



化学工学会 第 40 回秋季大会

第 7 回 ソフトウェア・ツール学生コンテスト

開催日時：2008 年 9 月 25 日 (木) 1:00 pm ~ 4:00pm

場 所：東北大学 川内北キャンパス (Q 会場)

主 催：化学工学会 SIS 部会 情報技術教育分科会

http://altair.chem-eng.kyushu-u.ac.jp/scej_contest2008/

目次

1. プロセス設計部門

設計課題：「エチルベンゼンの脱水素によるスチレンモノマーの製造」.....	1
プロセス設計部門提出資料の要求仕様書	6
(1) 北海道大学	8
向田 光志 (M1), 佐藤 由実 (M1), 篠岡 実樹 (M1), 遠子内 涉 (M1), 橋本 龍馬 (M1), 吉川 琢也 (M1)	
(2) 東京農工大学	14
田中 宏幸 (B4), TAN KHEE SEAN(B4)	
(3) 静岡大学	21
李 憲樹 (M2), 大西 智士 (B4), 原田 直幸 (B4)	
(4) 京都大学 A チーム	29
川口 久文 (B4), 成田 洋一 (B4)	
(5) 東京工業大学 A チーム	36
荻原 一晃 (B4)	
(6) 京都大学 B チーム	43
中村 尚登 (B4)	
(7) 九州大学 A チーム	50
阿部 飛太 (M1), 青木拓朗 (M1)	
(8) 九州大学 B チーム	58
井上 直洋 (M1), 岩村 健太郎 (M2), 弘中 秀至 (M1)	
2. 一般ソフトウェア・ツール部門	
一般ソフトウェア・ツール部門課題について	64
(9) 東京工業大学 B チーム	65
猪子 寛司 (D1)	
(10) 名古屋大学チーム	66
鈴木 博貴 (D1)	

H20 年度 プロセス設計 課題

エチルベンゼンの脱水素によるスチレンモノマーの製造

1. プロセスの概要

本プロセスは、エチルベンゼン（EB）から脱水素反応によりスチレンモノマー（以下では、単にスチレン（S）と呼んだりする）を製造するプロセスである。S はポリスチレンや ABS 樹脂などの原料となり、全世界では年間に 2000 万トン以上生産され国内でも 300 万トン程度生産されている。プラントの規模としては工場あたり年間に 10 万トンから 50 万トン程度の生産規模である。

本プロセスの基本構成は図 1 に示すように反応工程と分離工程からなる。これに未反応生成物のリサイクル、原料の精製工程、用役のプロセスなどを必要に応じて組み合わせることによりスチレンモノマー製造プラントが構成されている。副製品としては、ベンゼン（B）およびトルエン（T）が生産される。

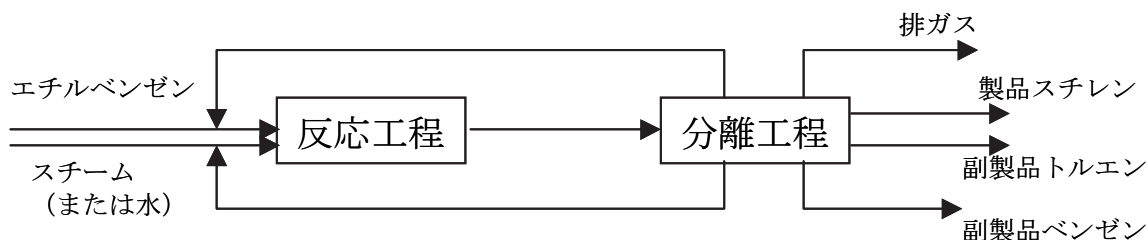


図 1 プロセスの概要

2. 課題

2. 1) 純度 99.8 mol% 以上のスチレンモノマーを 200,000 ton/year 生産するプロセスを設計する。

2. 2) 設計条件

(1) プラント稼働時間：1日24時間連続操業で、年330日稼働とする。

(2) 原料供給条件：

EB 圧力 101.3 kPa 温度 30 degC 原料純度：B 0.5mol% EB 99.5mol%

H₂O (EB との希釈・反応水) 圧力 300.0 kPa 温度 30degC 純度 100mol%

(3) 製品、副製品、および、生成物：

B 99.5mol%以上 圧力 101.3 kPa 温度 38degC

T 99.0mol%以上 圧力 101.3 kPa 温度 38degC

S 99.8mol%以上 圧力 101.3 kPa 温度 38degC

燃料ガス (H₂, CO₂ 等) 圧力 400.0 kPa 温度 38degC 改訂2版

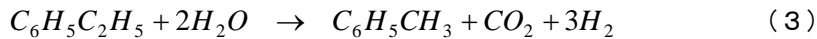
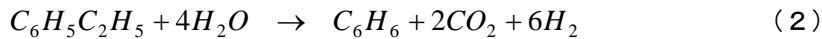
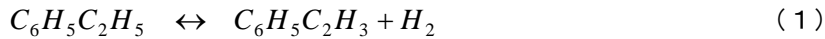
(4) 用役

冷却水、加熱蒸気、燃料ガス、冷却用空気温度などは、3. 主な仮定と計算上の注意の項で示す。

3. 主な仮定と計算上の注意

3. 1 反応工程

原料のエチルベンゼンは、触媒の入った気相反応器で以下の反応によりスチレンおよび副生成物を生成する。なお、この反応器では触媒の劣化を防ぐため大過剰の水蒸気を混合して気相反応を行う。



式(1)の主反応では、エチルベンゼン(EB)からスチレン(S)を生成する正反応と、その逆反応が存在する。一方、式(2)と(3)の副反応では、副生成物であるベンゼン(B)とトルエン(T)を生成するが、大過剰の水蒸気が存在するために、原料エチルベンゼン(EB)分圧の一次反応で近似できる。

従って、式(1)～(3)の生成物の反応速度式は次式で与えられる。

$$r_1 = k_{11}P_{EB} - k_{12}P_S P_{H_2} \quad [kgmol/(m^3 \cdot hr)] \quad (4)$$

$$r_2 = k_2 P_{EB} \quad [kgmol/(m^3 \cdot hr)] \quad (5)$$

$$r_3 = k_3 P_{EB} \quad [kgmol/(m^3 \cdot hr)] \quad (6)$$

ただし、 P_{EB} 、 P_S 、 P_{H_2} は、それぞれ、エチルベンゼン(EB)、スチレン(S)、水素(H₂)の分圧[atm]である。また、式(4)～(6)の速度定数は次のアウレニウス式で与えられる

$$k_{11} = G_{11} \exp\left\{-\frac{E_{11}}{RT}\right\}, \quad k_{12} = G_{12} \exp\left\{-\frac{E_{12}}{RT}\right\} \quad (7a)$$

$$k_2 = G_2 \exp\left\{-\frac{E_2}{RT}\right\}, \quad k_3 = G_3 \exp\left\{-\frac{E_3}{RT}\right\} \quad (7b)$$

ここで、頻度因子 G_i と活性化エネルギー E_i は次表のように与えられる。

速度定数	頻度因子 G_i	活性化エネルギー E_i [kJ/kgmol]
k_{11} [kgmol/(m ³ ·hr·atm)]	1.090e+6	74170
k_{12} [kgmol/(m ³ ·hr·atm ²)]	0.1929	-50409
k_2 [kgmol/(m ³ ·hr·atm)]	5.690e+9	160620
k_3 [kgmol/(m ³ ·hr·atm)]	2.490e+10	165100

<反応工程における仮定>

- ・上記の他にも副反応が存在するが無視できるものとする。
- ・炭化水素化合物の熱分解が発生しない範囲で運転するため、反応器内温度は720degC以下となるように設計すること。
- ・炭素の触媒上への析出などがあるため、反応器入口において炭化水素成分量の5倍以上(モル流量で)の水蒸気が含まれていること。
- ・反応器内の触媒が占める容積は、反応器体積の50%とする(触媒の空隙率は0.5)。
ただし、反応速度式(E, G)は、触媒を含む反応管の入りでの組成から求めたものであって触媒の存在を前提とした係数である。
- ・副反応では水は大過剰に加えられていることからEBの一次反応とした。
- ・反応熱は、適宜求めること。

3. 2 分離工程

反応工程を出た中間製品は排ガスを分離した後、凝縮した水は反応工程に水蒸気にして戻される。炭化水素はベンゼン、トルエン、スチレン、エチルベンゼンを主成分とする留分に分離され、未反応のエチルベンゼンは反応工程に戻される。スチレンは主製品として、ベンゼンおよびトルエンは副生成物として系外に取り出される。

蒸留工程ではスチレンの熱による重合を防ぐために、スチレンを 90mol%以上含む系は 100degC 以下で運転するものとする。

<分離工程における仮定>

- ・気液平衡で、水と炭化水素留分は、液の状態では完全に 2 液相に分離すると仮定してもよい。
- ・スチレンを 90mol%以上含む系は 100degC 以下で運転するものとする。

3. 3 物質収支、熱収支、圧力バランス

物質収支、熱収支、圧力バランスを求めること。なお、以下の仮定を用いてもかまわない。

(1) 配管や反応器内、塔内、での圧力損失は無視してよい。但し、加圧すべき箇所には、必ずコンプレッサー（ガス）か、ポンプ（液）を入れること。また、減圧すべき箇所には、バルブ（液、ガス）を入れること。

(2) 制御系を考慮する必要はない。

(3) 各装置の熱損失は無視してよい。

(4) 加熱炉を設ける場合は、燃料と空気の完全燃焼により、900℃のガスが発生するものとする。発生したガスと流体との熱交換は、通常の熱伝導による熱交換器とみなし輻射の影響は無視してよい。

3. 4 用役

加熱や動力用スチーム、冷却用水、燃料（加熱、スチーム発生等に使用する）、電力を系外から導入して用いることができる。スチームや冷却水などの使用後の用役は系外へ送出できるものとする。

4. 機器の設計

4. 1. 蒸留塔

・塔径は、最大ガス流速をとる段で、フラッディングが生じないように決定すること。

・段間隔は塔径に関係なく 60cm とする。ただし、塔頂は、還流供給・気液の分離のため間隔は 2m とする。塔底部は、液ホールドアップのため、間隔は 4m とする。また、原料供給段の間隔は段間隔に 1m を加えるものとする。

・塔効率は 80% とする。

4. 2. 熱交換器

・総括熱伝達係数 $[W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}]$ は以下の値をとり、流速に無関係とする。

受熱流体 - 与熱流体

ガス - ガス : 200

受熱流体 - 与熱流体

ガス - ガス（凝縮）: 500

ガス	-	液	: 200	液	-	ガス (凝縮)	: 1,000
液	-	液	: 300	液 (蒸発)	-	ガス	: 500
液 (蒸発)	-	ガス (凝縮)	: 1,500	液 (蒸発)	-	液	: 1,000
液	-	ガス	: 200				

4. 3 回転機 (コンプレッサーとポンプ)

・所要動力のみを求めればよい。ただし、コンプレッサーの等エントロピー効率を 80%とする。

4. 4 反応器

反応器は固定床を想定したとしても、断熱型・等温 (内部熱交換) 型があり、触媒も管内・管外を選択があり、流れ方向も軸方向・半径方向の選択などが存在するので本課題では前提条件は設けないこととしたので回答者が適宜設計する。コスト積算については、5. 1 項を参照のこと。

5. 機器費、建設費、および、運転 (プラントの生産) にかかわる費用

5. 1 プラントの機器費、建設費 (プラント建設総費用)

プラント建設費の償却年数は 7 年とし、各年定額の償却として、金利は無視してよい。

工事費を含めたプラント建設総費用は、下記の①から⑥までの総和の 2.5 倍とする。

なお、下記以外の装置および費用については、適宜判断すること。

①熱交換器、蒸留塔コンデンサー、蒸留塔リポイラー

$$\text{Cost} [\text{¥}] = 1,500,000 \times A^{0.65} \times K$$

ここで、A : 伝熱面積 [m²]、K=1.0 (熱交換器、コンデンサー)、K=2.0 (リポイラー、反応器熱交換部)

②加熱炉

$$\text{Cost} [\text{¥}] = 10,000,000 \times F^{0.85} + (\text{熱交換器と仮定したコスト})$$

ここで、F : 燃料消費量 [kmol/hr]

③蒸留塔

$$\text{Cost} [\text{¥}] = 1,500,000 \times D^{1.066} \times H^{0.82} + (\text{コンデンサーとリポイラーのコスト})$$

ここで D : 直径 [m]、H : 高さ [m]

④反応器

$$\text{Cost} [\text{¥}] = 20,000,000 \times D^{1.066} \times H^{0.82} + (\text{熱交換器 (熱交換が必要な場合) のコスト})$$

ここで D : 直径 [m]、H : 高さ、もしくは、長さ [m]

⑤コンプレッサー

$$\text{Cost} [\text{¥}] = 500,000 \times Q^{0.82}$$

ここで、Q : 所要動力 [kW] 多段圧縮器については、総所要動力からコストを算出する。

⑥貯槽、バルブ、配管、ポンプ、電気・計装、建屋など

その他の設備として①から⑤までの機器費合計の1.0倍が更に必要とする。

5. 2 運転(プラントの生産)にかかわる費用

① 原料、製品、用役費の価格を6. コストデータの項に示すのでこれを用いて収益を求める。

② プラントを運営する費用として①の他に、下記を加えるものとする。

- ・ 保全費用： プラント建設総費用の3%/年とする。
- ・ 人件費： 400,000,000円/年とする。
- ・ その他費用は本課題では無視する。

6. コストデータ

6. 1 ユーティリティコスト

- ・ 加熱 100atm 高圧スチーム (500℃) : ¥4.0/MJ
 - ・ 加熱用飽和中圧スチーム (250℃) : ¥1.4/MJ
 - ・ 加熱用飽和低圧スチーム (130℃) : ¥1.0/MJ
- (加熱用スチームはプラント内で使用後に系外へ送出する)
- ・ 燃料油 (ヘキサンと仮定) : ¥30/kg
- 注： 燃焼により、900℃のガスとなるものとする。
- ・ 冷却水 (供給30℃、送出(もどり) 45℃以下とする) : ¥10/ton
 - ・ 電力 : ¥15/KW

改訂2版

6. 2 原料、製品価格

- 原料 : ¥ 80/kg
- 原料水(補充) : ¥ 5/kg
- 製品 : スチレン : ¥100/kg
- トルエン : ¥ 60/kg
- ベンゼン : ¥ 70/kg
- オフガス : 熱量換算で燃料油の半額の価値を持つものとする。
- 余剰水蒸気 : ユーティリティコストの半額の価値を持つものとする。

以上

プロセス設計部門 提出資料

1. PFD (1枚)

機器 with 機器番号 or 機器名称 (反応器、蒸留塔、熱交換器、ポンプ、圧縮機 など)、
機器の接続(Stream with No. or Name)、減圧用バルブ

注：主な Stream に圧力・温度を記述すること。なお、制御は記述しなくてよい。

2. 物質収支 Stream-Data-Table (1枚)

Stream-No. or Name、圧力、温度、流量、組成、液化率

3. 本課題の設備費検討にかかわる機器データの表 (1~2枚)

課題 5.1 のプラントの建設費にかかわるデータとして以下の表を作成する。

1) 反応器：

機器番号 or 機器名、形式 (断熱、等温・熱交換)、直径(m)、長さ(m)、
等温反応器の場合は伝熱面積(m²)、コスト(¥)

2) 蒸留塔：

機器番号 or 機器名、理論段数、実段数、直径(m)、高さ(m)、コスト(¥)

注：課題 5. 1 の③に示すように、コンデンサーとリボイラーは蒸留塔本体とは別であり、蒸留塔のコストは本体のみとして、コンデンサーとリボイラーは別途熱交換器①として算出する。

3) 熱交換器

機器番号 or 機器名、熱交換量(MJ/Hr)、伝熱面積(m²)、
高温側・低温側の入口出口温度(deg C)、コスト(¥)

注：伝熱面積は使用する simulator によっては、別途求める必要がある。

4) 加熱炉

機器番号 or 機器名、熱交換量(MJ/Hr)、想定した伝熱面積(m²)、燃料消費量、
低温側の入口出口温度(deg C)、燃焼ガスの出口温度、コスト(¥)

注：課題 3.3(4)に記載したように熱交換器と同様のコスト推算であるので、900degC の完全燃焼ガスとの熱交換としている。伝熱面積は使用する simulator によっては別途求める必要がある。また、900degC の完全燃焼ガスと必要な燃料流量についても別途求める必要がある。

5) 圧縮機

機器番号 or 機器名、所要動力、流量、入口および出口圧力(MPa)、コスト(¥)

6) ポンプ

機器番号 or 機器名、所要動力、流量、入口および出口圧力(MPa)

注：ポンプは、機器費は⑥に含めるので、単体のコストは求める必要はない

4. 経済検討の纏め (1枚)

1) 原料と製品の流量と価格

2) 用役使用量

用役を使用した機器の機器番号 or 機器名および各使用用役量、各用役の総和

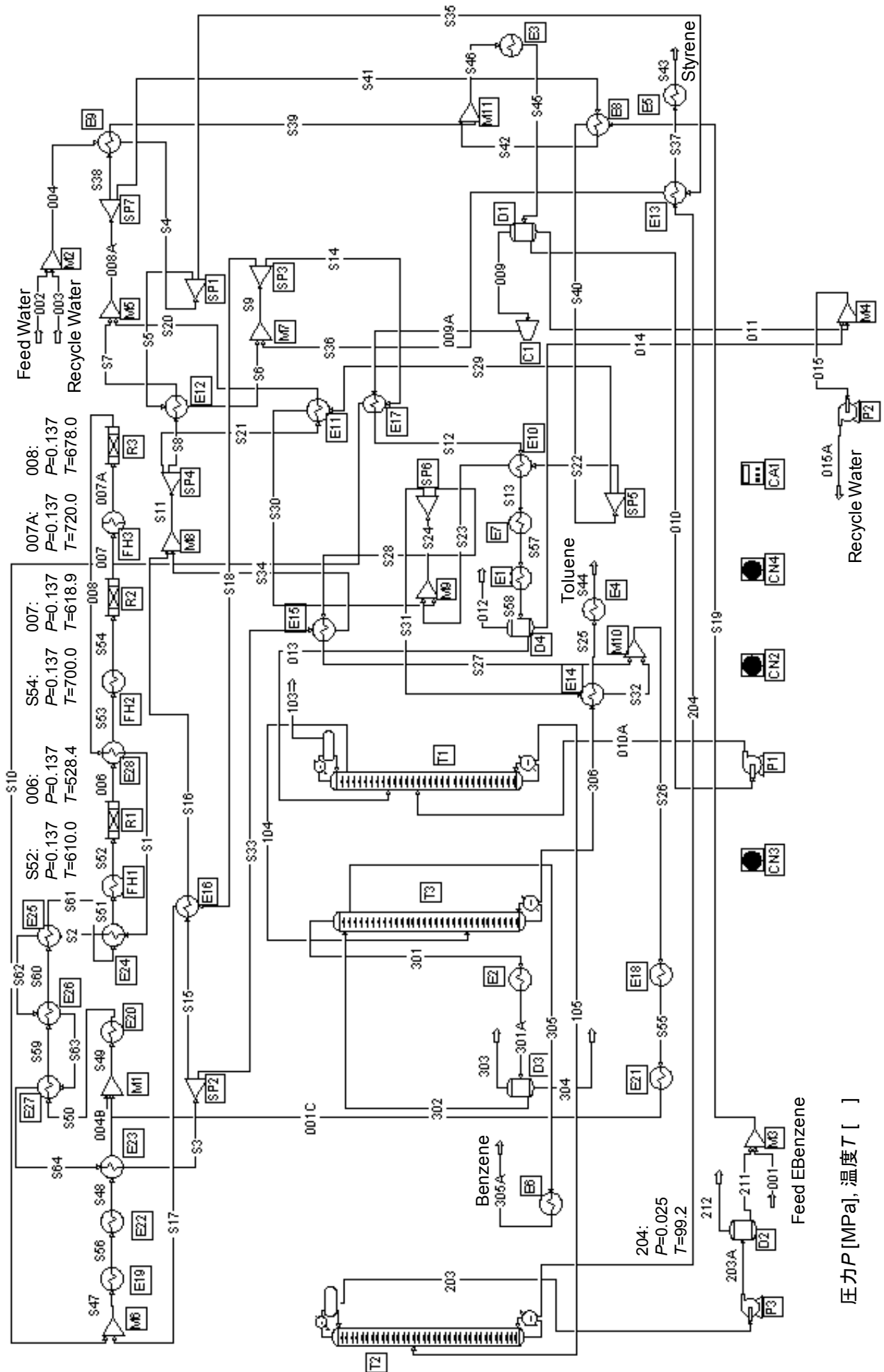
3) プラントコスト、運転にかかわる費用、プラント収益

5. 今回の設計結果に至った経緯 (出来るだけ2枚以内にしてください)

最終的なプロセスフロー選定に至った経緯や比較検討した工夫した点について、簡潔に述べてください。

この部分が課題として重要な部分ですので、要点を出来るだけ箇条書きで書いてください。

1. PFD



压力 P [MPa], 温度 T []

2. Stream Date

各ストリームにおける詳細を Table 2.1 に示した。

Table 2.1 Stream Date

stream no.	圧力 / MPa	温度 / °C	流量 / kg-mol-hr ⁻¹	組成						液化率 / %		
				Ebenzene	Styrene	Benzene	Toluene	Water	H ₂		CO ₂	
001	1.1	30.0	314	0.995	0	0.005	0	0	0	0	0	100
001C	0.25	173.4	406	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	0.017
002	1	30.0	194	0	0	0	0	1.000	0	0	0	100
003	1	45.2	1830	0	0	0	0	1.000	0	0	0	100
004	1	43.7	2024	0	0	0	0	1.000	0	0	0	100
004B	1	180.1	2024	0	0	0	0	1.000	0	0	0	92.24
006	0.137	528.4	2574	0.108	0.045	0.002	0.003	0.775	0.061	0.006	0	0
007	0.137	618.9	2750	0.057	0.074	0.005	0.011	0.694	0.137	0.021	0	0
007A	0.137	720.0	2750	0.057	0.074	0.005	0.011	0.694	0.137	0.021	0	0
008	0.137	678.0	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	0	0
008A	0.137	95.8	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.929	0
009	0.137	41.5	663	0.006	0.010	0.008	0.008	0.058	0.774	0.136	0	0
009A	0.43	193.1	663	0.006	0.010	0.008	0.008	0.058	0.774	0.136	0	0
010	0.137	41.5	388	0.230	0.604	0.042	0.116	0.005	0.000	0.002	0	100
010A	0.24	49.2	388	0.230	0.604	0.042	0.116	0.005	0.000	0.002	0	100
011	0.137	41.5	1801	0	0	0	0	1	0	0	0	100
012	0.43	38.0	622	0.002	0.002	0.007	0.004	0.015	0.826	0.145	0	0
013	0.43	38.0	13	0.223	0.437	0.117	0.210	0.005	0.001	0.006	0	100
014	0.43	38.0	29	0	0	0	0	1	0	0	0	100
015	0.137	41.5	1830	0	0	0	0	1	0	0	0	100
015A	1	41.8	1830	0	0	0	0	1	0	0	0	100
103	0.2	100.0	1.21	3.82E-04	5.46E-06	0.250	0.253	0.037	0.093	0.367	0	0
104	0.22	133.1	68	0.002	4.59E-05	0.260	0.701	0.032	2.37E-04	0.004	0	0
105	0.26	181.8	332	0.277	0.723	4.06E-11	6.00E-05	9.59E-12	0	0	0	100
203	0.008	61.8	92	0.995	0.005	1.47E-10	2.17E-04	3.47E-11	0	0	0	100
203A	0.25	62.0	92	0.995	0.005	1.47E-10	2.17E-04	3.47E-11	0	0	0	100
204	0.025	99.2	240	0.002	0.998	3.99E-23	7.45E-19	9.67E-18	0	0	0	100
211	0.25	61.2	92	0.995	0.005	1.47E-10	2.17E-04	3.47E-11	0	0	0	100
301A	0.14	90.0	134	3.17E-14	3.68E-19	0.970	2.63E-04	0.022	1.33E-04	0.008	0	0
301A	0.12	49.0	134	3.17E-14	3.68E-19	0.970	2.63E-04	0.022	1.33E-04	0.008	99.76	0
302	0.12	49.0	132	3.23E-14	3.75E-19	0.987	2.68E-04	0.007	1.37E-05	0.006	0	100
303	0.12	49.0	0.490	1.18E-15	9.00E-21	0.286	2.56E-05	0.098	0.033	0.584	0	0
304	0.12	49.0	1.95	8.45E-19	2.83E-23	4.83E-04	2.36E-08	0.999	5.09E-07	2.41E-04	0	100
305	0.14258	91.2	17	6.04E-12	1.66E-16	0.995	0.005	4.39E-04	7.16E-08	1.59E-05	0	100
305A	0.14258	38.0	17	6.04E-12	1.66E-16	0.995	0.005	4.39E-04	7.16E-08	1.59E-05	0	100
306	0.18	131.9	48	0.003	6.50E-05	0.004	0.990	0.003	4.89E-32	1.56E-22	0	100
S1	0.137	570.5	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	0	0
S2	0.137	493.7	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	0	0
S3	0.137	206.1	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	0	0
S4	1	70.4	2024	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S5	1	70.4	1434	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S6	1	73.2	1434	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S7	0.137	96.0	1766	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.672	0
S8	0.137	95.9	1766	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.674	0
S9	1	73.1	2024	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S10	1	164.8	331	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S11	0.137	95.9	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.674	0
S12	0.43	94.2	663	0.006	0.010	0.008	0.008	0.058	0.774	0.136	0	0
S13	0.43	91.7	663	0.006	0.010	0.008	0.008	0.058	0.774	0.136	0	0
S14	1	73.1	331	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S15	0.137	206.1	1933	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	0	0
S16	0.137	96.1	1933	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.387	0
S17	1	174.1	1693	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S18	1	73.1	1693	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S19	0.25	37.4	406	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S20	0.137	96.0	1087	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.651	0
S21	0.137	95.9	1087	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.674	0
S22	0.25	70.3	100	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S23	0.25	73.2	100	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S24	0.25	73.7	406	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S25	0.18	102.8	48	0.003	6.50E-05	0.004	0.990	0.003	4.89E-32	1.56E-22	0	100
S26	0.25	150.3	406	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S27	0.25	155.0	358	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S28	0.25	73.7	358	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S29	0.25	70.3	307	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S30	0.25	73.2	307	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S31	0.25	73.7	48	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S32	0.25	100.4	48	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S33	0.137	206.1	920	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	0	0
S34	0.137	96.1	920	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.446	0
S35	1	70.4	590	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S36	1	73.2	590	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S37	0.025	96.7	240	0.002	0.998	3.99E-23	7.45E-19	9.67E-18	0	0	0	100
S38	0.137	95.8	1694	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.929	0
S39	0.137	95.0	1694	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	5.377	0
S40	0.25	70.3	406	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	100
S41	0.137	95.8	1159	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	1.929	0
S42	0.137	95.1	1159	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	5.116	0
S43	0.025	45.0	240	0.002	0.998	3.99E-23	7.45E-19	9.67E-18	0	0	0	100
S44	0.18	38.0	48	0.003	6.50E-05	0.004	0.990	0.003	4.89E-32	1.56E-22	0	100
S45	0.137	41.5	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	90.33	0
S46	0.137	94.8	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	5.505	0
S47	1	171.7	2024	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S48	1	180.1	2024	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S49	0.137	100.5	2430	0.166	1.78E-04	6.47E-04	8.19E-06	0.833	0	0	0	51.46
S50	0.137	180.1	2430	0.166	1.78E-04	6.47E-04	8.19E-06	0.833	0	0	0	0
S51	0.137	528.4	2430	0.166	1.78E-04	6.47E-04	8.19E-06	0.833	0	0	0	0
S52	0.137	610.0	2430	0.166	1.78E-04	6.47E-04	8.19E-06	0.833	0	0	0	0
S53	0.137	638.6	2574	0.108	0.045	0.002	0.003	0.775	0.061	0.006	0	0
S54	0.137	700.0	2574	0.108	0.045	0.002	0.003	0.775	0.061	0.006	0	0
S55	0.25	173.2	406	0.995	0.001	0.004	4.90E-05	7.84E-12	0	0	0	99.96
S56	1	180.1	2024	0	0	0	0	1	0	0	0	100
S57	0.43	70.8	663	0.006	0.010	0.008	0.008	0.058	0.774	0.136	0	0
S58	0.43	38.0	663	0.006	0.010	0.008	0.008	0.058	0.774	0.136	22.74	0
S59	0.137	276.1	2430	0.166	1.78E-04	0.001	8.19E-06	0.833	0	0	0	0
S60	0.137	365.0	2430	0.166	0.000	0.001	8.19E-06	0.833	0	0	0	0
S61	0.137	448.7	2430	0.166	0.000	0.001	8.19E-06	0.833	0	0	0	0
S62	0.137	413.9	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	0	0
S63	0.137	330.2	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	0	0
S64	0.137	241.6	2853	0.033	0.085	0.008	0.018	0.646	0.180	0.032	0	0

3. 設備費検討に関する機器データ

使用した各機器についての詳細を Table 3.1 から Table 3.8 に示した。

Table 3.1 反応器

機器番号	形式	直径 / m	長さ / m	コスト / ¥
R1	固定床型 断熱反応器	3.0	5.5	261,058,993
R2	固定床型 断熱反応器	3.0	3.0	158,811,037
R3	固定床型 断熱反応器	3.0	1.5	89,957,232

Table 3.2 蒸留塔

機器番号	理論段数	実段数	直径 / m	高さ / m	コスト / ¥
T1	24	29	2.85	30.5	75,596,885
T2	54	67	6.26	59.0	300,216,308
T3	24	30	1.01	31.3	25,622,661

Table 3.3 蒸留塔(コンデンサー)

機器番号	熱交換量 / MJ·hr ⁻¹	伝熱面積 / m ²	高温側		低温側		コスト / ¥
			T _{in} / °C	T _{out} / °C	T _{in} / °C	T _{out} / °C	
T1	30026	90.5	133.1	100.0	30.0	45.0	28,049,577
T2	58207	462	73.5	61.8	30.0	45.0	80,878,836

Table 3.4 蒸留塔(リボイラー)

機器番号	熱交換量 / MJ·hr ⁻¹	伝熱面積 / m ²	高温側		低温側		コスト / ¥
			T _{in} / °C	T _{out} / °C	T _{in} / °C	T _{out} / °C	
T1	42212	75.4	668.5	306.2	181.0	181.8	49,816,462
T2	51491	67.7	730.1	283.5	99.0	99.2	46,472,707
T3	2297	7.78	306.2	282.6	131.4	131.9	11,381,380

Table 3.5 熱交換器

機器番号	熱交換量 / MJ·hr ⁻¹	伝熱面積 / m ²	高温側		低温側		コスト / ¥
			T _{in} / °C	T _{out} / °C	T _{in} / °C	T _{out} / °C	
E1	2998	50.8	70.8	38.0	30.0	41.5	19,264,159
E2	133	5.09	91.2	38.0	30.0	36.8	4,319,611
E3	2757	105	96.5	38.0	30.0	41.5	30,840,457
E4	511	18.3	99.2	38.0	30.0	39.1	9,927,676
E5	92535	908	92.9	45.0	30.0	45.0	125,520,079
E6	4896	45.1	90.0	49.0	30.0	45.0	17,842,913
E7	620	18.0	96.6	70.8	30.0	40.9	9,812,595
E8	2813	20.0	96.4	92.9	37.4	70.3	10,527,196
E9	4110	31.4	96.4	92.9	43.7	70.4	14,084,066
E10	61.1	3.24	99.2	96.6	70.3	73.2	3,222,409
E11	187	9.96	99.2	96.4	70.3	73.2	6,682,739
E12	304	16.2	99.2	96.4	70.4	73.2	9,180,930
E13	125	4.44	99.2	96.5	70.4	73.2	3,954,562
E14	273	8.82	131.9	99.2	73.2	100.4	6,172,921
E15	6176	215	212.9	99.2	73.2	155.0	49,269,303
E16	12977	564	212.9	99.2	73.2	174.1	92,100,059
E17	2302	115	194.7	99.2	73.2	164.8	32,687,477
E18	2103	33.0	250.0	250.0	148.6	173.2	14,553,933
E19	1153	21.8	250.0	250.0	172.6	180.1	11,104,764
E20	2969	52.8	250.0	250.0	163.2	180.1	19,761,374
E21	13574	98.3	250.0	250.0	173.2	173.4	29,601,025
E22	72758	578	250.0	250.0	180.1	180.1	93,607,736
E23	1220	23.2	212.9	206.1	180.1	180.1	11,565,621
E24	15302	792	554.4	469.0	441.3	528.4	114,861,305
E25	15302	745	469.0	383.6	354.2	441.3	110,359,234
E26	15302	703	383.6	298.3	267.2	354.2	106,279,808
E27	15302	665	298.3	212.9	180.1	267.2	102,562,709
E28	22140	954	678.0	554.4	528.4	638.6	129,629,081

Table 3.6 加熱炉

機器番号	熱交換量 / MJ·hr ⁻¹	伝熱面積 / m ²	燃料消費量 / kmol·hr ⁻¹	低温側		燃焼ガス	コスト / ¥
				T _{in} / °C	T _{out} / °C	T _{out} / °C	
FH1	14333	116	22.6	528.4	610.0	620.0	174,336,764
FH2	12351	137	26.0	638.6	700.0	710.1	196,529,524
FH3	20882	203	48.0	618.9	720.0	730.1	315,914,460

Table 3.7 コンプレッサー

機器番号	所要動力 / kW	流量 / kmol·hr ⁻¹	P _{in} / MPa	P _{out} / MPa	コスト / ¥
C1	966.5	663.1	0.137	0.43	140,230,634

Table 3.8 ポンプ

機器番号	所要動力 / kW	流量 / kmol·hr ⁻¹	P _{in} / MPa	P _{out} / MPa
P1	1.4	388.1	0.137	0.24
P2	13.3	1830.4	0.137	1
P3	1.3	91.9	0.008	0.25

4. 経済検討

原料と製品の流量と価格をそれぞれ Table 4.1、Table 4.2 に示した。また用役使用量について Table 4.3 に、プラントコスト、運転に関わる費用についてそれぞれ Table 4.4、Table 4.5 に示した。次に Net Present Value(NPV)について検討し、Table 4.6 に示した。なお、プロジェクト期間を 10 年間、税率を 30 %として計算した。

Table 4.1 原料

	Total Flowrate	Flowrate / kg·hr ⁻¹							価格
	/ kg·hr ⁻¹	EBenzene	Styrene	Benzene	Toluene	water	H ₂	CO ₂	/ ¥·year ⁻¹
Ethyl Benzene	33277	33155	0	123	0	0	0	0	21,084,506,602
Water	3487	0	0	0	0	3487	0	0	138,092,797

Table 4.2 製品

	Total Flowrate	Flowrate / kg·hr ⁻¹							価格
	/ kg·hr ⁻¹	EBenzene	Styrene	Benzene	Toluene	water	H ₂	CO ₂	/ ¥·year ⁻¹
Styrene	24964	50.9	24913	0	0	0	0	0	19,771,225,075
Benzene	1339	0	0	1331	7.113	0.148	0	0.012	742,202,742
Toluene	4379	16.5	0.332	13.6	4346	2.60	0	0	2,081,040,698
Off Gas	5947	98.4	128	336	221	171	1026	3967	471,258,431

Table 4.3 用役使用量

機器番号	使用用役量			
	冷却水 / MJ·hr ⁻¹	中圧スチーム / MJ·hr ⁻¹	燃料油 / kmol·hr ⁻¹	電力 / kW
蒸留塔 (コンデンサー)	T1 30026			
	T2 58207			
熱交換器	E1 2998			
	E2 133			
	E3 2757			
	E4 511			
	E5 92535			
	E6 4896			
	E7 620			
	E18 2103			
	E19 1153			
	E20 2969			
	E21 13574			
	E22 72758			
加熱炉	FH1		22.6	
	FH2		26.0	
	FH3		48.0	
コンプレッサー	C1			966.52
ポンプ	P1			1.44
	P2			13.29
	P3			1.31
Total	192682	92557	97	982.6

※ 蒸留塔のリボイラーでは燃料油の排熱を利用した。

Table 4.4 プラントコスト

	機器コスト / ¥	建設コスト / ¥
反応器	1,189,295,742	2,973,239,356
蒸留塔	401,435,854	1,003,589,634
蒸留塔(コンデンサー)	108,928,413	272,321,033
蒸留塔(リボイラー)	96,289,169	240,722,923
熱交換器	509,827,263	1,274,568,157
加熱炉	686,780,748	1,716,951,870
コンプレッサー	140,230,634	350,576,585
ドラム、ポンプ、その他	3,132,787,823	7,831,969,557
Total	6,265,575,646	15,663,939,114

Table 4.5 運転に関わる費用

	コスト / ¥·year ⁻¹
販売上げ高	23,065,726,946
Styrene	19,771,225,075
Benzene	742,202,742
Toluene	2,081,040,698
Off gas	471,258,431
原料費	21,222,599,398
EBenzene	21,084,506,602
Water	138,092,797
用役費	2,371,260,459
冷却水	246,484,925
中圧スチーム	531,729,256
燃料油	1,978,174,817
電力	116,728,128
保全費	469,918,173
人件費	400,000,000

Table 4.6 NPV (単位: 百万円)

year	Investment	dk	FCI _L - Σ dk	Revenue	COM	After Tax Net Profit	After Tax cash Flow	Discrete Cash Flow	Cumulative Cash Flow
0			16,134						
1	-7,832		16,134					-7,832	-7,832
2	-7,832		16,134					-7,832	-15,664
3		2,305	13,829	23,066	23,994	-2,263	42	42	-15,622
4		2,305	11,524	23,066	23,994	-2,263	42	42	-15,580
5		2,305	9,219	23,066	23,994	-2,263	42	42	-15,539
6		2,305	6,915	23,066	23,994	-2,263	42	42	-15,497
7		2,305	4,610	23,066	23,994	-2,263	42	42	-15,455
8		2,305	2,305	23,066	23,994	-2,263	42	42	-15,413
9		2,305		23,066	23,994	-2,263	42	42	-15,372
10				23,066	23,994	-650	-650	-650	-16,021

5. 今回の設計結果に至った経緯

5.1 スチレンモノマー製造プロセスの設計

- ・ 初めに設計したスチレンモノマー製造プロセスを Fig.1 に示した。
- ・ 反応工程：反応器は複数(3基)の固定床反応器を用いた。これは、主反応が吸熱反応であるため高温での操作が望ましい一方、副反応を抑制するために、未反応エチルベンゼン量が多い場合には低温で操作する必要があるため、反応温度を徐々に上げていくことを検討したためである。また、反応器は等温型に比べ制御が容易で実用例の多い断熱型を用いた。
- ・ 分離工程：あらかじめ混合物中の水、オフガスの大半をフラッシュ蒸留により分離した後、ベンゼンとトルエン、およびエチルベンゼンとスチレンに分離したあと、それぞれの成分に分離した。

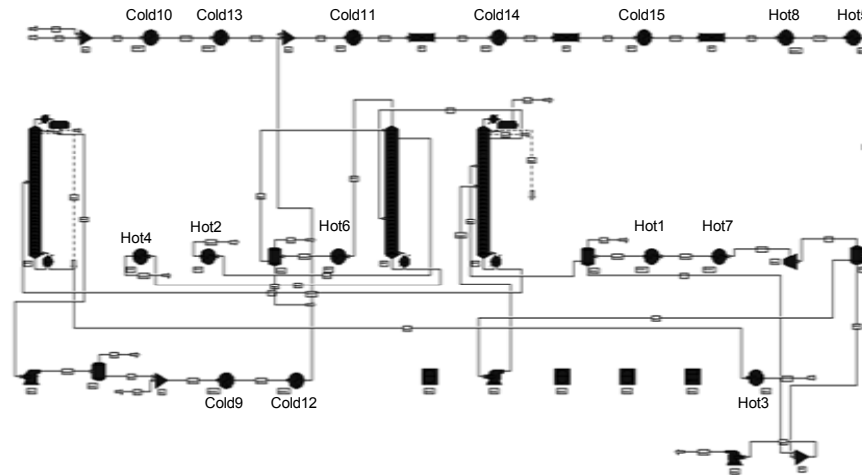


Fig.1 スチレンモノマー製造プロセス(熱交換ネットワーク最適化前)

5.2 ピンチテクノロジーを利用した熱回収スキームの最適化

- ・ コスト削減や環境問題、エネルギー問題の観点からプロセスの省エネルギー化を考え、ピンチテクノロジーを利用した熱回収スキームの最適化を検討した。
- ・ プロセス全体として、どの温度領域でどれだけ加熱・冷却の要求があるかを把握し、またプロセス内熱回収の余地を明らかとするため、与熱流体(Hot)と受熱流体(Cold)それぞれのデータを抽出し、Composite Curve(Fig.2)を作成した。ここで、Fig.2においてHot側線図とCold側線図が最も接近する点をピンチポイントと呼び、この点における最少接近温度差 T_{min} の最適値について検討した。必要な熱交換器の建設コストと用役コストはトレードオフの関係にあるため、これらの合計コストが最少となる T_{min} を検討した結果、最適な T_{min} は 26 と求められた(Fig.4)。なお、用役については Grand Composite Curve を作成し、それを基に最適な配分について検討した(Fig.3)。

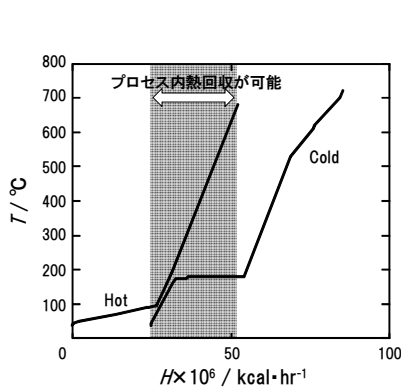


Fig.2 Composite Curve ($\Delta T_{min}=26^{\circ}\text{C}$)

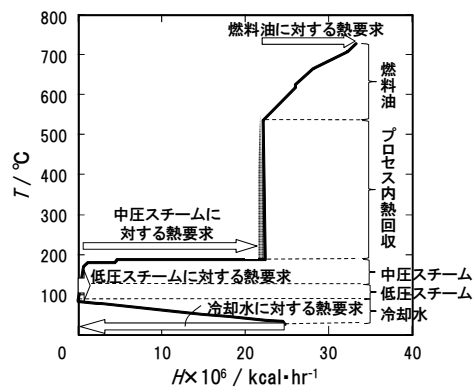


Fig.3 用役の最適配分 ($\Delta T_{min}=26^{\circ}\text{C}$)

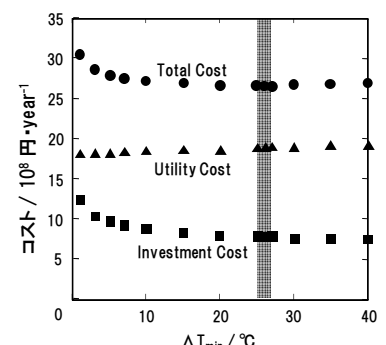


Fig.4 最適 ΔT_{min} の決定

- ・ 最適と求められた $T_{min}=26$ と設定したときの性能をターゲットとし、これを達成する熱交換ネットワークを Grid Diagram という表現方法を用いて設計した(Fig.5)。
- ・ ターゲットの用役配分に忠実に設計した結果、複雑なネットワークとなってしまった。特に低压スチームから中圧スチームの温度領域では、同じ流体を2度スプリットし、熱交換数も多い。よって、現実的なデザインを得るため、要求熱量が少ない低压スチームを用いないネットワークを検討した。

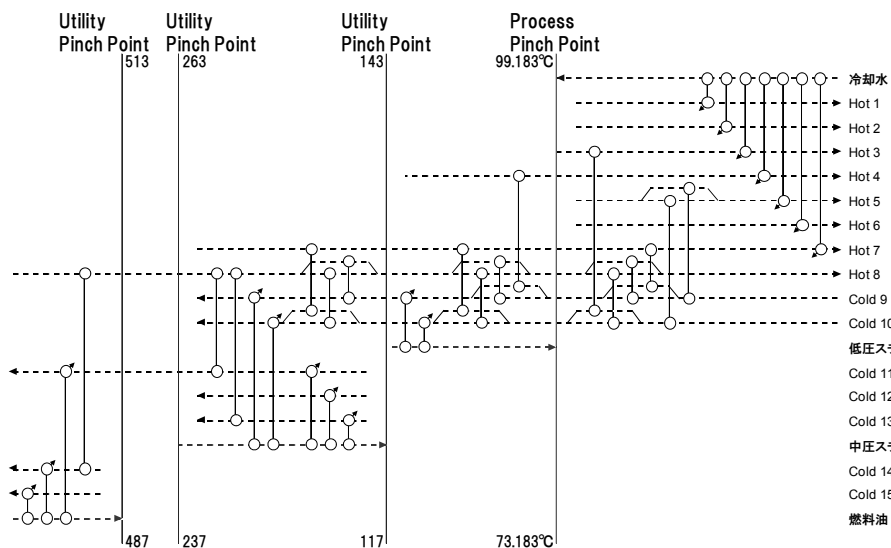


Fig.5 $\Delta T_{min}=26^\circ\text{C}$ と設定したときの性能を達成した熱交換ネットワーク

- ・ 最終的に設計した熱交換ネットワークを Fig.6 に示した。Fig.5 のネットワークと比較すると、スプリット構造が2ヶ所減少し、熱交換器数も5基減少した。これは低压スチームとの熱交換に利用する熱交換器を削減したほか、用役ピンチポイントによる制約を外したことで、各熱交換器に対する熱負荷の移動が柔軟に行えるようになり、同一流体どうしでの熱交換を単純化することができたためである。

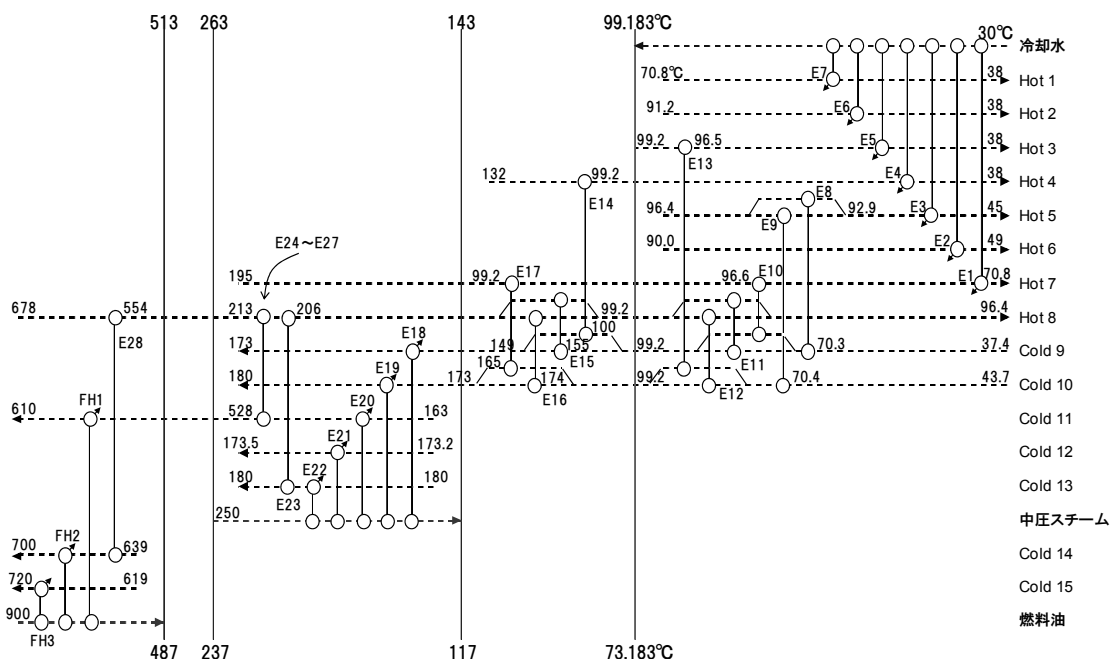


Fig.6 最終的に設計した熱交換ネットワーク

5.3 経済性評価

- ・ 本プロセスでは利益が出ないことがわかった。収益性を改善させるため、スチレン価格を上げることを検討した結果、スチレン価格を 113 円/kg 以上にするだけで 10 年後の NPV が黒字になることが分かった。

1 プロセスフローダイアグラム (PFD) と物質収支

今回の課題である「エチルベンゼンの脱水素によるスチレンモノマーの製造」を Aspen Plus を用いて作成した。設計したプロセスフローダイアグラムを図 1 に示した。

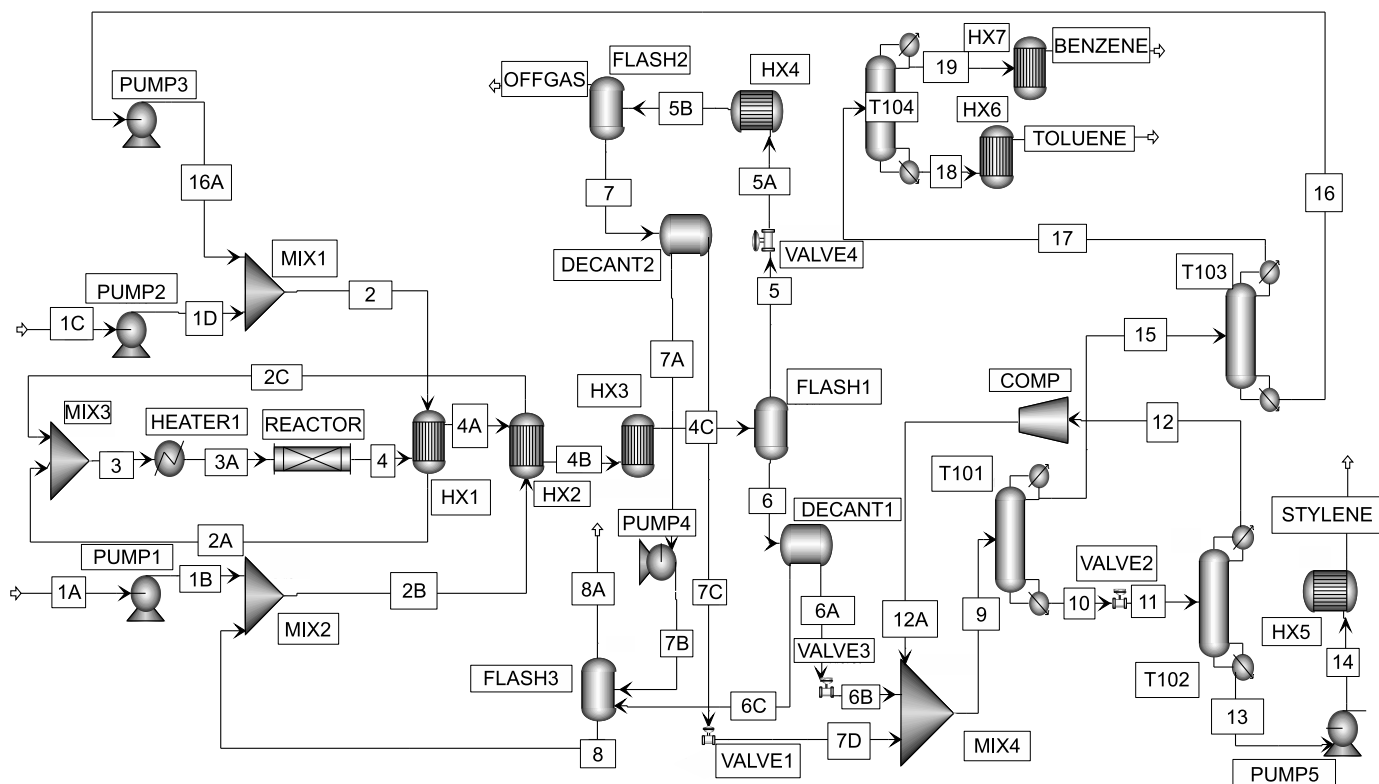


図 1 プロセスフローダイアグラム

図 1 に示したプロセスフローダイアグラムについて、主なストリームのデータを表 1 に示した。また全てのストリームにおける物質収支は末尾の表 11 に示した。

表 1 主なストリームの物質収支

	3A	4	9	11	15	17	OFFGAS	BENZENE	TOLUENE	STYRENE
Temperature C	560	517.95	98.76	97.35	136.1	104.01	38	38	38	38
Pressure bar	5.07	5.07	1.01	0.25	1.01	1.01	4	1.01	1.01	1.01
Vapor Frac	1	1	0	0.24	1	1	1	0	0	0
Mass Flow kg/hr	319589.2	319589.2	182471.12	36323.78	146144.89	1547.89	1680.45	486.45	1061.44	25278.03
Mole Flow kmol/hr										
EB	1605.13	1346.15	1421.84	78.19	1343.64	0.07	1.91	0	0.07	0.55
T	0.06	11.56	11.49	6.71E-07	11.49	11.43	0.07	0.03	11.4	1.58E-16
B	1.32	6.43	6.24	7.02E-15	6.24	6.24	0.18	6.19	0.05	0
S	18.7	261.07	287.77	269.05	18.71	0	0.2	0	0	242.15
H2O	8166.43	8122.97	1.74E-06	9.59E-34	1.74E-06	1.74E-06	2.17	1.74E-06	2.47E-15	0
H2	1.29E-18	307.55	2.62E-07	4.02E-21	2.62E-07	2.62E-07	304.55	2.62E-07	3.71E-35	0
CO2	1.19E-17	21.73	2.56E-07	4.27E-20	2.56E-07	2.56E-07	17.79	2.56E-07	6.05E-34	0
Mole Frac										
EB	0.16	0.13	0.82	0.23	0.97	0	0.01	0	0.01	0
T	5.86E-06	0	0.01	1.93E-09	0.01	0.64	0	0	0.99	6.50E-19
B	0	0	0	2.02E-17	0	0.35	0	1	0	0
S	0	0.03	0.17	0.77	0.01	0	0	0	0	1
H2O	0.83	0.81	1.01E-09	2.76E-35	1.26E-09	9.81E-08	0.01	2.80E-07	2.14E-16	0
H2	1.32E-22	0.03	1.51E-10	1.16E-23	1.90E-10	1.48E-08	0.93	4.21E-08	3.22E-35	0
CO2	1.21E-21	0	1.48E-10	1.23E-22	1.85E-10	1.44E-08	0.05	4.11E-08	5.26E-35	0

2 設備検討に使用する機器のデータ

2.1 設備費

反応器、蒸留塔、熱交換器、加熱炉、圧縮機そしてポンプのデータは、表2から表7に示した。

反応器のコストは、 $Cost[\text{円}] = 2 \times 20,000,000 \times D^{1.066} \times H^{0.82}$ で算出した。ここで、 $D[\text{m}]$ は直径、 $H[\text{m}]$ が長さである。2倍にしているのは、反応器内の触媒体積が、反応器体積の50%のためである。

表2 反応器の形式、直径、長さコスト

機器名	形式	直径 [m]	長さ [m]	コスト [億円]
REACTOR	断熱	2.0	10	5.53

蒸留塔のコストは、 $Cost[\text{円}] = 1,500,000 \times D^{1.066} \times H^{0.82}$ で算出した。ここで、 $D[\text{m}]$ は直径、 $H[\text{m}]$ が長さである。また、塔の直径は、フラッシングが生じないように、 $D = 2\sqrt{\frac{V}{\pi U_{max}}}$ で算出した。ただし、 $U_{max} = K_V \sqrt{\frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_v}}$ である。ここで、 $U_{max}[\text{m/s}]$ が塔内の許容蒸気速度、 $\rho_l[\text{kg/m}^3]$ が溢流液の密度、 $\rho_v[\text{kg/m}^3]$ が上昇蒸気の密度、 K_V が定数、 $V[\text{m}^3/\text{sec}]$ が塔内蒸発上昇量である。今回、バルブトレー蒸留塔を使用することに決めた。PerryのChemical Engineer's Handbookによると、バルブトレーの場合、Souders-Brownの K_V 値に、1.7という係数を掛けることになっている。従って、段間隔60cmの定数、 $K_V = 0.05 \times 1.7 = 0.085$ で算出した。塔頂部は、還流供給・気液分離のため間隔は2mとし、塔底部は、液ホールドアップのため、間隔は4mとする。また、原料供給段の間隔は段間隔に1mを加えるものとする。塔の高さ、 $H[\text{m}] = (\text{段数} \times \text{段間隔}) + 7$ となる。

表3 蒸留塔の理論段数、実段数、直径、高さコスト

機器名	理論段数	実段数	直径 [m]	高さ [m]	コスト [億円]
T101	35.5 段	45 段	8.86	33.6	2.74
T102	35.9 段	45 段	4.60	34.0	1.37
T103	36.3 段	46 段	5.59	34.6	1.71
T104	16.8 段	21 段	1.20	19.6	0.21

熱交換器のコストは、 $Cost[\text{円}] = 1,500,000 \times A^{0.65} \times K$ で算出した。ここで、 $A[\text{m}^2]$ は伝熱面積、交換器の場合定数 $K = 1.0$ である。

表4 熱交換器の伝熱面積、熱交換量、入口出口温度とコスト

機器名	伝熱面積 [m ²]	熱交換量 [MJ/Hr]	高温側の温度 [°C]		低温側の温度 [°C]		コスト [億円]
			入口	出口	入口	出口	
HX1	1092	183107	517	261	121	460	1.41
HX2	2228	364475	262	120	94	189	2.25
HX3	274	63633	120	85	30	45	0.58
HX4	24.9	1777	85	38	30	45	0.12
HX5	31.2	2718	99	38	30	45	0.14
HX6	1.43	143	112	38	30	45	0.019
HX7	0.53	226	80	38	30	45	0.010

加熱炉のコストは、 $Cost[\text{円}] = 10,000,000 \times F^{0.85}$ で算出した。ここで、 $F[\text{kmol/hr}]$ が燃料消費量である。今回の設計では加圧した原料を加熱炉に送り込むという形式を考えたため、熱交換器のコストを加熱炉の一部に入れなかった。

表 5 加熱炉の熱交換量、燃料消費量、入口出口温度とコスト

機器名	熱交換量 [MJ/Hr]	燃料消費量 [Kmol/Hr]	低温側の温度 [°C]		コスト [億円]
			入口	出口	
HEATER1	3508	40.7	348	560	2.33

表 6 圧縮機の所要動力、流量、入口出口圧力とコスト

機器名	所要動力 [kW]	流量 [kg/h]	圧力 [MPa]		コスト [億円]
			入口	出口	
COMP	217	10652	0.0253	0.1013	0.41

圧縮機のコストは、 $Cost[\text{円}] = 500,000 \times Q^{0.82}$ で算出した。ここで、 $Q[\text{kW}]$ が所要動力である。
ポンプのコストは、その他の設備費用に含めるので、単体のコストを求める必要はない。

表 7 ポンプの所要動力、流量と出入り口の圧力

機器名	所要動力 [kW]	流量 [kg/h]	圧力 [MPa]	
			入口	出口
PUMP1	0.212	839	0.3300	0.5066
PUMP2	6.297	27911	0.1013	0.5066
PUMP3	28.496	145891	0.1013	0.5066
PUMP4	0.077	757	0.4000	0.5066
PUMP5	1.121	25287	0.0253	0.1013

2.2 建設費

反応器、蒸留塔、熱交換器、加熱炉、コンプレッサーの設備費からプラント建設に必要な費用を求めた。建設費は、設備費の 5 倍として算出した。

表 8 設備費の合計

機器名	コスト [億円]
反応器	5.53
蒸留塔	6.03
熱交換機	4.53
加熱炉	2.33
圧縮機	0.41
合計	18.83

表 8 より、設備費は 18.83 億円となった。ゆえに建設にかかる費用は 94.15 億円になった。これに保全費用として、プラント建設総費用の 3%/年が必要であるから、次式より保全費用を含んだプラントの建設費用は 113.9 億円となった。

$$7 * (94.15 * 0.03) + 94.15 = 113.9[\text{億円}] \quad (1)$$

3 経済検討の纏め

3.1 原料と製品の流量と価格

原料ならびに製品の流量と価格を以下の表に示す。ここでは原料と水は使用料であることから負の値で示す。また、この章で示した価格は七年間のものである。

表9 原料と製品の流量と価格とその差額

	流量 [kmol/h]	価格 [億円]
原料	263	-1236.76
水	46.16	-0.179
スチレン	242.7	1400
トルエン	11.52	35.31
ベンゼン	6.22	18.88
オフガス	326.87	36.27
合計		254

3.2 用役使用料

熱交換器、蒸留塔、ポンプ、コンプレッサーおよび加熱炉における用役の使用料の合計を表4に示した。

表10 用役の使用料

機器名	使用料 [億円]	
熱交換器	6.59	
ポンプ	0.3	
蒸留塔	リボイラー	197.19
	コンデンサー	29.86
コンプレッサー	1.44	
加熱炉	56.17	
合計	291.55	

3.3 プラントコスト、運転にかかわる費用、プラント収益

プラントの建設にかかる費用は2.2節で示したように113.9億円である。次に運転に関わる費用は3.2節で求めた用役の使用料291.55億円に人件費を加えたものである。ゆえに式(2)により319.55億円となった。

$$291.55 + (4 \times 7) = 319.55[\text{億円}] \quad (2)$$

このようにして求めた建設費、運転費と3.1節に示した製品価格との差がプラントの収益となる。式(3)によってプラントの収益を求めると七年間で178.55億円の損失となった。

$$254 - 113.9 + 319.55 = -178.55[\text{億円}] \quad (3)$$

4 設計結果に至った経緯

4.1 反応器の設計

エチルベンゼンからスチレンを生成する反応は副反応を伴う可逆吸熱反応である。スチレンと水素の物質が増加するに連れて逆反応が進み、スチレンは消費され副反応物のみ生成してしまう。ここで効率的にスチレンを生成する方法は反応率を抑えつつ選択率を上げるものだと考えた。反応率を抑えることで過剰なスチレンを生成させて逆反応を防ぐ狙いがある。また選択率をあげることでスチレンの生成率を上げられるだけでなく、副生成物が生成するときに発生する水素を抑えられる。こうすることでスチレンの逆反応の反応速度を低下させることができる。

こういった考えから反応率を抑えたまま選択率を上げる方法を考察した。まず、Aspen Plus の Sensitive Analysis を用いて反応温度の解析を行った。断熱反応器を使用した場合、入口温度 560 °C が転化率を保ったまま反応率を低くできる限界であった。次に反応器の圧力について考察を行った。反応器を低圧で運転することでルシャトリエの原理から逆反応の反応速度を低下させられる。しかし、減圧することで加熱炉にかかる負荷が大きくなってしまい、費用対効果は得られなかった。また減圧を行い逆反応を停止させるためには、かなり減圧が必要になることがシミュレーションを行った結果より分かった。このことから反応器内での減圧は安全性においても問題があると考えられる。逆に加圧する場合を考える。加圧することで分子の接触率が上がり同体積の反応器においては反応率が高くなってしまふ。ゆえに加圧前と比較して反応器の体積の削減に繋がる。直径 2m、長さ 10m、入り口温度 560 °C の反応器において Sensitive Analysis を用い反応率、選択率、加熱炉にかかる負荷について解析を行った結果、反応器内の圧力は 5atm が適切だと検討した。

反応率の低い状態ではエチルベンゼンを含んだ系を扱う蒸留塔において分離の負荷が大きくなってしまふ。このことから選択率を落とさずに反応率を上げる方法が求められた。そのために、副生成物として発生する水素を除去し、新たに設置した反応器によって反応させる方法である。そうすることで反応率だけではなく選択率も上げることができた。しかし、水素を分離する処理において反応中間物を一度冷却しなければならず、再び反応温度まで加熱するために燃料費がかかってしまふ。反応器間での熱交換を検討したが上がった反応率に見合う効果は生まれなことが分かった。このような考察の結果、反応器は直径 2m、長さ 10m のものを断熱条件で入り口温度 560 °C、5atm で運転するとした。

4.2 加熱炉の設計

今回の設計では加圧した原料を加熱炉に送り込むという形式を考えた。この場合、炭化水素を加熱する危険性は伴うが可燃性物質と空気の混合を防止する対策を行うことで使用できると考えた。熱交換器を用いる場合と比較して、加熱炉を用いることで効率的に転斜熱を使用することができ、また建設コストが安価になるといった点で優れていると考えた。他にも電気やスチームを用いて加熱する方法について検討の余地が残っているが、原料を管を通して加熱炉に送り込むといった方法を選択する。

4.3 蒸留塔の設計

4.1 節に示したように未反応のエチルベンゼンが他の物質に比べて多量に含まれている。このことから蒸留塔においてエチルベンゼンを含む系では段数、運転費ともに大きくなってしまふ。

一本の蒸留塔で製品スペックを満たすためにスチレンの分離を行うには最小理論段数で 107 段となってしまふ。ここでは二本の蒸留塔を用いて蒸留塔間でリサイクルする方法を試みた。手順としては、まず 1 本目の蒸留塔で分離を行い到底で得られたスチレンとエチルベンゼンの混合物を新たに 2 本目の蒸留塔に入れて分離し塔頂から得られる混合物を先の蒸留塔にリサイクルするというものである。1 本目の蒸留塔では、いくらかのエチルベンゼンを含むがスチレンを完全に分離できるように設定し 2 本目の蒸留塔で塔底から得られるスチレンについて製品スペックを満たすように調整を行った。また、分離しきれなかつたスチレンを一本目の蒸留塔へ戻すことによって回収が可能になる。このようにすることによって、一本目の蒸留塔での最小理論段数を 36 段、製品スペックを満たすように分離を行う 2 本目の蒸留塔では最小理論段数を 36 段と二本の和を

とって72段となり、一本で行うときよりも大幅な段数削減に繋がった。蒸留塔の設定は経済的だとされる最小還流比の1.5倍で運転することにした。

今回のプロセスフローにおいては節3.3で示したように七年間で178.55億円という大きな損失となった。このような結果を招いた理由として蒸留塔において段数の削減に成功したものの、リボイラーにかかる負荷を考慮できていなかったことが大きい。

スチレンの熱による重合を防ぐために、スチレンが90mol%以上含まれる系において100℃以下で行わなければならない。今回、提案するプロセスにおいてスチレンが90mol%以上含まれる系は製品スペックを満たすようにエチルベンゼンとスチレンを分離を行う蒸留塔である。1atmにおいてスチレンの沸点は145℃でありエチルベンゼンの沸点は136℃である。このことから分かるように常圧で分離を行ったとき塔底から得られるスチレンの温度は100℃を越えてしまう。ここでは減圧蒸留を用いて、この問題を解決した。

蒸留塔内の圧力を0.25atmにすることによって、スチレンを90mol%以上含む系は99.4℃となり重合を防ぐことができた。また実際の減圧蒸留塔では0.04から0.13atmで運転していることもあり、今回の0.25atmは現実的に適用可能な数値だと考えた。

改良の余地がある部分は以下の点である。今回は重合防止のために減圧蒸留を行ったが、水蒸気蒸留を行うことでも100℃以下で分離の可能性がある。ここで分離に使用するスチームであるが、これは反応器に流すものを使用することでコストをかけずに運用できると考えられる。また生成物とスチームの分離であるが、製品温度に冷却した後にデカンターを使用することで製品スペックまで分離が可能だと考えた。

4.4 設計において検討した点

この節では、設計をするにあたり工夫した点は以下の通りである。また数値の決定においては、Sensitive Analysisを用いて決定した。

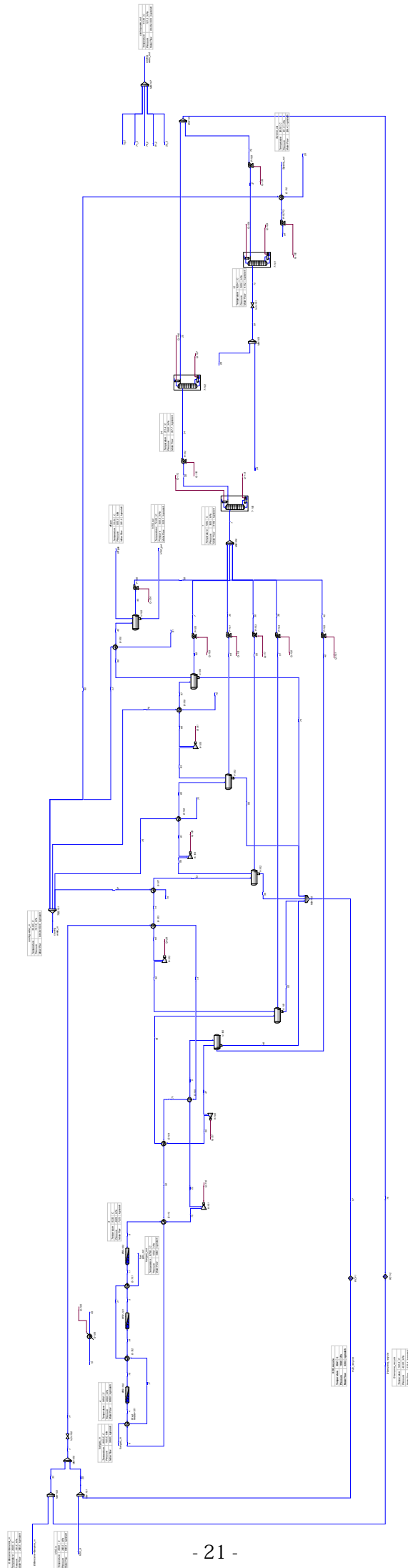
今回のプロセス設計は、反応における反応率を抑えたまま選択率を上げる方法を検討した。まず、Aspen PlusのSensitive Analysisを用いて反応温度の解析を行った。次に反応器の圧力について考察を行った。反応器を低圧で運転することでルシャトリエの原理から逆反応の反応速度を低下させられる。しかし、減圧することで加熱炉にかかる負荷が大きくなってしまい、費用対効果は得られなかった。逆に加圧する場合を考える。加圧することで分子の接触率が上がり同体積の反応器においては反応率が高くなってしまう。直径2m、長さ10m、入口温度560℃の反応器においてSensitive Analysisを用い反応率、選択率、加熱炉にかかる負荷について解析を行った結果、反応器内の圧力は5atmが適切だと検討した。

熱交換器を用いる場合と比較して、加熱炉を用いることで効率的に転斜熱を使用することができ、また建設コストが安価になるといった点で優れていると考えた。

未反応のエチルベンゼンが他の物質に比べて多量に含まれている。このことから蒸留塔においてエチルベンゼンを含む系では段数、運転費ともに大きくなってしまう。

蒸留において、一本の蒸留塔で製品スペックを満たすためにスチレンの分離を行うには最小理論段数で107段となってしまった。ここでは二本の蒸留塔を用いて蒸留塔間でリサイクルする方法を試みた。このようにすることによって、蒸留塔のリサイクルは一本で行うときよりも大幅な段数削減に繋がった。また、蒸留塔内の圧力を0.25atmにすることによって、スチレンを90mol%以上含む系は99.4℃となり重合を防ぐことができた。また実際の減圧蒸留塔では0.04から0.13atmで運転していることもあり、今回の0.25atmは現実的に適用可能な数値だと考えた。

反応中間物からオフガスを分離する際に、一旦反応中間物を冷却しなければならない。反応中間物と原料との間で熱リサイクルを十分行っても、反応中間物の温度を目標値まで下げることができない。反応中間物の流量が大きいため、多量の冷却水を使用しなければならない。そこで、熱リサイクルを行った反応中間物の気液分離を熱いまま行い、次に分離した気体を冷却水で目標の温度に下げることにした。このように二段階の気液分離を行うことにより、使用冷却水の量を半分以下に削減することができた。



2. 物質収支 Stream-Data-Table

	圧力 kPa	温度 °C	流量		kmol/h	組成						液化 率	
			kg/h	kg/h		エチルベンゼン	スチレン	ベンゼン	トルエン	水	二酸化炭素		水素
E-Benzene+Benzene_in	101.3	30.00	3.711E+04		350.0	0.995000	0.000000	0.005000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
H2O_in	300.0	30.00	1.081E+04		600.0	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
off-gas	500.0	70.00	2195		381.0	0.013915	0.004949	0.004338	0.002948	0.063673	0.004192	0.905986	1.000
Styrene_out	101.3	38.00	3.535E+04		339.4	0.002000	0.998000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000
H2O_out	500.0	70.00	9964		553.1	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.999997	0.000001	0.000001	0.000
cooling water_in	101.3	30.00	1.521E+06		8.443E+04	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000	0.000
cooling water_out	101.3	44.35	1.521E+06		8.443E+04	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000	0.000
fuel gas_in	100.0	900.0	1.765E+05		5880	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.538462	0.461538	0.000000	1.000
fuel gas_out	100.0	676.6	1.765E+05		5880	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.538462	0.461538	0.000000	1.000

3. 本課題の設備検討にかかわる機器データの表

1) 反応器

機器名	形式	直径	長さ	コスト
		m	m	¥
PFR-100	断熱	5	10	¥734,737,185
PFR-101	断熱	5	10	¥734,737,185
PFR-102	断熱	5	10	¥734,737,185

2) 蒸留塔

機器名	理論段数	実段数	直径	高さ	コスト
			m	m	¥
T-100	55	85	1.5	56.8	¥63,441,023
T-101	76	80	1.5	53.8	¥60,680,061
T-102	67	90	1.5	59.8	¥66,175,848

3) 熱交換器

機器名	熱交換量 MJ/Hr	伝熱面積 m ²	高温側		低温側		コスト ¥
			温度(入口)	温度(出口)	温度(入口)	温度(出口)	
			°C	°C	°C	°C	
E-100	33350	164.3	128	70	30	45	¥41,326,591
E-101	17030	145.9	738	677	526	560	¥38,256,649
E-102	11630	76.9	780	738	537	560	¥25,226,466
E-103	48360	149.8	138	119	68	68	¥38,917,789
E-104	105300	356.5	148	109	70	72	¥68,382,267
E-105	107400	290.5	220	93	68	70	¥59,865,733
E-107	38490	134.8	119	115	30	45	¥36,341,900
E-108	12140	36.9	138	121	30	45	¥15,653,961
E-109	715.8	2.1	140	128	30	45	¥2,406,127
E-110	3487	229.4	93	38	30	37	¥51,342,973
T-100	コンデンサー	196300	6.7	240	211		¥5,164,638
	リボイラー	223300	6.7	257	257		¥10,329,276
T-101	コンデンサー	74060	6.7	86	86		¥5,164,638
	リボイラー	58370	6.7	93	93		¥10,329,276
T-102	コンデンサー	116500	6.7	240	210		¥5,164,638
	リボイラー	116500	6.7	253	254		¥10,329,276

4) 加熱炉

機器名	熱交換量 MJ/Hr	伝熱面積 m ²	燃料消費量 kmol	温度(入口) °C	温度(出口) °C	燃料ガスの温度 °C	コスト ¥
FH-101	31460	153.13	452.32	490	560	780	¥1,847,199,942

5) 圧縮機

機器名	所要動力 kW	流量 kmol/h	入口圧力 MPa	出口圧力 MPa	コスト ¥
K-100	4715	5779	0.1	0.2	¥514,310,032
K-101	8945	7223	0.04	0.1	¥869,492,594
K-103	1670	3467	0.2	0.3	¥219,582,391
K-104	479.5	1387	0.3	0.4	¥78,925,377
K-105	300.8	1109	0.4	0.5	¥53,846,543

6) ポンプ

機器名	所要動力 kW	流量 kmol/h	入口圧力 MPa	出口圧力 MPa
P-100	0.02525	1.03	0.5	1
P-101	1.925	65.92	0.4	1
P-103	16.52	487.7	0.3	1
P-104	7.219	187.8	0.2	1
P-106	4.006	174.3	0.5	1
P-107	1.267	339.4	0.02	0.1013
P-109	0.06841	70.8	0.02	0.04

4. 経済検討の纏め

1) 原料と製品の流量と価格

	単価[¥/kg]	量[kg/h]	価格[¥/h]	価格[¥/year]
原料	80	37109	¥2,968,720	¥23,512,263,749
原料水(補充)	5	10809	¥54,045	¥428,038,787
製品 スチレン	100	35349	¥3,534,854	¥27,996,046,035
オフガス	15	32036	¥480,544	¥3,805,905,050

2) 用役使用料

加圧 100atm 高圧スチーム

機器名	使用量[kJ/h]	使用量[MJ/h]	単価[¥/MJ]	使用料[¥/h]	使用料[¥/year]
T-100	223286917.7	223287	4	¥893,148	¥7,073,729,552
T-102	116534891.7	116535	4	¥466,140	¥3,691,825,368
				小計	¥10,765,554,920

加熱用飽和低压スチーム (130℃)

機器名	使用量[kJ/h]	使用量[MJ/h]	単価[¥/MJ]	使用料[¥/h]	使用料[¥/year]
T-101	58374802	58375	1	¥58,375	¥462,328,436
				小計	¥462,328,436

燃料油

機器名	使用量[kg/h]	単価[¥/kg]	使用料[¥/h]	使用料[¥/year]
FH-101	38900	30	¥1,166,993	¥9,242,584,748
			小計	¥9,242,584,748

冷却水

機器名	使用量[kg/h]	使用量[ton/h]	単価[¥/ton]	使用料[¥/h]	使用料[¥/year]
E-100	550429	550	10	¥5,504	¥43,593,987
E-107	635159	635	10	¥6,352	¥50,304,560
E-108	200403	200	10	¥2,004	¥15,871,904
E-109	11813	12	10	¥118	¥935,618
E-110	123292	123	10	¥1,233	¥9,764,723
				小計	¥120,470,792

電力

機器名	使用量[kW/h]	単価[¥/kW]	使用料[¥/h]	使用料[¥/year]
K-100	4715	15	¥70,726	¥560,152,571
K-101	8945	15	¥134,176	¥1,062,670,103
K-103	1670	15	¥25,049	¥198,384,915
K-104	479	15	¥7,192	¥56,962,131
K-105	301	15	¥4,512	¥35,735,211
			小計	¥1,913,904,931

3) プラントコスト、運転にかかわる費用、プラント収益
プラントコスト

	費用
熱交換器	¥377,720,455
コンデンサー	¥15,493,914
リボイラー	¥30,987,828
加熱炉	¥1,847,199,942
蒸留塔	¥190,296,931
反応器	¥2,204,211,556
コンプレッサー	¥1,736,156,938
その他	¥6,402,067,564
小計	¥12,804,135,127
建設総費	¥32,010,337,818
年間	¥4,572,905,403

運転に関わる費用

	費用
保全費	¥960,310,135
人件費	¥400,000,000
小計	¥1,360,310,135

プラント収益

¥-20,576,410,816

5. 今回の設計結果に至った経緯

反応工程

トルエンとベンゼンをあまり生成せず、スチレンを可能な限り生成するために以下の事柄に関して検討を行った。

1. 反応器の体積は同じで、長さとお数を変えた場合

- ・直径 5m、長さ 20m の反応器を 1 個
- ・直径 5m、長さ 10m の反応器を 2 個
- ・直径 5m、長さ 5m の反応器を 4 個
- ・直径 5m、長さ 4m の反応器を 5 個

にかえた場合の、製品の生成量に関して検討を行った。

2. 反応器 1 個当たりの体積(直径 5m、長さ 10m)は同じで、お数を変えた場合

- ・直径 5m、長さ 10m の反応器 1 個
- ・直径 5m、長さ 10m の反応器 2 個
- ・直径 5m、長さ 10m の反応器 3 個
- ・直径 5m、長さ 10m の反応器 4 個

にかえた場合の、製品 (スチレン) 生成量と反応器のお数とコストの変化に関して検討を行った。

3. 反応器 (1 個、直径 5m、長さ 10m) の入口温度を変えた場合のスチレンの生成量に関して検討を行った。

4. 反応器 (2 個、直径 5m、長さ 10m) の反応器と反応器の間で熱を加えた場合

- ・1 個目の反応器入口温度
- ・2 個目の反応器入口温度

をそれぞれ変化させた場合の、製品 (スチレン) 生成量と燃料油の消費量、加熱炉と熱交換器に関するコストについて検討を行った。

5. 反応器 (3 個、直径 5m、長さ 10m) の反応器と反応器の間で熱を加えた場合

- ・1 個目の反応器入口温度
- ・2 個目の反応器入口温度
- ・3 個目の反応器入口温度

をそれぞれ変化させた場合の、製品 (スチレン) 生成量と燃料油の消費量、加熱炉と熱交換器に関するコストについて検討を行った。

分離工程

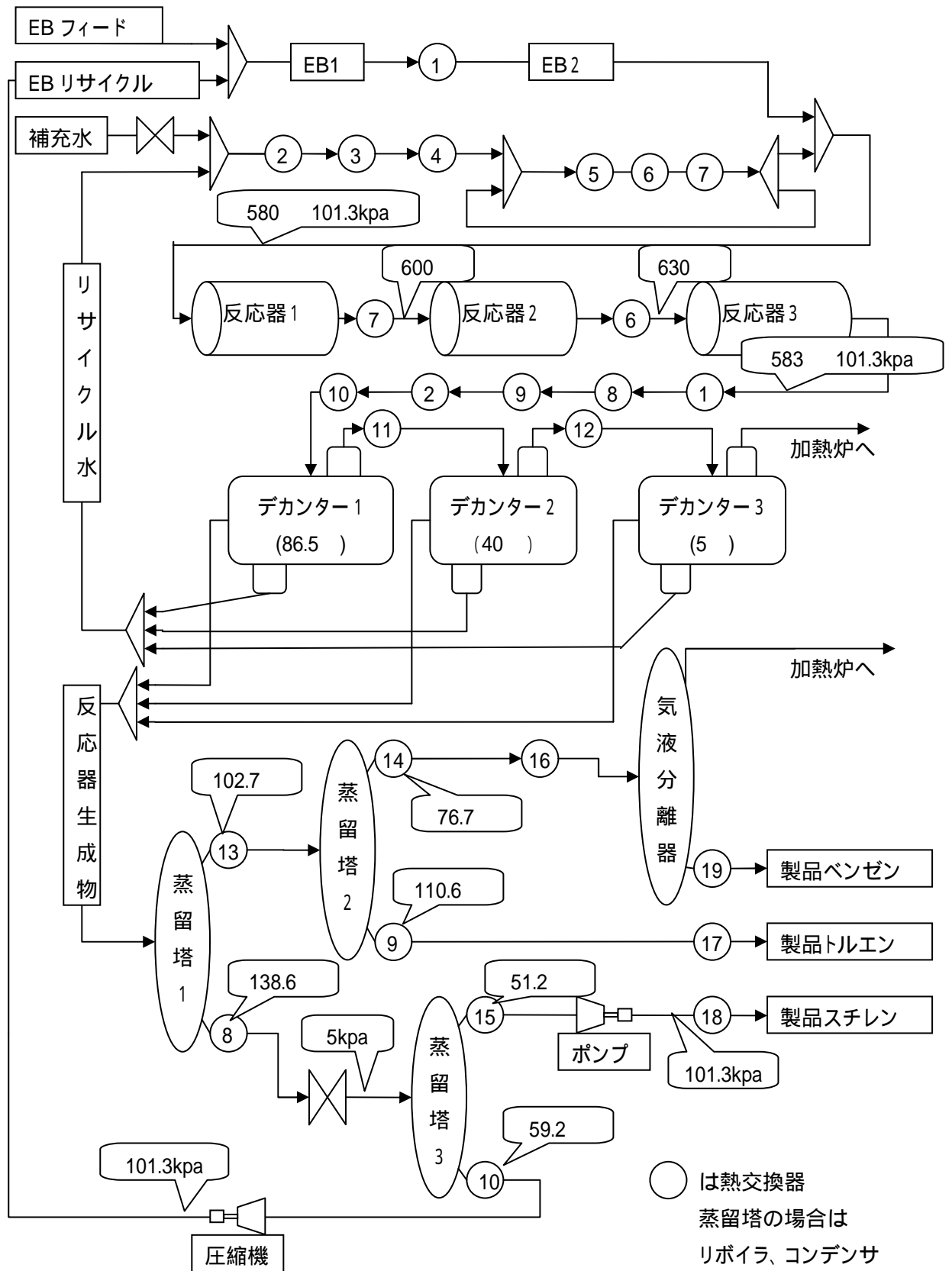
反応工程でトルエンとベンゼンをあまり生成しなかったので、

- ・ スチレン
- ・ H₂O
- ・ 排ガス（主に水素）

に分離するために以下の事柄に関して検討を行った。

1. 反応器から出てきたものをスチレン， H₂O， 排ガスに分類するために圧縮、冷却する。
その際、圧力を一度に加えるか、何度かに分けて加えるかということについて検討を行った。
2. スチレンを 90mol%以上含む系が 100degC 以下になるように、蒸留塔について検討を行った。

1.PFD



2. 物質収支 Stream-Data-Table

Name	EBフィード	EBリサイクル	EB1	EB2
Pressure [kPa]	101.3	101.3	101.3	101.3
Temp []	30.0	136.0	135.8	560.0
Molar Flow [kmol/h]	274.14	285.86	560.00	560.00
Mass Flow [kg/h]	29066	30272	59338	59338
VaporFraction	0.000	0.936	0.178	1.000
Molar Fraction (E-Benzene)	0.995	0.961	0.978	0.978
Molar Fraction (Stylene)	0.000	0.023	0.012	0.012
Molar Fraction (Toluene)	0.000	0.016	0.008	0.008
Molar Fraction (Benzene)	0.005	0.000	0.002	0.002

Name	補充水	リサイクル水
Pressure [kPa]	300.0	101.3
Temp []	30.0	64.6
Molar Flow [kmol/h]	77.30	2722.70
Mass Flow [kg/h]	1393	49059
Molar Fraction (H2O)	1.000	1.000

Name	反応器1入口	反応器2入口	反応器3入口	反応器3出口
Pressure [kPa]	101.3	101.3	101.3	101.3
Temp []	579.9	600.0	630.0	583.2
Molar Flow [kmol/h]	3360.00	3446.04	3550.87	3676.26
Mass Flow [kg/h]	109789	109790	109790	109790
VaporFraction	1.000	1.000	1.000	1.000
Molar Fraction (Hydrogen)	0.000	0.027	0.059	0.096
Molar Fraction (E-Benzene)	0.163	0.136	0.106	0.075
Molar Fraction (Stylene)	0.002	0.023	0.046	0.068
Molar Fraction (Toluene)	0.001	0.002	0.004	0.007
Molar Fraction (Benzene)	0.000	0.001	0.002	0.003
Molar Fraction (H2O)	0.833	0.809	0.779	0.741

Name	デカンター1油相	デカンター2油相	デカンター3油相	デカンター1水相	デカンター2水相	デカンター3水相
Pressure [kPa]	101.3	101.3	101.3	101.3	101.3	101.3
Temp []	86.5	40.0	5.0	86.5	40.0	5.0
Molar Flow [kmol/h]	136.78	410.57	11.03	1461.72	1232.48	28.41
Mass Flow [kg/h]	14318	42697	1126	26338	22208	512
VaporFraction	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Molar Fraction (E-Benzene)	0.460	0.505	0.517	0.000	0.000	0.000
Molar Fraction (Stylene)	0.514	0.426	0.313	0.000	0.000	0.000
Molar Fraction (Toluene)	0.021	0.048	0.105	0.000	0.000	0.000
Molar Fraction (Benzene)	0.005	0.019	0.064	0.000	0.000	0.000
Molar Fraction (H2O)	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000

Name	デカンター1気相	デカンター2気相	デカンター3気相	反応器生成物	蒸留塔1留出液	蒸留塔1缶出液
Pressure [kPa]	101.3	101.3	101.3	101.3	101.3	101.3
Temp []	40.0	5.0	5.0	51.2	102.7	138.6
Molar Flow [kmol/h]	2077.77	434.71	395.28	558.37	29.16	529.21
Mass Flow [kg/h]	69134	4229	2591	58141	2524	55617
VaporFraction	0.209	0.909	1.000	0.000	1.000	0.000
Molar Fraction (Hydrogen)	0.170	0.812	0.893	0.000	0.006	0.000
Molar Fraction (E-Benzene)	0.103	0.015	0.002	0.494	0.003	0.521
Molar Fraction (Stylene)	0.086	0.009	0.001	0.445	0.000	0.470
Molar Fraction (Toluene)	0.010	0.004	0.001	0.043	0.660	0.009
Molar Fraction (Benzene)	0.004	0.003	0.002	0.017	0.316	0.000
Molar Fraction (H2O)	0.608	0.073	0.009	0.000	0.000	0.000

Name	蒸留塔2留出液	蒸留塔2缶出液	蒸留塔3留出液	蒸留塔3缶出液	気液分離器気相	気液分離器液相
Pressure [kPa]	101.3	101.3	5.0	5.0	101.3	101.3
Temp []	76.7	110.6	51.2	59.2	44.0	44.0
Molar Flow [kmol/h]	9.75	19.41	286.71	242.50	0.77	8.98
Mass Flow [kg/h]	735	1789	30359	25258	35	700
VaporFraction	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.000
Molar Fraction (Hydrogen)	0.017	0.000	0.000	0.000	0.214	0.000
Molar Fraction (E-Benzene)	0.000	0.005	0.960	0.002	0.000	0.000
Molar Fraction (Stylene)	0.000	0.000	0.023	0.998	0.000	0.000
Molar Fraction (Toluene)	0.000	0.992	0.016	0.000	0.000	0.000
Molar Fraction (Benzene)	0.939	0.003	0.000	0.000	0.293	0.995
Molar Fraction (H2O)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Name	製品スチレン	製品ベンゼン	製品トルエン
Pressure [kPa]	101.3	101.3	101.3
Temp []	38.0	38.0	38.0
Molar Flow [kmol/h]	242.50	8.98	19.41
Mass Flow [kg/h]	25258	700	1789
VaporFraction	0.000	0.000	0.000
Molar Fraction (E-Benzene)	0.002	0.000	0.005
Molar Fraction (Stylene)	0.998	0.000	0.000
Molar Fraction (Toluene)	0.000	0.000	0.992
Molar Fraction (Benzene)	0.000	0.995	0.003

3. 本課題の設備費検討にかかわる機器のデータ

3.1 反応器

表 3.1 反応器の設計

機器番号	反応器 1	反応器 2	反応器 3
形式	断熱	断熱	断熱
直径 [m]	2.3	2.3	2.3
長さ [m]	5	6.6	8.5
年間コスト [億円]	1.30	1.63	2.01

3.2 蒸留塔

表 3.2 蒸留塔の設計

機器番号	蒸留塔 1	蒸留塔 2	蒸留塔 3
理論段数	30	20	48
実段数	38	25	60
直径 [m]	3.07	0.88	10.1
高さ [m]	29.8	22	43
年間コスト [億円]	0.57	0.12	2.75

3.3 熱交換器

表 3.3 熱交換器の設計

機器番号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
熱交換量 [MJ/h]	72650	22436	62350	90170	35290	19980	15310	20070	1356	66520
伝熱面積 [m ²]	1034	470	385	510	477	193	280	91	7	385
与熱入口温度 []	583.2	202.7	130.0	711.9	898.4	796.0	691.3	299.0	209.1	91.8
与熱出口温度 []	299.0	91.8	130.0	200.0	711.9	691.3	609.1	209.1	205.7	86.2
受熱入口温度 []	135.8	63.6	100.0	100.0	609.0	557.7	544.0	138.6	110.6	51.2
受熱出口温度 []	560.0	100.0	100.0	609.0	796.0	630.0	579.9	138.6	110.6	51.2
年間コスト [億円]	0.98	0.58	0.51	0.62	0.59	0.33	0.42	0.20	0.04	0.51

機器番号	11	12	13	14	15	16	17	18	19
熱交換量 [MJ/h]	89180	2214	9714	2000	64100	317	7	239	959
伝熱面積 [m ²]	729	36	42	14	1459	62	4	28	294
与熱入口温度 []	86.7	40.0	102.7	76.7	59.2	76.7	110.6	59.3	44.0
与熱出口温度 []	40.0	5.0	102.7	76.7	59.2	44.0	38.0	38.0	38.0
受熱入口温度 []	30.0	0.0	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0
受熱出口温度 []	45.0	0.0	45.0	45.0	45.0	45.0	45.0	45.0	40.0
年間コスト [億円]	0.78	0.11	0.12	0.06	1.22	0.16	0.02	0.09	0.43

3.4 加熱炉

表 3.4 加熱炉の設計

機器名	加熱炉
燃料消費量 [kg/h]	2772
燃焼ガス出口温度 []	200
年間コスト [億円]	2.16

なお、加熱炉からの燃焼ガスによる熱交換器の熱交換量、想定した伝熱面積、低温側の入口出口温度については、3.3 に記してある。

3.5 圧縮機・ポンプ

表 3.5 圧縮機の設計

機器名	圧縮器
所要動力 [kW]	851.4
流量 [kg/h]	30270
入口圧力 [MPa]	0.005
出口圧力 [MPa]	0.1013
年間コスト [億円]	0.90

表 3.5 ポンプの設計

機器名	ポンプ
所要動力 [kW]	1.0
流量 [kg/h]	25260
入口圧力 [MPa]	0.005
出口圧力 [MPa]	0.1013

4.経済検討

4.1 原料と製品

表 4.1 原料と製品の流量・コスト

	原料		製品		
	EB	水	スチレン	ベンゼン	トルエン
流量 [kg]	29066	1393	25258	700	1789
年間総額 [億円]	1841.62	5.52	2000.43	38.81	85.01

4.2 用役使用量

表 4.2.1 各用役の使用量

機器番号・機器名	3	12	11	13	14	15
用役名	130 ｽｰﾑ	冷媒	水	水	水	水
用役使用量	62350 MJ/h	2214 MJ/h	1200 t/h	153 t/h	31 t/h	1010 t/h

機器番号・機器名	17	18	19	加熱炉	圧縮機	ポンプ
用役名	水	水	水	燃料	電力	電力
用役使用量	15 t/h	4 t/h	0.2 t/h	2772 kg/h	851 kW/h	1 kW/h

表 4.2.2 各用役の総和

用役名	使用量		年間コスト [億円]
130 ｽｰﾑ	62350	MJ/h	4.94
冷媒	2214	MJ/h	0.14
水	2414	t/h	1.91
燃料	2772	kg/h	6.59
電力	852	kW/h	1.01

4.3 コスト

表 4.3 コスト・収益

プラントコスト [億円]	19.22
運転コスト [億円]	保全費用
	人件費
	用役費
プラント収益 [億円]	-10.67

5. 今回の設計結果に至った経緯

反応工程

スチーム流量を変化させることにより炭化水素成分分圧を変化させ、平衡を移動させることができる。しかし、スチームの加熱に多くの熱量が必要なため、スチーム流量は炭化水素成分の5倍で固定し、全圧を操作することで炭化水素成分分圧を変更することにした。

反応器の運転圧力について検討を行った結果、圧力を上げると反応器コストは小さくなるが、スチレン選択率が下がるため、粗益が減少する。また、圧力を下げるとスチレン選択率は上がるものの、反応器コストが増大してしまう。結果として、運転圧力の変化に対する経済性の変化は小さく、ポンプやバルブ等のコストを考慮して常圧（1気圧）での運転を選択した。

反応器の形式について多管式熱交換反応器、断熱反応器に対して検討を行った。

- ・多管式熱交換反応器では、反応器入口温度を低く、反応器出口温度を高く設定することにより、副反応の進行を抑え、かつ反応率を上げることができる。しかし、反応器自体で熱交換を行う場合、熱安定性により細管の直径が決定し、また反応器体積により、熱交換面積が決定してしまう。これに基づくと、熱交換面積がきわめて大きくなり、コスト面で不利になってしまう。よって今回の課題には不適と判断した。
- ・断熱式反応器では、反応が吸熱の平衡反応であるため、反応の進行とともに温度が低下し、反応速度が落ちてしまう。そのために、反応器を分割し、途中で熱交換器を設置して温度を上げ、反応を進行させることとした。
- ・断熱式反応器の設計に対しては、2段式、3段式、4段式で検討を行った。それぞれ、1段あたりのスチレン生成量を同じにして計算を行ったため、各段における最適な入口温度を独立して求めることができた。

結果として、反応器は、3段型断熱反応器、常圧運転、入口温度は1段目580、2段目600、3段目630と決定した。

分離工程

デカンターの設計

炭化水素成分、オフガス（主にCO₂とH₂）、水を分離するために、冷却してデカンターで三相を一度に分離することにした。しかし、水の沸点ぎりぎりの温度では気相成分に炭化水素が流出してしまう。また、十分温度を下げた場合、再加熱に必要な熱量が増大するため、温度を順次下げ、86.5、40、5の三段階で冷却を行った。

蒸留塔の設計

製品スチレンで要求される濃度は非常に高濃度であり重合の影響を考慮して蒸留をしなければならぬため、減圧することによって塔内温度を重合が起こらない程度に抑えた。各蒸留塔において、還流比を最小還流比の 1.3 倍として設計している。また、第 3 塔の塔内圧力に対するコスト変化が大きく支配的であると考え、圧力を変化させて最適化を行った。

結果として、蒸留塔第 3 塔は圧力が 5kPa と決定した。

熱交換

この反応では反応前、ならびに反応途中の流体を 500 以上に加熱する必要がある。今回の課題では外部から導入するスチームは最高温度 500 のものしか与えられていないので、発生する水素と分離しきれなかった炭化水素、燃料（ヘキサン）を燃焼させる加熱炉を建設し、熱を供給することとした。

熱交換の設計方針は以下のようにした。

加熱炉について

- ・発生したガスと流体との最小接近温度差は 100 以上を確保する。したがって加熱炉での受熱流体の最高温度は 800 とする。
- ・加熱炉に送り込む流体はスチームだけとする。
- ・熱交換した後の発生ガスは、そのうちの 60% を燃焼用空気に混ぜて熱を再利用する。

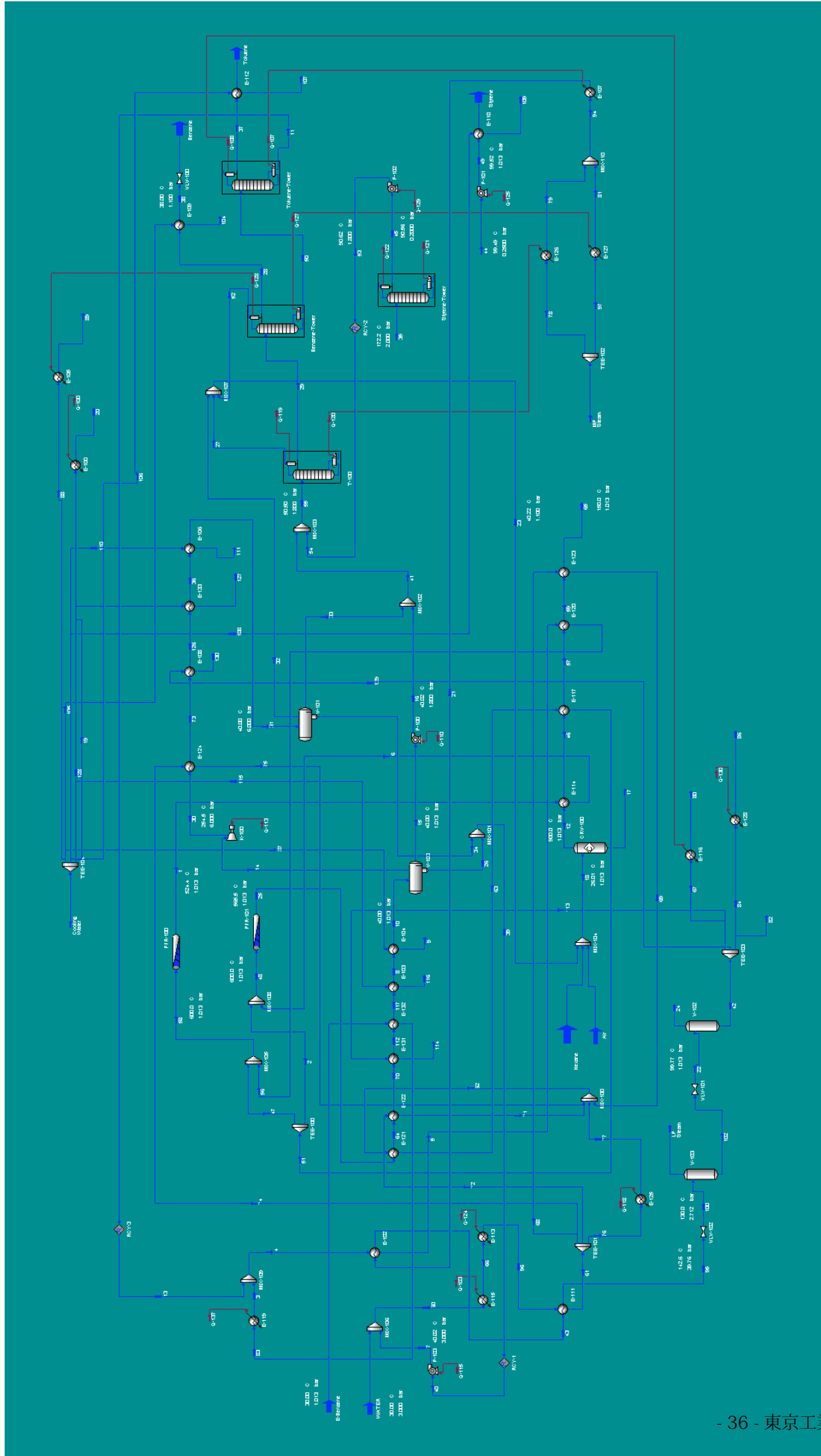
原料の加熱について

- ・加熱炉にはスチームのみしか投入できないので、原料 EB と水は別々に加熱し、反応器の直前で混合する。
- ・原料エチルベンゼンは反応後流体との熱交換により 560 まで加熱される。
- ・加熱炉で発生した 800 スチームはまず反応途中の流体の加熱に用い、その後、一部を原料フィードとして用い、残りは再び加熱炉にリサイクルされる。
- ・反応後流体、加熱炉での加熱で不足する熱量は 130 スチームを用いて供給する。

反応後流体について

- ・反応後流体はまず原料エチルベンゼンの加熱に用い、次に蒸留塔（第 1 塔、第 2 塔）のリボイラ - 加熱用のフィードに用いる。その後、原料水の加熱に用い、潜熱を用いて蒸留塔の第 3 塔のリボイラ - の加熱を行った後、デカンターへ送られる。

今回の課題では熱交換コストが高く設定されているため、極端に熱交換量が少ない熱交換器は省略した。その方が 130 スチームの使用量は増加するが、全体のコストは低くなった。



Stream	E-Benzene	Water	Styrene	Benzene	Toluene	Air	MP Steam	LP Steam	Cracking	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25		
Vapour Fraction	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Vapour Temperature [°C]	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	33	
Pressure [bar]	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	
Mass Flow [kg/h]	28.20	91.18	182.37	253.83	345.15	436.47	527.80	619.13	710.46	801.79	893.12	984.45	1075.78	1167.11	1258.44	1349.77	1441.10	1532.43	1623.76	1715.09	1806.42	1897.75	1989.08	2080.41	2171.74	2263.07	2354.40	2445.73	2537.06	2628.39	2719.72	2811.05	2902.38	2993.71	3085.04	
Mole Fraction S	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
Mole Fraction EB	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Mole Fraction H2O	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Mole Fraction CO2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Mole Fraction N2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Mole Fraction Hexane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	

4 経済検討

		使用量	単価	/h	/day	/year	
1) 原料	EB	28520.919		80	2281673.5	54760164	¥18,070,854,138
	Water	1182.7507		5	5913.7534	141930.08	¥46,836,927
						合計	¥18,117,691,065
		生産量	単価	/h	/day	/year	
製品	S	25287.978		100	2528797.8	60691148	¥20,028,078,776
	B	535.15441		70	37460.809	899059.42	¥296,689,607
	T	1478.342		60	88700.517	2128812.4	¥702,508,099
Utility(送出)	LP Steam	1736		0.5	868	20832	¥6,874,560
						合計	¥21,027,276,482
2) 燃料	ヘキサン	3816		30	114480	2747520	¥906,681,600
	Utility	MP Steam	134400	1.4	188160	4515840	¥1,490,227,200
		Cooling Wa	452.9	10	4529	108696	¥35,869,680
	電力		831.1854	15	12467.781	299226.74	¥98,744,826
						合計	¥2,531,523,306
3) 建設費	①~⑤の合計		⑥				
	¥3,554,455,595		¥3,554,455,596				
						総額	¥17,772,277,973
						保全費用	¥533,168,339
						人件費	¥400,000,000
				年間収益	1~7年目	¥-3,094,003,081	
					8年目以降	¥-555,106,228	
運転費用							

1) 反応器					
機器名	形式	直径 [m]	長さ [m]	コスト	
PFR-100	断熱	5.884	5.884	¥565,760,522	
PFR-101	断熱	5.346	5.346	¥472,163,709	

2) 蒸留塔					
機器名	段数 [段]	供給段 [段]	直径 [m]	高さ [m]	コスト
T-100	50	28	7.2	32.8	¥330,898,956
Benzene-Tower	45	16	1.77	35.8	¥80,933,373
Toluene-Tower	30	20	2.31	23.8	¥71,464,842
Styrene-Tower	40	8	7.2	29.8	¥300,633,807

3) 熱交換器							
機器名	交換熱量	伝熱面積	高温側 [°C]		低温側 [°C]		コスト
			入口	出口	入口	出口	
E-102	21.35	177.321916	215.3	145.4	135.9	136.3	¥43,429,700
E-103	0.7609	18.221779	97.24	94.14	30	45	¥9,896,355
E-104	218.1	1460.12493	94.14	40	30	45	¥170,979,786
E-106	1.991	24.3136291	79.32	40	30	45	¥11,936,957
E-108	0.4801	11.2925329	145.1	110	99.77	99.78	¥7,251,129
E-109	0.01947	1.64462703	59.32	38	30	45	¥2,072,693
E-110	2.794	104.63295	99.52	38	30	45	¥30,823,061
E-111	0.8115	91.1556937	145.4	142.6	130.4	132.9	¥28,180,632
E-112	0.1971	6.44528291	110.6	38	30	45	¥5,036,149
E-114	22.01	103.033838	900	818.4	524.4	600.2	¥30,516,040
E-117	12	72.1798572	818.4	773.5	529.3	600	¥24,213,729
E-120	65.99	369.079427	773.5	520.7	136.3	600.8	¥69,938,957
E-121	62.71	826.635854	565.5	372.1	133.4	529.3	¥118,126,004
E-122	61.68	371.419676	372.1	154.2	132.9	133.4	¥70,226,892
E-123	91.36	421.853389	520.7	150	132.9	133.4	¥76,286,249
E-124	1.541	18.0130597	254.5	145.1	132.9	133.4	¥9,822,525
E-131	11.24	234.765672	154.2	110	99.77	99.78	¥52,119,921
E-132	3.161	114.477326	110	97.24	30	90	¥32,678,260
E-133	0.4203	10.2439594	110	79.32	30	45	¥6,806,054
E-127	7.109	13.0542993	250	250	148.8	149.5	¥15,935,330
E-105	4.159	35.0573581	81.98	59.19	30	45	¥15,142,505
E-107	11.92	39.9538428	250	215.3	150.8	151.2	¥32,971,167
E-116	11.92	201.466597	110.8	110.6	99.77	99.78	¥47,187,095
E-101	54.8	337.017329	136.8	119.9	99.48	99.49	¥131,854,576
E-100	45.99	241.346579	90.98	90.56	30	45	¥53,064,980
E-115	12.09	123.111961	90.98	90.56	39.86	78.48	¥34,259,926
E-125	14.13	218.838384	147.6	142.9	139.2	133.4	¥49,793,372
E-113	16.57	153.831357	142.9	137.4	78.48	130.4	¥39,597,742
E-119	1.577	13.8356828	137.4	136.8	90	117.2	¥8,274,498
E-128	29.54	378.394438	119.9	109.8	99.77	99.78	¥71,081,297

4) 加熱炉		
機器名	燃料消費量 [kmol/h]	コスト
CVR-100	56.8889	¥310,294,020

5) 圧縮機					
機器名	所要動力 [kW]	流量 [kg/h]	圧力 [MPa]		コスト
			入口	出口	
K-100	822.1	3710	0.103	0.6	¥122,802,785

6)					
機器名	所要動力 [kW]	流量 [kg/h]	圧力 [MPa]		コスト
			入口	出口	
P-100	1.984	60120	0.1013	0.18	¥3,554,455,595
P-101	0.8034	25290	0.025	0.1013	
P-102	1.023	15310	0.02	0.18	
P-103	5.275	76150	0.1013	0.3	

4.経済検討

		使用量	単価	/h	/day	/year
1) 原料	EB	28520.92	80	2281674	54760164	¥18,070,854,138
	Water	1182.751	5	5913.753	141930.1	¥46,836,927
					合計	¥18,117,691,065

		生産量	単価	/h	/day	/year
製品	S	25287.98	100	2528798	60691148	¥20,028,078,776
	B	535.1544	70	37460.81	899059.4	¥296,689,607
	T	1478.342	60	88700.52	2128812	¥702,508,099
Utility(送出)	LP Steam	1736	0.5	868	20832	¥6,874,560
					合計	¥21,027,276,482

2) 燃料	ヘキサン	3816	30	114480	2747520	¥906,681,600
Utility	MP Steam	134400	1.4	188160	4515840	¥1,490,227,200
	Cooling Water	452.9	10	4529	108696	¥35,869,680
電力		831.1854	15	12467.78	299226.7	¥98,744,826
					合計	¥2,531,523,306

3) 建設費	①～⑤の合計	⑥				
	¥3,554,455,595	¥3,554,455,596				
					総額	¥17,772,277,973
					保全費用	¥533,168,339
					人件費	¥400,000,000

運転費用	年間収益	1～7年目	¥-3,094,003,081
		8年目以降	¥-555,106,228

5.

Reactor

反応条件について

製品の S 以外は原料の単価よりも低いので、S の総括転化率が多くなるように反応条件を設定した。製品の価格関係から、S の総括転化率を 90% と目標にした。

高温では、単通転化率は高くなるが、S 以外の生成も多くなる。よって、リサイクル量が多くなり、機器も大きくなってしまいが、反応温度は低めの 600℃ とした。

圧力は、反応速度式(4)より高圧であるほど、式(1)の逆反応速度が大きくなるので、低圧で、大気圧下としました。

反応器は、断熱反応器を採用した。これは、等温反応器に比べ安価であり、さらに、反応器出口に向かい低温になるので、式(1)の反応の左への反応が大きくなるにつれ、式(2)(3)の反応速度も下げることができる。さらに、転化率を上げるために反応器を 2 つ使い、入り口温度は同じとした。

反応器サイズは、感度分析により決定した。

分離

オフガスに含まれる製品、原料の量を小さくするために、冷却水の条件から、40℃ で分離し、さらに、気相を 6bar に加圧、冷却し、分離する。

蒸留

蒸留する流体は、S が 40% 以上、EB が 50% 弱含まれていることから、まず S を分離する。このとき、塔頂部へ S が含まれると、EB のリサイクルにより、反応器に S が戻されることで反応率が落ちるのを防ぐために、回収率を高く設定し、さらに S が重合を開始しない濃度とする。

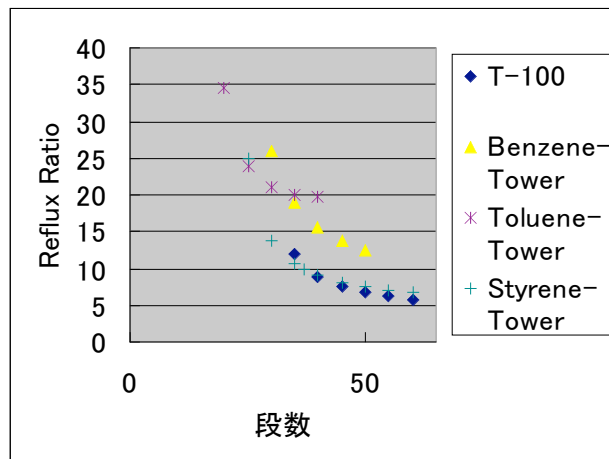
S は精製塔に送られ、減圧蒸留により製品スペックまで濃度をあげる。

T-100 の留出液は、低沸成分が含まれているので、沸点が低い順に精製していく。

最後に EB をプロセス上流にリサイクルをかける。

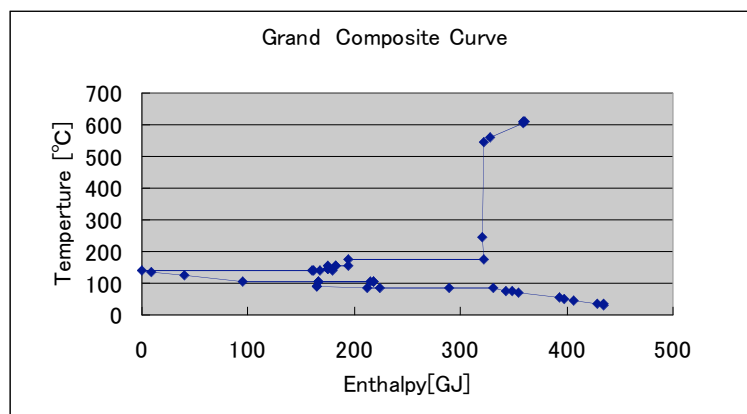
蒸留塔の段数は、Reflux Ratio と段数の関係より、感度分析により決定した。

蒸留塔は操作時において、不安定な運転となりやすい。よって塔径は、最大ガス流速をとる段において、フラッディングが生じない径から、さらに 1.1 倍したものを採用している。



熱交換

プロセスの格流体から、Grand Composite Curve を作成する。



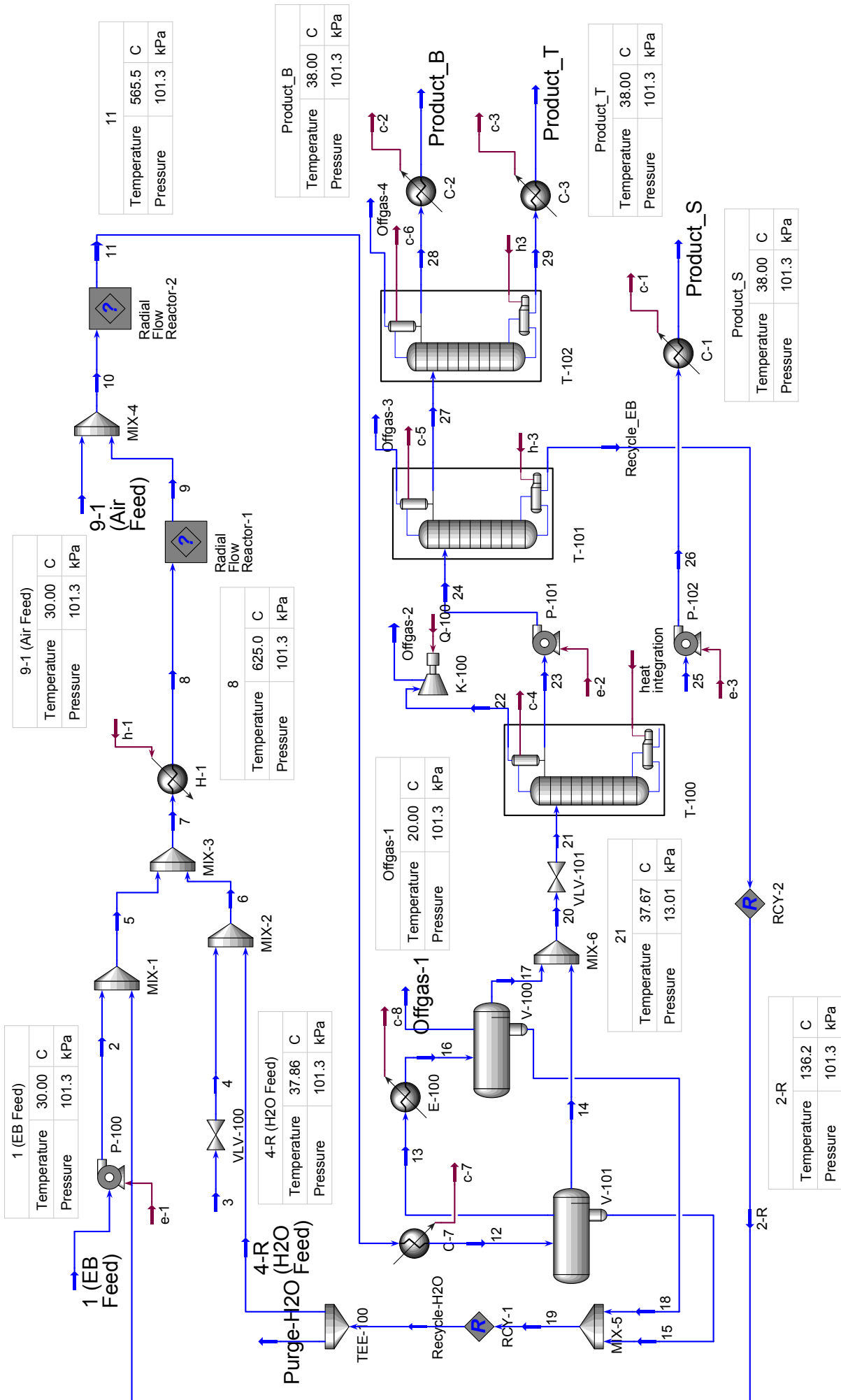
これより、Furnace が必要であり、さらに Furnace 線を描くと、Utility は、加熱用飽和中圧蒸気のみ必要であることがわかる。熱量換算で、オフガスは燃料の半額の価値であるので、系内で燃焼させることとする。


Furnace を加えた Grand Composite Curve では、大きなポケットを持つから、これにより Utility を作成することも考えたが、価格関係から得策ではないと考えられるので、そのまま熱交換することとした。

熱交換では、相変化を含む流体は温度差を 5°C とり、相変化を含まないものは 7.5°C とし、低温流体、高温流体に適用して熱交換を考えた。よって、相変化しないもの同士は最小熱交換温度差を 15°C 、相変化するもの同士は 10°C となっている。

価格について

原料から、S の転化率を高くなるように設計してあるので、この問題の価格設定では、全く利益がでないが、もし、原料 EB の価格が 20% 低下 ($64\text{¥}/\text{kg}$)、または、製品 S の価格が 16% UP したとすれば、7 年での減価償却が可能である。



1	 KYOTO UNIVERSITY Calgary, Alberta CANADA	Case Name: \\ASAGAO7\usr\nakamura\WORKSHEET(*-j).HSC
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Tue Sep 02 13:36:41 2008
4		
5		

Workbook: Case (Main)

Material Streams						Fluid Pkg:	All
Name	1 (EB Feed)	2-R	4-R (H2O Feed)	8	9-1 (Air Feed)		
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000		
Temperature (C)	30.00 *	136.2 *	37.87	625.0 *	30.00 *		
Pressure (kPa)	101.3 *	101.3 *	101.3	101.3	101.3 *		
Molar Flow (kgmole/h)	283.3 *	332.4 *	3085 *	3701	215.2 *		
Mass Flow (kg/h)	3.004e+004	3.529e+004	5.559e+004	1.209e+005	6209		
Liquid Volume Flow (m3/h)	34.53	40.56	55.70	130.8	7.178		
Heat Flow (kJ/h)	-2.931e+006	3.752e+006	-8.759e+008	-5.757e+008	2.996e+004		
Name	Offgas-1	Offgas-2	Offgas-3	Offgas-4	Product_B		
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000		
Temperature (C)	20.00	136.8	83.87	62.37	38.00 *		
Pressure (kPa)	101.3	101.3 *	101.3	101.3	101.3		
Molar Flow (kgmole/h)	522.1	1.641	1.000e-001	9.999e-002	10.47		
Mass Flow (kg/h)	8123	124.6	7.003	6.374	817.0		
Liquid Volume Flow (m3/h)	17.53	0.1479	8.135e-003	7.375e-003	0.9262		
Heat Flow (kJ/h)	-2.026e+007	-1.224e+005	-8016	-1.131e+004	5.222e+005		
Name	Product_S	Product_T	Purge-H2O				
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000				
Temperature (C)	38.00 *	38.00 *	37.87				
Pressure (kPa)	101.3	101.3	101.3				
Molar Flow (kgmole/h)	243.1	23.72	1.107				
Mass Flow (kg/h)	2.532e+004	2189	19.95				
Liquid Volume Flow (m3/h)	27.86	2.517	1.999e-002				
Heat Flow (kJ/h)	2.580e+007	3.432e+005	-3.143e+005				

Compositions						Fluid Pkg:	All
Name	1 (EB Feed)	2-R	4-R (H2O Feed)	8	9-1 (Air Feed)		
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000 *	0.0000 *	0.9999	0.8335	0.0000 *		
Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.9950 *	0.9987 *	0.0000	0.1659	0.0000 *		
Comp Mole Frac (Styrene)	0.0000 *	0.0013 *	0.0000	0.0001	0.0000 *		
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000 *		
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0050 *	0.0000 *	0.0000	0.0004	0.0000 *		
Comp Mole Frac (Toluene)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000 *		
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000 *		
Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000 *		
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.2100 *		
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.7900 *		
Name	Offgas-1	Offgas-2	Offgas-3	Offgas-4	Product_B		
Comp Mole Frac (H2O)	0.0231	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.0055	0.4523	0.0015	0.0000	0.0000		
Comp Mole Frac (Styrene)	0.0020	0.0005	0.0000	0.0000	0.0000		
Comp Mole Frac (CO2)	0.0858	0.2835	0.3283	0.4159	0.0033		
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0022	0.0947	0.3549	0.5813	0.9950		
Comp Mole Frac (Toluene)	0.0019	0.0848	0.3003	0.0003	0.0017		
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.5542	0.0842	0.0150	0.0025	0.0000		
Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.3253	0.0000	***	***	0.0000		

Workbook: Case (Main) (continued)

Compositions (continued)

Fluid Pkg: All

11	Name	Product_S	Product_T	Purge-H2O		
12	Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.9999		
13	Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.0020	0.0105	0.0000		
14	Comp Mole Frac (Styrene)	0.9980	0.0000	0.0000		
15	Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000		
16	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.0000	0.0000		
17	Comp Mole Frac (Toluene)	0.0000	0.9894	0.0000		
18	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000		
19	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000	0.0000	0.0000		
20	Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000		
21	Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000		

22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68

3. 本課題の設備費検討に関わる機器データの表

1) 反応器

機器名	形式	直径 [m]	長さ [m]	コスト [億円]
Radial Flow Reactor-1	断熱	2.3	6.5	3.38
Radial Flow Reactor-2	断熱	4.1	6.5	6.27

※反応器はラジアルフロー型反応器を使用したため、PFRの1.5倍のコストがかかるとした。

※触媒には白金を使用したため、触媒価格を以下の式を用いて計算した。

触媒コスト [¥] = 触媒層体積 [m³] × 比重 [g/cm³] × 白金含有率 [%] × 白金単価 [¥/g]
 ただし、比重 3 g/cm³, 白金含有率 0.002 %, 白金単価 3500 ¥/g

2) 蒸留塔

機器名	理論段数	実段数	直径 [m]	高さ [m]	コスト [億円]
T-100	83	104	8.7	68	4.79
T-101	49	61	2.5	42	0.85
T-102	56	70	0.7	48	0.25

3) 熱交換器

機器名	熱交換量 [MJ/h]	伝熱面積 [m ²]	高温側入口温度 [°C]	高温側出口温度 [°C]	低温側入口温度 [°C]	低温側出口温度 [°C]	コスト [億円]
1	8.0E+03	118	87.3	87	56	77	0.33
2	9.4E+04	860	268	87.3	77	77	2.39
3	8.4E+04	150	569	268	77	93	0.39
h1	1.8E+05	500	900	900	93	625	0.85
h2	1.6E+03	0.7	900	900	111	111	0.02
h3	1.7E+04	8.1	900	900	136	136	0.15
c1	1.8E+03	76	77	38	30	30	0.25
c2	4.8E+01	2.2	71	38	30	30	0.03
c3	3.1E+02	9.1	111	38	30	30	0.06
c4	9.1E+04	1099	53	53	30	30	1.42
c5	1.1E+04	53	87	87	30	30	0.20
c6	2.0E+03	17	62	62	30	30	0.10
c7	1.1E+05	1224	87	38	30	30	1.52
c8	1.7E+03	55	38	20	10	10	0.20

4) 加熱炉

機器名	熱交換量 [MJ/h]	伝熱面積 [m ²]	燃料消費量 [kmol/年]	低温側入口温度 [°C]	低温側出口温度 [°C]	燃焼ガス出口温度 [°C]	コスト [億円]
h1	1.8E+05	500	4.2E+05	93	625	900	
h2	1.0E+03	0.7	2.4E+03	111	111	900	0.46
h3	1.7E+04	8.1	4.1E+04	136	136	900	

5) 圧縮機

機器名	所要動力 [kW]	流量 [kmol/h]	入口圧力 [MPa]	出口圧力 [MPa]
K-100	4.09	1.64	0.011	0.1013

6) ポンプ

機器名	所要動力 [kW]	流量 [kmol/h]	入口圧力 [MPa]	出口圧力 [MPa]
P-100	2.6E-04	284	0.1013	0.1013
P-101	1.44	366.9	0.011	0.1013
P-102	0.97	242.7	0.011	0.1013

4. 経済検討の纏め

1) 原料, 製品の流量と価格

	成分	流量 [kmol/h]	価格 [億円/年]
原料	EB	284	190.0
	SM	242.7	200.0
製品	B	10.5	10.4
	T	24.1	4.5

※ここで, EB, SM, B, Tはそれぞれエチルベンゼン, スチレンモノマー, ベンゼン, トルエンを表す.

2) 用役使用量

用役	機器名	使用用役量 [トン/年]	用役費 [億円/年]	合計 [億円/年]
冷却水	c1	2.3E+05	0.02	2.8
	c2	6.2E+03	0.001	
	c3	4.0E+04	0.004	
	c4	1.2E+07	1.17	
	c5	1.4E+06	0.14	
	c6	2.6E+05	0.03	
	c7	1.4E+07	1.41	

用役	機器名	使用用役量 [MJ/年]	用役費 [億円/年]	合計 [億円/年]
10°Cの冷媒	c8	1.4E+07	0.08	0.08
ヘキサン	h1	1.4E+09	10.9	12.1
	h2	7.9E+06	0.06	
	h3	1.3E+08	1.05	

3) プラントコスト, 運転に関わる費用, プラント収益

	内訳	費用 [億円/年]	計 [億円/年]
プラントコスト	反応器	1.38	18.69
	触媒	0.66	
	熱交換機	0.95	
	加熱炉	0.46	
	蒸留塔	0.82	
	コンプレッサー	0.01	
	その他の設備	3.61	
	工事費	10.8	
運転費用	原料費(EB)	190	212.59
	人件費	4	
	プラント保全費	3.79	
	用役費	14.8	
売上げ	SM	200	214.9
	B	10.4	
	T	4.5	
収益			-16.4

※その他の設備として, 貯槽, バルブ, 配管, ポンプ, 電気・計装, 建屋などが必要とする.
 その際, 熱交換器, 加熱路, 蒸留塔, 反応器, コンプレッサーの
 機器費合計の1.0倍のコストが更に必要とする.

5. 今回の設計結果に至った経緯

・ラジアルフロー型反応器の使用

反応器に関して、PFRでは圧力損失が大きくなるため、反応器の分割や管長の短縮が必要となる。そこで、本プロセスでは、ラジアルフロー型反応器を用いることとした。ラジアルフロー型反応器では原料を半径方向に流すため、原料を軸方向に流すPFRに比べ触媒層を通過する距離が短縮される。そのため、圧力損失が小さく、高い空間速度がとれるだけでなく、触媒粒径を小さくできるメリットがある。

ただし、構造が複雑となりコストが高くなるという欠点があるため、コスト計算の際には課題の推算式を1.5倍した値を使用することとした。また、圧力損失は無視できるものとした。

・反応工程の最適化

本反応は複合反応であり、各反応速度は温度や分圧の関数である。そこで、反応工程を最適化するにあたり、収率と選択率に着目し、2つのパターンについてシミュレーションを行った。1つ目のパターンでは各反応器出口でスチレンモノマ（以下、SM）の収率が最大となるように反応器体積を決定し、2つ目のパターンでは各反応器出口でSMの選択率が最大となるように反応器体積を決定した。この時、反応器は2基直列、操作圧力は1atm、2つの反応器入口での流体温度は等しいとし、最適化変数は反応器入口温度およびスチーム流量比（スチーム/エチルベンゼン（以下、EB）比）とした。その際、評価指標として以下の式を用いた。

$$\text{評価指標} = \text{粗利} - (\text{装置コスト} + \text{ユーティリティコスト})$$

ここで、粗利は売上げから原料費を引いた値である。その結果、選択率を優先した反応器入口温度600℃、スチーム流量比5.25の場合が最適となった。しかし、分離工程のコストや人件費、プラント維持費を考慮するとプロセス全体で利益を得ることは難しいと判断し、次の水素酸化プロセスを検討することとした。

・水素酸化プロセスの検討

水素酸化プロセスの特徴は、選択的に水素を酸化することのできる触媒を用いて、生成された水素を酸化することである。反応器にはラジアルフロー型反応器を使用し、2基目の反応器の内側に選択的水素酸化触媒、外側に脱水素触媒を設置する。1基目の反応器で生成された水素を含む流体に空気を混合し、2基目の反応器の内側で水素を酸化させ、外側で脱水素反応を進行させる。水素の燃焼熱の利用によりユーティリティコストの削減及び、副生成物の水素の減少により逆反応の抑制にもつながる。ただし、触媒には白金が使用されているので、白金のコストを以下の式を用いて考慮することとした。

$$\text{触媒コスト} [\text{¥}] = \text{触媒層体積} [\text{m}^3] \times \text{比重} [\text{g/m}^3] \times \text{白金含有率} [\%] \times \text{白金単価} [\text{¥/g}]$$

最適化を行うに際して、水素酸化を行わないプロセスと同様に反応器は2基直列、操作圧力は1atmとした。また、先の結果を考慮し、各反応器出口でSMの選択率が最大となるように脱水素触媒層体積を決めることとした。ただし、水素の爆発限界を考慮して1基目の反応器出口において水素濃度が3mol%以下、炭化水素の酸化防止という観点から供給空気量は水素の理論空気量の80%、2基目の反応器出口において酸素濃度が1ppm以下となるように水素酸化触媒層の体積を決定した。最適化変数は1基目の反応器入口の温度とした。その結果、反応器入口温度が600℃の場合が最適となったが、625℃の場合とコスト差が約2500万円と、他の結果と比べ接近していたため、分離工程と組み合わせて熱回収を行い、反応器入口温度を決定することとした。

・デカンタの段数決定

デカンタで相分離を行うに際して流体温度を下げる必要があるため冷却水を用いて38℃まで冷却し相分離を行った。しかし、この温度で相分離を行うと気相から多量の原料及び製品が排出された。そこで、デカンタを2基用い、1基目のデカンタの気相を冷媒により20℃まで冷却することとした。ここで、最小接近温度差は10℃とし、冷媒には10℃のプロピレン冷媒を用いることとした。これはベンゼンの凝固点5.5℃を考慮したためである。

・蒸留シーケンスの決定

製品や原料としてリサイクルされる炭化水素成分は4種類あるので、3基の蒸留塔のシーケンスは5パターンあり、以下の評価指標を用いて最適シーケンスを決定した。

評価指標＝装置コスト＋加熱コスト＋冷却コスト

その結果、流量が多く、リボイラの温度が低いSM、EBの順に製品として払い出すシーケンスとなった。この結果を基に各蒸留塔における最適な還流比を決定した。

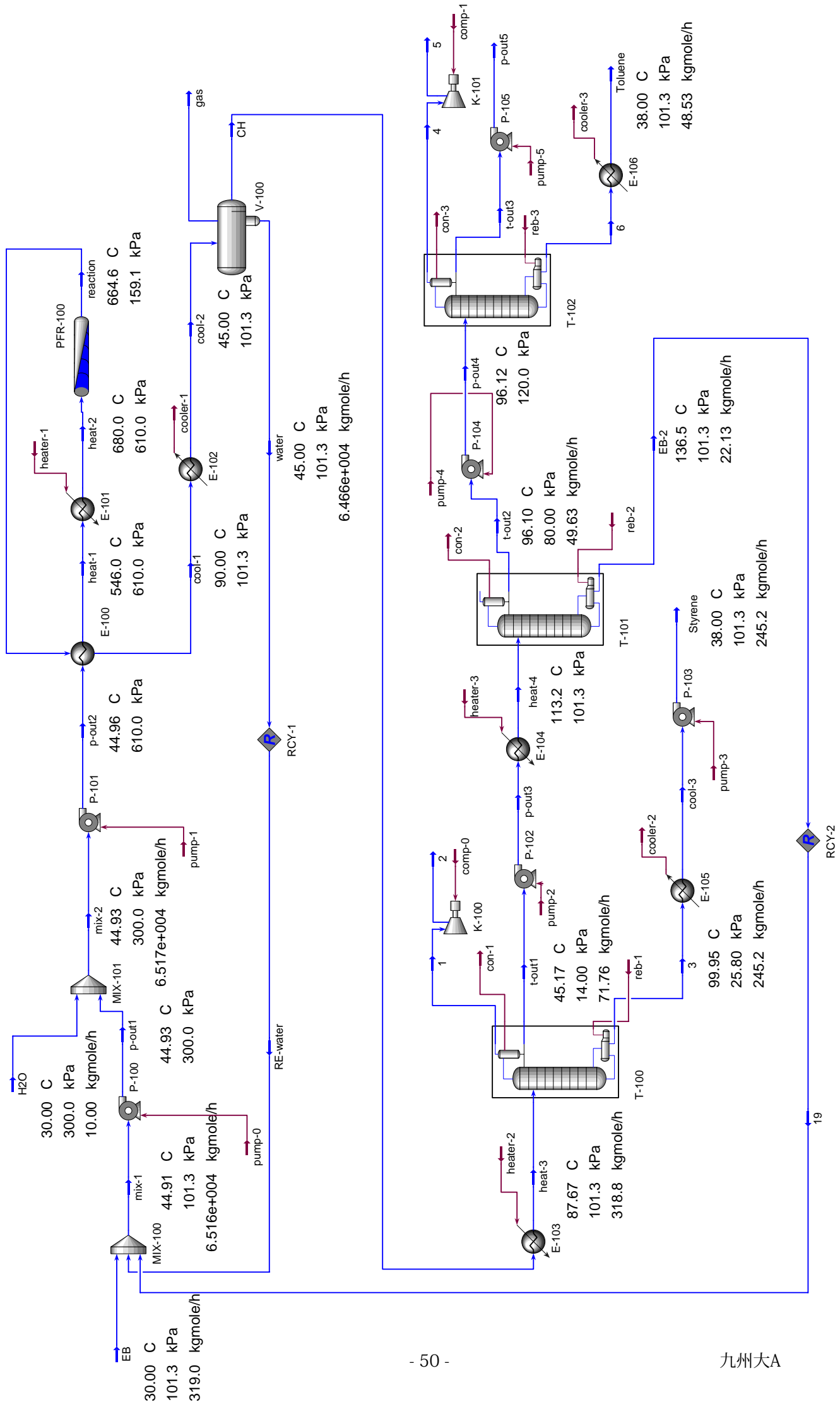
・熱回収


反応工程の入口温度が600℃及び625℃の2通りについてT-Q線図を用い、プロセス全体で熱回収を行った。その結果、625℃の場合が最適となった。

・まとめ

本設計では、ラジアルフロー型反応器を用いた、脱水素反応によるSMプロセスを設計したが、反応工程だけで、赤字が約17億円となった。そこで、選択的水素酸化触媒を用いたプロセスに改良したことにより、分離工程なども含めた全工程での赤字を16.4億円まで改善できた。


ただし、まだプロセス全体では赤字であり、今後改善すべき点としては、反応器内の圧力変更、反応器数の変更、選択的水素酸化触媒層の配置の工夫などが挙げられる。



1	 KYUSHU UNIV Calgary, Alberta CANADA	Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\HABE\ffXfNfgfbf\ \ŸĈEvŠw\ ŸĈEv
2		Unit Set:	SI
3		Date/Time:	Sat Sep 06 00:35:10 2008
4			
5			

Workbook: Case (Main)

		Material Streams				Fluid Pkg:	All
11	Name	EB	mix-2	heat-2	reaction	cool-2	
12	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.0087	
13	Temperature (C)	30.00 *	44.93	680.0 *	664.6	45.00 *	
14	Pressure (kPa)	101.3 *	300.0	610.0 *	159.1	101.3 *	
15	Molar Flow (kgmole/h)	319.0 *	6.517e+004	6.517e+004	6.555e+004	6.555e+004	
16	Mass Flow (kg/h)	3.382e+004	1.204e+006	1.204e+006	1.204e+006	1.204e+006	
17	Liquid Volume Flow (m3/h)	38.87	1212	1212	1223	1223	
18	Heat Flow (kJ/h)	-3.184e+006	-1.846e+010	-1.405e+010	-1.405e+010	-1.841e+010	
19	Name	gas	CH	water	1	t-out1	
20	Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	
21	Temperature (C)	45.00	45.00	45.00	45.17	45.17	
22	Pressure (kPa)	101.3	101.3	101.3	14.00	14.00	
23	Molar Flow (kgmole/h)	567.3	318.8	6.466e+004	1.800	71.76	
24	Mass Flow (kg/h)	6675	3.257e+004	1.165e+006	122.9	6903	
25	Liquid Volume Flow (m3/h)	19.11	36.17	1167	0.1435	7.926	
26	Heat Flow (kJ/h)	-3.326e+007	2.717e+007	-1.841e+010	-1.258e+005	8.105e+005	
27	Name	3	H2O	t-out2	EB-2	4	
28	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	
29	Temperature (C)	99.95	30.00 *	96.10	136.5	89.09	
30	Pressure (kPa)	25.80	300.0 *	80.00	101.3	85.00	
31	Molar Flow (kgmole/h)	245.2	10.00 *	49.63	22.13	0.6966	
32	Mass Flow (kg/h)	2.554e+004	180.2	4557	2347	56.86	
33	Liquid Volume Flow (m3/h)	28.10	0.1805	5.236	2.690	6.489e-002	
34	Heat Flow (kJ/h)	2.901e+007	-2.858e+006	1.227e+006	3.967e+005	3.954e+004	
35	Name	t-out3	6	heat-4	mix-1	RE-water	
36	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0008	0.0000	0.0000	
37	Temperature (C)	89.09	109.8	113.2 *	44.91	45.00 *	
38	Pressure (kPa)	85.00	101.3	101.3	101.3	101.3 *	
39	Molar Flow (kgmole/h)	0.4000	48.53	71.76	6.516e+004	6.482e+004 *	
40	Mass Flow (kg/h)	34.90	4465	6903	1.204e+006	1.168e+006	
41	Liquid Volume Flow (m3/h)	3.994e-002	5.131	7.926	1212	1170	
42	Heat Flow (kJ/h)	1.413e+004	1.311e+006	1.664e+006	-1.846e+010	-1.845e+010	
43	Name	cool-3	Styrene	Toluene	19	p-out4	
44	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
45	Temperature (C)	38.00 *	38.00 *	38.00 *	136.5 *	96.12	
46	Pressure (kPa)	25.00 *	101.3 *	101.3 *	101.3 *	120.0 *	
47	Molar Flow (kgmole/h)	245.2	245.2	48.53	22.01 *	49.63	
48	Mass Flow (kg/h)	2.554e+004	2.554e+004	4465	2334	4557	
49	Liquid Volume Flow (m3/h)	28.10	28.10	5.131	2.676	5.236	
50	Heat Flow (kJ/h)	2.623e+007	2.623e+007	7.421e+005	3.958e+005	1.228e+006	
51	Name	2	5	p-out5	p-out2	heat-3	
52	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0001	
53	Temperature (C)	127.6	95.67	89.10	44.96	87.67 *	
54	Pressure (kPa)	101.3 *	101.3 *	101.3 *	610.0 *	101.3 *	
55	Molar Flow (kgmole/h)	1.800	0.6966	0.4000	6.517e+004	318.8	
56	Mass Flow (kg/h)	122.9	56.86	34.90	1.204e+006	3.257e+004	
57	Liquid Volume Flow (m3/h)	0.1435	6.489e-002	3.994e-002	1212	36.17	
58	Heat Flow (kJ/h)	-1.121e+005	4.002e+004	1.413e+004	-1.846e+010	2.960e+007	
59	Name	p-out1	cool-1	heat-1	p-out3		
60	Vapour Fraction	0.0000	0.0416	1.0000	0.0000		
61	Temperature (C)	44.93	90.00 *	546.0	45.20		
62	Pressure (kPa)	300.0 *	101.3 *	610.0 *	101.3 *		
63	Molar Flow (kgmole/h)	6.516e+004	6.555e+004	6.517e+004	71.76		
64	Mass Flow (kg/h)	1.204e+006	1.204e+006	1.204e+006	6903		
65	Liquid Volume Flow (m3/h)	1212	1223	1212	7.926		
66	Heat Flow (kJ/h)	-1.846e+010	-1.809e+010	-1.442e+010	8.115e+005		

1	 KYUSHU UNIV Calgary, Alberta CANADA	Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\HABE\ffXfNfgfbf\ \YCEvŠw\ YCEv
2		Unit Set:	SI
3		Date/Time:	Sat Sep 06 00:35:10 2008
4			
5			

Workbook: Case (Main) (continued)

Compositions							Fluid Pkg:	All
11	Name	EB	mix-2	heat-2	reaction	cool-2		
12	Comp Mole Frac (H2O)	0.0000 *	0.9947	0.9947	0.9873	0.9873		
13	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0050 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
14	Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.9950 *	0.0052	0.0052	0.0003	0.0003		
15	Comp Mole Frac (Styrene)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0039	0.0039		
16	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0066	0.0066		
17	Comp Mole Frac (Toluene)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0009	0.0009		
18	Comp Mole Frac (CO2)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0009	0.0009		
19	Name	gas	CH	water	1	t-out1		
20	Comp Mole Frac (H2O)	0.0943	0.0010	1.0000	0.1698	0.0003		
21	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0010	0.0033	0.0000	0.0309	0.0138		
22	Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.0027	0.0671	0.0000	0.0828	0.2894		
23	Comp Mole Frac (Styrene)	0.0207	0.7721	0.0000	0.0037	0.0190		
24	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.7623	0.0003	0.0000	0.0508	0.0000		
25	Comp Mole Frac (Toluene)	0.0161	0.1553	0.0000	0.5063	0.6774		
26	Comp Mole Frac (CO2)	0.1029	0.0009	0.0000	0.1558	0.0002		
27	Name	3	H2O	t-out2	EB-2	4		
28	Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	1.0000 *	0.0004	0.0000	0.0265		
29	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.0000 *	0.0199	0.0000	0.5354		
30	Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.0019	0.0000 *	0.0001	0.9381	0.0000		
31	Comp Mole Frac (Styrene)	0.9981	0.0000 *	0.0000	0.0615	0.0000		
32	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0003		
33	Comp Mole Frac (Toluene)	0.0000	0.0000 *	0.9793	0.0004	0.4169		
34	Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000 *	0.0003	0.0000	0.0210		
35	Name	t-out3	6	heat-4	mix-1	RE-water		
36	Comp Mole Frac (H2O)	0.0002	0.0000	0.0003	0.9947	1.0000 *		
37	Comp Mole Frac (Benzene)	0.3474	0.0098	0.0138	0.0000	0.0000 *		
38	Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.0000	0.0001	0.2894	0.0052	0.0000 *		
39	Comp Mole Frac (Styrene)	0.0000	0.0000	0.0190	0.0000	0.0000 *		
40	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *		
41	Comp Mole Frac (Toluene)	0.6523	0.9900	0.6774	0.0000	0.0000 *		
42	Comp Mole Frac (CO2)	0.0001	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000 *		
43	Name	cool-3	Styrene	Toluene	19	p-out4		
44	Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0004		
45	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.0000	0.0098	0.0000 *	0.0199		
46	Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.0019	0.0019	0.0001	0.9380 *	0.0001		
47	Comp Mole Frac (Styrene)	0.9981	0.9981	0.0000	0.0620 *	0.0000		
48	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000		
49	Comp Mole Frac (Toluene)	0.0000	0.0000	0.9900	0.0000 *	0.9793		
50	Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0003		
51	Name	2	5	p-out5	p-out2	heat-3		
52	Comp Mole Frac (H2O)	0.1698	0.0265	0.0002	0.9947	0.0010		
53	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0309	0.5354	0.3474	0.0000	0.0033		
54	Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.0828	0.0000	0.0000	0.0052	0.0671		
55	Comp Mole Frac (Styrene)	0.0037	0.0000	0.0000	0.0000	0.7721		
56	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0508	0.0003	0.0000	0.0000	0.0003		
57	Comp Mole Frac (Toluene)	0.5063	0.4169	0.6523	0.0000	0.1553		
58	Comp Mole Frac (CO2)	0.1558	0.0210	0.0001	0.0000	0.0009		
59	Name	p-out1	cool-1	heat-1	p-out3			
60	Comp Mole Frac (H2O)	0.9947	0.9873	0.9947	0.0003			
61	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0138			
62	Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.0052	0.0003	0.0052	0.2894			
63	Comp Mole Frac (Styrene)	0.0000	0.0039	0.0000	0.0190			
64	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0066	0.0000	0.0000			
65	Comp Mole Frac (Toluene)	0.0000	0.0009	0.0000	0.6774			
66	Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0009	0.0000	0.0002			

3. 機器データの表

機器名	形式	直径[m]	長さ[m]	cost[¥/1本]	本数	cost[¥]			
反応器									
PFER-100	断熱	3	7.2	325,577,137	20	6,511,542,747			
機器名	理論段数	実段数	供給段	直径	高さ	cost[¥]			
T-100	32	40	17	1.5	31	38,611,896			
T-101	30	38	15	1.5	29.8	37,381,944			
T-102	4	5	3	1.5	10	15,268,787			
機器名	熱交換量[MJ/h]	伝熱面積[m ²]	高温側入口温度[°C]	高温側出口温度[°C]	低温側入口温度[°C]	低温側出口温度[°C]	温度変化[°C]	総括熱伝達係数	cost[¥]
E-100	4041142.5	9850.0	664.6	90.0	45.0	546.0	76.0	1500	591,323,051
E-102	26610.0	902.3	90.0	45.0	30.0	45.0	27.3	300	125,044,636
E-103	2436.0	11.1	130.0	130.0	45.0	87.7	61.2	1000	7,151,865
E-104	852.8	5.6	130.0	130.0	45.2	113.2	42.0	1000	4,617,538
E-105	2785.0	1058.0	100.0	38.0	30.0	45.0	24.4	300	31,053,429
E-106	568.4	19.4	109.8	38.0	30.0	45.0	27.2	300	10,301,757
T-100 コンデンサー	98900.0	5770.5	61.6	45.2	30.0	45.0	15.9	300	417,713,824
T-100 リボイラー	98990.0	4160.1	130.0	130.0	93.8	100.0	33.0	200	337,684,687
T-101 コンデンサー	8963.0	133.0	103.8	96.1	30.0	45.0	62.4	300	36,031,833
T-101 リボイラー	8923.0	108.2	250.0	250.0	134.5	136.5	114.5	200	31,509,450
T-102 コンデンサー	8012.0	134.4	96.5	89.1	30.0	45.0	55.2	300	36,262,185
T-102 リボイラー	8149.0	531.8	130.0	130.0	107.6	109.8	21.3	200	88,684,445
機器名	熱交換量[MJ/h]	燃料使用量[kmol/h]	入口圧力[kPa]	出口圧力[kPa]	cost[¥]				
E-101	70150.0	15.2			101,094,979				
機器名	所要動力[kW]	流量[kmol/h]	入口圧力[kPa]	出口圧力[kPa]	cost[¥]				
K-100	3.8	1.8	14.0	101.3	1,495,434				
K-101	0.1	0.7	85.0	101.3	96,499				
機器名	所要動力[kW]	流量[kmol/h]	入口圧力[kPa]	出口圧力[kPa]					
P-100	89.8	65160.0	101.3	300.0					
P-101	117.5	65170.0	300.0	560.0					
P-102	0.3	71.8	14.0	101.3					
P-103	0.8	245.2	25.0	101.3					
P-104	0.1	49.6	80.0	120.0					
P-105	0.0	0.4	85.0	101.3					
加熱炉									
コンプレッサ									
ポンプ									
合計						8,422,870,983			

4.1原料と製品の流量と価格

原料	流量 [kg/h]	流量 [kg/year]	単価 [¥/kg]
E-Benzene	33,822	267,871,856	80
H2O	180	1,425,600	5

製品	流量 [kg/h]	流量 [kg/year]	単価 [¥/kg]
Styrene	25,489	201,872,880	100
Toluene	4,427	35,061,840	60
Benzene	0	0	70

4.2 役使用量

機器名	熱交換量 [MJ/h]	燃料使用量 [kmol/h]	使用量 [kg/h]	単価 [¥/h]
E-100	70150.0	15.2	1,309.3	30

機器名	種類	熱交換量 [MJ/h]	単価 [¥/MJ]
E-103	低圧	2436.0	1.0
E-104	低圧	852.8	1.0
T-100 リボイラー	低圧	98990.0	1.0
T-101 リボイラー	中圧	8923.0	1.4
T-102 リボイラー	低圧	8149.0	1.0

機器名	熱交換量 [MJ/h]	使用量 [ton/h]	単価 [¥/ton]
E-102	26610.0	422.4	10
E-105	2785.0	44.2	10
E-106	568.4	9.0	10
T-100 コンデンサー	98900.0	1,569.8	10
T-101 コンデンサー	8963.0	142.3	10
T-102 コンデンサー	8012.0	127.2	10

機器名	所要動力 [kW]	単価 [¥/kW]
K-100	3.8	15
K-101	0.1	15
P-100	112.2	15
P-101	146.9	15
P-102	0.3	15
P-103	1.0	15
P-104	0.1	15
P-105	0.0	15

cost [¥/h]	cost [¥/year]
2,705,776	21,429,748,505
900	7,128,000

cost [¥/h]	cost [¥/year]
2,548,900	20,187,288,000
265,620	2,103,710,400
0	0

cost [¥/h]	cost [¥/year]
39,279	311,088,813

cost [¥/h]	cost [¥/year]
2,436	19,293,120
853	6,754,176
98,990	784,000,800
12,492	98,938,224
8,149	64,540,080

cost [¥/h]	cost [¥/year]
4,224	33,452,571
442	3,501,143
90	714,560
15,698	124,331,429
1,423	11,267,771
1,272	10,072,229

cost [¥/h]	cost [¥/year]
57	451,915
2	15,979
1,683	13,330,845
2,203	17,448,750
5	39,145
15	120,493
2	12,599
0	39
189,315	1,499,374,680

合計

4.3プラントコスト、運転費用、収益

プラント建設費用[¥]	保全費用 [¥/year]	人件費 [¥/year]
42,114,354,916	1,263,430,647	400,000,000

収入 [¥/year]		支出 [¥/year]	
製品価格	Styrene	20,187,288,000	E-Benzene
	Toluene	2,103,710,400	H2O
	Benzene	0	
			プラント建設費
			保全費用
			人件費
			用役費用
合計		22,290,998,400	合計
			総計
			-21,429,748,505
			-7,128,000
			-6,016,336,417
			-1,263,430,647
			-400,000,000
			-1,499,374,680
			-30,616,018,249
			-8,325,019,849

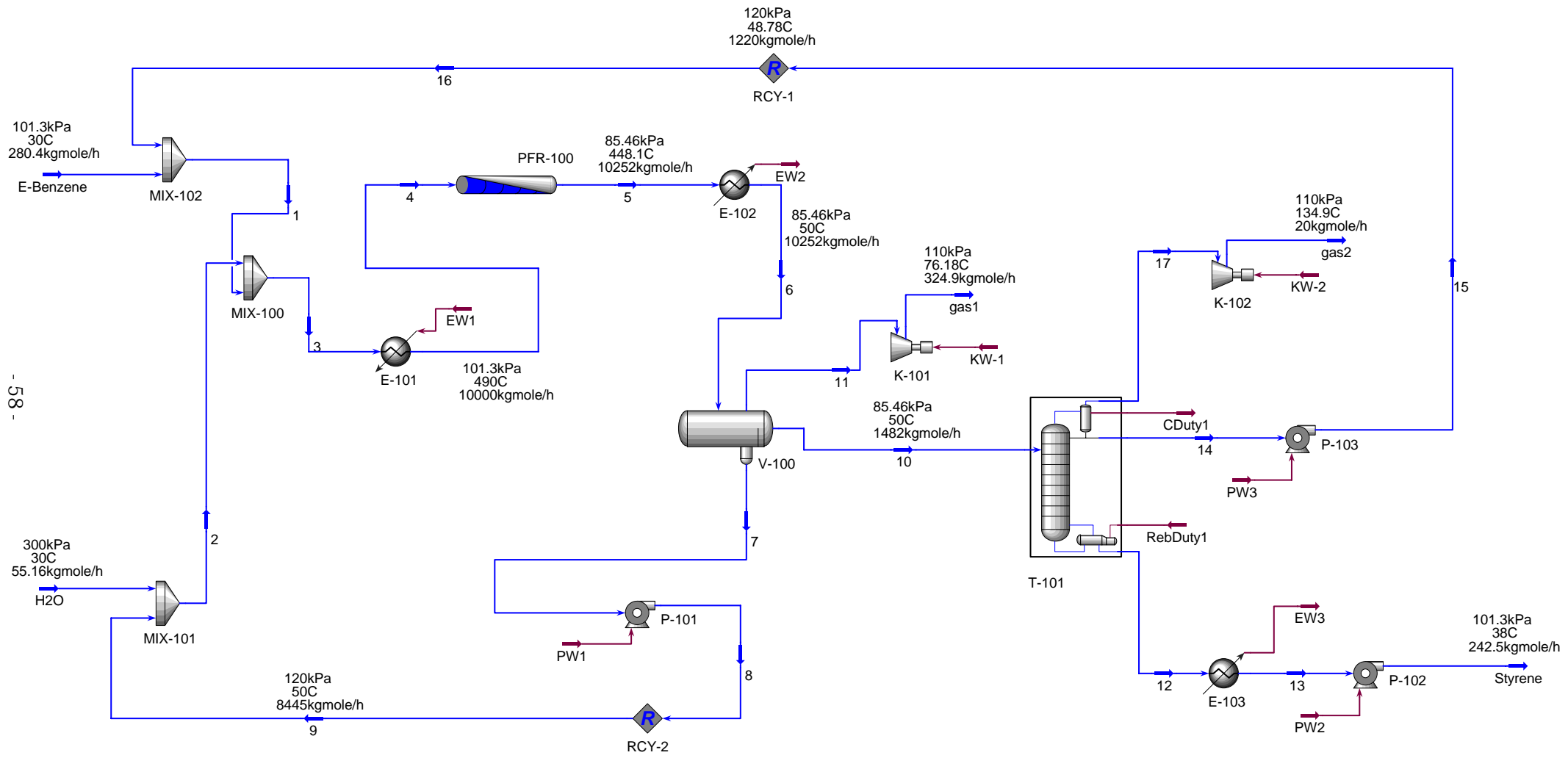
5. 今回の設計結果に至った経緯


- ・ 反応器に投入する原料の温度と圧力は、主反応の反応効率が最も良くなるように 680 ， 610kPa に設定した。
- ・ 反応器の前の stream(heat-2)の温度が 680 に対して 3 相セパレータの前の stream (cool-2)の 45 とかなり低温のため熱交換器(E-100)を用いた。結果、スチームは用いず、さらに少ない量のヘキサンと冷却水で反応器付近の熱交換ができ、ユーティリティコストの大幅な削減ができた。また、反応器付近の過熱器と冷却器の建設コストも削減することができた。
- ・ 反応器の大きさについては、大きくすることで主反応の反応効率を上げることができたが、その分だけ反応器の建設コストがかかってしまうため反応効率が 80%付近になるように設定した。また、このとき建設コストを少なくするために計算式の指数が大きい半径をできるだけ小さくするようにした。
- ・ 反応器から出てきた製品を 3 相セパレータで分離するために stream(cool-2)の温度を 45 度に下げた後、3 相に分離した。そして排ガスは stream(gas)で大気中に排気し、有機物は stream(CH)として蒸留塔に供給し、過剰な水は stream(water)としてリサイクルし MIX-100 に供給した。
- ・ 蒸留塔 T-100 では bottom から出てくる製品の温度が 100 度以下になるように圧力を調節し、さらに、bottom から出てくるスチレン量を最大になるように stream(3)の流量を調節し、蒸留塔の分離効率が最大になるように段数と供給段を調節した。その後、供給前の stream(heat-3)の温度と供給 stream の温度が一致するように stream(heat-3)の温度を設定した。最後に、stream(3)を製品の条件に合うように圧力・温度を調節した後、製品スチレンとして stream(Styrene)を得た。
- ・ 蒸留塔 T-101 では stream(heat-4)中の未反応のエチルベンゼンを取り除くため、bottom から出てくるエチルベンゼンの量を最大になるように stream(EB-2)の流量を調節し、蒸留塔の分離効率が最大になるように段数と供給段を調節した。その後、供給前の stream(heat-4)の温度と供給 stream の温度が一致するように stream(heat-4)の温度を設定した。bottom から取り除いた stream(EB-2)はリサイクルして MIX-100 に供給した。また、排気するガスの量が少なかったため Condenser を Total に設定した。

- ・ 蒸留塔 T-102 のから出てくる stream(6)を昇圧せずに済むように stream(p-out4)の圧力を 101.3kPa より大きくした .
- ・ 蒸留塔 T-102 では bottom から出てくるトルエンの量を最大になるように stream(6)の流量を調節し、蒸留塔の分離効率が最大になるように段数と供給段を調節した . その後に , stream(6)を製品の条件に合うように圧力・温度を調節した後、製品トルエンとして stream(Toluene)を得た。

- 58 -

九州大B



1	 KYUSHU UNIV Calgary, Alberta CANADA	Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\NINO.LAB7\ffXfNfgbf\ \ä ä E%ü
2		Unit Set:	SI
3		Date/Time:	Sat Sep 06 17:48:55 2008
4			
5			

Workbook: Case (Main)

Material Streams							Fluid Pkg:	All
Name	3	5	11	10	7			
Vapour Fraction	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000			
Temperature (C)	48.49	448.1	50.00	50.00	50.00			
Pressure (kPa)	101.3	85.46	85.46	85.46	85.46			
Molar Flow (kgmole/h)	1.000e+004	1.025e+004	324.9	1482	8445			
Mass Flow (kg/h)	3.115e+005	3.115e+005	3447	1.559e+005	1.522e+005			
Liquid Volume Flow (m3/h)	335.2	340.8	10.62	177.7	152.5			
Heat Flow (kJ/h)	-2.411e+009	-1.710e+009	-1.159e+007	2.336e+007	-2.390e+009			
Name	17	14	12	15	13			
Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000			
Temperature (C)	48.68	48.68	96.81	48.78	37.93 *			
Pressure (kPa)	5.000	5.000	23.00	120.0 *	23.00			
Molar Flow (kgmole/h)	20.00	1220	242.5	1220	242.5			
Mass Flow (kg/h)	2011	1.286e+005	2.526e+004	1.286e+005	2.526e+004			
Liquid Volume Flow (m3/h)	2.322	147.6	27.79	147.6	27.79			
Heat Flow (kJ/h)	7.137e+005	-3.182e+006	2.847e+007	-3.158e+006	2.574e+007			
Name	Styrene	9	8	H2O	2			
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000			
Temperature (C)	38.00	50.00 *	50.00	30.00 *	49.87			
Pressure (kPa)	101.3 *	120.0 *	120.0 *	300.0 *	120.0			
Molar Flow (kgmole/h)	242.5	8445 *	8445	55.16	8500 *			
Mass Flow (kg/h)	2.526e+004	1.522e+005	1.522e+005	993.8	1.531e+005			
Liquid Volume Flow (m3/h)	27.79	152.5	152.5	0.9958	153.5			
Heat Flow (kJ/h)	2.574e+007	-2.390e+009	-2.390e+009	-1.569e+007	-2.405e+009			
Name	16	E-Benzene	1	gas2	4			
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.9775	1.0000			
Temperature (C)	48.78 *	30.00 *	45.31	134.9	490.0 *			
Pressure (kPa)	120.0 *	101.3 *	101.3	110.0 *	101.3			
Molar Flow (kgmole/h)	1220 *	280.4	1500 *	20.00	1.000e+004			
Mass Flow (kg/h)	1.286e+005	2.973e+004	1.583e+005	2011	3.115e+005			
Liquid Volume Flow (m3/h)	147.6	34.17	181.8	2.322	335.2			
Heat Flow (kJ/h)	-3.098e+006	-2.900e+006	-5.998e+006	9.523e+005	-1.710e+009			
Name	6	gas1						
Vapour Fraction	0.0317	1.0000						
Temperature (C)	50.00 *	76.18						
Pressure (kPa)	85.46	110.0 *						
Molar Flow (kgmole/h)	1.025e+004	324.9						
Mass Flow (kg/h)	3.115e+005	3447						
Liquid Volume Flow (m3/h)	340.8	10.62						
Heat Flow (kJ/h)	-2.378e+009	-1.129e+007						
Compositions							Fluid Pkg:	Basis-1
Name	3	5	11	10	7			
Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.1417	0.1141	0.0431	0.7797	0.0000			
Comp Mole Frac (Styrene)	0.0035	0.0273	0.0075	0.1871	0.0000			
Comp Mole Frac (Toluene)	0.0034	0.0036	0.0035	0.0238	0.0000			
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0014	0.0014	0.0030	0.0090	0.0000			
Comp Mole Frac (H2O)	0.8500	0.8283	0.1445	0.0000	1.0000			
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0250	0.7868	0.0003	0.0000			
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0004	0.0116	0.0001	0.0000			
Name	17	14	12	15	13			
Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.8256	0.9337	0.0018	0.9337	0.0018			
Comp Mole Frac (Styrene)	0.0185	0.0285	0.9982	0.0285	0.9982			
Comp Mole Frac (Toluene)	0.0658	0.0278	0.0000	0.0278	0.0000			
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0582	0.0100	0.0000	0.0100	0.0000			
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000			
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0248	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000			
Comp Mole Frac (CO2)	0.0070	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000			



KYUSHU UNIV
 Calgary, Alberta
 CANADA

Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\NINO.LAB7\ytfXfNfgbf\ \ ä'ä E%ü
 Unit Set: SI
 Date/Time: Sat Sep 06 17:48:55 2008

Workbook: Case (Main) (continued)

Compositions (continued)

Fluid Pkg: Basis-1

Name	Styrene	9	8	H2O	2
12 Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.0018	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000
13 Comp Mole Frac (Styrene)	0.9982	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000
14 Comp Mole Frac (Toluene)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000
15 Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000
16 Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	1.0000 *	1.0000	1.0000 *	1.0000
17 Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000
18 Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000
Name	16	E-Benzene	1	gas2	4
20 Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.9332 *	0.9950 *	0.9448	0.8256	0.1417
21 Comp Mole Frac (Styrene)	0.0290 *	0.0000 *	0.0235	0.0185	0.0035
22 Comp Mole Frac (Toluene)	0.0278 *	0.0000 *	0.0226	0.0658	0.0034
23 Comp Mole Frac (Benzene)	0.0100 *	0.0050 *	0.0091	0.0582	0.0014
24 Comp Mole Frac (H2O)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.8500
25 Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0248	0.0000
26 Comp Mole Frac (CO2)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0070	0.0000
Name	6	gas1			
28 Comp Mole Frac (E-Benzene)	0.1141	0.0431			
29 Comp Mole Frac (Styrene)	0.0273	0.0075			
30 Comp Mole Frac (Toluene)	0.0036	0.0035			
31 Comp Mole Frac (Benzene)	0.0014	0.0030			
32 Comp Mole Frac (H2O)	0.8283	0.1445			
33 Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0250	0.7868			
34 Comp Mole Frac (CO2)	0.0004	0.0116			

Energy Streams

Fluid Pkg: All

Name	EW1	EW2	RebDuty1	CDuty1	PW3
38 Heat Flow (kJ/h)	7.010e+008	6.679e+008	2.124e+008	2.097e+008	2.336e+004
Name	PW2	EW3	PW1	KW-2	KW-1
40 Heat Flow (kJ/h)	2965	2.733e+006	7090	2.386e+005	3.036e+005

3. 機器データの表

反応器	機器名	形式	直径[m]	長さ[m]	一本のcost[¥]	本数					cost[¥]
	PFR-100	断熱	3.75	4.28	269,607,033	36					9,705,853,201
蒸留塔	機器名	理論段数	実段数	直径	高さ	供給段数					cost[¥]
	T-101	92	115	1.5	74.8	41					79,506,723
熱交換器	機器名	熱交換量[KW]	総括伝熱係数	伝熱面積[m2]	高温側入口温度[deg C]	高温側出口温度[deg C]	低温側入口温度[deg C]	低温側出口温度[deg C]	ΔT[°C]	cost[¥]	
	HeatEX1	22,900	200	4.064070832	500.0	499.0	438.1	490.0	28.2	3,731,780	
	HeatEX2	148,200	200	42.38599934	448.1	130.0	102.0	438.1	17.5	17,131,123	
	HeatEX3	21,887	200	3.095373314	130.0	128.0	90.4	96.8	35.4	6,252,947	
	HeatEX4	5,114	200	0.764068209	130.0	130.0	90.4	102.0	33.5	1,259,294	
	HeatEX5	13,817	200	3.212088462	130.0	100.0	90.0	90.4	21.5	6,405,206	
	HeatEX6	182	200	0.042310205	130.0	100.0	90.0	90.4	21.5	191,991	
	HeatEX7	1,500	200	0.742400497	100.0	96.8	86.6	90.0	10.1	1,235,965	
	HeatEX8	16,346	200	7.024296254	96.8	61.7	48.5	86.6	11.6	5,325,778	
	HeatEX9	5,430	200	1.561187423	61.7	50.0	31.9	45.0	17.4	2,003,720	
	HeatEX10	454	200	0.195090693	96.8	61.7	48.5	86.6	11.6	518,496	
	HeatEX11	150	200	0.042999838	61.7	50.0	31.9	44.9	17.4	194,019	
	HeatEX12	50,420	200	16.18418466	58.3	50.0	31.9	45.0	15.6	9,162,211	
	HeatEX13	7,883	200	2.14230941	50.0	48.7	30.0	31.9	18.4	2,461,301	
	HeatEX14	117	200	0.044908154	50.0	37.9	30.0	30.0	13.0	199,573	
ポンプ	機器名	所要動力[kW]	流量[kmol/h]	入口圧力[kPa]	出口圧力[kPa]						
	P-101	2.5	8455.0	85.5	120.0						
	P-102	1.0	242.5	22.0	101.3						
	P-103	7.6	1219.0	15.0	120.0						
コンプレッサ	機器名	所要動力[kW]	流量[kmol/h]	入口圧力[kPa]	出口圧力[kPa]					cost[¥]	
	K-101	105.425	325	85.46	110					22,792,070	
	K-102	55.375	20	15	110					13,442,724	
合計										9,864,225,398	

4.1原料と製品の流量と価格

原料	流量[kg/h]	流量[kg/year]	単価[¥/kg]
E-Benzene	29,736	235,509,120	80
H2O	994	7,872,480	5

製品	流量[kg/h]	流量[kg/year]	単価[¥/kg]
Styrene	25,258	200,043,360	100

cost[¥/h]	cost[¥/year]
2,378,880	18,840,729,600
4,970	39,362,400

cost[¥/h]	cost[¥/year]
2,525,800	20,004,336,000

4.2用役使用量

スチーム	機器名	種類	熱交換量[MJ/h]	単価[¥/MJ]
	HeatEX1	500°Cスチーム	22,780	4
	HeatEX3,4	130°Cスチーム	22,170	1

冷却水	機器名	使用量[ton/h]	単価[¥/ton]
	HeatEX9,11~14	1,020	10

電力	機器名	所要動力[KW]	単価[¥/KW]
	K-101	105.425	15
	K-102	55.375	15
	P-101	2.461	15
	P-102	1.043	15
	P-103	7.611	15

cost[¥/h]	cost[¥/year]
91,120	721,670,400
22,170	175,586,400

cost[¥/h]	cost[¥/year]
10,200	80,784,000

cost[¥/h]	cost[¥/year]
1,581	12,524,490
831	6,578,550
37	292,397
16	123,849
114	904,217

合計	126,069	998,464,302
----	---------	-------------

4.3プラントコスト、運転費用、収益

プラント建設費用[¥]	保全費用 [¥/year]	人件費[¥/year]
49,321,126,991	1,479,633,810	400,000,000

収入[¥/year]			支出[¥/year]		
			プラント建設費	-7,045,875,284	
			保全費用	-1,479,633,810	
			人件費	-400,000,000	
			用役費用	-998,464,302	
製品価格	Styrene	20,004,336,000	原料価格	E-Benzene	-18,840,729,600
				H2O	-39,362,400
合計		20,004,336,000	合計		-28,804,065,396
			総計		-8,799,729,396

5. 今回の設計結果に至った経緯

・まず、原料と製品の価格の差に注目しました。エチルベンゼンの原料費が 80 [¥/kg]なのに対して、副製品であるトルエンの売却価格が 60 [¥/kg]、ベンゼンの売却価格が 70 [¥/kg]というものでした。これらの単位を換算するとエチルベンゼンが約 8480 [¥/kmol]なのに対してトルエンが約 5520 [¥/kmol]、ベンゼンが 5460 約 [¥/kmol]となります。つまり副製品ができればできるほど利益は下がっていくということに加えて、副製品を取り分けるために必要な蒸留塔の建設費やそのためのユーティリティコストも削減できると考えたため、副製品ができないような条件に設計することにしました。

・反応器入り口温度の設定は上記の理由があるので反応率を上げすぎてもいけないので、加熱炉を用いないで 500 スチームを用いて 490 まで温めるようにしました。

・副反応がほとんど起きていないために原料の水はほとんど残っているので、三相分離器を用いてガスと有機物と水をそれぞれ分離させて、水をリサイクルにまわしました。

・蒸留塔の設計段階では、コンデンサーとリボイラーで用いる用役のユーティリティコストが一番高くなってしまうため、スチレンの製品濃度を保つことと還流比をできるだけ小さくすることを最優先として設計しました。

・もともと反応率が低くなるように設定していたため、多量のエチルベンゼンを主成分としたものも蒸留塔からでてきました。トルエンとベンゼンはほとんど含まれていないため、新たに蒸留塔を設置しないでそのままリサイクルに回しました。

・その後完成したプロセスに対してユーティリティコストを削減することを目標に、高温流体と低温流体同士で熱交換を行うことを検討しました。そこで、ピンチテクノロジーを用いて、ユーティリティコストが最小になるように熱交換器網を設計しました。

・その次に、装置コスト削減を考え熱交換器の数を減らすために、熱交換量の少ないものや、比熱の比が同じでストリームも対応している熱交換器を一つにするなどして熱交換器網の最適化にとりかかった。

・なお今回提出した PFD のデータは熱交換器網を設計する前のものである。

2. 一般ソフトウェア・ツール部門

課 題

独自で開発したソフトウェア（計測、データ処理、シミュレーションなど）、既存のソフトウェアの新しい使い方やちょっとした工夫について発表してください。

評価方法

開発したソフトウェアの有用性や、既存ソフトウェアの使い方の工夫を総合的に評価します。

2 件の応募があり、本ページ下部に応募（8 月 8 日締切）時に記載の概要を示す。また次ページより、発表要旨各 1 ページ（9 月 5 日締切）を掲載する。

概要 (300 字以内)

(9) 東京工業大学 猪子 寛司

プロセス実験演習において、学生は機器の選択、組み合わせ、操作の最適化に必要な知識を自ら発見することが望まれる。一方、ティーチングアシスタント (TA) は学生の知識発見を適切に支援する必要がある。しかし、知識発見に必要な知識間の繋がりを適切に示唆することは、指導経験に乏しい TA には困難である。

本ツールは、知識間に繋がりを持たない学習者エージェントと、異なる専門知識構造を持つ複数のコーチエージェントから成る。そして、これらのエージェント間で相互作用を行わせ、学習者エージェントが知識間の繋がりを発見していく様子を可視化する。

知識発見の様子の可視化情報は、TA が知識間の繋がりの示唆を行う参考となるため、有用である。

(10) 名古屋大学 鈴木 博貴

本研究では、有限差分法を用いた平行平板間非圧縮性乱流の DNS において、粘性項に対してスペクトル法に近い高解像度を持つ四次および八次精度の中心 Compact Scheme を導入することにより、散逸領域である高波数域の高解像度化を試みた。スペクトル法による計算結果との比較を行った結果、高次乱流統計量の評価において精度の向上を確認した。また、パワースペクトルおよび散逸スペクトルの高波数域において、粘性項離散化の高次精度化による顕著な違いを確認した。この違いは、粗い計算格子を用いた場合により顕著に見られ、本手法の有効性が示唆された。

1. はじめに

本学の化学工学科に所属する学生が学部3年次に履修する「化学工学実験」の一テーマである「化学工学実験の計画」では、指導教員のほか、ティーチングアシスタント(TA)として博士後期課程の大学院生一名が実験スタッフとなり、学生の指導に当たっている。

「化学工学実験の計画」では、学生自らが設定した目的に合った攪拌プロセスの設計を行う。これに対し実験スタッフはディスカッションを行い、学生が設計したいプロセスに必要な知識を発見できるよう適切に支援することが望まれる。しかし、指導経験に乏しいTAは、学生の多様な提案に自身の持つ化学工学に関する知識の間に繋がりを見出すことができないため、対応することがしばしば困難である。

そこで、未熟なTAを支援するため、ディスカッションによって学生が知識項目間に繋がりを見出す様子を可視化するツールの作成を行った。

2. コーチエージェント・学習者エージェント

ディスカッションの様子を可視化するに当たり、実験スタッフを模した「コーチエージェント」、学生を模した「学習者エージェント」という2種類のエージェント間で通信を行わせることを考えた。

コーチエージェントは Fig.1 に示すように、単一の巨大な知識構造ではなく、それぞれに専門分野を設定し、知識構造を持たせた。単一の巨大な知識構造を作成するのは困難な作業である。そこで、ユーザが作成可能なサイズの知識構造を持ったコーチエージェントを複数用意し、交代で学習者エージェントの指導を行うこととした。なお、知識項目間の繋がりにはアルゴリズムがコンピュータ向きであるISM(Interpretive Structural Modeling)を用いている。

学生は機械的操作の講義などにより、攪拌プロセスの基本的な用語について知識として持っているはずである。そこで実験テキストから約80項目にのぼる知識項目を抽出し、Fig.2 に示すように、学習者エージェントに持たせた。学習者エージェントはコーチエージェント群とのディスカッションにより、知識項目間に繋がりを持つことができる。

3. ディスカッションの様子の可視化

Fig.3 はエージェント同士のディスカッションにおいて、コーチエージェントが「トルク」と「攪拌羽根径」の繋がりを学習者エージェントに示している場面である。図にあるように、ユーザが作成可能な小さな知識構造から、学習者エージェントに巨大な知識構造を持たせることができた。この巨大な知識構造の中には、コーチエージェント作成時にユーザが気付いてい

なかった間接的な繋がりがある。本ツールの可視化情報を基に、ユーザが気付いていなかった知識項目間の繋がりを知ることにより、実際のディスカッションにおいて学生に示唆できる知識項目間の繋がりに多様性を持たせることができる。

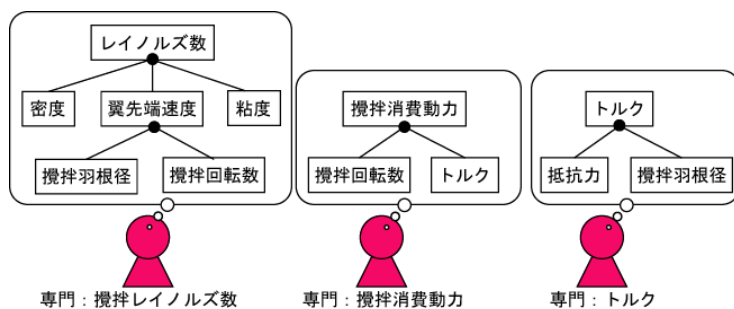


Fig. 1 コーチエージェントの例

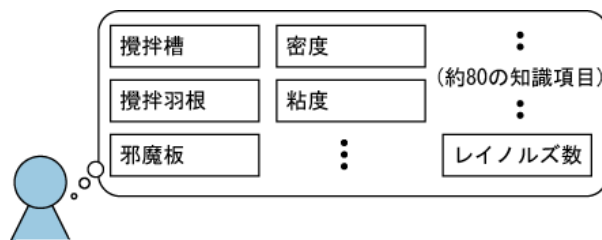


Fig. 2 学習者エージェント

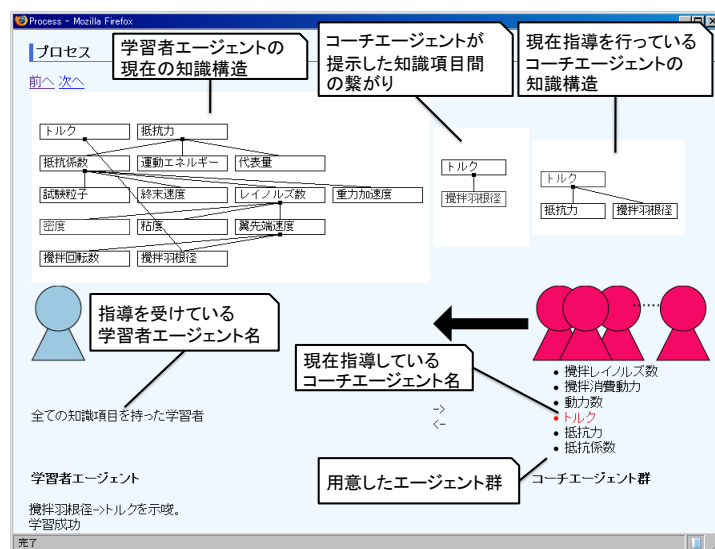


Fig. 3 ディスカッションの様子

4. 実装

本ツールはプログラミング言語 Java を用いた Web アプリケーションとして実装した。そして、エージェントの編集や知識項目の追加、ディスカッションの実行を本ツールのユーザであれば誰でも行えるようにした。さらに、他のユーザの行ったエージェント同士のディスカッションの様子や結果についても閲覧できるようになっている。

*【連絡先】 kinoko@chemeng.titech.ac.jp

有限差分法による乱流解析の精度向上に関する提案

(名古屋大学工学研究科 D1・学振 DC1)(学)○鈴木 博貴*

共同研究者:(名大工)(正)長田 孝二・(名大工)酒井 康彦・(名大工)久保 貴

1. 結論

工学的に重要な乱流現象を時間発展的に数値解析する方法として、有限差分法によるDNSおよびLESが広く用いられている。本発表では、有限差分法により再現された乱流の精度をさらに向上させる工夫として、級数展開に匹敵する解像度を持つ中心コンパクトスキーム(CCS)の導入によるN-S式の粘性項の高次精度化を提案する。粘性項の高次精度化により、従来精度の確保が難しいとされている散逸領域の精度向上が期待できる。また、Poisson方程式の求解に反復法を用いる場合において、反復計算量を増やすことなく精度を向上させることが可能であり、さらに、通常の計算ではPoisson方程式の反復計算量に比べ粘性項の計算量が極めて少ないことを踏まえると、全体の計算量の増加もわずかであると期待される。なお、検証計算コードの開発・構築はすべて発表者により行われた。

2. 中心コンパクトスキーム

CCSのセル中心における三重対角型離散式を式(1)に、各パラメータを表1に、その実効波数をFig.1に示す。ここで、 f は変数、 f_0 は変数の一階差分値、 h は計算格子間隔である。

3. 計算手法と条件

手法の効果の検証を、平均圧力勾配により駆動される平行平板間乱流のDNSにより行う。支配方程式は、連続の式、およびNavier-Stokes(N-S)方程式であり、 $Re_\tau=150$ とした。計算格子にはスタガード格子を用いた。時間進行には3次精度Runge-Kutta(RK3)法とCrank-Nicolson法(y方向粘性項)にもとづく部分段階法を用いた。Poisson方程式をFFTとTDMAを併用により直接的に求解し、連続の式の残差がマシンゼロ程度であることを確認している。N-S式の対流項、圧力項の離散化には、2-4次精度の中心差分を用いた。N-S式の粘性項の離散化には、導入を提案する4-8次精度の中心則CCS、および比較対象として2-4次精度の中心差分法を用いた。計算条件を表2に示す。

4. 計算結果

Run C1およびRun D1について、平均流速分布および平均圧力の鉛直方向分布をFig.2に、速度変動および圧力変動のrms値の鉛直方向分布をFig.3に示す。スペクトル法による計算結果と極めて良好に一致し、本計算の信頼性を確認した。Run C2およびRun D2について、壁面近傍($y^+=15$)におけるスパン方向スペクトルをFig.4に示す。粘性項に対するCCSの導入が、散逸領域の計算結果に顕著な違いを与えることが分かる。

参考文献

- 1) Lele, S.K., J.Com. Phy., **103**, 1992, 16-42.
- 2) Iwamoto, K. et al., Int. J. Heat and Fluid Flow, **23**, 2002, 678-689.

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = a \frac{-f_{i-1/2} + f_{i+1/2}}{h} + b \frac{-f_{i-3/2} + f_{i+3/2}}{3h} + c \frac{-f_{i-5/2} + f_{i+5/2}}{5h} \quad (1)$$

Table 1 CCSの係数

	CCS4	CCS8
α	1 / 22	75/354
a	12 / 11	(37950 - 39275 α) / 31368
b	0	(65115 α - 3550) / 20912
c	0	(25669 α - 6114) / 62736

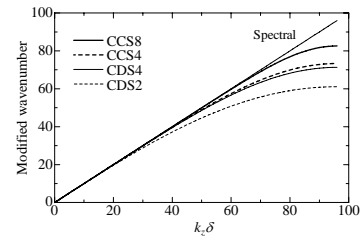


Fig. 1 CCSと中心差分法の実効波数

Table 2 計算条件

Run ID	Run C1, Run D1	Run C2, Run D2
$L_x^+ \times L_y^+ \times L_z^+$	2356 \times 300 \times 628	2356 \times 300 \times 942
$N_x \times N_y \times N_z$	256 \times 128 \times 128	128 \times 128 \times 128

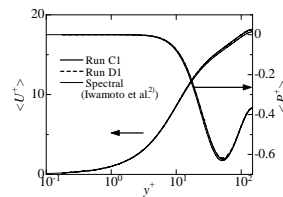


Fig. 2 平均速度および平均圧力の鉛直方向分布

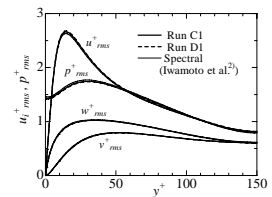


Fig. 3 速度および圧力変動のrms値の鉛直方向分布

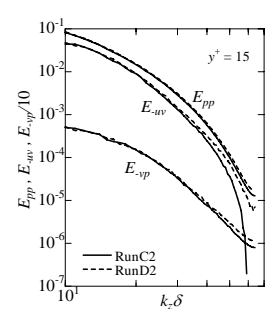
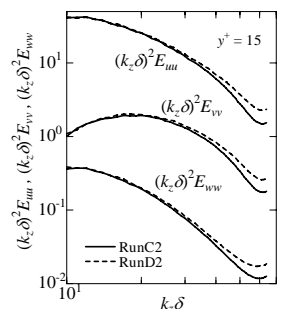


Fig. 4 スペクトルに対するCCS導入の効果

* hsuzuki@nagoya-u.jp