製品純度が指定される場合の簡略化蒸留計算法*

鈴木 功**, 八木 宏**, 平田 光穂**

A Simplified Calculation Method of Distillation When Product Purities are Specified*

by Isao Suzuki**, Hiroshi Yagi** and Mitsuho Hirata**

Summary : A simplified calculation method of multi-component distillation, which specifies the purity of products, was recently reported by Mr. Matsumura for process simulation and optimization. He assumed separation factors of light and heavy key components, and obtained convergent solutions by the Newton-Raphson method of two variables. But this method has some defects as represented by difficulty in assuming initial values and by complexity of equations involved.

In this paper, a method is proposed for solving the above problems. Selecting quantities of the top product as variables, which is restricted into a narrow range of specified product purities, convergent solutions were obtained by use of the Regula-Falsi method. The computational procedure is simple, fast and numerically stable.

1 緒 言

蒸留塔の物質収支を計算する方法として、厳密解を得るための逐次段計算法や解析的計算法と並んで全還流に基づいた簡略化計算法が設計に利用されている。最近では Liddle¹⁾ と Hengstebeck²⁾ らにより簡略化計算法についての検討が加えられた。またプロセスのシミュレーションや最適化制御が盛んになるにつれて、製品純度が指定される場合の簡略化計算法が要求されるようになり、最近松村³⁾ により報告された。

松村は Fenske の式を用いて、まず低沸点と高沸点限界成分の分離率を仮定して最小理論段数を計算し、次にこの最小理論段数を用いて非限界成分の分離率を求め、この結果から製品純度を計算し、指定された純度になるまで試行錯誤計算を繰り返している。この方法では純度を従属変数とする二変数を探索する必要があり、二変数の Newton 法を用いて収束を速めている。しかし、低沸点と高沸点限界成分の分離率を収束解の近くに仮定しないと収束解が得られない場合があり、また Newton 法を用いているので偏微分式が必要になり、この式が複雑なことが欠点と思われる。

そこで、筆者らはこの問題に対して塔頂留出量のみを仮定して、一変数の Regula-falsi 法により比較的容易に収束解を求めることができたので報告する。

2 計 算 法

製品純度が指定される場合の簡略化計算というのは、具体的に書き換えると、原料供給量、原料組成、留出液とかん出液の任意成分の純度が与えられている場合に Fenske の式を用いて

* 昭和 44 年 6 月 14 日受理

** 東京都立大学工学部 (東京都世田谷区深沢) Faculty of Engineering, Tokyo Metropolitan University (Fukazawa, Setagaya-ku, Tokyo)

最小理論段数と各成分の分離率を求める問題であり、この場合に純度は (成分数-3) 個必要である。

ここで最小理論段数を S_m 、低沸点と高沸点限界成分の留出組成を $x_{D,lk}$, $x_{D,hk}$ 、それぞれのかん出組成を $x_{w,lk}$, $x_{w,hk}$ 、また高沸点限界成分に対する低沸点限界成分の比揮発度を $\alpha_{lk,hk}$ (脚注 1) とすると Fenske の式は次式となる。

$$S_m = \frac{\log \left(\frac{x_{D,lk} x_{w,hk}}{x_{w,lk} x_{D,hk}} \right)}{\log \alpha_{lk,hk}} \quad (1)$$

原料供給量を F 、留出量を D 、かん出量を W とし、おのおのの組成を z_i , $x_{D,i}$, $x_{w,i}$ 、おのおのの流量を f_i , d_i , w_i で表わす。分離率 (η_i) は次式により定義する。

$$\eta_i \equiv \frac{d_i}{f_i} \quad (2)$$

したがって

$$1 - \eta_i = \frac{w_i}{f_i} \quad (3)$$

今、留出液中の l 成分の純度とかん出液中の m 成分の純度が指定されたとすると、

$$\frac{d_l}{\sum d_i} = \frac{d_l}{D} = \frac{f_l \cdot \eta_l}{D} = x_{D,l} \quad (4)$$

$$\frac{w_m}{\sum w_i} = \frac{w_m}{W} = \frac{f_m (1 - \eta_m)}{F - D} = x_{w,m} \quad (5)$$

上式より

$$\eta_l = \frac{D x_{D,l}}{f_l} \quad (6)$$

$$\eta_m = 1 - \frac{x_{w,m} (F - D)}{f_m} \quad (7)$$

l, m 成分に対して分離率を用いて式 (1) を書き換えると次式をうる。

$$S_m = \frac{\log \left(\frac{1 - \eta_m}{\eta_m} \cdot \frac{\eta_l}{1 - \eta_l} \right)}{\log \alpha_{l,m}} \quad (8)$$

脚注 1) 操作圧力、原料供給温度における値を用いる。

次に Fenske の式から l 成分に対して i 成分の分離率を求める

$$\eta_i = \frac{\eta_l}{\eta_l + (\alpha_{l,i})^{S_m}(1 - \eta_l)} \quad (9)$$

以上の式から D を仮定すると計算による D の値が求まる。すなわち、 D を仮定すると (6), (7) から η_l, η_m が求まり、これらの値を式 (8) に代入して S_m を求め、 S_m と η_l を式 (9) に代入すると η_i が得られる。ここで、 η_i と f_i から D を計算することができる。そこで

$$G(D) = D - \sum_{i=1}^N f_i \eta_i = 0 \quad (10)$$

上式を解くには、Newton 法を用いることもできるが、ここでは微分式が複雑になるので Regula-falsi 法を用いる。

次に D の存在領域について考える。分離率は定義から明らかに

$$0 < \eta_l < 1$$

$$0 < \eta_m < 1$$

上式と式 (2), (3) から次式をうる

$$0 < D < \frac{f_l}{x_{D,l}}$$

$$F - \frac{f_m}{x_{w,m}} < D < F$$

D が存在するためには

$$F - \frac{f_m}{x_{w,m}} < \frac{f_l}{x_{D,l}}$$

ゆえに D の存在領域は

$$F - \frac{f_m}{x_{w,m}} < D < \frac{f_l}{x_{D,l}} \quad (11)$$

実際には、 D に比べて十分小さな値 ϵ を上式に加えて次式を用いる。

Fig. 1 Calculation Procedure for the Example

$$F - \frac{f_m}{x_{w,m}} + \epsilon \leq D \leq \frac{f_l}{x_{D,l}} - \epsilon \quad (12)$$

以上は製品純度が指定される場合であるが、この方法は段数と留出量を与えられている場合にも応用できる。つまり、変数として η_l を仮定し式 (8) で η_m を求め、式 (9) により η_i を計算し、式 (10) を用いてやはり一変数の Regula-falsi 法で解くことができる。

3 計算例

松村が取り扱った脱プロパン塔を例として収束解を求める。与えられた条件を Table 1 に示す。なお計算手順は Fig. 1 のとおりであり、式 (12) の ϵ は 0.01 とおいた。 $G(D)$ の関数は制限領域内で Fig. 2 に示すような形をしており、収束過

Fig. 2 Calculated $G(D)$ Curve for the Example

Fig. 3 The Distribution of $G(D)$ by Successive Approximations

Table 1 Input Specifications for the Example

Comp.	$C_1(1)$	$C_2(2)$	$i-C_4(3)$	$n-C_4(4)$	$C_5(5)$
Feed (f_i)	0.5	90.4	39.62	116.3	1.0
Relative Volatility ($\alpha_{i,i}$)	0.4611	1.0	1.78	2.155	3.828
$x_{D,i}$		0.98			
Purity (mol. fr.) $x_{w,m}$				0.74	

程は Fig. 3 のとおりである。また Table 2 に収束解を示した。松村らとほぼ同じ回数で収束していることがわかる。

4 結 語

製品純度が指定されている場合の簡略化蒸留計算法について、留出量を制限領域の上限値と下限値に機械的に設定して、一変数の Regula-falsi 法により容易に収束解をうることができた。さらにこの方法は、段数と留出量が与えられている場合にも応用できる。

引 用 文 献

- 1) Liddle, C.J., *Chem. Eng.*, **75**, (23), 137 (1968).
- 2) Hengstebeck, R.J., *ibid.*, **76**, (1), 115 (1969).
- 3) 松村 真, 化学工学第 34 年会, 講演要旨集第 3 分冊, 4 (1969) 東京.

Table 2 Results of Computation for Depropanizer

Initial Condition								
D			$G(D)$					
90.668			1.229					
92.235			-9.165					
Trial No.	D	$G(D)$	Plate No.	η_1	η_2	η_3	η_4	η_5
1	90.853	0.448	14.155	1.00000	0.98491	0.01829	0.00124	0.00000
2	90.917	0.222	13.846	1.00000	0.98561	0.02282	0.00165	0.00000
3	90.949	0.115	13.729	1.00000	0.98595	0.02495	0.00185	0.00000
4	90.965	0.061	13.676	1.00000	0.98612	0.02602	0.00195	0.00000
5	90.973	0.033	13.649	1.00000	0.98621	0.02659	0.00201	0.00000
6	90.977	0.018	13.636	1.00000	0.98626	0.02689	0.00203	0.00000
7	90.980	0.010	13.628	1.00000	0.98629	0.02705	0.00205	0.00000
8	90.981	0.005	13.624	1.00000	0.98630	0.02713	0.00206	0.00000
9	90.982	0.003	13.622	1.00000	0.98631	0.02718	0.00206	0.00000

新刊紹介

"Biodeterioration of Materials Microbiological and Allied Aspects"

Edited by

A. Harry Walters & John J. Elphick

本書は 1968 年 9 月, イギリスの Southampton 大学で行なわれた第 1 回国際生劣化 (biodeterioration) シンポジウムに提出された論文集から成っており, このような活動はイギリス化学工業協会の微生物グループによって 1965 年に組織された生劣化シンポジウムに始まり, OECD を初め Brit. Petr.; Esso Petr.; Shell Chem.; Courtaulds; Geigy; ICI; Monsanto Chem.; Unilever などの支援のもとに行なわれたものである。内容は,

- I. 生劣化の基礎, 4 編
 - II. 生劣化の機構, 4 編
 - III. 生劣化の生態学的様相, 6 編
 - IV. 生劣化抵抗の試験, 5 編
 - V. 生劣化の抑制, 4 編
 - VI. 物質の生劣化と保護, 10 編
 - VII. 炭化水素微生物学と金属の腐食, 5 編
 - VIII. 木材腐朽の生態学的様相, 6 編
 - IX. 殺菌剤 (biocides), 6 編
 - X. 酵素と木材破壊有機物の生理学, 7 編
 - XI. 海水汚濁, 5 編
 - XII. 貯蔵製品の微生物学, 5 編
- の 67 編から成っている。

このうち特に石油に関係の深いのは,

II-2, 炭化水素の分解機構, R.W. Traxler & W.L. Flannery, 南西ルイジアナ大学 (アメリカ)

VII-1, 金属の有機酸腐食とこれらの腐食過程に関連する機構, O.H. Calderon, E.E. Staffeldt & C.B. Coleman, ニューメキシコ州立大学ほか (アメリカ)

VII-2, 航空機燃料系統における断続的使用の殺菌燃料添加剤の評価, J.J. Elphick & S.K.P. Hunter, Admiralty Materials Lab. (イギリス)

VII-3, *Cladosporium Resinae* の天然源としての土壌, D.G. Parbery, メルボルン大学 (オーストラリア)

VII-4, 潤滑油およびエマルションの微生物分解とその工学的意義, E.C. Hill, 南ウエルズ大学 (イギリス)

VII-5, ガンマー線照射による切削油劣化の抑制, H.W. Rossmore & J.G. Brazin, Wayne 州立大学 (アメリカデトロイト市)

のほか, ポリ塩化ビニル関係の生劣化や殺菌剤関係の発表であろう。このような地道な研究にわが国からも発表が寄せられることを期待している。

発行所: Elsevier Publishing Co.

ページ: 740 発行年: 1968 年

定 価: 13,200 円

(平川芳彦)