



Title	新しい過剰Gibbsエネルギー式と非理想溶液の分離操作計算への応用
Author(s)	坪香, 毅
Citation	大阪大学, 1976, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/31523
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 ＜a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed >大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名・(本籍)	坪 香 毅
学 位 の 種 類	工 学 博 士
学 位 記 番 号	第 3 6 3 0 号
学位授与の日付	昭 和 51 年 3 月 25 日
学位授与の要件	基礎工学研究科化学系 学位規則第 5 条第 1 項該当
学 位 論 文 題 目	新しい過剰 Gibbs エネルギー式と非理想溶液の 分離操作計算への応用
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 片 山 俊 (副査) 教 授 伊 藤 龍 象 教 授 榎 田 栄 一

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、新しい過剰 Gibbs エネルギー式の提出と、その式を用いた非理想溶液の分離操作計算法の開発を目的としたもので、次の 2 編に分かれる。

第 1 編では、気液及び液液平衡関係を表現できる新しい過剰 Gibbs エネルギー式を提出し、更に最近提出された新しい式の間の相互関係を論じている。この編は 1, 2 章から成っている。

第 2 編は、強い非理想溶液を取扱う分離プロセスの計算法の開発を検討する。その際、活量係数の計算には新しく提出された過剰 Gibbs エネルギー式が有効に適用される。この編は 3, 4 および 5 章から構成されている。

第 1 章は、Gibbs-Helmholtz の関係式に、Wilson の局所体積分率で表わされた過剰エンタルピー式を用いて、気液及び液液平衡に適用可能な修正 Wilson 式を提出している。この式は 2 成分系に対し 2 個のパラメータを有するのみで、多成分系には、何らの仮定又はパラメータを付加することなく拡張される。更に、この式を 2 成分系あるいは 3 成分系の気液及び液液平衡データを再現することによって、その適用性に検討を加えている。

第 2 章では、最近平沼および Abrams と Prausnitz が各々新しい過剰 Gibbs エネルギー式を発表しているが、これらの新しい式は、Wilson 式も含めて、修正 Wilson 式と同一の溶液モデルに基づいており、その違いは Gibbs-Helmholtz 式を積分する際の境界条件の取り方の差によっていることを明らかにした。また上記境界条件を適当に選ぶことにより、新しい式を誘導できることも示唆した。

第 3 章では、液液平衡分離計算の収束法として、新しく“疑似平衡法”を提出した。“疑似平衡法”とは、非線形の相平衡式を何ら最適化法を用いずに解くものである。更に、この分離計算法を繰返し

適用することにより、並流液液抽出計算、そして3成分系液液平衡データの推算が可能であることを示した。

第4章では、収束法として“疑似平衡法”を採用した、新しい多段多成分液液抽出計算法を提出している。この方法はそのアルゴリズムが平易であり、数値計算例により計算時間が短かく、数値的にも安定であることが示された。なお、活量係数の計算には修正 Wilson 式が有効に適用された。

第5章は、強い非理想系をも計算できる多成分蒸留計算法の開発を取扱っている。この方法は、物質収支式をその非線形性を考慮し、“疑似平衡”の概念を用いて解くものである。また、本方法は一切微係数を必要とせず、初期温度分布を仮定するのみで十分であり、その使用には何ら経験が必要としない。数値計算例により、強い非理想系に対する本方法の有用性が示された。同時に修正 Wilson 式の蒸留問題への適用性が検討された。

論文の審査結果の要旨

本論文では過剰Gibbsエネルギー表現式として修正Wilson式が導出されている。この修正Wilson式は気液平衡と液液平衡とがともに表現できるというWilson式にはみられない優れた長所を持っており、工学的に非常に有用な式と考えられる。論文ではまた、最近提出された過剰Gibbsエネルギー表現式の相互関係が解明されている。

論文では続いて相平衡計算をも含む分離操作計算が疑似平衡の考えを導入することによって簡単に遂行できることが示され、今まで困難とされていた液液抽出計算ならびに強い非理想系の多成分系蒸留計算によって例示されている。

これらの研究成果は相平衡および単位操作計算を通じて化学工業の発展に寄与するところが少なくない。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。