

2020 年度 テーマ K 化学数値計算（レポート課題）

担当：渡邊研究室 助教 平賀佑也（ yuya.hiraga.d6@tohoku.ac.jp ）

【締切および提出対象】

- ・ **7/30（木） 18:00 厳守**，Google Classroom のシステムを介して提出
（システムで判断されるため，1 分の遅延であっても「遅延」になることに注意）

- ・ 提出するのは，レポート本体と，1～3 日目で作成した Excel ファイル

なおレポート本体は Word ファイルを変換した pdf 形式とすること

「テーマ K_学籍番号_氏名.pdf」

「テーマ K_1 日目_計算ファイル_学籍番号_氏名.xlsm」

「テーマ K_2 日目_計算ファイル_学籍番号_氏名.xlsm」

「テーマ K_3 日目_計算ファイル_学籍番号_氏名.xlsm」

以上の **4 ファイル**が提出対象

【諸注意】

- ・ レポートに表紙はつけないこと
→冒頭に課題名を書き，その下にグループ番号，学籍番号と氏名を，続いて内容を記すこと。
- ・ 「レポート内容」の項目にしたがって作成し，可能な限り詳細に記すこと
- ・ Web 検索などにより得た情報を記載しても構わないが，その真偽は各自判断し，必ず出典を記すこと
- ・ プログラムを貼り付ける場合は，自分のものであり，記載内容が明瞭にわかるものであれば，写真・スクリーンショット・テキスト・どのような形でも良い
- ・ フローチャートを貼り付ける場合も，自分のものであり，記載内容が明瞭にわかるものであれば，写真・スクリーンショット・手書き・PowerPoint で作成など，どのような形でも良い。配布したフローチャートを利用する場合は，自分で追加した部分（文字・線）の色を変更すること

【レポート内容】

最低限，以下に示す内容を記載すること。これ以上の内容を記す分には一向に構わない。

緒言（背景および目的）

VBA 言語体系の説明 ※少なくとも以下の 4 つについては説明すること

- (1) 変数（宣言，型，桁）
- (2) Cells
- (3) For ループ（繰り返し計算とは）
- (4) If 文（条件分岐とは）

結果と考察 ※必ずプログラム，フローチャートおよび計算結果（グラフ or 表）を入れること

- (1) 水およびエタノールの蒸気圧曲線

- ・ フローチャート, プログラム
 - ・ 結果のグラフ
 - ・ 考察
- (2) 水およびエタノールの沸点 =NEWTON 法=
- ・ 計算に用いる目的関数とその微分の式
 - ・ フローチャート, プログラム
 - ・ 結果の表
 - ・ 考察
- (3) 水+エタノール混合系の沸点 =はさみうち法=
- ・ 計算に用いる目的関数
 - ・ フローチャート, プログラム ※2 日目後半部分で最終的に完成したもののみで良い
 - ・ 結果のグラフ
 - ・ 考察
- (4) 水の気液飽和密度を計算すること =Peng-Robinson 式=
- ・ Peng-Robinson 式 (使用した範囲で)
 - ・ フローチャート, プログラム
 - ・ 結果のグラフ
 - ・ 考察 ※NIST のデータとの比較・ズレの理由考察は必須

課題

共通課題, ならびにグループ番号に応じた選択課題に解答すること

結言 ※実験レポートとしての結言をまとめること

感想 ※どのようなものでも構わないので, 感想をまとめること (採点対象外)

参考文献

【課題】

(共通課題)

1. 1 日目の Newton 法を用いた水・エタノールの沸点計算の課題について, 収束条件を

【変化量 $|fP/fP'|$ が十分小さく (10^{-6} 以下に) なったら】

としていたが, Newton 法の仕組みを考慮した上でこれ以外の収束条件を考え, 元々の収束条件との違いを比較・考察せよ. ただし, 収束条件のうち, 数値部分のみを変更すること (例えば 10^{-6} を 10^{-8} にするだけ, など) は認めない.

2. 1 日目の沸点計算プログラムを用いて, メタノールおよびアセトンの沸点を求めよ.

3. 2 日目の 2 成分混合系沸点計算プログラムを利用し, また配布した Excel シートの構成を利用した上でエタノール-水, メタノール-水, アセトン-水の混合系の沸点を連続的に計算できるプログラムを作成, 実行せよ. 作成したプログラムとともに, 結果を示すこと.

※ヒント: 作成したプログラム全体をあと 2 回繰り返すということは, ループの位置および記号をどうするか.

それによって移動するセルは, 2 つ目, 3 つ目の系になるときに, 行あるいは列がどう変化するか.

4. 気液 2 相の飽和密度計算プログラムにおいて, 気相と液相それぞれの圧縮因子計算に要する計算回数を出力せ

よ。このとき、いずれかの計算回数が多くなる。同程度の計算水準を確保する前提で、この計算回数を低減させる方法を考え、それを確かめよ。

(選択課題)

5. 3 日目の気液飽和密度計算において、グループ番号に応じて以下の物質について同様に PR-EoS とアントワン式による計算を行い、NIST 密度データとのズレを中心として、3 日目に算出した水の結果との比較を行うこと。それぞれの物質についての NIST による密度は Excel シートに添えてあるものを利用し、計算する温度範囲（初期値、最終温度）は、水の場合と同様に設定する。なお、最低限、指定された物質について計算・考察してあれば、その他の物質についても計算・考察を加えても良い。

グループ 1～7 : メタノール, ヘキサン

グループ 8～13 : メタノール, トルエン

グループ 14～19 : メタノール, シクロヘキサン