

例題で学ぶ 化学プロセスシミュレータ

—フリーシミュレータ COCO/ChemSep
と Excel による解法—

化学工学会 編
工学博士 伊東 章 著

コロナ社

ま え が き

化学工学の教育カリキュラムは化学工学量論に始まり、移動現象論、単位操作とつづく体系としてすでに確立しており、その内容は長年変わっていない。しかし最近のプロセス設計の現場では、Aspen, HYSYS, PRO/II などの化学プロセスシミュレータの使用が一般的となっている。シミュレータには化学工学の基礎事項の多くが内部に組み込まれ、コンピュータ画面上でプロセスを構成するだけで、設計計算とプロセスのシミュレーションが可能である。

筆者は化学工学教育者として、このようなプロセスシミュレータの普及による「化学工学のブラックボックス化」に危機感を抱いていた。化学工学の基礎事項がシミュレータの内部にブラックボックス化することは、化学工学を知らなくてもプロセス設計ができるということであり、化学工学技術者の専門性を脅かすことになる。これからの化学工学技術者は化学工学の理論・原理がわかった上で、プロセスシミュレータも使いこなせなくてはならない。そのためにシミュレータの使用を前提とした化学工学の教育方法を考える必要がある。

最近ではプロセス設計演習など上級科目でシミュレータの実習を行っている大学もあり、化学工学会主催でプロセスシミュレータによる「プロセスデザイン学生コンテスト」も毎年実施されている。しかし未だ化学工学教育の全般でシミュレータが活用されているとはいえない。これは実務経験のある教官が少なく、シミュレータを十分に教育できないこと、および商用シミュレータが実務向けで、システムが大きく、教材としては使い勝手の点でやや問題があったためと思われる。

しかし最近の化学プロセスシミュレータ COCO/ChemSep により、シミュレータの教育利用が身近なものになってきた。COCO/ChemSep はフリーソフトである。システムも小さく手軽に各自のパソコンにインストールできる。し

かしフリーソフトであるだけに、試そうとしても、サポートもなく資料も乏しい中での自習にならざるを得ない。

そこでこの COCO/ChemSep の登場を契機に、化学プロセスシミュレータを学ぶ講座を企画し、「パーソナル化学プロセスシミュレータ COCO/ChemSep で学ぶ化学プロセス計算」として化学工学会誌「化学工学」に連載した(2017年9号～2018年8号)。この連載講座では本格的なプロセス設計を目指すというよりは、むしろ基礎的な「化学工学量論」,「単位操作」,「反応工学」科目中の各種例題について、COCO シミュレータによる解法を紹介した。その際、同じ例題解法を従来の化工計算(Excelによる解法)と比較することを心掛けた。この形式により、プロセスシミュレータの使い方を習得すると同時に、その内部の化学工学の基礎事項を再確認して、シミュレータのブラックボックス化を防ぎたいという意図があった。

本書はこの連載を基にさらに例題を加え(連番途中に追加した例題の例題番号には、その前の例題番号に a, b, c, ... を付けた)、解説を詳しくしてまとめたものである。各例題解法ファイルはコロナ社ホームページからダウンロードでき、COCO/ChemSep を各自のパソコンで修得できるよう詳しくガイドした。しかし、実際には紙面によるソフトの実習・習得には困難が伴う。そこでほとんどの例題解法についてチュートリアルビデオを制作して YouTube 上に掲載してあるので、本書と併用して活用していただきたい。

本書が化学工学教育全般で化学プロセスシミュレータを取り入れる契機となり、化学工学の基礎知識をマスターした上でシミュレータを使いこなせるケミカルエンジニアの育成に役立つことを願っている。

化学工学誌連載にあたっては関口秀俊氏(東京工業大学)、渕野哲郎氏(東京工業大学)、佐々木正和氏(東洋エンジニアリング)、および原稿の校閲をいただいた化学工学誌編集委員の滝澤正規氏、平岡一高氏にお世話になった。記して感謝申し上げます。

2018年9月

伊東 章

3. 反応プロセス

【例題 5】	燃焼ガス温度（反応率反応器 Fixed conversion reactor）	36
【例題 6】	平衡組成（ギブス反応器 Gibbs reactor）	40
【例題 6a】	平衡組成（平衡反応器 Equilibrium reactor）	45
【例題 6b】	複合反応の平衡組成	48
【例題 7】	リサイクル・パージプロセス	51

4. 熱交換器

【例題 8】	熱交換器（並流）	55
【例題 9】	熱交換器（向流）	58
【例題 10】	内部で相変化のある熱交換器	60
【例題 11】	熱交換器システム	61
【参考例題】	冷蔵庫のモデル（冷凍サイクル）	65

5. 蒸 留

【例題 11a】	2 成分系フラッシュ蒸留（エタノール/水系）	67
【例題 11b】	3 成分系フラッシュ蒸留（炭化水素系）	70
【例題 11c】	断熱フラッシュ	73
【例題 11d】	単 蒸 留	75
【例題 12】	2 成分系蒸留（エタノール/水系）	77
【例題 12a】	充填塔による 2 成分系蒸留 —物質移動モデル—	82
【例題 12b】	2 成分系精密蒸留	87

【例題 12c】	空 気 蒸 留	89
【例題 13】	多成分系蒸留 (C4-C9 炭化水素系)	91
【例題 13a】	3 塔による蒸留系列 (C2-C5 炭化水素系)	97
【例題 14】	圧力スイング蒸留 (エタノール/ベンゼン系)	99
【例題 15】	共沸蒸留 (エタノール/水/ベンゼン系)	101
【例題 15a】	抽出蒸留 (アセトン/メタノール/水系)	103

6. 調 湿

【例題 16】	断 熱 増 湿	108
【例題 17】	圧 縮 除 湿	111
【例題 18】	水による空気の冷却	113
【例題 19】	冷 水 塔 (1)	115
【例題 19a】	冷 水 塔 (2)	118

7. 抽 出

【例題 20】	単抽出 (水による酢酸の抽出)	120
【例題 21】	向流抽出 (スルホランによるベンゼンの抽出)	124
【例題 22】	並流多段抽出 (エーテルによるエタノールの抽出)	129
【例題 22a】	酢酸水溶液の酢酸エチルによる向流抽出	133

8. ガ ス 吸 収

【例題 23】	単成分蒸気の吸収操作 (エタノール蒸気の水による吸収)	137
---------	-----------------------------	-----

【例題 23a】	単成分ガスの吸収操作 (SO ₂ ガスの水による吸収) ……………	141
【例題 23b】	単成分蒸気の吸収操作 (気相支配) (アンモニア蒸気の水による吸収) ……………	146
【例題 23c】	放散操作 (廃水中の VOC 放散) ……………	149
【例題 24】	多成分蒸気の吸収操作 (炭化水素蒸気の洗浄) ……………	152
【例題 24a】	吸収-放散プロセス (1) (水による CO ₂ 吸収) ……………	154
【例題 24b】	吸収-放散プロセス (2) (TEG による天然ガスの除湿) ……	156

9. 反応工学 —CSTR と PFR—

【例題 25】	CSTR と PFR (液相 1 次反応) ……………	159
【例題 26】	CSTR と PFR の組合せ (液相自触媒反応) ……………	167
【例題 27】	気相 PFR (気相 1 次反応) ……………	170
【例題 27a】	気相 PBR (触媒層反応器) ……………	174
【例題 28】	回分反応 (BR) (液相逐次反応) ……………	177

10. 反応工学 —非等温反応器—

【例題 29】	非等温 CSTR —液相ブタン異性化反応— ……………	182
【例題 29a】	非等温 PFR —液相ブタン異性化反応— ……………	185
【例題 30】	非等温 PFR —気相アセトン分解反応— ……………	188
【例題 31】	非等温 PBR (1) —メタンの改質反応— ……………	191
【例題 32】	非等温 PBR (2) —ベンゼンの水素化反応— ……………	195

11. Excel との連携

- 【例題 33】 管内流れの圧力損失……………200
【例題 34】 ガス分離膜モジュール（ソルバー使用例）……………204

12. プロセス設計

- 【例題 35】 多重効用蒸発……………209
【例題 36】 トルエンの脱アルキル化プロセス……………212
【例題 37】 エチレングリコール製造プロセス……………214
【例題 38】 メタノールプロセス……………216
- 引用・参考文献……………220
索 引……………221

編集注記

本書で解説する COCO/ChemSep 化学プロセスシミュレータは、Windows XP 以降の Windows OS が前提となります。また、11 章で解説する Excel unit operation は、Windows XP では動作しませんのでご注意ください。また、その必要な Excel バージョンは 2010 以降です。なお、本書での Excel に関する表記は、2016 が前提となっていますが、それ以前のバージョンでも動作します（どのバージョンまで動作するかは確認していません。2010 以降を推奨します）。

アプリケーション本体画面、あるいは設定画面などについては、本書では“ウィンドウ”あるいは“画面”という表記をし、警告メッセージなどの画面を“ダイアログボックス”と表記しています。一連のプロセスを記載するのに→が多く使われますが、場合によっては、設定内容が入れ子になっている場合にその設定過程としてスラッシュを使うこともあります。また、設定内容の併記にスラッシュやカンマを使うことがあります。(設定項目):(設定内容)もよく使われます。

本書の図番は、(例題番号).(例題内連番)となっています。また、例題に属さない図については、(章番).(章内連番アルファベット記号)となっています。

本書例題で使用したシミュレーションデータおよびチュートリアルビデオについては、以下のとおりです。これらデータのご利用およびシミュレータのご使用については、基本的に自己責任でお願いいたします。著者およびコロナ社は、原則として、これらに関する質問には応じられませんので、ご理解のほどお願いいたします。

COCO/ChemSep 化学プロセスシミュレータのダウンロード

COCO/ChemSep のインストールは COCO サイト：<http://www.cocosimulator.org/> からダウンロードして行う。本書編集時、最新バージョンは 3.2 で、稼働 OS は Windows XP 以降である。実行形式のインストーラーになっているので、ダウンロード後ダブルクリックでインストール作業を進めることができる。

本書例題で取り扱った COCO, ChemSep, Excel ファイルとチュートリアルビデオ

本書各例題で取り扱った COCO (.fsd), ChemSep (.sep), Excel (.xlsx および .xlsm) ファイルは、コロナ社 Web サイトの本書紹介ページからダウンロードできる。また、各例題の YouTube チュートリアルビデオへのリンクも掲載している。

1

COCO/ChemSep の 使い方と機能

1.1 COCO/ChemSep 入門

はじめに実際の蒸留実験装置のモデル化例に沿って、化学プロセスシミュレータ COCO/ChemSep の使い方と機能を紹介する。

【例題 0】 オルダージュウ蒸留器によるメタノール水溶液の蒸留^{(S, p. 29)†}

図 0.1 は、4 段のオルダージュウ蒸留器による蒸留実験装置の原理図と写

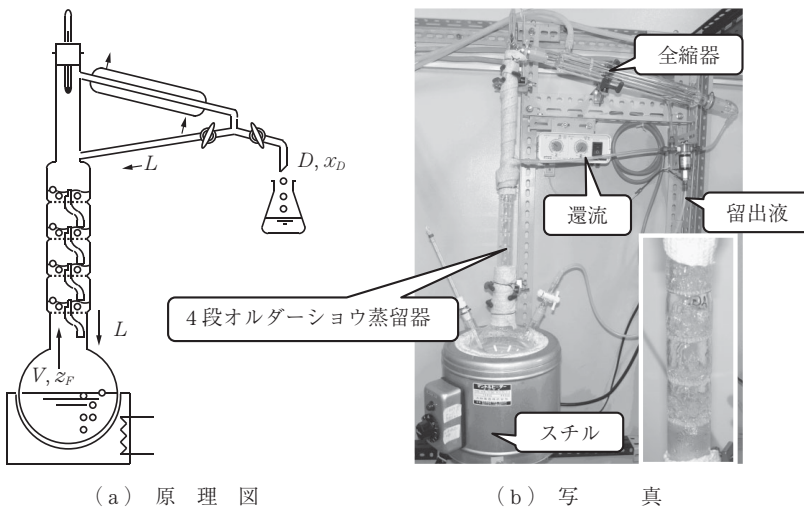


図 0.1 オルダージュウ蒸留器による蒸留実験装置の原理図と写真

† 肩付き記号と p.○は、巻末の引用・参考文献の記号とそのページを示す。

真である。スチルのメタノール (1)/水 (2) 溶液を沸騰させ、流量 V 、メタノールモル分率 z_F の蒸気をカラムに供給する。塔頂で留出蒸気を全縮して、留出液 D と還流液 L (還流比 $R = L/D$) に分ける。この実験装置の分離性能、すなわち留出液流量 D 、留出液組成 x_D を、平衡段 (理論段) を仮定して計算せよ。

【COCO 解法】 (<COCO_00.fsd>を参照)

インストールで作成された **COFE** (CAPE-OPEN Flowsheet Environment) のショートカット  から起動する。

図 0.2 のように、開始画面は Flowsheet ウィンドウを中心に上にメニュー、ツールバー、左に Document Explorer, 下に Log/Warning ウィンドウである。

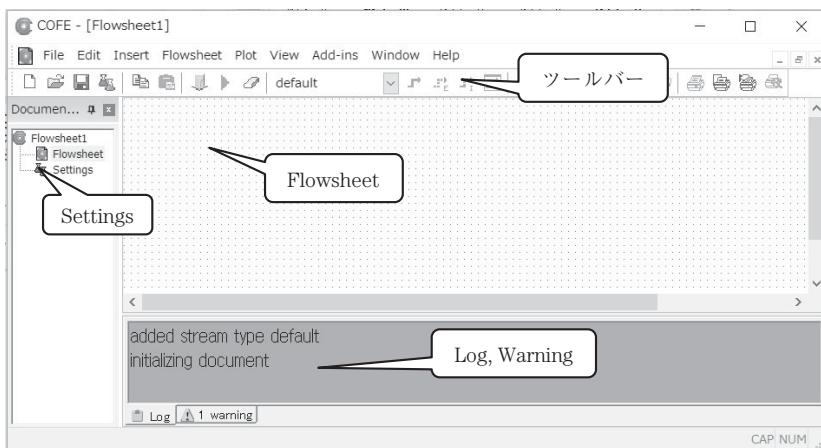


図 0.2 COCO の COFE 起動画面

まず Document Explorer の Setting をクリックして、図 0.3 のように、Flowsheet configuration ウィンドウから Property packages タブでプロセス中の全成分、および物性値モデルを設定する。反応のあるプロセスでは Reaction packages タブから反応式、反応速度などを設定する (3 章, 9 章, 10 章を参照)。

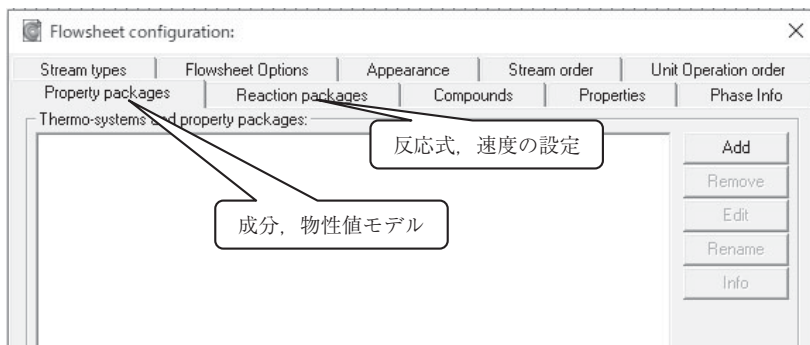


図 0.3 Settings をクリックして立ち上がる Flowsheet configuration 画面

図 0.4 のように、Properties packages→Add で Select Package ウィンドウとなる。普通は TEA を選択する。ここでは特別に気液平衡計算のため Chem-Sep Property Package Manager を選択し、Select ボタンを押す。

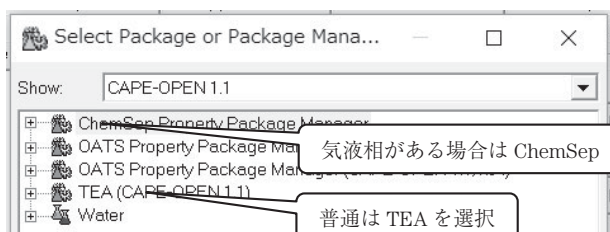


図 0.4 Select Package ウィンドウ

ウィンドウが立ち上がるので、New を選択すると新たに ChemSep[†] が立ち上がる（元は分離装置用シミュレータの **ChemSep** が先にあり、**COCO** がそれを包含したという経緯があり、もともと両者は別のシステムである）。図 0.5 のように、はじめに Components で関係する成分を選択する。画面左側の Components in databank にはガス、液の 430 ほどの化学種がリストされてい

[†] ここでいう ChemSep は COCO に包含されたアプリケーション名である。後の図 0.9 で言及する ChemSep は Flowsheet に配置する Unit operation 名である。なお、Chem-Sep が立ち上がる時、自動的に画面がアクティブにならないことがあるので、注意が必要である。この場合、タスクバーにある ChemSep アイコンをクリックする。

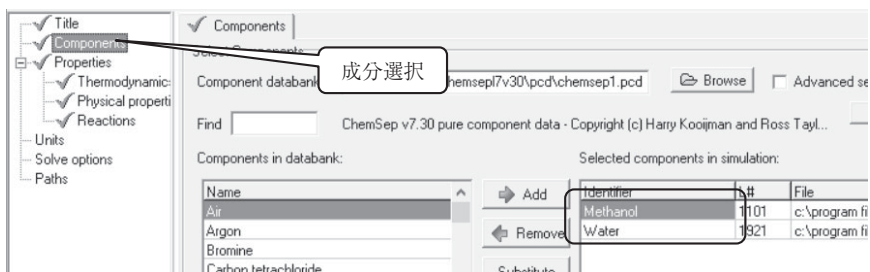


図 0.5 Settings→Property packages→ChemSep の Components 選択

る。ここでは Methanol, Water を選択し, Add で右側のリストに追加する。

次いで, 図 0.6(a)のように, Properties/Thermodynamics で物性推算モデルを選択する。ここでは K-value: DECHEMA, Activity coefficient (活量係数式) に Wilson を選択した。選択すると成分パラメータを Load するよう指示が出る (図(b))。Load するとファイル選択画面が出るので, ここではもちろん Wilson.ipd を選択する。また, 蒸気圧 Vapor pressure: Extended Antoine である。これも成分パラメータを付属の data base から Load する。Enthalpy は ideal としている。

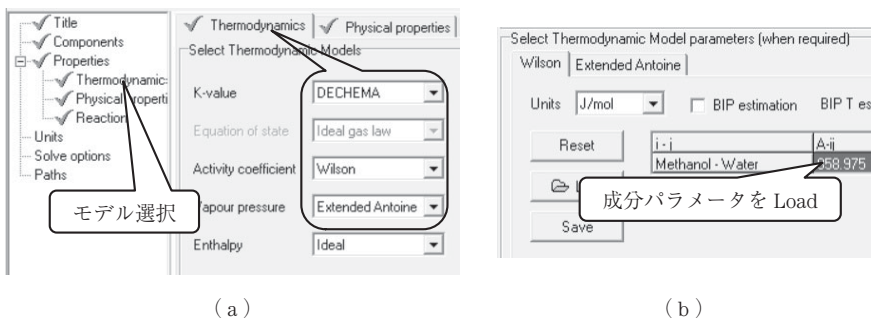


図 0.6 Settings→Property packages→ChemSep の Thermodynamics 設定

図 0.7 はこの実験で使うメタノール/水系の気液平衡について, ChemSep 中の各種モデルによる推算を x - y 関係で比較したものである。活量係数式で成分パラメータが COCO のデータベースにある Van Laar, Wilson では, Wilson

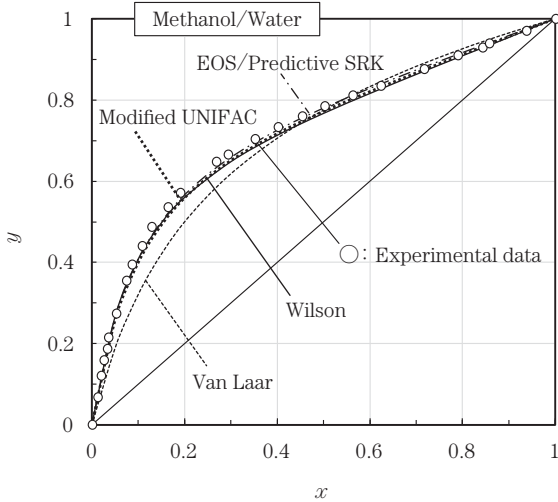


図 0.7 メタノール (x)/水系の気液平衡 (○印) と平衡推算モデルの比較

がデータとの一致がよい。活量係数式でグループ溶液モデルにより成分パラメータ不要の Modified UNIFAC も優秀である。さらに状態方程式 (EOS) を基礎とする Predictive SRK がパラメータ不要にもかかわらずよく気液平衡を予測できている。このように成分・系により物性モデルの推算精度が異なるので、使う成分に対する適切なモデルの選択が重要である。

ChemSep を閉じ、Flowsheet configuration も閉じて Flowsheet に戻る。ChemSep を閉じるとき保存のダイアログが出るので、“Yes” とする。さらに “Assign property package to the default stream type?” と出るので、これも “Yes” とする。ここで “No” とすると、この Settings/ChemSep で選んだ Components が Flowsheet 側で反映されない。

さて、この Property package を保存すると、Flowsheet configuration 画面に “new package” というデフォルト名で保存されるので、名前含めて修正したいときはこれを選択し、Edit すればよい。

なお、ChemSep を閉じる際、上記のダイアログボックスがアクティブにならずに、いつまでも終わらないように見えるときがあるので、注意が必要であ

索引

【あ】

アセトン分解反応	188
圧縮係数線図	24
圧縮除湿	111
圧平衡定数	46
圧力スイング蒸留	99
圧力損失	200

【い】

移動単位数	138
移動単位高さ	138

【え】

液液平衡	17, 120, 122
液相 1 次反応	159
液相自触媒反応	167
液相逐次反応	177
エタンの熱分解	170
エチレングリコール製造 プロセス	214
エチレンの酸化	174

【お】

押し流れ	20
オルダーショウ蒸留器	1

【か】

回収塔	102
回分式	159
回分反応	177
回分反応器	20, 159
過剰空気率	37
ガス吸収	16, 136
ガス分離膜モジュール	204

活量係数モデル	15
管型反応器	20, 159
完全混合槽反応器	19

【き】

気液平衡	15
気相 1 次反応	170
気相 PBR	174
気相 PFR	170
気相支配	146
気体の PVT	24
気体の熱容量	28
揮発性有機加工物	149
ギブス自由エネルギー最小 化法	20
ギブス反応器	19, 40

吸収-放散プロセス	154, 156
吸収操作	137
吸収操作 (多成分蒸気)	152
吸収操作 (単成分ガス)	141
吸収操作 (単成分蒸気)	146
吸収塔	7, 137
吸収塔高さ	137
共沸蒸留	101
共沸塔	102

【く】

空気蒸留	89
------	----

【こ】

向流抽出	124, 133
向流熱交換器	58, 59

【し】

湿球温度	113
------	-----

湿度図表	108
充填塔	82, 136
充填塔高さ	84, 136
状態方程式	15
蒸発潜熱	31, 107
蒸留	15
蒸留 (2 成分系)	77
蒸留 (2 成分系精密)	87
蒸留 (3 塔)	97
蒸留 (圧力スイング)	99
蒸留 (共沸)	101
蒸留 (空気)	89
蒸留 (充填塔による 2 成分 系)	82
蒸留 (多成分系)	91
蒸留 (抽出)	103
蒸留塔	7, 77
触媒層反応器	20, 159, 174

【す】

水蒸気圧	107
------	-----

【そ】

総括収率	52
総括伝熱係数	55
操作線	138
ソルバー	204

【た】

多重効用蒸発	209
多成分系蒸留	91
多段抽出	120
単蒸留	75
単抽出	120
断熱火炎温度	36

						Splitter	18
						Stream report	9
						【V】	
						VOC	149
						VOC 除去率	149
						VOC 放散	149
						【Z】	
						z 線図	24
						【数字】	
						1 回通過反応率	52
【H】		【N】					
HETP	85	NTU	138				
HK 成分	96			【P】			
HTU	138			Parametric Study	21		
				PBR	20, 159		
【L】				Peng Robinson	17		
Levenspiel プロット	161			PFR	20, 159		
LK 成分	96			Predictive SRK	17		
				Products 列	51		
【M】		【S】					
MakeUpMixer	18	Show GUI	11				
McCabe-Thiele 階段作図	79	Solve	11				
McCabe-Thiele 図	11						
Modified UNIFAC	17						

— 著者略歴 —

1977年 東京工業大学工学部化学工学科卒業
1982年 東京工業大学大学院博士課程修了（化学工学専攻）
工学博士（東京工業大学）
1982年 東京工業大学助手
1983年 新潟大学助手
1988年 新潟大学助教授
2007年 新潟大学教授
2009年 東京工業大学教授
2018年 東京工業大学名誉教授

例題で学ぶ化学プロセスシミュレータ

—フリーシミュレータ COCO/ChemSep と Excel による解法—

Free Simulator COCO/ChemSep and Excel for Chemical Engineering

Calculations Learned by Examples

© 公益社団法人 化学工学会 2018

2018年11月22日 初版第1刷発行

検印省略

編者 公益社団法人
化学工学会
著者 伊^い東^{とう}章^{あきら}
発行者 株式会社 コロナ社
代表者 牛来真也
印刷所 三美印刷株式会社
製本所 有限会社 愛千製本所

112-0011 東京都文京区千石 4-46-10
発行所 株式会社 コロナ社
CORONA PUBLISHING CO., LTD.
Tokyo Japan

振替 00140-8-14844・電話 (03)3941-3131(代)

ホームページ <http://www.coronasha.co.jp>

ISBN 978-4-339-06647-0 C3043 Printed in Japan

(金)



 <出版者著作権管理機構 委託出版物>

本書の無断複製は著作権法上での例外を除き禁じられています。複製される場合は、そのつど事前に、出版者著作権管理機構（電話 03-3513-6969, FAX 03-3513-6979, e-mail: info@jcopy.or.jp）の許諾を得てください。

本書のコピー、スキャン、デジタル化等の無断複製・転載は著作権法上での例外を除き禁じられています。購入者以外の第三者による本書の電子データ化及び電子書籍化は、いかなる場合も認めていません。落丁・乱丁はお取替えいたします。