

〈特集〉

水処理プロセスシミュレータ

堀井重希, 佐々木友野

栗田工業株式会社 開発本部 基盤技術グループ
(〒329-0105 栃木県下都賀郡野木町川田1-1 E-mail: shigeki.horii@kurita.co.jp)

概要

近年の超純水製造プラントでは排水回収システムの導入が主流になっており、水の流れは非常に複雑なものになっている。当社で独自に開発した水処理プロセスシミュレータは、水中に不純物として存在する各成分の物質収支を厳密に計算したうえで、個々の水処理装置の設計計算を行うことができる設計ツールである。pHやMアルカリ度などの水質指標を考慮することが可能で、pH調整薬品量の計算や膜処理装置におけるスケール析出判定を行うことができる。計算結果および計算過程は日本語のテキスト形式で出力される。今後、水処理プロセスのさらなる効率化や運転管理への応用が期待できる。

キーワード：超純水製造, 設計計算, 排水回収, フローシート, 物質収支
原稿受付 2012.4.19

EICA: 17(1) 41-44

1. はじめに

1.1 開発の背景と目的

半導体製造の各工程では、ウエハ等の洗浄のために大量の超純水が使用されている。使用後の超純水には薬品・微粒子等が含まれているが、その汚染の程度はさまざまであり、原水である工業用水などと比較すれば十分に清澄な水も含まれている。これらを適切に処理し再利用することで用排水処理コストを抑える排水回収システムの導入は近年の主流になっており、排水を系外に出さないクローズドシステムが導入される場合もある¹⁾。

超純水製造プラントの処理フロー例を Fig. 1 に示す。

排水回収システムがあることによって、水の流れが

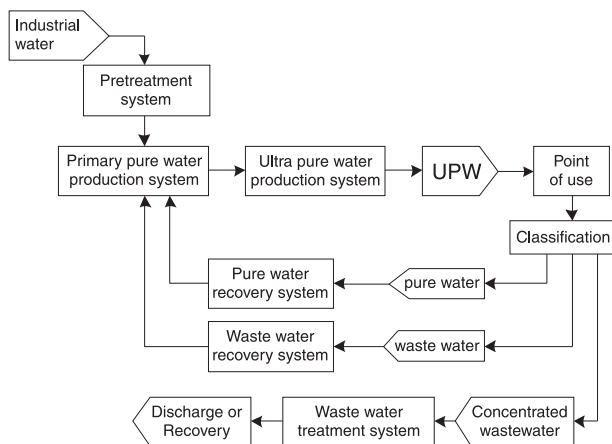


Fig. 1 Block flow example of the ultra-pure water production system²⁾

非常に複雑となる。超純水製造プラントの設計では、複雑な水の流れが存在する中で、特定の水処理装置入口の水量・水質を予測し装置仕様を決定しなければならず、そのために多くの時間と労力が費やされてきた。水処理プロセスシミュレータは、水中に不純物として存在する各成分の物質収支を超純水製造プラント全体でとり、そのうえで個々の水処理装置の設計計算を行うことによって設計の効率化と品質向上を図ることを目的として開発されたものである。

1.2 システム

水処理プロセスシミュレータの基本ソフトウェアとして、インベンシスプロセスシステムズ(株)のPro/IIを採用した。Pro/IIは主に石油化学系のプラントを対象とした定常プロセスシミュレータである。同様のプロセスシミュレータに比べて拡張性・カスタマイズ性に優れており、当社が独自に作成した水処理装置の計算モデルをPro/IIに追加することで、水処理プロセスへの適用を可能にした。

1.3 特長

- 水処理プロセスシミュレータの特長を以下に示す。
- ①排水回収プロセスを含む超純水製造プラント全体において、全成分の物質収支計算が可能である。
 - ②原水水質や処理水量等の諸条件を入力するだけで、各水処理ユニットの入口流量や水質が自動的に計算され、手入力する必要がない。
 - ③設計条件や処理フローの変更があった場合でも、数秒から数十秒で再計算できる。

2. シミュレータ使用方法

2.1 フローシートの作成

Pro/II の PFD (Process Flow Diagram) パレットの中に主要な水処理ユニットを登録しておく。たとえば、砂ろ過塔、活性炭塔、膜処理装置 (RO, MF, UF)、イオン交換樹脂塔、脱炭酸塔、脱気膜、UV 酸化装置、生物処理装置、沈澱槽などである。このほかに、水質調整ユニット、薬品添加ユニットなどが組み込まれている。ユーザーは、PFD パレットの中から水処理ユニットを選択し、ドラッグ&ドロップでフローシート画面上に並べる。それらを線 (ストリーム) でつないでフローシートを完成させる (Fig. 2)。条件設定が必要なストリームおよび装置ユニットのラベルは赤色で表示されており、データ入力が促される。

2.2 ストリームの条件設定

シミュレーションの実行準備として、処理フローの最上流に位置するストリーム (工業用水など) の流量・温度・圧力・水質を設定する必要がある。石油化学系の化学プラントの場合と異なる点は、原料組成の 99.9% 以上が「水」そのものであるということである。最上流のストリームの直後に接続された矢印のアイコン

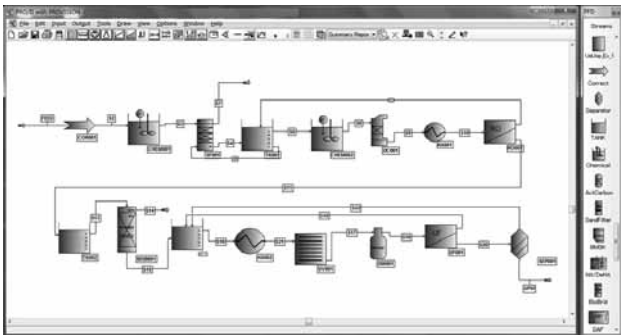


Fig. 2 Water treatment flow sheet example on the process simulator

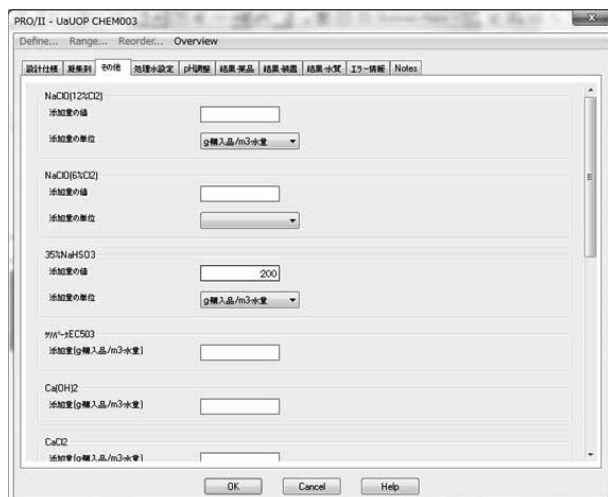


Fig. 3 Customized data entry window for water treatment simulation

ンは、「水質調整ユニット」であり、pH や M アルカリ度といった指標を入力し、ナトリウム、塩化物イオン、炭酸等の濃度調整を行う。

2.3 ユニットの条件設定

フローシート上のユニットアイコンをダブルクリックして、データ入力ウィンドウ (Fig. 3) を開き、設計に必要なデータを入力する。多くのパラメータについては、あらかじめデフォルト値が用意されており、ユーザーの操作負担が軽減されている。

2.4 計算の実行

データ入力完了するとユニットとストリームのラベルがすべて黒色に変化する。これは、シミュレーションの実行準備完了を示す。実行を開始するには、画面上の実行ボタンを押すだけでよい。どの順番で解くかは Pro/II が自動的に判断してくれる。すべての成分の物質収支誤差が設定値以下になれば収束したと判断され、すべてのユニットのアイコンは青色に変化する。計算時間は、非常に大規模な水処理プラントのシミュレーションでも 1 分未満である。つまり、フローシートを組んでしまえば、1 分未満ですべてのユニットの設計計算が完了することになる。

2.5 計算結果の表示

フローシート上のユニットを選択後、簡単なクリック操作でテキストエディタが起動し、各装置の仕様計算結果を日本語で表示することができる。たとえば、RO 膜処理ユニットの場合には、RO ベッセルの構成、処理水およびブライン水の水質、スケール防止薬品添加量などを計算結果として得ることができる。また、ユニットの入口ストリームおよび出口ストリームにおける流量、温度、各成分濃度のほか、pH、電気伝導率などの水質指標についてもまとめて出力される (Fig. 4)。計算結果のみを出力するのではなく、ユー

| INPUT | | OUTPUT | |
|-----------------------------------|-----------|----------------------------------|------------|
| ROの種類 | 8in PA膜 | 運転系列数 | 1.000000 |
| ROの膜材質 | PA膜 | 総バッチ数 (1系列) | 6.000000 |
| バッチ構成 | 自動 | 第1Aバッチ数 (1系列) | 3.000000 |
| バッチ透過水量 (加圧値) [m ³ /d] | 30.000000 | 第2Aバッチ数 (1系列) | 2.000000 |
| 膜有効圧力 (加圧値) [MPa] | 0.700000 | 第3Aバッチ数 (1系列) | 1.000000 |
| 1バッチ中のバッチ数 | 4.000000 | 総バッチ数 (1系列) | 24.000000 |
| | | 水回収率 [%] | 75.000000 |
| | | Langelier指数 [CaCO ₃] | -20.896422 |
| STREAM DATA | | | |
| | 原水 | 処理水 | ブライン |
| 流量 [m ³ /h] | 28.843180 | 21.707365 | 7.235795 |
| 温度 [°C] | 20.000000 | 20.000000 | 20.000000 |
| 電気伝導率 [mS/m] | 17.535662 | 0.365237 | 69.678188 |
| Na [mg/L] | 35.025464 | 0.642941 | 138.173034 |

Fig. 4 Partial output example for the RO unit simulation

ザーが計算の過程を逐一確認できるようにしておくことも、シミュレーション結果の信頼性を高めるうえで非常に重要である。本シミュレータでは、ユニット毎または全ユニット一括で、計算結果と計算過程をまとめた計算書が出力可能である。

2.6 エラーメッセージ

水処理ユニットの設計計算において、設定値や計算結果が設計基準の範囲外であること等が原因でエラーが発生した場合には、そのユニットのアイコンが赤色に変化し、計算が中断される。エラーの原因は、前節と同様の操作で日本語表示される。

2.7 コントローラ

Pro/II は、上流側のユニットから順番に解いていくシーケンシャルモジュラー型のソフトウェアであるため、工業用水等の流入水量を設定すれば、最も下流側に位置する超純水量が自動的に決定されることになる。しかし、超純水プラントの設計では、超純水量を先に設定することの方が通常である。水処理プロセスシミュレータでは、Pro/II の「コントローラ」を使用して流入水量を自動調整することによって、超純水量を目的値に設定することができる。

3. 水処理分野特有の課題と対応

3.1 pH と M アルカリ度

水処理分野において、pH、M アルカリ度は、非常によく用いられる重要な水質指標であるが、これらは物質収支計算の対象とはなりえない。そこで、水処理プロセスシミュレータでは、pH や M アルカリ度から TIC (total inorganic carbon) を算出して物質収支の対象成分としている。M アルカリ度の定義は、「単位体積の試水を pH4.8 にするまでに添加される強酸の当量」であるが、緩衝成分が炭酸のみと仮定した場合、水溶液の電気的中性条件から次式が成立する³⁾。

$$\text{MAlk} = 50000([\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{OH}^-] - [\text{H}^+]) \quad (1)$$

ここで、MAlk は M アルカリ度 (mgCaCO₃/L) である。

(1) 式と炭酸の解離平衡式から、次の(2)式が導かれ原水の TIC を推定することができる⁴⁾。

$$[\text{TIC}] = \left(\frac{\text{MAlk}}{50000} - \frac{K_w}{[\text{H}^+]} + [\text{H}^+] \right) \cdot \frac{K_1 K_2 + K_1 [\text{H}^+] + [\text{H}^+]^2}{K_1([\text{H}^+] + 2K_2)} \quad (2)$$

K_1 : 炭酸の第1解離定数 ($10^{-6.35}$)

K_2 : 炭酸の第2解離定数 ($10^{-10.33}$)

K_w : 水の解離定数 (10^{-14})

水処理プロセスシミュレータでは、TIC を物質収支の対象成分として取扱い、各装置ユニットにおける TIC の除去率を定数または関数形で設定している。

3.2 pH 調整薬品量

処理効率を高めるため、あるいはトラブルを防止するために水処理ユニットの前段で pH 調整を行う場合が多い。水処理プロセスシミュレータでは、pH 調整薬品量の計算を正確に行うことができる。このためには、pH 調整前後の M アルカリ度の変化を計算すればよく、緩衝成分が炭酸のみの場合には(2)式を使用することもできる。水処理プロセスシミュレータでは、水中に炭酸以外の緩衝成分 (リン酸、アンモニア等) が共存することも想定し、pH 調整に必要な強酸・強アルカリの量を計算している。このような計算は、手計算で行うには煩雑であり、水処理プロセスシミュレータを活用するメリットの1つといえる。

3.3 有機物の収支

水中の有機物量を表す指標としては、TOC (total organic carbon)、BOD、COD などがあげられる。TOC は超純水の純度にも係わる重要な有機物指標であり、迅速で正確な測定が可能であることから、水処理プラントの計画設計においても利用頻度が高い。一方で、TOC の具体的な成分については何も示されておらず、活性炭で吸着するものなのか、生物処理が可能な成分なのか等、その特性については何も情報が得られない。水処理プロセスシミュレータでは、当社の水処理プラントにおける運転実績等を考慮して、各ストリームにおける TOC 濃度を推定できるようにしている。将来的には TOC 成分をその特性ごとに分画して物質収支をとる必要もでてくるであろう。

3.4 懸濁物質

凝集処理や微生物処理のように懸濁物質 (suspended solid, SS と略す) が発生するユニットでは、後段の沈澱槽で濃縮した高濃度の SS を循環し、原水と混合するというのが通常よく行われる。しかし、メインストリームにおける SS 流入量に比べて、SS 循環量の方が圧倒的に多い場合の物質収支計算は、何らかの工夫を加えないと収束しない場合が多い。水処理プロセスシミュレータでは、収束解に近い流量等の情報をストリームに書き込むことで、収束性を改善する工夫を行っている。Pro/II 等の基本ソフトウェアをカスタマイズして利用する場合、その特性を十分把握したうえで、収束が容易なプログラミングを心がける必要が

ある。

3.5 スケール析出

水処理プロセスシミュレータでは、炭酸カルシウムをはじめ、固形物析出反応に関わる平衡計算を多数組み込んでいる。すべてのストリームにおいてイオン強度を計算するとともに、ランゲリア指数などの飽和指数を計算している。RO膜ユニット等においてスケール析出の可能性がある場合にはエラーメッセージを出力し、水回収率の低下やスケール防止薬品の添加などの対応をユーザーに促すようにしている。

4. 超純水製造プロセスのシミュレーション例

開発した水処理プロセスシミュレータで超純水製造プロセスを再現したイメージ図を Fig. 5 に示す。各ストリームの流量は大小さまざまであるか、水の流れが非常に複雑であることを示している。実際の現場プロセスにおいて、数十点でのサンプリングを行い、シミュレーション結果と現場の水質が概ね一致することを確認している。

5. おわりに

水処理プロセスシミュレータを活用していくためには、次のような課題がある。

5.1 プロセスの最適化

水処理プロセスシミュレータは、ユーザーが描いたフローシートに沿って、物質収支計算、設計計算を行っているに過ぎない。お客様の原水水質、超純水の必要量と要求水質に応じて、どのような処理フローを選定するかについては、熟練技術者の経験も必要になる。今後は、フローシート全体を評価するような指標を導入してユーザーによるケーススタディを支援し、より適切な水処理システムの構築をめざす必要がある。

5.2 運転管理への応用

水処理プロセスシミュレータは、もともと設計用のツールとして開発されたものであるが、運転管理への適用も期待される。Pro/II は定常シミュレータであるため、各成分濃度の時間変化を予測することはでき

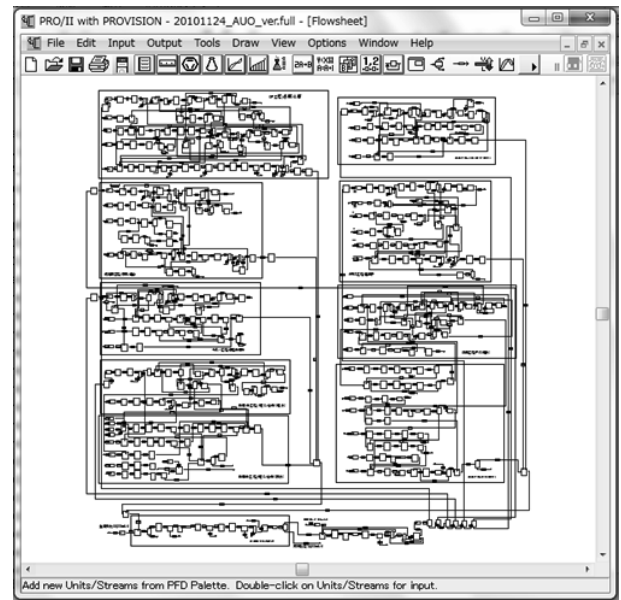


Fig. 5 Simulation model example for a highly integrated ultra-pure water production system

ないが、現在の水質・水量などを入力して、運転中のユニットの余裕度を把握し、運転管理上のボトルネックを抽出するツールとして活用できるものと考えられる。

5.3 継続的な改良

水処理技術は、日々、改良・改善が進められている。このため、最適な水処理プロセスを提示可能とするためには、今回作成した装置ユニットモデルを常に更新し、最新の状態に維持しておく必要がある。また、新しく開発された水処理装置や薬品への対応など、継続した改良を進めていく必要がある。

参考文献

- 1) 半導体基盤技術研究会編：超純水の科学，リアライズ社，pp. 163-164 (1990)
- 2) 岡崎 稔，鈴木宏明：超純水のはなし，日刊工業新聞社，p. 87 (2002)
- 3) 小玉俊明，藤井哲雄：水道水腐食の基礎としての水質化学，防食技術 No. 26, pp. 641-653 (1977)
- 4) Dieter A. Wolf-Gladrowa, Total alkalinity: The explicit conservative expression and its application to biogeochemical processes, Marine Chemistry, Volume 106, pp.287-300 (2007)