

連載 Excel で解く化学工学10大モデル 第1回 蒸留塔のMcCabe-Thiele法

伊東 章

1. 対象とするプロセス：棚段式蒸留塔

蒸留は気液平衡を利用して成分分離をおこなう単位操作であり、蒸留塔は棚段上で気液を沸騰状態で接触させ、この気液接触段を重ねた構造により、蒸気は塔の上方へ、液は下方に流下させ、塔頂と塔底で成分を分離する分離プロセスである。

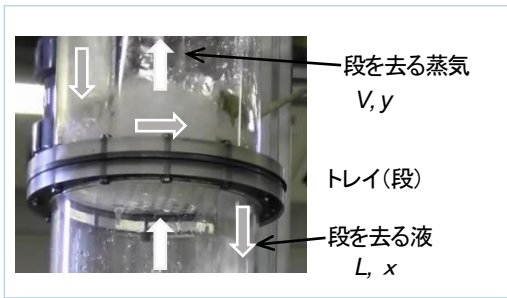


図1 トレイ(段)上の気液接触

2. モデル式の作成

ここで考える蒸留塔をリボイラの1段を含め理論段8段の蒸留塔とする。(図2, 図3)この塔で2成分混合液を分離する場合について、2つの仮定をおこないモデル化する。
 仮定1：気液の流量一定 蒸気流量 V, V' 、液量 L, L' は塔内で一定とする。ただし供給段前後では異なる。
 仮定2：各段を去る気液は気液平衡にある これが「理論段(theoretical plate)」, 「理想段(ideal stage)」の仮定である。ある段 i から下降する液の組成 x_i と、段上の液から発生する蒸気の平均組成 y_i が気液平衡の関係にあるとする。この x_i, y_i は段上の組成(変化)にはかかわりない。

各理論段に塔頂の1から始まり塔底(リボイラ)を8と番号をつける。原液、留出液、缶出液、還流の流量を各々 F, D, W, L とし、組成を $z_F, x_D, x_W, x_L (=x_D)$ とする。原液は第6段上へ供給され、流量 qF の液と $(1-q)F$ の飽和蒸気との混合物で供給されるものとする。塔内の気液流量は、濃縮部：蒸気流量 V および液流量 L

回収部：蒸気流量 $V' = L + qF - W$ および液流量 $L' = L + qF$

で、これらは仮定1より定数である。

仮定2の理論段の条件より気液平衡関係：

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (a)$$

が $[x_1, y_1=x_D], [x_2, y_2], [x_3, y_3], [x_4, y_4], [x_5, y_5], [x_6, y_6], [x_7, y_7], [x_W, y_8]$ の組で成立する。 $(\alpha$: 相対揮発度) これより塔内組成の未知数は液相の $x_D, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_W$ の9個になった。これらについて物質収支を以下のようにたてる。

① 塔全体の低沸点物質収支： $Fz_F = Dx_D + Wx_W$ (1)

② 塔頂での関係：塔頂蒸気 y_1 は全縮器で全て凝縮されて x_D になるので、次式である。

$$x_D = y_1 \quad (2)$$

③ 濃縮部の $[x_1, y_2], [x_2, y_3], [x_3, y_4], [x_4, y_5], [x_5, y_6]$ の関係：例えば図の塔頂まわり①境界で全体および低沸点成分の物質収支は(入り) = (出)として、次式である。

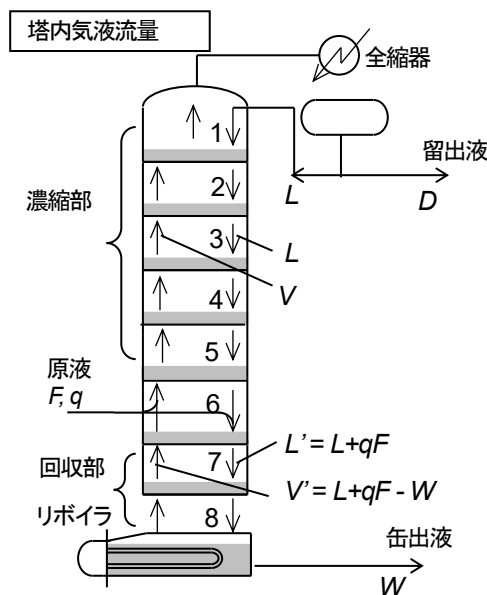


図2 蒸留塔の気液流量

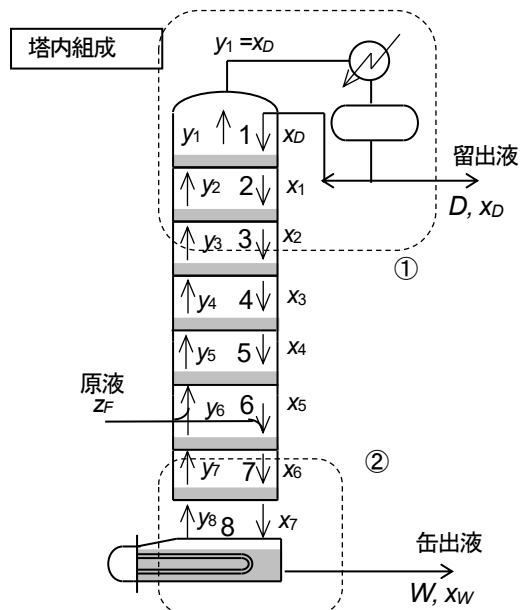


図3 2成分系蒸留塔の塔内組成

全体： $V=L+D$ ， 低沸点成分： $Vy_3=Lx_2+Dx_D$

V を消去して次式となる。

$$y_3 = \frac{L}{L+D}x_2 + \frac{D}{L+D}x_D \quad (4)$$

同様に他の段についても次式が得られる。

$$y_2 = \frac{L}{L+D}x_1 + \frac{D}{L+D}x_D \quad (3), \quad y_4 = \frac{L}{L+D}x_3 + \frac{D}{L+D}x_D \quad (5),$$

$$y_5 = \frac{L}{L+D}x_4 + \frac{D}{L+D}x_D \quad (6), \quad y_6 = \frac{L}{L+D}x_5 + \frac{D}{L+D}x_D \quad (7)$$

($R=L/D$ が還流比である。)

④ 回収部の $[x_6, y_7], [x_7, y_8]$ の関係：例えば図1の塔底まわり②境界の物質収支は次式である。

$$\text{全体： } L+qF=V'+W$$

$$\text{低沸点成分： } (L+qF)x_6=V'y_7+Wx_w$$

V' を消去して次式となる。

$$y_7 = \frac{L+qF}{L+qF-W}x_6 - \frac{W}{L+qF-W}x_w \quad (8)$$

同様に他の段についても次式が成り立つ。

$$y_8 = \frac{L+qF}{L+qF-W}x_7 - \frac{W}{L+qF-W}x_w \quad (9)$$

3. モデル式の解法

以上により、9個の未知数に関する9個の連立方程式(式(1)~(9))が得られた。この連立方程式をExcelのソルバーで解く。

【例題1】エタノール水溶液の蒸留分離<cem01.xls>

理論段の数8の蒸留塔でエタノール/水の2成分系混合液を分離する。 $F=1$ kmol/s, 供給組成 $z_F=0.4$, 供給液の液割合 $q=0.5$, 留出液量 $D=0.5$, 還流比 $R(=L/D)=1$ の設定条件で塔内組成分布を計算し, 塔の分離性能 x_D, x_W を求めよ。エタノール/水系の気液平衡は α を x の関数として計算される。(図4のセルC10-C17)

(解) 図4のExcelシートでB1:B7にパラメーター, B9:B17に未知数の適当な初期値を入れる。C10:C17に気液平衡関係(式(a))を, D9:D17で y_i を計算し, E9:E17に式(1)~(9)の残差((右辺)-(左辺))を書く。E18に残差2乗和を計算し, ソルバーでE18を目的セル, B9:B17を変化させるセルとして最小化する。これで連立方程式が解かれ, 解がB9:B17に得られる。図5に得られた蒸留塔内各段の組成を階段状に描いて示す。

	A	B	C	D	E	F	G
1	F=	1				L/(L+D)=	0.5
2	D=	0.5				D/(L+D)=	0.5
3	W=	0.5				=C10*B10/(1+(C	0.5
4	zF=	0.4				(L	0.0
5	q=	0.5				W/(L+qF-W)=	1.00
6	R=	1					
7	L=	0.5				=B2*B9+B3*B17-B1*B4	
8		x	α	y_i	Eqs.		
9	xD=	0.747				-2.6E-05	式(1)
10	x1=	0.698	1.28	0.747		-3.5E-07	式(3)
11	x2=	0.636	1.49	0.723		1.02E-06	式(4)
12	x3=	0.554	1.80	0.692		7.11E-06	式(5)
13	x4=	0.464	2.15	0.651		4.41E-06	式(6)
14	x5=	0.375	2.56	0.606		4.77E-06	式(7)
15	x6=	0.283	3.24	0.561		8.61E-06	式(8)
16	x7=	0.188	4.56	0.514		4.77E-06	式(9)
17	xW=	0.053	8.55	0.323		0.000	式(2)
18						1.09E-09	=SUMSQ(E9:E17)
19							

図4 2成分系蒸留塔の各段組成計算<cem01.xls>

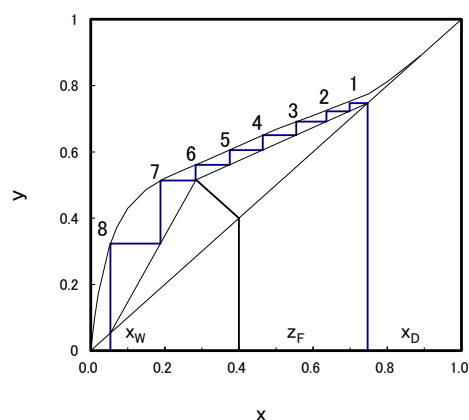


図5 塔内各段の濃度

例題1では蒸留塔の理論段の数が与えられ, 還流比をパラメーターとして分離性能(x_W, x_D)を求めた。これを操作型の問題という。これとは逆に, 分離性能(x_W, x_D)と還流比を指定して, それに必要な段数を求めるのが設計型の問題である。McCabe-Thiele法¹⁾は同じ仮定1, 仮定2を用いるこの設計型問題の解法である。

McCabe-Thiele法では段数の添字のない式(4), (8)を用い,

$$\text{濃縮部操作線： } y = \frac{L}{L+D}x + \frac{D}{L+D}x_D$$

$$\text{回収部操作線： } y = \frac{L+qF}{L+qF-W}x - \frac{W}{L+qF-W}x_w$$

と平衡線間で階段作図をおこない, 設定した分離に必要な理論段の数を求める。普通はグラフ用紙上で手書きにより階段作図をおこなうのだが, これをExcelシート上で自動作図することを試みた。

【例題2】McCabe-Thiele法による段数計算<cem02.xls>

還流比と塔の分離性能を与えて, 理論段の数をグラフ上で求めよ。

(解) 図6が還流比, 塔頂塔底濃度などの条件(B列)を与

えて、グラフ上で McCabe-Thiele 法の階段作図をおこなう Excel シートである。(簡単のため α は一定値としている。) E 列で操作線上の y を計算する。これは濃縮部操作線と回収部操作線の式で求められる y の小さい方の値とする。(E)F 列にこの y から平衡な x を計算し、平衡線上の点を求める。これを塔頂の $x_D=y_1$ の値から出発して、順次交互に y, x を求め、指定の塔底濃度 x_W を超えた段数が求められる理論段の数である。(図 7)

このシートでは R, q, α を変えて階段作図の様子、段数の変化をみる事ができる。これにより「最小還流比」、「最小理論段数」の理解が容易になるであろう。

	A	B	C	D	E	F
1	McCabe-Thieleの階段作図法 理論段の数					
2	F=	1	n	y n	x n	
3	D=	0.5		0.930	0.930	=xD
4	W=	0.5		1	0.930	0.842
5	R=	3		0.864	0.842	
5	L=DR=	1.5	2	0.864	0.717	
7	zF=	0.5		0.770	0.717	
3	qF=	0.5	3	0.770	0.573	
3	xD=	0.93		0.662	0.573	
0	xW=	0.07	4	0.662	0.440	
1	α =	2.5		0.562	0.440	
2	R/(R+1)	0	=MIN(\$B\$12*\$F4+\$B\$13*\$B\$9,\$			
3	1/(R+1)	0	B\$14*\$F4-\$B\$15*\$B\$10)			
4	(L+qF)/(L+qF-W)	1.3				
5	W/(L+qF-W)	0	=(E4*(1/\$B\$11))/(1+((1/\$B\$11)-1)*E4)			

図 6 McCabe-Thiele 法解法シート<cem02.xls>

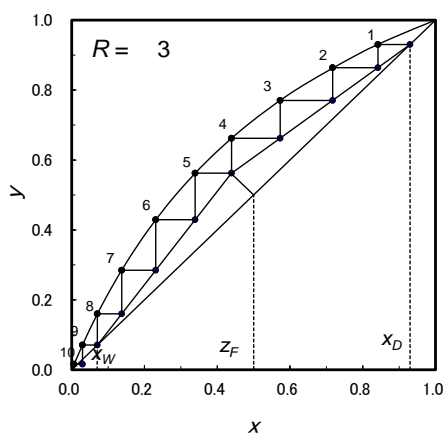


図 7 Excel による McCabe-Thiele 法段数計算

(例題のファイルは化学工学会のホームページに掲載されています。ダウンロードしてお試ください。)

原典 1) W.L. McCabe and E.W. Thiele: *Ind. Eng. Chem.*, **17**, 605 (1925).

化学工学トリビア 理論的な段数？

McCabe-Thiele 法で求められる「理論段数」とは「The number of theoretical plates or trays」の訳であるので「理論段の一の数」という意味である。しかし最近の化学工学の教科書では、

「段数は整数にならないが、理論段であるから端数を生じてもよい」(2006 年出版)

「得られた段数が理論的に必要な理論段数」(2010 年)

「理論段数(theoretical number of stages)」(2012 年)(2006 年)

「理論段数はあくまで理論的に要求される段数である」

(2012 年)

など、著者が理論段数を「理論的な(計算上の)段数」と誤解しているような記述が多くみられる。これでは「理論段(=理想段=平衡段=段を去る気液が平衡にある)」という McCabe-Thiele 法の基本の仮定 2 が見失われることになる。筆者は本稿であえて「理論段の数」と書いて注意喚起しているつもりである。