

A304 単蒸留実験を用いて推定した組成や物性パラメータによる 多成分系バッチ蒸留操作の検討

(オメガシミュレーション)○(正)横山 克己*、(日大理工)(学)本橋 賢典、
(正)松田 弘幸、(正)栗原 清文、(正)栃木 勝己

1. はじめに

溶剤回収などの小規模な分離操作にはバッチ蒸留を利用する機会が多いが、シミュレーションによりその運転の操作を検討するためには、溶液に含まれている成分の組成と物性パラメータ（気液平衡関係やエンタルピ）が必要となる。比較的容易に実験ができる単蒸留実験装置を用いて、留出する際の温度および留出量の測定を行い、連立常微分方程式で表される単蒸留の数式モデルを使って、バッチ蒸留シミュレーションのためのデータが得られないかを検討した。なお、筆者らは数式モデルの温度変化と単蒸留の温度測定値から、最小 2 乗法で組成を決定する方法を報告した[1]。

組成と物性パラメータの組み合わせから、①含まれている成分が既知で物性パラメータが存在するが組成が分からない、②組成は分かっているが一部の成分の物性パラメータが不明③組成が分からず含まれている一部の成分も不明（あるいは物性パラメータが不明）、の 3 ケースが考えられる。まず、理想溶液が仮定できる系と非理想溶液系の 2 種類の 3 成分系について、温度と留出量の測定を行い、組成を推定することを検討した（①のケース）。つぎに理想溶液系について、1 成分の物性パラメータが不明なケースを想定して、測定値を用いて組成と物性パラメータを推定した（②、③のケース）。この推定結果を使ってバッチ蒸留操作がどの程度検討できるかを確認した。

2. 数式モデルと解法

使用した単蒸留の数式モデルは

$$\langle \text{物質収支} \rangle \quad \frac{dU}{dt} = -D \quad (1)$$

$$\frac{d(U \cdot x_i)}{dt} = -D \cdot y_i \quad (i=1,2,3) \quad (2)$$

$$\langle \text{熱収支} \rangle \quad \frac{d(U \cdot h)}{dt} = -D \cdot H + Q \quad (3)$$

である。ここで、 U はフラスコ内のホールドアップ量、 D は留出量、 x_i は液相組成、 y_i は気相組成、 h は液相エンタルピ、 H は気相エンタルピ、 Q は加熱量である。これに気液平衡式を加えて解いた。なお、蒸気圧には Antoine 式を非理想溶液の活量係数 γ には Wilson 式を用い、エンタルピは 2 次式で表現した。

バッチ蒸留の数式モデルも同様に各段の物質収支、

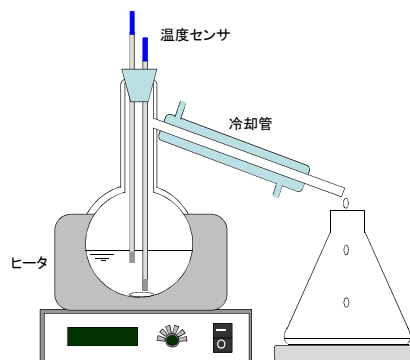


図 1 単蒸留実験装置

熱収支から構築した。

単蒸留モデルを使った測定値からの組成および物性パラメータの推定や、バッチ蒸留計算のシミュレーションには、方程式解法ソフト EQUATRAN-G を用いた。

3. 実験とその結果

図のような単蒸留実験装置を用いた。3 成分系には、理想溶液が仮定できるベンゼン+トルエン+p-キシレン系と、非理想溶液のメタノール+エタノール+水系を試みた。前者は温度のみを、後者は温度と留出量の測定値を使って、いずれの系でも精度よく初期組成を推定することができた。一例を表に示した。

表 1 初期組成の推定

	成分	初期組成(モル分率)		誤差
		測定値	推算値	
#1	メタノール	0.2007	0.1916	0.91%
	エタノール	0.3005	0.3087	0.82%
	水	0.4988	0.4998	0.10%
#2	メタノール	0.3012	0.2907	1.05%
	エタノール	0.1997	0.2078	0.81%
	水	0.4990	0.5015	0.24%
#3	メタノール	0.2995	0.3182	1.87%
	エタノール	0.3002	0.2892	1.10%
	水	0.4003	0.3926	0.77%

4. バッチ蒸留シミュレーションへの適用

ベンゼン+トルエン+p-キシレン系でトルエンが不明とした場合を想定して、測定値を用いて組成のみ（②のケース）と組成および物性パラメータ（③のケース）を推定した。その推定結果を使ってバッチ蒸留のシミュレーションを行い、既知の計算結果と比較した。工業的な運転操作の検討に十分利用できることが分かった。

[1] 本橋ら: 化学工学会第 74 年会 講演要旨集 F317 (2009)

* E-mail: katsumi@omegasim.co.jp