

# トルエンの空気酸化による安息香酸の製造

## 1 講座 移動現象論分野

荊尾太雅 宮本奏汰

### keyword

空気酸化	Air Oxidation
気液反応	Gas-liquid Reaction
晶析	Crystallization
多変数同時全体最適化	Multi-variable Simultaneous Optimization
ヒートインテグレーション	Heat Integration

# 目次

第 1 章	緒言	1
第 2 章	プロセスの概要	2
2.1	プロセスの概要 . . . . .	2
2.2	設計条件 . . . . .	2
第 3 章	反応部	4
3.1	反応機構 . . . . .	4
3.2	反応器選定 . . . . .	5
3.3	設計方程式 . . . . .	5
3.4	物質移動容量係数の推算 . . . . .	6
3.5	反応器設計結果 . . . . .	7
3.6	反応部設計結果 . . . . .	7
第 4 章	分離部 1	9
4.1	蒸留塔設計 . . . . .	9
4.2	分離部 1 設計結果 . . . . .	10
第 5 章	分離部 2	11
5.1	晶析器選定 . . . . .	11
5.2	設計方程式 . . . . .	12
5.3	晶析器設計結果 . . . . .	12
5.4	抽出塔設計 . . . . .	13
5.5	分離部 2 設計結果 . . . . .	13
第 6 章	燃焼部	14
第 7 章	最適化	15
7.1	方法 . . . . .	15
7.2	最適化結果 . . . . .	16
第 8 章	物質収支・熱収支	17
第 9 章	ヒートインテグレーション	20
第 10 章	経済評価	22
第 11 章	結言	23

謝辞	24
参考文献	25
変数一覧	26
付録 A    コスト推算	27
A.1    労務費 . . . . .	27
A.2    ユーティリティコスト . . . . .	27
A.3    機器コスト . . . . .	27
付録 B    プログラム	29
B.1    python . . . . .	29
B.2    VBA . . . . .	60

# 第 1 章

## 緒言

安息香酸は、主としてフェノールの原料となる他、その誘導体やそのエステルが食品や化粧品などの添加物として広く利用されている。2014 年には世界全体で 48 万トンが製造されており、新興国での需要の増加から、2024 年には生産量が 64 万トンとなることを見込まれている [1]。そこで、安価なトルエンを原料として用いて安息香酸を製造するプロセスを検討することにした。

## 第 2 章

# プロセスの概要

### 2.1 プロセスの概要

本設計で対象とするのは、トルエンを空気酸化することにより安息香酸を製造するプロセスである。プロセス全体の概略図を図 2.1 に示す。

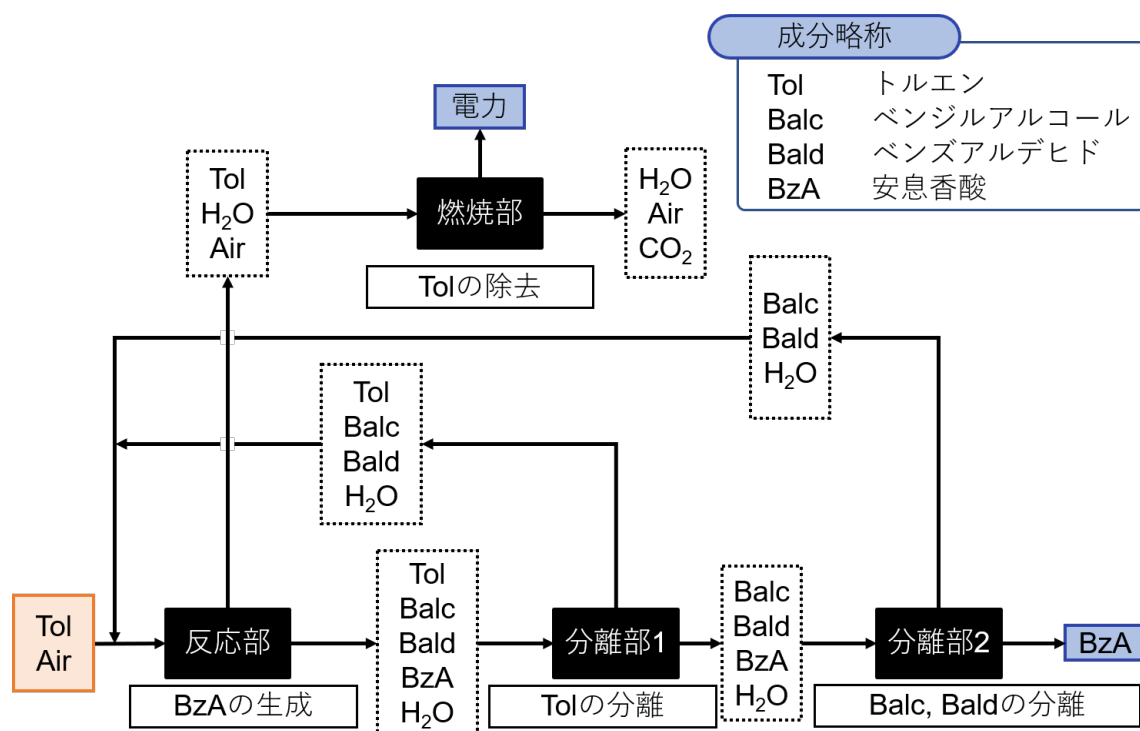


図 2.1 プロセス全体の概略図

### 2.2 設計条件

プロセスを設計するにあたり、以下の条件を設定した。

1. 生産要求は、99.0 wt% 以上の安息香酸を年 2 万トンとする。
2. 工場の稼働時間は、1 日 24 時間、年 300 日とする。

3. 原料として、純度 100 % のトルエンおよび、組成を窒素 79 mol% 酸素 21 mol% とする空気を用いる。  
ただし、両原料は 25 °C, 1 bar で供給されるものとする。
4. 減価償却期間は 8 年とする。
5. 圧力損失，熱損失，制御系については考慮しない。
6. HYSIS を用いての物性推算は UNIQUAC 式によって行う。

## 第 3 章

# 反応部

トルエンを空気酸化させ、安息香酸に転化させることを目的とする工程である。反応部の概略図を図 3.1 に示す。反応器にフィードされる液は、原料およびリサイクルによって回収された未反応トルエン、ベンジルアルコール、ベンズアルデヒド、水であり、反応器入り口において 7 bar, 170 °C に加熱および加圧され、反応器に供給される。また、反応器底部からは空気が 1 bar, 25 °C で供給されており、攪拌されながら反応器上方に向かう。反応器内は外部熱媒によって加熱され、7 bar, 170 °C に保たれており、攪拌によって液中に溶けた酸素と未反応物質は触媒酸化反応を起こす。また、気液間物質移動により、液中のトルエンおよび水が盛んに蒸発するが、蒸発したトルエンおよび水を含む空気は反応器からコンデンサーに流入し凝縮される。凝縮したトルエンおよび水はデカンターへ送られ、密度差分離によりトルエンのみを反応器に還流し、水はパージする。また、凝縮しなかったトルエンは、環境安全上の理由からそのまま排出することはできないので、濃度を減少させるために燃焼部へと送られる。反応器からの流出液は次の工程である分離部 1 へと送られる。

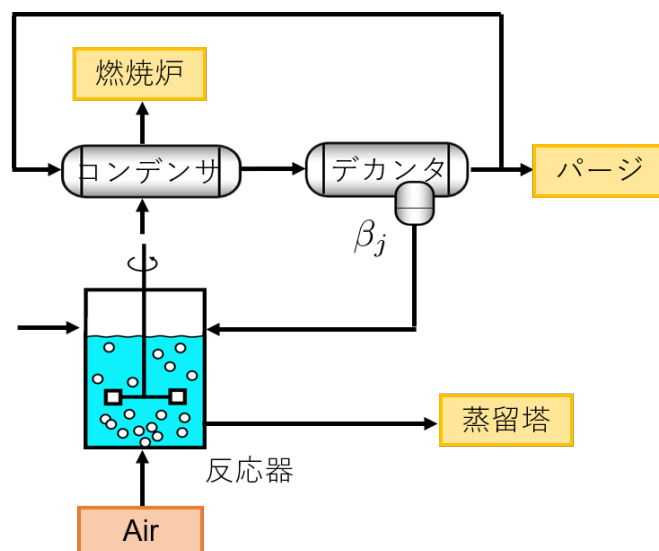
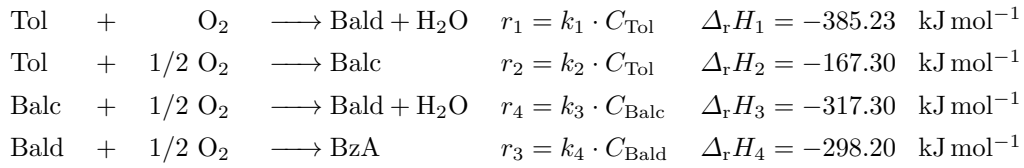


図 3.1 反応部概略図

### 3.1 反応機構

今回用いた反応を以下に示す。それぞれの反応速度式および、298 K における反応エンタルピーも示している。トルエンは経路によらず最終的に安息香酸へと転化する。



ただし、トルエンを Tol, ベンジルアルコールを Balc, ベンズアルデヒドを Bald, 安息香酸を BzA と表記している。これらの反応は全て酸化反応であり、触媒には、酸化剤であるモリブデン酸マンガニ  $\text{MnMoO}_4$  を用いることとした。これらの反応の反応速度定数は、表 3.1 のようである [2]。

表 3.1 各反応式の反応速度定数

	$k_1$	$k_2$	$k_3$	$k_4$
$\ln A_j [-]$	17.93	20.63	15.40	19.70
$E_j [\text{kJ mol}^{-1}]$	69.53	81.39	56.99	71.44

また、酸化反応が激しい場合にはトルエンは二酸化炭素まで転化するので、反応器における反応率が高い場合には考慮する必要があるが、今回の設計結果では単通反応率が 0.265 と低いため、この反応は十分無視できると考えられる。

## 3.2 反応器選定

流通式の気液反応器の種類には、拡散速度に対して不利な順に、気泡塔、気液攪拌槽、充填塔などがある。反応器を選定するにあたり、最大反応速度と最大拡散速度の比を表す八田数を概算し、八田数が 0.1 より小さいなら気泡塔、5 より大きければ充填塔、中間域ならば気液攪拌槽を選択することとした [3]。今回は気液攪拌槽型反応器を選択した。実際のプロセスでは気泡塔も選択される。

反応器内攪拌には 6 枚羽根タービン翼を用い、空気流入による冷却作用が大きいため、ジャケットを取り付け、ジャケット内部に熱媒を流している。また、空気を反応器内に送るスパージャー直径は反応器直径の 1/3 とした。反応装置の L/D 比を 2 とした。また、反応器体積のうち半分は液相が占めるとした。

八田数の定義式

$$\gamma = \frac{(\text{最大反応速度})}{(\text{最大拡散速度})} = \frac{(C_B k D_B)^{1/2}}{k_L} \quad (3.1)$$

## 3.3 設計方程式

両相の滞留時間の大きさが十分異なると考えられることから、液相は完全混合状態として、気相は鉛直方向に向かう押し出し流れと仮定できると判断した。設計時に用いた仮定は以下のようである。

- 気相は水平方向に一様な濃度分布を持つ。
- 気相側境界膜抵抗は無視できる
- 液相は完全混合状態である。
- 窒素、酸素はヘンリー則に従い、その他の物質はラウール則に従う。

以上の仮定および、蒸発油分を還流する機構を含めて、設計方程式 (3.2), (3.3), (3.4) を立式した。

$$0 = F_{\text{liq},j}^{\text{in}} - F_{\text{liq},j}^{\text{out}} - (1 - \beta_j) k_L a \int_0^{V_{\text{tot}}} (C_j - C_j^{\text{sat}}) dV + r_j V_L \quad (3.2)$$



$$\frac{dF_{\text{gas},j}}{dV} = k_L a (C_j - C_j^{\text{sat}}) \quad (3.3)$$

$$\sum_j F_{j,\text{in}} H_{j,\text{in}} - \sum_j F_{j,\text{out}} H_{j,\text{out}} = UA(T_s - T) \quad (3.4)$$

解析方法としては、まず油分を全還流として近似的に各油分の液相中濃度を決定した。そして、酸素、窒素について液中濃度を仮定した後に、気相の物質収支を Runge-Kutta 法によって計算し、各蒸発量が収支式と一致する濃度を求めた。また、物質移動容量係数が十分大きいと判断し、最適化計算を行う場合には、気相は迅速に平衡状態へ達すると仮定した。

### 3.4 物質移動容量係数の推算

物質移動容量係数は、反応装置形状、反応器内部流体の様々な物性、流れの状態に依存する。攪拌槽型反応器に対し、物質移動容量係数の推算に用いた各相関式を記す。

液相側物質移動係数の相関式 [3]

$$\text{小気泡の場合： } k_L = 0.31 S c_L^{-2/3} (g \Delta \rho \mu_L / \rho_L^2)^{1/3} \quad (3.5)$$

$$\text{大気泡の場合： } k_L = 0.42 S c_L^{-1/2} (g \Delta \rho \mu_L / \rho_L^2)^{1/3} \quad (3.6)$$

比表面積の相関式 [3]

$$a = 1.44 \left( \frac{P_V^{0.4} \rho_L^{0.2}}{\sigma^{0.6}} \right) \left( \frac{u_G}{u_t} \right)^{0.5} \left( \frac{P_T}{P_G} \right) \left( \frac{\rho_G}{\rho_a} \right)^{0.16} \quad (3.7)$$

上記の 2 式を利用するために用いた相関式を以下に記す。

ガスホールドアップの相関式 [3]

$$\varepsilon_G = \left( \frac{u_G \varepsilon_G}{u_t} \right) + 0.000216 \times \left( \frac{P_V^{0.4} \rho_L^{0.2}}{\sigma^{0.6}} \right) \left( \frac{u_G}{u_t} \right)^{0.5} \left( \frac{P_T}{P_G} \right) \left( \frac{\rho_G}{\rho_a} \right)^{0.16} \quad (3.8)$$

気泡の体積平均径の相関式 [3]

$$d_{vs} = 4.15 \left( \frac{\sigma^{0.6}}{P_V^{0.4} \rho_L^{0.2}} \right) \left( \frac{P_G}{P_T} \right) \left( \frac{\rho_a}{\rho_G} \right)^{0.16} \varepsilon_G^{0.5} + 0.0009 \quad (3.9)$$

気泡の終末速度の相関式 [3]

$$u_t = \left( \frac{4 \Delta \rho g d_{vs}}{3 C_D \rho_L} \right)^{0.5} \quad (3.10)$$

さらに、上記の相関式を利用するために用いた物性値の推算式、および変数の定義式などの諸式を以下に記す。

抗力係数の相関式 [4]

$$C_D = \max \left[ \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}), \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo + 4} \right] \quad (3.11)$$

拡散係数の推算

wilke-chang の式 [5]

$$D_{12} = \frac{2.946 \times 10^{-11} (\beta M_{r,2})^{1/2} T}{\mu_2 V_{b,1}^{0.6}} \quad (3.12)$$

Einstin-Stokes の式 [6]

$$\frac{D\mu}{T} = \text{const.} \quad (3.13)$$

界面張力の推算

界面張力の温度依存性に関する相関式 [3]

$$\sigma \propto \{1 - (T/T_c)\}^n \quad (3.14)$$

気泡レイノルズ数の定義式 [4]

$$Re = \frac{\rho_L u_t d_{vs}}{\mu_L} \quad (3.15)$$

エトベス数の定義式 [4]

$$Eo = \frac{g \Delta \rho d_{vs}^2}{\sigma} \quad (3.16)$$

また，空気の沸点における分子容を  $29.9 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$  であり [3]，トルエンの界面張力を  $\sigma = 0.81 \text{ N m}^{-2}$  である [7]，会合度を 1 とみなせるとした [8]．

以上の諸式を用いて物質移動容量係数を推算した．結果は反応器設計結果で示す．

### 3.5 反応器設計結果

最終結果における反応器の詳細を表 3.2 に示す．ただし，反応器内温度は，外部熱媒を用いることで  $170^\circ\text{C}$  に保たれているとした．

表 3.2 反応器設計結果

項目	値
反応器内圧力 [bar]	7.00
反応器内温度 [ $^\circ\text{C}$ ]	170
反応器体積 [ $\text{m}^3$ ]	14.6
気液総体積 [ $\text{m}^3$ ]	8.25
単通反応率 [—]	0.265
ガスホールドアップ [—]	0.115
液平均滞留時間 [h]	0.478
物質移動容量係数 [ $\text{s}^{-1}$ ]	0.470
液相物質移動係数 [ $\text{m s}^{-1}$ ]	0.00172
比界面積 [ $\text{m}^{-1}$ ]	273
反応器空間率 [—]	0.435
総攪拌動力 [kW]	8.25
気泡体積平均径 [mm]	2.53
エトベス数 [—]	1480
気泡レイノルズ数 [—]	1170

### 3.6 反応部設計結果

最適化後の最終結果における反応部の物質収支を図 3.2 中に示す．最適化方法については最適化の章で述べる．

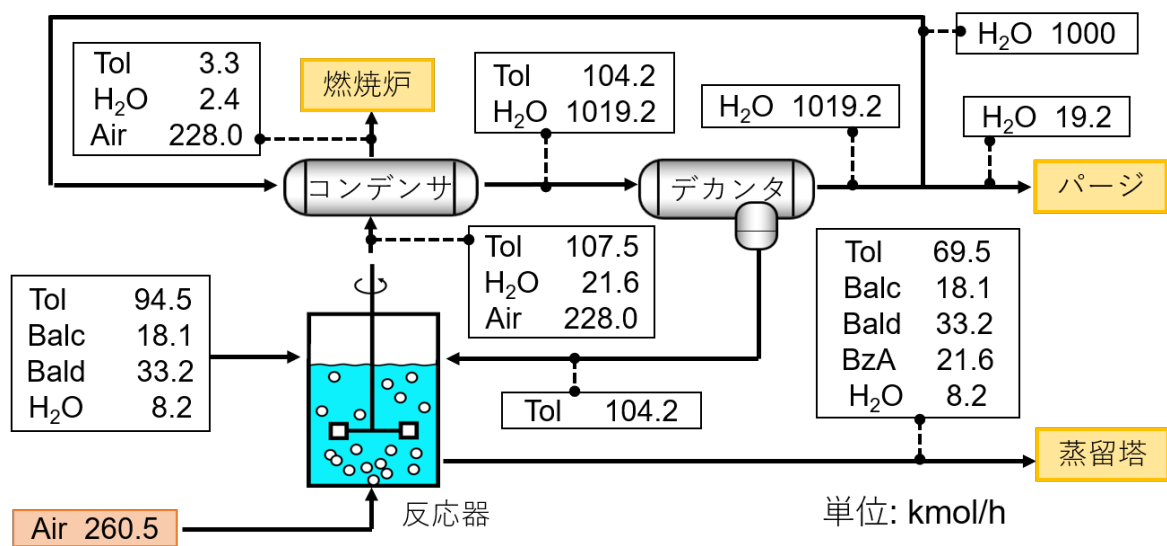


図 3.2 反応部設計結果

## 第 4 章

# 分離部 1

反応器からの流出液のうち、主に未反応トルエンを分離することを目的とする工程である。低沸点成分であるトルエンおよび水は蒸留によってほぼ全量が回収され、回収しきれなかったベンジルアルコールやベンズアルデヒド、安息香酸およびモリブデン酸マンガ触媒は分離工程 2 へと送られる。

### 4.1 蒸留塔設計

未反応トルエンのうち 99 % 以上を回収することを目的とした。設計条件として、蒸留塔段数を 10 段、蒸留塔供給段を 6 段、還流比を 1.0 とした。

蒸留塔圧力を変更し、全体の利益を最大とする点を探索した。反応器流出液圧力が 7 bar であるため、7 bar が最適な圧力であることが予想される。蒸留塔の圧力を変化させ、人件費を除くプロセス全体の利益を評価関数としてプロットした図 4.1 から、確かに 7 bar でプロセス全体の利益が最大化されることを確認した。

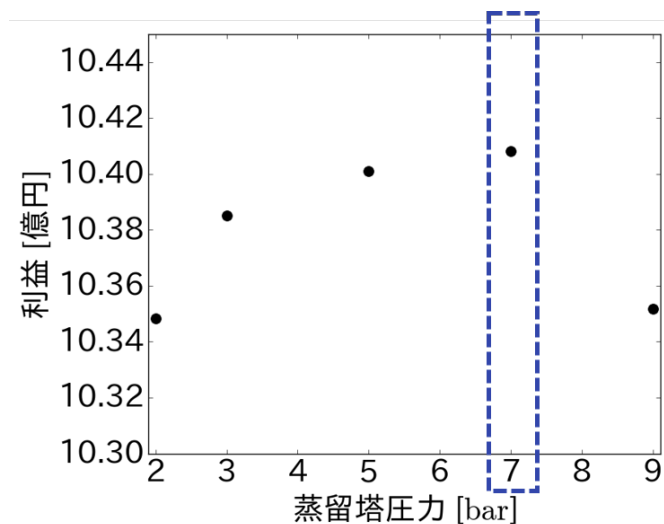


図 4.1 蒸留塔圧力最適化

設計結果を表 4.1 に記す。

表 4.1 蒸留塔設計結果

項目	値
塔径 [m]	1.0
塔高 [m]	6.1
塔内圧力 [bar]	7
コンデンサ内温度 [°C]	232
リボイラー内温度 [°C]	316

## 4.2 分離部 1 設計結果

最適化後の最終結果における分離部 1 の流量関係を図 4.2 中に示す。

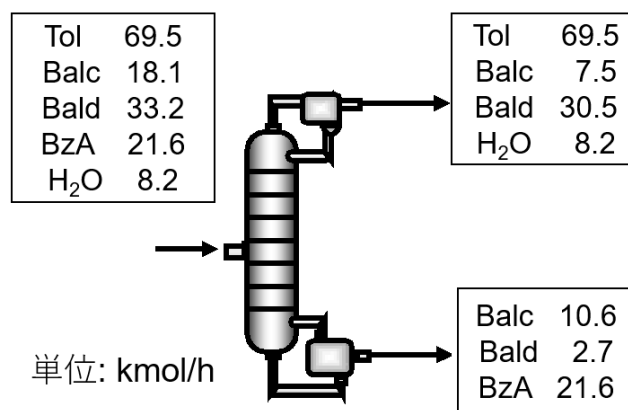


図 4.2 分離部 1 設計結果

## 第 5 章

# 分離部 2

他成分を分離し，安息香酸の製品結晶を得る工程である．蒸留塔の流出液に含まれるベンジルアルコール，ベンズアルデヒド，安息香酸，モリブデン酸マンガ触媒を抽出塔に送る．また，晶析後の安息香酸水溶液をリサイクルして同時に抽出塔に入れ，安息香酸とその他の成分を分離する．安息香酸飽和水溶液は晶析器に運ばれ，製品結晶を取り出す．その他の成分については回収し，反応器へと循環させる．

### 5.1 晶析器選定

結晶，溶液をともに連続的に流通させることができる連続式の晶析装置を選択した．溶解度の温度依存性が大きいことと，目的とする結晶生産量が多いことから，連続式攪拌槽型晶析装置を選定した．結晶は針状であり，一般的な球形の結晶よりも装置内に詰まる恐れがある [3]．したがって，製品結晶のみが固体状で装置内を占めると想定して，空間率が 0.9 以上となるように十分な装置容積をとる必要があるため，晶析装置内液相部の 2 倍の装置容積を用意するものとして設計した．L/D 比は 2 とした．

溶解度の温度依存性の相関式

$$C^* = 2.03 \times 10^{-5} T^4 + 2.03^{-5} \times T^4 + 2.97 \times 10^{-4} T^3 + 4.70 \times 10^{-2} T^2 + 1.43 T + 24.71 \quad (5.1)$$

ただし，温度  $T$  [°C]，溶解度  $C^*$  [g kg-solvent<sup>-1</sup>] である．

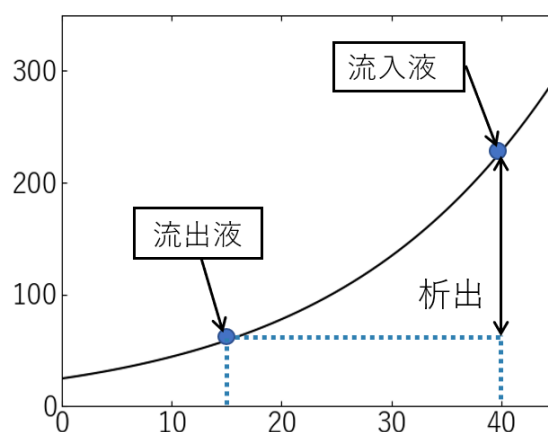


図 5.1 溶解度の温度依存性

## 5.2 設計方程式

以下の仮定を用いた.

- 結晶表面拡散は迅速に行われる.
- 晶析器内は完全混合状態である.
- 二次核発生の影響は無視する.

[9] により, 以下の実験式および理論式を用いて設計を行った.

一次核発生速度

$$B^0 = k_b M_T^j \Delta C^b \quad (5.2)$$

結晶成長速度

$$G = k_g \Delta C^g \quad (5.3)$$

結晶成長速度定数

$$k_g = k_{g0} \exp \left( -\frac{E_g}{RT} \right) \quad (5.4)$$

個数収支式

$$n = n^0 \exp \left( -\frac{L}{G\tau} \right) \quad (5.5)$$

懸濁密度

$$M_T = c_0 - c = 6k_v \rho_c n^0 (G\tau)^4 \quad (5.6)$$

各パラメータは以下の通りである.

$$\begin{aligned} k_{g0} &= 1.06 \times 10^7 (\mu\text{m})(\text{g/g-solvent})^{-g} \\ B^0 &= 40.05 \text{ kJ mol}^{-1} \\ k_b &= 9.16 \times 10^{12} (\#/ \text{m}^3 \text{s})(\text{g/mL})^{-j} (\text{g/g-solvent})^{-b} \\ g &= 0.44 \\ j &= 1.78 \\ b &= 1.2 \\ k_v &= 0.1 \\ \rho_c &= 1.32 \text{ g cm}^{-3} \end{aligned}$$

## 5.3 晶析器設計結果

最適化の結果によって得られた晶析器の設計結果を表 5.1 に記す.

表 5.1 晶析器設計結果

項目	値
晶析器体積 [m <sup>3</sup> ]	7.16
晶析器液体積 [m <sup>3</sup> ]	3.58
晶析器フィード液温 [°C]	40.0
晶析器内温度 [°C]	13.3
晶析器内圧力 [bar]	1.00
滞留時間 [min]	9.71
単通結晶収率 [-]	0.690
結晶化可能量基準収率 [-]	0.902
結晶の体積平均径 [μm]	3.41

## 5.4 抽出塔設計

十分に塔内へ液を滞留させることによって、安息香酸を水中に飽和させることを目的とした。十分なデータを得られなかったため、2 時間の装置内滞留によって安息香酸がトルエン溶媒中に飽和し、その他ベンジルアルコール、ベンズアルデヒドの溶解度については無視できると仮定した。

## 5.5 分離部 2 設計結果

分離部 2 のみの流量関係を簡易的に図 5.2 中に示す。蒸留塔から送られてきた油液は冷却され、抽出塔内に供給される。晶析器からリサイクルされる安息香酸水溶液を加熱し、溶解度を上昇させて抽出塔内に供給する。抽出塔内では安息香酸が水中に溶解し、ベンジルアルコール、ベンズアルデヒドおよび触媒は溶解せずに回収され、反応部へ送られる。安息香酸水溶液を晶析器に供給し、製品結晶を得ている。

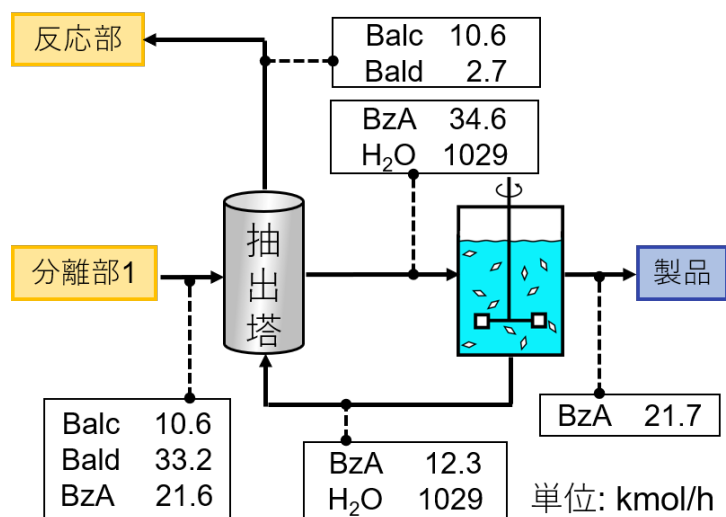


図 5.2 分離部 2 設計結果



## 第 6 章

# 燃焼部

トルエンは人体に有害な物質であり，吸引によって神経系などに深刻な被害を与えることがある．排出指針値としてトルエンを扱う作業環境において 50 ppm，その他の場所については 0.7 ppm と定められている [10]. この基準を満たすため，反応部のコンデンサーで凝縮しなかったトルエンを燃焼させることで，その濃度を減じる．燃焼炉内ではトルエンが完全燃焼し，二酸化炭素および水へ転化すると仮定し，量論的に燃焼に必要な量と等量の酸素を供給して燃焼炉へと送るものとした．燃焼熱は熱媒の生成に使用され，足りない分は燃料を投入して賄っているものと考えた．

## 第 7 章

# 最適化

### 7.1 方法

最適化を行うにあたり、最適化変数として以下の 3 つを選択した。

- 反応器体積
- 晶析器体積
- 晶析器温度

これらの変数を選択した理由を述べる。まず、反応器体積についてのトレードオフの関係を説明する。反応器体積が大きいとき、反応器の装置コストは大きくなる。一方で、反応器出口から排出される未反応トルエンの量が減るため、蒸留塔のリボイラーに必要な熱量が減少し、熱煤のコストは減少する。また、反応器体積が小さいときは、反応器の装置コストは小さくなるが、熱煤のコストは大きくなる。

次に、晶析器体積についてのトレードオフの関係を説明する。晶析器体積が大きいとき、晶析器の装置コストは大きくなる。しかし、析出する安息香酸の量が増えるため、リサイクルに回る安息香酸の量が少なくなり、それを保持するための純水の量が減少することで、純水の費用は抑えられる。晶析器の体積が小さいときは、逆の関係となる。

最後に、晶析器温度についてのトレードオフの関係を説明する。晶析器温度が低い時、必要な外部冷媒の温度が低くなるため、冷媒の単価は高くなる。しかし、晶析する安息香酸の量が大きくなるため、リサイクルに回る安息香酸の量が小さくなり、必要な純水の量が減るため、純水を冷やすために用いている冷媒の量は小さく抑えられる。晶析器温度が高いときは、冷媒の単価は安くなるが、冷媒の必要量が大きくなる。このように、最適化変数に選択した変数は、その大小によって、トレードオフの関係が生じる。そのため、これらの変数の値を変化させることで、利益が最大となる最適点を探索することが可能であると考えた。

次に、最適化の具体的な手法について述べる。プロセスを最適化するにあたり、3 つの最適化変数全てを同時に最適化することを考えた。運転可能な範囲を考慮して、反応器体積は、13.5 ~ 16.0 m<sup>3</sup> の範囲で 0.5 m<sup>3</sup> 刻みで 6 点、晶析器体積は、6 ~ 12 m<sup>3</sup> の範囲で 0.5 m<sup>3</sup> 刻みで 13 点、晶析器温度は、5.0 ~ 20.0 °C の範囲で 1 °C 刻みで 16 点、計 1248 点のデータを取った。そして、それぞれのデータについてフィッティングを行った後に、それぞれの探索範囲を 100 等分し、データの個数を 100 × 100 × 100 点に増やした。それらのデータを用いて、横軸に晶析器温度、縦軸に晶析器体積を設定し、反応器体積の値を逐次的に変化させることで、100 枚のヒートマップを作成した。ヒートマップが表す値は、

$$P.I. = (\text{売上}) - (\text{原料コスト}) - (\text{装置コスト}) - (\text{用役コスト}) \quad (7.1)$$

で表される評価関数の値とした。また、各ヒートマップ上で評価関数の値が最大となる点をプロットした。さらに、評価関数の最大値がどのように変化するかを見るために、横軸に反応器体積、縦軸に評価関数の値を取

り，グラフを作成した．

## 7.2 最適化結果

評価関数の値が最大となった点でのヒートマップおよび，評価関数の最大値の変化を表したグラフは図 7.1 のようになった．また，作成した gif は github にアップロードしてる (<https://github.com/miyamo-sou/processdesign>)．最適点での反応器体積は  $14.69 \text{ m}^3$ ，晶析器体積は  $7.16 \text{ m}^3$ ，晶析器温度は  $13.3 \text{ }^{\circ}\text{C}$  となった．また，その時の評価関数の値は 10.35 億円となった．

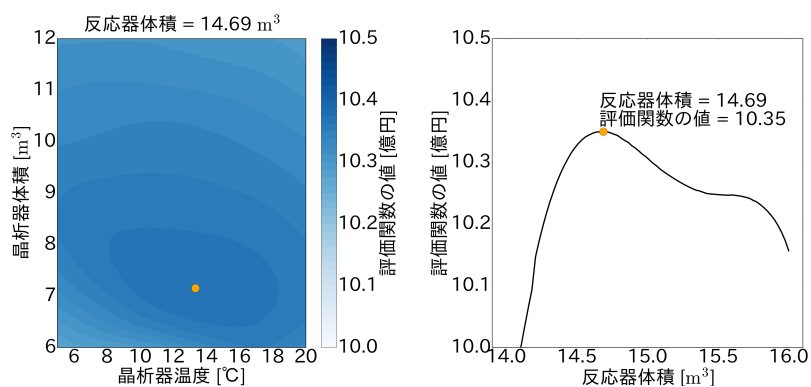


図 7.1 評価関数の値が最大となる点でのヒートマップと最適点の推移

このように，評価関数は大きなピークが存在する形になっていることが分かる．これは，最適化方法の節でも述べたが，反応器体積，晶析器体積，晶析器温度を変化させると，それぞれのトレードオフの関係によって，コストが変化する．そのため，このようにピークが生じたと考えられる．

## 第 8 章

# 物質収支・熱収支

全体のフロー図は図 8.1 のようになった。

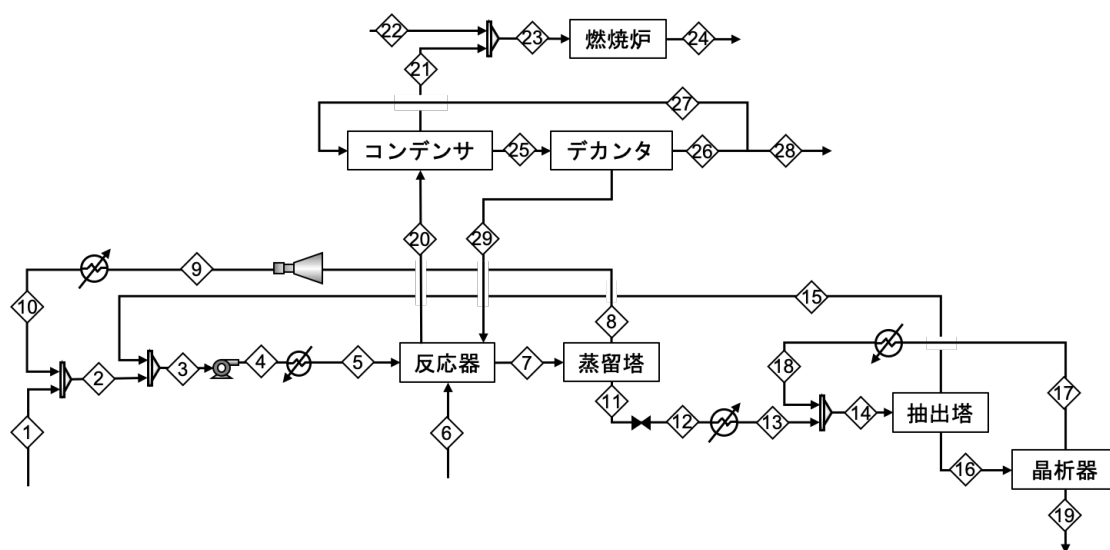


図 8.1 フロー図

また，フロー図に記載されているフローの組成および温度，圧力は表 8.1，8.2，8.3 のようになった。

表 8.1 流量関係

[kmol h <sup>-1</sup> ]	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
トルエン	25	94.5	94.5	94.5	94.5	0	69.5	69.5	69.5	69.5
ベンジルアルコール	0	7.5	18.1	18.1	18.1	0	18.1	7.5	7.5	7.5
ベンズアルデヒド	0	30.5	33.2	33.2	33.2	0	33.2	30.5	30.5	30.5
安息香酸	0	0	0	0	0	0	21.6	0	0	0
水	0	8.2	8.2	8.2	8.2	0	8.2	8.2	8.2	8.2
空気	0	0	0	0	0	260.5	0	0	0	0
二酸化炭素	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
合計	25	140.7	154	154	154	260.5	150.6	115.7	115.7	115.7
温度 [°C]	25	79.9	75.56	76.04	170	25	170	231.5	194.8	90.88
圧力 [bar]	1	1	1	7	7	1	7	7	1	1

表 8.2 流量関係

[kmol h <sup>-1</sup> ]	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
トルエン	0	0	0	0	0	0	0	0	0	107.5
ベンジルアルコール	10.6	10.6	10.6	10.6	10.6	0	0	0	0	0
ベンズアルデヒド	2.7	2.7	2.7	2.7	2.7	0	0	0	0	0
安息香酸	21.6	21.6	21.6	34.6	0	34.6	13	13	21.6	0
水	0	0	0	1029	0	1029	1029	1029	0	21.6
空気	0	0	0	0	0	0	0	0	0	228
二酸化炭素	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
合計	34.9	34.9	34.9	1076.9	13.3	1063.6	1042	1042	21.6	357.1
温度 [°C]	315.6	230.9	25	25	40	40	13.3	40	13.3	25
圧力 [bar]	7	1	1	1	1	1	1	1	1	1

表 8.3 流量関係

[kmol h <sup>-1</sup> ]	21	22	23	24	25	26	27	28
トルエン	3.4	0	3.4	0	104.1	0	0	0
ベンジルアルコール	0	0	0	0	0	0	0	0
ベンズアルデヒド	0	0	0	0	0	0	0	0
安息香酸	0	0	0	0	0	0	0	0
水	2.4	0	2.4	15.8	0	0	0	0
空気	228	39.4	267.4	237.8	1019.2	1019.2	1000	19.2
二酸化炭素	0	0	0	23.4	0	0	0	0
合計	233.8	39.4	273.2	277	1123.3	1019.2	1000	19.2
温度 [°C]	25	25	25	25	25	25	25	25
圧力 [bar]	1	1	1	1	1	1	1	1

フロー全体の与熱流体および、受熱流体は図 8.2 のようになった。図中の流体の熱量関係は表 8.4 および、8.5 のようになった。

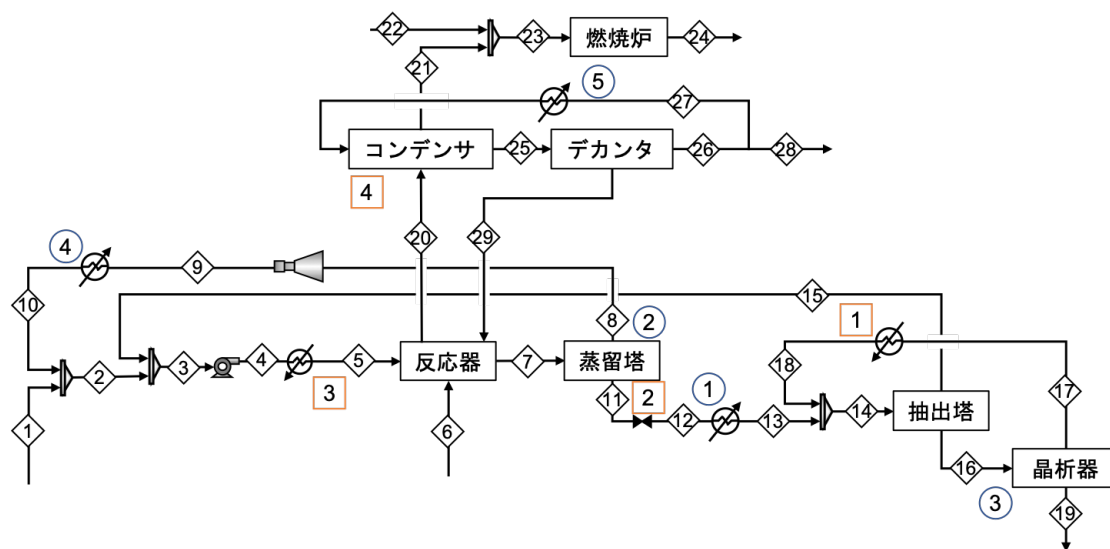


図 8.2 与熱流体と受熱流体

表 8.4 与熱流体

与熱流体	変化前温度 [°C]	変化後温度 [°C]	与熱量 [MJ h <sup>-1</sup> ]
① 蒸留塔留出液	194.8	90.9	6338.4
② 蒸留塔コンデンサー	248.3	231.5	5111.8
③ 晶析器流入流体	40.0	13.3	2252.7
④ 蒸留塔缶出液	230.9	25	2436.7
⑤ コンデンサ流出純水	40.0	25	1130.6

表 8.5 受熱流体

受熱流体	変化前温度 [°C]	変化後温度 [°C]	受熱量 [MJ h <sup>-1</sup> ]
① 晶析器リサイクル	13.3	40.0	2149.3
② 蒸留塔リボイラー	304.0	315.6	11735.8
③ 反応器入り口流体	76.0	170.0	2922.4
④ コンデンサ流入純水	25.0	40.0	1130.6

## 第 9 章

# ヒートインテグレーション

流体同士の熱交換を行い，外部流体の利用量を削減することを目的としてヒートインテグレーションを行った．本プロセスにおいては熱交換器は多管型熱交換器として，向流で熱交換を行った．熱交換面積を求めるため，以下の式を用いた．

$$Q = UA(\Delta T)_{\text{lm}} \quad (9.1)$$

ただし  $(\Delta T)_{\text{lm}}$  は温度差の対数平均であり，熱交換によって与熱流体の温度が  $T_{\text{h1}}$  から  $T_{\text{h2}}$  に変化し，受熱流体の温度が  $T_{\text{c2}}$  から  $T_{\text{c1}}$  に変化するとき，

$$(\Delta T)_{\text{lm}} = \frac{(T_{\text{h1}} - T_{\text{c1}}) - (T_{\text{h2}} - T_{\text{c2}})}{\ln\{(T_{\text{h1}} - T_{\text{c1}})/(T_{\text{h2}} - T_{\text{c2}})\}} \quad (9.2)$$

と表される．総括熱伝達係数として，両熱交換流体の相状態にのみ依存するとして表 9.1 の値を用いた．

表 9.1 総括熱伝達係数

流体 1	流体 2	総括伝熱係数 [ $\text{W m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]
ガス	ガス	150
ガス	液	200
ガス	ガス (凝縮)	500
ガス	液 (蒸発)	500
液	液	300
液	ガス (凝縮)	1000
液	液 (蒸発)	1000
ガス (凝縮)	液 (蒸発)	1500

用いた外部熱媒の温度と熱量を表 9.2 に示す．

表 9.2 用いた外部熱媒

熱媒	温度 [ $^{\circ}\text{C}$ ]	交換熱量 [ $\text{kJ h}^{-1}$ ]
熱媒 1	330.0	11735.8
熱媒 2	55.0	1085.7
熱媒 3	2.3	1761.1

図 9.1 に最終的な設計結果における TQ 線図を示す。

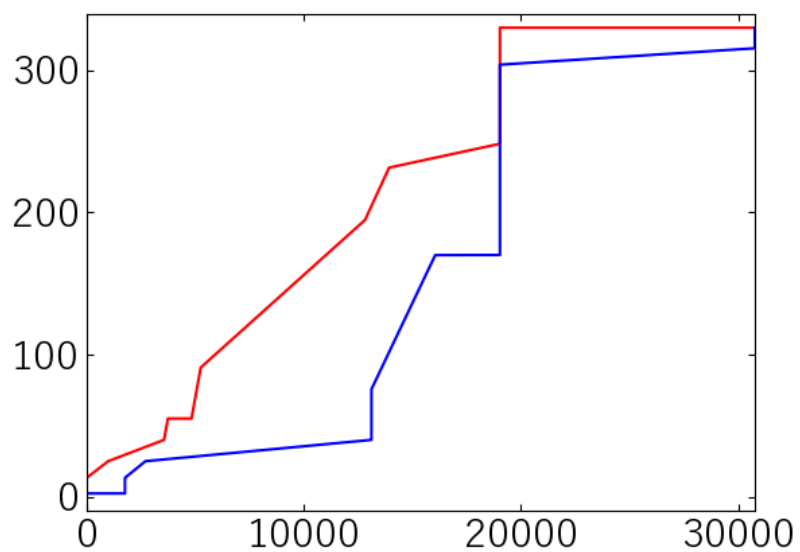


図 9.1 TQ 線図

ヒートインテグレーションを行うことで、必要な外部熱煤の費用は 3.6 億円から 1.2 億円にまで削減することができた。



## 第 10 章

# 経済評価

減価償却期間を 8 年とした場合の経済評価は表 10.1 のようになった．なお，各装置費の推算式は，Appendix A に示した通りである．また，市場調査により，トルエンは 500 \$/t，安息香酸は 1013 \$/t とした．

表 10.1 経済評価 [億円/年]

収入	製品	安息香酸	23.7	23.7
支出	原料コスト	トルエン	10.4	10.4
	装置コスト	晶析器	0.39	18.31
		反応器	0.34	
		熱交換器	0.33	
		抽出塔	0.14	
		コンデンサ	0.05	
		燃焼炉	0.05	
		蒸留塔	0.04	
		デカンタ	0.04	
		ポンプ	0.02	
		コンプレッサー	0.02	
	運転コスト	用役コスト	1.24	6.60
		触媒	0.36	
		人件費	5	

## 第 11 章

### 結言

設計目標を純度 99.0 wt% の安息香酸を年 2 万 ton 製造するものとして、設計を行った。文献値を参考として主に気液反応器と晶析装置を設計した。気液反応器については、装置形状や内部流体の物性を考慮したうえで、気液間物質移動を含めた収支式を用いて詳細な解析を行った。また、晶析装置については各速度過程を考慮して解析を行った。リサイクルフローを多く設置したプロセスを考えたことに加えて、蒸発したトルエンを燃焼炉で燃やし、燃焼熱を利用するようなプロセスを考えたため、原料を最大限に活用することができた。それに伴い、環境に十分配慮したプロセスとなった。プロセスを最適化するにあたり、反応器体積、晶析器体積、晶析器内温度の 3 変数を同時に最適化することで、プロセス全体を考慮した上での最適値を得ることができた。結果として年間 5.39 億円の利益を見込めるプロセスとなった。

残った課題としては、蒸発するトルエンのさらなる回収を行うため、燃焼炉ではなく吸着装置を用いるプロセスと比較検討することや、晶析装置について結晶粒系分布を考慮すること、また、抽出塔について詳細な設計を行うことが挙げられる。さらに、熱交換構成について具体的な熱交換器の形状およびシステムを考慮する余地がある。本プロセスはダウ法フェノール製造工程の安息香酸生成部分を参考に設計を行ったため、安息香酸からフェノールの製造プロセスを検討することも可能である。

# 謝辞

今回のプロセス設計では、様々な方々にお世話になりました。山本教授，谷口准教授をはじめとする多くの化学工学の先生方，集中講義を実施してくださった玉川先生に感謝の意を申し上げます。

また，1 講座の先輩方の協力無しには私たちのプロセス設計は完了できませんでした。プロセスの内容や発表に対し，的確なアドバイスをいただきました。さらに，お忙しい中，原稿やスライドのチェック，発表練習などに協力して頂いたことで，無事に発表を終えることができました。

私たちのプロセス設計に協力してくださった先生方，先輩方に改めて御礼申し上げます。

## 参考文献

- [1] Hexa Research, Benzoic Acid Market Analysis, 2016 <https://www.hexaresearch.com/research-report/benzoic-acid-market>
- [2] J.A.A. Hoorn and J. Van Soolingen and G.F. Versteeg, *Chemical Engineering Research and Design*, **83**, 187 - 195, 2005
- [3] 化学工学会・化学工学便覧・丸善出版
- [4] 富山 明男, 片岡 勲 and 坂口 忠司, 日本機械学会論文集 B 編, **61**, 2357-2364, 1995
- [5] Wilke C.R. and P.Chang, *AIChE J.*, **1**, 264, 1955
- [6] 京都大学化学プロセス工学コース 実験テキスト
- [7] Jasper, J.J. The surface tension of pure liquid compounds, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **1**, 841–1010, 1972
- [8] R.Byron Bird and Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot *TransPortPhenomena* revised second edition willy
- [9] Gary Morris and Graham Power, *et al. Org. Process Res. Dev.*, **19**, 1891-1902, 2015
- [10] 東京都福祉保健局 [http://www.fukushihoken.metro.tokyo.jp/kankyo/kankyo\\_eisei/jukankyo/indoor/sickhouse\\_faq/sick\\_faq\\_04.html](http://www.fukushihoken.metro.tokyo.jp/kankyo/kankyo_eisei/jukankyo/indoor/sickhouse_faq/sick_faq_04.html)
- [11] Li, Wang and Zhang, Qingjun and Zeng, Aiwu, *Transactions of Tianjin University*, **25**, 52-65, 2019,
- [12] 富士フイルム和光純薬 (株) <https://labchem-wako.fujifilm.com/jp/product/detail/W01W0113-0065.html>
- [13] キシダ化学 (株) <http://www.kishida.co.jp/product/catalog/detail/id/960>
- [14] 化学工学会・SIS 部会・情報技術教育分科会, 第 10 回プロセスデザイン学生コンテスト
- [15] 京都大学・プロセス設計講義資料 3
- [16] 第 6 回ソフトウェアツール学生コンテスト [http://www.chemeng.titech.ac.jp/~sis\\_cont/dairokkai.html](http://www.chemeng.titech.ac.jp/~sis_cont/dairokkai.html)
- [17] Gizli, Ali and Aytimur, Guelin and Alpay, Erden and Atalay, *Chemical Engineering & Technology*, **31**, 2008
- [18] Versteeg, G and L. Alsters, P and A. A. Hoorn, J, *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, **3**, 01, 2005
- [19] Tang and Liang, Bin, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **46**, 6442-6448, 2007
- [20] Ståhl, Marie and Åslund, Bengt L. and Rasmuson, Åke, *AIChE Journal*, **47**, 1544-1560, 2001

# 変数一覧

$a$ :比界面積	$P_G$ :攪拌動力
$B^0$ :一次核発生速度	$P_T$ :
$c$ :重量濃度	$r$ :反応速度
$C$ :モル濃度	$T$ :温度
$C_D$ :抗力係数	$T_c$ :臨界温度
$D$ :拡散係数	$u_t$ :気泡の終末速度
$d_{vs}$ :気泡体積平均径	$u_G$ :気泡の空塔速度
$E$ :活性化エネルギー	$V$ :体積
$E_g$ :結晶化過程の活性化エネルギー	$\beta$ :還流率
$F$ :モル流量	$\mu$ :粘度
$g$ :重力加速度	$\mu_L$ :液相粘度
$G$ :核成長速度	$\sigma$ :界面張力
$k$ :反応速度定数	$\rho_a$ :空気密度
$k_b$ :核発生速度定数	$\rho_L$ :液相密度
$k_g$ :核成長速度定数	$\rho_g$ :気相密度
$k_L$ :液相物質移動係数	$\Delta\rho$ :密度差
$k_L a$ :液相物質移動容量係数	$EO$ :エトベス数
$k_v$ :結晶体積形状係数	$Sc$ :シュミット数
$M_T$ :懸濁密度	$Re$ :レイノルズ数
$n$ :結晶の個数密度	

## 付録 A

# コスト推算

為替レートは 1 ドル=111.73 円とした。(2019 年 4 月平均)

### A.1 労務費

労務費の推算について補足する。プラントは 4 直 3 交代で運転され、1 班の人数に関して次の推算式を用いた。

$$(1 \text{ 班の人数}) = (6.29 + 0.23 \times (\text{主要機器数}))^{0.5} \quad (\text{A.1})$$

よって、総運転員数は 40 人であり、主任などに 10 人加え、50 人に平均 1000 万円の給与を支払うとして労務費を算出した。

### A.2 ユーティリティコスト

用役単価を表 A.1 に示す。触媒であるモリブデン酸マンガンは材料である酢酸マンガン 21 g とモリブデン

表 A.1 用役単価

項目	価格
燃料 [\$/ GJ]	1.095
触媒 [円/g]	9.616
2.3 °C プロピレン冷媒 [\$/ GJ]	4.804
純水 [\$/ t]	45
電力 [\$/ kWh]	0.1

酸アンモニウム 5.04 g を混ぜて作られる [11]。各価格について酢酸マンガンは 500 g あたり 3100 円とし ([12], 2019/7/17 確認), モリブデン酸アンモニウムは 500 g あたり 11900 円 ([13], 2019/7/17 確認) とした。燃料, プロピレン冷媒 (内挿値) の価格は参考文献 [14] より得た。電力の価格は参考文献 [15] から得た。

さらに排水処理費用としてデカンターからパージする純水に 1 t あたり 0.041 \$ かかるとした [15]。

### A.3 機器コスト

下記の推算は 2001 年のデータで行い、2001 年のコストインデックス 394 と 2018 年のコストインデックス 603.1 を用いて値を修正している [15]。主要機器について、

- 1) 常圧で運転することを想定し、炭素鋼を用いて作成されるとしてメーカー出荷地点での価格を推算

- 2) 関連する部分の直接費，間接費を含めた価格の推算
- 3) 圧力や材質利用に関する補正

という 3 段階によって機器の建設費を推定する方法を用いた。

まず，メーカー船積み出荷価格  $C_p^0$  は，機器の特徴サイズ  $A$  と係数  $K_1, K_2, K_3$  を用いて

$$\log_{10} C_p^0 = K_1 + K_2 \log_{10} A + K_3 (\log_{10} A)^2 \quad (\text{A.2})$$

直接費や間接費，特殊材料費，操作圧力を考慮すると，各装置に関するコストは  $C_p^0$  の数倍になる．すなわち，

$$C_{\text{BM}} = F_{\text{BM}} C_p^0 \quad (\text{A.3})$$

と表される． $C_{\text{BM}}, F_{\text{BM}}$  はそれぞれベアモジュールコスト，ベアモジュールファクターと呼ばれる． $F_{\text{BM}}$  は，

$$F_{\text{BM}} = B_1 + B_2 F_p F_M \quad (\text{A.4})$$

と表される．ここで， $B_1, B_2, F_p, F_M$  はそれぞれ圧力，材質に依存しない部分の係数，依存する部分の係数，圧力ファクター，材質ファクターを表す． $F_p$  に関しては槽型の装置に対して推算式 (A.5) が提示されている．

$$F_{p, \text{vessel}} = \begin{cases} \max \left\{ \frac{(P_g + 1)D}{10.71 - 0.00756(P_g + 1)} + 0.5, 1 \right\} & (P_g > -0.5 \text{ bar}) \\ 1.25 & (P_g \leq -0.5 \text{ bar}) \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

ただし， $P_g$  はゲージ圧 [bar] である．槽型以外の装置については，次式を用いた．

$$\log_{10} F_p = C_1 + C_2 \log_{10} P_g + C_3 (\log_{10} P_g)^2 \quad (\text{A.6})$$

各機器のコスト算出に当たって用いた係数を表 A.2 に示す．データが資料にない機器についてはベアモ

表 A.2 ベアモジュールファクター算出に用いた係数

	$A$	$K_1$	$K_2$	$K_3$	$B_1$	$B_2$	$C_1$	$C_2$	$C_3$	材質	$F_M$
反応器	体積 [m <sup>3</sup> ]	4.5587	0.2986	0.002	1.49	1.52	-	-	-	Ti clad	4.8
晶析器	体積 [m <sup>3</sup> ]	4.5097	0.1781	0.1344	1.49	1.52	-	-	-	Ti alloy clad	9.4
蒸留塔 (槽)	体積 [m <sup>3</sup> ]	3.4974	0.4485	0.1074	1.49	1.52	-	-	-	Ti clad	4.8
蒸留塔 (トレイ)	面積 [m <sup>2</sup> ]	2.9949	0.4465	0.3961	1.49	1.52	-	-	-	Ti clad	4.8
抽出塔	体積 [m <sup>3</sup> ]	3.4974	0.4485	0.1074	1.49	1.52	-	-	-	Ti	9.4
デカンター	体積 [m <sup>3</sup> ]	3.4974	0.4485	0.1074	2.25	1.82	-	-	-	CC	1
燃焼炉	燃焼熱量 [kW]	3.068	0.6597	0.0194	-	-	0	0	0	CC	1
ポンプ	電力 [kW]	3.8696	0.3161	0.122	1.89	1.35	0	0	0	Ni alloy	3.9
コンプレッサー	電力 [kW]	2.2897	1.3604	-0.103	-	-	0	0	0	CC	1

ジュールファクターを 1 とした．

熱交換器については，伝熱面積を  $A$  [m<sup>2</sup>] として次の計算式を用いた [16]．

$$(\text{コスト [億円]}) = 0.015K \times A^{0.65} \quad (\text{A.7})$$

ただし， $K$  は定数でありコンデンサーは 1，リボイラーは 2 とした．

## 付録 B

# プログラム

### B.1 python

ソースコード B.1 気液反応器の解析

---

```
1  #%%
2
3
4  #気液反応器の解析をします.特に断りがなければSI 単位です
5  #FlowN0; 0=反応器への流入液,1=反応器からの流出液,2=反応器への流入空気,
6  # 3=反応からデカンターへの蒸気
7  # 4=反応器への還流油分,5=デカンターからの流出空気,
8  # 6=デカンターに入れる冷却水,7=デカンターからの流出水
9  #ComponentN0; 0=Tol,1=Bo1,2=Ba1,3=Bac,4=H2O,5=N2,6=O2
10
11 import math as mt
12 import numpy as np
13 import matplotlib.pyplot as plt
14 import openpyxl as px
15
16
17
18
19 #-----外部入力値-----
20 #結果出力用ファイル設定(ソースファイルディレクトリ)
21 conclusionbookname = "conclusion.xlsx"
22
23 # 0. 外部入力条件を受けとります
24 #液相体積
25 VL = 0.020
26 #流入液体積 [m3/s]
27 v0 = 0.020/3600.
28 #反応器体積
29 DHrate = 1.0
30 #全圧
31 Prea = 7.0e+5
32 #温度
```



```

33 Trea = 150. + 273.15
34 #流入液モル分率
35 x0 = np.array([0.9, 0., 0., 0., 0.1, 0., 0.])
36 #流入液全モル量 [mol/s]
37 F0all = 0.005
38
39
40 #-----
41 # 1 入力
42 # 1-1 計算に用いる物性パラメータを入力します
43 #自然定数
44 pi = mt.pi
45 Rgas = 8.314
46 gra = 9.81
47
48 #アレニウス型反応速度式のパラメータ
49 #頻度因子 [s-1]
50 A = np.array([mt.exp(20.634), mt.exp(17.928), mt.exp(15.4), mt.exp(19.698)])
51 A = A / 3600.
52 #活性化エネルギー
53 E = np.array([81.389, 69.53, 56.987, 71.442])
54 E = E * 1000.
55 #反応速度定数 [s-1]
56 k = np.array([A[i] * mt.exp(-E[i] / (Rgas * Trea)) for i in range(4)])
57
58
59 # 物性値 (HYSIS 150°C)
60 rhoL = 738.6
61 muL = 0.1781 / 1000.
62 rhoG = 5.74
63
64 #物性値 (推算)
65 #気相から液相への拡散係数 wilke-chang の式とアインシュタイン-ストークスの式によって計算
66 DL = 0.0001 * 0.000000074 * ((1. * 92.141) ** 0.5 * 293.15)
67      / (0.579 * (29.9 ** 0.6))
68 DL = (Trea / 293.15) * ((0.579 / 1000.) / muL) * DL
69
70
71 #表面張力 温度依存性の表式でデータを換算
72 sig = 0.0221 * ((591.7 - Trea) / (591.7 - 353.15)) ** 1.24
73
74
75 # 1-2 反応器の装置条件を決めます
76 #液相部高さ #反応器直径, 断面積
77 Drea = (VL / (pi * DHrate)) ** (1 / 3)
78 hL = Drea * DHrate
79 Area = pi * (Drea ** 2)
80 #ノズル直径, 断面積

```

```

81 Dnoz = Drea / 1.5
82 Anoz = pi * (Dnoz ** 2)
83
84
85 # 1-3 反応器の運転条件を決めます
86 #空間時間
87 tau = VL / v0
88 #体積当たり攪拌動力
89 Pv = 2000.
90 #反応器への空気体積流量
91 QG = (50. / 1000. / 3600.) * (VL / 0.00025) ** 0.8
92 #デカンター内温度
93 Tdec = 50. + 273.15
94 #気体の空塔速度
95 uG = QG / Area
96 #気体の投入線速度
97 u = QG / Anoz
98 #攪拌動力
99 PG = Pv * VL
100 #気体の流入運動エネルギー
101 PK = 0.5 * QG * rhoG * u ** 2
102 #気体の流入位置エネルギー
103 Pg = QG * rhoL * gra * hL
104 #総エネルギー
105 PT = PG + PK + Pg
106
107
108 # 1-3 マテリアルフローに必要な変数を入力します
109
110 T2 = 20. + 273.15
111
112 #各フローのモル分率
113 #x0
114 x1 = np.array(np.zeros(7))
115 y2 = np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0.79, 0.21])
116 y3 = np.array(np.zeros(7))
117 y4 = np.array([1., 0, 0, 0, 0, 0, 0])
118 y5 = np.array([0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.])
119 y6 = np.array([0., 0., 0., 0., 1., 0., 0.])
120 y7 = np.array([0, 0, 0, 0, 1., 0, 0])
121
122
123 #各フローのモル流量
124 F0 = np.array(x0 * F0all)
125 F1 = np.array([0.] * 7)
126 F2 = np.array([0., 0., 0., 0., 0., ((Prea * 0.79) / (Rgas * T2)), \
127               ((Prea * 0.21) / (Rgas * T2))])
128 F2 = np.array(F2 * QG)

```

```

129 F3 = np.array([0.] * 7)
130 F4 = np.array([0.] * 7)
131 F5 = np.array([0.] * 7)
132 F6 = np.array([0.] * 7)
133 F7 = np.array([0.] * 7)
134
135 #各フローのモル濃度
136 C0 = np.array(F0 / v0)
137 C1 = np.array([0.] * 7)
138
139 #-----
140 # 2 kLa の推算を行います
141
142
143 #体積平均気泡径と終末速度に関して逐次代入計算を行います.
144 #気泡径と終末速度の初期値です.
145 dvs = 0.
146 ut = 0.
147 dvsnew = 0.003
148 epsG = 0.
149 Eo = 0.
150 Re = 0.
151
152 #Eo はエトベス数, Re は気泡レイノルズ数, CD は抗力係数
153 while abs((dvs - dvsnew) / dvsnew) > 0.00001:
154     dvs = dvsnew
155     #定義
156     Eo = gra * (rhoL - rhoG) * dvs / sig
157
158     utnew = 0.15
159     while abs((ut - utnew) / utnew) > 0.00001:
160         ut = utnew
161         #定義
162         Re = dvs * ut * rhoL / muL
163         #抗力係数の相関
164         CD = max((24 / Re * (1 + 0.15 * Re ** 0.687)), (8 / 3 * Eo / (Eo + 4)))
165         #気泡の運動方程式
166         utnew = (4 / 3 / CD * (1 - rhoG / rhoL) * gra * dvs) ** 0.5
167
168
169     ut = utnew
170     #ガスホールドアップの相関式 (二次方程式)
171     Const1 = -(uG / ut) ** 0.5
172     Const2 = -0.000216 * (Pv ** 0.4 * rhoL ** 0.2 / sig ** 0.6)
173             * ((uG / ut) ** 0.5) * (PT / PG)
174     epsG = (0.5 * (-Const1 + mt.sqrt(Const1 ** 2 - 4 * Const2))) ** 2
175     #気泡径の相関
176     dvsnew = 4.15 * (sig ** 0.6 / (Pv ** 0.4 * rhoL ** 0.2))

```

```

177             * (PG / PT) * epsG ** 0.5 + 0.0009
178 dvs = dvsnew
179
180
181 #反応器内物質高さ,体積(液相+気相)
182 htot = hL / (1 - epsG)
183 Vtot = htot * Area
184 #体積当たり比表面積aの相関
185 a = 1.44 * ((Pv ** 0.4 * rhoL ** 0.2) / sig ** 0.6)
186     * (PT / PG) * (uG / ut) ** 0.5
187
188 #液相側物質移動係数kLの相関
189 #気泡径0.6mm以下の時
190 if dvs <= 0.0006:
191     kL = 0.31 * ((muL / (rhoL * DL)) ** (-2 / 3)) * ((gra * (rhoL - rhoG)
192         * muL / (rhoL ** 2)) ** (1 / 3))
193
194 #気泡系0.6mm以上2.5mm以下の時
195 elif 0.0006 < dvs <= 0.0025:
196     x = (dvs - 0.0006) / (0.0025 - 0.0006)
197     kL = (1 - x) * 0.31 * ((muL / (rhoL * DL)) ** (-2 / 3))
198         * ((gra * (rhoL - rhoG) * muL / (rhoL ** 2)) ** (1 / 3)) + x
199         * (0.42 * ((muL / (rhoL * DL)) ** (-0.5)) * ((gra * (rhoL - rhoG)
200             * muL / (rhoL ** 2)) ** (1 / 3)))
201
202 #気泡径2.5mm以上の時
203 else:
204     kL = 0.42 * ((muL / (rhoL * DL)) ** (-0.5)) *
205         ((gra * (rhoL - rhoG) * muL / (rhoL ** 2)) ** (1 / 3))
206
207 #液相物質移動容量係数kLa
208 kLa = kL * a
209
210 #-----
211 # 3 液相の油分について,蒸発の影響を無視小,CSTRモデルと仮定して反応器内濃度を求めます
212
213 #tol
214 C1[0] = C0[0] / (1 + (k[0] + k[1]) * tau)
215 #Bol
216 C1[1] = (C0[1] + k[0] * tau * C1[0]) / (1 + k[2] * tau)
217 #Bal
218 C1[2] = (C0[2] + (k[1] * C1[0] + k[2] * C1[1]) * tau) / (1 + k[3] * tau)
219 #Bac
220 C1[3] = C0[3] + k[3] * tau * C1[2]
221
222 #各反応の反応量
223 Rr = np.array([k[0] * C1[0], k[1] * C1[0], k[2] * C1[1], k[3] * C1[2]])
224 Rr = Rr * VL

```

```

225 #各成分の反応量
226 RR = np.array([- (Rr[0] + Rr[1]), Rr[0] - Rr[2], Rr[1] + Rr[2] - Rr[3], \
227               Rr[3], Rr[1] + Rr[2], 0., \
228               - (0.5 * Rr[0] + Rr[1] + 0.5 * Rr[2] + 0.5 * Rr[3]))
229 print(C0)
230 print(C1)
231 print(RR)
232
233
234 #%%
235 #-----
236 # 4 気相について, RK4 法を用いて蒸発量を推算します
237 # 4-first 計算に用いる関数を定義
238
239 def Gaseq(Fgas):
240     # 気相側の物質収支式
241
242     def Csatcalc(yg):
243         # 平衡濃度Csat を求める関数
244         Cs = np.array([0.] * 7)
245         xe = np.array([0.] * 7)
246
247         #tol, H2O=ラウール則, N2, O2=ヘンリー則で計算, 残りは蒸発しないとする
248         xe[0] = Prea * yg[0] / 10 ** (Aant[0] - Bant[0] / (Trea + Cant[0]))
249         xe[1] = x1[1]
250         xe[2] = x1[2]
251         xe[3] = x1[3]
252         xe[4] = Prea * yg[4] / mt.exp(Aant[4] - Bant[4] / (Trea + Cant[4]))
253         xe[5] = Prea * yg[5] / HenryN2
254         xe[6] = Prea * yg[6] / HenryO2
255
256         Cs = sum(C1) * xe
257         return (Cs)
258
259     # 定義
260     Csat = np.array([0.] * 7)
261     dFgdz = np.array([0.] * 7)
262     ygas = np.array([0.] * 7)
263
264     #気相モル分率y を求め, 平衡濃度 Csat を算出
265     ygas = Molefraction(Fgas)
266     Csat = Csatcalc(ygas)
267
268     #収支式の計算
269     const = kLa * pi * Drea ** 2
270     dFgdz = np.array(-const * (Csat - C1))
271
272     return (dFgdz)

```

```

273
274
275 def Molefraction(Flow):
276     fraction = np.array(Flow / sum(Flow))
277     return (fraction)
278
279
280 # 4-1 計算に用いる気液平衡データを入力
281
282 #アントワン定数 10** or exp(A-B/(T+C))
283 #tol=10** #H2O=exp
284 Aant = np.array([4.54436 + 5.0, 0., 0., 0., 23.1964, 0., 0.])
285 Bant = np.array([1738.123, 0., 0., 0., 3816.44, 0., 0.])
286 Cant = np.array([0.394, 0., 0., 0., -46.13, 0., 0.])
287
288 #ヘンリー定数 pall*y=Henry*x
289 HenryN2 = 187000000.
290 HenryO2 = 114000000.
291
292
293 # 4-2 rk4 法を用いて気相の物質収支式を解き、全体の物質収支と照らし合わせて収束させる
294
295 #窒素濃度の初期値. これは蒸発も溶解もしないように収束させる
296 C1[5] = 0.5
297 #水と酸素の初期値. これらは反応生成量, 消費量が蒸発 (溶解) 量と等しくなるように収束させる
298 C1[4] = 10.
299 C1[6] = 0.5
300
301 #誤差評価関数初期値
302 eps = 1000.
303
304 #ステップ数
305 step = 50
306 #刻み幅
307 h = htot / step
308
309 j = 0
310 while eps >= 0.001 and j <= 100:
311     j = j + 1
312     x1 = Molefraction(C1)
313     #計算用
314     Fg = F2.copy()
315
316     for i in range(0, step - 1):
317
318         kk1 = np.array(h * Gaseq(Fg))
319         kk2 = np.array(h * Gaseq(Fg + kk1 / 2.))
320         kk3 = np.array(h * Gaseq(Fg + kk2 / 2.))

```

```

321         kk4 = np.array(h * Gaseq(Fg + kk3))
322
323         Fg += (kk1 + 2. * (kk2 + kk3) + kk4) / 6.
324     next
325
326     #結果
327     F3 = Fg.copy()
328
329     #誤差を求める
330     epslist = np.array([(F3[4] - RR[4]) / RR[4]) ** 2, \
331                        ((F2[5] - F3[5]) / F2[5]) ** 2, \
332                        (((F3[6] - F2[6]) - RR[6]) / RR[6]) ** 2])
333     eps = sum(epslist)
334
335     print(eps)
336
337     #値の改善
338
339     C1[4] += - (F3[4] - RR[4])
340     C1[5] += (F2[5] - F3[5])
341     C1[6] += - ((F3[6] - F2[6]) - RR[6])
342
343
344 # 4-3 収束時の分布を取得
345
346 #-----
347 # 5 デカンター周りの各流量を求め、液相の反応に対して蒸発の影響が無視できるか確認する
348 # 5-1 各流量を算出する。
349 #F5 について、デカンターで Tdec まで蒸気 F3 が冷やされ、水とトルエンが飽和状態まで凝縮する。
350 y3 = Molefraction(F3)
351 F5 = F3.copy()
352 y5sat = np.array([10 * (Aant[0] - Bant[0] / (Tdec + Cant[0])) / Prea, 0, \
353                  0, 0, mt.exp(Aant[4] - Bant[4] / (Tdec + Cant[4])) / Prea, 0, 0])
354 F5[0] = y5sat[0] / (1 - y5sat[0] - y5sat[4]) * (F5[5] + F5[6])
355 F5[4] = y5sat[4] / (1 - y5sat[0] - y5sat[4]) * (F5[5] + F5[6])
356 y5 = Molefraction(F5)
357
358
359 #溶解度が低いため、デカンターにおける分離効率は近似的に 100%とする
360 F4[0] = F3[0] - F5[0]
361
362 #冷却のため投入する水量F6 を計算する
363
364
365 #F7 を計算
366 F7[4] = F6[4] + F3[4] - F5[4]
367
368

```

```

369 # 6 結果を出力する
370
371 wb = px.load_workbook(conclusionbookname)
372 ws = wb.active
373
374 for i in range(7):
375     ws.cell(row=i + 2, column=2).value = F2[i]
376     ws.cell(row=i + 2, column=3).value = F3[i]
377     ws.cell(row=i + 2, column=4).value = F4[i]
378     ws.cell(row=i + 2, column=5).value = F5[i]
379
380     ws.cell(row=i + 10, column=1).value = x1[i]
381     ws.cell(row=i + 10, column=2).value = y2[i]
382     ws.cell(row=i + 10, column=3).value = y3[i]
383     ws.cell(row=i + 10, column=4).value = y4[i]
384     ws.cell(row=i + 10, column=5).value = y5[i]
385
386 wb.save(filename=conclusionbookname)

```

迅速に気相が平衡に達すると仮定した場合の上記プログラムは以下のようになり、実際の解析ではこちらを用いた。

---

ソースコード B.2 気液反応器の解析 (迅速に平衡)

---

```

1  # 気液反応器の解析をします. 特に断りがなければSI 単位です
2
3  # FlowNO : 0=反応器への流入液, 1=反応器からの流出液, 2=反応器への流入空気,
4  # 3=反応器からデカンターへの蒸気
5  # 4=反応器への還流油分, 5=デカンターからの流出空気,
6  # 6=デカンターに入れる冷却水, 7=デカンターからの流出水
7  # ComponentNO: 0=Tol, 1=Bo1, 2=Ba1, 3=Bac, 4=H2O, 5=N2, 6=O2
8  # ver_slim : 迅速な平衡の仮定から各流量を求めるslim な program です
9  import math
10 import numpy as np
11 import xlwings as xw
12
13 def main():
14
15     # #-----Excel シートからdata を取得-----
16     wb = xw.Book.caller()
17     F0_input = wb.sheets[0].range((43, 4), (43, 10)).value
18                                     # 反応器入口成分別モル流量
19     P_input = wb.sheets[0].range('D3').value # 反応器圧力
20     VL_input = wb.sheets[0].range('D4').value # 反応器体積
21     T_input = wb.sheets[0].range('D5').value # 反応器温度
22     T_decanter = wb.sheets[0].range('D7').value # デカンタ温度
23     v0_input = wb.sheets[0].range('N43').value # 反応器入口体積流量
24     topRow = 46
25     # -----
26

```



```

27 # 流れのクラスと流れに関するメソッド
28 class Flow:
29
30     # 中身
31     def __init__(self):
32         # モル流量, モル分率, 濃度, 平衡での気液モル分率, 温度を持っています
33         self.MolerFlow = np.array([0.]*7)
34         self.Fraction = np.array([0.]*7)
35         self.Concentration = np.array([0.]*7)
36         self.EquilibriumGasFraction = np.array([0.]*7)
37         self.EquilibriumLiquidFraction = np.array([0.]*7)
38         self.MolerEnthalpy = np.array([0.]*7)
39         self.Enthalpy = np.array([0.]*7)
40         self.EnthalpyTotal = 0.0
41         self.Temp = 0.0
42
43         # アントワン定数  $10^{**} \text{ or } \exp(A-B/(T+C))$ 
44         # tol=10** H2O=exp
45         antoineA = np.array([4.54436 + 5.0, 0., 0., 0., 23.1964, 0., 0.])
46         antoineB = np.array([1738.123, 0., 0., 0., 3816.44, 0., 0.])
47         antoineC = np.array([0.394, 0., 0., 0., -46.13, 0., 0.])
48
49         # ヘンリー定数  $p_{all} \cdot y = \text{Henry} \cdot x$ 
50         HenryN2 = 187000000.
51         HenryO2 = 114000000.
52
53         # 標準モル生成エンタルピー
54         LiquidDeltafEnthalpy = np.array([12.4, -94.1, -87.0, -385.2 \
55                                           , -285.83, 0., 0. ])
56         GasDeltafEnthalpy = np.array([50.4, 154.9, -36.8, -290.4 \
57                                       , -241.818, 0., 0. ])
58
59         # 熱容量係数
60         GasheatcapacityA = np.array([-24.356, 0., 0., -51.295 \
61                                       , 32.244, 28.107, 24.234 ])
62         GasheatcapacityB = np.array([0.513, 0., 0., 0.629 \
63                                       , 1.92e-3, -3.68e-6, 4.84e-3 ])
64         GasheatcapacityC = np.array([-2.77e-5, 0., 0., -4.24e-5 \
65                                       , 1.06e-5, 1.75e-5, -2.08e-5 ])
66         GasheatcapacityD = np.array([4.91e-8, 0., 0., 1.06e-7 \
67                                       , -3.60e-9, -1.07e-8, 2.93e-10])
68
69         # 熱容量係数
70         LiqheatcapacityA = np.array([157.09, 0., 0., 0. \
71                                       , 75.375, 0., 0. ])
72         LiqheatcapacityB = np.array([0., 0., 0., 0. \
73                                       , 0., 0., 0. ])
74         LiqheatcapacityC = np.array([0., 0., 0., 0. \
75                                       , 0., 0., 0. ])

```

```

75     LiqueatcapacityD = np.array([0. , 0. , 0. ,0. \
76                                   ,0. , 0. , 0. ])
77
78
79     # モル流量からモル分率を求めるメソッド
80     def FractionCalc(self):
81         FlowSum = np.sum(self.MolerFlow)
82         self.Fraction = self.MolerFlow/FlowSum
83
84     # 濃度からモル分率を求めるメソッド
85
86     def FractionCalcFromConcentration(self):
87         FlowSum = np.sum(self.Concentration)
88         self.Fraction = self.Concentration/FlowSum
89
90     # decanter で Tol と水の平衡状態の気体モル分率を求めるメソッド
91
92     def DecanterEquilibriumGasFractionCalc(self):
93         self.EquilibriumGasFraction[0] = (
94             10 ** (self.antoineA[0] - self.antoineB[0] /
95                 (Tdec + self.antoineC[0])))/Prea
96         self.EquilibriumGasFraction[4] = (
97             math.exp(self.antoineA[4] - self.antoineB[4] /
98                 (Tdec + self.antoineC[4])))/Prea
99
100     # CSTR(液相)の設計方程式から油分の液相濃度を求めさせるメソッド
101     def CSTRLiquidCalc(self):
102         # tol
103         Flow1.Concentration[0] = Flow0.Concentration[0] /
104             (1 + (k[0] + k[1]) * tau)
105         # Balc
106         Flow1.Concentration[1] = (Flow0.Concentration[1] + \
107             k[0] * tau * Flow1.Concentration[0]) / (1 + k[2] * tau)
108         # Bald
109         Flow1.Concentration[2] = (Flow0.Concentration[2] + \
110             (k[1] * Flow1.Concentration[0] + \
111             k[2] * Flow1.Concentration[1]) * tau) / (1 + k[3] * tau)
112         # BzA
113         Flow1.Concentration[3] = Flow0.Concentration[3] + \
114             k[3] * tau * Flow1.Concentration[2]
115
116     # reactor で平衡状態の液モル分率を求めるメソッド
117     def EquilibriumLiquidFractionCalc(self):
118         self.EquilibriumLiquidFraction[0] = Prea * self.Fraction[0] /
119             10 ** (self.antoineA[0] - self.antoineB[0] /
120                 (Trea + self.antoineC[0]))
121         self.EquilibriumLiquidFraction[1] = Flow1.Fraction[1]
122         self.EquilibriumLiquidFraction[2] = Flow1.Fraction[2]

```

```

123     self.EquilibriumLiquidFraction[3] = Flow1.Fraction[3]
124     self.EquilibriumLiquidFraction[4] = Prea * self.Fraction[4] /
125         math.exp(self.antoineA[4] - self.antoineB[4] /
126             (Trea + self.antoineC[4]))
127     self.EquilibriumLiquidFraction[5] = Prea * self.Fraction[5] /
128         self.HenryN2
129     self.EquilibriumLiquidFraction[6] = Prea * self.Fraction[6] /
130         self.HenryO2
131
132     # 気流が迅速に平衡に達すると仮定してほかの流量や濃度を求めるメソッド
133     def EquilibriumAssumptionCalc(self):
134
135         Flow1.FractionCalcFromConcentration()
136
137         # F2 から F3 の決定
138         Flow3.MolerFlow[4] = RR[4]
139         Flow3.MolerFlow[5] = Flow2.MolerFlow[5]
140         Flow3.MolerFlow[6] = Flow2.MolerFlow[6] + RR[6]
141
142         Flow3.Fraction[0] = Flow1.Fraction[0] /
143             Prea * 10. ** \
144             (self.antoineA[0] - self.antoineB[0] / \
145             (Trea + self.antoineC[0]))
146         sumF3 = np.sum(Flow3.MolerFlow)
147         Flow3.MolerFlow[0] = Flow3.Fraction[0] /
148             (1-Flow3.Fraction[0])*(sumF3)
149         Flow3.FractionCalc()
150
151         #迅速に平衡に達すると仮定してF1 の H2O,N2,O2 濃度を決定
152         Flow3.EquilibriumLiquidFractionCalc()
153         C1sum=np.sum(Flow1.Concentration)
154         Flow1.Fraction[4] = Flow3.EquilibriumLiquidFraction[4]
155         Flow1.Fraction[5] = Flow3.EquilibriumLiquidFraction[5]
156         Flow1.Fraction[6] = Flow3.EquilibriumLiquidFraction[6]
157         Flow1.Concentration[4] = Flow1.Fraction[4] /
158             (1-Flow1.Fraction[4]) * C1sum
159         Flow1.Concentration[5] = Flow1.Fraction[5] /
160             (1-Flow1.Fraction[5]) * C1sum
161         Flow1.Concentration[6] = Flow1.Fraction[6] /
162             (1-Flow1.Fraction[6]) * C1sum
163         Flow1.FractionCalcFromConcentration()
164         Flow1.MolerFlow = Flow1.Concentration * v0
165
166         # F5 について、デカンターで Tdec まで蒸気 F3 が冷やされ、
167         # 水とトルエンが飽和状態まで凝縮するとして決定
168         Flow5.MolerFlow = np.copy(Flow3.MolerFlow)
169         Flow5.DecanterEquilibriumGasFractionCalc()
170         Flow5.MolerFlow[0] = Flow5.EquilibriumGasFraction[0] /

```

```

171         (1 - Flow5.EquilibriumGasFraction[0] - \
172         Flow5.EquilibriumGasFraction[4]) * \
173         (Flow5.MolerFlow[5] + Flow5.MolerFlow[6])
174     Flow5.MolerFlow[4] = Flow5.EquilibriumGasFraction[4] /
175         (1 - Flow5.EquilibriumGasFraction[0] - \
176         Flow5.EquilibriumGasFraction[4]) * \
177         (Flow5.MolerFlow[5] + Flow5.MolerFlow[6])
178     Flow5.FractionCalc()
179
180     # 溶解度が低い場合、デカンターにおける分離効率は近似的に 100%としてF4 を決定
181     Flow4.MolerFlow[0] = Flow3.MolerFlow[0] - Flow5.MolerFlow[0]
182     #F1 に蒸発の寄与を取り込む
183     Flow1.MolerFlow[0] += -Flow5.MolerFlow[0]
184
185     # 冷却のため投入する水量F6 を決定
186     #モルエンタルピーの計算
187     Flow1.LiquidEnthalpyCalc()
188     Flow2.GasEnthalpyCalc()
189     Flow3.GasEnthalpyCalc()
190     Flow4.LiquidEnthalpyCalc()
191     Flow5.GasEnthalpyCalc()
192     Flow6.LiquidEnthalpyCalc()
193     Flow7.LiquidEnthalpyCalc()
194
195     #連立方程式を解きF6 と F7 を求める
196     A1list=[1,-1]
197     A2list=[Flow6.MolerEnthalpy[4] , -Flow7.MolerEnthalpy[4]]
198     A_matrix = np.array([A1list, A2list])
199     b = np.array([Flow4.MolerFlow[4] + Flow5.MolerFlow[4] - \
200         Flow3.MolerFlow[4] ,Flow4.EnthalpyTotal + \
201         Flow5.EnthalpyTotal - Flow3.EnthalpyTotal ])
202     x_vec = np.linalg.solve(A_matrix, b)
203     Flow6.MolerFlow[4] = x_vec[0]
204     Flow7.MolerFlow[4] = x_vec[1]
205
206
207     # 気体のモルエンタルピーを求めるメソッド [J/mol]
208     def GasEnthalpyCalc(self):
209         self.MolerEnthalpy = self.GasDeltafEnthalpy*1000+
210         self.GasheatcapacityA*(self.Temp -298.15 ) + \
211         self.GasheatcapacityB*(self.Temp**2.-298.15**2.)/2. + \
212         self.GasheatcapacityC*(self.Temp**3.-298.15**3.)/3. + \
213         self.GasheatcapacityD*(self.Temp**4.-298.15**4.)/4.
214         self.Enthalpy = self.MolerFlow * self.MolerEnthalpy
215         self.EnthalpyTotal=np.sum(self.Enthalpy)
216
217     # 液体のモル当たりエンタルピーを求めるメソッド [J/mol]
218     def LiquidEnthalpyCalc(self):

```

```

219         self.MolerEnthalpy = self.LiquidDeltafEnthalpy*1000 + \
220             self.LiqheatcapacityA*(self.Temp-298.15)
221         self.Enthalpy = self.MolerFlow * self.MolerEnthalpy
222         self.EnthalpyTotal=np.sum(self.Enthalpy)
223
224     # インスタンスの定義
225     Flow0 = Flow()
226     Flow1 = Flow()
227     Flow2 = Flow()
228     Flow3 = Flow()
229     Flow4 = Flow()
230     Flow5 = Flow()
231     Flow6 = Flow()
232     Flow7 = Flow()
233
234     # -----外部入力値-----
235
236     # 0. 外部入力条件を受けとります
237     # 液相体積
238     VL = VL_input
239     # 流入液体積 [m3/s]
240     v0 = v0_input # [m3/hour]
241     v0 = v0 / 3600.
242     # 反応器体積
243     DHrate = 1.0
244     # 全圧 [Pa]
245     Prea = P_input * 1.e+5
246     # 温度 [°C]
247     Trea = T_input + 273.15
248     # 流入液モル流量 [mol/s]
249     Flow0.MolerFlow = np.array(F0_input) # kmol/hour
250     Flow0.MolerFlow = Flow0.MolerFlow / 3.6 # mol/s
251     # -----
252
253     # 1 入力 -----
254     # 1-1 計算に用いる物性パラメータを入力します
255     # 自然定数
256     pi = math.pi
257     Rgas = 8.314
258     gra = 9.81
259
260     # アレニウス型反応速度式のパラメータ
261     # 頻度因子 [s-1]
262     A = np.array([math.exp(20.634), math.exp(17.928),
263                   math.exp(15.4), math.exp(19.698)])
264     A = A / 3600.
265     # 活性化エネルギー
266     E = np.array([81.389, 69.53, 56.987, 71.442])

```

```

267     E = E * 1000.
268     # 反応速度定数 [s-1]
269     k = np.array([A[i] * math.exp(-E[i] / (Rgas * Trea)) for i in range(4)])
270
271     # 1-2 反応器の装置条件を決めます
272     Drea = (VL / (pi * DHrate)) ** (1 / 3)
273     hL = Drea * DHrate
274     Area = pi * (Drea ** 2)/4.
275     Dnoz = Drea / 10
276     Anoz = pi * (Dnoz ** 2)/4.
277
278     # 1-3 反応器の運転条件を決めます
279     tau = VL / v0
280     QG = (50. / 1000. / 3600.) * (VL / 0.00025)*0.6
281     Tdec = T_decanter + 273.15
282
283
284     #global 宣言
285     kLa = 0.0
286     htot = 0.0
287     Rr = np.array([0.]*4)
288     RR = np.array([0.]*7)
289
290
291     # 1-4 マテリアルフローに必要な変数を入力します
292
293     Twater = 25.0
294
295     Flow2.Temp = 10. + 273.15
296     Flow3.Temp = Trea
297     Flow4.Temp = Tdec
298     Flow5.Temp = Tdec
299     Flow6.Temp = Twater + 273.15
300     Flow7.Temp = Tdec
301
302     # 各フローのモル分率
303     Flow0.FractionCalc()
304     Flow2.Fraction = np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0.79, 0.21])
305     Flow4.Fraction = np.array([1., 0, 0, 0, 0, 0, 0])
306     Flow6.Fraction = np.array([0., 0., 0., 0., 1., 0., 0.])
307     Flow7.Fraction = np.array([0, 0, 0, 0, 1., 0, 0])
308
309     # 各フローのモル流量
310     Flow2.MolerFlow = np.array([0., 0., 0., 0., 0., ((Prea * 0.79) / \
311         (Rgas * Flow2.Temp)), ((Prea * 0.21) / (Rgas * Flow2.Temp))])
312     Flow2.MolerFlow = Flow2.MolerFlow * QG
313
314     # 各フローのモル濃度

```

```

315     Flow0.Concentration = Flow0.MolerFlow / v0
316
317     # 2 液相の油分について, 蒸発の影響を無視小,
318     # CSTR モデルと仮定して反応器内濃度を求めます -----
319
320     Flow1.CSTRLiquidCalc()
321
322     # 各反応の反応量
323     Rr = np.array([k[0] * Flow1.Concentration[0], \
324                   k[1] * Flow1.Concentration[0], \
325                   k[2] * Flow1.Concentration[1], \
326                   k[3] * Flow1.Concentration[2]])
327     Rr = np.array(Rr * VL)
328     # 各成分の反応量
329     RR = np.array(-(Rr[0] + Rr[1]), \
330                   Rr[0] - Rr[2], \
331                   Rr[1] + Rr[2] - Rr[3], \
332                   Rr[3], Rr[1] + Rr[2], \
333                   0., \
334                   -(0.5 * Rr[0] + Rr[1] + 0.5 * Rr[2] + 0.5 * Rr[3]))
335
336
337     # 3 気相について, 平衡に達すると仮定してF3 や他の流量をを推算します -----
338     Flow3.EquilibriumAssumptionCalc()
339
340
341     #-----出力-----
342
343     H7_6_cooling = Flow6.MolerFlow[4] *
344                   (Flow7.MolerEnthalpy[4] - Flow6.MolerEnthalpy[4])
345                   /1000. /1000. *3600
346     H6_1000kmol_cooling = 1000.* 1000. / 3600.*
347                   (Flow7.MolerEnthalpy[4] - Flow6.MolerEnthalpy[4])
348                   /1000. /1000. *3600
349
350     if H7_6_cooling > H6_1000kmol_cooling:
351         Flow6.MolerFlow[4] = 1000. * 1000. / 3600.
352         Flow7.MolerFlow[4] = Flow6.MolerFlow[4] -
353                               Flow5.MolerFlow[4] +
354                               Flow3.MolerFlow[4]
355
356     Flow6.LiquidEnthalpyCalc()
357     Flow7.LiquidEnthalpyCalc()
358
359     Flow6.Temp += -273.15
360     Flow7.Temp += -273.15
361     F1_output = Flow1.MolerFlow * 3.6 # 反応器出口成分別モル流量
362     F2_output = Flow2.MolerFlow * 3.6 # 反応器出口成分別モル流量

```

```

363 F3_output = Flow3.MolerFlow * 3.6 # 反応器出口成分別モル流量
364 F4_output = Flow4.MolerFlow * 3.6 # 反応器出口成分別モル流量
365 F5_output = Flow5.MolerFlow * 3.6 # 反応器出口成分別モル流量
366 F6_output = Flow6.MolerFlow * 3.6 # 反応器出口成分別モル流量
367 F7_output = Flow7.MolerFlow * 3.6 # 反応器出口成分別モル流量
368 Flow1.EnthalpyTotal = Flow1.EnthalpyTotal * 1.e-9
369 Flow2.EnthalpyTotal = Flow2.EnthalpyTotal * 1.e-9
370 Flow3.EnthalpyTotal = Flow3.EnthalpyTotal * 1.e-9
371 Flow4.EnthalpyTotal = Flow4.EnthalpyTotal * 1.e-9
372 Flow5.EnthalpyTotal = Flow5.EnthalpyTotal * 1.e-9
373 Flow6.EnthalpyTotal = Flow6.EnthalpyTotal * 1.e-9
374 Flow7.EnthalpyTotal = Flow7.EnthalpyTotal * 1.e-9
375
376 wb.sheets[0].range((44, 4), (44, 10)).value = F1_output # 流出液流量
377 wb.sheets[0].range(44, 12).value = Flow1.EnthalpyTotal # 流出液流量
378
379 wb.sheets[0].range((topRow + 0, 4), (topRow + 0, 10)).value = F2_output
380 # 流入空気流量
381 wb.sheets[0].range((topRow + 1, 4), (topRow + 1, 10)).value = F3_output
382 # 反応器からデカンターへの蒸気
383 wb.sheets[0].range((topRow + 2, 4), (topRow + 2, 10)).value = F4_output
384 # 反応器へ還流される油分
385 wb.sheets[0].range((topRow + 3, 4), (topRow + 3, 10)).value = F5_output
386 # 吸着装置へ運ばれるTo1 飽和蒸気
387 wb.sheets[0].range((topRow + 4, 4), (topRow + 4, 10)).value = F6_output
388 # 冷却のため投入する水量
389 wb.sheets[0].range((topRow + 5, 4), (topRow + 5, 10)).value = F7_output
390 # デカンターからパージする水量
391 wb.sheets[0].range((topRow + 6, 4), (topRow + 6, 10)).value
392 = Flow1.Concentration
393 # 流出液流量
394
395 wb.sheets[0].range(topRow + 0, 15).value = Flow2.EnthalpyTotal
396 # 流入空気流量
397 wb.sheets[0].range(topRow + 1, 15).value = Flow3.EnthalpyTotal
398 # 反応器からデカンターへの蒸気
399 wb.sheets[0].range(topRow + 2, 15).value = Flow4.EnthalpyTotal
400 # 反応器へ還流される油分
401 wb.sheets[0].range(topRow + 3, 15).value = Flow5.EnthalpyTotal
402 # 吸着装置へ運ばれるTo1 飽和蒸気
403 wb.sheets[0].range(topRow + 4, 15).value = Flow6.EnthalpyTotal
404 # 冷却のため投入する水量
405 wb.sheets[0].range(topRow + 5, 15).value = Flow7.EnthalpyTotal
406 # デカンターからパージする水量
407
408 wb.sheets[0].range(74,6).value = H7_6_cooling
409 wb.sheets[0].range(74,7).value = Flow6.Temp
410 wb.sheets[0].range(74,8).value = Flow7.Temp +0.001

```



```

411
412     wb.sheets[0].range(75,6).value = H6_1000kmol_cooling
413     wb.sheets[0].range(75,7).value = Twater
414     wb.sheets[0].range(75,8).value = T_decanter
415
416     wb.sheets[0].range(76,6).value = H6_1000kmol_cooling
417     wb.sheets[0].range(76,7).value = T_decanter
418     wb.sheets[0].range(76,8).value = Twater

```

---

### ソースコード B.3 グランドコンポジットカーブおよび TQ 線図を書くコード

---

```

1  # =====
2  # プログラム：熱交換の解析
3  #
4  # ver010
5  # : グランドコンポジットカーブを描画します.
6  # ver020
7  # : 追加 TQ 線図を描画します
8  # ver030
9  # : 追加 各流体の熱交換対応を解析します
10 # ver040
11 # : 追加 任意の等温外部熱媒の熱量計算を実装
12 #
13 # 使い方:
14 # xlwings をimport したエクセルファイルに,
15 # 相状態 [気体, 液体, 凝縮ガス, 蒸気液] = ["gas", "liq", "congas", "vapliq"]
16 # を書き込む
17 # (一部データを入れていない総括伝熱係数の組み合わせがある)
18 # 等温流体には"give", "receive"を明示する.
19 # (エラーを吐くときは人為的に微小な温度勾配をつける)
20 # 外部熱媒には"exgive", "exreceive"と書く
21 # 横の列に交換熱量, 熱交換前温度, 熱交換後の温度の順に書き込む.
22 # 熱交換流体の総数を書き込む. (外部熱媒を含む)
23 # 最小接近温度差を決める.
24 # vba から Runpython コマンドで実行 .
25 #
26 # =====
27
28 def main():
29
30 #ライブラリ
31 from scipy import interpolate
32 from math import log
33 import numpy as np
34 import xlwings as xw
35 import copy
36 import sys
37 from matplotlib import pyplot as plt
38 from matplotlib.font_manager import FontProperties

```

```

39 from matplotlib import rcParams
40
41
42 wb = xw.Book.caller()
43
44 #=====外部入力値=====
45 readsheet = 0 #読み込みたいシートNO(0始まり)
46 writesheet = 1 #書きこみたいシートNO(0始まり)
47 row_readstart = 64 #読み込みたい表の左上の行
48 column_readstart = 3 #読み込みたい表の左上の列
49 row_writestart = 2 #書き込みたい表の左上の行
50 column_writestart = 2 #書き込みたい表の左上の列
51 #=====
52
53 sn_input = wb.sheets[readsheet].range((row_readstart-1, column_readstart-1 ))
54         .value
55 mdt_input = wb.sheets[readsheet].range((row_readstart, column_readstart-1 ))
56         .value
57
58 streamnumber = int(sn_input) #熱交換流体の総数
59 minimumdeltaTemperture = float(mdt_input) #最小接近温度差
60
61 sig = 1 #切り捨てる少数点以下桁数
62
63 #識別用
64 #授受関係
65 give = "give" #与熱流体
66 receive = "receive" #受熱流体
67 externalgive = "exgive" #外部熱媒
68 externalreceive = "exreceive" #外部冷媒
69 gives = [give ,externalgive ]
70 receives = [receive,externalreceive]
71
72 #相状態関係
73 gas = "gas"
74 liquid = "liq"
75 condensategas = "congas"
76 vaporliquid = "vapliq"
77 phaselist = [gas, liquid, condensategas, vaporliquid]
78
79 twophaselist = []
80 for i in range (len(phaselist)):
81     for j in range (len(phaselist)):
82         if i <= j:
83             twophaselist.append([phaselist[i], phaselist[j]])
84     next
85 next
86

```

```

87 #overall_heattransfer_coefficient = 総括伝熱係数U[W/m2 K]
88 # [gasgas],[gas liq],[gas congas],[gas vapgaz],[liqliq],
89 # [liq congas],[liq vapliq],[congascongas],[congas vapliq][vapliqvapliq]
90 Ulist = [150., 200., 500., 500., 300., 1000., 1000., "none", 1500., "none" ]
91
92 #float 判定用
93 eps = 10.**(- float(sig))
94
95 #熱媒検索用
96 streamindex_give = []
97 streamindex_receive = []
98 streamindex_externalgive = []
99 streamindex_externalreceive = []
100 streamindex_externalheat = []
101
102 class Heatstream():
103
104     def __init__(self, number):
105         self.name = "" #ストリーム名
106         self.property = ""
107                                     #(give or receive) or (exgive or exreceive)
108         self.phase = "" #状態
109         self.number = number #ストリーム番号
110         self.deltaheat = 0.0 #交換熱量
111         self.deltaheat_section = 0.0 #区間交換熱量
112         self.heatcapacity = 0.0 #熱容量
113         self.temperatureMAX = 0.0 #高温
114         self.temperatureMIN = 0.0 #低温
115         self.temperatureindexMAX = 0 #高温検索用
116         self.temperatureindexMIN = 0 #低温検索用
117         self.rebcon = "" #reboier 判別用
118
119         self.leftend_externalheat_GCC = 0.0 #外部熱媒用
120
121     def read(self):
122         # excel 連携用
123         self.name = wb.sheets[readsheet]
124             .range((row_readstart + self.number + 1 ,column_readstart + 0 )).value
125         self.phase = wb.sheets[readsheet]
126             .range((row_readstart + self.number + 1 ,column_readstart + 1 )).value
127         self.property = wb.sheets[readsheet]
128             .range((row_readstart + self.number + 1 ,column_readstart + 2 )).value
129         self.deltaheat = wb.sheets[readsheet]
130             .range((row_readstart + self.number + 1 ,column_readstart + 3 )).value
131         self.temperatureMAX = wb.sheets[readsheet]
132             .range((row_readstart + self.number + 1 ,column_readstart + 4 )).value
133         self.temperatureMIN = wb.sheets[readsheet]
134             .range((row_readstart + self.number + 1 ,column_readstart + 5 )).value

```

```

135     self.rebcon = wb.sheets[readsheet]
136         .range((row_readstart + self.number + 1 ,column_readstart + 6 )).value
137
138
139     #ねんのため
140     self.name = str(self.name)
141     self.phase = str(self.phase)
142     self.property = str(self.property)
143     self.deltaheat = float(self.deltaheat)
144     self.temperatureMAX = float(self.temperatureMAX)
145     self.temperatureMIN = float(self.temperatureMIN)
146
147     ddmax = np.random.rand() * 0.0001 + 0.0001 #等温熱媒調整用微小項
148     ddmin = np.random.rand() * 0.0001 + 0.0001 #等温熱媒調整用微小項
149
150     if (self.temperatureMAX - self.temperatureMIN) > 0 :#与熱流体
151         self.property = give
152         streamindex_give.append(self.number)
153
154     elif (self.temperatureMAX - self.temperatureMIN) < 0 :#受熱流体
155         self.property = receive
156         self.temperatureMAX, self.temperatureMIN
157             = self.temperatureMIN, self.temperatureMAX
158         streamindex_receive.append(self.number)
159
160     self.temperatureMAX += ddmax #傾きがないとエラーなので微小勾配をつける
161     self.temperatureMIN += -ddmin
162
163     if self.property == externalgive :#外部与熱流体
164         self.deltaheat = 0.0
165         streamindex_externalgive.append(self.number)
166
167         streamindex_externalheat.append(self.number)
168
169     elif self.property == externalreceive :#外部受熱流体
170         self.deltaheat = 0.0
171         streamindex_externalreceive.append(self.number)
172
173         streamindex_externalheat.append(self.number)
174
175     self.heatcapacity_calc()
176
177     def heatcapacity_calc(self):
178         self.heatcapacity = self.deltaheat
179             / (self.temperatureMAX - self.temperatureMIN)
180
181
182     streams=[] #熱流体の情報読み込み

```

```

183 for i in range (streamnumber):
184     dummy = Heatstream(i)
185     streams.append(dummy)
186     streams[i].read()
187
188 ascendingtemperature_TQ=[] #温度の昇順ソート
189 ascendingtemperature_GCC=[]
190 for i in range (len(streams)):
191     ascendingtemperature_TQ.append(streams[i].temperatureMAX) #TQ 線図用
192     ascendingtemperature_TQ.append(streams[i].temperatureMIN)
193     if streams[i].property == give: #GCC 用
194         ascendingtemperature_GCC.append(streams[i].temperatureMAX)
195         ascendingtemperature_GCC.append(streams[i].temperatureMIN)
196     elif streams[i].property == receive:
197         ascendingtemperature_GCC
198             .append(streams[i].temperatureMAX + minimumdeltaTemperture)
199         ascendingtemperature_GCC
200             .append(streams[i].temperatureMIN + minimumdeltaTemperture)
201 next
202
203 ascendingtemperature_TQ.sort()
204 ascendingtemperature_GCC.sort()
205
206 #整理した温度のindexを取得
207 for i in range (len(streams)):
208     streams[i].temperatureindexMAX = ascendingtemperature_TQ
209         .index(streams[i].temperatureMAX)
210     streams[i].temperatureindexMIN = ascendingtemperature_TQ
211         .index(streams[i].temperatureMIN)
212
213 heatbalance_section_GCC =np.array([0.]*(len(ascendingtemperature_GCC)))
214                                     #各温度範囲での熱バランス
215 heatbalance_sum_GCC =np.array([0.]*(len(ascendingtemperature_GCC)))
216                                     #GCC グラフ用の熱量
217
218 for i in range (len(ascendingtemperature_GCC) - 1): #GCC カーブデータの作成
219     dT = (ascendingtemperature_GCC[i+1] - ascendingtemperature_GCC[i])
220     for j in range (len(streamindex_give)):
221         x = streams[streamindex_give[j]]
222         if x.temperatureMIN <= ascendingtemperature_GCC[i] < x.temperatureMAX:
223             heatbalance_section_GCC[i] += + x.heatcapacity * dT
224     for j in range (len(streamindex_receive)):
225         x = streams[streamindex_receive[j]]
226         if (x.temperatureMIN + minimumdeltaTemperture) \
227             <=ascendingtemperature_GCC[i] \
228             < (x.temperatureMAX + minimumdeltaTemperture):
229             heatbalance_section_GCC[i] += - x.heatcapacity * dT
230

```

```

231     heatbalance_sum_GCC[i+1] = heatbalance_sum_GCC[i] - \
232                             heatbalance_section_GCC[i]
233 next
234
235 GCCleft = np.min(heatbalance_sum_GCC) #カーブ左端の探索
236 heatbalance_sum_GCC = heatbalance_sum_GCC - GCCleft #GCC カーブをずらす
237
238 #=====
239 #外部熱媒使用量の計算
240
241 GCCfunction = interpolate.interp1d(ascendingtemperature_GCC,heatbalance_sum_GCC)
242
243 def ExternalHeatFromGCCfunction(EXheatstream): #外部熱媒の使用可能量を計算する関数
244     EXHeat = 0.0
245
246     if EXheatstream.property == externalgive: #熱媒の場合
247         if EXheatstream.temperatureMIN >= ascendingtemperature_GCC[-1]:
248             EXHeat = heatbalance_sum_GCC[-1]
249         else :
250             EXHeat = GCCfunction(EXheatstream.temperatureMIN)
251             for i in range(len(ascendingtemperature_GCC)):
252                 if ascendingtemperature_GCC[i] >= EXheatstream.temperatureMIN:
253                     EXHeat = np.min([EXHeat, heatbalance_sum_GCC[i]])
254             next
255
256     if EXheatstream.property == externalreceive: #冷媒の場合
257         if EXheatstream.temperatureMIN + minimumdeltaTemperture \
258             <= ascendingtemperature_GCC[0]:
259             EXHeat = heatbalance_sum_GCC[0]
260         else :
261             EXHeat = GCCfunction(EXheatstream.temperatureMIN + \
262                                 minimumdeltaTemperture)
263             for i in range(len(ascendingtemperature_GCC)):
264                 if ascendingtemperature_GCC[i]
265                     <=EXheatstream.temperatureMIN + minimumdeltaTemperture:
266                     EXHeat = np.min([EXHeat, heatbalance_sum_GCC[i]])
267             next
268
269     EXheatstream.deltaheat = EXHeat
270
271
272 for i in range (len(streamindex_externalheat)): #外部熱媒の使用可能量を計算
273     ExternalHeatFromGCCfunction(streams[streamindex_externalheat[i]])
274
275
276 for i in range (len(streamindex_externalgive)):
277     #温度の異なる外部熱媒を用いている時,熱量を分割する処理
278     for j in range (len(streamindex_externalgive)):

```

```

279         #低コスト熱媒に代用可能な部分の検索
280         if (streams[streamindex_externalgive[i]].temperatureMIN \
281             > streams[streamindex_externalgive[j]].temperatureMIN):
282             streams[streamindex_externalgive[i]].leftend_externalheat_GCC = \
283                 np.max([streams[streamindex_externalgive[i]]
284                     .leftend_externalheat_GCC, \
285                     streams[streamindex_externalgive[j]].deltaheat])
286
287
288     for i in range (len(streamindex_externalreceive)):
289         #温度の異なる外部冷媒を用いている時、熱量を分割する処理
290         for j in range (len(streamindex_externalreceive)):
291             #低コスト熱媒に代用可能な部分の検索
292             if streams[streamindex_externalreceive[i]].temperatureMIN
293                 < streams[streamindex_externalreceive[j]].temperatureMIN:
294                 streams[streamindex_externalreceive[i]] \
295                     .leftend_externalheat_GCC = \
296                     np.max([streams[streamindex_externalreceive[i]]
297                         .leftend_externalheat_GCC, \
298                         streams[streamindex_externalreceive[j]].deltaheat])
299
300
301     #熱容量と実際の外部熱媒使用熱量の計算
302     for i in range (len(streamindex_externalheat)):
303         streams[streamindex_externalheat[i]].deltaheat +=
304             - streams[streamindex_externalheat[i]].leftend_externalheat_GCC
305         streams[streamindex_externalheat[i]].heatcapacity_calc()
306
307     #=====
308
309     #TQdiagram のデータ制作=====
310
311     sectionheat_give = np.array([0.]*(len(ascendingtemperature_TQ)))
312     sectionheat_receive = np.array([0.]*(len(ascendingtemperature_TQ)))
313     heatsum_give = np.array([0.]*(len(ascendingtemperature_TQ)))
314     heatsum_receive = np.array([0.]*(len(ascendingtemperature_TQ)))
315
316     for i in range (len(ascendingtemperature_TQ)-1):
317         dT = (ascendingtemperature_TQ[i+1] - ascendingtemperature_TQ[i])
318         for j in range (len(streams)):
319             if streams[j].property in gives :
320                 if streams[j].temperatureindexMIN \
321                     <= i < streams[j].temperatureindexMAX:
322                     sectionheat_give[i] += streams[j].heatcapacity * dT
323             elif streams[j].property in receives :
324                 if streams[j].temperatureindexMIN \
325                     <= i < streams[j].temperatureindexMAX:
326                     sectionheat_receive[i] += streams[j].heatcapacity * dT

```

```

327
328     next
329     heatsum_give[i+1] = sectionheat_give[i] + heatsum_give[i]
330     heatsum_receive[i+1] = sectionheat_receive[i] + heatsum_receive[i]
331 next
332
333 # print("Draw TQ diagram Complete")
334 #=====
335
336 class HeatExchanger:
337     def __init__(self):
338         self.exchangeheat =0.0
339         self.streamname_give =""
340         self.streamname_receive =""
341         self.temperaturehigh_give =0.0
342         self.temperaturelow_give =0.0
343         self.temperaturehigh_receive =0.0
344         self.temperaturelow_receive =0.0
345         self.heatcapacity_give =0.0
346         self.heatcapacity_receive =0.0
347         self.deltatemperature_high =0.0
348         self.deltatemperature_low =0.0
349         self.LogMeantemperature =0.0
350         self.phase_give =""
351         self.phase_receive =""
352         self.U =0.0
353         self.area =0.0
354         self.rebconfacter =1.
355         self.cost =0.0
356
357
358     def heatcapacity_calc(self):
359         self.heatcapacity_give = self.exchangeheat /
360             (self.temperaturehigh_give - self.temperaturelow_give)
361         self.heatcapacity_receive = self.exchangeheat /
362             (self.temperaturehigh_receive - self.temperaturelow_receive)
363
364     def deltatemperature_LogMean_calc(self):
365         self.deltatemperature_high = np.abs(self.temperaturehigh_give - \
366             self.temperaturehigh_receive)
367         self.deltatemperature_low = np.abs(self.temperaturelow_give - \
368             self.temperaturelow_receive)
369         if self.deltatemperature_high == self.deltatemperature_low:
370             self.LogMeantemperature = self.deltatemperature_high
371         else:
372             self.LogMeantemperature = (self.deltatemperature_high - \
373                 self.deltatemperature_low)/ \
374                 log(abs(self.deltatemperature_high/self.deltatemperature_low))

```



```

375
376
377     def Rounddata(self):
378         self.exchangeheat = np.round(self.exchangeheat,sig)
379         self.LogMeantemperature = np.round(self.LogMeantemperature,sig)
380         self.heatcapacity_give = np.round(self.heatcapacity_give)
381         self.heatcapacity_receive = np.round(self.heatcapacity_receive)
382
383
384 #複合線図を分解して熱交換器の対応を考える
385 #TQ 関数の作成
386 temperature_GCCgiveinter = interpolate.interp1d(heatsum_give, \
387         ascendingtemperature_TQ ,fill_value='extrapolate', \
388         bounds_error=False)
389 temperature_GCCreceiveinter = interpolate.interp1d(heatsum_receive, \
390         ascendingtemperature_TQ ,fill_value='extrapolate', \
391         bounds_error=False)
392
393 heatsum_give = list(heatsum_give)
394 heatsum_receive = list(heatsum_receive)
395
396 def temperature_TQgive(Q): #引数はascendingtemperature_TQ 参照
397     if Q[1] == give:
398         T = ascendingtemperature_TQ[Q[2]]
399     else:
400         T = temperature_GCCgiveinter(Q[0])
401     return(T)
402
403 def temperature_TQreceive(Q):
404     if Q[1] == receive:
405         T = ascendingtemperature_TQ[Q[2]]
406     else:
407         T = temperature_GCCreceiveinter(Q[0])
408     return(T)
409
410
411 #熱量で区間分割
412 ascendingheat_TQ = []
413 for i in range (len(ascendingtemperature_TQ)):
414     ascendingheat_TQ.append([heatsum_give[i] ,give ,i])
415     #Q の座標, g,r どちらの区切り点か, どの昇順温度と対応しているかを保存
416     ascendingheat_TQ.append([heatsum_receive[i],receive ,i])
417 next
418 ascendingheat_TQ.sort(key=lambda x:x[0])
419
420 #各区間での熱交換リストの作成
421 streamlistTQsection_give = []
422 streamlistTQsection_receive = []

```

```

423 datalist_heatexchanger = []
424
425 countgive = -1
426 countreceive = -1
427
428 #熱交換データの作成
429 for i in range (len(ascendingheat_TQ)-1):
430
431     if ascendingheat_TQ[i][1] == give: #give ,receive の昇順温度との対応を記録
432         countgive += 1
433     elif ascendingheat_TQ[i][1] == receive:
434         countreceive += 1
435
436     temperaturelow_give = temperature_TQgive(ascendingheat_TQ[i])
437     temperaturelow_receive = temperature_TQreceive(ascendingheat_TQ[i])
438     temperaturehigh_give = temperature_TQgive(ascendingheat_TQ[i+1])
439     temperaturehigh_receive = temperature_TQreceive(ascendingheat_TQ[i+1])
440     deltaT_give = temperaturehigh_give - temperaturelow_give
441     deltaT_receive = temperaturehigh_receive - temperaturelow_receive
442
443     #区間中に存在する熱流体のリストを作成
444     for j in range (len(streams)):
445
446         x = copy.deepcopy(streams[j])
447
448         if x.property in gives:
449             if x.temperatureindexMIN <= countgive < x.temperatureindexMAX:
450                 x.deltaheat_section = x.heatcapacity * deltaT_give
451                 streamlistTQsection_give.append(x)
452         if x.property in receives:
453             if x.temperatureindexMIN <= countreceive < x.temperatureindexMAX:
454                 x.deltaheat_section = x.heatcapacity * deltaT_receive
455                 streamlistTQsection_receive.append(x)
456     next
457
458     #与熱流体と受熱流体のマッチング
459     while len(streamlistTQsection_give) > 0
460         and len(streamlistTQsection_receive) > 0:
461
462         #データクラス作成
463         dummy = HeatExchanger()
464         datalist_heatexchanger.append(dummy)
465
466         heatlist_give_receive = [streamlistTQsection_give[0].deltaheat_section,\
467                                 streamlistTQsection_receive[0].deltaheat_section]
468
469     #熱交換データの構成
470     dlhe = datalist_heatexchanger[-1]

```

```

471     dlhe.exchangeheat = np.min(heatlist_give_receive)
472     dlhe.streamname_give = streamlistTQsection_give[0].name
473     dlhe.streamname_receive = streamlistTQsection_receive[0].name
474     dlhe.temperaturehigh_give = temperaturehigh_give
475     dlhe.temperaturelow_give = temperaturelow_give
476     dlhe.temperaturehigh_receive = temperaturehigh_receive
477     dlhe.temperaturelow_receive = temperaturelow_receive
478     dlhe.heatcapacity_calc()
479     dlhe.phase_give = streamlistTQsection_give[0].phase
480     dlhe.phase_receive = streamlistTQsection_receive[0].phase
481
482     if streamlistTQsection_give[0].rebcon == "reb"
483         or streamlistTQsection_receive[0].rebcon == "reb":
484         dlhe.rebcon_factor = 2.
485
486     #熱交換反映
487     streamlistTQsection_give[0].deltaheat_section += - dlhe.exchangeheat
488     streamlistTQsection_receive[0].deltaheat_section += - dlhe.exchangeheat
489
490     #交換済流体の削除
491     deleteindex = heatlist_give_receive.index(min(heatlist_give_receive))
492     if deleteindex == 0:
493         del streamlistTQsection_give[0]
494     else:
495         del streamlistTQsection_receive[0]
496 next
497
498 deletecounter = 0 #無視小交換を取り除く処理
499 for i in range(len(datalist_heatexchanger)):
500     datalist_heatexchanger[i].Rounddata()
501     if datalist_heatexchanger[i].exchangeheat < eps:
502         datalist_heatexchanger.insert(0, datalist_heatexchanger[i])
503         del datalist_heatexchanger[i+1]
504         deletecounter += 1
505 for i in range(deletecounter):
506     del datalist_heatexchanger[0]
507
508
509 #熱交換データの整理
510 sorted_datalist_heatexchanger = []
511 datanumberbeforesort = len(datalist_heatexchanger)
512 while len(datalist_heatexchanger) > 0:
513     mixcounter = 1
514     sorted_datalist_heatexchanger
515         .append(copy.deepcopy(datalist_heatexchanger[0]))
516     for i in range(len(datalist_heatexchanger) -1):
517         #交換流体と各熱容量が一致したら熱交換器をまとめる
518         if datalist_heatexchanger[i+1].streamname_give \

```

```

519         == datalist_heatexchanger[0].streamname_give \
520         and datalist_heatexchanger[i+1].streamname_receive \
521         == datalist_heatexchanger[0].streamname_receive \
522         and np.abs(datalist_heatexchanger[i+1].heatcapacity_give \
523             - datalist_heatexchanger[0].heatcapacity_give) < eps \
524         and np.abs(datalist_heatexchanger[i+1].heatcapacity_receive \
525             - datalist_heatexchanger[0].heatcapacity_receive) < eps :
526
527         sorted_datalist_heatexchanger[-1].exchangeheat
528             += datalist_heatexchanger[i+1].exchangeheat #熱量の加算
529         sorted_datalist_heatexchanger[-1].temperaturehigh_give
530             = datalist_heatexchanger[i+1].temperaturehigh_give #温度範囲の拡張
531         sorted_datalist_heatexchanger[-1].temperaturehigh_receive
532             = datalist_heatexchanger[i+1].temperaturehigh_receive
533
534         datalist_heatexchanger.insert(0, datalist_heatexchanger[i+1])
535         del datalist_heatexchanger[i+2]
536         mixcounter += 1
537     next
538     for i in range(mixcounter):
539         del datalist_heatexchanger[0]
540     next
541 datanumberaftersort = len(sorted_datalist_heatexchanger)
542
543 totalcost=0.0
544 totalheat=0.0
545
546 #対数平均温度差dT, 総括伝熱係数 U, 熱交換器面積 A の計算
547 for i in range(len(sorted_datalist_heatexchanger)):
548
549     sorted_datalist_heatexchanger[i].deltatemperature_LogMean_calc()
550     sorted_datalist_heatexchanger[i].Rounddata()
551
552     for j in range (len(twophaselist)):
553         if [sorted_datalist_heatexchanger[i].phase_give, \
554             sorted_datalist_heatexchanger[i].phase_receive] == twophaselist[j] \
555             or [sorted_datalist_heatexchanger[i].phase_receive, \
556                 sorted_datalist_heatexchanger[i].phase_give] == twophaselist[j]:
557             sorted_datalist_heatexchanger[i].U = Ulist[j]
558     next
559
560     sorted_datalist_heatexchanger[i].area \
561         = (1.e+6/3600.)*sorted_datalist_heatexchanger[i].exchangeheat \
562         /(sorted_datalist_heatexchanger[i].U * \
563             sorted_datalist_heatexchanger[i].LogMeantemperature)
564
565     sorted_datalist_heatexchanger[i].cost = 0.015 * \
566         sorted_datalist_heatexchanger[i].rebconfacter * \

```

```

567         sorted_datalist_heatexchanger[i].area ** 0.62
568     totalcost += sorted_datalist_heatexchanger[i].cost
569     totalheat += sorted_datalist_heatexchanger[i].exchangeheat
570 next
571
572 #出力
573 wb.sheets[writesheet].clear_contents()
574 for i in range (len(streams)):
575     wb.sheets[readsheet].range((row_readstart + streams[i].number + 1, \
576         column_readstart + 2)).value = streams[i].property
577     wb.sheets[readsheet].range((row_readstart + streams[i].number + 1, \
578         column_readstart + 3)).value = streams[i].deltaheat
579
580 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +0)).value
581     = "熱交換器番号"
582 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +1)).value
583     = "与熱流体"
584 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +2)).value
585     = "受熱流体"
586 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +3)).value
587     = "対数平均温度差 [K]"
588 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +4)).value
589     = "交換熱量 [MJ/h]"
590 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +5)).value
591     = "伝熱面積 [m2]"
592 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +6)).value
593     = "価格 [億円]"
594 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +7)).value
595     = "総コスト [億円/year]"
596 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +8)).value
597     = "総交換熱量 [MJ/h]"
598 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +10)).value
599     = "温度差 1"
600 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart, column_writestart +11)).value
601     = "温度差 2"
602
603 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart+1, column_writestart +7)).value
604     = totalcost/7.
605 wb.sheets[writesheet].range((row_writestart+1, column_writestart +8)).value
606     = totalheat
607
608 for i in range (len(sorted_datalist_heatexchanger)):
609     wb.sheets[writesheet].range((row_writestart +i+1, column_writestart +0)).
610         .value = i+1
611     wb.sheets[writesheet].range((row_writestart +i+1, column_writestart +1)).
612         .value = sorted_datalist_heatexchanger[i].streamname_give
613     wb.sheets[writesheet].range((row_writestart +i+1, column_writestart +2)).
614         .value = sorted_datalist_heatexchanger[i].streamname_receive

```

```

615     wb.sheets[writesheet].range((row_writestart +i+1 ,column_writestart +3 ))
616         .value = sorted_datalist_heatexchanger[i].LogMeantemperature
617     wb.sheets[writesheet].range((row_writestart +i+1 ,column_writestart +4 ))
618         .value = sorted_datalist_heatexchanger[i].exchangeheat
619     wb.sheets[writesheet].range((row_writestart +i+1 ,column_writestart +5 ))
620         .value = sorted_datalist_heatexchanger[i].area
621     wb.sheets[writesheet].range((row_writestart +i+1 ,column_writestart +6 ))
622         .value = sorted_datalist_heatexchanger[i].cost
623
624     wb.sheets[writesheet].range((row_writestart +i+1 ,column_writestart+10 ))
625         .value = sorted_datalist_heatexchanger[i].deltatemperature_high
626     wb.sheets[writesheet].range((row_writestart +i+1 ,column_writestart +11 ))
627         .value = sorted_datalist_heatexchanger[i].deltatemperature_low
628 next
629
630
631 #=====
632 # #グラントコンボジットカーブのデータ出力
633
634 rcParams['font.family'] = 'sans-serif'
635 rcParams['font.sans-serif'] = ['Hiragino Maru Gothic Pro', 'Yu Gothic', \
636                               'Meirio', 'Takao', 'IPAexGothic', 'IPAPGothic', \
637                               'VL PGothic', 'Noto Sans CJK JP']
638 rcParams['font.size'] = 22
639
640 # fig1=plt.figure()
641 # ax1 = fig1.add_subplot()
642 # ax1.plot(heatbalance_sum_GCC, \
643           ascendingtemperature_GCC,label="グラントコンボジットカーブ")
644 # # plt.xlim(0,40)
645 # # plt.ylim(0,250)
646 # # ax1.set_xlabel(xlabel="熱量 [MJ/h]")
647 # # ax1.set_ylabel(ylabel="温度 [°C]")
648 # plt.gca().xaxis.set_tick_params(which='both',direction='in', \
649                                   bottom=True ,top=True ,left=True ,right=True)
650 # plt.gca().yaxis.set_tick_params(which='both',direction='in', \
651                                   bottom=True ,top=True ,left=True ,right=True)
652 # # plt.rcParams["legend.fancybox"] = False # 丸角
653 # # plt.rcParams["legend.framealpha"] = 1 # 透明度の指定, 0で塗りつぶしなし
654 # # plt.rcParams["legend.edgecolor"] = 'black' # edgeの色を変更
655 # # plt.legend()
656 # plt.show()
657
658
659
660 # print("Draw GCC diagram Complete")
661
662 #TQ 線図出力

```

```

663 fig2 = plt.figure()
664 ax_give = fig2.add_subplot()
665 ax_receive = fig2.add_subplot()
666 heatsum_give = list(heatsum_give)
667 heatsum_receive = list(heatsum_receive)
668 ascendingtemperature_TQ = list(ascendingtemperature_TQ)
669
670 ax_give.plot(heatsum_give, ascendingtemperature_TQ ,color ="r")
671 ax_receive.plot(heatsum_receive, ascendingtemperature_TQ ,color ="b")
672 plt.xlim(0,heatsum_receive[-1])
673 plt.ylim(-10,ascendingtemperature_TQ[-1]+10)
674 # ax_give.set_xlabel(xlabel="熱量 [MJ/h]")
675 # ax_give.set_ylabel(ylabel="温度 [°C]")
676 plt.gca().xaxis.set_tick_params(which='both',direction='in',bottom=True ,\
677     top=True ,left=True ,right=True)
678 plt.gca().yaxis.set_tick_params(which='both',direction='in',bottom=True ,\
679     top=True ,left=True ,right=True)
680 # plt.rcParams["legend.fancybox"] = False # 丸角
681 # plt.rcParams["legend.framealpha"] = 1 # 透明度の指定, 0で塗りつぶしなし
682 # plt.rcParams["legend.edgecolor"] = 'black' # edgeの色を変更
683 # plt.legend()
684 plt.tick_params(axis = 'x', colors = 'k')
685 plt.tick_params(axis = 'y', colors = 'k')
686 plt.show()

```

---

## B.2 VBA

---

### ソースコード B.4 変数宣言

---

```

1 Option Explicit
2
3 Public Const TolMolarMass = 92.141 'トルエンモル質量 [kg/kmol]
4 Public Const BzAMolarMass = 122.124 '安息香酸モル質量 [kg/kmol]
5 Public Const WaterMolarMass = 18.015 '水モル質量 [kg/kmol]
6
7 Public Const OxygenFraction = 0.2
8 Public Const NitrogenFraction = 0.8
9
10 Public hycase As Object
11
12 Public AdditionalAirHYSYS As ProcessStream
13 Public AdopterHYSYS As ProcessStream
14 Public BoilerBottomOutHYSYS As ProcessStream
15 Public BoilerTopOutHYSYS As ProcessStream
16 Public CrystallizationInHYSYS As ProcessStream
17 Public CrystallizedRecycleHYSYS As ProcessStream
18 Public DecanterOutHYSYS As ProcessStream
19 Public DistillationInHYSYS As ProcessStream

```

```

20 Public DistillationLiqOutHYSYS As ProcessStream
21 Public DistillationVapOutHYSYS As ProcessStream
22 Public DistVapOutXHYSYS As ProcessStream
23 Public ExternalOutHYSYS As ProcessStream
24 Public ExtractedBzAHYSYS As ProcessStream
25 Public ExtractedOthersHYSYS As ProcessStream
26 Public ExtractedWaterHYSYS As ProcessStream
27 Public FeedHYSYS As ProcessStream
28 Public MixerInHYSYS As ProcessStream
29 Public PostDistillationVapOutHYSYS As ProcessStream
30 Public PostDistVapOutXHYSYS As ProcessStream
31 Public PostReactorOutHYSYS As ProcessStream
32 Public PreAdopterHYSYS As ProcessStream
33 Public PreCrystallizedRecycleHYSYS As ProcessStream
34 Public PreReactorInHYSYS As ProcessStream
35 Public ProductHYSYS As ProcessStream
36 Public PumpInHYSYS As ProcessStream
37 Public ReactorInHYSYS As ProcessStream
38 Public ReactorOutHYSYS As ProcessStream
39 Public ValveOutHYSYS As ProcessStream
40
41 Public PreReactorInHeaterHYSYS As ProcessStream
42 Public ReactorOutPumpHYSYS As ProcessStream
43 Public CondenserHYSYS As ProcessStream
44 Public ReboilerHYSYS As ProcessStream
45 Public ExternalOutCoolerHYSYS As ProcessStream
46 Public PreCrystallizedRecycleHeaterHYSYS As ProcessStream
47 Public ValveOutCoolerHYSYS As ProcessStream
48 Public PowerOfPumpHYSYS As ProcessStream
49 Public DistVapOutCoolerHYSYS As ProcessStream
50 Public DistVapOutExpandHYSYS As ProcessStream

```

---

#### ソースコード B.5 HYSYS と python を繋ぐコード

---

```

1 Option Explicit
2
3 Sub main()
4
5 Dim topRow As Integer
6 topRow = 18
7
8 Dim resultSheet As Worksheet
9 Set resultSheet = ThisWorkbook.Sheets(1)
10
11 With resultSheet
12     .Cells(10, 4) = ""
13     .Cells(11, 4) = ""
14     .Range(.Cells(18, 4), .Cells(48, 12)) = ""
15     .Range(.Cells(18, 11), .Cells(50, 12)) = 0

```



```

16 End With
17
18
19 Dim i As Integer
20 Dim j As Integer
21 Dim m As Integer
22 Dim n As Integer
23 Dim h As Integer
24 Dim p As Integer
25 Dim q As Integer
26
27 Dim flowRange As Variant 'excel シートから array への adopter
28 Dim reactorErr As Double '反応器収束用誤差
29 Dim reactorEps As Double '反応器収束用
30 Dim crystallizerErr As Double '晶析器収束用誤差
31 Dim crystallizerEps As Double '晶析器収束用
32
33 reactorErr = 1
34 crystallizerErr = 1
35 reactorEps = 0.001
36 crystallizerEps = 0.001
37
38 '-----
39 Dim k As Variant '[h-1] 反応速度定数
40 Dim reactorPres As Double '[bar] 反応器圧力
41 Dim reactorVol As Double '[m3] 反応器体積
42 Dim reactorTemp As Double '[°C] 反応器温度
43 Dim F0 As Double '[kmol/h] feed トルエン流量
44 Dim extractorTemp As Double '[°C] 抽出温度
45 Dim crystallizerVolume As Double '[°C] 晶析器体積
46 Dim crystallizerTemp As Double '[°C] 晶析器温度
47
48 With resultSheet
49     reactorPres = .Cells(3, 4)
50     reactorVol = .Cells(4, 4)
51     reactorTemp = .Cells(5, 4) + 273.15
52     F0 = .Cells(6, 4)
53     extractorTemp = 40
54     crystallizerVolume = .Cells(8, 4)
55     crystallizerTemp = .Cells(9, 4)
56 End With
57 Call Utils.solve_k(reactorTemp, k)
58 '-----
59
60 '-----
61 Set hycase = GetObject(ThisWorkbook.Path & "¥main.hsc")
62
63 With hycase.Flowsheet.MaterialStreams

```

```

64 Set AdditionalAirHYSYS = .Item("AdditionalAir")
65 Set AdopterHYSYS = .Item("Adopter")
66 Set BoilerBottomOutHYSYS = .Item("BoilerBottomOut")
67 Set BoilerTopOutHYSYS = .Item("BoilerTopOut")
68 Set CrystallizationInHYSYS = .Item("CrystallizationIn")
69 Set CrystallizedRecycleHYSYS = .Item("CrystallizedRecycle")
70 Set DecanterOutHYSYS = .Item("DecanterOut")
71 Set DistillationInHYSYS = .Item("DistillationIn")
72 Set DistillationLiqOutHYSYS = .Item("DistillationLiqOut")
73 Set DistillationVapOutHYSYS = .Item("DistillationVapOut")
74 Set DistVapOutXHYSYS = .Item("DistVapOutX")
75 Set ExternalOutHYSYS = .Item("ExternalOut")
76 Set ExtractedBzAHYSYS = .Item("ExtractedBzA")
77 Set ExtractedOthersHYSYS = .Item("ExtractedOthers")
78 Set ExtractedWaterHYSYS = .Item("ExtractedWater")
79 Set FeedHYSYS = .Item("Feed")
80 Set MixerInHYSYS = .Item("MixerIn")
81 Set PostDistillationVapOutHYSYS = .Item("PostDistillationVapOut")
82 Set PostDistVapOutXHYSYS = .Item("PostDistVapOutX")
83 Set PostReactorOutHYSYS = .Item("PostReactorOut")
84 Set PreAdopterHYSYS = .Item("PreAdopter")
85 Set PreCrystallizedRecycleHYSYS = .Item("PreCrystallizedRecycle")
86 Set PreReactorInHYSYS = .Item("PreReactorIn")
87 Set ProductHYSYS = .Item("Product")
88 Set PumpInHYSYS = .Item("PumpIn")
89 Set ReactorInHYSYS = .Item("ReactorIn")
90 Set ReactorOutHYSYS = .Item("ReactorOut")
91 Set ValveOutHYSYS = .Item("ValveOut")
92 End With
93
94 With hycase.Flowsheet.EnergyStreams
95 Set PreReactorInHeaterHYSYS = .Item("PreReactorInHeater")
96 Set ReactorOutPumpHYSYS = .Item("ReactorOutPump")
97 Set CondenserHYSYS = .Item("Condenser")
98 Set ReboilerHYSYS = .Item("Reboiler")
99 Set ExternalOutCoolerHYSYS = .Item("ExternalOutCooler")
100 Set PreCrystallizedRecycleHeaterHYSYS = _
101     .Item("PreCrystallizedRecycleHeater")
102 Set ValveOutCoolerHYSYS = .Item("ValveOutCooler")
103 Set PowerOfPumpHYSYS = .Item("PowerOfPump")
104 Set DistVapOutCoolerHYSYS = .Item("DistVapOutCooler")
105 Set DistVapOutExpandHYSYS = .Item("DistVapOutExpand")
106 End With
107
108 Dim DistillationHYSYS As ColumnOp
109
110 Dim ToReb As ProcessStream
111 Dim BoilUp As ProcessStream

```

```

112 Dim ToCond As ProcessStream
113 Dim Reflux As ProcessStream
114
115 Set DistillationHYSYS = hycase.Flowsheet.Operations.Item("T-100")
116 With DistillationHYSYS.ColumnFlowsheet.MaterialStreams
117     Set ToReb = .Item("To Reboiler")
118     Set BoilUp = .Item("Boilup")
119     Set ToCond = .Item("To Condenser")
120     Set Reflux = .Item("Reflux")
121 End With
122 '-----
123
124 '-----
125 With resultSheet
126     AdditionalAirHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 0, 1), "bar"
127     AdopterHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 1, 1), "bar"
128     CrystallizedRecycleHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 5, 1), "bar"
129     DecanterOutHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 6, 1), "bar"
130     DistillationInHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 7, 1), "bar"
131     DistVapOutXHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 10, 1), "bar"
132     ExternalOutHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 11, 1), "bar"
133     ExtractedBzAHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 12, 1), "bar"
134     ExtractedOthersHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 13, 1), "bar"
135     ExtractedWaterHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 14, 1), "bar"
136     FeedHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 15, 1), "bar"
137     PostDistillationVapOutHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 17, 1), "bar"
138     PostDistVapOutXHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 18, 1), "bar"
139     PostReactorOutHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 19, 1), "bar"
140     PreAdopterHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 20, 1), "bar"
141     PreCrystallizedRecycleHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 21, 1), "bar"
142     PreReactorInHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 22, 1), "bar"
143     ProductHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 23, 1), "bar"
144     ReactorInHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 25, 1), "bar"
145     ReactorOutHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 26, 1), "bar"
146     ValveOutHYSYS.Pressure.SetValue .Cells(topRow + 27, 1), "bar"
147
148
149     AdditionalAirHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 0, 2), "C"
150     AdopterHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 1, 2), "C"
151     CrystallizedRecycleHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 5, 2), "C"
152     DecanterOutHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 6, 2), "C"
153     ExternalOutHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 11, 2), "C"
154     ExtractedBzAHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 12, 2), "C"
155     ExtractedOthersHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 13, 2), "C"
156     ExtractedWaterHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 14, 2), "C"
157     FeedHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 15, 2), "C"
158     PreAdopterHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 20, 2), "C"
159     PreCrystallizedRecycleHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 21, 2), "C"

```

```

160     ProductHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 23, 2), "C"
161     ReactorInHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 25, 2), "C"
162     ReactorOutHYSYS.Temperature.SetValue .Cells(topRow + 26, 2), "C"
163 End With
164 '-----
165
166 '-----
167 Dim feedMolarFlow As Double 'feed モル流量 [kmol/h]
168 Dim feedVolumeFlow As Double 'feed 体積流量 [m3/h]
169 Dim feedComponentMolarFlow As Variant 'feed 成分別モル流量 [kmol/h]
170 Dim feedComponentVolumeFlow As Variant 'feed 成分別体積流量 [m3/h]
171 Dim feedComponentMolarFractin As Variant 'feed モル分率 [-]
172
173 Dim reactorInMolarFlow As Double 'CSTR 入口モル流量 [kmol/h]
174 Dim reactorInVolumeFlow As Double 'CSTR 入口体積流量 [m3/h]
175 Dim reactorInComponentMolarFlow As Variant 'CSTR 入口成分別モル流量 [kmol/h]
176 Dim reactorInComponentVolumeFlow As Variant 'CSTR 入口成分別体積流量 [m3/h]
177 Dim reactorInComponentMolarFraction As Variant 'CSTR 入口モル分率 [-]
178
179 Dim reactorOutMolarFlow As Double 'CSTR 出口モル流量 [kmol/h]
180 Dim reactorOutVolumeFlow As Double 'CSTR 出口体積流量 [m3/h]
181 Dim reactorOutComponentMolarFlow As Variant 'CSTR 出口成分別モル流量 [kmol/h]
182 Dim reactorOutComponentVolumeFlow As Variant 'CSTR 出口成分別体積流量 [m3/h]
183 Dim reactorOutComponentMolarFraction As Variant 'CSTR 出口モル分率 [-]
184
185 Dim decanterOutComponentMolarFlow As Variant 'デカンタ気体出口成分別モル流量 [kmol/h]
186
187 Dim boilerInComponentMolarFlow As Variant 'ボイラー入口成分別モル流量 [kmol/h]
188 Dim distillationLiqOutComponentMolarFlow As Variant
189         '蒸留塔缶出液成分別モル流量 [kmol/h]
190
191 Dim extractedWaterMolarFlow As Double '抽出器出口水モル流量
192 Dim extractedWaterComponentMolarFlow As Variant '抽出器出口水成分別モル流量
193
194 Dim extractedBzAMolarFlow As Double '抽出器出口安息香酸モル流量
195 Dim extractedBzAComponentMolarFlow As Variant '抽出器出口安息香酸成分別モル流量
196
197 Dim extractedOthersMolarFlow As Double '抽出器出口不純物モル流量
198 Dim extractedOthersComponentMolarFlow As Variant '抽出器出口不純物成分別モル流量
199
200 Dim adopterComponentMolarFlow As Variant 'リサイクル計算用蒸留塔缶出液流量 [kmol/h]
201
202 Dim ToCrystallizationMolarFlow As Double '晶析器入口モル流量 [kmol/h]
203 Dim ToCrystallizationVolumeFlow As Double '晶析器入口体積流量 [m3/h]
204 Dim ToCrystallizationBzAMolarFraction As Double '晶析器入口安息香酸モル分率 [-]
205 Dim ToCrystallizationBzAMolarFlow As Double '晶析器入口安息香酸モル流量 [kmol/h]
206 Dim ToCrystallizationWaterMolarFlow As Double '晶析器入口水モル流量 [kmol/h]
207

```

```

208 Dim BzAConcentration As Double '晶析器入口安息香酸濃度 [kg/m3]
209 Dim CrystallizedBzA As Double '晶析した安息香酸モル流量 [kmole/h]
210 Dim products As Variant '晶析した安息香酸
211 Dim restOfProducts As Variant '晶析しなかった残り
212 Dim RestOfBzA As Double '晶析しなかった安息香酸
213 Dim RestOfWater As Double '晶析器から流出する水
214
215 Dim necessaryOxygen As Double 'トルエン完全燃焼に必要な酸素 [kmol/h]
216 Dim lackingOxygen As Double '不足している酸素 [kmol/h]
217 Dim additionalOxygen As Double '追加する酸素 [kmol/h]
218 Dim additionalNitrogen As Double '追加する窒素 [kmol/h]
219 Dim additionalAir As Variant '追加する空気 [kmol/h]
220 Dim isAirNeed As Boolean 'whether additional air is needed
221 isAirNeed = False
222
223 Dim distillationVapOutTmp As Double '蒸留塔留出液の温度
224 Dim distillationVapOutComponentMolarFlow As Variant
225 '蒸留塔留出液の成分別モル流量 [kmol/h]
226 '-----
227
228 '-----
229 feedComponentMolarFlow = Array(F0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
230 feedComponentVolumeFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
231 feedComponentMolarFractin = Array(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
232
233 reactorInComponentMolarFlow = Array(F0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
234 reactorInComponentVolumeFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
235 reactorInComponentMolarFraction = Array(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
236 Call Utils.solveComponentVolumeFlow(reactorInComponentMolarFlow, _
237     reactorInComponentVolumeFlow)
238 reactorInMolarFlow = Utils.sumOfFlow(reactorInComponentMolarFlow)
239 reactorInVolumeFlow = Utils.sumOfFlow(reactorInComponentVolumeFlow)
240
241 reactorOutComponentMolarFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
242 reactorOutComponentVolumeFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
243 reactorOutComponentMolarFraction = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
244
245
246 boilerInComponentMolarFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
247 decanterOutComponentMolarFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
248
249 distillationLiqOutComponentMolarFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
250
251 extractedBzAComponentMolarFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
252 extractedOthersComponentMolarFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
253 extractedWaterComponentMolarFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
254
255 adopterComponentMolarFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)

```

```

256
257 distillationVapOutComponentMolarFlow = Array(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)
258 '-----
259
260
261 '-----
262 FeedHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues feedComponentMolarFlow, "kgmole/h"
263 i = 0
264 Do While (reactorErr > reactorEps And i < 600)
265     With resultSheet
266         .Range(.Cells(topRow + 25, 4), .Cells(topRow + 25, 12)) = _
267             reactorInComponentMolarFlow
268         .Cells(topRow + 25, 14) = reactorInVolumeFlow
269         ' 単通反応率
270         .Cells(12, 4) = (reactorInComponentMolarFlow(0) - _
271             reactorOutComponentMolarFlow(0)) / _
272             reactorInComponentMolarFlow(0)
273     End With
274
275     Call RunPython("import analyzer_nowrite; analyzer_nowrite.main()")
276
277     ' 反応器出口のモル流量をシートから取得する.
278     resultSheet.Cells(topRow + 26, 9) = 0
279     resultSheet.Cells(topRow + 26, 10) = 0
280     flowRange = resultSheet.Range(resultSheet.Cells(topRow + 26, 4), _
281         resultSheet.Cells(topRow + 26, 12))
282     For j = 1 To 9
283         reactorOutComponentMolarFlow(j - 1) = flowRange(1, j)
284     Next j
285     reactorOutComponentMolarFlow(5) = 0
286     reactorOutComponentMolarFlow(6) = 0
287
288     ' デカンタから蒸発するモル流量をシートから取得する.
289     flowRange = resultSheet.Range(resultSheet.Cells(topRow + 31, 4), _
290         resultSheet.Cells(topRow + 31, 12))
291     For j = 1 To 9
292         decanterOutComponentMolarFlow(j - 1) = flowRange(1, j)
293     Next j
294
295     ' HYSYS に反応器出口とデカンタ出口のモル流量を渡す.
296     ReactorOutHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
297         reactorOutComponentMolarFlow, "kgmole/h"
298     DecanterOutHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
299         decanterOutComponentMolarFlow, "kgmole/h"
300
301     ' 蒸留塔留出液のつじつま合わせ.
302     distillationVapOutTmp = PostDistillationVapOutHYSYS. _
303         Temperature.GetValue("C")

```

```

304 distillationVapOutComponentMolarFlow = PostDistillationVapOutHYSYS. _
305     ComponentMolarFlow.GetValues("kgmole/h")
306 distillationVapOutComponentMolarFlow(5) = 0
307 distillationVapOutComponentMolarFlow(6) = 0
308
309 DistVapOutXHYSYS.Temperature.SetValue distillationVapOutTmp, "C"
310 DistVapOutXHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
311     distillationVapOutComponentMolarFlow, "kgmole/h"
312
313
314 ' 蒸留塔缶出液のモル流量をHYSYS から取得し、疑似抽出を行う。
315 distillationLiqOutComponentMolarFlow = DistillationLiqOutHYSYS. _
316     ComponentMolarFlow.GetValues("kgmole/h")
317
318 Call pseudo_extractor.main(distillationLiqOutComponentMolarFlow, _
319     extractedBzAComponentMolarFlow, _
320     extractedOthersComponentMolarFlow, _
321     extractedWaterComponentMolarFlow, _
322     extractorTemp)
323
324 ExtractedBzAHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
325     extractedBzAComponentMolarFlow, "kgmole/h"
326 ExtractedOthersHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
327     extractedOthersComponentMolarFlow, "kgmole/h"
328 ExtractedWaterHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
329     extractedWaterComponentMolarFlow, "kgmole/h"
330
331 ' 疑似抽出の結果を晶析器に渡す。
332 ToCrystallizationBzAMolarFlow = extractedBzAComponentMolarFlow(3)
333 ToCrystallizationWaterMolarFlow = extractedWaterComponentMolarFlow(4)
334 ToCrystallizationVolumeFlow = CrystallizationInHYSYS. _
335     StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
336
337 BzAConcentration = (ToCrystallizationBzAMolarFlow * BzAMolarMass) / _
338     (ToCrystallizationWaterMolarFlow * WaterMolarMass)
339
340 CrystallizedBzA = crystallization.MSMPR(crystallizerTemp, _
341     BzAConcentration, _
342     ToCrystallizationVolumeFlow, _
343     crystallizerVolume, _
344     ToCrystallizationBzAMolarFlow)
345
346 RestOfBzA = ToCrystallizationBzAMolarFlow - CrystallizedBzA
347 RestOfWater = ToCrystallizationWaterMolarFlow
348 products = Array(0, 0, 0, CrystallizedBzA, 0, 0, 0, 0, 0)
349 restOfProducts = Array(0, 0, 0, RestOfBzA, RestOfWater, 0, 0, 0, 0)
350 ProductHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues products, "kgmole/h"
351 PreCrystallizedRecycleHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _

```

```

352         restOfProducts, "kgmole/h"
353
354     ' 収束判定を行う.
355     reactorErr = Abs((distillationLiqOutComponentMolarFlow(3) + _
356                     decanterOutComponentMolarFlow(0) - F0)) / F0
357
358     reactorInComponentMolarFlow = ReactorInHYSYS. _
359         ComponentMolarFlow.GetValues("kgmole/h")
360     reactorInVolumeFlow = ReactorInHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
361
362
363     i = i + 1
364 Loop
365
366 '-----反応器収束後, シートに計算結果を書き込むバージョンのpythonを実行する. -----
367 Call RunPython("import analyzer_final; analyzer_final.main()")
368 resultSheet.Cells(topRow + 26, 9) = 0
369 resultSheet.Cells(topRow + 26, 10) = 0
370 flowRange = resultSheet.Range(resultSheet.Cells(topRow + 26, 4), _
371                             resultSheet.Cells(topRow + 26, 12))
372 For j = 1 To 9
373     reactorOutComponentMolarFlow(j - 1) = flowRange(1, j)
374 Next j
375 flowRange = resultSheet.Range(resultSheet.Cells(topRow + 31, 4), _
376                             resultSheet.Cells(topRow + 31, 12))
377 For j = 1 To 9
378     decanterOutComponentMolarFlow(j - 1) = flowRange(1, j)
379 Next j
380 reactorOutComponentMolarFlow(8) = 0
381 ReactorOutHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
382     reactorOutComponentMolarFlow, "kgmole/h"
383 DecanterOutHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
384     decanterOutComponentMolarFlow, "kgmole/h"
385
386 distillationLiqOutComponentMolarFlow = _
387     DistillationLiqOutHYSYS.ComponentMolarFlow.GetValues("kgmole/h")
388
389 Call pseudo_extractor.main(distillationLiqOutComponentMolarFlow, _
390                             extractedBzAComponentMolarFlow, _
391                             extractedOthersComponentMolarFlow, _
392                             extractedWaterComponentMolarFlow, _
393                             extractorTemp)
394
395 ExtractedWaterHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
396     extractedWaterComponentMolarFlow, "kgmole/h"
397 ExtractedBzAHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
398     extractedBzAComponentMolarFlow, "kgmole/h"
399 ExtractedOthersHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _

```



```

400         extractedOthersComponentMolarFlow, "kgmole/h"
401
402 ToCrystallizationBzAMolarFlow = extractedBzAComponentMolarFlow(3)
403 ToCrystallizationWaterMolarFlow = extractedWaterComponentMolarFlow(4)
404 ToCrystallizationVolumeFlow = CrystallizationInHYSYS. _
405         StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
406
407 BzAConcentration = (ToCrystallizationBzAMolarFlow * BzAMolarMass) / _
408         (ToCrystallizationWaterMolarFlow * WaterMolarMass)
409
410 CrystallizedBzA = crystallization.MSMPR(crystallizerTemp, _
411         BzAConcentration, _
412         ToCrystallizationVolumeFlow, _
413         crystallizerVolume, _
414         ToCrystallizationBzAMolarFlow)
415
416 RestOfBzA = ToCrystallizationBzAMolarFlow - CrystallizedBzA
417 RestOfWater = ToCrystallizationWaterMolarFlow
418 products = Array(0, 0, 0, CrystallizedBzA, 0, 0, 0, 0, 0)
419 restOfProducts = Array(0, 0, 0, RestOfBzA, RestOfWater, 0, 0, 0, 0)
420 ProductHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues products, "kgmole/h"
421 PreCrystallizedRecycleHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
422         restOfProducts, "kgmole/h"
423
424 '-----
425
426
427
428 '-----抽出器の収束計算を行う-----
429 ' 蒸留塔出口のモル流量は操作できないので、晶析のリサイクルを行うために、
430 ' Adopter を設置し、そこにて流量を操作する。
431 ' まず, preAdopter の成分別モル流量を設定する。
432 AdopterHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
433         PreAdopterHYSYS.ComponentMolarFlow.GetValues("kgmole/h"), "kgmole/h"
434
435 i = 0
436 Do While (crystallizerErr > crystallizerEps And i < 100)
437     adopterComponentMolarFlow = AdopterHYSYS. _
438         ComponentMolarFlow.GetValues("kgmole/h")
439
440     Call pseudo_extractor.main(adopterComponentMolarFlow, _
441         extractedBzAComponentMolarFlow, _
442         extractedOthersComponentMolarFlow, _
443         extractedWaterComponentMolarFlow, _
444         extractorTemp)
445
446     ExtractedWaterHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
447         extractedWaterComponentMolarFlow, "kgmole/h"

```

```

448 ExtractedBzAHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
449     extractedBzAComponentMolarFlow, "kgmole/h"
450 ExtractedOthersHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
451     extractedOthersComponentMolarFlow, "kgmole/h"
452
453 ToCrystallizationBzAMolarFlow = extractedBzAComponentMolarFlow(3)
454 ToCrystallizationWaterMolarFlow = extractedWaterComponentMolarFlow(4)
455 ToCrystallizationVolumeFlow = CrystallizationInHYSYS. _
456     StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
457
458 BzAConcentration = (ToCrystallizationBzAMolarFlow * BzAMolarMass) / _
459     (ToCrystallizationWaterMolarFlow * WaterMolarMass)
460
461 CrystallizedBzA = crystallization.MSMPR(crystallizerTemp, _
462     BzAConcentration, _
463     ToCrystallizationVolumeFlow, _
464     crystallizerVolume, _
465     ToCrystallizationBzAMolarFlow)
466
467 RestOfBzA = ToCrystallizationBzAMolarFlow - CrystallizedBzA
468 RestOfWater = ToCrystallizationWaterMolarFlow
469 products = Array(0, 0, 0, CrystallizedBzA, 0, 0, 0, 0, 0)
470 restOfProducts = Array(0, 0, 0, RestOfBzA, RestOfWater, 0, 0, 0, 0)
471 ProductHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues products, "kgmole/h"
472 PreCrystallizedRecycleHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
473     restOfProducts, "kgmole/h"
474
475 adopterComponentMolarFlow(3) = distillationLiqOutComponentMolarFlow(3) + _
476     restOfProducts(3)
477 AdopterHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues _
478     adopterComponentMolarFlow, "kgmole/h"
479
480 crystallizerErr = Abs((distillationLiqOutComponentMolarFlow(3) + _
481     restOfProducts(3)) - (products(3) + restOfProducts(3)))
482 i = i + 1
483 Loop
484 '-----
485
486 '-----
487 decanterOutComponentMolarFlow = _
488     DecanterOutHYSYS.ComponentMolarFlow.GetValues("kgmole/h")
489
490 ' 量論関係から、トルエンを全量燃焼させるのに必要な酸素量を求める。
491 ' Tol + 9 O2 -> 4 H2O + 7 CO2
492 necessaryOxygen = decanterOutComponentMolarFlow(0) * 9
493 lackingOxygen = necessaryOxygen - decanterOutComponentMolarFlow(6)
494 additionalOxygen = lackingOxygen
495 additionalNitrogen = lackingOxygen * (NitrogenFraction / OxygenFraction)

```

```

496
497
498 If (additionalOxygen < 0) Then
499     additionalOxygen = 0
500     additionalNytrgen = 0
501     isAirNeed = True
502 End If
503
504 additionalAir = Array(0, 0, 0, 0, 0, additionalNytrgen, additionalOxygen, 0, 0)
505 AdditionalAirHYSYS.ComponentMolarFlow.SetValues additionalAir, "kgmole/h"
506 '-----
507
508 '-----
509 With resultSheet
510     For i = 0 To 8
511         .Cells(topRow + 0, i + 4) = _
512             AdditionalAirHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
513         .Cells(topRow + 1, i + 4) = _
514             AdopterHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
515         .Cells(topRow + 2, i + 4) = _
516             BoilerBottomOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
517         .Cells(topRow + 3, i + 4) = _
518             BoilerTopOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
519         .Cells(topRow + 4, i + 4) = _
520             CrystallizationInHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
521         .Cells(topRow + 5, i + 4) = _
522             CrystallizedRecycleHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
523         .Cells(topRow + 6, i + 4) = _
524             DecanterOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
525         .Cells(topRow + 7, i + 4) = _
526             DistillationInHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
527         .Cells(topRow + 8, i + 4) = _
528             DistillationLiqOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
529         .Cells(topRow + 9, i + 4) = _
530             DistillationVapOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
531         .Cells(topRow + 10, i + 4) = _
532             DistVapOutXHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
533         .Cells(topRow + 11, i + 4) = _
534             ExternalOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
535         .Cells(topRow + 12, i + 4) = _
536             ExtractedBzAHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
537         .Cells(topRow + 13, i + 4) = _
538             ExtractedOthersHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
539         .Cells(topRow + 14, i + 4) = _
540             ExtractedWaterHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
541         .Cells(topRow + 15, i + 4) = _
542             FeedHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
543         .Cells(topRow + 16, i + 4) = _

```

```

544         MixerInHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
545     .Cells(topRow + 17, i + 4) = _
546         PostDistillationVapOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
547     .Cells(topRow + 18, i + 4) = _
548         PostDistVapOutXHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
549     .Cells(topRow + 19, i + 4) = _
550         PostReactorOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
551     .Cells(topRow + 20, i + 4) = _
552         PreAdopterHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
553     .Cells(topRow + 21, i + 4) = _
554         PreCrystallizedRecycleHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
555     .Cells(topRow + 22, i + 4) = _
556         PreReactorInHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
557     .Cells(topRow + 23, i + 4) = _
558         ProductHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
559     .Cells(topRow + 24, i + 4) = _
560         PumpInHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
561     .Cells(topRow + 25, i + 4) = _
562         ReactorInHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
563     .Cells(topRow + 26, i + 4) = _
564         ReactorOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
565     .Cells(topRow + 27, i + 4) = _
566         ValveOutHYSYS.ComponentMolarFlow(i) * 3600
567     Next
568
569     .Cells(topRow + 0, 13) = _
570         AdditionalAirHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
571     .Cells(topRow + 1, 13) = _
572         AdopterHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
573     .Cells(topRow + 2, 13) = _
574         BoilerBottomOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
575     .Cells(topRow + 3, 13) = _
576         BoilerTopOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
577     .Cells(topRow + 4, 13) = _
578         CrystallizationInHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
579     .Cells(topRow + 5, 13) = _
580         CrystallizedRecycleHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
581     .Cells(topRow + 6, 13) = _
582         DecanterOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
583     .Cells(topRow + 7, 13) = _
584         DistillationInHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
585     .Cells(topRow + 8, 13) = _
586         DistillationLiqOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
587     .Cells(topRow + 9, 13) = _
588         DistillationVapOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
589     .Cells(topRow + 10, 13) = _
590         DistVapOutXHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
591     .Cells(topRow + 11, 13) = _

```

```

592     ExternalOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
593 .Cells(topRow + 12, 13) = _
594     ExtractedBzAHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
595 .Cells(topRow + 13, 13) = _
596     ExtractedOthersHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
597 .Cells(topRow + 14, 13) = _
598     ExtractedWaterHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
599 .Cells(topRow + 15, 13) = _
600     FeedHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
601 .Cells(topRow + 16, 13) = _
602     MixerInHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
603 .Cells(topRow + 17, 13) = _
604     PostDistillationVapOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
605 .Cells(topRow + 18, 13) = _
606     PostDistVapOutXHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
607 .Cells(topRow + 19, 13) = _
608     PostReactorOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
609 .Cells(topRow + 20, 13) = _
610     PreAdopterHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
611 .Cells(topRow + 21, 13) = _
612     PreCrystallizedRecycleHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
613 .Cells(topRow + 22, 13) = _
614     PreReactorInHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
615 .Cells(topRow + 23, 13) = _
616     ProductHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
617 .Cells(topRow + 24, 13) = _
618     PumpInHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
619 .Cells(topRow + 25, 13) = _
620     ReactorInHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
621 .Cells(topRow + 26, 13) = _
622     ReactorOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
623 .Cells(topRow + 27, 13) = _
624     ValveOutHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h")
625
626 .Cells(topRow + 0, 14) = _
627     AdditionalAirHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
628 .Cells(topRow + 1, 14) = _
629     AdopterHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
630 .Cells(topRow + 2, 14) = _
631     BoilerBottomOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
632 .Cells(topRow + 3, 14) = _
633     BoilerTopOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
634 .Cells(topRow + 4, 14) = _
635     CrystallizationInHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
636 .Cells(topRow + 5, 14) = _
637     CrystallizedRecycleHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
638 .Cells(topRow + 6, 14) = _
639     DecanterOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")

```

```

640 .Cells(topRow + 7, 14) = _
641     DistillationInHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
642 .Cells(topRow + 8, 14) = _
643     DistillationLiqOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
644 .Cells(topRow + 9, 14) = _
645     DistillationVapOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
646 .Cells(topRow + 10, 14) = _
647     DistVapOutXHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
648 .Cells(topRow + 11, 14) = _
649     ExternalOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
650 .Cells(topRow + 12, 14) = _
651     ExtractedBzAHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
652 .Cells(topRow + 13, 14) = _
653     ExtractedOthersHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
654 .Cells(topRow + 14, 14) = _
655     ExtractedWaterHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
656 .Cells(topRow + 15, 14) = _
657     FeedHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
658 .Cells(topRow + 16, 14) = _
659     MixerInHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
660 .Cells(topRow + 17, 14) = _
661     PostDistillationVapOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
662 .Cells(topRow + 18, 14) = _
663     PostDistVapOutXHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
664 .Cells(topRow + 19, 14) = _
665     PostReactorOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
666 .Cells(topRow + 20, 14) = _
667     PreAdopterHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
668 .Cells(topRow + 21, 14) = _
669     PreCrystallizedRecycleHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
670 .Cells(topRow + 22, 14) = _
671     PreReactorInHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
672 .Cells(topRow + 23, 14) = _
673     ProductHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
674 .Cells(topRow + 24, 14) = _
675     PumpInHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
676 .Cells(topRow + 25, 14) = _
677     ReactorInHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
678 .Cells(topRow + 26, 14) = _
679     ReactorOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
680 .Cells(topRow + 27, 14) = _
681     ValveOutHYSYS.StdLiqVolFlow.GetValue("m3/h")
682
683 .Cells(topRow + 0, 15) = _
684     AdditionalAirHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
685 .Cells(topRow + 1, 15) = _
686     AdopterHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
687 .Cells(topRow + 2, 15) = _

```

```

688     BoilerBottomOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
689 .Cells(topRow + 3, 15) = _
690     BoilerTopOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
691 .Cells(topRow + 4, 15) = _
692     CrystallizationInHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
693 .Cells(topRow + 5, 15) = _
694     CrystallizedRecycleHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
695 .Cells(topRow + 6, 15) = _
696     DecanterOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
697 .Cells(topRow + 7, 15) = _
698     DistillationInHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
699 .Cells(topRow + 8, 15) = _
700     DistillationLiqOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
701 .Cells(topRow + 9, 15) = _
702     DistillationVapOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
703 .Cells(topRow + 10, 15) = _
704     DistVapOutXHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
705 .Cells(topRow + 11, 15) = _
706     ExternalOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
707 .Cells(topRow + 12, 15) = _
708     ExtractedBzAHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
709 .Cells(topRow + 13, 15) = _
710     ExtractedOthersHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
711 .Cells(topRow + 14, 15) = _
712     ExtractedWaterHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
713 .Cells(topRow + 15, 15) = _
714     FeedHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
715 .Cells(topRow + 16, 15) = _
716     MixerInHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
717 .Cells(topRow + 17, 15) = _
718     PostDistillationVapOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
719 .Cells(topRow + 18, 15) = _
720     PostDistVapOutXHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
721 .Cells(topRow + 19, 15) = _
722     PostReactorOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
723 .Cells(topRow + 20, 15) = _
724     PreAdopterHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
725 .Cells(topRow + 21, 15) = _
726     PreCrystallizedRecycleHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
727 .Cells(topRow + 22, 15) = _
728     PreReactorInHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
729 .Cells(topRow + 23, 15) = _
730     ProductHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
731 .Cells(topRow + 24, 15) = _
732     PumpInHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
733 .Cells(topRow + 25, 15) = _
734     ReactorInHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
735 .Cells(topRow + 26, 15) = _

```

```

736     ReactorOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
737 .Cells(topRow + 27, 15) = _
738     ValveOutHYSYS.HeatFlow.GetValue("GJ/h")
739
740
741 .Cells(10, 4) = reactorErr
742 .Cells(11, 4) = crystallizerErr
743
744
745 .Cells(topRow + 47, 6) = CondenserHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
746 .Cells(topRow + 47, 7) = ToCond.Temperature.GetValue("C")
747 .Cells(topRow + 47, 8) = Reflux.Temperature.GetValue("C")
748
749 .Cells(topRow + 48, 6) = _
750     DistVapOutExpandHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
751 .Cells(topRow + 48, 7) = _
752     DistillationVapOutHYSYS.Temperature.GetValue("C")
753 .Cells(topRow + 48, 8) = _
754     PostDistillationVapOutHYSYS.Temperature.GetValue("C")
755
756 .Cells(topRow + 49, 6) = PowerOfPumpHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
757 .Cells(topRow + 49, 7) = PumpInHYSYS.Temperature.GetValue("C")
758 .Cells(topRow + 49, 8) = PreReactorInHYSYS.Temperature.GetValue("C")
759
760 .Cells(topRow + 50, 6) = _
761     PreCrystallizedRecycleHeaterHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
762 .Cells(topRow + 50, 7) = _
763     PreCrystallizedRecycleHYSYS.Temperature.GetValue("C")
764 .Cells(topRow + 50, 8) = _
765     CrystallizedRecycleHYSYS.Temperature.GetValue("C")
766
767 .Cells(topRow + 51, 6) = PreReactorInHeaterHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
768 .Cells(topRow + 51, 7) = PreReactorInHYSYS.Temperature.GetValue("C")
769 .Cells(topRow + 51, 8) = ReactorInHYSYS.Temperature.GetValue("C")
770
771 .Cells(topRow + 52, 6) = ValveOutCoolerHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
772 .Cells(topRow + 52, 7) = DistillationLiqOutHYSYS.Temperature.GetValue("C")
773 .Cells(topRow + 52, 8) = ValveOutHYSYS.Temperature.GetValue("C")
774
775 ' .Cells(topRow + 53, 6) = ReactorOutCoolerHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
776 ' .Cells(topRow + 53, 7) = ReactorOutHYSYS.Temperature.GetValue("C")
777 ' .Cells(topRow + 53, 8) = DistillationInHYSYS.Temperature.GetValue("C")
778
779 .Cells(topRow + 54, 6) = ReboilerHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
780 .Cells(topRow + 54, 8) = BoilUp.Temperature.GetValue("C")
781 .Cells(topRow + 54, 7) = ToReb.Temperature.GetValue("C")
782
783 .Cells(topRow + 55, 6) = -((.Cells(topRow + 25, 15).Value + _

```



```

784         .Cells(topRow + 28, 15).Value + .Cells(topRow + 30, 15).Value) _
785         - (.Cells(topRow + 26).Value + .Cells(topRow + 29, 15).Value)) _
786         * 1000
787     .Cells(topRow + 55, 7) = reactorTemp - 273.15
788     .Cells(topRow + 55, 8) = reactorTemp - 273.15 + 0.1
789
790 ' .Cells(topRow + 60, 6) = ReactorOutPumpHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
791     .Cells(topRow + 60, 6) = 0
792     .Cells(topRow + 60, 7) = PostReactorOutHYSYS.Temperature.GetValue("C")
793     .Cells(topRow + 60, 8) = DistillationInHYSYS.Temperature.GetValue("C")
794
795     .Cells(topRow + 61, 6) = DistVapOutCoolerHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
796     .Cells(topRow + 61, 7) = DistVapOutXHYSYS.Temperature.GetValue("C")
797     .Cells(topRow + 61, 8) = PostDistVapOutXHYSYS.Temperature.GetValue("C")
798
799     .Cells(topRow + 70, 6) = ExternalOutCoolerHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
800
801 End With
802 '-----
803
804 '-----
805 Dim CrystallizationInEnthalpy As Double ' [MJ/h]
806 Dim ProductEnthalpy As Double ' [MJ/h]
807 Dim PreCrystallizedRecycleEnthalpy As Double ' [MJ/h]
808
809 CrystallizationInEnthalpy = CrystallizationInHYSYS. _
810     EnthalpyEstimate.GetValue("MJ/kgmole") * _
811     CrystallizationInHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h") / 1000
812 ProductEnthalpy = ProductHYSYS.EnthalpyEstimate.GetValue("MJ/kgmole") * _
813     ProductHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h") / 1000
814 PreCrystallizedRecycleEnthalpy = PreCrystallizedRecycleHYSYS. _
815     EnthalpyEstimate.GetValue("MJ/kgmole") * _
816     PreCrystallizedRecycleHYSYS.molarFlow.GetValue("kgmole/h") _
817     / 1000
818
819
820 With resultSheet
821     .Cells(55, 27) = PowerOfPumpHYSYS.Power.GetValue("kW")
822     .Cells(55, 25) = ExternalOutCoolerHYSYS.HeatFlow.GetValue("MJ/h")
823     .Cells(55, 35) = DistVapOutExpandHYSYS.Power.GetValue("kW")
824
825     .Cells(topRow + 59, 6).Value = -(ProductEnthalpy + _
826         PreCrystallizedRecycleEnthalpy - _
827         CrystallizationInEnthalpy) * 1000
828     .Cells(topRow + 59, 8).Value = crystallizerTemp
829 End With
830
831

```

```

832 Call RunPython("import heatexchange; heatexchange.main()") '
833 ThisWorkbook.Save
834 '-----
835
836 Debug.Print "completed"
837 End Sub

```

---

#### ソースコード B.6 抽出塔

---

```

1 Option Explicit
2
3 Sub main(outletFlow As Variant, _
4     BzAFlow As Variant, _
5     OthersFlow As Variant, _
6     WaterFlow As Variant, _
7     T As Double)
8
9 Dim toluene As Double '[kmol/h]
10 Dim balc As Double '[kmol/h]
11 Dim bald As Double '[kmol/h]
12 Dim bza As Double '[kmol/h]
13 Dim h2o As Double '[kmol/h]
14 Dim Nitrogen As Double '[kmol/h]
15 Dim Oxygen As Double '[kmol/h]
16 Dim co As Double '[kmol/h]
17 Dim co2 As Double '[kmol/h]
18 Dim HotWater As Double '[kmol/h]
19
20 Dim Csat As Double '水単位質量当たりの安息香酸の溶解度 [BzA-g/ H2O-g]
21
22
23 ' 蒸留塔出口の成分別モル数を求める.
24 toluene = outletFlow(0)
25 balc = outletFlow(1)
26 bald = outletFlow(2)
27 bza = outletFlow(3)
28 h2o = outletFlow(4)
29 Nitrogen = outletFlow(5)
30 Oxygen = outletFlow(6)
31 co = outletFlow(7)
32 co2 = outletFlow(8)
33
34 ' 安息香酸のモル量すべてが溶ける水の量を溶解度と温度から求める.
35 Csat = _
36     (0.0000203 * T ^ 4 + 0.000297 * T ^ 3 + 0.047 * T ^ 2 + 1.43 * T + 24.71) / _
37     1000
38 HotWater = ((bza * BzAMolarMass * 1000) / Csat) / WaterMolarMass / 1000
39
40

```

```

41 ' 抽出器で, 100%分離できたと考え, 成分別モル流量を求める.
42 BzAFlow(3) = bza
43
44 OthersFlow(0) = toluene
45 OthersFlow(1) = balc
46 OthersFlow(2) = bald
47 OthersFlow(4) = h2o
48 OthersFlow(5) = Nitrogen
49 OthersFlow(6) = Oxygen
50 OthersFlow(7) = co
51 OthersFlow(8) = co2
52
53 WaterFlow(4) = HotWater
54
55 End Sub

```

---

ソースコード B.7 晶析器

---

```

1 Option Explicit
2
3 '-----変数定義-----
4
5 Private Const j_pow = 1.78
6 Private Const b_pow = 1.2
7 Private Const g_pow = 0.44
8 Private Const R = 8.314
9 Private Const kv = 0.1 '結晶体積形状係数
10
11 Private kb As Double '核発生速度
12 Private kg As Double '結晶成長速度
13 Private kg0 As Double '結晶成長頻度因子
14 Private Eg As Double '結晶成長活性化エネルギー
15 Private rhoc As Double '結晶密度
16 Private GrowthRate As Double '結晶成長速度定数
17 Private T_MSMPR As Double '連続晶析器内温度
18 Private T_MSMPR_K As Double '連続晶析器内温度
19 Private C_Feed As Double 'Feed液 Bac 濃度
20 Private Csat As Double 'Bac 飽和濃度
21 Private delta_C As Double '過飽和度
22 Private Mt As Double '懸濁密度(体積当たり結晶生産速度)
23 Private B0 As Double '一次核発生速度
24 Private rhoL As Double '液溶媒密度
25 Private tau_MSMPR As Double '平均滞留時間
26 Private n0 As Double '個数密度
27 Private Vol_MSMPR As Double '晶析装置液体積
28 Private v0_MSMPR As Double 'Feed液体積流量
29 Private Yc As Double '全体結晶転化率
30 Private Ycmax As Double '可能結晶転化率
31

```

```

32 Function MSMPR(T_input As Double, _
33             C_Feed_input As Double, _
34             v0_input As Double, _
35             Vol_input As Double, _
36             BzAMolarFlow As Double) As Double
37
38 '諸条件から結晶生産量を求めます.
39
40 '-----操作条件入力-----
41 T_MSMPR = T_input ' [°C]
42 C_Feed = C_Feed_input ' [g/g]
43 v0_MSMPR = v0_input ' [m3/h]
44 Vol_MSMPR = Vol_input ' [m3]
45
46 '-----パラメータ入力-----
47 Eg = 40.05 ' [kJ/mol]
48 kg0 = 10600000# ' [ $\mu$ m/s]
49 kb = 9160000000000# ' [(#/m3 s)(g/mL)j(BzA-g/H2O-g)b]
50 rhoc = 1.32 ' [g/cm3]
51 rhoL = 0.998 ' [g/mL]
52
53 '-----諸量計算-----
54 tau_MSMPR = Vol_MSMPR / v0_MSMPR * 60 ' [min]
55 Csat = (0.0000203 * T_MSMPR ^ 4 + 0.000297 * T_MSMPR ^ 3 + _
56         0.047 * T_MSMPR ^ 2 + 1.43 * T_MSMPR + 24.71) / 1000 ' [g/g]
57 T_MSMPR_K = T_MSMPR + 273.15 ' [K]
58 kg = kg0 * Exp(-(Eg * 1000) / (R * T_MSMPR_K)) ' [ $\mu$ m/s]
59
60
61 '-----晶析器内濃度Cの決定(濃度誤差の二分法)-----
62
63 Dim C1 As Double, C2 As Double, C3 As Double ' 仮定晶析器内濃度
64 Dim Cnew1 As Double, Cnew2 As Double, Cnew3 As Double ' 更新濃度
65 Dim err1 As Double, err2 As Double, err3 As Double ' 誤差
66 Dim counter As Integer ' 計算回数
67 Dim eps As Double ' 収束半径
68
69 eps = 0.0000001
70 counter = 0
71 C1 = Csat * 1.00000001 ' 下限
72 C2 = C_Feed * 0.99999999 ' 上限
73
74 Call calc(C1, Cnew1, err1) ' 小さい濃度C1での誤差検出
75 Call calc(C2, Cnew2, err2) ' 大きい濃度C2での誤差検出
76
77 Do While (Abs((C1 - C2) / C1) > eps)
78
79     C3 = (C1 + C2) / 2

```

```

80 Call calc(C3, Cnew3, err3) '中間濃度C3での誤差検出
81 '更新
82 If err1 * err3 >= 0 Then
83     C1 = C3
84     err1 = err3
85 Else
86     C2 = C3
87     err2 = err3
88 End If
89 counter = counter + 1
90 Loop
91
92 '-----出力部-----
93 Yc = (C_Feed - C3) / C_Feed * 100 '[wt%]
94 Ycmax = (C_Feed - C3) / (C_Feed - Csat) * 100 '[wt%]
95
96 MSMPR = BzAMolarFlow * Yc * Ycmax / 10000
97 'MSMPR = (C_Feed - C3) * rhoL * v0_MSMPR * 1000 '[kg/h]
98 End Function
99
100 Sub calc(ByRef C As Double, ByRef Cnew As Double, ByRef err As Double)
101 '計算ユニットです
102
103 Dim Mtnew As Double
104
105 Mt = (C_Feed - C) * rhoL '定義式 [g/mL]
106 delta_C = C - Csat '定義式 [g/g]
107 GrowthRate = kg * delta_C ^ g_pow '実験式 [ $\mu$ m/s]
108 B0 = kb * Mt ^ j_pow * delta_C ^ b_pow '実験式 [# / m3 s]
109 n0 = B0 / GrowthRate '定義式 [m3  $\mu$ m]
110 Mtnew = 6 * kv * rhoc * (n0 * 1000000) * _
111     ((GrowthRate * 0.000001) * (tau_MSMPR * 60)) ^ 4 '個数収支式 [g/mL]
112 Cnew = C_Feed - Mtnew / rhoL '個数収支式 [g/g]
113 err = C - Cnew '誤差
114
115 End Sub

```

---

ソースコード B.8 関数群

---

```

1 Option Explicit
2
3 Sub solve_k(Temp As Double, k As Variant)
4
5 Dim i As Integer
6
7 Dim a As Variant
8 Dim E As Variant
9 Dim R As Double
10

```

```

11 a = Array(Exp(20.634), Exp(17.928), Exp(15.4), Exp(19.698))
12 E = Array(81.389, 69.53, 56.987, 71.442)
13 k = Array(0, 0, 0, 0)
14 R = 8.314
15
16 For i = 0 To 3
17     k(i) = a(i) * Exp(-E(i) * 1000 / R / Temp)
18 Next i
19
20 End Sub
21
22 Sub solveX(ByRef F As Variant, ByRef x As Variant)
23
24 Dim i As Integer
25 Dim sum As Long
26
27 sum = sumOfFlow(F)
28
29 For i = 0 To 8
30     x(i) = F(i) / sum
31 Next i
32
33 End Sub
34
35 Function sumOfFlow(F As Variant) As Double
36
37 Dim i As Integer
38
39 sumOfFlow = 0
40
41 For i = 0 To 8
42     sumOfFlow = sumOfFlow + F(i)
43 Next i
44
45 End Function
46
47 Sub solveComponentVolumeFlow(molarFlow As Variant, volumeFlow As Variant)
48
49 Dim i As Integer
50 Dim param As Variant
51
52 ' [m3/mol]
53 param = Array(0.10550147646805, 0.10002241059429, 0.101176788713442, _
54     0.112399721649694, 1.77522405788194E-02, 0, 0, 0, 5.32284437764362E-02)
55
56 For i = 0 To 8
57     volumeFlow(i) = molarFlow(i) * param(i)
58 Next

```

```
59
60 End Sub
```

---

ソースコード B.9 最適化を行うコード

---

```
1 Option Explicit
2
3 Sub gridrun()
4
5 Dim topRow1 As Integer
6 Dim topRow2 As Integer
7
8 Dim leftColumn1 As Integer
9 Dim leftColumn2 As Integer
10
11 Dim resultSheet As Worksheet
12 Dim writeSheet As Worksheet
13 Dim saveSheet As Worksheet
14 Set resultSheet = ThisWorkbook.Sheets(1)
15 Set writeSheet = ThisWorkbook.Sheets(4)
16 Set saveSheet = ThisWorkbook.Sheets(5)
17
18 Dim crVolume As Double
19 Dim reVolume As Double
20
21
22
23 Dim i As Integer
24 Dim j As Integer
25 Dim p As Integer
26 Dim l As Integer
27
28 topRow1 = 8
29 leftColumn1 = 4
30
31 topRow2 = 3
32 leftColumn2 = 2
33
34 For i = 1 To 1
35     j = 0
36
37     Call process_all.main
38
39     With writeSheet
40         .Cells(topRow1 + j, leftColumn1 + i) = resultSheet.Cells(28, 22)
41
42         If (resultSheet.Cells(10, 4) > 0.001) Then
43             If (resultSheet.Cells(11, 4) > 0.001) Then
44                 .Cells(topRow1 + j, leftColumn1 + i).Interior.Color = _
```

```

45             RGB(255, 0, 0)
46         Else
47             .Cells(topRow1 + j, leftColumn1 + i).Interior.Color = _
48                 RGB(0, 255, 0)
49         End If
50     Else
51         If (resultSheet.Cells(11, 4) > 0.001) Then
52             .Cells(topRow1 + j, leftColumn1 + i).Interior.Color = _
53                 RGB(0, 0, 255)
54         End If
55     End If
56 End With
57 Next i
58
59 End Sub

```

---