

化学工学系の専門科目で必要とされる数学の内容について

梅野 善雄*, 福村 卓也†

The Required Mathematical Contents for the Department of Chemical Engineering

Yoshio UMENO*, Takuya FUKUMURA†

Abstract: The purpose on education of the department of chemical engineering in Ichinoseki National College of Technology is to produce chemical engineers with the abilities of designing and operating chemical plants. Chemical engineers should study not only chemistry but also basic electrical engineering and control engineering, in which an applied mathematics, such as laplace transform, is required. On the contrary, so far, teachers in mathematics have not been recognizing that mathematics is essential for the education of the department of chemical engineering. In this paper, the required mathematical contents for the department of chemical engineering are analyzed in detail and the future mathematics educations of the department are discussed from a view point of mathematics teacher.

Keywords: chemical engineering, mathematical contents

1. はじめに

第1著者は、工学では数学がどのような利用のされ方をしているのかについての共同研究に参加したことがある。機械系、電気系など幾つかの分野の専門科目の中で、数学がどのような使われ方をしているのかを共同で調査し、化学系の専門科目では物理化学についての調査が行われた¹⁾。一部に Schrödinger の偏微分方程式が出てくるものの、数学の内容としてはそれほど複雑な計算は必要とされていないように思われた。

一方、著者達の勤務校には物質化学工学科があり、化学プラント工場の設計や運転に係わる化学技術者の育成を教育目的としている。専門科目に現れる数学の内容について質問に訪れる学生も少なくない。質問の内容をみると、この学科の専門科目ではかなり高度の数学が必要とされているように思われた。そこで、化学工学系の専門科目について以前と同様の調査を行うこととした。本稿ではその概要を紹介すると同時に、化学工学系の学科で教授されるべき数学の内容について考察する。

2. 物質化学工学科の概要

本校の物質化学工学科の前身は化学工学科である。化学プラント工場の設計・運転を行う化学技術者の育成を目的として、昭和44年度に全国の3高専(本校を含む)に設置された。その当時の社会問題でもあった化学工業の発展と公害対策の両方に対応できる技術者の養成が期待され、その後半世紀近くにわたり1,000名以上(本校)の人材を世に送り出してきた。現在は、その後の時代の変化に対応するため、化学工学分野を学ぶ「プロセス工学コース」と、バイオ分野を学ぶ「生物工学コース」を併せ持つ学科として改組されている。

*一関工業高等専門学校一般教科自然科学系 Ichinoseki National College of Technology

†一関工業高等専門学校物質化学工学科 Ichinoseki National College of Technology

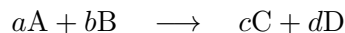
参考までに、4年次の専門科目を下記に紹介する。括弧内は単位数である。本校の物質化学工学科では、他学科と違い卒業研究を4年の後期から配置している。

必修科目	応用数学 (1), 微分方程式 (1), 応用物理 II(2), 情報処理 (2) 物理化学 II(2), 創成化学工学実験 (2), 物質化学工学実験実習 (3) 卒業研究 (1)
選択必修科目	化学プロセス工学 I(2), 無機材料工学 (2), 生化学 I(2), 生化学 II(2)
選択科目	基礎化学工学 III(2), 反応工学 (2), 機器分析 (1), 有機化学 III(1) 実践創造技術 (2), 化学プロセス工学 II(1), 微生物工学 (1)

化学プラントの中では、化学物質が次々に変化していく。その変化は、反応器という内部の見えない容器の中で行われる。特定の物質がどの時点でどれだけ生成されているのかは、その物質に関する反応速度式 (微分方程式) で表されるので、反応の状況を知るには微分方程式を解いて得られた解を詳細に分析することが必要になる。物質の種類や反応の仕方に応じていろいろな微分方程式を立て、それらを解いて解の状況を調べる作業が頻繁に必要な。本校の物質化学工学科では、これらの内容が4年の反応工学と5年の計測制御工学で教授される。以下では、主にこの2つの科目で使われている数学の内容についてまとめた。

3. 反応工学で使用される数学

化学反応では、成分 A の時刻 t における濃度を C_A とするとき、その反応速度 dC_A/dt が問題となる。それは、他のいろいろな成分の濃度や温度などに影響される。たとえば、



という反応式で温度が一定という条件のもとでは、 C_A は成分 A と成分 B の濃度のそれぞれのべき乗の積に比例し

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A^m C_B^n$$

という微分方程式が成り立つ。 $m = 1, n = 0$ のときは成分 A の 1 次反応という。 $m = 1, n = 1$ のときは、個々の成分については 1 次であるが全体としては 2 次反応である。 m, n は自然数である必要はなく、0.38 次反応や -1 次反応という場合もある。負の場合は、A 成分の増加につれて反応速度が減少することになる。反応の仕方も、一つの容器内での反応なのか連続する管内での反応なのかなど様々な状況がある。その状況の違いによりいろいろな形の微分方程式が現れる。以下に幾つかの例を示す。

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A \quad (1 \text{ 次反応})$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A C_B$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A^2 \quad (2 \text{ 次反応})$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A^n \quad (n \text{ 次単一反応})$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -(k_1 + k_2)C_A^a C_B^b$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A(C_{R_0} - bC_{A_0} + bC_A)$$

反応工学では、学生がこれらの微分方程式を解析的に解けることが求められる。上記の例はいずれも変数分離形であるので、それを解くこと自体に大きな問題はない。しかし、その計算を添え字を含む多数の文字係数の中で行うには、教員であっても式変形には相当の注意

が必要である。また、解いた後で $C_A = \dots$ の形に変形するには、学生は四苦八苦するだろうことが予想される。以下に、学生に求められている式変形の幾つかを紹介する。

3.1 変数分離形の微分方程式の解法

初期条件 $C_A(0) = C_{A_0}$ を与えて

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A(C_{B_0} - bC_{A_0} + bC_A)$$

を解いて $C_A = \dots$ に変形するには、以下のような計算が必要になる。

まず、変数分離をして部分分数に分解して積分する。

$$\frac{1}{C_A(C_{B_0} - bC_{A_0} + bC_A)} dC_A = -k dt$$

$$\frac{1}{b} \left(\frac{1}{\frac{C_{B_0}}{b} - C_{A_0}} \right) \int_{C_{A_0}}^{C_A} \left(\frac{1}{C_A} - \frac{1}{\frac{C_{B_0}}{b} - C_{A_0} + C_A} \right) dC_A = -k \int_0^t dt$$

この積分を計算して式を整理すると

$$\frac{1}{C_{B_0} - bC_{A_0}} \left(\log \left| \frac{C_A}{C_{A_0}} \right| - \log \left| \frac{\frac{C_{B_0}}{b} - C_{A_0} + C_A}{\frac{C_{B_0}}{b}} \right| \right) = -kt$$

$$\frac{1}{C_{B_0} - bC_{A_0}} \log \left| \frac{C_A C_{B_0}}{bC_{A_0} \left(\frac{C_{B_0}}{b} - C_{A_0} + C_A \right)} \right| = -kt$$

となる。実際には絶対値の内部は正の場合を考えるので、この式は指数関数を用いて

$$C_A = \frac{bC_{A_0}}{C_{B_0}} \left(\frac{C_{B_0}}{b} - C_{A_0} + C_A \right) \exp \{-kt(C_{B_0} - bC_{A_0})\}$$

と表される。両辺に C_A が現れるので、右辺の括弧を外して C_A について整理することにより

$$C_A = \frac{C_{A_0}(C_{B_0} - bC_{A_0}) \exp \{-kt(C_{B_0} - bC_{A_0})\}}{C_{B_0} - bC_{A_0} \exp \{-kt(C_{B_0} - bC_{A_0})\}}$$

$$= \frac{C_{A_0}(C_{B_0} - bC_{A_0})}{C_{B_0} \exp \{kt(C_{B_0} - bC_{A_0})\} - bC_{A_0}}$$

が得られる。

必要とされる変形

この計算で必要とされる式変形のタイプをまとめると、次のようになる。

(1) 部分分数分解：
$$\frac{1}{x(b-a+x)} = \frac{1}{b-a} \cdot \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{b-a+x} \right)$$

(2) 簡単な分数関数の定積分：

$$\int_a^x \frac{1}{b-a+x} dx = \log |b-a+x| - \log |b| = \log \left| \frac{b-a+x}{b} \right|$$

(3) 対数関数の性質を利用した式変形：

$$\begin{aligned}\log|x| - \log|b-a+x| - \log|a| + \log|b| &= \log\left|\frac{x}{a}\right| - \log\left|\frac{b-a+x}{b}\right| \\ &= \log\left|\frac{x/a}{(b-a+x)/b}\right| = \log\left|\frac{bx}{a(b-a+x)}\right|\end{aligned}$$

(4) 対数から指数への式変形（絶対値の内部は正とする）：

$$\frac{1}{b-a} \log\left|\frac{bx}{a(b-a+x)}\right| = -kt \quad \text{より} \quad \frac{bx}{a(b-a+x)} = e^{-kt(b-a)}$$

(5) 指数関数を含む簡単な分数方程式の解法： $\frac{bx}{a(b-a+x)} = e^{-kt(b-a)}$

$$\begin{aligned}bx &= a(b-a+x)e^{-kt(b-a)} \\ x(b-ae^{-kt(b-a)}) &= a(b-a)e^{-kt(b-a)} \\ \therefore x &= \frac{a(b-a)e^{-kt(b-a)}}{b-ae^{-kt(b-a)}} = \frac{a(b-a)}{be^{kt(b-a)}-a}\end{aligned}$$

反応工学では、以上の式変形をきちんと行って、与えられた微分方程式の解を解析的に求めることができるようになることが求められている。

3.2 指数方程式の二分法による数値解法

微分方程式の解法は、具体的な化学反応の反応の仕方を分析するために行われる。単に文字式での解を求めるに留まらず、求めた解に具体的な値を代入して得られる方程式を、1つの変数について解くことも必要になる。たとえば、前節の解において、 C_A の値を与えて時刻 t を求めるために、次のような計算が行われている。

各係数の値が

$$b = 1, \quad C_{A_0} = 3.58 \text{ mol/L}, \quad C_{B_0} = 5.22 \text{ mol/L}, \quad k = 5.33 \times 10^{-2} \text{ L/mol} \cdot \text{min}$$

であるとき、 $C_A = 1.03 \text{ mol/L}$ となる t を求めるには、

$$1.03 = \frac{3.85(5.22 - 3.58)}{5.22 \cdot \exp\{5.33 \times 10^{-2}t(5.22 - 3.58)\} - 3.58}$$

を満たす t を求めればよい。この式の場合は対数を利用して $t = \dots$ の形に表すことができるが、式の形によってはそのような変形ができない場合もある。そのような場合にも値を求めることができるように、二分法により解の近似値を求める。

つまり、 $f(t) = (\text{右辺}) - (\text{左辺})$ とおいて、次のような手順で解の近似値を求める。

- (1) $f(t) = (\text{右辺}) - (\text{左辺})$ とおいて、 $f(t_1)f(t_2) < 0$ を満たす t_1, t_2 を定める。
- (2) $(t_1 + t_2)/2 = t_3$ として、 $f(t_3)$ の値を求める。
- (3) s, t を t_1, t_2, t_3 のどれかとし、 $f(s)f(t) < 0$ ($s < t$) となる s, t を新ためて t_1, t_2 として同様のことを繰り返す。
- (4) 解を含む区間をある程度狭めたら、その後は 10^{-n} 刻みで値を代入して解を求める。

この計算を上記の例に対して行うと、次のようになる。まず、 $f(t)$ を

$$f(t) = \frac{6.314}{5.22 \cdot e^{0.0874t} - 3.58} - 1.03$$

として定め、最初の区間を $t_1 = 0$, $t_2 = 10$ として考えると $t_3 = 5$ であり

$$f(0) = 2.82, \quad f(10) = -0.323, \quad f(5) = 0.3727$$

となるので、 $t_1 = 5$, $t_2 = 10$ とする。以下、同様の計算を繰り返すと、7回目の計算で

$$f(7.03125) = 0.00994, \quad f(7.1875) = -0.0123$$

となる。中点 $t_3 = 7.109375$ では $f(t_3) = -0.001264$ である。そこで、以後は $t = 7.109$ から 0.001 刻みで値を調べていくと $f(7.101) = -0.00007$ となるので、解の近似値として $t \doteq 7.101$ を得る。実際の値は $t = 7.10049 \dots$ である。なお、この計算は、

$$x = \frac{a(b-a)}{be^{kt(b-a)} - a}$$

の逆関数を求めることにより、 t の値を直接計算で求めることもできる。

3.3 1 階線形微分方程式の解の極値計算

幾つかの化学反応が次々に連続して起きる場合は、中間生成物を管理する必要もある。たとえば、物質 A から S が生成されるときに



という反応がおこり、中間的に R が生成されるとする。それぞれの反応式を

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A, \quad \frac{dC_R}{dt} = -k_2 C_R + k_1 C_A, \quad \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_R$$

とする。 $C_A(0) = C_{A_0}$ とすると $C_A = C_{A_0} \exp(-k_1 t)$ であるから、 C_R を求めるには

$$\frac{dC_R}{dt} = -k_2 C_R + k_1 C_{A_0} \exp(-k_1 t)$$

を解けばよい。これは

$$\frac{dC_R}{dt} + k_2 C_R = k_1 C_{A_0} \exp(-k_1 t)$$

となり 1 階線形の微分方程式である。解の公式を利用して解くと、求める C_R は

$$C_R = C_{R_0} \exp(-k_2 t) + \frac{k_1 C_{A_0}}{k_2 - k_1} \{ \exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t) \}$$

と表される。学生は、この計算も自分で行うことができるようにならなければならない。

具体的な化学反応による生成物について考えるとき、その反応式が満たす微分方程式を解くことは単なる途中経過に過ぎない。中間的に生成される物質 R が必要になるときは、R が最大になるときに取出せばよい。それには、 C_R が最大になる時刻 t を求める必要がある。その計算は通常の極値計算であるが、その計算を添え字を含む多数の文字係数の中で行わなければならない。実際には、次のような計算を行うことになる。

$$\frac{dC_R}{dt} = -k_2 C_{R_0} e^{-k_2 t} + \frac{k_1 C_{A_0}}{k_2 - k_1} (k_2 e^{-k_2 t} - k_1 e^{-k_1 t})$$

$t = t_{R_{max}}$ のとき最大とすると, ここでは $\frac{dC_R}{dt} = 0$ であるから,

$$-k_2 C_{R_0} e^{-k_2 t_{R_{max}}} + \frac{k_1 C_{A_0}}{k_2 - k_1} (k_2 e^{-k_2 t_{R_{max}}} - k_1 e^{-k_1 t_{R_{max}}}) = 0$$

である. この式を変形すると

$$\exp((k_2 - k_1)t_{R_{max}}) = \frac{-k_2 C_{R_0}(k_2 - k_1) + k_1 k_2 C_{A_0}}{k_1^2 C_{A_0}}$$

となるので, 両辺の対数をとって

$$t_{R_{max}} = \frac{1}{k_2 - k_1} \ln \left(\frac{-k_2 C_{R_0}(k_2 - k_1) + k_1 k_2 C_{A_0}}{k_1^2 C_{A_0}} \right)$$

が得られる. ときおり, 学生がこのような式変形ができずに質問に来ることもあるが, この変形過程は数学教員であっても細心の注意が必要である. 学生には, 変形の方角性をアドバイスするにとどめている. この計算の後で, 学生は実験などで得られた具体的な数値を代入することにより, $t_{R_{max}}$ の値を具体的に計算することになる.

4. 電気回路と複素数の極形式

化学反応の反応過程を制御するには, 温度・圧力・濃度・流量・水位などの量を制御しなければならない. それらの量はセンサーで検知され, 信号が増幅されて受信器に波形などで表示される. 一連のプロセスに異常が生じたとき, その異常箇所を特定するには, センサーからの信号がどのような過程を経て画面表示されるかという電気回路に関する知識も把握しておく必要がある. そのため, 物質化学工学科では, 電気工学概論の科目も配置されている.

一般に, 交流回路にコイルやコンデンサーなどが接続されていると, その回路を流れる電流や電圧の周期は変わらず振幅や位相だけが変化する. そこで, 電気回路の種々の計算では, 流れる電流をたとえば $r \cos(\omega t + \phi)$ とするとき, 振幅 r と位相 ϕ の2つの情報に注視し, この波を極形式 $re^{j\phi}$ (j は虚数単位) に対応させて表す. この表記はフェーザ表示と呼ばれる. これによって, 周期部分は考えずに電圧の和や差などを計算することができる. 位相がどのように変わるかはベクトル表示して計算した方が直感的にも分かりよいこともあり, 状況に応じてベクトル表示される場合もある.

電気回路に関することを学ぶ以上は, 上記のことを理解した上で, 複素数に関する四則計算がきちんとできる必要がある. 特に, 位相を求める計算では, 偏角に関する正接の加法定理までが現れてくる. 実際, $z = a + bj$, $w = c + dj$ のとき $\arg z = \phi_1$, $\arg w = \phi_2$ とすると, $zw = (ac - bd) + (ad + bc)j$ であるので, $\arg(zw) = \phi$ とおくと

$$\begin{aligned} \tan \phi &= \frac{ad + bc}{ac - bd} = \frac{ac \tan \phi_2 + ac \tan \phi_1}{ac - a \tan \phi_1 \cdot c \tan \phi_2} \\ &= \frac{\tan \phi_1 + \tan \phi_2}{1 - \tan \phi_1 \tan \phi_2} = \tan(\phi_1 + \phi_2) \end{aligned}$$

という形で正接の加法定理が利用される.

また, RLC 直列回路で電流 $I = \cos \omega t$ が流れるとき, その回路で発生する電圧を考えると, それは抵抗, コイル, コンデンサーにより発生する電圧の合計値である. コイルやコンデ

ンサで発生する電圧は電流の位相よりもも $\pm\pi/2$ ずつずれて

$$V_R = R \cos \omega t, \quad V_L = L\omega \cos \left(\omega t + \frac{\pi}{2} \right), \quad V_C = \frac{1}{C\omega} \cos \left(\omega t - \frac{\pi}{2} \right)$$

となる。これらを合成した式から振幅と位相を求めようとする、その計算は容易ではない。しかし、フェザー表示の極形式で考えると、それぞれインピーダンスが

$$z_R = R e^{j \cdot 0}, \quad z_L = \omega L e^{j \frac{\pi}{2}}, \quad z_C = \frac{1}{\omega C} e^{-j \frac{\pi}{2}}$$

となり、複素数表示すると

$$z_R = R, \quad z_L = j\omega L, \quad z_C = -j \frac{1}{\omega C}$$

となる。これらの合計値は

$$z = R + j \left(\omega L - \frac{1}{\omega C} \right)$$

である。したがって、得られる電圧を $V \cos(\omega t + \phi)$ とすると

$$V = |z| = \sqrt{R^2 + \left(\omega L - \frac{1}{\omega C} \right)^2}$$

であり、位相 ϕ は

$$\tan \phi = \frac{\omega L - \frac{1}{\omega C}}{R}$$

により求めることができる。

以上のことを踏まえた上で、さらに増幅回路の仕組みとして、センサーによる検出回路と、それを増幅して記録する回路とのインピーダンスを整えることの必要性についての理解も求められる。このように、化学工学では単なる化学に関する知識ばかりが必要なのではない。基礎的な電気回路に関する知識も必要とされている。

5. 計測制御工学で使用される数学

いろいろな化学製品は、温度・圧力・濃度などを制御しながら複雑な反応過程を経て精製される。化学工学の技術者は、その制御過程をきちんと把握して管理する必要がある。ここでは、化学反応式ばかりではなく、センサーなどいろいろな検出器や信号増幅の仕組みなど、電気回路に関する知識も求められる。また、複数のプロセスが連続する場合はラプラス変換が必須であり、伝達関数などをきちんと取り扱えなければならない。

計測制御工学では、以上のような内容が教授されている。ここでは、この科目で必要とされる数学の内容について具体的に幾つか紹介する。

5.1 ラプラス変換と伝達関数

求める化学反応が幾つかのプロセスを経て得られる場合、個々のプロセスの入力と出力の関係は、微分方程式の非斉次項とその解との関係で表される。たとえば、1次遅れ系と呼ばれるプロセスでは

$$\tau \frac{dy}{dt} + y = K u(t) \quad (1)$$

という形の 1 階線形微分方程式が現れる．ここで，出力関数 y は物質の濃度や槽内の温度などを表す． τ はそのプロセスの特性を表す定数であり， K は定常状態における入力と出力の比 (出力/入力) である．そして $u(t)$ が初期入力関数である．初期条件を $y(0) = 0$ としてラプラス変換をして， $y(t)$, $u(t)$ のラプラス変換 $\mathcal{L}\{y(t)\}$, $\mathcal{L}\{u(t)\}$ をそれぞれ簡単に $Y(s)$, $U(s)$ と表すと，

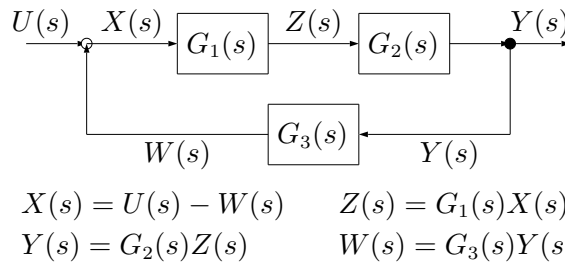
$$\tau s Y(s) + Y(s) = K U(s)$$

である．したがって，

$$Y(s) = \frac{K}{\tau s + 1} U(s) \tag{2}$$

となり，入力する関数のラプラス変換に $G(s) = K/(\tau s + 1)$ を乗じることで出力関数のラプラス変換が得られる． $G(s)$ が，この 1 次遅れ系の伝達関数である．複数のプロセスを経る場合の入力と出力の関係も，個々のプロセスの伝達関数を組み合わせることで表すことができる．

たとえば，下図のような負帰還のフィードバック制御において，それぞれの枠を 1 つのプロセスとして枠内の関数とそのプロセスの伝達関数とすると，それぞれの入力と出力の関係は



として表される．これより出力 $Y(s)$ を求めると

$$Y(s) = \frac{G_1(s)G_2(s)}{1 + G_1(s)G_2(s)G_3(s)} \cdot U(s)$$

となる．したがって，このフィードバック制御の合成伝達関数は次の式で与えられる．

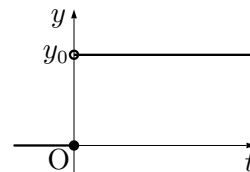
$$G(s) = \frac{G_1(s)G_2(s)}{1 + G_1(s)G_2(s)}$$

複雑な化学プロセスが連続する場合は，このようなブロック線図としての理解を得ておくことが必要である．また，当然ながら，具体的な入力に対してどのような出力が得られるのかについても理解しておく必要がある．

たとえば，前述の 1 次遅れ系において，初期条件を $y(0) = 0$ とし， $u(t)$ がステップ変化して $y_0 U(t)$ となった場合を考える． $U(t)$ は単位ステップ関数である． $U(t)$ のラプラス変換は $1/s$ であるから，出力関数 $y(t)$ のラプラス変換は

$$Y(s) = \frac{K}{\tau s + 1} \cdot \frac{y_0}{s}$$

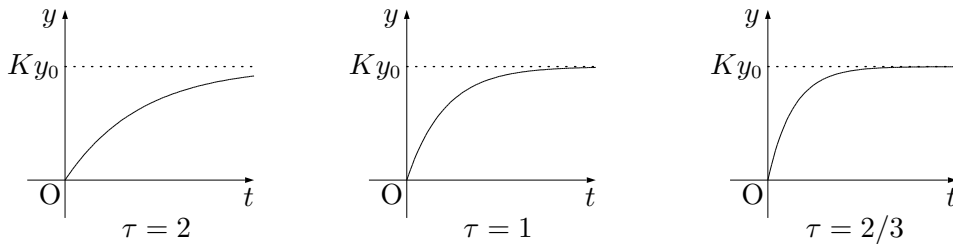
$$= K y_0 \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{s + \frac{1}{\tau}} \right)$$



となる。したがって、逆ラプラス変換をとることにより求める出力関数は次の式で表される。

$$y(t) = Ky_0 \left(1 - e^{-t/\tau}\right)$$

入力と出力との関係を理解するには、この関数のグラフが τ の値によりどのように変化するかについても把握する必要がある。下図に示すように、 τ の値が小さいほど応答も早い。



1次遅れ系で、入力関数が周期的に変化する場合もある。

たとえば、式(1)で $u(t) = A \sin \omega t$ による変化を与えると、ラプラス変換は式(2)により

$$\begin{aligned} Y(s) &= \frac{K}{\tau s + 1} \cdot \frac{A\omega}{s^2 + \omega^2} \\ &= \frac{KA\omega\tau}{\omega^2\tau^2 + 1} \left(\frac{1}{s + \frac{1}{\tau}} + \frac{1}{\tau\omega} \cdot \frac{\omega}{s^2 + \omega^2} - \frac{s}{s^2 + \omega^2} \right) \end{aligned}$$

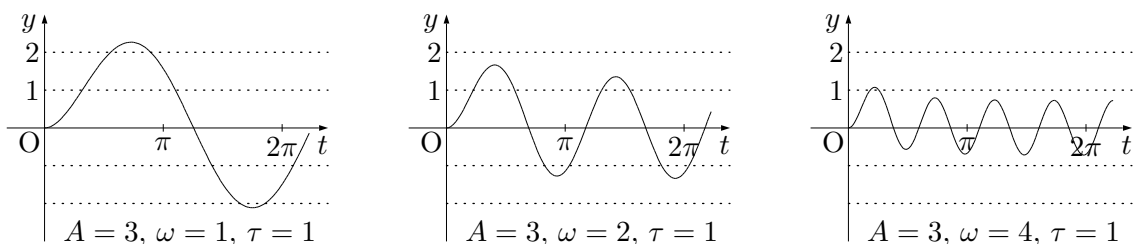
となる。この部分分数分解を計算するには、学生はかなりの時間を費やすだろうことが想定される。これを逆ラプラス変換することにより、出力関数として

$$y(t) = \frac{KA\omega\tau}{\omega^2\tau^2 + 1} \left(e^{-t/\tau} + \frac{1}{\omega\tau} \sin \omega t - \cos \omega t \right) \quad (3)$$

が得られる。数学では、この式が得られることで解答は終了するが、工学のプロセスとして理解するには、この式からどのような出力が得られているのかを把握できなければならない。

この式から、 $t \rightarrow \infty$ のときは第1項の指数関数部分は無視できるが、 t が十分に大きくないときは第1項の指数関数部分の影響を受ける。そのような状態は過渡状態と呼ばれる。一方、 t が十分に大きいときの出力は第2項と第3項の三角関数のみで表される。入力波と同じ周期を持つが、振幅の異なる三角関数の差になっているので、入力波と比べると振幅が変化して位相もずれること、特に ω の値が大きくなるにつれて振幅が小さくなるのが分かる。その状態は定常状態と呼ばれる。このプロセスの特性値 τ は、与えた入力波に対する出力波の定常状態の振幅を見ることで求められる。

以下に、 $K = 1, A = 3, \tau = 1$ の場合に幾つかの ω の値に対するグラフを示す。 ω が大きくなるにつれ振幅が小さくなる。つまり、このような系に高周波の入力を与えると得られる出力の振幅は小さくなる。このような性質は、ローパスフィルター特性と呼ばれている。



5.2 フーリエ変換と周波数応答

関数 $y(t)$ のラプラス変換は

$$\mathcal{L}\{y(t)\} = \int_0^{\infty} e^{-st} y(t) dt$$

により定義される。変数 s は、一般論では複素数である。一方、関数 $y(t)$ のフーリエ変換は

$$\mathcal{F}\{y(t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-j\omega t} y(t) dt$$

により定義され、積分範囲がラプラス変換と異なる。

工学系のいろいろな分野ではラプラス変換やフーリエ変換が駆使されているが、実際の工学場面で現れる関数は $t \geq 0$ の場合に関心があるのであって、 $t < 0$ の場合には無関心であることが多い。したがって、そのような関数では $t < 0$ の場合は $y(t) = 0$ として考えても差し支えない。その場合のフーリエ変換は

$$\mathcal{F}\{y(t)\} = \int_0^{\infty} e^{-j\omega t} y(t) dt$$

となり、ラプラス変換の s を形式的に $j\omega$ に置き換えた式になる。

つまり、ラプラス変換を行って得られた式の s を $j\omega$ で置き換えることでフーリエ変換が求められる。この置き換えにより、 s 空間から周波数空間に移行する。ラプラス変換での入力、出力、そして伝達関数をそれぞれ $U(s)$, $Y(s)$, $G(s)$ とすると、

$$Y(s) = G(s)U(s)$$

であるが、この関係が s を $j\omega$ に置き換えることにより

$$Y(j\omega) = G(j\omega)U(j\omega)$$

となる。それぞれは複素数であり、右辺は複素数の積として計算されることになる。

たとえば、式 (1) の 1 次遅れ系

$$\tau \frac{dy}{dt} + y = Ku(t)$$

の場合に $y(0) = 0$ という初期条件でラプラス変換すると、前述の式 (2) により

$$Y(s) = G(s)U(s), \quad G(s) = \frac{K}{\tau s + 1}$$

となるので、フーリエ変換した式は s を $j\omega$ で置き換えることにより

$$Y(j\omega) = G(j\omega)U(j\omega)$$

となる。ここで、 $G(j\omega)$ を表す複素数は

$$\begin{aligned} G(j\omega) &= \frac{K}{\tau j\omega + 1} = \frac{K(-j\tau\omega + 1)}{\tau^2\omega^2 + 1} \\ &= K \left(\frac{1}{1 + \tau^2\omega^2} - j \frac{\tau\omega}{1 + \tau^2\omega^2} \right) \end{aligned}$$

となるから、偏角を ϕ とすると

$$|G(j\omega)| = \frac{K}{\sqrt{1 + \tau^2\omega^2}}, \quad \tan \phi = -\tau\omega$$

である。一方、この 1 次遅れ系に $u(t) = A \sin \omega t$ を入力したときの出力波は式 (3) で表されるから、その定常状態の部分を $y_1(t)$ とすると

$$\begin{aligned} y_1(t) &= \frac{KA\omega\tau}{\omega^2\tau^2 + 1} \left(\frac{1}{\omega\tau} \sin \omega t - \cos \omega t \right) \\ &= \frac{KA}{1 + \tau^2\omega^2} (\sin \omega t - \tau\omega \cos \omega t) \\ &= \frac{KA}{\sqrt{1 + \tau^2\omega^2}} \sin(\omega t + \phi) \quad (\tan \phi = -\tau\omega) \end{aligned}$$

となる。したがって、定常状態の振幅は伝達関数の大きさと入力波の振幅の積で表され、位相は入力波の位相と一致することが分かる。このことを利用すると、定常状態の振幅を観測することでシステムの特性値である τ の値を求めることができる。

6. 物質化学工学科で必要とされる数学

反応工学と計測制御工学で使われる数学の内容について紹介してきた。これらの科目は、化学反応を取り扱う工場の技術者となるには必須の科目と思われる。そこで使われている数学の内容をみると、種々の公式や原理を表現するためにだけ数学の式が使われているのではない。いろいろな微分方程式を自分の手で解けることが求められている。そのような計算をすることができ、さらに得られた解について種々の分析を加えることができなければならない。そのためには、以下のような知識が必要になると思われる。

基礎数学では、

- (1) 複素数の四則計算，極形式，偏角と絶対値
- (2) 多数の文字を含む式の変形，特に，部分分数分解への変形
- (3) 対数の基本的な性質を利用した式の変形，特に，対数を含む式から指数の式への変形
- (4) 指数関数を含む方程式の解法
- (5) 基本的な関数のグラフ，特に，分数・指数・対数・三角関数のグラフ

微分積分では、

- (1) 基本的な関数の導関数の計算
- (2) 関数の極値の計算，特に最大値・最小値の計算
- (3) 二分法による方程式の数値解の計算
- (4) 部分分数分解への変形を伴う積分の計算

微分方程式では、

- (1) 微少量 dx, dy に関する式から微分方程式の導出
- (2) 微少量 dx, dy に関する式からの積分計算
- (3) 変数分離形や 1 階線形微分方程式の解析解の計算

ラプラス変換では、

- (1) ラプラス変換や逆ラプラス変換の意味と主要な基本公式

- (2) ラプラス変換を利用した微分方程式の解法や、ブロック線図や伝達関数に対する理解
 (3) 微分方程式の解を入力に対する出力としての理解と、ステップ応答や周波数応答などへの理解

フーリエ変換では、

- (1) フーリエ変換の意味や、フーリエ変換はラプラス変換の変数 s を $j\omega$ に変えることにより得られることへの理解
 (2) フーリエ変換した式は複素数であることへの理解
 (3) 複素数をベクトルとしてとらえた理解や複素数の大きさや偏角の具体的な計算

以上の計算を、多数の文字係数を含む式に対して行わなければならない。そこでは、どの文字が独立変数で、どの文字が従属変数なのかをしっかりと理解して計算する必要がある。また、多くの文字係数の中で、定数であるのはどの文字であるのかも把握しておく必要がある。つまりは、応用数学の内容まで含めた数学に関する基礎知識を踏まえた上で、さらにそれらを使いこなす総合的な数学力が求められているといえよう。

物質化学工学科では女子学生が約半数を占める。実際に授業を行っている第2著者の印象では、授業の理解度に特に男女差は生じていない。どちらかという、純粋に化学が好きでフラスコを使った実験がしたい学生などは、数学の必要性をあまり感じていない傾向が感じられるという。ここで述べられた内容が必修科目である以上、学生達は必死で覚えよう、理解しようとしたことであろう。そのような努力の中で、数学に対する理解もある程度は向上したのではないかと思われる。実際の化学プロセスと結びついた計算であるので、数学上の計算の意味が実際に即して理解されだろうことも推察される。その意味では、通常の数学の授業において、今学んでいる内容が高学年のどのような場面が必要になるかを伝えるだけでも、数学への取り組み具合が異なったものになるかもしれない。

化学工学では光や波を扱うことも多い。そこではフーリエ級数やフーリエ変換に関する基礎的理解が必須であり、たたみ込み積分への理解も必要である。数学教員の多くは、化学系の学科でこれらの知識が必要という認識はほとんどないと思われる。過去の調査でも、化学系の学科でここまで数学が必要という報告はなされていない¹⁾。この学科で必要な数学の内容については、再検討が必要なように感じられる。

7. おわりに

高専に長年勤めてきた第1著者は、物質化学工学科でこれほどの数学が必要とされていることの認識がなかった。他学科でも同様に数学を駆使する科目があるのではないかと思い、反応工学の内容を他学科の数名の5年生に見てもらくと、どの学科の学生も「ここまで数学を使うような科目は自分の学科にはない」と述べていた。したがって、本校で最も数学力を必要としている学科は、電気情報工学科でも機械工学科でも制御情報工学でもなく、物質化学工学科の学生達であるといえる。専門学科が望む学生の数学力について再認識させられた思いがある。

参考文献

- [1] 佐藤義隆・五十嵐貫, 他 11 名: 工学系に必要とされる数学に関する調査研究 1—化学系分野における数学—, 日本数学教育学会高専部会論文誌, Vol.4, No.1, 1997