

(解説)

最前線のシミュレータを駆使したプラント設計

服部一三・栗城雄治・森崎計人

都市環境・エンジニアリングカンパニー・エネルギープラント部

Advanced Simulation for Plant Design

Ichizo Hattori・Yuji Kurishiro・Kazuto Morisaki

Process simulators are essential for the design of chemical plant, because detailed quantitative analysis to minimize plant cost and increase energy savings is indispensable. Recently, static analysis and dynamic simulation have been applied to such designs. In this paper, four samples using advanced process simulators (existing plant revamping, complicated reaction analysis, batch plant operation, load fluctuation analysis) are introduced. Simulation results all agree with actual plant operation, proving that this technology can be used to create sophisticated plant designs.

まえがき = 化学プラントでは流動・伝熱・蒸留などの単位操作の役目をもった数多くの機器で構成されている。そのため、ほかのプラントのようにベンダ設計の大型機器の結合を主体とした設計に加え、熱・物質収支を確立させた上で個々の機器の主要仕様（例えば熱交換器の伝熱面積、蒸留塔の塔径及び段数）を、化工計算などの手法を用い機器ごとにオーダーメイドで決定する必要がある。

従って、熱・物質収支の確立には気液平衡・物性推算など複雑な解析を必要とし、汎用シミュレータが用いられることが多い。これら標準化された設計手法を用いることで種々な化学プラントのみならず、エネルギー・環境プラントへの対応も可能となり、現にこれら関連分野にも基盤技術として広く活用されている。このように化学プラントは各種関連分野の技術の基盤を育成する母体となっているといえよう。

ここでは化学プラントの設計にシミュレータを用いた例について述べる。

1. シミュレータのこれまでの活用

プラント設計において、かつてはベンチプラント・パイロットプラントをベースとした単純なスケールアップで設計する手法が採用されたことも少なくなかった。ただし、近年は正確な定量解析の必要性からシミュレータの使用が一般化してきた。さらに省エネルギーと設備費低減の必要性から、動的解析など、より複雑な分野へシミュレータを最大限に活かす工夫が続けられている。

2. 既設プラントの能力推定への活用

シミュレータを用いることの一つの利点は運転データをトレースできることである。そのため既設設備の計装データ、熱交換器の総括伝熱係数をシミュレータに入力してボトルネックを検証し、能力増強の設備改造を最小限にする検討に用いられることも多い。

ここでは石油化学プラントで約30%の能力増強に関してシミュレータを利用した例を示す。この系は以下の理由により簡易計算が不可能であった。

- ・成分数が20以上と多く簡易計算は不可能である。
- ・製造モードが3ケースありそれぞれにバランスを作成し、すべてのケースを満足する設備条件を見いだす必要がある。
- ・蒸留塔は15基以上存在し、塔内負荷を含めた物質/熱収支の定量解析が必要である。

従って汎用のプロセスシミュレータ PROII[®]を使用した。計算にあたり、データバンクにない物質については、文献値から定数物性・変数物性計算式を入力して物性値を独自に推算することとした。

2.1 蒸留塔の改造

このNo.1蒸留塔のフローシートを図1に示す。シミュレータを用いることで、単なる物質・熱収支のみでなく塔内の各段ごとの流量(塔内負荷)・物性が表示できる。

改造案の検討結果を表1に示す。ここでは既設の流量を100%とした比較を示す。蒸留塔本体に関しては塔本体の改造回避を前提として、塔内負荷をもとに詳細検討を行ない塔下部の回収部を効率の良いハイキャパシティトレイに変更した。塔上部の濃縮部に関してはアップ率

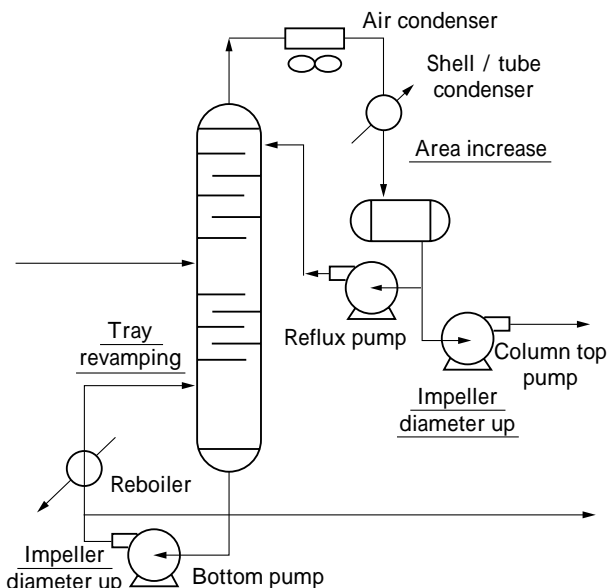


図1 No.1 蒸留塔フロー
Fig. 1 No.1 Distillation column flow scheme

表1 No.1 蒸留塔の改造案
Table 1 Idea of revamping for No.1 distillation column

	Existing (%)	Revamping (%)	Revamping method
Reboiler duty	100	151	No change
Air condenser duty	100	100	No change
Shell/tube condenser duty	100	240	Area increase
Column load (upper)	100	122	No change
Column load (lower)	100	154	Revamping of high capacity tray
Bottom pump flow	100	137	Impeller dia. up
Reflux pump flow	100	108	No change
Column top pump flow	100	129	Impeller dia. up

が20%程度であり、当初の設計で設計余裕をもっていたため改造不要となった。熱交換器の性能検討は、さらにHTRI (Heat Transfer Research Institute) のプログラムを用いて以下の条件が満足されることを確認した。

$$Q < U \cdot T \cdot A$$

- Q : 必要熱交換量 kW
- U : 総括伝熱係数 kW/(m²・K)
- T : 対数平均温度差 K
- A : 伝熱面積 m²

リボイラ自体は、既設の総括伝熱係数を考慮して循環量を比率以上にアップさせることで改造を回避し、熱交換器の改造は塔頂多管式コンデンサのみと最小限にすることができた。また、ポンプは流量増加分をカバーするために、ポンプの性能曲線による検討を行ないインペラ径をアップすることで対応した。

2.2 フィード熱交換器 / 凝縮器の追加

図2は、連結した2つの塔の改造においてフィードヒータ及びコンデンサの追加のみにとどめた例である。この例では熱媒の全負荷の制限もあり、No.3 蒸留塔のり

ボイラの改造は不可能であり、加熱源としてフィードヒータを追加することで対応した。

また、No.2 蒸留塔の圧力を低下させることで多重効用のNo.3 蒸留塔の凝縮器の対数平均温度差を大きくし、さらに既設の総括伝熱係数を考慮したことで、その凝縮器の改造を回避した。負荷の必要アップ率が20%前後であったこともあり、表2で示すようにNo.2 蒸留塔に関してはコンデンサの追加のみとなり、ほとんどの機器は改造不要と判断できた。シミュレータを活用した定量的な解析により改造範囲を最小限にとどめることができ、客先の実験室での個別の実験データをもとに全体のマテリアルバランスをシミュレータを用いて統合し、全体フローの設計検討を行なうことも多い。

3. ラボ反応試験結果からの反応設計への適用

実施例では表3及び図3に示すように一つの反応器で種々の反応が行われるため解析が複雑であり、シミュ

図2 No.2/3 蒸留塔フロー
Fig. 2 No.2 & 3 Distillation column flow scheme

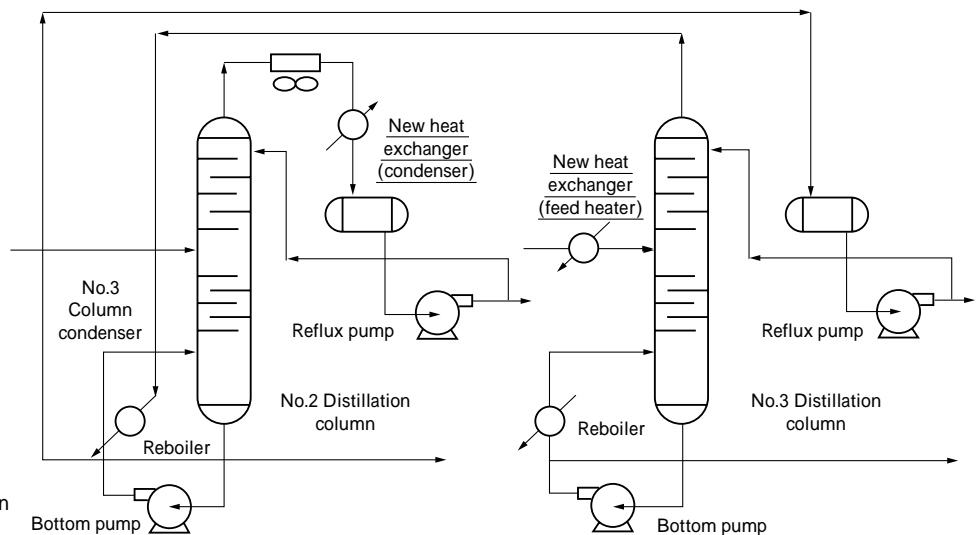


表2 No.2, 3 蒸留塔の改造案
Table 2 Idea of revamping for No.2 and 3 distillation column

	Existing (%)	Revamping (%)	Revamping method
No.2 Column condenser duty (for new condenser)	100	120	No change
		12	New exchanger
No.3 Column reboiler duty (for feed heater)	100	76	No change
		46	New exchanger
No.3 Column condenser duty	100	125	No change
No.3 Column load (upper)	100	125	No change
No.3 Column load (lower)	100	73	No change
No.3 Column bottom pump flow	100	< 100	No change
No.3 Column reflux pump flow	100	125	No change

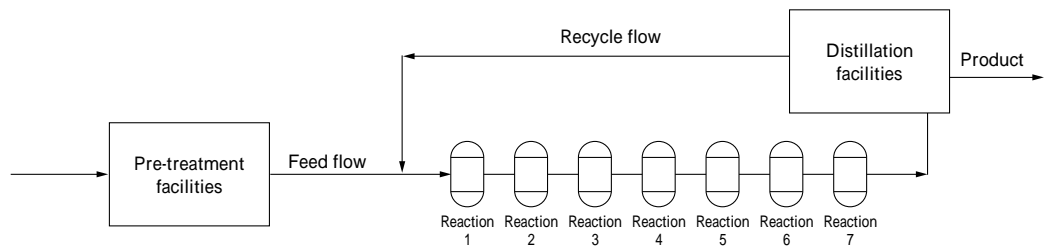


図3 反応フロー
Fig. 3 Reaction flow

レータの適切な活用が要求される。この例は芳香族1, 2を原料として芳香族3を求める製品とするプロセスである。

まず、エーテルをアルコールの分解反応で生成させる(反応1)。このエーテルが芳香族1, 2と連鎖反応を起こし、製品である芳香族3が得られる(反応2, 3)。さらなる連鎖反応で副生成物を生成させる(反応4)。同時に芳香族2, 3, 4に異性体が存在し、その異性化反応が起こる(反応5)。なお、この反応4及び反応5は製品の収率の上では好ましくない反応である。さらに、中間体反応も間接的に原料収率などに寄与する(反応6及び7)。

これら複雑な反応を実設計に展開するには、個々の反応の結果を統合させ、全体のバランスに適用させることが必要である。全体のマテリアルバランスは反応をconversion reactorのユニットを結合させパラメータコントロール手法を用いて計算した。conversion reactorは転化率を設定して、反応式の前後の物質・熱収支を計算するユニットである。

3.1 反応転化率の決定事例

ラボ実験では、反応器入口・出口でのH₂(水素)、C1(メタン)やアルコールのバランスが得られている。ま

た反応器の出口での製品である芳香族3とその異性体組成のデータは存在し、反応1, 2, 3, 5の転化率、分配率は与えられている。ただし、成分数が多いため転化率、分配率にはばらつきがあり確定された値ではない。なお、主反応ではない反応4, 6, 7の転化率は得られていない。

表4のNo.1のパラメータ(反応器出口での異性体も含めた製品の芳香族3の比率)はH₂, C1には関係せず、反応2, 3の転化率は既知のため未知の反応4の転化率を変化させることで計算できる。その結果、No.1パラメータを実験値とほぼ同じ値での反応4の転化率を得ることができた。さらに順次反応6, 7の転化率を変化させることにより、H₂, C1のバランスに關与するNo.2, 3のパラメータの検証も行なうことができた。これらパラメータの実験値と計算値がほぼ一致したことから、反応1, 2, 3, 5の転化率の妥当性も確かめられたといえる。

3.2 転化率変動の検討事例

一方、個々の反応の転化率は温度・圧力などの条件によって変化する。設計にはこれらの転化率の変動も考慮に入れる必要がある。ここでは、反応1のアルコールの転化率及び反応5の芳香族3の異性化反応での転化率が変化した場合のフィード及びリサイクル量への影響を表

表3 反応式の種類
Table 3 Reaction formula

Reaction	Reaction formula
Reaction 1	Alcohol ----> Ether + Water
Reaction 2	Aromatics 1 + Ether ----> Aromatics 2 + Water
Reaction 3	Aromatics 2 + Ether ----> Aromatics 3 + Water
Reaction 4	Aromatics 3 + Ether ----> Aromatics 4 + Water
Reaction 5	Isomerization of aromatics 2, 3, 4 (Total 12 formula)
Reaction 6	Intermediate (A ~ H) + H ₂ ----> C1 (Total 8 formula)
Reaction 7	C1 + Intermediate A ----> Intermediate B

表4 コントロールするパラメータ
Table 4 Control parameter

No.	Parameter	Control value	Control value		Conversion Value (%)
			Experiment	Simulation	
1	Conversion of reaction 4	Reactor outlet aromatics 3 / Reactor outlet total aromatics	0.36	0.36	29.65
2	Conversion of reaction 6	Reactor outlet H ₂ / Reactor inlet H ₂	0.97	0.97	68.70
3	Conversion of reaction 7	Reactor outlet C1 / Reactor inlet C1	1.023	1.019	9.75
4	Feed H ₂	Reactor inlet H ₂ / Reactor inlet total aromatics	1.50	1.52	
5	Feed alcohol	Reactor inlet alcohol + 2 × ether / Reactor inlet aromatics 1&2	2.00	2.00	

表5 リサイクル量に及ぼす反応転化率の影響
Table 5 Effect of conversion of reaction for recycle flow rate

No.	Reaction	Conversion (%)	Feed flow rate (%)	Recycle flow rate (%)
1	Reaction 1	100.0	100.0	99.6
		85.0	100.0	100.0
		70.0	100.3	100.5
2	Reaction 5 (Isomerization of aromatics)	90.2	106.7	106.7
		87.7	100.0	100.0
		82.7	96.3	93.0

5に示した。フィード量の変化は反応の前処理設備、リサイクル量の変化は下流の蒸留設備の機器仕様に影響する。特に異性化反応の転化率を押さえることが重要であることがわかる。

このようにシミュレータの制御ユニットを活用することで転化率を求め、さらに転化率を変動させることで実際に起こりうるプラントでの変動を推定し、最適な機器仕様を設計段階で正確に決定することができる。

4. 動的解析の応用

前項までで紹介してきた手法は定常状態での解析であるが、近年非定常状態での解析の重要性も高まりつつある。ここでは動的解析を行なった事例とその手法を示す。

4.1 バッチ蒸留への適用

医薬品プラントなどにおいては、設備効率を高めるためにマルチパスを意図したプラントの計画が多い。この種のプラントは切替を考慮したバッチプラントであるため、蒸留塔で複数の操作条件を満足させる必要があり、最適な蒸留操作を求めるためには動的解析が必要となる。ここでは表6に示すように、異なった物質の分離を行なう3つのケースを満足させるバッチ蒸留塔を汎用のHYSYSのシミュレータを用いて解析した事例を示す。

図4のバッチ蒸留には以下の特徴がある。

- ・釜に初期に仕込んだ量を蒸留分離する。
- ・塔底から連続的に抜出すことはせず、重質分は釜残とし最後に排出させる。
- ・塔底加熱部が釜の構造になっており、そのジャケット部の伝面は釜での液面とともに変化する。
- ・軽質分が2種類以上存在する場合には初留、後留とに分けて流出させる。初留と後留の切替で両成分が混在する間は別途リサイクルとして回収する。

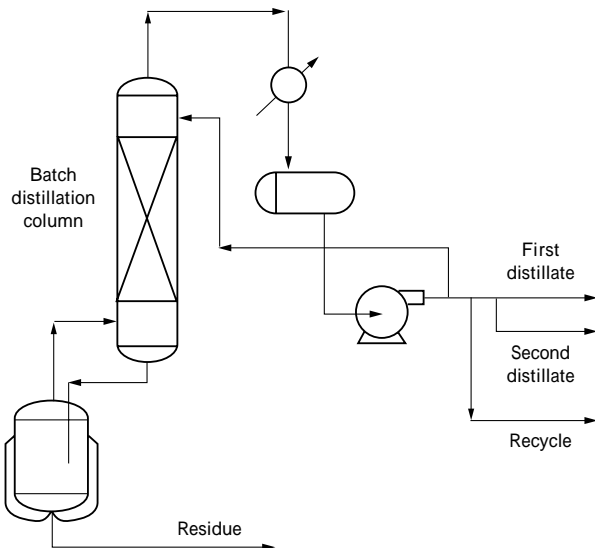


図4 バッチ蒸留塔フロー
Fig. 4 Batch distillation column flow scheme

表6 バッチ運転の種類
Table 6 Case for batch distillation

	First distillate	Second distillate	Residue	Batch period (h)
Case 1	Low boiler	Water	m-cresol	18.0
Case 2		Methanol	Water	16.0
Case 3		Acetone	Water	14.0

ケース1の低沸点物・水・クレゾール系のバッチ蒸留の解析を行った結果を以下に示す。

加熱釜には以下の組成の液が注入されており、初期の液レベルは80%とした。なお、この蒸留操作は大気圧である。

低沸点物	40.0mol%
水	45.0mol%
m-クレゾール	15.0mol%

バッチ蒸留は以下の手順で行った。

1) 炊上げ (操作 a)

リボイラに熱源を与えると、低沸点物が塔頂成分として分離される。伝熱面積は底面と側面のジャケットの合計とし、側面部の伝面は液レベルに比例するものとした。

2) 全還流

還流ドラムの液面が30%になった時点で全還流操作を開始する。

3) 初留抽出 (操作 b)

塔頂の低沸点物のモル濃度が90%以上に上昇した後、初留低沸点物の抽出を開始する。

4) 混合物リサイクル (操作 c)

抽出が進むと塔頂の低沸点物の濃度が減少し、規定の純度を満足しなくなるので初留からリサイクルラインへの切替を行なう。

5) 水抽出 (操作 d)

塔頂は水が主成分となり純度が90%以上となった時点で水として回収する。塔底の温度がさらに上昇した時点で操作を終了し、塔底にはm-クレゾールが釜残として残る。

図5にはリボイラ及びコンデンサの熱交換量の経時変化を示す。リボイラの伝面が液レベルに関係することから、熱交換量が加熱釜の液レベルとともに低下していることがわかる。

図6に温度の経時変化を示す。組成変化が現われるリボイラ、塔頂、コンデンサの順に温度変化が起こっていることがわかる。特に、塔頂の流出成分が低沸点物から

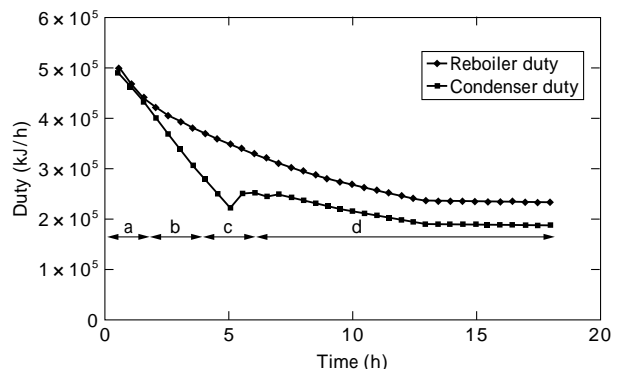


図5 熱交換量の経時変化
Fig. 5 Heat duty change

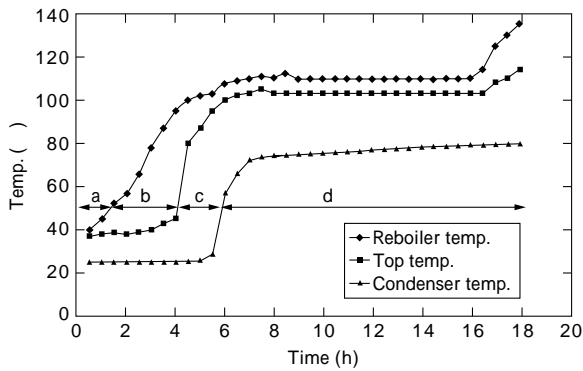


図6 温度の経時変化
Fig. 6 Temperature change

水に変化する際に温度が顕著に変化する（操作 b と c の間）。実際の運転では、この温度変化をもとに操作の切替えを行なうこととなる。

図7には塔頂組成の経時変化を示す。最初の3時間ほどは初留成分である低沸点物が塔頂から分離され、後留成分である水と重質成分である m-クレゾールとの分離は18時間で完了する。なお、3時間から6時間の間の塔頂成分は低沸点物と水の混合物であり、リサイクルさせる必要があることがわかる。液レベルが減少して、与えられる熱負荷が減少するのに反して、水の蒸発潜熱が大きいいため水の塔頂への分離は低沸点物と比較して時間がかかることがわかる。

なお、還流比を増加させた際の結果を図8に示す。初留・後留とも軽質成分の純度は上昇するが、必要熱負荷が多くなるため分離に要する時間が22時間に増加する。

4.2 負荷変動を行なう装置の運転に適用した事例

近年、空気分離装置などの運転に対しては負荷の増減が要求されるケースが増えつつある。このため適切な運転条件を事前に得るためには、ダイナミックシミュレーション技術を駆使して、制御方法を検討する必要がある。そしてその結果と実装置の動特性データを比較し検証することで、新たに精度を向上させた装置の設計を行なうことができる。

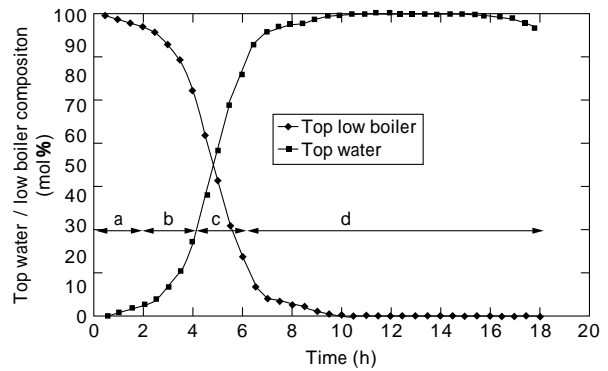


図7 塔頂組成の経時変化
Fig. 7 Column top composition change

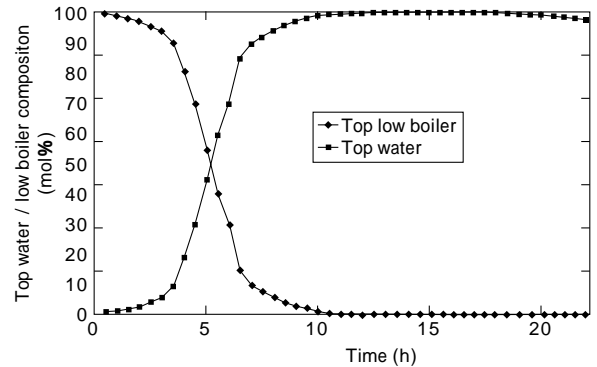


図8 還流比を増加させた際の塔頂組成の経時変化
Fig. 8 Column top composition change for reflux ratio increase

図9に示した低純度酸素装置を、前項と同じシミュレータを用いて負荷を増減させて各パラメータの変化を推算し、実データと比較検討した。まず用いた数学的モデルを説明する。

1) 主熱交換器

原料空気を冷却する機器であり、その熱交換量を（製品酸素量 + 製品窒素量 + 廃窒素量）の関数として変化させた。

$$Q_e = (Q_{O_2, out} - Q_{O_2, in}) + (Q_{N_2, out} - Q_{N_2, in}) + (Q_{w, out} - Q_{w, in})$$

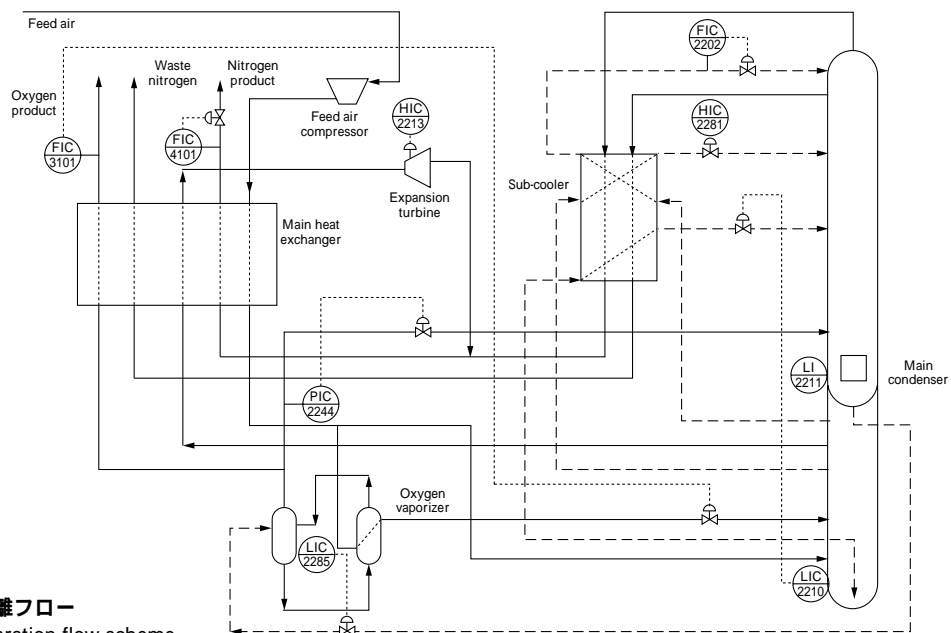


図9 空気分離フロー
Fig. 9 Air separation flow scheme

Q_e : 主熱交換器での交換熱量

添字 O_2, N_2, w : 製品酸素, 製品窒素, 廃窒素

2) 酸素蒸発器

製品酸素を蒸発させ、かつ原料空気の一部を液化させる機器であり、空気流量は製品酸素流量の一定比倍、交換熱量は製品酸素流量に比例するように変化させた。

$$F_{air} = K1 \times FO_2$$

$$Q_{vap} = K2 \times FO_2$$

Q_{vap} : 酸素蒸発器での交換熱量

F_{air}, FO_2 : 空気流量, 製品酸素流量

$K1, K2$: 比例定数

3) 高压塔・低压塔・主凝縮器

ホールドアップは液のみを考慮することとし 精留槽・コンデンサ・リボイラは完全混合を仮定した。

a) 棚段及びフィード段の物質収支

$$dM_i/dt = V_{i+1} + L_{i-1} - V_i - L_i + F_i$$

$$\alpha(x_i \cdot M_{j,i})/dt = y_{i+1} \cdot V_{j,i+1} + x_{i-1} \cdot L_{j,i-1} - y_i \cdot V_{j,i} - x_i \cdot L_{j,i} + z_i \cdot F_{j,i}$$

b) コンデンサ及びリボイラの物質収支

$$dM_i/dt = V_{i+1} + L_{i-1} - V_i - L_i$$

$$\alpha(x_i \cdot M_{j,i})/dt = y_{i+1} \cdot V_{j,i+1} + x_{i-1} \cdot L_{j,i-1} - y_i \cdot V_{j,i} - x_i \cdot L_{j,i}$$

c) 棚段及びフィード段の熱収支

$$\alpha(h_i \cdot M_i)/dt = H_{i+1} \cdot V_{i+1} + h_{i-1} \cdot L_{i-1} - H_i \cdot V_i - h_i \cdot L_i + l_i \cdot F_i$$

d) コンデンサ及びリボイラの熱収支

$$\alpha(h_i \cdot M_i)/dt = H_{i+1} \cdot V_{j,i+1} + h_{i-1} \cdot L_{j,i-1} - H_i \cdot V_{j,i} - h_i \cdot L_{j,i} + Q$$

e) 気液平衡

$$y_j = P_j / (PT \cdot x_j)$$

t : 時間

T : 温度

P : 圧力

PT : 全圧

M : 液ホールドアップ

x, y, z : 液体, ガス, フィード組成

H, H_i, l : 液体, ガス, フィードエンタルピ

L, V : 液体, ガス流量

Q : コンデンサ, リボイラの交換熱量

α, β : コンデンサ, リボイラの補正係数

添字 i : 段番号

添字 j : 成分番号

4) 調節弁

リニア特性として、モデル化した。

$$\text{流量} = (\text{流量レンジ}) \cdot (\text{弁開度})$$

動的解析結果を以下に示す。

5分後に負荷増量を開始した際の負荷増量時(負荷増量後約3時間)の原料空気の流量変化に伴う製品酸素及び製品窒素の流量変化を図10に、純度の変化を図11に示す。主な機器での液量変化を図12に示す。

製品酸素純度は主凝縮器での酸素が活発になるため、いったん酸素濃度が上昇し、その後徐々に元の純度に戻

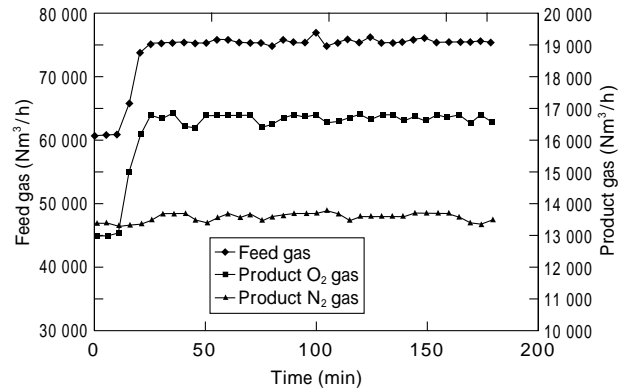


図10 負荷増量時の製品ガス流量変化

Fig.10 Product flow change in case of capacity increasing

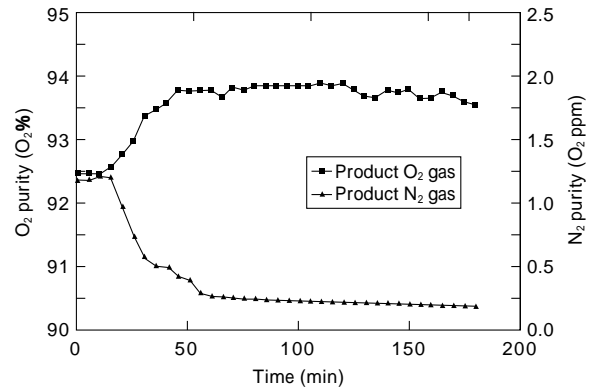


図11 負荷増量時の製品純度変化

Fig.11 Product purity change in case of capacity increasing

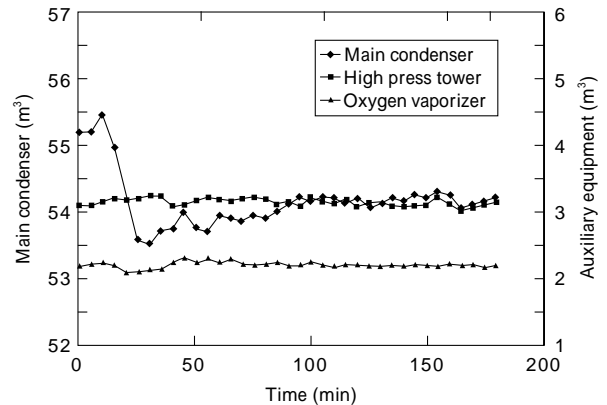


図12 負荷増量時の液量変化

Fig.12 Product flow change in case of capacity increasing

った。製品窒素純度は、原料空気量が増量されたのに対して、製品窒素量を増量しないために純度は上昇した。

高压塔及び製品蒸発器液面は、液面制御良好により一定に保たれた。主凝縮器液面は原料空気量の増加に伴う主凝縮器での蒸発量増加及び製品酸素量の増加に伴う酸素蒸発器への液酸素送り量の増加により低下した。これらの結果を表7に示す。

また、シミュレーション結果と実測データの比較を図13に示す。シミュレーション結果と実測データは比較的良好一致を示した。

なお、負荷減量テストでも同様の結果が得られた。

以上のことから、負荷増減における製品純度の変化幅を確認するとともに計算モデルの妥当性を確認した。

表7 増量運転サマリ

Table 7 Summary of capacity increasing operation

	Before increasing (%)	After increasing (%)
Feed air load	80	100
Product oxygen load (FIC3101)	80	100
Product nitrogen load (FIC4101)	90	90
Top nitrogen reflux valve (FIC2202)	Constant	Constant
Upper nitrogen reflux valve (HIC2281)	MV 23	MV 33
Other LIC, PIC	SV constant	SV constant
Load increasing speed	Operation speed 2.5%/min (Action speed approximately 2%/min)	

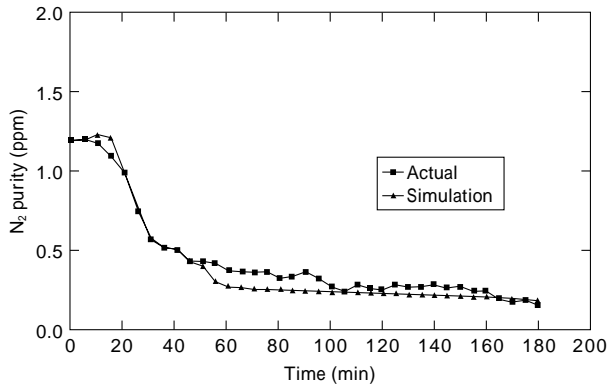


図13 シミュレーションと実測データの比較

Fig.13 Comparison between simulation and actual result

むすび=化学プラントの設計においては、シミュレータで実際の運転を事前に推定することができ、最適な設計には欠かせない手法となっている。今後も省エネルギーなどの観点から精密な定量解析へのプラント運転上の要求はますます強くなり、高度なシミュレーション解析技術が求められる。この手法は化学プラントだけでなくエネルギー・環境分野にも広く応用できるため、積極的な活用と優れた設計手法の確立に今後とも注力していきたい。