18.433 19 0.221 0.982 20.5014 20 cal_x277.55 [MPa] at277.59[K] If Gells(s, 1).Value Like "*exp*" Then End If 21 0 0.0396 If Gells(s, 1).Value Like "*exp*" Then End If 22 0.0041 0.7061 0.1386 23 0.0058 0.7763 0.1827 24 0.0061 0.8281 0.2396 25 0.016 0.904 0.4396 26 0.016 0.904 0.4396 27 0.016 0.904 0.4396 28 0.0238 0.9324 0.63396 29 0.0237 0.9324 0.3396 30 0.0276 0.9408 0.7396 31 0.037 0.9545 0.9894 32 0.0397 1.9867 Image: State Sta | 16 | 0.201 | 0.991 | 13.0965 | | | 思 an m m | | 小米ケ大米ケー | z | | | | | | | | | | | | | |
| 18 026 0987 18:433 For 0 = 1 To 65368 19 0.210 0.982 205014 For 0 = 1 To 65368 20 cal_x27755cal_y27755P(MPa] at27759(X) For 0 = 1 To 65368 For 0 = 1 To 65368 21 0 0.0396 For 0 = 1 To 65368 For 0 = 1 To 65368 22 0.0041 0.7091 0.1396 For 0 = 1 To 65536 23 0.0058 0.7763 0.1827 'E (1) bit ± ± 2 a 2 24 0.0061 0.8281 0.2396 Count 2 = 0 65598 25 0.0121 0.8772 0.3396 For 0 = 1 (60, 1).Value Like "scal#" Then Count 2 = 10 65598 27 0.0166 0.904 0.4396 Count 2 = 0 count 2 + 1 28 0.0238 0.6396 Count 2 = 0 count 2 + 1 Count 2 = 0 count 2 + 1 30 0.0276 0.9408 0.7396 If If 0 elis (0, 1).Value Like "scap#" Then Count 2 = 0 count 2 + 1 31 0.037 0.8572 1.9667 If 0 elis (0, 1).74 a elis (0, 1).74 a elis (0, 1).75 elis (| 17 | 0.24 | 0.985 | 15.9854 | | n | = 1 | exp_ at c | 0.987.02.987.7 | . ବ | | | | | | | | | | | | | |
| 19 0.281 0.382 20.5014 11 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 | 18 | 0.26 | 0.987 | 18.433 | | F | or or = | 1 To 6553 | 6) Uslus II | | | | | | | | | | | | | | |
| 20 000000000000000000000000000000000000 | 19 | 0.281 | 0.982 | 20.5014 D[MD=] =#077 E0[/] | | | II C | Exit For |).value Li | ке + | exb* i | nen | | | | | | | | | | | |
| 21 0.00 0.0 | 20 | Gal_X277.58 | cal_yz77.58 | 0.030e | | | End | If | | | | | | | | | | | | | | | |
| 12 00047 0.0105 0.1827 23 00058 0.7763 0.1827 24 00061 0.8281 0.2396 25 0.0121 0.8772 0.3396 26 0.016 0.9071 0.4551 27 0.0166 0.9071 0.4551 28 0.0199 0.9208 0.5396 29 0.0238 0.9324 0.5396 29 0.0237 0.9545 0.9894 30 0.00276 0.9468 0.7396 21 0.0397 0.9572 1.0627 31 0.007 0.9754 2.0858 32 0.00375 0.9754 2.0858 32 0.0175 0.9754 2.0858 32 0.0175 0.9754 2.0858 33 0.107 0.9754 2.0858 34 0.0170 0.9818 3.2129 | 21 | 0.00/1 | 0.7091 | 0.0390 | | N | ext o | n + I | | | | | | | | | | | | | | | |
| 24 0.0010 0.2336 0.2336 25 0.0121 0.8772 0.3396 26 0.016 0.904 0.4396 27 0.0166 0.904 0.4396 28 0.0199 0.9208 0.5396 29 0.0238 0.9324 0.6396 30 0.0276 0.9408 0.7396 31 0.037 0.9554 0.9894 32 0.0397 0.96572 1.0627 33 0.0757 0.9754 2.0658 35 0.1052 0.9754 2.0658 35 0.1052 0.9818 3.1282 | 23 | 0.0041 | 0.763 | 01827 | | | er in ca | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 25 00121 08772 03396 For 0 = n To 65568 26 0016 0.904 0.4396 Gunt2 = count2 + 1 27 00166 0.9071 0.4551 If 28 00199 0.9208 0.8396 Count2 + 1 29 0.0238 0.8324 0.6396 If 30 0.0276 0.9408 0.7396 If 31 0.037 0.9545 0.9894 Image: Count2 + 1 32 0.0397 0.9547 1.9824 Image: Count2 + 1 33 0.07 0.9754 0.9658 Image: Count2 + 1 35 0.1075 0.9754 2.0658 Image: Count2 + 1 36 0.117 0.9818 3.128 Image: Count2 + 1 36 0.1117 0.9818 3.129 Image: Count2 + 1 | 24 | 0.0081 | 0.8281 | 0.2396 | | ſ | 区切り到 ount2 = | ₩を致える : 0# | | | | | | | | | | | | | | | |
| 26 0.016 0.904 0.4396 If Cells(0, 1).Value Like "tells" linen 27 0.016 0.9071 0.4551 If Cells(0, 1).Value Like "tells" linen 28 0.0199 0.9206 0.5396 If Cells(0, 1).Value Like "tells" linen 29 0.0238 0.9324 0.6396 If Cells(0, 1).Value Like "tells" linen 30 0.0276 0.9406 0.7396 31 0.037 0.9545 0.9894 32 0.0397 1.9677 34 0.0757 0.9754 35 0.1075 0.9754 36 0.1117 0.9818 31 0.1117 0.9818 | 25 | 0.0121 | 0.8772 | 0.3396 | | Ě | or o = | n To 6553 | 6 | | | | | | | | | | | | | | |
| 27 0.0166 0.9071 0.4551 If end if 28 0.0199 0.8206 0.5396 If edits(o, 1). Value Life "*exp*" Then Count 2 + 1 29 0.0226 0.9324 0.6396 If edits(o, 1). Value Life "*exp*" Then Count 2 + 1 30 0.0276 0.9408 0.7396 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 31 0.037 0.9645 0.9894 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 32 0.0397 0.9738 1.9667 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 33 0.07 0.9738 1.9667 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 34 0.0757 0.9754 2.0656 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 35 0.1017 0.9818 3.1089 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 36 0.1117 0.9818 3.129 Image: Count 2 + 1 37 0.0277 0.0276 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 Image: Count 2 + 1 </td <td>26</td> <td>0.016</td> <td>0.904</td> <td>0.4396</td> <td></td> <td></td> <td>11.0</td> <td>æris(o, 1 Count2 =</td> <td>).Value Li Count2 + 1</td> <td>ке 📪</td> <td>cal≭"T</td> <td>nen</td> <td></td> | 26 | 0.016 | 0.904 | 0.4396 | | | 11.0 | æris(o, 1 Count2 = |).Value Li Count2 + 1 | ке 📪 | cal≭"T | nen | | | | | | | | | | | |
| 28 00199 0.9208 0.8386 If Cells(o. 1).Value Like **exp* Then 29 0.0238 0.8324 0.6396 | 27 | 0.0166 | 0.9071 | 0.4551 | | | End | If | | | | | | | | | | | | | | | |
| 29 0.0238 0.9324 0.6396 30 0.0276 0.9408 0.7396 31 0.037 0.9545 0.9894 32 0.0397 0.9572 1.0627 33 0.0757 0.9754 2.0585 35 0.1075 0.9754 2.0585 35 0.1079 0.9754 0.9818 36 0.1117 0.9818 3.128 | 28 | 0.0199 | 0.9208 | 0.5396 | | | If C | ells(o, 1 Count? = |).Value Li Count2 + 1 | ke "* | exb*. 1 | hen | | | | | | | | | | | |
| 90 0.0276 0.9408 0.7396 Image: Constraint of the state of | 29 | 0.0238 | 0.9324 | 0.6396 | | = = | • | vountz - | oodiitz T I | | | | | | | | | | - • • • | <u> </u> | | | |
| 31 0.037 0.9545 0.9894 32 0.0397 0.9572 1.0627 33 0.07 0.9738 1.9167 34 0.0757 0.9754 2.0658 35 0.1050 0.9814 3.1089 36 0.1117 0.9818 3.2129 | 30 | 0.0276 | 0.9408 | 0.7396 | | <u>- س</u> | - 1 | | | - | | | - | | | | - | | <u> </u> | | | | |
| 32 0.0397 0.9572 1.0627 33 0.07 0.9738 1.9167 34 0.075 0.9754 2.0658 35 0.1085 0.9614 3.1089 36 0.1117 0.99818 3.2129 | 31 | 0.037 | 0.9545 | 0.9894 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 33 0.07 0.9738 19167 34 0.0757 0.9754 2.0858 35 0.1085 0.9814 31.089 36 0.1117 0.9818 32.129 | 32 | 0.0397 | 0.9572 | 1.0627 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 34 0.0757 0.9754 2.0858 35 0.1065 0.9814 3.1089 36 0.1117 0.9818 3.2129 37 0.0917 0.0918 3.2129 | 33 | 0.07 | 0.9738 | 1.9167 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 3b 0.108b 0.9814 31.089 36 0.1117 0.9818 32129 7 0.1027 0.1040 1.100 | 34 | 0.0757 | 0.9754 | 2.0858 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | 35 | 0.1085 | 0.9814 | 3.1089 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | 36 | 0.1117 | 0.9818 | 3.2129 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

次に画面上部の再生ボタンをクリックする。

| 2 | Microsoft V | /isual Ba | sic for Ap | plication | ns – (BW | R用)fort | .8→Sigma | plot変 | 換プロ! | グラム.xl | | | | |
|-----|--|--|------------------------------------|---------------------------------|-------------------------------|-----------------------------|-------------------------|---------------|----------------|--------|--|--|--|--|
| ~ | ファイル(<u>E</u>) ハレプ(<u>H</u>) | 編集(<u>E</u>) | 表示(⊻) | 挿入(<u>I</u>) | 書式(<u>O</u>) | デバッグ(| <u>D</u>) 実行(<u>I</u> | <u>R</u>) ツ- | -ル(<u>T</u>) | アドイン | | | | |
| ÷ E | 🛛 📼 - 🛃 | 8 B | 24 🗎 | " 🧿 | > • | 🖌 💐 | 1 😚 🖀 | 0 | 1行,1 | L桁 | | | | |
| ((| (General) sort | | | | | | | | | | | | | |
| | Bub sort(Dim x() A Dim i As Dim o As Dim o Flor | () Is Variar Integer, Double, | nt, y(100 , j As In Count As |) As Dou teger, n Double, | ble, z(1 As Inte Count2 | 00) As [ger As Inte; | Double ger | | | | | | | |

すると、このように並び変わる。(このプログラムは、SigmaPlot で読み込む際に操作が楽に なるように、並び替えている。)

| | - 17 - (* | ~ - | | | | | fort | .81 [互換モ | -ド] - Micro | soft Excel | | | | | | | |
|--|------------------|-----------------------------------|--------------------|--|------------|-----------------|------------------|----------------------|---------------------------|------------|----------------------|-------------------|---------------|-------------|----------------|-----------------------|-----------|
| 771 | (ル ホー) | 」 挿入 | ページレイア | ウト 数式 | データ | 校閲 表示 | 〒 開発 | | | | | | | | |) ۵ | |
| 貼り(| । जन्म अम | MS Pゴシック B <i>I</i> <u>U</u> ~ | • & | 11 · A [*] · <u>A</u> · <u>∡</u> | | = ≫. ≡ (# (# | 高 折り返し 空 セルを称 | いて全体を表示す 結合して中央揃う | する 標準 え × 剄 × 9 | 6 · | ▼ ↓00 条件付き 書式▼ | テーブルとして 書式設定 - | セルの スタイル - | | Σ 書式 ↓ 2 | * 並べ替えと フィルター * | |
| 2799ノボート ロー ノオント ロー ロに塗 ら 数値 ら スタイル セル 福度 日本 1000 日本 10000 | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| - 4 | 10 | B | | | F | F | G | н | T | 1 | V | I | M | N | 0 | D | 0 = |
| 1 2 3 | 成分成分 | ↑番号:1 / 番号:2 so- | √2 (⊐- -C5H12(= | -ド番号:11: Iード番号: | 7) | | G | | | 0 | K | | IVI | IN | 0 | F | |
| 4 5 | KRISH | HT.R. | KAIRA | H. | ROBINSO | D.B. | | J.C.HEM.EN | 22(| | | | | | | | = |
| 7 | N2 exp_x277. | i-C5H12 5 P[MPa] at | :exp_y277.5 | P[MPa] at | exp_x310.8 | P[MPa] at | exp_y310.8 | P[MPa] at | exp_x344.1 | P[MPa] at | exp_y344.1 | P[MPa] at | exp_x377.3 | P[MPa] at: | exp_y377.3 | P[MPa] at | cal_x277. |
| 9 | 0.002 | 0.1827 | 0.822 | 0.1827 | 0.001 | 0.2241 | 0.322 | 0.2241 | 0.0027 | 0.5068 | 0.255 | 0.5068 | 0.0037 | 0.9687 | 0.163 | 0.9687 | |
| 10 | 0.005 | 0.4551 | 0.931 | 0.4551 | 0.003 | 0.3275 | 0.546 | 0.3275 | 0.0054 | 0.6447 | 0.418 | 0.6447 | 0.0085 | 1.2238 | 0.31 | 1.2238 | 0.004 |
| 12 | 0.015 | 1 1 9167 | 0.900 | 1 9167 | 0.0002 | 0.5205 | 0.723 | 0.9200 | 0.0100 | 1.21 | 0.565 | 1.21 | 0.0205 | 2.8958 | 0.400 | 2.8958 | 0.000 |
| 13 | 0.050 | 3 21 29 | 0.986 | 3.2129 | 0.0226 | 1.3755 | 0.892 | 1.3755 | 0.0238 | 1.6651 | 0.0752 | 1.6651 | 0.0753 | 4 4505 | 0.757 | 4 4505 | 0.000 |
| 14 | 0.086 | 5 5606 | 0.991 | 5 5606 | 0.0220 | 2 4097 | 0.931 | 2 4097 | 0.042 | 2 6648 | 0.831 | 2 6648 | 0112 | 6.3328 | 0.805 | 6.3328 | 0.012 |
| 15 | 0.14 | 9.1631 | 0.994 | 9.1631 | 0.0597 | 3,7748 | 0.949 | 3.7748 | 0.0598 | 3.9541 | 0.879 | 3.9541 | 017 | 9.0941 | 0.827 | 9.0941 | 0.01.6 |
| 16 | 0.20 | 13 0965 | 0.991 | 13 0965 | 0.097 | 61121 | 0.962 | 61121 | 0.0929 | 5 5468 | 0.899 | 5 5468 | 0.221 | 11 5383 | 0.835 | 11 5383 | 0.018 |
| 17 | 0.2 | 15,9854 | 0.985 | 15,9854 | 0.152 | 9.6491 | 0.965 | 9.6491 | 0.13 | 7.7738 | 0.912 | 7.7738 | 0.3 | 15.8061 | 0.83 | 15.8061 | 0.025 |
| 18 | 0.2 | 5 18,433 | 0.987 | 18,433 | 0.192 | 13,1999 | 0.965 | 13,1999 | 0.185 | 10.9246 | 0.918 | 10.9246 | 0.437 | 20,7427 | 0.78 | 20,7427 | 0.027 |
| 19 | 0.28 | 20.5014 | 0.982 | 20.5014 | 0.244 | 15.7647 | 0.961 | 15.7647 | 0.238 | 13.894 | 0.919 | 13.894 | | | | | 0.05 |
| 20 | | | | | 0.276 | 18.1572 | 0.958 | 18.1572 | 0.297 | 17.4436 | 0.916 | 17.4436 | | | | | 0.039 |
| 21 | | | | | 0.305 | 20.7772 | 0.953 | 20.7772 | 0.35 | 20.7772 | 0.905 | 20.7772 | | | | | 0.0 |
| 22 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.075 |
| 23 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.1 OE |
| 24 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.111 |
| 25 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.135 |
| 26 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.166 |
| 27 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.176 |
| 28 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.192 |
| 29 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.216 |
| 30 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.235 |
| 31 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.257 |
| 32 | | | | | | | | | | | | | | | | | 0.259 |

次に、上から7行を削除する。

| | - 1 | | | | | | fort | .81 「互換干・ | - 181 - Micro | osoft Excel | | | | | | |
|-------|--|---------------------|------------|--------------|-----------|----------------|-----------|-------------|---------------|--------------|------------|---------------|------------|-------------|----------|---------------|
| 774 | μ. <u>π-</u> Δ | tā l | ペーミレイアウ | ト数式 | データ | 校問 実行 | - 問発 | Lance | ., | | | | | | | ~ |
| | | 3477 | ~ 2007 | 1 30.24 | 1.1 | 10.161 40.0 | N 14176 | | | | | | | | (| - |
| | <u>м</u> м | SPゴシック | * 1 | 1 · A A | == | = 🗞 | 冒 折り返し | て全体を表示す | する標準 | | ▼ | | | | | 1 |
| 貼り作 | ביים בווד ביים ביוד בווד ביוד ביוד ביוד ביוד ביוד ביוד | <i>I</i> <u>U</u> - | 🔛 • 🛛 😓 • | A - 2 - | ≣≣ | | - セルを結 | 合して中央揃え | £ ب ∰ ب (| % • <u>*</u> | -00 条件付3 | き テーブルとして | セルの | 挿入 削除 | 書式 | · 並べ替え |
| イトレンプ | π−⊩ ⊑ | | フォント | 5 | | | 記書 | | 5 | 数庙 | 書式▼ | 書式設定▼ スタイル | X91/L * | * * †71L | | - ノイルター 編年 |
| | F16 | - | (a £ | - | | | HULE | | | 30/11- | - | 777 177 | | C7P | | 11101 |
| | A. | P | | D | c | F | G | Ц | T | I | V | 1 | hd | N | 0 | D |
| 1 | exp x277.5 | P[MPa] at | exp v277.5 | P[MPa] atte | cp x310.8 | · P[MPalat: | exp v3108 | P[MPa] at: | exp x344.1 | P[MPa] at | exp v344.1 | P[MPa] at | exp x377.3 | P[MPa] at | exp v377 | 3 P[MPa] |
| 2 | 0.0024 | 0.1827 | 0.822 | 0.1827 | 0.001 | 0.2241 | 0.322 | 0.2241 | 0.0027 | 0.5068 | 0.255 | 0.5068 | 0.0037 | 0.9687 | 0.16 | 3 0.96 |
| 3 | 0.0051 | 0.4551 | 0.931 | 0.4551 | 0.003 | 0.3275 | 0.546 | 0.3275 | 0.0054 | 0.6447 | 0.418 | 0.6447 | 0.0085 | 1.2238 | 0.3 | 1 1.22 |
| 4 | 0.0152 | 0.9894 | 0.968 | 0.9894 | 0.0062 | 0.5205 | 0.725 | 0.5205 | 0.01 06 | 0.9204 | 0.583 | 0.9204 | 0.0205 | 1.7064 | 0.48 | 6 1.70 |
| 5 | 0.0354 | 1.9167 | 0.982 | 1.9167 | 0.0113 | 0.8239 | 0.824 | 0.8239 | 0.0153 | 1.21 | 0.675 | 1.21 | 0.0435 | 2.8958 | 0.67 | 4 2.89 |
| 6 | 0.0504 | 3.2129 | 0.986 | 3.2129 | 0.0226 | 1.3755 | 0.892 | 1.3755 | 0.0238 | 1.6651 | 0.752 | 1.6651 | 0.0753 | 4.4505 | 0.75 | 7 4.45 |
| 7 | 0.0866 | 5.5606 | 0.991 | 5.5606 | 0.0373 | 2.4097 | 0.931 | 2.4097 | 0.042 | 2.6648 | 0.831 | 2.6648 | 0.112 | 6.3328 | 0.80 | 5 6.33: |
| 8 | 0.143 | 9.1631 | 0.994 | 9.1631 | 0.0597 | 3.7748 | 0.949 | 3.7748 | 0.0598 | 3.9541 | 0.879 | 3.9541 | 0.17 | 9.0941 | 0.82 | 7 9.09 |
| 9 | 0.201 | 13.0965 | 0.991 | 13.0965 | 0.097 | 6.1121 | 0.962 | 6.1121 | 0.0929 | 5.5468 | 0.899 | 5.5468 | 0.221 | 11.5383 | 0.83 | 5 11.53 |
| 10 | 0.24 | 15.9854 | 0.985 | 15.9854 | 0.152 | 9.6491 | 0.965 | 9.6491 | 0.13 | 7.7738 | 0.912 | 7.7738 | 0.3 | 15.8061 | 0.8 | 3 15.80 |
| 11 | 0.26 | 18.433 | 0.987 | 18.433 | 0.192 | 13.1999 | 0.965 | 13.1999 | 0.185 | 10.9246 | 0.918 | 10.9246 | 0.437 | 20.7427 | 0.7 | 8 20.74: |
| 12 | 0.281 | 20.5014 | 0.982 | 20.5014 | 0.244 | 15.7647 | 0.961 | 15.7647 | 0.238 | 13.894 | 0.919 | 13.894 | | | | |
| 13 | | | | | 0.276 | 18.1572 | 0.958 | 18.1572 | 0.297 | 17.4436 | 0.916 | 17.4436 | | | | |
| 14 | | | | | 0.305 | 20.7772 | 0.953 | 20.7772 | 0.35 | 20.7772 | 0.905 | 20.7772 | | | | |
| 15 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 16 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 17 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 18 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 19 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 20 | | | | | | | | | | | | | | | | |

ここまで出来たら、Excel での操作は終了である。ファイルは保存して閉じる。

次に、SigmaPlotを開く。(Excel でもグラフを書くことはできるが、2 成分系までである。 3 成分系の三角線図を書きたければ、SigmaPlotを使わざるを得ない。)

3.2.5 bmij.exe 使用法 (BWR 状態方程式による気液平衡関係を用いた異種分子間 相互作用係数 *m_{ii}*の決定)

このプログラムは、"異種分子間相互作用係数である *m_{ij}* を気液平衡関係にフィッティン グする形で決定する"という操作をプログラム化したものである。

基本的な操作法は、西海研究室資料に詳しく書かれているので、理解したうえでこの文 章を読んでもらいたい。

このプログラムの使用において、注意すべき事が一つある。決定した最適 *m_{ij}*が本当に正 しそうな値なのかを疑うことである。この最適 *m_{ij}*の決定には黄金分割法が使用されており、 エネルギーでいえば最も安定な場所を探すような計算を行っている。計算を行う際に範囲 と刻み幅を設定するのだが、初期値の選び方によっては不正な値に収束することが簡単に 起こりえる。もしくは、値が全く収束しないということがよく起こる。

そこで、実際的に最適m_{ii}をどう決めていけばよいのかをここでは述べていく。

3.2.5.1 収束しない場合、計算後に出力される平均絶対偏倚が明らかに大きい場合、最適 *m*_{ij} の値が全く予測できない場合などの最適 *m*_{ii}の決定法

適当な値を bcomp.exe に何度か、代入して m_{ij} の範囲を絞っていくのが簡単であるように 思われる。視覚的にも分かりやすいためだ。この方法は、bmij.exe で決定した最も確からし い最適 m_{ij} が、十分に気液平衡関係を表現できているのかの最終確認にも使用することが出 来る。bcomp.exe の使用法は、今までとほぼ一緒であるが、"通常計算"の所で、"N"を入 力すると別メニューが開ける。ここから説明する。





"プロット表示": y

"グラフ上に数値を描く": y

"出力単位": Enter

"m12は相関値?":n

"チェック計算?":n

"すべての温度で?":y

と進む。(もし、温度数が多すぎて、画面が見きれてしまう場合には、一通り終わってから、 "fort.7.txt"を確認すればよい。)

ここで、m12に適当な値を代入してみる。例えば、0.954と代入した。



| s 0.28 | 300E+02 | | | | | | | i | | |
|--------|---------|------|------|-------|-------------------------|-------------|------|--------|---|--|
| u 0.26 | SOOE+02 | | * | | | | | o i | = | |
| r 0.24 | 400E+02 | | | | | | | i | | |
| e 0.22 | 200E+02 | | | | | | | i | | |
| 0.20 | DOOE+02 | | * | | | | | o i | | |
| 0.18 | 300E+02 | | | | | | | i | | |
| 0.16 | 600E+02 | | * | | | | | o i | | |
| 0.14 | 400E+02 | | | | | | | i | | |
| 0.12 | 200E+02 | | | | | | | i | | |
| 0.10 | DOOE+02 | | * | | | | | o i | | |
| 0.80 |)00E+01 | | | | | | | i | | |
| 0.60 |)00E+01 | | * | | | | | o i | | |
| 0.40 |)00E+01 | | | | | | | i | | |
| 0.20 |)00E+01 | | * | | | | | o i | | |
| 0.00 |)00E+00 | | | | | | | i | | |
| | | | ++ | ++- | + | -++ | + | ++ | | |
| | | | 0.1 | .2 .3 | .4 .5 . mole fractio | .6 .7 on | .8 . | .9 1.0 | | |
| | | | | | | | | | | |
| | | | ナホエリ | +++ | () | | | | | |
| | m(I | , Z, | を変更し | ימפצי | (y/n) | | | | | |
| | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | |

このように、何もプロットされていない場合は、代入した値が真の値と大きく異なること を示している。

ここで、"y"とすれば、新しく m12 に適当な値を代入することができる。これを何度か 繰り返せば、真の値に近い値が得られるはずである。

実際にこれを何度か繰り返し、m12を"0.25"としたときに、次のような結果を得られた。



これはおそらく最適値に近い値であろう。

ここで、bmij.exe に戻る。



先ほど決定した、0.25を初期値として入力する。



すると比較的簡単に、確からしい"0.257236"が得られた。

3.2.6 生データの"mix.txt"への登録方法

"mix.txt"への登録法は、西海研究室資料にも書かれているが、大量のデータを入力する際にはその方法は不向きである。そこで、大量のデータを入力する方法をここで紹介する。

3.2.6.1 大量の生データを"mix.txt"への登録したい場合

まずは、"mix.txt"を"秀丸"などのソフトウェアを使って開く。

| 🖳 C:¥N_System¥expdata¥mix.txt - 秀丸 | | 1 | | |
|--|--|---|--|----------------------|
| ファイル(E) 編集(E) 表示(⊻) 検索(S) | ウィンドウ(<u>₩</u>) マクロ(<u>M</u>) | その他(<u>0</u>) | | 17250: 71 |
| 📔 🖻 💾 マ 🗔 🔀 🗮 | ् 🐢 📢 🖾 🗖 | • | | |
| » 172481 1↓ | 0 30 | 40 | 60 🕅 | <u>***</u> |
| 17249 333.15 12↓ | | | | * |
| 17250 0.0870 0.088 | 0.1800 | 0.2800 | 0.40404 | _ |
| 172510.4750 0.478 1725210.9070 0.908 | U U.DIOU :0.1 | 0.7130 | 0.79504 | |
| 17253 0.1870 0.188 | 0.3400 | 0.4630 | 0.5780↓ | |
| 17254 0.6390 0.642 | 0 0.7380 | 0.7960 | 0.8470↓ | |
| 17256 0.0216 0.021 | U↓ 7 0.0254 | 0.0297 | 0.04221 | |
| 17257 0.0444 0.044 | 4 0.0474 | 0.0492 | 0.0504 | |
| 17258 0.0516 0.051 | 8↓ | | | |
| 17259 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% | | ~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~ | \$%%%%%%%%%%%%%¥ | |
| 17261 N2(nitrogen) + C8H18(| lootana 2.2.4-tr | (methylnentane) | VLE. | |
| 17262 Graham, E.B., Weale, K.E | Progr.Int.Res.Th | nerm.Transp.Prop. | ,Am.Soc.Mech.Engrs.,(| (196 |
| 17263 2),153↓ | | | | |
| 17265 222 15 21 | | | | |
| 17266 0.0049 0.003 | 8 0.0056↓ | | | |
| 17267 0.7870 0.732 | 0_0.6860↓ | | | |
| 17268 15.1985 20.26 | 47 25.3308 | L . | | |
| 17209 346.15 34 | 5 0.0142 ↓ | | | |
| 17271 0.7790 0.720 | Ŭ Ŭ.669Ū↓ | | | |
| 17272 15.1985 20.26 | 47 25.3307 | L | | |
| 17273 373.15 3↓ 17274 0 0200 0 019 | 5 0.0200.L | | | |
| 17275 0.7570 0.689 | 0.6260 | | | |
| 17276 15.1985 20.26 | 47 25.3308 | l | | |
| | >>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>> | 6%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% | 5%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% | |
| 17279 CH4(methane) + 1mnpht | In(1-methylnaphtha | ene) | VIF↓ | |
| 17280 Sebastin,H,M. J.Chem | .Eng.Data, 24(1979) |)2,149-152↓ | | |
| 17281 4↓ | | | | |
| 17202 404.15 /* | 1 0.0051 | 0.1054 | 0 1000 | - |
| 秀丸エテ 下候補 次の結果 | 単語を 分割ウィ 切り抜 | き コピー 貼り付け | タグジャ アウトライン 行番号 | 日本語(Shift-JIS) 挿入モード |

このような画面が開かれるはずだ。

中身を覗いてみると、規則正しく並べられているのが分かる。まず、"%%%%%%%%" によって区切れられた領域が目に入る。この"%%%%%%%%%"と"%%%%%%%%%"の間 が一つの生データである。例えば、真ん中の以下の部分に着目する。

| %%%%%%%%%%%%%%%%% | %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% | %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% |
|-------------------|--|--|
| 1 1 6 | 2 117 38↓ | |
| N2(nitroger | n) + C8H18(i-octan | e, 2,2,4-trimethylpentane) VLE↓ |
| Graham, E, B | .,Weale,K.E. Prog | r.Int.Res.Therm.Transp.Prop.,Am.Soc.Mech.Engrs.,(190 |
| 2),153 | | |
| 3↓ | | |
| 323.15 34 | | |
| 0.0049 | 0.0038 | 0.0056↓ |
| 0.7870 | 0.7320 | 0.6860↓ |
| 15.1985 | 20.2647 | 25.3308↓ |
| 348.15 3↓ | | |
| 0.0105 | 0.0125 | 0.0142↓ |
| 0.7790 | 0.7200 | 0.6690↓ |
| 15.1985 | 20.2647 | 25.3307↓ |
| 373.15 3↓ | | |
| 0.0200 | 0.0195 | 0.0200↓ |
| 0.7570 | 0.6890 | 0.6260↓ |
| 15.1985 | 20.2647 | 25.3308↓ |
| 1%%%%%%%%%%%%% | <u>,~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~</u> | ĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂĂŎŎŎŎŎŎŎ |

もう少し詳しく解説すると、次のようになっている。

- (1行目) 気液平衡の種類 単位系 成分数 物質番号 物質番号
- (2行目) 文献名
- (3行目)著者名
- (4 行目) 温度数(等温気液平衡ならば。等圧気液平衡なら圧力数)
- (5行目)温度 (その温度における)データ数
- (6行目)液相組成x(データ数分だけ)
- (7 行目)気相組成 y(データ数分だけ)
- (8行目) 圧力 p (データ数分だけ)

~温度数分だけ(6行目)から(8行目)の繰り返し~

内容さえしっかり理解していれば、直接、テキストファイルに書き込むのが最も時間の かからない方法であるだろう。直接、書き加える場合、常にバックアップを取る事と最新 の注意を払う必要がある。このファイルが N-System の生命線である事を忘れずに。

"Tab key"を使うと簡単に綺麗に行間を空ける事が出来る。また、"Enter key"で行数を 判断しているので、例えば2行目が長くなりすぎて3行目に突入していても"Enter key"に より改行されていなければ、2行目の続きとして判断される。

第4章 結果と考察

4.1 成分ファミリーの分類

西海が開発したプログラム N_System を用いて、無極性物質を中心とした 2 成分系における最適 m_{ij} を決定し、 V_{ci}/V_{cj} をx軸、最適 m_{ij} をy軸としてプロットした。すると、以下に示す結果を得た。



図 4.1 最適m_{ij}とV_{ci}/V_{cj}の関係

プロットした結果から、化学成分ごとに組分けを行い、分類されたこれらの組を成分フ ァミリーと呼ぶことにする。分類された成分ファミリーの結果を以下に示す。

| | CH_4 | alkane alkene cycloalkane | CO ₂ C ₂ H ₂ H ₂ S | N ₂ CO | arene |
|--|--------|---------------------------------|--|----------------------|-------|
| CH₄ | 1 | F1 | F3 | F4 | × |
| alkane alkene cycloalkane | F1 | F2 | F3 | F4 | F5 |
| CO ₂ C ₂ H ₂ H ₂ S | F3 | F3 | F3 | _ | F6 |
| N ₂ CO | F4 | F4 | _ | F4 | × |
| arene | × | F5 | F6 | × | F5 |

表 4.1 成分ファミリーの結果

本研究では、プロットした結果から図 4.2 に示すように、F1, F5, F6 で似た傾向を確認で きたため、これらを 1 つの成分ファミリーとして扱い、合計 4 つの成分ファミリーにまと めることを検討した。



図 4.2 F1, F5, F6 における似た傾向

なお、今回まとめる上で、図 4.2 における右下の 3 点は除外している。

4.2 相関式の立式

今回、全ての成分ファミリーにおいて、Hudson-McCoubreyの理論に基づく相関式によって相関した。

N_System で決定した最適 m_{ij} と相関式から求めた計算 m_{ij} の偏倚が最小になるように、ソルバーを使って、合計4つの成分ファミリーそれぞれに相関係数を決め、相関式を立てた。

以下に本研究で使用した相関式の形と、決定した相関係数を示す。

$$m_{ij} = 64 \left[\left\{ k_1 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\}^{\frac{1}{6}} + \left\{ k_1 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}} \right) \right\}^{-\frac{1}{6}} \right]^{-6} + k_2$$

(4.1)

表 4.2 相関係数のまとめ

| | F2 | F3 | F4 | F1+F5+F6 |
|----------------|----------|---------|----------|----------|
| k ₁ | 0.686132 | 0.576 | 1.676804 | 0.736109 |
| k ₂ | -0.00372 | -0.0408 | 0.023615 | -0.01669 |

4.2.1 Hudson-McCoubrey の理論に沿って相関できたか

以下に、決定した合計4つの成分ファミリーの相関式を載せた。

今回の研究において、Hudson-McCoubreyの理論に沿って1種類の相関式でまとめることが可能であるのかが、焦点となっている。

そのため、4 つの相関式と同一グラフ上に、Hudson-McCoubreyの理論の式を載せることで、理論に沿って相関できたのかを確認した。



図 4.3 決定した相関式のまとめ

図 4.3 から判断して、F4 の相関式が多少ずれているものの、全体としては、理論の式と同じ形で相関式が描けているため、Hudson-McCoubreyの理論に沿って相関できたと言える。
4.2.2 F1, F5, F6 をまとめることは可能か

F1, F5, F6 を1つの成分ファミリーとして扱うことが可能であるのかを判断するため、最 適*m_{ij}*と相関式を比較して、1つにまとめた相関式が、しっかりと F1, F5, F6 の系を表すこと ができているのかを確認した。以下に比較図を示す。



図 4.4 F1, F5, F6 における最適miiと相関式の比較



右下の3点を取り外して、さらに詳しく見てみると以下のようになった。

図 4.5 詳しい比較図

図 4.5 から判断して、F1 の系において 2 点ほど大きくずれているが、その他の系はほぼ 相関式上にあるため、しっかりと相関できていると考えられる。

先ほども述べたが、F1, F5, F6をまとめる上で、図 4.2 における右下の 3 点を除外したが、 それらは、2 次関数型の相関式で表した。以下に相関式の形を示す。

$$m_{ij} = k_3 + k_4 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}}\right) + k_5 \left(\frac{V_{ci}}{V_{cj}}\right)^2$$

(4.2)

4.3 気液平衡関係の逆算

相関式から求めた異種分子間相互作用パラメータm_{ij}を使って、気液平衡関係の逆算を行った。

逆算して得られた計算値と実験値を比較することで、相関式の妥当性を検討した。

4.3.1 合計 6 つの相関式による気液平衡関係の逆算

まずここでは、F1, F5, F6をまとめる前の表 4.1 に従って、6つの相関式によって求めた*m_{ij}*を使い、気液平衡関係の逆算を行った結果を示す。

| System | 文献番号 | $\rm V_{ci}/\rm V_{cj}$ | Opt. m _{ij} [-] | Cal. m _{ij} [-] | 温度 T[K] | x, y平均絶対偏倚 | 評価 |
|----------|------|-------------------------|--------------------------|--------------------------|---------|------------|----|
| CH4 C2H4 | 65 | 1.252525 | 0.970902 | 0.976 | 127.25 | 5.51E-02 | |
| | | | | | 158.25 | 3.86E-02 | C |
| | | | | | 219.25 | 6.06E-02 | C |
| | | | | | 253.25 | 6.29E-02 | |
| - | 358 | 1.252525 | 0.979524 | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| C2H6 | 21 | 1.494949 | 0.980476 | 0.975 | 130.37 | 8.56E-02 | |
| | | | | | 144.26 | 5.48E-02 | |
| | | | | | 158.15 | 3.00E-02 | _ |
| | | | | | 172.04 | 2.15E-02 | В |
| | | | | | 186.11 | 1.38E-02 | |
| | | | | | 192.39 | 1.48E-02 | |
| | | | | | 199.92 | 1.88E-02 | |
| C3H6 | 698 | 1.828283 | 0.961328 | 0.968 | 130 | 3.44E-02 | |
| | | | | | 140 | 1.72E-02 | |
| | | | | | 150 | 1.90E-02 | |
| | | | | | 160 | 1.90E-02 | A |
| | | | | | 170 | 9.51E-03 | |
| | | | | | 180 | 2.56E-02 | |
| | | | | | 190 | 2.27E-02 | |

表 4.3 F1 における気液平衡逆算の結果

| 0240 | 1 | 2 020202 | 0.060212 | 0.062 | 250 15 | 1.025-02 | ĺ |
|----------|-----|---------------|----------|-------|--------|----------|-------|
| 03110 | • | 2.020202 | 0.900212 | 0.302 | 200.10 | 1.522 02 | |
| | | | | | 283.15 | 1.99E-02 | |
| | | | | | 303.15 | 1.82E-02 | A |
| | | | | | 318.15 | 1.26E-02 | |
| | | | | | 338.15 | 1.13E-02 | |
| _ | 2 | 2.020202 | 0.96382 | 0.962 | 157.55 | 2.05E-02 | |
| | | | | | 174 25 | 2 71E-02 | |
| | | | | | 104.25 | 1 905-02 | |
| | | | | | 01015 | 1.090 02 | Α |
| | | | | | 213.15 | 1.50E-02 | |
| | | | | | 226.45 | 2.11E-02 | |
| | | | | | 241.45 | 2.26E-02 | |
| - | 26 | 2.020202 | 0.961591 | 0.962 | 144.26 | 5.93E-02 | |
| | | | | | 172.04 | 1.44E-02 | р |
| | | | | | 199.82 | 1.60E-02 | Б |
| | | | | | 227 59 | 1 87F-02 | |
| _ | 338 | 2 020202 | 0 962705 | | | | |
| | 330 | 2.020202 | 0.902703 | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| C4H10 | 6 | | | | | | |
| | • | | | | | | |
| | - | 0 575750 | 0.040047 | 0.040 | 477.55 | 0.045.00 | р |
| - | / | 2.3/3/38 | 0.942017 | 0.940 | 177.55 | 3.01E-02 | Б |
| i-C4H10 | 10 | 2.656566 | 0.946605 | 0.937 | 310.95 | 1.69E-02 | |
| | | | | | 344.25 | 1.67E-02 | A^+ |
| | | | | | 377 55 | 3 66F-03 | |
| 05112 | 11 | 2 1 4 1 4 1 4 | 0.026040 | 0.017 | 210.05 | 2.04E-02 | |
| C3H12 | | 3.141414 | 0.930049 | 0.917 | 310.95 | 2.04E-02 | |
| | | | | | 344.25 | 2.0/E-02 | |
| | | | | | 377.55 | 2.19E-02 | A |
| | | | | | 410.95 | 1.13E-02 | |
| | | | | | 444.25 | 1.50E-02 | |
| i-C5H12 | 24 | 3.111111 | 0.945755 | 0.918 | 344.26 | 3.23E-02 | |
| | | | | | 277 50 | 2045-02 | в |
| | | | | | 410.00 | 3.04L 02 | 2 |
| | 704 | 0.444444 | 0.040004 | 0.010 | 410.93 | 3.03E-02 | |
| - | /24 | 3.111111 | 0.943394 | 0.918 | 344.26 | 3.//E-02 | |
| | | | | | 360.93 | 2.08E-02 | |
| | | | | | 377.59 | 2.03E-02 | |
| | | | | | 394.26 | 2.00E-02 | р |
| | | | | | 410.93 | 1.97E-02 | Б |
| | | | | | 427 59 | 2 79E-02 | |
| | | | | | 444 26 | 1.35E-02 | |
| | | | | | 449.82 | 1.66E-02 | |
| | 0.2 | 2.060606 | 0.051220 | | 440.02 | 1.002 02 | |
| neoCoHTZ | 83 | 3.060606 | 0.951328 | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| - | 113 | 3.060606 | 0.937558 | | | | |
| _ | 114 | 3.060606 | 0.937983 | | | | |
| _ | 756 | 3 060606 | 0 942442 | 0 920 | 298 15 | 1 92E-02 | |
| | /00 | 0.000000 | 0.042442 | 0.020 | 200.10 | 1.020 02 | |
| | | | | | 290.10 | 1.91E-02 | р |
| | | | | | 344.20 | 2.89E-02 | Б |
| | | | | | 377.59 | 2.48E-02 | |
| | | | | | 410.93 | 4.99E-02 | |
| 3m-C5 | 84 | 3.707071 | 0.847852 | 0.893 | 298.15 | 1.03E-01 | |
| | | | | | 323.15 | 9.25E-02 | D |
| | | | | | 348 15 | 7 33E-02 | D |
| | | | | | 373 15 | 4 86E-02 | |
| | 267 | | | | 070.13 | 7.00L UZ | |
| | 30/ | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |

表 4.4 F1 における気液平衡逆算の結果(続き)

| C6H14 | 28 | 3.717172 | 0.886049 | 0.892 | 298.15 323.15 348.15 373.15 423.15 | 2.53E-02 2.14E-02 1.66E-02 1.29E-02 1.35E-02 | А |
|------------|-----|----------|----------|-------|--|--|---|
| cyl-C6 | 99 | 3.111111 | 0.85618 | | | | |
| - | 357 | 3.111111 | 0.900213 | 0.938 | 294.26 310.31 344.26 377.59 410.93 444.26 | 5.03E-02 4.62E-02 2.92E-02 2.51E-02 1.82E-02 1.76E-02 | В |
| C7H16 | 42 | 4.30303 | 0.858409 | | | | |
| - | 105 | 4.30303 | 0.904377 | | | | |
| - C8H18 | 30 | 4.30303 | 0.873688 | 0.868 | 199.82 210.93 222.04 233.15 244.26 255.37 277.59 310.93 344.26 377.59 410.93 444.26 477.59 510.93 298.15 323.15 348.15 373.15 | 8.13E-02 7.23E-02 6.22E-02 5.49E-02 4.61E-02 4.25E-02 3.03E-02 2.94E-02 2.45E-02 2.45E-02 2.40E-02 2.40E-02 2.02E-02 1.66E-02 1.92E-02 1.73E-02 1.18E-02 5.55E-03 | C |
| С9Н20 | 339 | 5.484848 | 0.915491 | | | | |
| | 700 | 5.484848 | 0.80923 | 0.824 | 223.15 248.15 273.15 298.15 323.15 348.15 373.15 423.15 | 1.35E-01 7.57E-02 3.89E-02 3.78E-02 3.65E-02 3.37E-02 9.08E-03 6.99E-03 | С |

表 4.5 F1 における気液平衡逆算の結果(続き)

| C10H22 | 29 | 6.090909 | 0.835491 | | | | |
|--------|-----|----------|----------|-------|--------|----------------------|-------|
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| - | 43 | 6.090909 | 0.922836 | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | 100 | | | | | | |
| - | 109 | | | | | | |
| | 747 | 0.000000 | 0.000544 | 0.000 | 010.00 | 0.405.00 | |
| - | /4/ | 6.090909 | 0.828541 | 0.802 | 310.93 | 3.49E-02 | |
| | | | | | 344.26 | 3.39E-02 | |
| | | | | | 377.59 | 3.48E-02 | |
| | | | | | 410.93 | 3.76E-02 | |
| | | | | | 444.20 | 3.//E-U2 | |
| | | | | | 4/7.09 | 4.19E-02 | |
| | | | | | 422 15 | 4.30E-02 6.01E-02 | |
| | | | | | 510.95 | 5.50E-02 | |
| | | | | | 542 75 | 5.55E 02 6.61E-02 | С |
| | | | | | 563.25 | 3.61E-02 | Ũ |
| | | | | | 583.05 | 2 50E-02 | |
| | | | | | 277 59 | 3 22E-02 | |
| | | | | | 310.93 | 2.64F-02 | |
| | | | | | 410.93 | 3.96F-02 | |
| | | | | | 477.59 | 4.36E-02 | |
| | | | | | 510.93 | 3.22E-02 | |
| | | | | | 277.59 | 3.44E-02 | |
| | | | | | 244.26 | 1.03E-01 | |
| C16H34 | 145 | 9.393939 | 0.594935 | 0.708 | 315 | 5.65E-04 | |
| | | | | | 355 | 1.10E-03 | |
| | | | | | 395 | 2.92E-03 | Α |
| | | | | | 435 | 1.35E-02 | |
| | | | | | 475 | 5.59E-02 | |
| - | 273 | | | | | | |
| - | 274 | | | | | | |
| C18H38 | 135 | 10.10101 | 0.452381 | 0.691 | 308.15 | 4.39E-04 | |
| | | | | | 323.15 | 1.40E-04 | |
| | | | | | 343.15 | 4.06E-04 | Δ+ |
| | | | | | 363.15 | 8.23E-04 | A |
| | | | | | 373.15 | 6.47E-04 | |
| | | | | | 423.15 | 3.21E-03 | |
| C20H42 | 126 | | | | | | |
| - | 140 | 11.11111 | 0.257236 | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| - | 755 | 11.11111 | 0.257236 | 0.668 | 313.15 | 2.26E-02 | |
| | | | | | 323.15 | 2.69E-04 | |
| | | | | | 373.15 | 7.20E-04 | A^+ |
| | | | | | 393.15 | 8.56E-04 | |
| | | | | | 413.15 | 9.85E-04 | |

表 4.6 F1 における気液平衡逆算の結果(続き)

表 4.7 F2 における気液平衡逆算の結果

| C2H6 | С3Н8 | 14 | 1.351351 | 0.996764 | 0.995789 | 255.35 | 1.31E-02 | |
|---|---------|-----|----------|----------|-------------|----------|----------------------|-------|
| | | | | | | 283.15 | 1.15E-02 | |
| | | | | | | 310.95 | 5.51E-03 | |
| | | | | | | 322.05 | 6.69E-03 | Λ+ |
| | | | | | | 333.15 | 5.15E-03 | ~ |
| | | | | | | 344.25 | 1.10E-02 | |
| | | | | | | 355.35 | 1.17E-02 | |
| | | | | | | 366.45 | 6.52E-03 | |
| | - | 731 | 1.351351 | 0.996 | 0.995789 | 255.37 | 1.32E-02 | |
| | | | | | | 283 15 | 1 20F-02 | |
| | | | | | | 310.93 | 5 19F-03 | |
| | | | | | | 322.04 | 3.82E-03 | A^+ |
| | | | | | | 333.15 | 4.99E-03 | |
| C4H10 - i-C4H10 i-C4H10 C5H12 | | | | | | 344.26 | 1.07E-02 | |
| | | | | | | 355.37 | 1.32E-02 | |
| C4H10 | C4H10 | 25 | 1,722973 | 0.982 | 0.9940018 | 338.71 | 2.13E-02 | |
| | | | | 01002 | 0.001.001.0 | 366 48 | 2 40E-02 | Α |
| | | | | | | 394.26 | 2.10E-02 | |
| | _ | 300 | 1 722973 | 0.982 | 0 9940018 | 4 08F+01 | 9.80E-02 | |
| | | 000 | 1.722070 | 0.002 | 0.0040010 | 4.00E+01 | 2 29E-02 | |
| | | | | | | 6.80E+00 | 2.23E 02 | В |
| | | | | | | 1.36E+01 | 2.00E 02 2.03E-02 | |
| | | 69 | 1 777027 | 0.00 | 0.0020616 | 204.04 | 2.00E 02 | |
| | | 00 | 1.777027 | 0.99 | 0.0020010 | 277 10 | 1.432-02 | |
| | | | | | | 377.43 | 1.91E-02 | A |
| | | | | | | 344.48 | 8.29E-03 | |
| | 05114.0 | | 0 101051 | 0.075 | | 311.20 | J.20E-03 | |
| | C5H12 | 340 | 2.101351 | 0.975 | 0.9852425 | 277.59 | 2.36E-02 | |
| | | | | | | 310.93 | 1.53E-02 | |
| | | | | | | 344.26 | 1.62E-02 | A^+ |
| | | | | | | 377.59 | 8.86E-03 | |
| | | | | | | 410.93 | 1.50E-02 | |
| | | | | | | 444.26 | 1.21E-02 | |
| | C6H14 | 341 | 2.486486 | 0.971 | 0.9727057 | 338.71 | 1.66E-02 | |
| | | | | | | 394.26 | 1.36E-02 | А |
| | | | | | | 449.82 | 2.82E-02 | |
| | C8H18 | 343 | 3.310811 | 0.926 | 0.9419427 | 273.15 | 1.41E-02 | |
| | | | | | | 298.15 | 1.16E-02 | |
| | | | | | | 313.15 | 1.25E-02 | |
| | | | | | | 323.15 | 1.55E-02 | л |
| | | | | | | 348.15 | 1.42E-02 | |
| | | | | | | 373.15 | 1.73E-02 | |
| | C10H22 | 38 | 4.074324 | 0.927 | 0.9125644 | 310.95 | 2.18E-02 | |
| | | | | | | 377.55 | 2.72E-02 | |
| | | | | | | 444.25 | 2.33E-02 | A |
| | | | | | | 510.85 | 1.83E-02 | |
| | - | 344 | 4.074324 | 0.926 | 0.9125644 | 277.59 | 1.61E-02 | |
| | | | | | | 310.93 | 1.96E-02 | |
| | | | | | | 344.26 | 2.71E-02 | |
| | | | | | | 377.59 | 2.36E-02 | |
| | | | | | | 410.93 | 1.76E-02 | A |
| | | | | | | 444.26 | 2.43E-02 | |
| | | | | | | 477.59 | 1.80E-02 | |
| C12H26 | | | | | | 510.93 | 1.97E-02 | |
| | C12H26 | 91 | 4.817568 | 0.893 | 0.8846208 | 373.15 | 2.16E-02 | |
| | | | | | | 323.15 | 4.05E-02 | В |
| | | | | | | 273.15 | 2.19E-02 | |
| | C16H34 | 146 | 6.283784 | 0.828 | 0.834877 | 315 | 2.87E-03 | |
| | | | | | | 355 | 1.23E-03 | |
| | | | | | | 395 | 3.48E-03 | Α |
| | | | | | | 435 | 1.41E-02 | |
| | | | | | | 475 | 5.69E-02 | |
| | C18H38 | 136 | 6.756757 | 0.809 | 0.8199108 | 308.15 | 1.28E-02 | |
| | | | | | | 323 15 | 3715-02 | |
| | | | | | | 2/2 15 | 3.712-03 | |
| | | | | | | 363 15 | 1 11 - 03 | A |
| | | | | | | 373 15 | 1.56F-03 | |
| | | | | | | 423 15 | 4 23F-03 | |
| | | | | | | 0 0 | | |

| | 020442 | 100 | 7 400400 | | 0 0001007 | 222.15 | 2.065-02 | в |
|------|---------|-----|----------|-------|------------|------------------|----------|-------|
| | G20H42 | 128 | 7.432432 | 0.05 | 0.8001007 | 333.15 | 3.90E-02 | Б |
| | - | 141 | 7.432432 | 0.95 | 0.8001007 | 323.15 | 1.49E-02 | |
| | | | | | | 343.15 | 3.68E-03 | . + |
| | | | | | | 373.15 | 5.12E-04 | A |
| | | | | | | 393.15 | 1.16E-03 | |
| | | | | | | 413.15 | 1.63E-03 | |
| | - | 759 | 7.432432 | 0.784 | 0.8001007 | 323.15 | 1.49E-02 | |
| | | | | | | 343.15 | 3.68E-03 | |
| | | | | | | 373.15 | 5.12E-04 | A^+ |
| | | | | | | 393.15 | 1.16E-03 | |
| | | | | | | 413.15 | 1.63E-03 | |
| | | | | | | 333.15 | 3.96E-02 | |
| C3H8 | C4H10 | 345 | 1.275 | 1 | 0.9948724 | 333.15 | 5.24E-03 | |
| | | | | | | 343.15 | 7.91E-03 | |
| | | | | | | 353.15 | 9.47E-03 | |
| | | | | | | 363.15 | 1.36E-02 | |
| | | | | | | 373.15 | 1.44E-02 | A^+ |
| | | | | | | 383.15 | 1.51E-02 | |
| | | | | | | 393.15 | 1.72E-02 | |
| | | | | | | 403.15 | 1.54E-02 | |
| | | | | | | 413.15 | 1.59E-02 | |
| | | | | | | 423.15 | 2.73E-03 | |
| | i-C4H10 | 708 | 1.315 | 0.996 | 0.9954596 | 266.54 | 1.44E-02 | |
| | | | | | | 299.75 | 3.27E-02 | |
| | | | | | | 338.64 | 2.29E-02 | A |
| | | | | | | 366.44 | 2.76E-02 | |
| | | | | | | 394.24 | 1.46E-02 | |
| | C5H12 | 16 | 1.555 | 0.984 | 0.9958969 | 344.25 | 1.87E-02 | |
| | | | | | | 360.95 | 1.84E-02 | |
| | | | | | | 377.55 | 1.44E-02 | |
| | | | | | | 394.25 | 1.72E-02 | A^+ |
| | | | | | | 410.95 | 1.73E-02 | |
| | | | | | | 427.55 | 9.35E-03 | |
| | | | | | | 444.25 | 1.97E-02 | |
| | | | | | | 460.95 | 2.48E-02 | |
| | C7H16 | 264 | 2.13 | 0.944 | 0.9843739 | 313.15 | 1.05E-01 | D |
| | | | | | | 303.15 | 6.87E-02 | |
| | - | 346 | 2.13 | 0.985 | 0.9843739 | 333.15 | 2.86E-03 | |
| | | | | | | 353.15 | 6.34E-03 | |
| | | | | | | 373.15 | 8.73E-03 | |
| | | | | | | 393.15 | 1.01E-02 | |
| | | | | | | 413.15 | 6.39E-03 | |
| | | | | | | 433.15 | 0.95E-03 | A |
| | | | | | | 403.10 | 1.22E-02 | |
| | | | | | | 473.15 | 2.040-02 | |
| | | | | | | 513 15 | 3.36E-02 | |
| | | | | | | 533 15 | 3 03F-02 | |
| | C10H22 | 15 | 3 0 1 5 | 0 926 | 0 9531352 | 310.03 | 0 02E_02 | |
| | 0101122 | 40 | 3.010 | 0.500 | 0.0001002 | 077 50 | J.UZE-03 | |
| | | | | | | 3//.59 | 0.00E-03 | A^+ |
| | | | | | | 444.20 510.02 | 9.04E-03 | |
| | | 107 | | 0.070 | 0.0704.440 | 010.93 | 8.00E-03 | |
| | C18H38 | 137 | 5 | 0.878 | 0.8/81419 | 308.15 | 1./4E-02 | |
| | | | | | | 323.15 | × | |
| | | | | | | 343.15 | 5.87E-03 | A^+ |
| | | | | | | 363.15 | 6.08E-03 | |
| | | | | | | 3/3.15 | 6.31E-03 | |
| | | | | | | 423.15 | 7.26E-03 | 1 |

表 4.8 F2 における気液平衡逆算の結果(続き)

| | C20H42 | 142 | 5.5 | 0.851 | 0.8606515 | 323.15 | 2.07E-02 | |
|--------|---------|----------|----------|-------|-----------|--------|----------------------|-------|
| | | | | | | 343.15 | 1.01E-03 | |
| | | | | | | 373.15 | 4.60E-03 | A⊤ |
| | | | | | | 393.15 | 5.01E-03 | |
| C4H10 | i-04H10 | 709 | 1 031373 | 0 007 | 0.9862834 | 273.15 | 4.07E-03 | D |
| 041110 | C5H12 | 347 | 1 219608 | 0.007 | 0.9936427 | 298.15 | 2 01E-02 | A |
| | - | 710 | 1 219608 | 0.992 | 0.9936427 | 298.15 | 1 98F-02 | A |
| | C7H16 | 349 | 1 670588 | 0.992 | 0.9947412 | 355 37 | 2 17E-02 | |
| | 0/1110 | 040 | 1.070000 | 0.002 | 0.0047412 | 372.04 | 2.172 02 | |
| | | | | | | 388.71 | 1.75E-02 | |
| | | | | | | 405.37 | 1.12E-02 | |
| | | | | | | 422.04 | 8.77E-03 | |
| | | | | | | 438.71 | 6.58E-03 | A^+ |
| | | | | | | 455.37 | 8.30E-03 1 15E-02 | |
| | | | | | | 488.71 | 1.49E-02 | |
| | | | | | | 505.37 | 2.08E-02 | |
| | | | | | | 522.04 | 1.49E-02 | |
| | | | | | | 538.71 | 1.50E-03 | |
| | C10H22 | 46 | 2.364706 | 0.974 | 0.9771432 | 310.93 | 1.64E-02 | |
| | | | | | | 377.59 | 1.19E-02 | A^+ |
| | | | | | | 510.03 | 6.68E-03 | |
| | _ | 737 | 2 364706 | 0 975 | 0 9771432 | 310.93 | 1.22E 02 | |
| | | 101 | 2.004700 | 0.070 | 0.0771402 | 344.26 | 1.00E 02 | |
| | | | | | | 377.59 | 1.18E-02 | |
| | | | | | | 410.93 | 5.76E-03 | A^+ |
| | | | | | | 444.26 | 6.30E-03 | |
| | | | | | | 477.59 | 5.34E-03 | |
| C6H14 | C7H16 | 352 | 1 157609 | 0 000 | 0 0010/11 | 303 15 | 1.20E-02 3.84E-02 | |
| 001114 | 0/110 | 552 | 1.137003 | 0.555 | 0.0010411 | 323 15 | 4 17F-02 | В |
| | _ | 714 | 1.157609 | 0.999 | 0.9919411 | 303.15 | 3.45E-02 | р |
| | | | | | | 323.15 | 4.17E-02 | D |
| | C16H34 | 122 | 2.527174 | 0.964 | 0.9713014 | 293.15 | 7.34E-02 | |
| | | | | | | 313.15 | 4.77E-02 | С |
| 02114 | 00116 | 64 | 1 102540 | 0.006 | 0.000055 | 333.15 | 3.04E-02 | |
| CZH4 | C2H6 | 04 | 1.193548 | 0.996 | 0.992855 | 208.55 | 2.46E-02 | |
| | | | | | | 253.15 | 1.80E-02 | В |
| | | | | | | 273.15 | 5.24E-02 | |
| | C4H10 | 63 | 2.056452 | 0.946 | 0.9863685 | 322.05 | 2.99E-02 | |
| | | | | | | 366.45 | 3.97E-02 | В |
| | | 250 | 0.056450 | | 0.0062605 | 388.75 | 3.30E-02 | |
| | _ | 309 | 2.000402 | | 0.9803085 | 366.48 | 2.90E-02 3.65E-02 | В |
| | C7H16 | 89 | 3 435484 | 0.95 | 0 9368931 | 473 15 | 1 58F-02 | |
| | | | | 0.50 | | 413.15 | 3.11E-02 | р |
| | | | | | | 353.15 | 4.26E-02 | ы |
| | | <u> </u> | | | | 293.15 | 1.91E-02 | |
| | - | 362 | 3.435484 | 0.94 | 0.9368931 | 216.48 | 2.25E-02 | |
| | | | | | | 233.15 | 1.72E-02 | |
| | | | | | | 249.82 | 1.42E-02 1.95E-02 | |
| | | | | | | 283.15 | 2.09E-02 | |
| | | | | | | 299.82 | 1.49E-02 | |
| | | | | | | 316.48 | 1.62E-02 | |
| | | | | | | 333.15 | 1.6/E-02 | |
| | | | | | | 366.48 | 2.10E-02 | A^+ |
| | | | | | | 383.15 | 1.81E-02 | |
| | | | | | | 399.82 | 1.74E-02 | |
| | | | | | | 416.48 | 1.20E-02 | |
| | | | | | | 433.15 | 1.12E-02 7.39E-03 | |
| | | | | | | 466.48 | 5.59E-03 | |
| | | | | | | 483.15 | 8.26E-03 | |
| | | | | | | 499.82 | 9.75E-03 | |
| | | | | | | 516.48 | 8.11E-03 | |

| | C10H22 | 93 | 4.862903 | 0.895 | 0.8831729 | 292.65 | 3.68E-02 | В |
|--------|--------|-----|----------|-------|-----------|--------|----------|------------------|
| | | | | | | 283.65 | 3.38E-02 | |
| | C12H26 | 90 | 5.75 | 0.866 | 0.8521905 | 283.15 | 2.55E-02 | |
| | | | | | | 298.15 | 4.48E-02 | С |
| | | | | | | 323.15 | 5.11E-02 | |
| | | | | | | 348.15 | 3.88E-02 | |
| | C18H38 | 138 | 8.064516 | 0.776 | 0.7825493 | 308.15 | 5.74E-03 | |
| | | | | | | 323.15 | 1.1/E-03 | |
| | | | | | | 343.15 | 8.16E-04 | - A ⁺ |
| | | | | | | 363.15 | 1.28E-03 | |
| | | | | | | 3/3.15 | 1.32E-03 | |
| | | | | | | 423.15 | 3.91E-03 | |
| | C20H42 | 143 | 8.870968 | 0.751 | 0.7613898 | 323.15 | 7.37E-03 | |
| | | | | | | 343.15 | 1.41E-03 | |
| | | | | | | 373.15 | 7.63E-04 | A |
| | | | | | | 393.15 | 1.13E-03 | |
| | | | | | | 413.15 | 1.44E-03 | |
| C3H6 | C2H6 | 9 | 1.222973 | 0.995 | 0.9936427 | 260.95 | 1.63E-02 | |
| | | | | | | 277.55 | 1.51E-02 | Λ+ |
| | | | | | | 310.95 | 6.75E-03 | <u>^</u> |
| | | | | | | 344.25 | 5.64E-03 | |
| | C3H8 | 15 | 1.104972 | 0.994 | 0.9896975 | 260.95 | 2.68E-02 | |
| | | | | | | 277.55 | 2.70E-02 | |
| | | | | | | 310.95 | 2.33E-02 | C |
| | | | | | | 344.25 | 8.90E-02 | |
| | | | | | | 360.95 | 1.24E-01 | |
| | - | 732 | 1.104972 | 0.994 | 0.9896975 | 223.75 | 6.88E-02 | |
| | | | | | | 228.65 | 3.48E-02 | C |
| | | | | | | 233.45 | 1.70E-02 | C |
| | | | | | | 239.35 | 1.99E-02 | |
| | C18H38 | 139 | 5.524862 | 0.873 | 0.8599676 | 308.15 | 9.98E-03 | |
| | | | | | | 323.15 | 1.43E-02 | |
| | | | | | | 343.15 | 1.26E-02 | A + |
| | | | | | | 363.15 | 9.94E-03 | A |
| | | | | | | 373.15 | 9.13E-03 | |
| | | | | | | 423.15 | 8.18E-03 | |
| | C20H42 | 144 | 6.077348 | 0.845 | 0.8413116 | 323.15 | 5.39E-03 | |
| | | | | | | 343.15 | 1.01E-02 | |
| | | | | | | 373.15 | 8.89E-03 | A^+ |
| | | | | | | 393.15 | 7.49E-03 | |
| | | | | | | 423.15 | 7.30E-03 | |
| 1-0 | 1-C4H8 | 66 | 1.325967 | 0.994 | 0.9955796 | 294.25 | 1.18E-02 | |
| | | | | | | 344.25 | 5.40E-03 | |
| | | | | | | 399.85 | 2.99E-02 | A |
| | | | | | | 410.95 | 1.25E-02 | |
| cyl-C6 | C6H14 | 87 | 1.194805 | 0.997 | 0.9962227 | 343.15 | 6.91E-02 | C |
| | C12H26 | 92 | 2.314935 | 0.976 | 0.9636952 | 288.3 | 1.16E-01 | |
| | | | | | _ | 298.02 | 1.10E-01 | D |
| | | | | | | 312.48 | 1.01E-01 | |
| | C16H34 | 123 | 3.019481 | 0.954 | 0.9314537 | 298.02 | 2.89E-01 | |
| | | 120 | | | | | | |
| | | | | | | 305 04 | 2 85E-01 | D |

表 4.9 F2 における気液平衡逆算の結果(続き)

表 4.10 F3 における気液平衡逆算の結果

| CO2 | CH4 | 12 | 1.053191 | 0.954 | 0.9383724 | 199.85 | 1.24E-01 | |
|-----|-------------|-----|-------------|---------|-----------|--------|----------------------|--------|
| | | | | | | 209.25 | 2.68E-02 | |
| | | | | | | 219.25 | 4.16E-02 | |
| | | | | | | 223.75 | 1.62E-02 | В |
| | | | | | | 241.45 | 1.47E-02 | |
| | | | | | | 259.85 | 1.26E-02 | |
| | | | | | | 271.55 | 5.30E-03 | |
| | - | 104 | 1.053191 | 0.961 | 0.9383724 | 233.15 | 2.71E-02 | |
| | | | | | | 253.15 | 2.31E-02 | Α |
| | | | | | | 273.15 | 9.58E-03 | |
| | | | | | | 283.15 | 4.27E-03 | |
| | C2H6 | 22 | 1.574468 | 0.94 | 0.9583575 | 288.71 | 3.13E-02 | |
| | | | | | | 266.48 | 6.02E-02 | С |
| | | | | | | 244.26 | 7.57E-02 | |
| | | 100 | 1 574400 | 0.040 | 0.0500575 | 222.04 | 5.24E-02 | D |
| | - | 100 | 1.574408 | 0.942 | 0.9583575 | 202.90 | 8.04E-02 | D |
| | - | 107 | 1.5/4468 | 0.94 | 0.9583575 | 283.15 | 1.35E-01 | D |
| | 0.0110 | _ | 0 1 0 7 0 0 | 0.050 | 0.0557000 | 200.30 | 1.22E-01 | |
| | C3H8 | 4 | 2.12/00 | 0.953 | 0.9557226 | 2/3.15 | 2.41E-02 | D |
| | | | | | | 253.15 | 3.04E-02 | Б |
| | | E | 0 10766 | 0.024 | 0.0557006 | 233.13 | 0.73E-02 | |
| | | 5 | 2.12/00 | 0.934 | 0.955/226 | 294.25 | 1.00E-02 | |
| | | | | | | 310.95 | 1.88E-02 | Α |
| | | | | | | 344.25 | 1.39L 02 | |
| | C4H10 | 3 | 2 712766 | 0.925 | 0.9428263 | 310.05 | 2 02E-02 | Δ |
| | 041110 | 3 | 2.712700 | 0.923 | 0.0400060 | 310.95 | 2.022 02 | л л |
| | | 44 | 2./12/00 | 0.921 | 0.9428203 | 344.23 | 1.96E=02 | A |
| | - | 70 | 2./12/00 | 0.93 | 0.9428203 | 2/3.15 | 1.01E-02 | A |
| | I-C4HTU | 59 | 2./9/8/2 | 0.917 | 0.9403617 | 310.93 | 2.21E-02 | |
| | | | | | | 344.26 | 2.93E-02 | Α |
| | | | | | | 377.59 | 2.87E-02 | |
| | | 71 | 2 707072 | 0 0 2 2 | 0.0402617 | 272 15 | 2.93E-02 | ۸ |
| | - 051110 | 254 | 2.797072 | 0.920 | 0.9403017 | 273.15 | 1.30E-02 | A |
| | CoHTZ | 354 | 3.308511 | 0.915 | 0.9251585 | 277.05 | 1.02E-02 | |
| | | | | | | 311.04 | 1.88E-02 | Α |
| | | | | | | 344.15 | 2.00E=02 2.37E=02 | |
| | LO5U12 | 720 | 2 276506 | 0.014 | 0.0260046 | 277.50 | 1.02E-02 | |
| | 1 031112 | /30 | 3.270390 | 0.514 | 0.9200940 | 211.03 | 1.02L 02 | |
| | | | | | | 310.93 | 1.77E-02 2.36E-02 | Α |
| | | | | | | 377.65 | 2.00E 02 | |
| | cyl=C6 | 56 | 3 276596 | 0.9 | 0 9260946 | 473 15 | 1.37E-02 | |
| | oy, oo | | 0.270000 | 0.0 | 0.0200010 | 493.15 | 2 25E-02 | |
| | | | | | | 513.15 | 1.98E-02 | A |
| | | | | | | 533.15 | 1.39E-02 | |
| | - | 155 | 3.276596 | 0.904 | 0.9260946 | 273.15 | 1.13E-01 | |
| | | | | | | 283.15 | 1.06E-01 | р |
| | | | | | | 298.15 | 1.08E-01 | D |
| | | | | | | 303.15 | 1.06E-01 | |
| | C7H16 | 713 | 4.531915 | 0.898 | 0.8857125 | 310.65 | 1.56E-02 | |
| | | | | | | 352.59 | 2.26E-02 | в |
| | | | | | | 394.26 | 2.14E-02 | 2 |
| | | | | | | 477.21 | 5.61E-02 | |
| | C8H18 | 97 | 5.212766 | 0.889 | 0.863965 | 353.15 | 2.58E-02 | - |
| | | | | | | 313.15 | 2.00E-02 | В |
| | | | | | | 393.15 | 4.19E-02 | |
| | C10H22 | 17 | 6.414894 | 0.862 | 0.8276257 | 277.55 | 2.48E-02 | |
| | | | | | | 310.95 | 1.92E-02 | |
| | | | | | | 344.25 | 2.29E-02 | |
| | | | | | | 377.55 | 2.14E-02 | Α |
| | | | | | | 410.95 | 2.03E-02 | |
| | | | | | | 444.25 | 1.82E-02 | |
| | | | | | | 4//.05 | 2.00E-02 | |
| | | | | | | 510.30 | 2./32 02 | |

| | C13H28 | 125 | 8.191489 | 0.853 | 0.7792906 | 313.15 | 4.63E-02 | С |
|------|---------|-----|--------------|-------|-----------|--------|----------------------|----------|
| | 016H24 | 107 | 0 902617 | 0 900 | 0 7290211 | 333.15 | 7.95E-02 | |
| | 0101134 | 127 | 5.053017 | 0.009 | 0.7303311 | 333.15 | 1.47E-01 | D |
| | | | | | | 353.15 | 6.52E-02 | |
| | C20H42 | 124 | 11.70213 | 0.727 | 0.7012233 | 323.15 | 8.44E-02 | |
| | | | | | | 348.15 | 1.20E-02 | В |
| | C2H4 | 72 | 1.319149 | 0.977 | 0.9529646 | 253.15 | 8.26E-02 | |
| | | | | 0.077 | 0.0020010 | 231.15 | 8.50E-02 | D |
| | C3H6 | 67 | 1.925532 | 0.955 | 0.9582664 | 273.15 | 1.79E-02 | В |
| | | | | | | 229.15 | 5.28E-02 | |
| | - | /3 | 1.925532 | 0.95 | 0.9582664 | 2/3.15 | 1.48E-02 4 95E-02 | В |
| | 1-C4H8 | 74 | 2.553191 | 0.949 | 0.9469673 | 273.15 | 2.63E-02 | Α |
| C2H2 | C2H6 | 751 | 1.309735 | 0.943 | 0.952615 | 277.59 | 8.39E-02 | |
| | | | | | | 288.71 | 2.14E-02 | D |
| | | | | | | 235.93 | 1.54E-01 | _ |
| | C6H14 | 78 | 3 256637 | 0 924 | 0 9267166 | 263 15 | 1.35E-01 | |
| | | | 0.200007 | | 0.0207.00 | 258.15 | 1.69E-01 | D |
| | | | | | | 253.15 | <u> 1.88E-01</u> | |
| | C8H18 | 79 | 4.336283 | 0.899 | 0.8918869 | 273.15 | 5.30E-02 | |
| | | | | | | 266.15 | 8.16E-02 | D |
| | | | | | | 253.15 | 1.19E-01 | |
| | C2H4 | 61 | 1.097345 | 0.973 | 0.9420125 | 277.59 | 1.91E-02 | Δ |
| | | | | | | 288.71 | 1.82E-02 | л |
| | C3H6 | 86 | 1.60177 | 0.941 | 0.9586447 | 333.15 | 6.06E-02 | р |
| | | | | | | 318.15 | 8.55E-02 7.16E-02 | D |
| H2S | CH4 | 37 | 1.013306 | 0.954 | 0.9350759 | 277.55 | 2.87E-02 | |
| | | | | | | 310.95 | 2.40E-02 | Α |
| | | | | | | 344.25 | 1.08E-02 | |
| | C3H8 | 36 | 2.047083 | 0.948 | 0.9569013 | 243.15 | 5.00E-02 | C |
| | | | | | | 273.15 | 5.28E-02 | Ũ |
| | C4H10 | 110 | 2.610031 | 0.947 | 0.9454542 | 324.82 | 1.85E-02 | |
| | | | | | | 380.37 | 3.92E-02 | В |
| | | | | | | 394.26 | 2.94E-02 | |
| | i-C4H10 | 738 | 2.691914 | 0.947 | 0.9433617 | 277.65 | 4.70E-02 | |
| | | | | | | 310.93 | 3.10E-02 | в |
| | | | | | | 344.37 | 2.99E-02 | D |
| | 05412 | 20 | 2 10 2 2 1 / | 0.034 | 0.0201956 | 377.59 | 3.78E-02 | <u> </u> |
| | 031112 | 20 | 3.103214 | 0.554 | 0.9291030 | 310.95 | 4.31E 02 | |
| | | | | | | 344.25 | 2.04E-02 | в |
| | | | | | | 377.55 | 1.62E-02 | _ |
| | | | | | | 410.95 | 2.23E-02 4.98E-02 | |
| | C10H22 | 32 | 6.171955 | 0.891 | 0.834656 | 277.55 | 8.14E-02 | |
| | | | | | | 310.95 | 7.36E-02 | |
| | | | | | | 344.25 | 4.90E-02 | С |
| | | | | | | 410.95 | 2.58E-02 | |
| | | | | | | 444.25 | 2.50E-02 | |
| | C3H6 | 60 | 1.85261 | 0.956 | 0.9588636 | 243.15 | 1.18E-01 | |
| | | | | | | 273.15 | 6.28E-02 | ע |
| | CO2 | 35 | 1.039362 | 0.951 | 0.9375819 | 273.15 | 5.07E-02 | |
| | | | | | | 246.35 | 2.61E-02 | В |
| | | | | | | 221.15 | 2.92E-02 | ļ |
| | - | 101 | 1.039362 | 0.958 | 0.9375819 | 293.15 | 1.93E-02 | |
| | | | | | | 333.15 | 1.17E-02 | Α |
| | | | | | | 353.15 | 1.07E-02 | |

表 4.11 F3 における気液平衡逆算の結果(続き)

| N2 | CH4 | 34 | 1.098779 | 0.973 | 0.9927147 | 155.35 | 2.55E-02 | |
|----|---------|-----|------------|-------|-----------|--------|----------|-------|
| | | | | | | 133.15 | 3.03E-02 | D |
| | | | | | | 122.05 | 3.94E-02 | Б |
| | | | | | | 99.85 | 4.81E-02 | |
| | C2H6 | 13 | 1.642619 | 0.926 | 0.9419352 | 194.26 | 4.44E-02 | |
| | | | | | | 172.04 | 4.08E-02 | Б |
| | | | | | | 149.82 | 4 17F-02 | в |
| | | | | | | 138 71 | 4 68E-02 | |
| | _ | 23 | 1 642619 | 1 | 0 9419352 | 171 43 | 6.34E-02 | |
| | | 20 | | • | 0.0110002 | 122.04 | 5 72E-02 | С |
| | C2H0 | 210 | 2 210756 | 0 009 | 0 9001429 | 110.02 | 7.605-02 | |
| | 03110 | 319 | 2.219730 | 0.908 | 0.0901420 | 104.02 | 7.000 02 | |
| | | | | | | 124.02 | 7.546-02 | |
| | | | | | | 120.37 | 8.00E-02 | |
| | | | | | | 140.82 | 8.17E-02 | |
| | | | | | | 143.15 | 1.00E-02 | |
| | | | | | | 100 15 | 4.90E-02 | |
| | | | | | | 190.15 | 3.04E-02 | |
| | | | | | | 223.15 | 2.43E-02 | |
| | | | | | | 229.82 | 2.09E-02 | С |
| | | | | | | 248.10 | 1.38E-02 | C |
| | | | | | | 209.82 | 2.93E-02 | |
| | | | | | | 2/3.15 | 1.30E-02 | |
| | | | | | | 289.15 | 2.28E-02 | |
| | | | | | | 298.15 | 3.48E-02 | |
| | | | | | | 298.15 | 2.0/E-U2 | |
| | | | | | | 323.15 | 4.03E-02 | |
| | | | | | | 333.15 | 4.26E-02 | |
| | | | | | | 343.15 | 2.08E-02 | |
| | | | | | | 353.15 | 1.12E-02 | |
| | C4H10 | 8 | 2.830189 | 0.885 | 0.8420695 | 310.95 | 2.74E-02 | |
| | | | | | | 344.25 | 5.65E-02 | В |
| | | | | | | 377.25 | 6.24E-02 | |
| | | | | | | 410.95 | 9.11E-03 | |
| | i-C4H10 | 320 | 2.918979 | 0.85 | 0.835521 | 255.37 | 1.20E-02 | |
| | | | | | | 283.21 | 1.13E-02 | |
| | | | | | | 310.87 | 2.59E-02 | |
| | | | | | | 338.65 | 3.55E-02 | А |
| | | | | | | 338.71 | 2.77E-02 | |
| | | | | | | 366.32 | 2.05E-02 | |
| | | | | | | 394.26 | 6.96E-03 | |
| | | | | | | 394.26 | 2.84E-02 | |
| | C5H12 | 716 | 3.45172 | 0.791 | 0.7995189 | 277.43 | 1.60E-02 | |
| | | | | | | 310.71 | 7.12E-03 | ۸ |
| | | | | | | 344.26 | 9.47E-03 | л |
| | | | | | | 377.59 | 2.54E-02 | |
| | i-C5H12 | 715 | 3 418424 | 0 796 | 0 8014466 | 277 59 | 1 20F-02 | |
| | | , | 0 | 000 | 0.0011100 | 210.02 | 0.255-02 | |
| | | | | | | 244.15 | 9.25E-03 | A^+ |
| | | | | | | 344.10 | 9.00E-03 | |
| | | | 4 00 405 4 | 0.75 | 0 7017470 | 3/1.3/ | 2.11E-02 | |
| | CoH14 | 323 | 4.084351 | 0.75 | 0./01/4/6 | 310.93 | 2.43E-02 | |
| | | | | | | 344.26 | 2.00E-02 | C |
| | | | | | | 377.55 | 3.20E-02 | C |
| | | | | | | 410.95 | 6.08E-02 | |
| | | | | | | 444.25 | 7.28E-02 | |

表 4.12 F4 における気液平衡逆算の結果

| | C7H16 | 324 | 4.72808 | 0.752 | 0.7275052 | 305.35 | 3.58E-02 | |
|----|--------|-----|----------|-------|-----------|------------------|-----------------------------|---|
| | | | | | | 352.55 | 3.23E-02 | |
| | | | | | | 376.35 | 5.21E-02 | |
| | | | | | | 399.85 | 8.34E-02 | |
| | | | | | | 413.15 | 6.68E-02 | D |
| | | | | | | 452.95 | 6.19E-02 | D |
| | | | | | | 453.15 | 3.67E-02 | |
| | | | | | | 455.35 | 5.62E-02 | |
| | | | | | | 472.15 | 7.84E-02 | |
| | | | | | | 497.15 | 7.42E-02 | |
| | C10H22 | 326 | 6.692564 | 0.566 | 0.6454094 | 310.95 | 3.67E-02 | |
| | | | | | | 344.25 | 2.24E-02 | в |
| | | | | | | 377.55 | 1.55E-02 | D |
| | | | | | | 411.85 | 1.43E-02 | |
| | C2H4 | 703 | 1.376249 | 0.97 | 0.9665604 | 200 | 3.04E-02 | в |
| | | | | | | 260 | 1.27E-02 | Б |
| | C3H6 | 706 | 2.008879 | 0.933 | 0.9082416 | 260 | 3.51E-02 | р |
| | | | | | | 290 | 3.00E-02 | D |
| CO | CH4 | 717 | 1.063373 | 0.98 | 0.9962729 | 91.56 | 8.15E-02 | |
| | | | | | | 97.17 | 6.11E-02 | |
| | | | | | | 105.22 | 3.75E-02 | С |
| | | | | | | 114.48 | 4.44E-02 | |
| | | | | | | 123.9 | 3.40E-02 | |
| | C2H6 | 718 | 1.589689 | 0.979 | 0.9466335 | 173.15 | 6.70E-02 | |
| | | | | | | 223.15 | 4.58E-02 | C |
| | | | | | | 248.15 | 4.19E-02 | C |
| | | | | | | 273.15 | 1.31E-02 | |
| | C3H8 | 719 | 2.148228 | 0.904 | 0.8960873 | 148.15 | 2.98E-02 | |
| | | | | | | 173.15 | 2.72E-02 | |
| | | | | | | 198.15 | 1.45E-02 | |
| | | | | | | 223.15 | 1.49E-02 | R |
| | | | | | | 248.15 | 2.47E-02 | Б |
| | | | | | | 273.15 | 3.24E-02 | |
| | | | | | | | | |
| | | | | | | 298.15 | 3.15E-02 | |
| | | | | | | 298.15 323.15 | 3.15E-02 <u>5.59E-02</u> | |

表 4.13 F4 における気液平衡逆算の結果(続き)

表 4.14 F5 における気液平衡逆算の結果

| benzene | C2H6 | 108 | 1.756757 | 0.967955 | 0.975 | 323.15 | 2.76E-02 | |
|---------|--------|------|---------------|---------------|-------|--------|----------|---|
| | | | | | | 373.15 | 2.91E-02 | В |
| | | | | | | 423.15 | 3.18E-02 | _ |
| | | | | | | 498.15 | 1.03E-02 | |
| | - | 380 | 1.756757 | 0.961712 | 0.975 | 298.15 | 3.23E-02 | В |
| | C3H8 | 51 | 1.3 | 0.981328 | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | - | 732 | 1.3 | 0.980901 | 0.990 | 310.93 | 4.07E-02 | |
| | | | | | | 344.26 | 2.26E-02 | |
| | | | | | | 377.59 | 1.70E-02 | В |
| | | | | | | 410.93 | 2.04E-02 | |
| | | | | | | 444.20 | 1.50E-02 | |
| | 05412 | 220 | | | | 477.39 | 1.19E-02 | |
| | COHIZ | 329 | 1 100154 | 0.000504 | | | | |
| | - | 337 | 1.196154 | 0.989524 | | | | |
| | | 0.00 | 1 100154 | 0.000504 | | | | |
| | - | 308 | 1.190154 | 0.989524 | | | | |
| | | 710 | 1 106154 | 0.007002 | 0.000 | 055.07 | 4 505 00 | |
| | _ | /10 | 1.190104 | 0.987983 | 0.992 | 200.37 | 4.09E-02 | В |
| | | 771 | 1 106154 | 0.000400 | | 209.10 | 3.44E-02 | |
| | | 771 | 1.190134 | 0.966409 | | | | |
| | C6U14 | 10 | 1 / 1 5 2 9 5 | 0 0 0 0 5 2 4 | 0.097 | 202 15 | 5745-02 | |
| | 001114 | 40 | 1.415565 | 0.909524 | 0.987 | 212 15 | 5.12E-02 | |
| | | | | | | 313.15 | J.12E-02 | С |
| | | | | | | 333 15 | 3 73E-02 | |
| | _ | 229 | | | | 000.10 | 0.702 02 | |
| | _ | 313 | | | | | | |
| | _ | 737 | | | 0.987 | 298 15 | 5 12E-02 | |
| | | | | | 0.007 | 328 25 | 3 18E-02 | |
| | | | | | | 333.15 | 4.94E-02 | С |
| | | | | | | 340.69 | × | |
| | | | | | | 350.5 | 3.98E-02 | |
| | C7H16 | 232 | | | | | | |
| | - | 314 | | | | | | |
| | - | 738 | | | 0.980 | 333.15 | 9.45E-02 | D |
| | C8H18 | 224 | | | | | | |
| | - | 315 | 1.884615 | 0.984935 | 0.970 | 328.15 | 1.85E-01 | |
| | | | | | | 328.25 | × | D |
| | | | | | | 338.15 | 1.63E-01 | D |
| | | | | | | 348.15 | 1.48E-01 | |
| | cyl−C6 | 226 | | | | | | |
| | - | 773 | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | - | 817 | 1.184615 | 0.986004 | 0.992 | 403.15 | 1.35E-01 | |
| | | | | | | 413.15 | 1.70E-01 | D |
| | | | | | | 423.15 | 1.55E-01 | |
| | C2H4 | 252 | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | - | 775 | 2.096774 | 0.963146 | 0.960 | 513.15 | 4.11E-02 | р |
| | | | | | | 523.15 | 3.2/E-02 | в |
| | | | | | | 033.15 | 2.02E-02 | |

| | C3H6 | 762 | 1 436464 | 0 974854 | | | | |
|--------------|----------|-----|---------------|----------|-------|------------------|----------------------|-------|
| | | /02 | 1.100101 | 0.071001 | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | - | 776 | 1.436464 | 0.962017 | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | - | 777 | 1.436464 | 0.977295 | | | | |
| | toluene | 53 | 1.230769 | 0.993394 | 0.991 | 433.15 | 3.85E-02 | |
| | | | | | | 473.15 | 3.08E-02 | В |
| | | | | | | 513.15 | 2.04E-02 | |
| | | | | | | 553.15 | 4.65E-02 | |
| | - | 236 | 4 4 4 9 4 5 4 | 0.070440 | 0.007 | 000.45 | 0.755.00 | 0 |
| | m-xylene | 814 | 1.446154 | 0.978146 | 0.987 | 393.15 | 6./5E-02 | C |
| | - | 820 | 1.446154 | 0.994246 | | | | |
| | | | | | | | | |
| teluene | 000 | 764 | 0 160160 | 0.056600 | 0.057 | 010.1 | 0.465.00 | |
| toidene | 0200 | /04 | 2.102102 | 0.90000 | 0.957 | 313.1 | 2.40E-02 | R |
| | | | | | | 393.1 172.1 | 1.82E-02 | Б |
| | 03H8 | 55 | 1 6 | 0 075511 | 0.001 | 4/3.1 | 3.33E=02 | |
| | 00110 | 55 | 1.0 | 0.870011 | 0.981 | 240.15 | 2.42E-02 | |
| | | | | | | 348.15 | 1./5E-02 | В |
| | | | | | | 393.15 402.15 | 3.10E-02 1.82E-02 | |
| | _ | 767 | 1.6 | 0 97/802 | 0.981 | 30/ | 1.02L 02 | |
| | | 707 | 1.0 | 0.374002 | 0.501 | 473.2 | 2 25E-02 | Α |
| | C5H12 | 49 | 1 028939 | 0 990213 | 0 991 | 293.15 | 1.67E-02 | |
| | 001112 | -10 | 1.020000 | 0.000210 | 0.001 | 303 15 | 1.07E 02 | А |
| | | | | | | 313 15 | 1.04E 02 | |
| | C10H22 | 383 | 1 884375 | 0 985623 | | 010.10 | 1.002 02 | |
| | 0101122 | 000 | 1.001070 | 0.000020 | | | | |
| | | | | | | | | |
| | _ | 760 | 1.884375 | 0.985623 | 0.991 | 373.5 | 1.12E-01 | |
| | | | | | | 383.6 | 9.37E-02 | D |
| | | | | | | 393.7 | 6.60E-02 | |
| | C2H4 | 94 | 2.580645 | 0.951591 | | | | |
| | | | | | | | | |
| | _ | 778 | 2.580645 | 0.932442 | 0.991 | 323.15 | 7.02E-03 | |
| | | | | | | 373.15 | 4.36E-03 | A^+ |
| | | | | | | 423.15 | 1.19E-02 | |
| | m-xylene | 759 | 1.175 | 0.994935 | 0.991 | 373.6 | 4.58E-02 | |
| | | | | | | 383.6 | 4.06E-02 | В |
| | | | | | | 393.7 | 2.74E-02 | |
| | tetralin | 774 | 1.403125 | 0.994146 | 0.988 | 573 | 3.27E-01 | |
| | | | | | | 608.2 | 1.29E-01 | р |
| | | | | | | 632.9 | × | D |
| | | | | | | 672.3 | 4.45E-02 | |
| o-xylene | C7H16 | 377 | 1.154472 | 0.992442 | 0.992 | 348.15 | 1.69E-02 | Α |
| | - | 382 | 1.154472 | 0.992017 | 0.992 | 348.1 | 1.94E-02 | |
| | | | | | | 358.1 | 1.75E-02 | Α |
| | | | | | | 368.3 | 1.42E-02 | |
| m-xylene | C3H8 | 768 | 1.88 | 0.970213 | 0.970 | 313.3 | 5.88E-03 | |
| | | | | | | 393.7 | 1.83E-02 | A |
| | | | | | | 473.2 | 3.34E-02 | |
| | C10H22 | 384 | | | | | | |
| | - | 761 | 1.603723 | 0.992017 | 0.981 | 373.5 | 1.28E-01 | P |
| | | | | | | 383.5 | 1.29E-01 | D |
| | | | | | | 393.7 | 9.21E-02 | |
| | C2H4 | 96 | 3.032258 | 0.912442 | 0.913 | 223.15 | 1.74E-02 | |
| | | | | | | 252.65 | 1.66E-02 | A |
| | | | | | | 293.15 | 5.83E-03 | |
| p-xylene | C7H16 | 234 | | | | | | |
| | - | 379 | 1.126984 | 0.993131 | 0.992 | 348.15 | 2.21E-02 | Α |
| ethylbenzene | C2H4 | 95 | 3.016129 | 0.904382 | 0.914 | 195.95 | 7.81E-02 | |
| | | | | | | 233.15 | 3.14E-02 | С |
| | | | | | | 293.15 | 6.64E-03 | |

表 4.15 F6 における気液平衡逆算の結果

| benzene | C2H2 | 82 | 2.300885 | 0.954509 | 0.962 | 283.15 | 2.17E-02 | |
|---------------------|-------|-----|----------|----------|---------|--------|----------------------|-------|
| | | | | | | 293.15 | 2.18E-02 | в |
| | | | | | | 303.15 | 2.64E-02 | D |
| | | | | | | 313.15 | 3.08E-02 | |
| | H2S | | 2.639594 | 0.963146 | | | | |
| | CO2 | 57 | 2.765957 | 0.927983 | 0.939 | 303.15 | 2.60E-02 | |
| | | | | | | 313.15 | 2.43E-02 | В |
| | | | | | | 323.15 | 3.01E-02 | |
| | | 260 | 0 765057 | 0.000101 | 0.020 | 333.15 | 3.65E-02 | |
| | - | 309 | 2./0090/ | 0.933131 | 0.939 | 298.10 | 1.41E-02 1.07E-02 | Α |
| | _ | 370 | 2 765957 | 0 020787 | 0 0 3 0 | 313.13 | 2.59E-02 | Δ |
| taluana | C2U2 | 010 | 2.703337 | 0.051229 | 0.035 | 252.15 | 2.35E 02 | 11 |
| tolderre | 02112 | 00 | 2.001000 | 0.551520 | 0.550 | 258.15 | 7.65E-02 | |
| | | | | | | 263 15 | 6 10E-02 | D |
| | | | | | | 268.15 | 4.29E-02 | |
| | | | | | | 273.15 | 2.96E-02 | |
| | H2S | 822 | 3.248731 | 0.953394 | 0.914 | 310.95 | 8.23E-02 | |
| | | | | | | 352.55 | 5.64E-02 | D |
| | | | | | | 394.25 | 5.10E-02 | 2 |
| | | | | | | 477.55 | 3.38E-02 | |
| | CO2 | 355 | 3.404255 | 0.912442 | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | 607 | 2 404255 | 0.017205 | 0 00 0 | 211.26 | 2 445-02 | |
| | - | 097 | 3.404233 | 0.917295 | 0.906 | 252 50 | 3.44E-02 3.40E-02 | |
| | | | | | | 393 71 | 1.84F-02 | В |
| | | | | | | 477.04 | 2.21E-02 | |
| m-xylene | C2H2 | 81 | 3.327434 | 0.935754 | 0.912 | 253.15 | 1.28E-01 | |
| | | | | | | 263.15 | 8.71E-02 | D |
| | | | | | | 273.15 | 8.00E-02 | D |
| | | | | | | 283.15 | 6.48E-02 | |
| | H2S | 826 | 3.817259 | 0.939787 | 0.887 | 310.9 | 1.63E-01 | |
| | | | | | | 352.6 | 9.54E-02 | D |
| | | | | | | 394.3 | 5.43E-02 | |
| | | | | | | 4//.6 | 4.42E-02 | |
| | CO2 | 827 | 4 | 0.860902 | 0.881 | 462.15 | 8.43E-03 | |
| | | | | | | 502.15 | 7.55E-03 | A^+ |
| | | | | | | 543.35 | 7.85E-03 | |
| | _ | 830 | 4 | 0 898672 | 0.881 | 310 | 5.61E-02 | |
| | | 000 | | 0.000072 | 0.001 | 338.7 | 6.34E-02 | _ |
| | | | | | | 394.3 | 3.15E-02 | С |
| | | | | | | 477.6 | 1.58E-02 | |
| p-xylene | CO2 | 828 | 4.021277 | 0.885491 | 0.880 | 353.2 | 2.68E-02 | |
| | | | | | | 373.4 | 1.54E-02 | Α |
| | | | | | | 393.2 | 1.93E-02 | |
| ethylbenzene | CO2 | 821 | 3.978723 | 0.90382 | 0.881 | 308 | 5.00E-02 | _ |
| | | | | | | 318 | 8.44E-02 | D |
| | | | | | | 328 | 4.28E-02 | |
| diphenylmethane | CO2 | 829 | 5.606383 | 0.811328 | 0.825 | 462.75 | 1.00E-03 | |
| | | | | | | 542.55 | 3.31E-03 | A^+ |
| | | | | | | 623.35 | 8.19E-03 | |
| an ann Ru | 0.00 | 161 | 4 776506 | 0 707550 | 0.047 | /03./5 | 2.47E-02 | |
| tetrain | 002 | 101 | 4.//0090 | 0.79/008 | 0.847 | 401.95 | 1.35E-02 | |
| | | | | | | 623 55 | 1.32L-02 | Α |
| | | | | | | 664.65 | 1.24E-02 | |
| 1-methylnaphthalene | CO2 | 818 | 4,734043 | 0,860854 | 0.849 | 308.2 | 2.67E-01 | |
| | | | | | | 318.2 | 2.76E-01 | D |
| | | | | | | 328.2 | × | |

F1 においては、CH₄-3-methylpentane 系を除けば、F2 においては、cyclohexane を含む系を除けば、非常に良く気液平衡関係を表していると言える。

F3 においては、逆算による結果の悪い系がいくつか存在し、特に C₂H₂を含む系について は見直しが必要である。

F4 においては、全体的にまずまずの結果は得られたが、 N_2 - C_7H_{16} 系に関しては、結果が悪かった。

F5 においても、まずまずの結果は得られたが、 C_8H_{18} を含む系、 $C_{10}H_{22}$ を含む系と炭素数 が多い系では、あまり結果が良くなかった。

F6においては、C2H2を含む系、H2Sを含む系に関して気液平衡関係を表せていなかった。

4.3.2 F1, F5, F6 に関して、個別のとき、まとめたときの気液平衡逆算の比較

4.3.1 では、それぞれ個別の相関式から求めた異種分子間相互作用パラメータ*m_{ij}を*使って、 気液平衡関係の逆算を行ったが、以下では F1, F5, F6 を 1 つの成分ファミリーとして、まと めた相関式から求めた*m_{ij}を*使って、気液平衡関係の逆算を行った結果を示す。

| System | System | | $\rm V_{ci}/\rm V_{cj}$ | Opt. m _{ij} [-] | Cal. m _{ij} [-] | 温度 T[K] | x, y平均絶対偏倚 | 評価 |
|--------|--------|-----|-------------------------|--------------------------|--------------------------|---------|----------------------|-------|
| CH4 C: | 2H4 | 65 | 1.252525 | 0.970902 | 0.983 | 127.25 | 9.06E-02 | |
| | | | | | | 158.25 | 3.96E-02 | C |
| | | | | | | 219.25 | 4.72E-02 | C |
| | | | | | | 253.25 | 7.53E-02 | |
| - | | 358 | 1.252525 | 0.979524 | 0.983 | 150 | 1.23E-02 | |
| | | | | | | 160 | 1.14E-02 | |
| | | | | | | 170 | 8.78E-03 | A^+ |
| | | | | | | 180 | 7.12E-03 | |
| | | | | | | 190 | 7.18E-03 | |
| C | 2H6 | 21 | 1.494949 | 0.980476 | 0.983 | 130.37 | 6.73E-03 | |
| | | | | | | 144.26 | 8.00E-03 | |
| | | | | | | 158.15 | 5.78E-03 | |
| | | | | | | 172.04 | 6.02E-03 | A^+ |
| | | | | | | 186.11 | 5.57E-03 | |
| | | | | | | 192.39 | 3.86E-03 | |
| | | | | | | 199.92 | 8.26E-03 | |
| C | 3H6 | 698 | 1.828283 | 0.961328 | 0.976 | 130 | 5.98E-02 | |
| | | | | | | 140 | 5.13E-02 | |
| | | | | | | 150 | 4.49E-02 | |
| | | | | | | 160 | 2.98E-02 | В |
| | | | | | | 170 | 2.42E-02 | |
| | | | | | | 180 | 2.04E-02 | |
| | | | | | | 190 | 1.88E-02 | |
| C | 3H8 | 1 | 2.020202 | 0.960212 | 0.970 | 258.15 | 3.57E-02 | |
| | | | | | | 283.15 | 2.56E-02 | |
| | | | | | | 303.15 | 1.61E-02 | A |
| | | | | | | 318.15 | 9.43E-03 | |
| | | | | | | 338.15 | 8.03E-03 | |
| - | | 2 | 2.020202 | 0.96382 | 0.970 | 157.55 | 4.95E-02 | |
| | | | | | | 1/4.25 | 1.52E-02 | |
| | | | | | | 194.85 | 1.38E-02 | A |
| | | | | | | 213.13 | 1.13E-02 2.91E-02 | |
| | | | | | | 220.45 | 1 02E-02 | |
| _ | | 26 | 2 020202 | 0 961591 | 0 970 | 144.26 | 1.32E 02 | |
| | | 20 | 2.020202 | 0.001001 | 0.070 | 172.04 | 3 31E-02 | |
| | | | | | | 199.82 | 2 28E-02 | A |
| | | | | | | 227.59 | 1.73E-02 | |
| _ | | 338 | 2.020202 | 0.962705 | 0.970 | 130.37 | 2.56E-02 | |
| | | | | | | 144.26 | 2.68E-02 | |
| | | | | | | 158.15 | 2.32E-02 | |
| | | | | | | 172.04 | 1.77E-02 | |
| | | | | | | 187.43 | 1.52E-02 | Α |
| | | | | | | 190.93 | 7.86E-03 | |
| | | | | | | 192.26 | 1.46E-02 | |
| | | | | | | 195.15 | 1.34E-02 | |
| | | | | | | 213.71 | 1.90E-02 | |
| C4 | 4H10 | 6 | | | 0.950 | 377.55 | 1.92E-02 | В |
| | | | | | 0.055 | 410.95 | 3.30E-02 | |
| - | | 7 | 2.575758 | 0.942017 | 0.950 | 177.55 | 3.50E-02 | |
| i-i | C4H10 | 10 | 2.656566 | 0.946605 | 0.947 | 310.95 | 1.64E-02 | |
| | | | | | | 344.25 | 1.61E-02 | A |
| | | | | | | 377.55 | 5.58E-03 | |

表 4.16 F1 における気液平衡逆算の結果

| C5H12 | 11 | 3.141414 | 0.936049 | 0.927 | 310.95 | 2.03E-02 | |
|----------|-----|---------------|----------|--------|--------|----------------------|---|
| | | | | | 344.25 | 2.08E-02 | |
| | | | | | 377.55 | 2.21E-02 | A |
| | | | | | 410.95 | 1.16E-02 | |
| | | | | | 444.25 | 1.49E-02 | |
| I-C5H12 | 24 | 3.111111 | 0.945755 | 0.928 | 344.26 | 3.26E-02 | р |
| | | | | | 3/7.59 | 3.08E-02 | Б |
| | 704 | 0 1 1 1 1 1 1 | 0.042204 | 0.020 | 410.93 | 3.03E-02 | |
| | /24 | 3.111111 | 0.943394 | 0.920 | 344.20 | 3.77E-02 2.00E-02 | |
| | | | | | 300.93 | 2.09E-02 2.04E-02 | |
| | | | | | 394.26 | 2.04E 02 | _ |
| | | | | | 410.93 | 1.98E-02 | в |
| | | | | | 427.59 | 2.79E-02 | |
| | | | | | 444.26 | 1.36E-02 | |
| | | | | | 449.82 | 1.66E-02 | |
| neoC5H12 | 83 | 3.060606 | 0.951328 | 0.930 | 344.26 | 2.90E-02 | |
| | | | | | 377.59 | 2.49E-02 | В |
| | | | | | 410.93 | 4.99E-02 | |
| - | 113 | 3.060606 | 0.937558 | 0.930 | 298.15 | 1.93E-02 | A |
| - | 114 | 3.060606 | 0.937983 | 0.930 | 298.15 | 1.92E-02 | Α |
| - | 756 | 3.060606 | 0.942442 | 0.930 | 298.15 | 1.93E-02 | |
| | | | | | 298.15 | 1.92E-02 | _ |
| | | | | | 344.26 | 2.91E-02 | В |
| | | | | | 377.59 | 2.50E-02 | |
| 0.05 | | | 0.047050 | | 410.93 | 4.99E-02 | |
| 3m-C5 | 84 | 3./0/0/1 | 0.847852 | 0.903 | 298.15 | 1.00E-01 | |
| | | | | | 323.15 | 9.08E-02 | D |
| | | | | | 346.13 | 1.20E-02 | |
| _ | 367 | | - | 0 00 3 | 208 15 | 4.//E-02 2.43E-02 | |
| | 307 | | | 0.303 | 323 15 | 2.43E 02 2.13E-02 | |
| | | | | | 348 15 | 1 50E-02 | A |
| | | | | | 373.15 | 1.33E-02 | |
| C6H14 | 28 | 3.717172 | 0.886049 | 0.903 | 298.15 | 2.14E-02 | |
| | | | | | 323.15 | 1.81E-02 | |
| | | | | | 348.15 | 1.39E-02 | Α |
| | | | | | 373.15 | 1.09E-02 | |
| | | | | | 423.15 | 1.38E-02 | |
| cyl−C6 | 99 | 3.111111 | 0.85618 | 0.928 | 338.71 | 2.72E-02 | Α |
| - | 357 | 3.111111 | 0.900213 | 0.928 | 294.26 | 4.97E-02 | |
| | | | | | 310.31 | 4.45E-02 | |
| | | | | | 344.26 | 2.88E-02 | в |
| | | | | | 377.59 | 2.48E-02 | |
| | | | | | 410.93 | 1.81E-02 | |
| 071110 | 40 | 4 00000 | 0.050400 | 0.070 | 444.20 | 1.76E-02 | |
| C/HI0 | 42 | 4.30303 | 0.858409 | 0.879 | 199.82 | 8.96E-02 | |
| | | | | | 210.93 | 6.91E-02 | |
| | | | | | 222.04 | 5.01E-02 | С |
| | | | | | 244 26 | 4.36E-02 | |
| | | | | | 255.37 | 4.10E-02 | |
| - | 105 | 4.30303 | 0.904377 | 0.879 | 310.93 | 3.85E-02 | |
| | | | | | 410.93 | 2.29E-02 | в |
| | | | | | 477.59 | 2.07E-02 | D |
| | | | | | 510.93 | 4.78E-02 | |
| - | 746 | 4.30303 | 0.873688 | 0.879 | 199.82 | 8.97E-02 | |
| | | | | | 210.93 | 6.90E-02 | |
| | | | | | 222.04 | 5.80E-02 | |
| | | | | | 233.10 | 3.13E=02 4.35E=02 | |
| | | | | | 244.20 | 4.33E-02 4 10F-02 | |
| | | | | | 277 59 | 2.90E-02 | |
| | | | | | 310.93 | 3.03E-02 | С |
| | | | | | 344.26 | 3.00E-02 | |
| | | | | | 377.59 | 2.56E-02 | |
| | | | | | 410.93 | 2.54E-02 | |
| | | | | | 444.26 | 2.21E-02 | |
| | | | | | 477.59 | 1.84E-02 | |
| | | | | | 510.93 | 3.85E-02 | |

表 4.17 F1 における気液平衡逆算の結果(続き)

| C8H18 | 30 | 4.949495 | 0.815623 | 0.854 | 298.15 | 2.54E-02 | |
|--------|-----|------------|---------------|-------|--------|----------------------|---------|
| | | | | | 323.15 | 1.90E-02 | |
| | | | | | 348.15 | 1.71E-02 | Α |
| | | | | | 373.15 | 1.17E-02 | |
| | | | | | 423.15 | 5.46E-03 | |
| C9H20 | 339 | 5.484848 | 0.915491 | 0.835 | 223.15 | 1.33E-01 | |
| | | | | | 249.15 | 8.61E-02 | |
| | | | | | 240.13 | 3 72E=02 | |
| | | | | | 270:10 | 2 84E-02 | |
| | | | | | 323 15 | 2.04E 02 | С |
| | | | | | 323.13 | 2.42L 02 2.71E-02 | |
| | | | | | 346.13 | 2./TE-02 | |
| | | | | | 373.13 | 7.755.02 | |
| | 700 | 5 40 40 40 | 0.00000 | 0.005 | 423.15 | 7.75E-03 | |
| _ | 700 | 5.484848 | 0.80923 | 0.835 | 223.15 | 1.51E-01 | |
| | | | | | 248.15 | 8.88E-02 | |
| | | | | | 273.15 | 4.21E-02 | |
| | | | | | 298.15 | 3.88E-02 | С |
| | | | | | 323.15 | 3.61E-02 | |
| | | | | | 348.15 | 3.31E-02 | |
| | | | | | 373.15 | 1.30E-02 | |
| | | | | | 423.15 | 5.90E-03 | |
| C10H22 | 29 | 6.090909 | 0.835491 | 0.814 | 310.95 | 3.15E-02 | |
| | | | | | 344.25 | 2.57E-02 | |
| | | | | | 377.55 | 2.83E-02 | |
| | | | | | 410.95 | 2.75E-02 | В |
| | | | | | 444.25 | 2.66E-02 | |
| | | | | | 477 55 | 3 79E-02 | |
| | | | | | 510.95 | 3 25E-02 | |
| | 42 | 6.00000 | 0 0 2 2 2 2 2 | 0.914 | 277.50 | 5.44E-02 | |
| | 43 | 0.090909 | 0.922030 | 0.014 | 217.39 | J.44E-02 | |
| | | | | | 310.93 | 2.05E-02 | В |
| | | | | | 410.93 | 3.11E-02 | Б |
| | | | | | 477.59 | 3.51E-02 | |
| | | | | | 510.93 | 2.5/E-02 | |
| - | 109 | | | 0.814 | 244.26 | 1.37E-01 | D |
| | | | | | 277.59 | <u>5.94E-02</u> | |
| - | 747 | 6.090909 | 0.828541 | 0.814 | 310.93 | 3.10E-02 | |
| | | | | | 344.26 | 2.72E-02 | |
| | | | | | 377.59 | 2.70E-02 | |
| | | | | | 410.93 | 3.01E-02 | |
| | | | | | 444.26 | 3.04E-02 | |
| | | | | | 477.59 | 3.47E-02 | |
| | | | | | 510.93 | 3.64E-02 | |
| | | | | | 423.15 | 4.55E-03 | |
| | | | | | 510.95 | 4.70E-02 | |
| | | | | | 542.75 | 5.71E-02 | С |
| | | | | | 563.25 | 2.01E-02 | 1 |
| | | | | | 583.05 | 3.49E-02 | |
| | | | | | 277.59 | 5.43E-02 | |
| | | | | | 310.93 | 2.65F-02 | 1 |
| | | | | | 410.93 | 3.11F-02 | |
| | | | | | 477 59 | 3 51F-02 | |
| | | | | | 510 93 | 2.57E-02 | 1 |
| | | | | | 277 50 | 5 94 =-02 | |
| | | | | | 244.26 | 1 37E-01 | |
| | | | | | 277.20 | | - |

表 4.18 F1 における気液平衡逆算の結果(続き)

表 4.19 F5 における気液平衡逆算の結果

| benzene | C2H6 | 108 | 1.756757 | 0.967955 | 0.978 | 323.15 | 3.00E-02 | |
|---------|--------|------|---------------|----------|-------|----------------------|----------|---|
| | | | | | | 373.15 | 3.03E-02 | в |
| | | | | | | 423.15 | 3.23E-02 | Б |
| | | | | | | 498.15 | 1.06E-02 | |
| | - | 380 | 1.756757 | 0.961712 | 0.978 | 298.15 | 3.63E-02 | В |
| | C3H8 | 51 | 1.3 | 0.981328 | 0.983 | 344.25 | 1.11E-02 | |
| | | | | | | 410.85 | 1 77F-02 | Α |
| | | | | | | 477.55 | 1.15E-02 | |
| | _ | 732 | 1.3 | 0 980901 | 0 983 | 310.93 | 2.33E-02 | |
| | | ,01 | | 0.000001 | 0.000 | 344.26 | 1.36E-02 | |
| | | | | | | 377.59 | 1.00E 02 | |
| | | | | | | 410.93 | 1.61E-02 | A |
| | | | | | | 444.26 | 1 14E-02 | |
| | | | | | | 477.59 | 9.38E-03 | |
| | C5H12 | 329 | | | 0.983 | P=0 1014F+00[MPa] | 2 96E-02 | А |
| | | 227 | 1 106154 | 0.020524 | 0.000 | 255.27 | 2.00E 02 | |
| | | | 1.190134 | 0.989324 | 0.962 | 200.15 | 0.07E-02 | D |
| | | 0.00 | 1 100154 | 0.000504 | 0.000 | 289.13 | 0.03E-02 | |
| | | 300 | 1.190154 | 0.969524 | 0.962 | 200.45 | 0.07E-02 | D |
| | | 710 | | | | 289.15 | 8.05E-02 | |
| | - | /10 | 1.196154 | 0.987983 | 0.982 | 255.37 | 8.45E-02 | D |
| | | | | | | 289.15 | 6.08E-02 | |
| | - | 771 | 1.196154 | 0.988409 | 0.982 | 255.35 | 8.82E-02 | D |
| | | | | | | 289.15 | 6.08E-02 | |
| | C6H14 | 48 | 1.415385 | 0.989524 | 0.983 | 303.15 | 9.97E-02 | |
| | | | | | | 313.15 | 9.55E-02 | D |
| | | | | | | 323.15 | 8.42E-02 | 2 |
| | | | | | | 333.15 | 7.99E-02 | |
| | - | 229 | | | 0.983 | P=0.1000E+01[atm] | 8.96E-02 | D |
| | - | 313 | | | 0.983 | P=0.7600E+03[mmHg] | 7.84E-02 | D |
| | _ | 737 | | | 0.983 | 298.15 | 1.14E-01 | |
| | | | | | | 328.25 | 7.76E-02 | |
| | | | | | | 333.15 | 1.05E-01 | D |
| | | | | | | 340.69 | 3.71E-02 | |
| | | | | | | 350.5 | 3.54E-02 | |
| | C7H16 | 232 | | | | P=0.1000E+01[atm] | | |
| | _ | 314 | | | | 348.15 | | |
| | _ | 738 | | | | 333.15 | | |
| | C8H18 | 224 | | | 0.974 | P=0.7600E+03[mmHg] | 9.79E-02 | D |
| | _ | 315 | 1 884615 | 0 984935 | 0 974 | 328 15 | 1.30E-01 | |
| | | 010 | 1.001010 | 0.001000 | 0.071 | 328.25 | 9.03E-02 | |
| | | | | | | 338 15 | 1 11E-01 | |
| | | | | | | 348 15 | 9.70E-02 | |
| | | 226 | | | 0 982 | P=0.7600E+03[mmHg] | 5.04E-02 | C |
| | cyr ou | 220 | | | 0.002 | 1 -0.7000E-00[mming] | 0.04E 02 | Č |
| | | //3 | | | 0.962 | 303.15 | 0.00E-02 | D |
| | | 0.17 | 4 4 9 4 9 4 5 | 0.000004 | 0.000 | 313.15 | 7.03E-02 | |
| | - | 817 | 1.184615 | 0.986004 | 0.982 | 403.15 | 4.36E-02 | р |
| | | | | | | 413.15 | 3.93E-02 | Б |
| | 00114 | | | | 0.007 | 423.15 | 3./0E-02 | |
| | C2H4 | 252 | | | 0.968 | P=0.8000E+02[atm] | × | |
| | | | | | | P=0.6000E+02[atm] | × | В |
| | | | | | | P=0.4000E+02[atm] | 4.81E-02 | |
| | - | 775 | 2.096774 | 0.963146 | 0.968 | 513.15 | 4.11E-02 | |
| | | | | | | 523.15 | 3.27E-02 | В |
| | | | | | | 533.15 | 2.02E-02 | |

| | C3H6 | 762 | 1.436464 | 0.974854 | 0.983 | 453.15 | 3.99E-01 | |
|---------|----------|-----|----------|-----------|---------|-------------------|----------------------|----------|
| | | | | | | 473.15 | 2.35E-01 | |
| | | | | | | 523.15 | 5.62E-02 | D |
| | | | | | | 533.15 | 3.85E-02 | |
| | | | | | | 543.15 | 2.12E-02 | |
| | - | 776 | 1.436464 | 0.962017 | 0.983 | 453.15 | 3.92E-02 | |
| | | | | | | 473.15 | 2.98E-02 | |
| | | | | | | 523.15 | 1.28E-02 | A |
| | | | | | | 533.15 | 5.92E-03 | - |
| | | | | | | 543.15 | 7.62E-03 | <u> </u> |
| | - | 777 | 1.436464 | 0.977295 | 0.983 | 298.15 | 1.42E-02 | Α |
| | toluene | 53 | 1.230769 | 0.993394 | 0.983 | 433.15 | 7.86E-02 | |
| | | | | | | 473.15 | 5.38E-02 | Б |
| | | | | | | 513.15 | 8.15E-02 | P |
| | | | | | | 553.15 | 1.34E-01 | |
| | - | 236 | | | 0.983 | P=0.1000E+01[atm] | 1.13E-01 | D |
| | m-xylene | 814 | 1.446154 | 0.978146 | 0.983 | 393.15 | 5.79E-02 | С |
| | _ | 820 | 1.446154 | 0.994246 | 0.983 | 298.15 | 1.07E-01 | |
| | | | | | | 310.15 | 7.33E-02 | D |
| | | | | | | 323.15 | 7.04E-02 | |
| toluene | C2H6 | 764 | 2,162162 | 0.956606 | 0.965 | 313.1 | 3.23E-02 | |
| | | | | | | 393.1 | 2.08E-02 | в |
| | | | | | | 473.2 | 3.04E-02 | 1 |
| | C3H8 | 55 | 16 | 0 975511 | 0 981 | 323 15 | 2 31E-02 | |
| | | | | 0.070011 | 0.001 | 348 15 | 1.67E-02 | |
| | | | | | | 393 15 | 3 13E-02 | в |
| | | | | | | 402.15 | 1.82E-02 | |
| | _ | 767 | 16 | 0 974802 | 0.981 | 394 | 1 86E-02 | <u> </u> |
| | | | | 0.07.1002 | 0.001 | 473.2 | 2 23E-02 | A |
| | C5H12 | 49 | 1 028939 | 0 990213 | 0 977 | 293 15 | 9.09E-02 | |
| | 001112 | 10 | 1.020000 | 0.000210 | 0.077 | 303 15 | 8 12E-02 | D |
| | | | | | | 313 15 | 7.46E-02 | |
| | C10H22 | 383 | 1 88/375 | 0.085623 | 0 0 7 / | 373 5 | 8.47E-02 | |
| | 0101122 | 303 | 1.004373 | 0.303023 | 0.574 | 2026 | 6.60E-02 | Б |
| | | | | | | 303.0 | 0.09E-02 4 16E-02 | |
| | | 760 | 1 00/275 | 0.095622 | 0.074 | 2725 | 4.10L 02 | |
| | | /00 | 1.004373 | 0.985025 | 0.974 | 373.3 | 6.60E-02 | Б |
| | | | | | | 303.0 | 0.09E-02 4 16E-02 | |
| | C2H4 | 0.4 | 2 500645 | 0.051501 | 0.050 | 202.65 | 4.10E 02 | - |
| | 0204 | 54 | 2.300043 | 0.931391 | 0.930 | 203.03 | 3.40E-02 | В |
| | | | | | | 292.03 | 2./4E-02 | - |
| | - | //8 | 2.580645 | 0.932442 | 0.950 | 323.15 | 2.20E-02 | |
| | | | | | | 373.15 | 9.95E-03 | A |
| | | | | | | 423.15 | 8.11E-03 | <u> </u> |
| | m-xylene | 759 | 1.175 | 0.994935 | 0.982 | 373.6 | 1.68E-01 | |
| | | | | | | 383.6 | 1.40E-01 | D |
| | | | | | | 393.7 | 1.26E-01 | <u> </u> |
| | tetralin | 774 | 1.403125 | 0.994146 | 0.983 | 573 | 4.27E-01 | |
| | | | | | | 608.2 | 1.31E-01 | D |
| | | | | | | 632.9 | × | Ĩ |
| | | | | | | 672.3 | 4.45E-02 | |

表 4.20 F5 における気液平衡逆算の結果(続き)

| o-xylene | C7H16 | 377 | 1.154472 | 0.992442 | 0.981 | 348.15 | 1.03E-01 | D |
|--------------|--------|-----|----------|----------|-------|-------------------|----------|---|
| | - | 382 | 1.154472 | 0.992017 | 0.981 | 348.1 | 8.93E-02 | |
| | | | | | | 358.1 | 9.07E-02 | D |
| | | | | | | 368.3 | 8.21E-02 | |
| m-xylene | C3H8 | 768 | 1.88 | 0.970213 | 0.975 | 313.3 | 1.18E-02 | |
| | | | | | | 393.7 | 1.96E-02 | В |
| | | | | | | 473.2 | 3.25E-02 | |
| | C10H22 | 384 | | | | | | |
| | - | 761 | 1.603723 | 0.992017 | 0.981 | 373.5 | 1.32E-01 | |
| | | | | | | 383.6 | 1.32E-01 | D |
| | | | | | | 393.7 | 9.60E-02 | |
| | C2H4 | 96 | 3.032258 | 0.912442 | 0.931 | 223.15 | 8.74E-02 | |
| | | | | | | 252.65 | 4.65E-02 | С |
| | | | | | | 293.15 | 2.34E-02 | |
| p-xylene | C7H16 | 234 | | | | P=0.1000E+01[atm] | 9.08E-02 | D |
| | - | 379 | 1.126984 | 0.993131 | 0.980 | 348.15 | 1.26E-01 | D |
| ethylbenzene | C2H4 | 95 | 3.016129 | 0.904382 | 0.932 | 195.95 | 1.71E-01 | |
| | | | | | | 233.15 | 5.24E-02 | D |
| | | | | | | 293.15 | 2.14E-02 | |

表 4.21 F5 における気液平衡逆算の結果(続き)

| 表 4.22 F6 におけ | る気液平衡逆算の結果 |
|---------------|------------|
|---------------|------------|

| benzene | C2H2 | 82 | 2.300885 | 0.954509 | 0.960 | 283.15 | 1.79E-02 | |
|--|------|------|---------------|---------------|--------|------------------|----------|-------|
| | | | | | | 293.15 | 2.02E-02 | |
| | | | | | | 303.15 | 2.53E-02 | A |
| | | | | | | 313.15 | 3.01E-02 | |
| | H2S | | 2.639594 | 0.963146 | 0.947 | | | |
| | CO2 | 57 | 2,765957 | 0.927983 | 0.942 | 303.15 | 3.25E-02 | |
| | | | | | | 313 15 | 2 98F-02 | _ |
| | | | | | | 323 15 | 3 50E-02 | в |
| | | | | | | 333.15 | 4 06E-02 | |
| | _ | 360 | 2 765057 | 0.033131 | 0.042 | 208.15 | 2.03E-02 | |
| | | 303 | 2.703337 | 0.555151 | 0.542 | 230.13 | 2.032 02 | A |
| | | 270 | 0.765057 | 0 0 0 0 7 0 7 | 0.040 | 313.13 | 2.22E-02 | ٨ |
| | - | 370 | 2./0393/ | 0.929767 | 0.942 | 313.2 | 2.97E-02 | A |
| toluene | C2H2 | 80 | 2.831858 | 0.951328 | 0.939 | 253.15 | 7.78E-02 | |
| | | | | | | 258.15 | 6.10E-02 | C |
| | | | | | | 263.15 | 4.81E-02 | C |
| | | | | | | 268.15 | 3.20E-02 | |
| | | | | | | 2/3.15 | 2.02E-02 | |
| | H2S | 822 | 3.248731 | 0.953394 | 0.922 | 310.95 | 6.18E-02 | |
| | | | | | | 352.55 | 4.39E-02 | С |
| | | | | | | 394.25 | 4.22E-02 | |
| | | | | | | 477.55 | 2.96E-02 | |
| | CO2 | 355 | 3.404255 | 0.912442 | 0.916 | 311.26 | 2.08E-02 | |
| | | | | | | 352.59 | 2.93E-02 | Δ |
| | | | | | | 393.71 | 1.63E-02 | Λ |
| | | | | | | 477.04 | 2.26E-02 | |
| | - | 697 | 3.404255 | 0.917295 | 0.916 | 311.26 | 1.96E-02 | |
| | | | | | | 352.59 | 2.96E-02 | |
| | | | | | | 393.71 | 1.99E-02 | А |
| | | | | | | 477.04 | 2.42E-02 | |
| m-xylene | C2H2 | 81 | 3.327434 | 0.935754 | 0.919 | 253.15 | 9.39E-02 | |
| | | | | | | 263.15 | 6.38E-02 | D |
| | | | | | | 273.15 | 5.90E-02 | D |
| | | | | | | 283.15 | 5.10E-02 | |
| | H2S | 826 | 3.817259 | 0.939787 | 0.899 | 310.9 | 1.28E-01 | |
| | | | | | | 352.6 | 6 57E-02 | n |
| | | | | | | 394.3 | 5.09E-02 | D |
| | | | | | | 477.6 | 4.59E-02 | |
| | CO2 | 827 | 4 | 0.860002 | 0 80 1 | 462.15 | 1 25E-02 | |
| | 002 | 027 | | 0.000302 | 0.001 | 402.10 E00.0E | 1.202 02 | |
| | | | | | | 502.05 | 1.01E-02 | A^+ |
| | | | | | | 543.35 | 9.22E-03 | |
| | | 0.00 | | 0.000070 | 0.001 | 582.55 | 1.36E-02 | |
| | - | 830 | 4 | 0.898672 | 0.891 | 301.9 | 3.44E-02 | |
| | | | | | | 338./ | 0.07E-02 | В |
| | | | | | | 394.3 | 2.3/E-02 | |
| a undana | 001 | 0.00 | 4 0 0 1 0 7 7 | 0.005404 | 0.000 | 4//.0 | 1.30E-U2 | |
| p-xylene | 002 | 828 | 4.0212// | 0.885491 | 0.890 | 353.2 | 1.65E-02 | |
| | | | | | | 3/3.4 | 1.93E-02 | A |
| | | | | | | 393.2 | 2.56E-02 | |
| ethylbenzene | CO2 | 821 | 3.978723 | 0.90382 | 0.892 | 308 | 5.35E-02 | 0 |
| | | | | | | 318 | 5.45E-02 | С |
| | | | | | | 328 | 2.25E-02 | |
| diphenylmethane | CO2 | 829 | 5.606383 | 0.811328 | 0.830 | 462.75 | 6.46E-03 | |
| | | | | | | 542.55 | 7.01E-03 | А |
| | | | | | | 623.35 | 1.05E-02 | |
| | | | | | | 703.75 | 2.41E-02 | |
| tetralin | CO2 | 161 | 4.776596 | 0.797558 | 0.861 | 461.95 | 1.94E-02 | |
| | | | | | | 543.55 | 1.64E-02 | |
| | | | | | | 623.35 | 1.38E-02 | A |
| | | | | | | 664.65 | 1.34E-02 | |
| 1-methylnaphthalene | CO2 | 818 | 4.734043 | 0.860854 | 0.862 | 308.2 | 2.67E-01 | |
| , and a state of the state of t | | 5.0 | | | , | 318.2 | 2.76E-01 | D |
| | | | | | | 328.2 | X | |
| | | | | | | | | |

以上の結果を踏まえて、逆算による計算値と実験値の偏倚をグラフ化した。



図 4.6 F1 における逆算による計算値と実験値の偏倚

F5



図 4.7 F5 における逆算による計算値と実験値の偏倚



図 4.8 F6 における逆算による計算値と実験値の偏倚

気液平衡関係を、相関式によって推算することができたのかを確認するため、F1/CH₄-C₂H₆ 系の 199.92K における気液平衡逆算を図示する。



図 4.9 CH₄-C₂H₆系の気液平衡逆算

第5章 結言

異種分子間相互作用パラメータ*m_{ij}*を化学成分の違いにより、4 つの成分ファミリーに分類することができた。

Hudson-McCoubreyの理論に基づき、相関式を立式できた。

相関式を12本から4本にまとめることができた。

相関式を2種類から1種類にすることができた。

気液平衡関係の逆算による、F1, F5, F6をまとめることが可能であるかの評価は、F1 はほぼ同じ結果、F5 は一部の系で、まとめると悪い結果、逆に F6 は一部の系で、まとめると良い結果になった。

以上より F1, F5, F6 をまとめることは、一部で改善の余地はあるが、基準値:0.15 を満た している系がほとんどであるため、可能であると言える。

参考文献

- 1) Nishiumi, H. and S. Saito., J. Chem. Eng. Japan., 10, 176,(1977)
- 2) Nishiumi, H. and S. Saito., J. Chem. Eng. Japan., 8, 356,(1975)
- 3) Reed, T. M., J. Phys. Chem., 59, 425, (1955)
- 4) Hudson, G. H. and J. McCoubery., Trans. Faraday Soc., 56, 761, (1960)
- 5) Rowlinson, J. S. and F. L. Swinton, "Liquids and Liquid Mixtures", Butterworths Monographa in

Chemistry, London (1982)

謝辞

本研究を遂行するにあたり、終始ご指導下さいました、西海英雄教授に敬意を表すとともに、心から御礼申し上げます。

また、本研究をまとめるにあたりご協力いただいた法政大学サステイナビリティ研究員 の吾郷健一氏、特任教育技術員の郝秀花氏に心から御礼申し上げます。そして、数々の助 言と激励をくださった修士2年の荒井茉衣氏、泉雅和氏、大鹿修平氏、佐々木謙氏、学部4 年の岩倉明美氏、江口雄基氏、太田誠之輔氏、中村優祐氏、今井健人氏、北村研太氏、小 西啓太氏、富樫卓也氏、西川弘将氏、半崎就太氏、松永祐輝氏、村野公健氏に深く感謝い たします。

記号

 $B_0, A_0, C_0, D_0, E_0, b, a, d, \alpha, c, \gamma, e, f, g, h =$ fifteen coefficients for normal fluids in Eq. (2.13)

- B = second virial coefficient [cm³/mol]
- $C = \text{third virial coefficient } [\text{cm}^6/\text{mol}^2]$

 m_{ii} = binary interaction parameter between component i and j defined by Eq. (2.20) [-]

- n = number of moles of a system [mole]
- N =number of component [-]
- P = pressure [MPa, atm, psi, bar, Torr]
- R = gas constant [J/Kmol]

 s_1^*, s_3^* = reduces polar parameters in Eq. (2.15)

- s_1, s_2, s_3 =polar parameters defined by Eq. (2.14)
- T = temperature [K]
- T_c = critical temperature [K]
- V_c = critical molar volume [cm³/mol]
- x = liquid mole fraction [-]
- y = vapor mole fraction [-]
- ρ = molar density [mol/ cm³]
- Ψ_A, Ψ_E = polar parameters defined by Eq. (2.13) [-]
- $\Psi_{A}^{*}, \Psi_{E}^{*}$ = reduced polar parameters defined by Eq. (2.15) [-]
- Ψ_s = quantity defined by Eq. (2.14)
- ω = Pitzer's acentric factor

<Subscript>

i, j = component