



化学工学会

第41回秋季大会

第8回 ソフトウェア・ツール学生コンテスト

～事前審査資料～

開催日時 : 2009年9月17日(木) 9:00～3:00pm
場所 : 広島大学 東広島キャンパス (M会場)
主催 : 化学工学会 SIS 部会 情報技術教育分科会
分科会協賛 : (株)オメガシミュレーション
コンテスト協賛 : (株)アスペンテックジャパン
出光興産(株)
インベンシス プロセス システムス(株)
住友化学(株)
(株)トクヤマ
東洋エンジニアリング(株)
(株)PreFEED
三井化学(株)
三菱化学エンジニアリング(株)

http://altair.chem-eng.kyushu-u.ac.jp/scej_contest2009/

目次

1. プロセス設計部門	
設計課題：「クメン製造プロセスの設計」.....	1
プラント建設費コスト推算法.....	9
プラント建設費コスト推算法.....	20
提出資料要項.....	22
(1) 東京農工大学チーム.....	23
工学部 化学システム工学科 永井研究室 足立 泰隆 (B4), 山下 晋平 (B4)	
(2) 東京工業大学 A チーム.....	35
大学院 理工学研究科 化学工学専攻 渕野研究室 今村 真里子 (M1)	
(3) 九州大学 A チーム.....	49
大学院 工学研究院 化学工学部門 第7講座 (栢植研究室) 小松 真一 (M1), 侯 迪思 (M1)	
(4) 京都大学 A チーム.....	58
大学院 工学研究科 化学工学専攻 プロセスシステム工学研究室 (長谷部研究室) 満洲 裕幸 (B4)	
(5) 徳島大学チーム.....	71
工学部 化学応用工学科 化学プロセス工学 C3 講座 (杉山・外輪研究室) 中澤 孝太 (B4), 山口 進太郎 (M2), 山本 篤 (M2)	
(6) 東京工業大学 B チーム.....	84
大学院 理工学研究科 化学工学専攻 渕野研究室 荻原 一晃 (M1)	
(7) 静岡大学チーム.....	97
工学部物質工学科化学システム工学コース 武田研究室 大西 智士 (M1), 永谷 英之 (M2), 大嶋 啓奨 (B4), 深見 孝志 (B4)	
(8) 九州大学 B チーム.....	105
大学院 工学研究院 化学工学部門 第7講座 (栢植研究室) 小関 慶一 (M1), 松本 雄一郎 (M1)	
(9) 京都大学 B チーム.....	114
大学院 工学研究科 化学工学専攻 移動現象論研究室 (山本研究室) 鈴木 裕介 (B4), 加藤 誠 (B4)	
(10) 東京工業大学 C チーム.....	133
大学院 理工学研究科 化学工学専攻 関口研究室 高橋 祐介 (M1), 石毛 克弥 (M1), キム サンユン (M1)	
2. モデリング・シミュレーション部門	
モデリング・シミュレーション部門課題について.....	141
提出資料要項.....	142
(10) 名古屋大学チーム.....	(未)
大学院 工学研究科 機械理工学専攻 統計流体工学研究室 (酒井研究室) 鈴木 博貴 (D2)	

情報技術教育分科会

平成 21 年度 「ソフトウェア・ツール学生コンテスト」プロセス設計課題

クメン製造プロセスの設計(Rev. 0※)

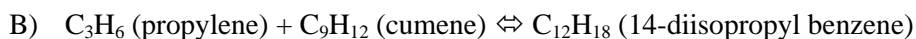
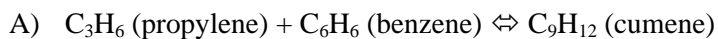
※最新版の Rev. Number は、HP 上で確認してください。

1. 概要:

クメン(イソプロピルベンゼン)は、ベンゼンとプロピレンを原料とし、酸触媒下で合成される。1939～1945年(第二次世界大戦)には、高オクタン価航空機ガソリン燃料の需要に応えるために製造されたが、今日では、世界中の生産の殆どが、クメン法によるフェノールおよびアセトンの工業的合成法の中間体として、製造されている。

長年にわたり、固体燐酸触媒を用いた気相アルキレーションプロセスが主な製造プロセスであったが、収率に限界があることや、触媒が再生できないために廃棄物が大量に発生するといったデメリットから、近年ゼオライト触媒の技術を適応した液相合成プロセスが開発され、多くの製造会社が、気相アルキレーションプロセスから代替してきた。

ベンゼンとプロピレンによるアルキレーションでは、A)に示す主反応のほかに、主に B)に示す(メタ、パラ)ジ・イソプロピルベンゼン(DIPB)を生成する副反応が起こる(但し、ここでは、パラ・ジ・イソプロピルベンゼンを代表成分として考える)。いずれの反応も発熱反応であり、DIPBの生成を抑えるために、工業プロセスのアルキレーション反応器では、ベンゼン過剰で運転するように設計される。



燐酸触媒を用いた気相アルキレーションプロセスでは、アルキレーション反応器入り口で、プロピレン対ベンゼンモル比で、約 1:10 とベンゼン大過剰をベースに設計することで、DIPBの生成を抑えているが、新規ゼオライト触媒による液相プロセスでは、ゼオライトの形状選択性により、より少ないベンゼン過剰率で DIPBの生成を抑制することを可能するとともに、アルキレーション反応器で生成した DIPBを、R)に示す反応によりクメンに転換するためのトランスアルキレーション用ゼオライト触媒(液相)を開発し、この反応器を導入することで、高い収率(ここでは、原料ベンゼンの製品クメンへ転嫁率として定義する)を実現している。



2. プロセス設計:

2-1 課題

純度 99.9wt% 以上のクメンを、収率 95% 以上で 250,000(t/yr) 製造する液相アルキレーション・トランスアルキレーションプロセスを設計せよ。但し、年間稼働時間は 8,000 (hr/yr) とする。

2-2 設計条件

(1) 原料 (BL) 条件 (BL: Battery Limit)

- ベンゼン: 1.013[bar]、25[°C]、Benzene: 99.8[mol %]、n-Hexane: 0.2[mol%]
- プロピレン: 11.12[bar]、25[°C]、Propane: 30.0[mol%]、Propylene: 70[mol%]
<注意>: プロピレンには、ポリマーグレード、ケミカルグレード、リファイナリーグレードがあり、ここで利用できるプロピレンは、リファイナリーグレードを想定している。

(2) 製品、複製品 (BL) 条件

- クメン: 純度 99.9wt% 以上、1.013[bar]、40[°C] (冷却水で冷やせるレベルまで)
- オフガス: 1.013[bar]~5.0[bar]、15[°C]~40[°C]、ガス
- 蒸留塔残渣: 1.013[bar]、40[°C] (冷却水で冷やせるレベルまで)
- その他パージ: 1.013[bar]、40[°C] (冷却水で冷やせるレベルまで)

(3) ユーティリティ

以下のユーティリティが利用可能である。

- HP Steam 254[°C] sat. vapor で供給、254[°C] sat. liquid で戻しても、3[bar] liquid で戻してもかまわない。コンデンセートの顕熱を利用してもかまわない。
- MP Steam 186[°C] sat. vapor で供給、186[°C] sat. liquid で戻しても、3[bar] liquid で戻してもかまわない。コンデンセートの顕熱を利用してもかまわない。
- LP Steam 160[°C] sat. vapor で供給、160[°C] sat. liquid で戻しても、3[bar] liquid で戻してもかまわない。コンデンセートの顕熱を利用してもかまわない。
- 冷却水 30[°C] 供給、40[°C] 戻り
- 冷媒 5°C 供給 15°C 戻り
-20°C 供給 -20°C 戻り
-50°C 供給 -50°C 戻り
- 電力 (220V)
- この他のユーティリティ (蒸気、冷媒) を利用する場合には、BL 内に内製する設備の設置を計画してもかまわない (3-5、4-5 参照)。但し、BL 内に設置される全ての機器は、「5-1」にあるプラント建設費に含まれる。
- 燃料 (Butane を想定する)、2[bar]、25[°C]
- ボイラー給水 (3[bar] 飽和脱気水)、使用後は 3[bar] liquid で戻す。

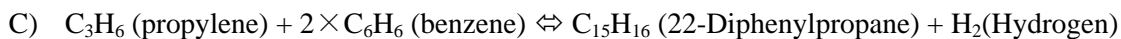
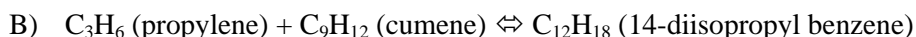
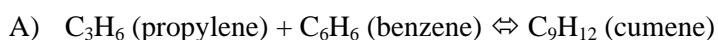
3. 設計上の注意点:

3-1 物性

Peng-Robinson 物性推算式を使う。

3-2 アルキレーション触媒／反応／反応器

アルキレーション触媒では、以下の3種類の反応が起こる。



Propane および n-Hexane は、反応には関与しない。フローシートシミュレーションによるプロセス全体の物質収支、熱収支計算をする上では、反応 A)、B)については、平衡反応器を仮定して、パフォーマンスを推定することができる。但し、平衡定数は、モル濃度基準の以下のものを使用し、平衡達成度は、Temperature Approach を用いることとする。

反応 A) クメン生成反応

	325[C]	300[C]	275[C]	250[C]
Keq	2760.356	8115.224	23329.03	70283.03

Temperature Approach = 11.5[K]

反応 B) DIPB 生成反応

	325[C]	300[C]	275[C]	250[C]
Keq	9694.152	19647.7	42163.03	97350.79

Temperature Approach = 0.0[K]

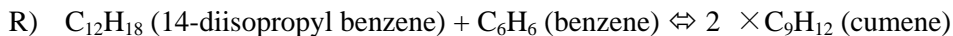
但し、利用するプロセスシミュレータによっては、回帰式が与えられて回帰パラメータを入力するように指定されているものもある。その場合には、上記平衡定数より、予め各自で回帰パラメータを推定しておく必要がある。

また、反応 C)は極微量の反応であり、フローシートシミュレーションによるプロセス全体の物質収支、熱収支計算をする上では、アルキレーション反応器(反応器システム)入り口のベンゼンモル流量に対して、転嫁率 0.03%で考えることができる。

アルキレーション反応は、液相反応であり、反応圧力は 27[bar]を仮定する。圧力損失は、反応器システム全体として 4[bar]を見込んでおく。また、発熱反応であり、オリゴマー等の生成を抑制するために、反応は 120[C]から 180[C]の範囲で行わなければならない。このため、クメン生成反応を進め、かつこの温度範囲で操作するためには、何らかの方法で流体の温度を下げる必要がある。但し、本課題では、触媒の抜き出し等保全を考え、反応器は断熱反応器のみとする。温度を下げる方法としては、多段の触媒層を設計し、クエンチや外部熱交換器によって触媒層出口流体の温度を下げて、次の触媒層に供給することが考えられる。但し、外部熱交換器を使用するためには、構造上反応器シェルは分割しなければならない。

3-3 トランスアルキレーション触媒／反応／反応器

トランスアルキレーション触媒では、R)に示す反応が起こる。



フローシートシミュレーションによるプロセス全体の物質収支、熱収支計算をする上では、反応D)についても、平衡反応器を仮定して、パフォーマンスを推定することができる。但し、平衡定数は、モル濃度基準の以下のものを使用し、平衡達成度は、Temperature Approach を用いることとする。

	150[C]	175[C]	200[C]	225[C]	250[C]
Keq	2.035864	1.589202	1.240486	0.968635	0.756848

Temperature Approach = -117[K]

但し、利用するプロセスシミュレータによっては、回帰式が与えられて回帰パラメータを入力するように指定されているものもある。その場合には、トランスアルキレーションと同様に、上記平衡定数より、予め各自で回帰パラメータを推定しておく必要がある。

トランスアルキレーションも液相反応であり、反応圧力は 16[bar]を仮定する。圧力損失は、反応器全体として 2[bar]を見込んでおく。反応器は断熱一段反応器を仮定する。反応温度は 170°Cであり吸熱反応であるが、吸熱量が少ないため、温度の変化は無視できる。

3-4 分離プロセス

本プロセスで取り扱う主要成分は、蒸気圧の高い準に hydrogen, propylene, propane, n-hexane, benzene, cumene, 14-diisopropyl benzene, 22-Diphenylpropane である。この系では2液系や共沸状態を作らないため、分離には蒸留操作を用いることができるが、他の分離タスクを選択してもかまわない。ただし、その場合パフォーマンスに関して、実績や物理・化学的なモデルに基づき、十分に検討する必要がある。

原料ベンゼンに対するクメンの収率 95%、クメン純度 99.9%を達成するためには、分離プロセスの仕様を十分に検討する必要がある。特に蒸留を使う場合、Light Key Component=Benzene, Heavy key Component=Cumene の分離ポイントにおいて、Benzene の Heavy 側への混入は、製品 Cumene 純度制約を阻害する要因となるので注意が必要である。

3-5 フローシートシミュレーション(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。反応器以外、配管、塔内、熱交換器内での圧力損失は無視してよい。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。制御系を考慮する必要

はない。また、各装置の熱損失は無視してよい。

必要であれば、加熱用または動力用蒸気を発生するために加熱炉をBL内に計画してもかまわない。この場合、燃料はButaneを想定し、燃焼ガス温度は、燃焼空気は5%過剰で、断熱燃焼を仮定して求める。燃焼ガスのエンタルピーはスタック出口温度250[°C]まで回収することができるものとする。燃料としてプロセス内で発生するオフガス(Propane)を使って、燃料コストを削減してもかまわない。蒸気発生する場合、BLにてボイラー給水(脱気水)3[bar]飽和水を利用でき、使用後は3[bar]liquidで戻す。

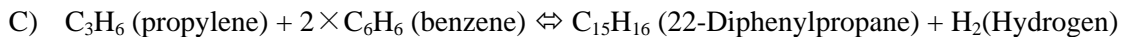
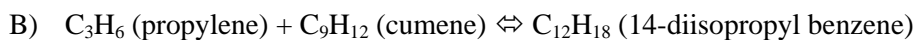
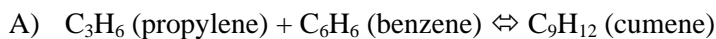
4. 機器設計・サイジング

4-1 触媒量及び反応器サイズ

フローシートシミュレーションによるプロセス全体の物質収支、熱収支計算の結果から、アルキレーション、トランスアルキレーション反応器の触媒量、反応器サイズを算出するには、以下に示すアレニウス式に基づく反応速度式を用いる。

4-1-1 アルキレーション触媒、反応器

前出の通り、アルキレーション触媒上では、以下 A)～C)の反応が起こるが、C)は生成量が微量であるので、必要な触媒量を算出するにあたっては、無視することとする。



A) Cumene 生成反応

$$C_3H_6 + C_6H_6 \xrightarrow{k_1} C_9H_{12}$$
$$r_1 = k_1 \cdot C_P \cdot C_b \quad [mol / L_{cat} / sec]$$
$$k_1 = 1.20 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-1.04 \times 10^5}{RT}\right)$$

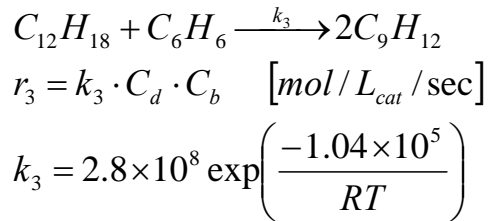
B) DIPB 生成反応

$$C_3H_6 + C_9H_{12} \xrightarrow{k_2} C_{12}H_{18}$$
$$r_2 = k_2 \cdot C_P \cdot C_c \quad [mol / L_{cat} / sec]$$
$$k_2 = 2.0 \times 10^{15} \exp\left(\frac{-1.47 \times 10^5}{RT}\right)$$

但し、 C_P 、 C_b 、 C_c は、Propylen、Benzene、Cumene のモル濃度[mol/L]、反応速度の単位系は、単位有効触媒容量[L_{cat}]当たりの Propylene のモル消費速度[mol/sec]で表し、温度は Kelvin[K]、触媒空隙率=0.5、活性化エネルギーの単位系は[J/mol]である。

反応器サイズは、実触媒容量で算出することができ、Length/Diameter=4.0とする。

4-1-2 トランスアルキレーション触媒、反応器



但し、 C_d 、 C_b は、DIPB、Benzene のモル濃度[mol/L]、反応速度の単位系は、単位有効触媒容量 $[L_{cat}]$ 当たりの DIPB のモル消費速度[mol/sec]で表し、温度は Kelvin[K]、触媒空隙率=0.5、活性化エネルギーの単位系は[J/mol]である。

反応器サイズは、実触媒容量で算出することができ、Length/Diameter=5.0 とする。

4-2 蒸留塔の直径

蒸留塔は段塔を仮定し、塔径はフラッディング等が生じない許容蒸気質量速度に基づき決定される。許容蒸気質量速度の推算方法は、トレータイプによって異なるが、シーブトレーを仮定して、次の式で推算することができる。

$$G^* = SF \cdot K \cdot \sqrt{\rho_v \cdot (\rho_l - \rho_v)}$$

但し、 G^* :許容蒸気質量速度(空塔基準)[kg/m²-s]、 SF :系補正係数、 K :段間隔と液表面張力より求まる許容蒸気速度係数[m/s]、 ρ_l :蒸気密度[kg/m³]、 ρ_v :液密度[kg/m³]である。ここでは、段間隔は、塔径に関係なく 0.6[m]とし、許容蒸気速度係数 K には、0.05[m/s]を用いる。また、系補正係数 SF には、0.8 を用いることとする。段数の計算には、段効率 80%を用いる。塔頂は、還流供給・気液の分離のため 2[m]、塔底部は、液ホールドアップのため 4[m]必要とし、原料供給段は段間隔+1[m]とする。

4-3 容器サイズ

液ホールドアップ量を滞留時間 3[min]をベースに求め、横置き容器(蒸留塔のオーバーヘッドのリザーバー等)、は、NL(Normal Liquid Level)を 50%、Length/Diameter=3.0 を用い、縦置き容器(フラッシュドラム等)は、NL=20%、Length/Diameter=2.0 を用いてサイジングせよ。

4-4 熱交換器サイズ

総括熱伝達係数 U [W/m²-K] として、流速に関係なく以下の値を用い、

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_m$$

を用いて伝熱面積 A [m²]を求める。但し、熱交換器内部で流体の C_p が大きく変化する場合(沸点や露点を通過する場合は)、 ΔT_m の計算には、Weightedを用いる必要があるので注意すること。

高温流体	低温流体	総括伝熱係数 [W/m ² -K]
ガス	ガス	200
液	ガス	200
液	液	300
ガス(凝縮)	液(蒸発)	1,500
ガス	液	200
ガス(凝縮)	ガス	500
ガス(凝縮)	液	1,000
ガス	液(蒸発)	500
液	液(蒸発)	1,000

4-5 回転機

4-5-1 ポンプ

所要動力を求める。ドライバーは電動機(モーター)を用いる。電動機の機械的ロス、所要動力の2%とする。

4-5-2 コンプレッサー

必要があれば、コンプレッサーの導入を計画してもかまわない。但し、コンプレッサーは断熱効率80%で所要動力を求め、ドライバーは電動機でも、BL内で内製する動力用蒸気による、蒸気タービン(復水タービンとし、復水機出口圧力は、0.28[bar])でもかまわない。但し、蒸気タービンの場合、断熱効率は80%とする。ドライバーの機械的ロスは、所要動力の2%とする。

4-6 その他必要となる機器

その他必要となる機器に関するパフォーマンスデータや機器設計データは、十分に検討の上各自が準備すること。

5. プロセス設計評価基準

製品純度、年間生産量および収率を満たした上で、プロセス設計評価基準として、プラント建設費と原料・ユーティリティ等直接運転費用による、年間費用(Annualized Cost)を使用する。プラント償却期間を10年、利子、イン플레이ション、インシュランスプレミアム、リスクプレミアム等は考慮せず、単純償却(ストレートライン)によって年間償却費用を算出する。また、直接運転費用は、年間稼働時間を8,000時間とし、原料費+ユーティリティ費用によって算出する。副生するオフガス、残渣、内製した余剰ユーティリティ等は、クレジットしない。

5-1 プラント建設費

プラント建設費用の推算には、BL内のすべての主要機器(反応器、蒸留塔、トレー、容器、熱交換器、ポンプ等)のFOBコストをベースとするFactored Estimation Method(G. D., "A Guide to

“Chemical Engineering Process Design and Economics”, Wiley, New York (1984)を用いる。推算式は別ファイルとして後日配布する。アルキレーション及びトランスアルキレーション触媒の費用は、建設費に含め、再生にかかる費用は無視する。触媒の費用は、ライセンス費用を含めて、アルキレーション触媒、トランスアルキレーション触媒ともに、10,000[\$/m³]で算出する。

5-2 直接運転費

(1) 原料

・ベンゼン	0.657[\$/kg]
・プロピレン(リファイナリーグレード)	0.736[\$/kg]

(2) ユーティリティ

・HPスチーム (254[°C]sat.)	29.97[\$/ton]
・MPスチーム (184[°C]sat.)	20.08[\$/ton]
・LPスチーム (160[°C]sat.)	17.08[\$/ton]
・冷却水 (30[°C]供給、40[°C]戻り)	14.8[\$/1000ton]
・冷媒 (5°C 供給、15°C 戻り)	4.43[\$/GJ]
(-20°C 供給、-20°C 戻り)	7.89[\$/GJ]
(-50°C 供給、-50°C 戻り)	13.11[\$/GJ]
・電力	0.06[\$/kWh]
・燃料	11.1 [\$/GJ](Low Heating Value of Butane)
・ボイラー給水	2.45[\$/ton]

プラント建設費コスト推算

Revision 0

1. 概要

コスト推算には、G. D. Ulrich が 1984 年に「A Guide to Chemical Engineering Process Design and Economics」(Wiley)の中で示した、Bare Module Cost Estimation と呼ばれる、Factored Estimation 法を用います。コストデータ、および推算式は“プラント建設費_R0.xls(又は plant_costestimate_R0.xls)”という名前の MS-Excel のファイルに入れてあり、サイジングの情報を所定のシートのコラムに入力してゆくと、2008 年現在のプラント建設費を計算するようになっていきます。このファイルを作成するに当たって、参照した資料は、R. Turton, R.C.Bailie, W.B.Whiting, J.A.Shaeiwitz, “Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes,” Prentice Hall です。参考書のデータは、1996 年現在のものです。CEPCI (Chemical Engineering Cost Index) = 382 ですので、2008 年現在のコストに直すのに、2008 年の CEPCI (= 575.4) を用いてスライド計算して求めるようにしてあります。

Ulrich のプラントコスト推算方法は、まず、機器のサイズやキャパシティを代表する値： A に対して、常圧操作を仮定し、炭素鋼で作られた場合の機器購入コスト (FOB コスト)： C_P を次の式で算出します。

$$\log_{10} C_P = K_1 + K_2 \log_{10} A + K_3 (\log_{10} A)^2$$

K_1 、 K_2 、 K_3 は、機器の種類、タイプによって異なる定数で、 A は例えば熱交換器であれば伝熱面積です。これに対して操作圧力： P がコストに影響するファクター (Pressure Factor) F_P を次の式で算出します。

$$\log_{10} F_P = C_1 + C_2 \log_{10} P + C_3 (\log_{10} P)^2$$

C_1 、 C_2 、 C_3 は、機器の種類、タイプによって異なる定数で、 P の単位は barg (ゲージ圧) です。 F_P は 1 以上の数で、 P は必ず最小最大の範囲に入っていなければなりません。更に Ulrich の方法では、材料の種類がコストに与える影響を考慮したファクター (Material Factor) F_M を導入します。 F_M は機器の種類、タイプによって一意に与えられる 1 以上の数として推算されます。そして、これらの基準となる購入コスト、Pressure Factor、Material Factor より、直接非、間接非を含む機器設置コストとしての Bare Module コスト C_{BM}^0 を算出します。

$$C_{BM}^0 = F_{MB}^0 \cdot C_P = (B_1 + B_2 \cdot F_M \cdot F_P) \cdot C_P$$

F_{BM}^0 は Bare Module Factor と呼ばれ、 B_1 、 B_2 は機器の種類、タイプによって異なるコストファクターです。 C_{BM}^0 の単位は当然ですが US \$です。 C_{BM}^0 は、配管、計装、土建にかかわる間接、直接設置費用ですので、主要機器の Bare Module コストの総和がプラント設置コストとなります。このプラント設置コストから、プラント建設コストを算出するには、建設にかかわる不測の損失や予備品費用を加味しなければなりません。この費用は我々が想像するよりもはるかに大きく、ここでは、プラント設置コストに比例したコストとして算出しています。この損失や予備品費用のことを、Contingency と呼び、このコストファクター (Contingency Factor) F_C を用いて、プラント建設コスト C_{BM} を次の式で計算します。

$$C_{BM} = (1 + F_C) \sum C_{BM}^0$$

F_C の値は、細かく言えばプロジェクトによって異なりますが、Contract Value として考えると、統計的に 15% ~ 20%です。ここでは 18%を採用しています。ここで示したプラント建設コストは、既存のコンビナートの中に、プラントを建設する場合のコストです。しかし、場合によっては全く新たに土地を切り開いてプラントを建設する場合もあるでしょう。このような場合のプラントのことを、Grass Roots Plant と呼び、そのときの建設コストを Grass Roots Cost と言います。Grass Roots Cost の見積もりは、場所による差が非常に大きいので、精度的は Factored Estimation として推算するのは難しいですが、Ordered Magnitude レベルで考えるのであれば、プラント建設コスト C_{BM} に、Grass Roots Factor : F_G を掛けて算出します。但し、ここでは既存のコンビナートの中に建設をすることを考えて、Grass Roots Plant の取り扱いについては省略します。

Factored Cost Estimation というと、歴史的には Lang Factor Method から始まると考えて間違えはないでしょう。プラントの建設費用で、直接データとして得られる値は、機器の船積み出荷価格 (FOB) と (契約上の) 建設費です。Lang Factor Method では、この FOB コストと建設費の関係に注目し、主要機器の総 FOB と建設費の関係を、プロセスの種類によって異なる、Lang Factor : f_L という比例乗数で関係付けています。「化学プラントの建設費は、主要機器コスト (FOB) の約 3 倍」というのは、この Lang Factor のことを言っています。Lang Factor Method 以降、Guthrie (Guthrie, K.M., "Capital Cost Estimation", Chem. Eng., 76(3), 114, 1969.) や、Ulrich (Ulrich, G.D., "A Guide to Chemical Engineering Process Design and Economics", Wiley, New York, 1984.) らによって、プラントコストのコスト構造の解析とそれに基づくデータの整理が行われ、「主要機器の常圧・炭素鋼を仮定した FOB ベースコスト」と「配管・計装・土建費用を含む主要機器モジュールの設置コスト」との関係を表す Bare Module Factor を機器の種類、タイプ、操作圧力、使用材料によって推算する方法へと展開してきています。これにより、総 FOB コストの係数倍でプラント建設コストを推算するのに比べて、精度が格段に向上したばかりか、プロセス設計の違いを、Bare

Module の設置コストの差として捕らえることができるようになり、プラント建設費における重みを容易に理解できるようになったことが重要です。

以上のような、コスト推算の流れを、Excel ファイルで行えるようにしてあります。以下、Sheet の構成、各シートの入力について説明します。

2 . Spread Sheet の構成

MS-Excel2003 で作ってあります。シートは、3 種類に分かれます。

- 1、機器の種類ごとの Bare Module Cost 推算用シート
- 2、機器の種類ごとのコストデータシート
- 3、プラント建設費算出シート

機器種類に対応する上記 1、2 のシート名との関係は以下のとおりです。

機器種類	1、機器の種類ごとの Bare Module Cost 推算用シート	2、機器の種類ごとのコストデータシート
Vessel	ProcessVessel	PV_Coeff
Sieve Tray	Sieve_Trays	-
Heat Exchanger	HeatExchanger	HE_Coeff、HE_FM
Pump	Pump+EL_DRV	Pump_Coeff、Pump_FM
Compressor	Compressor	Comp_Coeff
Compressor Driver	Driver_for_Compressor	DRV_Coeff
Furnace	Furnace	Furnace_Coeff

「3、プラント建設費算出シート」は、「Plant_Constraction_Cost」シートです。

機器の種類としては、Heat Exchanger、Vessel、Sieve Tray、Pump(モータードライバー付)、Compressor(ドライバーなし)、Compressor Driver、Furnace の 7 種類を準備しました。その他の機器に関しては、必要があれば各自調べて、1998 年のモジュール設置コストとして、「3、プラント建設費算出シート」の Equipment Category と書かれている部分の空白欄に入力してください。

各機器の Item Number、Type、キャパシティ、圧力、材料を「1 .機器の種類ごとの Bare Module Cost 推算用シート」に入力、もしくはプルダウンから選択すると、「2 .機器の種類ごとのコストデータシート」のパラメータを使って Bare Module Cost を算出します。「1 .機器の種類ごとの Bare Module Cost 推算用シート」の内部の行・列の値の参照は、相対位置を使っていますので、必要があれば行・列の挿入は可能です。しかし、「2 .機器の種類ごと

の「コストデータシート」の行・列の値の参照は、絶対位置を使っていますので、「2. 機器の種類ごとのコストデータシート」の変更は行わないでください。

次に各「機器の種類ごとの Bare Module Cost 推算用シート」および「プラント建設費算出シート」の入力・出力について説明します。

3. 機器の種類ごとの Bare Module Cost 推算用シートおよびプラント建設費算出シートの入出力

各シートの欄は薄緑と、薄い青で色分けされています。緑は入力欄を、青は出力欄を表しています。

3 - 1 : Vessel

No	Item Number	Type	Diameter[m]	Minimum Length [m]	Maximum Length [m]	Vessel Length [m]	Cp: Purchase Cost Assuming Ambient Operating Pressure and Carbon Steel Construction. [\$]	Operating Pressure [bars]	FP: Pressure Factor	Material	FM: Material Factor	Bare Module Cost [[\$]
11	0 Example	Vertical	1	2.5	30	20	\$46,941	10	1.5204	CS	1	\$240,147
12	1		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
13	2		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
14	3		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
15	4		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
16	5		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
17	6		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
18	7		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
19	8		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
20	9		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
21	10		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
22	11		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
23	12		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
24	13		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
25	14		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
26	15		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
27	16		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
28	17		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
29	18		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
30	19		0.3	0	0	1	\$1	1	1	CS	1	\$0
31												\$0

コマンド: NUM

ファイルパス: \\Plant_Construction_Cost\ProcessVessel\Sieve_Trays\HeatExchanger\Pump+EL_DRV\Compressor\Driver_for_Compressor\Furnace\PV_Cox

- (1) ProcessVessel のシートを選択します。Vessel には、蒸留塔の Column や Overhead Condenser の Preserver が含まれます。
- (2) Item Number を入力し の Type をプルダウンから選択します。Type には「Vertical」と「Horizontal」があり、これが選択されていないと、Bare Module Cost は\$0 となります。
- (3) Diameter は、0.3, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 4m の中から選択するようになってい

ます。切り上げで適当な数値を選択してください。デフォルトで 0.3 が選択されていますが、この値が 0 であると、他の欄で不都合が生じますので、使わない Item であっても、Diameter の値は消さないでください。

- (4) Diameter が選択されると、その Diameter に対して、最小・最大長さ が 示されますので、この範囲で に長さを入力してください。すると、常圧操作圧力で CS を材料とした場合のこの Vessel の FOB コスト計算して の欄に示します。
- (5) に操作圧力を入力し、 で材料を選択すると、Pressure Factor、Material Factor を出力して にこの Vessel の Bare Module Cost を出力します。
- (6) Vessel 類の Bare Module Cost の和は、 にあらわされます。

3 - 2 Sieve Tray

蒸留塔は、段塔を仮定し、Tray は Sieve Tray でコストを算出します。

No.	Tower Item Number	Dia. [m]	Cp: Purchase Cost Assuming Carbon Steel Construction. [\$/Tray]	Number of Trays	Fq: Quantity Factor	Material	FM: Material Factor	Bare Module Cost [\$]
11	0	2	\$575	32	1	SS	2	\$96,792
12	1							
13	2							
14	3							
15	4							
16	5							
17	6							
18	7							
19	8							
20	9							\$0

入力は Vessel 類とほぼ同様の手順で行います。

- (1) Sieve_Trays のシートを選択し、Tower の Item Number を入力し、 に Tower の Diameter を入力します。材料を CS とした場合の Tray1 枚の FOB コストを出力します。
- (2) Tower の必要段数を入力すると、ディスカウントの逆数のような Quantity Factor を出力します。更に材料として、CS、SS の何れかを選択すると、Material Factor を

出力し、段数分の Tray の Bare Module コストを の欄に出力します。全ての塔の Tray の Bare Module コストの和は、 に算出されます。

3 - 3 Heat Exchanger

No	Item Number	Heat Transfer Area (m2)	Heat Exchanger Type	Cp. Purchase Cost Assuming Ambient Operating Pressure and Carbon Steel Construction.[\$]	Shell Operating Pressure [bar(£)]	Tube Operating Pressure [bar(£)]	Pp. Pressure Factor	Shell Material	Tube Material	FM. Material Factor	Bare Module Cost [\$]
9	1	170	Floating Head	\$19,629	6	6	1	CS	CS	1	\$64,775
10	2	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
11	3	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
12	4	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
13	5	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
14	6	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
15	7	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
16	8	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
17	9	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
18	10	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
19	11	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
20	12	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
21	13	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
22	14	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
23	15	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
24	16	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
25	17	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
26	18	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
27	19	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
28	20	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
29	21	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
30	22	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
31	23	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
32	24	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
33	25	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
34	26	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
35	27	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
36	28	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
37	29	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
38	30	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
39	31	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0
40	32	1		\$0	1	1	1	CS	CS	1	\$0

- (1) HeatExchange のシートを選択し、伝熱面積を入力します。Type は、Fixed Tube Sheet or U-tube、Floating Head、Kettle Boiler から選択します。に常圧操作・SC を仮定したこの熱交換器の FOB コストを出力します。Type の欄が空欄の場合には Bare Module Cost の値は 0\$ となります。伝熱面積の欄で、使用されない Item にデフォルトで 1 が入っていますが、これを 0 もしくは空欄にすると他の欄の計算でエラーが出ますので、使用しない場合でも 1 を入れておいたままにしてください。
- (2) Shell Side, Tube Side の操作圧力 に入力します。但し、Vacuum 条件はこの推算式の範囲に入っていないので、Vacuum の場合は、その流体を Shell Side とし、20[barg] を入力しておいてください。Shell Side、Tube Side の操作圧力の組み合わせに従って、Pressure Factor を出力します。伝熱面積同様に、使用しない熱交換器の欄にデフォルトで操作圧力に 1 が入っていますが、これを 0 もしくは空欄にすると他の欄の計算でエラーが出ますので、使用しない場合でも 1 を入れておいたままにしてください。
- (3) Shell、Tube の材質を、 で SC、SS から選びます。Shell、Tube の組み合わせに応じた Material Factor を出力し、Bare Module コストを に出力します。Heat Exchanger

の Bare Module コスト総和は、スクロールダウンして、右下の欄に計算されるようにしてあります。

3 - 4 Pump with Electric Driver

No.	Item Number	Pump Type	Shaft Power [kW]	Number of Pumps	Cp: Purchase Cost Assuming 10 [barg] Suction Pressure and Cost Imp. [\$]	Suction Pressure [barg]	FP: Pressure Factor	Material	FM: Material Factor	Bare Module Cost [\$]
1	Example	Centrifugal	5	2	\$13,137	15	1.2459063	Castiron	1	\$48,360
2			5	0	\$0	1	0		0	\$0
3			5	0	\$0	1	0		0	\$0
4			5	0	\$0	1	0		0	\$0
5			5	0	\$0	1	0		0	\$0
6			5	0	\$0	1	0		0	\$0
7			5	0	\$0	1	0		0	\$0
8			5	0	\$0	1	0		0	\$0
9			5	0	\$0	1	0		0	\$0
10			5	0	\$0	1	0		0	\$0
11			5	0	\$0	1	0		0	\$0
12			5	0	\$0	1	0		0	\$0
13			5	0	\$0	1	0		0	\$0
14			5	0	\$0	1	0		0	\$0
15			5	0	\$0	1	0		0	\$0
16			5	0	\$0	1	0		0	\$0
17			5	0	\$0	1	0		0	\$0
18			5	0	\$0	1	0		0	\$0
19			5	0	\$0	1	0		0	\$0
20			5	0	\$0	1	0		0	\$0
21			5	0	\$0	1	0		0	\$0
22			5	0	\$0	1	0		0	\$0
23			5	0	\$0	1	0		0	\$0
24			5	0	\$0	1	0		0	\$0
25			5	0	\$0	1	0		0	\$0
26			5	0	\$0	1	0		0	\$0
27			5	0	\$0	1	0		0	\$0
28			5	0	\$0	1	0		0	\$0
29			5	0	\$0	1	0		0	\$0
30			5	0	\$0	1	0		0	\$0
31										\$0
32										\$0
33										\$0
34										\$0
35										\$0
36										\$0

- (1) Pump+EL_DRV のシートを選択します。Item Number を記入して、 で Pump Type として、Centrifugal か、Reciprocating を選択します。Pump の所要動力[kW]を を入力します。この Shaft Power の欄は、他の例と同様に、上書きするかデフォルトの値をそのままにしておくかどちらかにしてください。
- (2) の Number of Pumps には、Stand-by を含めた台数を記入します。すなわち、1 + 1 であれば 2 を入力します。 には、 で入力した Pump+EL_Driver 数分の常圧・CS を仮定した Pump の FOB コストが示されます。 、 で Pump 入り口圧力、材質を入力または選択し、Pressure Factor、Material Factor を算出し、 Bare Module コストを得ます。
- (3) 総 Pump+EL_Driver コストは、 欄に示されます。

3 - 5 Compressor without Driver

No.	Item Number	Compressor Type	Wfmin	Wfmax	Material	Fluid Power [kW]	Purchase Base Cost [\$]	Bare Module Cost [\$]
0	Example	Centrifugal	50	8000	SS	1000	\$719,615	\$4,533,572
1			0	0		1	\$1	\$0
2			0	0		1	\$1	\$0
3			0	0		1	\$1	\$0
4			0	0		1	\$1	\$0
5			0	0		1	\$1	\$0
6			0	0		1	\$1	\$0
7			0	0		1	\$1	\$0
8			0	0		1	\$1	\$0
9			0	0		1	\$1	\$0
10			0	0		1	\$1	\$0
11			0	0		1	\$1	\$0
12			0	0		1	\$1	\$0
13			0	0		1	\$1	\$0
14			0	0		1	\$1	\$0
15			0	0		1	\$1	\$0
16			0	0		1	\$1	\$0
17			0	0		1	\$1	\$0
18			0	0		1	\$1	\$0
19			0	0		1	\$1	\$0
20			0	0		1	\$1	\$0
21			0	0		1	\$1	\$0
22			0	0		1	\$1	\$0
23			0	0		1	\$1	\$0
24			0	0		1	\$1	\$0
25			0	0		1	\$1	\$0
26			0	0		1	\$1	\$0
27			0	0		1	\$1	\$0
28			0	0		1	\$1	\$0
29			0	0		1	\$1	\$0
30			0	0		1	\$1	\$0
31								\$0

- (1) Compressor のシートを選択し、Item Number を入力し、 Compressor Type を Centrifugal と Reciprocating から選択します。 で材質を CS、SS から選択し、所要動力 [kW]を入力します。所要動力は上下限值が示されますので、その範囲内で、入力してください。
- (2) ベースケースの FOB コストを出力し、 に Bare Module コストを表示します。総 Compressor Bare Module コストは、 の欄に算出されます。

3 - 6 Driver for Compressor

No	Item Number	Type	Ws Min [kW]	Ws Max [kW]	Shaft Power [kW]	Purchase Base Cost [\$]	Bare Module Cost [\$]
0	Example	Electric	3	6000	1000	\$48,806	\$70,209
1					1	\$1	\$0
2					1	\$1	\$0
3					1	\$1	\$0
4					1	\$1	\$0
5					1	\$1	\$0
6					1	\$1	\$0
7					1	\$1	\$0
8					1	\$1	\$0
9					1	\$1	\$0
10					1	\$1	\$0
11					1	\$1	\$0
12					1	\$1	\$0
13					1	\$1	\$0
14					1	\$1	\$0
15					1	\$1	\$0
16					1	\$1	\$0
17					1	\$1	\$0
18					1	\$1	\$0
19					1	\$1	\$0
20					1	\$1	\$0
21					1	\$1	\$0
22					1	\$1	\$0
23					1	\$1	\$0
24					1	\$1	\$0
25					1	\$1	\$0
26					1	\$1	\$0
27					1	\$1	\$0
28					1	\$1	\$0
29					1	\$1	\$0
30					1	\$1	\$0
31							\$0

- (1) Driver for Compressor シートを選択し、Item Number を入力して Driver Type で選択します。選択肢に Electric、Gas Turbine、Steam Turbine がありますが、ここでは Electric を選択してください。
- (2) Shaft Power の上限、下限値の範囲内で、Shaft Power を で入力し、ベースとなる FOB コストと Bare Module コストを算出します。総 Driver Bare Module コストは、に計算されます。

3 - 7 Furnace

No	Item Number	Type	Q Min [kW]	Q Max [kW]	Heat Duty [kW]	Purchase Base Cost [\$]	Order of Pressure [barg]	Pressure Factor	Tube Material	Material Factor	Bare Module Cost [\$]
0	Example	Reactive Process Heater (Reformer Furnace)	3000	150000	10000	\$811,895	200	1.3	CS	2.1	\$2,216,474
1			0	0	1	\$1		0	Alloy	0	\$0
2			0	0	1	\$1		0	SS	0	\$0
3			0	0	1	\$1		0		0	\$0
4			0	0	1	\$1		0		0	\$0
5			0	0	1	\$1		0		0	\$0
6			0	0	1	\$1		0		0	\$0
7			0	0	1	\$1		0		0	\$0
8			0	0	1	\$1		0		0	\$0
9			0	0	1	\$1		0		0	\$0
10			0	0	1	\$1		0		0	\$0
11			0	0	1	\$1		0		0	\$0
12			0	0	1	\$1		0		0	\$0
13			0	0	1	\$1		0		0	\$0
14			0	0	1	\$1		0		0	\$0
15			0	0	1	\$1		0		0	\$0
16			0	0	1	\$1		0		0	\$0
17			0	0	1	\$1		0		0	\$0
18			0	0	1	\$1		0		0	\$0
19			0	0	1	\$1		0		0	\$0
20			0	0	1	\$1		0		0	\$0
21			0	0	1	\$1		0		0	\$0
22			0	0	1	\$1		0		0	\$0
23			0	0	1	\$1		0		0	\$0
24			0	0	1	\$1		0		0	\$0
25			0	0	1	\$1		0		0	\$0
26			0	0	1	\$1		0		0	\$0
27			0	0	1	\$1		0		0	\$0
28			0	0	1	\$1		0		0	\$0
29			0	0	1	\$1		0		0	\$0
30			0	0	1	\$1		0		0	\$0
31											\$0
32											
33											
34											

Furnace の計算も、他の機器と同様です。但し、 Pressure に関しては、オーダーを入力しますので 10、50、100、200[barg]の中から選択してください。

3 - 8 Plant Construction Cost

	A	B	C	D	E	F	G	H
8								
9								
10		Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)					
11		Process Vessels		\$0				
12		Trays		\$0				
13		Heat Exchangers		\$0				
14		Pump with Electric Driver		\$0				
15		Compressor		\$0				
16		Compressor Driver		\$0				
17		Furnace		\$0				
18								
19								
20								
21		Total Bare Module Cost		\$0				
22		Plant Construction Cost Including 18% contingency		\$0				
23		Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008		575.40				
24		Plant Construction Cost in 2008		\$0				
25								
26								
27								
28								

Plant_Construction_Cost シートでは、機器種類ごとに算出した総 Bare Module コストを参照し に示し、それらの総和を「Total Bare Module Cost」として に算出します。このコストはいわばプラント設置コストであり、これに Contingency として 18% を上乘せした値が、 Plant Construction Cost です。しかし、この値は 1996 年現在 (CEPCI = 382) コストですので、2008 年の CEPCI = 575.4 を使ってスライドする必要があります。 Plant Construction Cost × 575.40 / 382.0 でスライドした値が「Plant Construction Cost 印 2008」となります。

注意

本冊子および本冊子が説明している Spread Sheet (プラント建設費_XX.xls 又は plant_costestimate_XX.xls: 但し XX は Version 番号であり、Version 番号を限定しない) の内容を、化学工学会・SIS 部会・情報技術教育分科会(情報技術教育分科会)の許可なく、改変、転載することを禁ず。本冊子および本冊子が説明する Spread Sheet は、情報技術教育分科会が主催、共催するコンテスト、および大学・大学院等高等教育機関における教育を目的とした活動に限って、使用、配布を認める。算出された結果により不利益が生じた場合でも、情報技術教育分科会はその責任を負わない。

プロセス設計部門 コスト推算結果の比較表

比較のため、各チームの提出資料から値を抜き出した。本表と23ページ以降の内容に食い違いがある場合には、23ページ以降の各チームの資料を優先する。

				Mark	東京農工大学	東京工業大学 Aチーム	九州大学 Aチーム
プラント建設費	Bare Module Cost(※1)	Equipment Category	Process Vessels	A1	\$22,829,603	\$1,636,224	\$1,314,414
			Trays	A2	\$153,794	\$118,979	\$45,292
			Heat Exchangers	A3	\$127,913	\$852,497	\$4,625,661
			Pump with Electric Driver	A4	\$295,953	\$558,613	\$188,154
			Compressor	A5	\$4,028	\$0	\$0
			Compressor Driver	A6	\$0	\$0	\$0
			Furnace	A7	\$0	\$3,206,072	\$0
	Total Bare Module Cost (A1+A2+...+A7)			B	\$23,411,291	\$6,372,385	\$6,173,520
	Plant Construction Cost Including 18% contingency (B×1.18)			C	\$27,625,324	\$7,519,414	\$7,284,753
	Plant Construction Cost in 2008 (C×575.40 / 382)			D	\$41,611,548	\$11,326,363	\$10,972,898
触媒費用	Alkylation Reaction		E			\$106,032	
	Trans-Alkylation Reaction		F			\$31,417	
	触媒費用計 (E+F)		G	\$632,000,000,000	\$1,468,032	\$137,449	
プラント建設費合計 (D+G)			H	\$632,041,611,548	\$12,794,395	\$11,110,347	
直接運転費	原料費	Benzene	供給量 [kg/hr]	単価[\$/kg]	20391.9	20363.1	21484.7
			年間コスト [\$ /year]	0.657	J1	\$107,179,669	\$107,028,664
	Propylene	供給量 [kg/hr]	単価[\$/kg]	15793.6		15857.7	16767.7
		年間コスト [\$ /year]	0.736	J2	\$92,992,717	\$93,369,966	\$98,728,184
	年間原料費合計[\$ /year] (J1+J2)			K	\$200,172,386	\$200,398,630	\$211,651,701
	ユーティリティ	HP Steam	使用量 [ton/hr]	単価[\$/ton]	0.0	0.0	53.3
			年間コスト [\$ /year]	29.97	L1	\$0	\$0
		MP Steam	使用量 [ton/hr]	単価[\$/ton]	0.0	0.0	0.3
			年間コスト [\$ /year]	20.08	L2	\$0	\$0
		LP Steam	使用量 [ton/hr]	単価[\$/ton]	1.9	0.0	0.1
年間コスト [\$ /year]			17.08	L3	\$258,640	\$0	\$6,969
冷却水		使用量 [ton/hr]	単価[\$/ton]	1269.6	2194.0	1304.9	
		年間コスト [\$ /year]	0.0148	L4	\$150,320	\$259,770	\$154,497
冷媒(5℃)		使用量 [GJ/hr]	単価[\$/GJ]	0.0	0.0	82.5	
		年間コスト [\$ /year]	4.43	L5	\$0	\$0	\$2,925,040
冷媒(-20℃)		使用量 [GJ/hr]	単価[\$/GJ]	0.0	1.6	0.0	
		年間コスト [\$ /year]	7.89	L6	\$0	\$99,429	\$0
冷媒(-50℃)		使用量 [GJ/hr]	単価[\$/GJ]	0.0	0.0	9.2	
		年間コスト [\$ /year]	13.11	L7	\$0	\$0	\$964,935
電力		使用量 [kWh/hr]	単価[\$/kWh]	267.8	218.4	161.2	
		年間コスト [\$ /year]	0.06	L8	\$128,549	\$104,832	\$77,354
燃料		使用量 [\$ /GJ] Low Heating Value of Butane	単価[\$/GJ]	601.5	0.0	0.0	
		年間コスト [\$ /year]	11.1	L9	\$53,411,424	\$0	\$0
ボイラー給水		使用量 [ton/hr]	単価[\$/ton]	0.0	34.0	0.0	
		年間コスト [\$ /year]	2.45	L10	\$0	\$667,292	\$0
年間ユーティリティ費合計[\$ /year] (L1+L2+...+L10)			M	\$53,948,933	\$1,131,322	\$16,959,948	
直接運転費合計[\$ /year] (K+M)			N	\$254,121,318	\$201,529,952	\$228,611,650	
Net Annualized Cost [\$ /year] (H/10 + N)			P	\$63,458,282,473	\$202,809,391	\$229,722,684	
製品	年間生産量[ton/year]		Q	251,251	249,994	250,000	
	Cumene 質量濃度 [%]			100.0%	100.0%		
	収率 [%]			100.1%	99.9%		
	Minimum Price [\$ /ton] (P/Q)			\$252,569	\$811	\$919	

※1: Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost:CEPCI=382)

※2: Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008 = 575.4

※3: 年間運転時間は8,000 hoursとする。

京都大学 Aチーム	徳島大学	東京工業大学 Bチーム	静岡大学	九州大学 Bチーム	京都大学 Bチーム	東京工業大学 Cチーム
\$10,076,465	\$1,298,736	\$2,523,300	\$148,218	\$2,504,190	\$2,667,990	\$2,286,533
\$227,266	\$466,492	\$90,919	\$267,634	\$93,591	\$160,296	\$113,602
\$752,353	\$1,731,972	\$680,019	\$568,380	\$2,205,595	\$814,162	\$682,135
\$638,228	\$401,277	\$458,886	\$212,507	\$534,623	\$174,217	\$213,011
\$4,621,838	\$0	\$0	\$0	\$0	\$0	\$2,305,394
\$115,136	\$0	\$0	\$0	\$0	\$0	\$0
\$2,422,560	\$0	\$1,845,096	\$3,423,040	\$0	\$636,879	\$636,879
\$18,853,846	\$3,898,477	\$5,598,221	\$4,619,779	\$5,337,998	\$4,453,544	\$6,237,554
\$22,247,538	\$4,600,203	\$6,605,901	\$5,451,339	\$6,298,838	\$5,255,182	\$7,360,314
\$33,511,082	\$6,929,206	\$9,950,355	\$8,211,258	\$9,487,831	\$7,915,791	\$11,086,713
	\$578,000	\$1,469,601	\$17,870	\$678,833	\$514,719	\$86,197
	\$2,787,604	\$106,321	\$93,590	\$442,504	\$628,319	\$125,664
\$641,000	\$3,365,604	\$1,575,922	\$111,460	\$1,121,337	\$1,143,038	\$211,861
\$34,152,082	\$10,294,810	\$11,526,277	\$8,322,718	\$10,609,168	\$9,058,829	\$11,298,574
	20431.55	21394.8	20700.0		22320.0	21409.0
\$107,768,000	\$107,388,212	\$112,451,069	\$108,799,200	\$112,512,887	\$117,313,920	\$112,525,704
	15940.93	15994.1	15920.0		15750.0	16030.0
\$72,711,000	\$93,860,205	\$94,173,261	\$93,736,960	\$93,545,899	\$92,736,000	\$94,384,640
\$180,479,000	\$201,248,417	\$206,624,330	\$202,536,160	\$206,058,786	\$210,049,920	\$206,910,344
0.0	67.3	0.0	0.0		0.0	0.0
\$0	\$16,133,331	\$0	\$0	\$5,912,441	\$0	\$0
0.0	7.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
\$0	\$1,128,556	\$0	\$0	\$0	\$0	\$0
0.0	0.0	0.0	5.3	0.0	0.0	0.0
\$0	\$0	\$0	\$729,658	\$0	\$0	\$0
	0.4	1628.3	2267.7	0.0	4453.6	5380.0
\$146,000	\$42	\$192,791	\$268,493	\$0	\$527,306	\$636,988
0.0	1.3	5.9	0.0	0.0	0.0	0.0
\$0	\$45,461	\$209,273	\$0	\$0	\$0	\$0
	0.0	0.0	28.7		0.0	0.0
\$447,000	\$0	\$0	\$1,811,544	\$104,042	\$0	\$0
	0.0	0.0	0.0		0.0	0.0
\$210,000	\$0	\$0	\$0	\$8,999,580	\$0	\$0
	159.3	100.9	161.0		65.3	1103.7
\$1,022,000	\$76,464	\$48,413	\$77,296	\$10,142,758	\$31,345	\$529,797
0.0	0.0	0.0	56.7	0.0	0.0	0.6
\$0	\$0	\$0	\$5,033,184	\$0	\$0	\$50,516
	0.0	21.3	0.0	0.0	0.0	12.4
\$697,000	\$0	\$417,872	\$0	\$0	\$0	\$243,635
\$2,522,000	\$17,383,853	\$868,349	\$7,920,175	\$25,158,821	\$558,651	\$1,533,516
\$183,001,000	\$218,632,270	\$207,492,678	\$210,456,335	\$231,217,607	\$210,608,571	\$208,443,860
\$186,416,208	\$219,661,751	\$208,645,306	\$211,288,607	\$232,278,524	\$211,514,454	\$209,573,717
250,000	250,000	250,000	250,000	250,000	250,000	250,005
\$746	\$879	\$835	\$845	\$929	\$846	\$838

化学工学会 第41秋季大会
第8回ソフトウェア・ツール学生コンテスト
プロセス設計部門 提出資料 (Rev.1)

次の2種類のファイルを提出すること。

提出方法は、参加申込時の「参加申込受付」という件名のメールに記載のURLにアクセスし、ファイルをアップロードして下さい。(9月2日(水)5:00pm 締切です。)

1. 審査用資料 (WordまたはPDFファイル)

(1) PFD

設計で得られた最終的なプロセスのPFDをできるだけ分かりやすく1枚にまとめる。

1枚では細かくて見づらい場合は、適宜、2枚以上に分けてもよい。

- ・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
- ・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

主なStreamについて、圧力、温度、流量、組成、液化率を表にまとめる。

(3) 本課題でのプラントコスト推算結果

(3-1) 反応器

課題資料4-1節 (触媒量および反応器サイズ)に従って決定した内容を要領よく纏める。

(次のプラント建設費の計算に必要な数値の根拠が分かるように)

(3-2) プラント建設費

学生コンテストHPからダウンロードしたSpread Sheet (plant_costestimate_R1.xls)を利用して得られたプラント建設費(シート: Plant_Construction_Cost)の表を、図として貼り付けること。

(3-3) 運転費

課題資料5-2節に示した値を利用して、1年間の直接運転費の計算結果を表に纏めよ。

(3-4) プロセス設計評価結果

(3-2)と(3-3)の結果に基づいて、設計結果を評価せよ。

(4) 今回の設計結果に至った経緯 (出来るだけ数枚以内に纏める)

最終的なプロセスフロー選定に至った経緯や工夫した点について、簡潔に述べる。

- ・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くこと。
- ・必要に応じて、図や表を利用しても良い。

2. 添付資料 (xlsファイル)

プラント建設費の計算に利用したSpread Sheet (plant_costestimate_R1.xls)のエクセルファイルそのもの。

プロセス設計部門提出資料

足立 泰隆 山下 晋平

東京農工大学 工学部 4 回生

2009 年 9 月 1 日

概要

今回「クメン製造プロセスの設計」というプロセス設計課題は

Aspen Plus を用いて作成した。

目次

(1) プロセスフローダイアグラム(PFD)

(2) 物質収支

(3) プラント推算結果

(3-1) 反応器

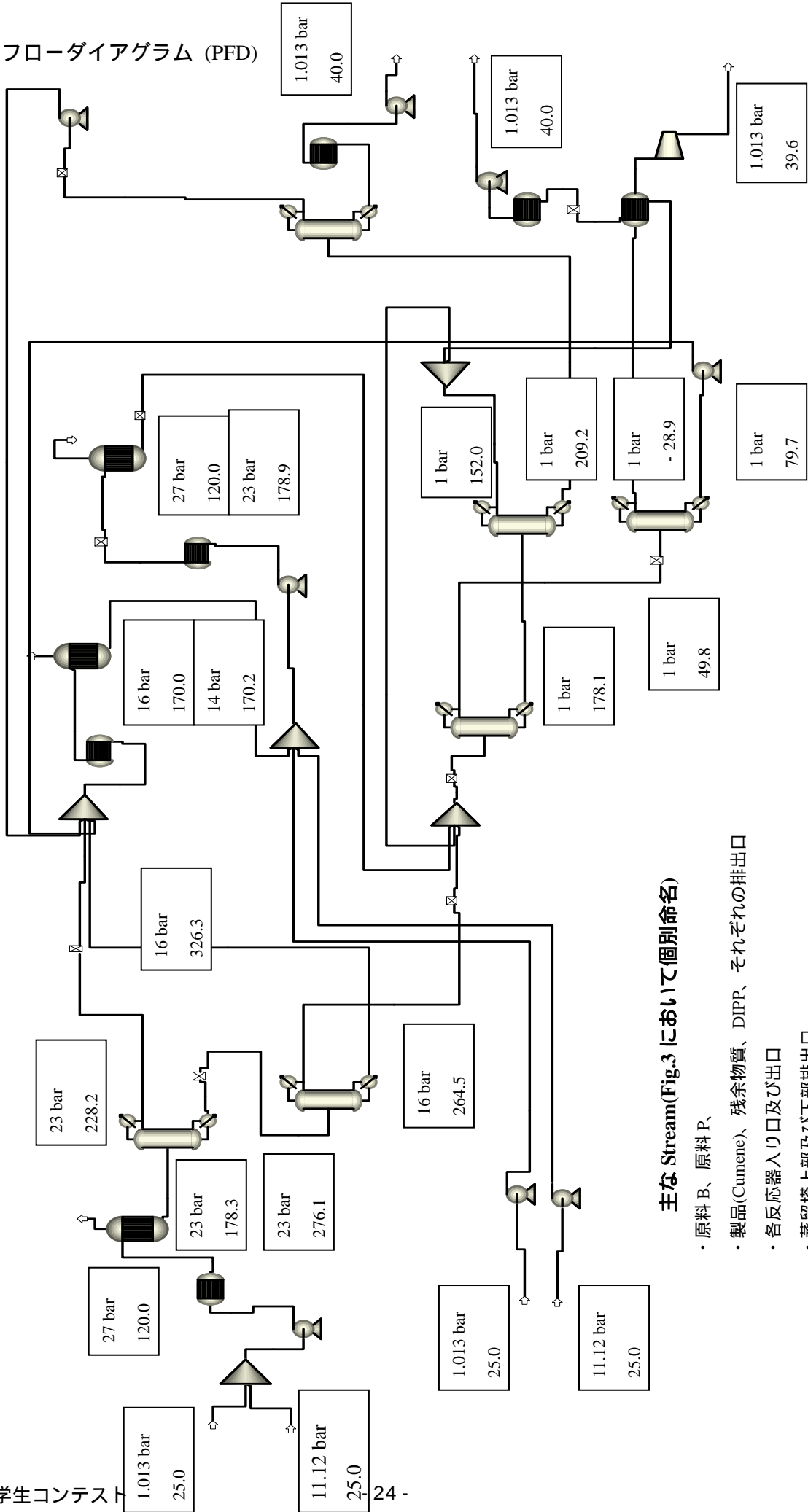
(3-2) プラント建設費

(3-3) 運転費

(3-4) プロセス設計評価結果

(4) 設計結果に至った経緯

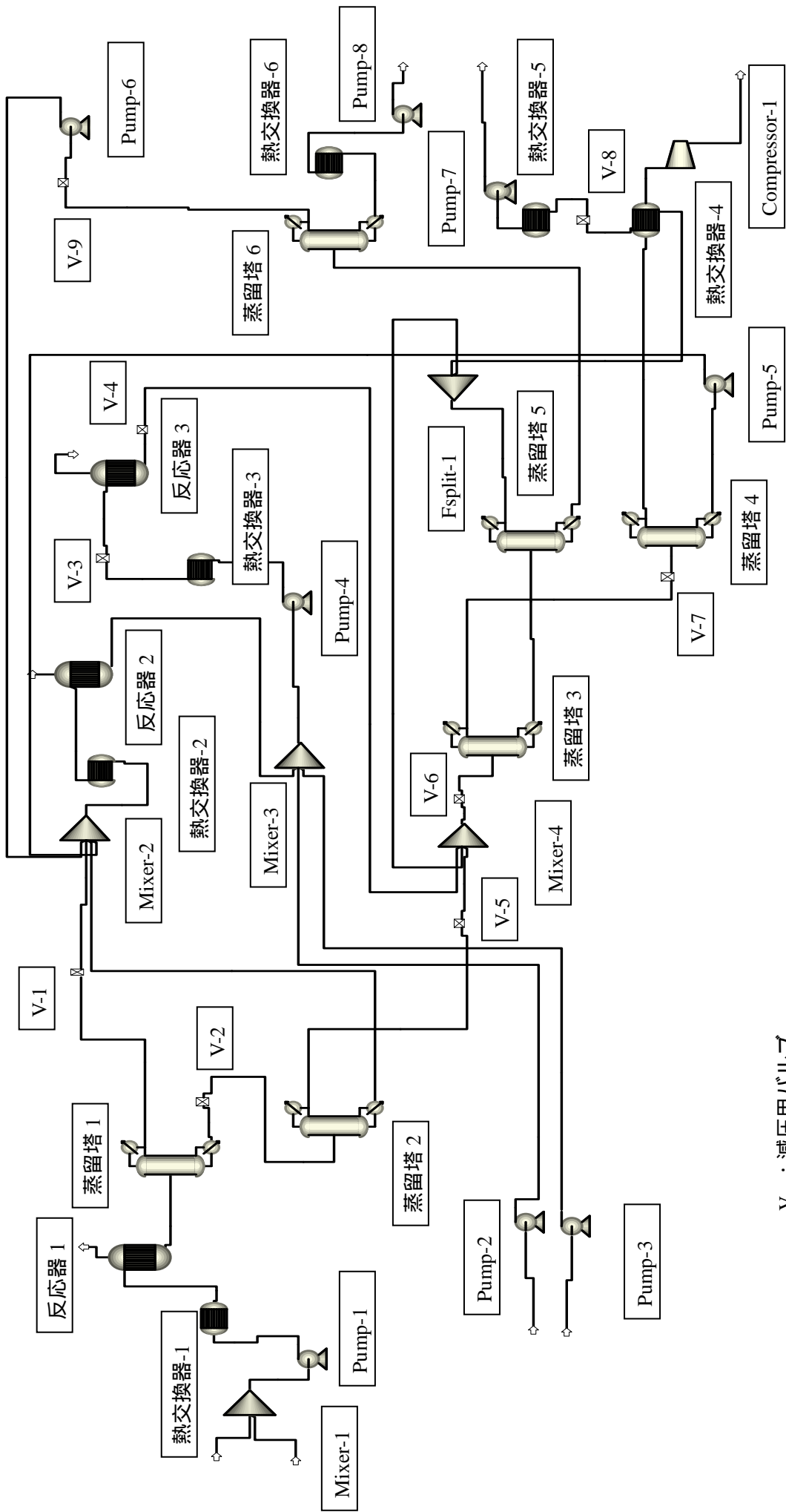
(1) プロセスフローダイアグラム (PFD)



主な Stream (Fig.3 において個別命名)

- 原料 B、原料 P、
- 製品 (Cumene)、残余物質、DIPP、それぞれの排出口
- 各反応器入り口及び出口
- 蒸留塔上部及び下部排出口

Fig.1 全体図



V- : 減圧用バルブ

Fig.2 機器名称

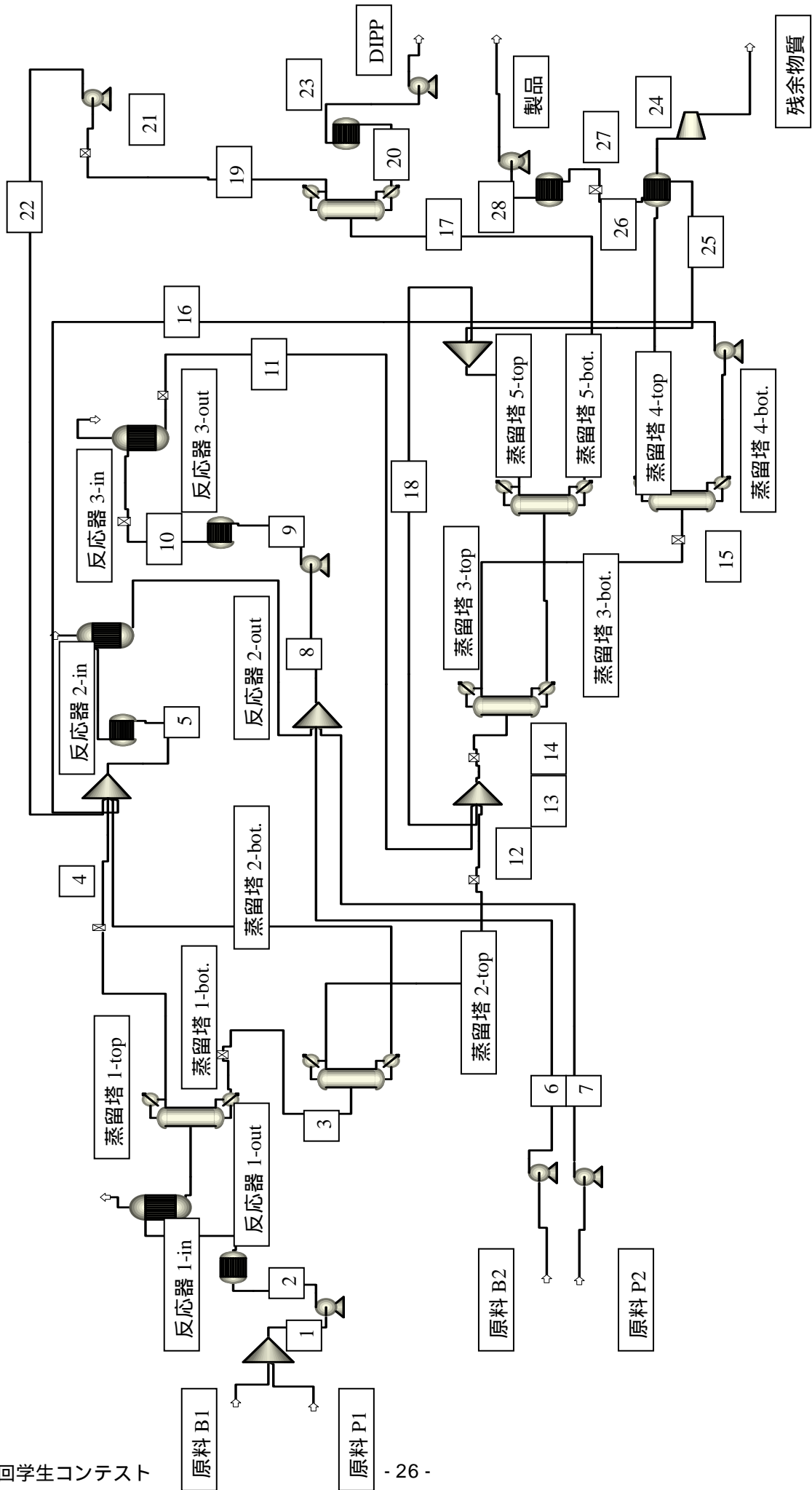


Fig.3 Stream No.

(2) 物質収支

Table.1 主な Stream data

	圧力 [bar]	温度 [°C]	質量流量 [kg/h]	モル流量 [kmol/h]	液化率 [-]
原料 B1	1.013	25.0	19532	250.0	1.0
原料 B2	1.013	25.0	859	11.0	1.0
原料 P1	11.120	25.0	1707	40.0	1.0
原料 P2	11.120	25.0	14086	330.0	1.0
製品 (Cumene)	1.013	40.0	31406	261.3	1.0
残余物質	1.013	39.6	4945	111.6	0.0
反応器 1-in(入口)	27.000	120.0	21240	290.0	1.0
反応器 1-out(出口)	23.000	178.3	21240	262.0	1.0
反応器 2-in	16.000	170.0	156452	1111.0	1.0
反応器 2-out	14.000	170.2	156452	1111.0	1.0
反応器 3-in	27.000	120.0	171398	1452.0	1.0
反応器 3-out	23.000	178.9	171398	1221.0	1.0
蒸留塔 1-top(上部排出口)	23.000	228.2	16552	215.7	0.0
蒸留塔 1-bot.(下部排出口)	23.000	276.1	4688	46.3	1.0
蒸留塔 2-top	16.000	264.5	4187	42.6	0.0
蒸留塔 2-bot.	16.000	326.3	500	3.7	1.0
蒸留塔 3-top	1.000	49.8	9845	174.3	0.0
蒸留塔 3-bot.	1.000	178.1	197312	1351.4	1.0
蒸留塔 4-top	1.000	-28.9	4945	111.6	0.0
蒸留塔 4-bot.	1.000	79.7	4900	62.7	1.0
蒸留塔 5-top	1.000	152.0	62813	522.6	0.0
蒸留塔 5-bot.	1.000	209.2	134499	828.9	1.0

原料 B : Benzene 系原料 1.013 [bar] , 25.0 [°C] , Benzene 99.8 [mol%] , n-Hexane 0.2 [mol%]

原料 P : Propylene 系原料 11.12 [bar] , 25.0 [°C] , Propane 30.0 [mol%] , Propylene 70.0 [mol%]

反応器 1、反応器 3 : アルキレーション反応

反応器 2 : トランスアルキレーション反応

蒸留塔 1 : 塔頂から Benzene を分離

蒸留塔 2 : 塔底から Cumene・DIPB(1,4-Diisopropylbenzene)に富んでいる成分系を分離

蒸留塔 3 : 塔頂から Benzene を分離 , 塔底から Cumene・DIPB に富んでいる成分系を分離

蒸留塔 4 : 塔頂から残余物質 (Propane・n-Hexane) を分離 , 塔底から Benzene を分離

蒸留塔 5 : 塔頂から Cumene を分離 , 塔底から DIPB を分離

蒸留塔 6 は DIPB と DIPP(2,2-Diphenylpropane)を分離しているがシミュレーションは行っていない

Table.2 主な Stream のモル分率

	Propylene	Benzene	Cumene	DIPB	Propane	n-Hexane
原料 B1	-	0.998	-	-	-	0.002
原料 B2	-	0.998	-	-	-	0.002
原料 P1	0.700	-	-	-	0.300	-
原料 P2	0.700	-	-	-	0.300	-
製品(Cumene)	-	60ppm	1.000	159ppm	-	6ppb
残余物質	83ppm	562ppm	-	-	0.995	0.005
反応器 1-in(入口)	0.097	0.860	-	-	0.041	0.002
反応器 1-out(出口)	133ppb	0.851	0.095	0.006	0.046	0.002
反応器 2-in	31ppb	0.237	0.004	0.747	0.011	438ppm
反応器 2-out	31ppb	0.064	0.350	0.575	0.011	438ppm
反応器 3-in	0.159	0.057	0.268	0.440	0.076	351ppm
反応器 3-out	8ppm	0.033	0.198	0.678	0.091	417ppm
蒸留塔 1-top(上部排出口)	161ppb	0.931	0.012	-	0.056	0.002
蒸留塔 1-bot.(下部排出口)	Trace	0.482	0.484	0.034	32ppm	291ppm
蒸留塔 2-top	Trace	0.523	0.473	0.004	35ppm	316ppm
蒸留塔 2-bot.	Trace	0.006	0.609	0.385	Trace	1ppm
蒸留塔 3-top	53ppm	0.360	300ppm	-	0.637	0.003
蒸留塔 3-bot.	Trace	23ppm	0.387	0.613	Trace	2ppb
蒸留塔 4-top	562ppm	83ppm	-	-	0.995	0.005
蒸留塔 4-bot.	Trace	0.999	833ppm	-	Trace	8ppm
蒸留塔 5-top	-	60ppm	1.000	159ppm	Trace	6ppb
蒸留塔 5-bot.	-	Trace	63ppm	1.000	-	Trace

Table.3 製品スペック

圧力 [bar]	温度 [°C]	モル流量 [kmol/h]	質量流量 [kg/h]	年間製造量 [ton/year]	Cumene 質量分率 [-]
1.013	40.0	261.3	31406	251251	1.000

Table.4 製品組成

	Propylene	Benzene	Cumene	DIPB	Propane	n-Hexane
モル分率 [-]	-	60ppm	1.000	159ppm	-	6ppb
質量分率 [-]	-	39ppm	1.000	214ppm	-	4ppb

$$\text{収率} = \frac{\text{Cumene 生成量 [kmol/h]}}{\text{原料 Benzene 供給量 [kmol/h]}} \times 100 \quad \text{として, 収率 } 100.1\%$$

(3) プラント推算結果

(3-1) 反応器

与えられた計算式よりそれぞれの反応器における k_1, k_2, k_3 よりそれぞれ単位有効触媒容量 $[L_{cat}]$ あたりの原料モル消費速度 $[mol/sec]$ を求め、これによって触媒体積を求め触媒費用を 10,000 $[\$/m^3]$ として算出した。行なわれる 3 つの反応の速度式は以下で表される。

$$\text{クメン生成} \quad r_1 = k_1 C_P C_B \quad k_1 = 1.2 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-1.04 \times 10^5}{RT}\right)$$

$$\text{DIPB 生成} \quad r_2 = k_2 C_P C_C \quad k_2 = 2.0 \times 10^{15} \exp\left(\frac{-1.47 \times 10^5}{RT}\right)$$

$$\text{クメン生成(トランス)} \quad r_3 = k_3 C_B C_D \quad k_3 = 2.8 \times 10^8 \exp\left(\frac{-1.04 \times 10^5}{RT}\right)$$

r_1, r_2 は触媒単位体積 $[L]$ あたりのプロピレンの mol 消費速度 $[mol/s]$ である。

r_3 は、触媒単位体積 $[L]$ あたりの DIPB の mol 消費速度 $[mol/s]$ である。

また、 r_1, r_2, r_3 は各反応器の入り口と出口のプロピレン $[mol/s]$ 、DIPB $[mol/s]$ の収支を取ることでも求められる。この収支式から求めたプロピレン mol 消費速度、DIPB mol 消費速度を r_{01}, r_{02}, r_{03} とする。また、アルキレーション反応、トランスアルキレーション反応、のどちらの反応器も触媒空隙率 = 0.50 である。

以上から使用した触媒の和 $W_t [L]$ は各反応器の触媒量を $W_1, W_2, W_3 [L]$ とすると、

$$W_t = W_1 + W_2 + W_3 = \left(\frac{r_{01}}{r_1} + \frac{r_{02}}{r_2}\right) + \left(\frac{r_{01}}{r_1} + \frac{r_{02}}{r_2}\right) + \frac{r_{03}}{r_3} \quad \text{で求めることができる。}$$

これは、反応速度が一定で、各反応器の入り口流量、出口流量がそれぞれ一定量になっている状態で立式した。アルキレーション反応において 2 つの反応は、同時に同一の触媒を使用していないとして計算している。

計算に使った EXCEL シートも添付する。

各物質の濃度 $C [mol/L]$ 、反応温度 T は簡単のため反応器出口のステータスを使用した。

$$\text{計算より} \quad W_1 = 5411023 [m^3]$$

$$W_2 = 345 [m^3]$$

$$W_3 = 909080 [m^3]$$

$$\text{必要な触媒量の和 } W_t = 6320448 [m^3]$$

$$\text{したがって 触媒費用} = 632044807792 = 6.32 \times 10^{11} [\$]$$

触媒空隙率を考えると，3つの反応器体積は V [m³]は以下のとおりである。

反応器 1 (アルキレーション反応) : $V_1 = 10822046$ [m³]

反応器 2 (トランスアルキレーション反応) : $V_2 = 690$ [m³]

反応器 3 (アルキレーション反応) : $V_3 = 1818160$ [m³]

アルキレーション反応器において Length/Diameter = 4.0 より，反応器高さ：L，塔径：D とすると，

$$V = \frac{D^2}{4} \times \pi \times L \quad \text{より，} \quad D = \sqrt[3]{\frac{4V}{\pi}} \quad \text{である。}$$

したがって， $D_1 = 151.0$ [m]， $L_1 = 604.1$ [m]

$D_3 = 83.3$ [m]， $L_3 = 333.3$ [m]

同様にトランスアルキレーション反応器において Length/Diameter = 5.0 より，

$$D = \sqrt[3]{\frac{4V}{5\pi}} \quad \text{である。}$$

したがって， $D_2 = 5.6$ [m]， $L_2 = 28.0$ [m]

(3-2) プラント建設費

Table.5 プラント建設費

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$22,829,603
Trays	\$153,794
Heat Exchangers	\$127,913
Pump with Electric Driver	\$295,953
Compressor	\$4,028
Compressor Driver	\$0
Furnace	\$0
Total Bare Module Cost	\$23,411,291
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$27,625,324
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$41,611,548

(3-3) 運転費

Table.6 直接運転費(原料+ユーティリティ費用)

	質量流量 [kg/h]	エネルギー [GJ/h]	電力 [kW]	1h 当りの費用 [\$/h]	年間費用 [\$/year]	
原料 B1	19532.44	-	-	12832.81	102662515.15	
原料 B2	859.43	-	-	564.64	4517148.31	
				小計	13397.46	107179663.44
原料 P1	1707.42	-	-	1256.66	10053265.41	
原料 P2	14086.18	-	-	10367.43	82939445.50	
				小計	11624.09	92992710.88
冷却水[熱交換 2]	-	-	-	7.11	56917.80	
冷却水[熱交換 3]	-	-	-	5.45	43633.09	
冷却水[熱交換 5]	-	-	-	6.22	49749.82	
				小計	18.79	150300.71
LPSteam[熱交換 1]	-	-	-	32.33	258679.81	
				小計	32.33	258679.81
Pump-1	-	-	33.46	2.01	16060.22	
Pump-2	-	-	1.48	0.09	711.05	
Pump-3	-	-	3.98	0.24	1912.78	
Pump-4	-	-	114.99	6.90	55197.19	
Pump-5	-	-	7.33	0.44	3518.10	
Pump-6	-	-	105.13	6.31	50461.60	
Pump-7	-	-	0.02	0.00	10.80	
				小計	15.98	127871.74
蒸留塔-1	-	14.65	-	162.62	1300983.26	
蒸留塔-2	-	1.56	-	17.27	138163.67	
蒸留塔-3	-	116.41	-	1292.15	10337183.98	
蒸留塔-4	-	396.12	-	4396.89	35175106.48	
蒸留塔-5	-	72.74	-	807.36	6458869.51	
				小計	6676.29	53410306.90
Compressor	-	-	1.42	0.09	682.98	
				小計	0.09	682.98
				総計	31765.03	254120216.45

(3-4) プロセス設計評価結果

反応器サイズ

(3-1)よりアルキレーション反応器のサイズがかなり巨大になってしまった。

反応器 1 : $D_1 = 151.0$ [m] , $L_1 = 604.1$ [m]

反応器 3 : $D_3 = 83.3$ [m] , $L_3 = 333.3$ [m]

このサイズの反応器を Vertical タイプで建設するのは難しいと考え、建設コストを推算する上では Horizontal タイプを考えた。今回設計したプロセスでは極力反応器の数を増やさないように努めたため、1 つあたりの反応器のサイズが巨大になってしまったものとする。

プラント収益

(3-1)より触媒費用 = 632044807792 [\$]

(3-2)よりプラント建設費用 = 41,611,548 [\$]

(3-3)より年間運転費 = 254120216 [\$/year]なので、10 年間で 2541202160 [\$]

以上 3 つを踏まえ、プラント償却期間を 10 年間とした場合を考える。

その間の運転費と建設費の総コストは $634627505118 = 6.35 \times 10^{11}$ [\$]となり、10 年間でこれ以上の利益を出す必要がある。

(2)の物質収支(Table3)より Cumene 年間製造量は 251251 [ton/year] であるから、10 年間での製造量は 2512510 [ton]である。

以上から、クメンの価格は最低でも 252.5871027 253 [\$/kg] はなければならない。

(4) 設計に至った経緯

基本コンセプト

今回プロセスを設計するに当たり、プロセス内の反応熱や蒸留塔における供給熱を有効利用して、極力加熱のためだけの機関の設置を減らした。また、冷却水の量を節約すること、反応器や蒸留塔の数を極力減らすことに努め、その上で製品純度と収量、収率の規定を達成しようと考えた。

アルキレーション反応における供給量の制限

Cumene は、Benzene と Propylene を原料として酸触媒下で合成される。そのアルキレーション反応における反応は 3 つで以下のとおりである。



しかし 3 つ目の DIPP 生成反応は、入口 Benzene のモル流量に対して転化率 0.03 % 程度の生成なので、シミュレーションの上ではこれを無視し、Benzene と Propylene からは残りの 2 つの反応のみ(A1、A2)が起こると考えることにした。

A1, A2 は発熱反応であり, オリゴマーなどの生成を抑制するために反応を 120 ~ 180 °C で行なわなければならない。入口温度を 120 °C にしても反応量を適切に抑えなければ出口温度が 180 °C を越えてしまうため, 1 つのアルキレーション反応器(反応器 1)に多量の原料を供給することはできなくなり, 目的の収量を得るためには反応器の数を増やすことが必然となってしまふ。これを反応器を増やさずに行なうには, 原料 Benzene に対して Propylene の供給上限が現れる。また原料 Benzene の量には, 年間生成量を満たしながら収率 95 %以上を満たすために, プロセスに供給できる上限が存在する。概算値ではあるが, Cumene を 260 kmol/h 強得ることで年間生成量は満たせ, その場合 275 kmol/h が Benzene の供給上限に当る。

全体プロセスの説明および設計上の工夫・利点

まず 1 対 1 程度で Benzene から Cumene を得ようと考え, 250 kmol/h の Benzene をアルキレーション反応に通した(原料 B1)。この時, 出口温度を 180 °C 未満に抑えられる Propylene の上限は 40 kmol/h だったのでそれを採用した(原料 P1)。Propylene はほぼ消費されるので, 得られた Cumene を分離すると残りは Benzene と DIPB である。

酸触媒の他に, 新規ゼオライト触媒を使用するとトランスアルキレーション反応が利用でき, DIPB から Cumene を製造することができる。



最初に行なった反応で得られる DIPB は少量であり, 上記で分離してきた Benzene と DIPB をトランスアルキレーション反応器(反応器 2)に通してもかなりの Benzene が残る。しかしプロセスを全て組んだ上でシミュレートしてみたところ, この残った Benzene は,

またすぐに別のアルキレーション反応器(反応器 3)に通すには温度が高すぎる,

Propylene が微量しか含まれていないので別のアルキレーション反応器(反応器 3)に通しても意味がない,

製品排出口のシミュレート結果から判断し目的収量の Cumene に対して Benzene の供給量が最初の 250 kmol/h(原料 B1)だけでは若干足りない,

という ~ の結果が得られた。そこでトランスアルキレーション反応の済んだ液(反応器 2-out)に新たに若干の Benzene(原料 B2)と, 多めの Propylene(原料 P2)の供給口を作り, これを混合することで温度を下げて冷却水の量を節約し(Mixer-3)、反応器 3 に回してアルキレーション反応を行った。

こうして 3 つの反応器を経由してきた液(Stream No.11)は Cumene が多く含まれていると考えられたので, これに初期の蒸留塔(蒸留塔 2)で分離しておいた Cumene を混合した(Mixer-4)。実際のシミュレート結果を見てもここで混合した液内は, Benzene と Cumene に富んでいた。なぜこの混合液において Mixer-3 で加えた多めの Propylene が少ないのかは追って説明する。

今混合した液を蒸留塔で減圧蒸留し Benzene(蒸留塔 3-top)と Cumene(蒸留塔 3-bot.)を分離すると, 原料中の Propane と n-Hexane も Benzene とともに Cumene から分離される。Cumene 側には Cumene より高沸点成分である DIPB も含まれており, 次の蒸留塔でこの Cumene(蒸留塔 5-top)と DIPB(蒸留塔 5-bot.)を分離した。

こうしてかなり Cumene の純度が高くなった液(蒸留塔 5-top)が得られたが, まだ目的の純度(99.9wt%)には達していなかったため, 半分に分け一方を製品として排出し, もう一方を先ほどトランスアルキレーション反応器から出てきた液に混合し(Mixer-4), 上記と同様に 2 つの蒸留塔間(蒸留塔 3 及び 5)を循環

させる経路を作った。それによってその循環系の中の Cumene 濃度は上がり、製品純度を達成できた。また同時に、この方法では新たに蒸留塔を設置することが無く純度を高められるので、蒸留塔の設置数を減らすこともできた。

上の循環系において、Cumene から分離された DIPB の流れ(蒸留塔 5-bot.)の中には、かなり高純度で多くの DIPB が含まれている。これは循環して系内を何度も回っているためだと思われる。この DIPB に富んだ液は圧力を調整して初めの方で使用したトランスアルキレーション反応器に加える(Stream No.17、19、21、22)。

蒸留塔 3 のところで Cumene から分離されてきた Benzene や Propane , n-Hexane を含む液はもう一つ蒸留塔(蒸留塔 4)を通すことで低温の残余物質(Propane と n-Hexane)と Benzene に分離した。この Benzene も上記 DIPB に富んだ液と同様に初めの方で使用したトランスアルキレーション反応器に加えた(Stream No.16)。低温の残余物質は製品の熱交換に利用して、冷却水の量を節約した。

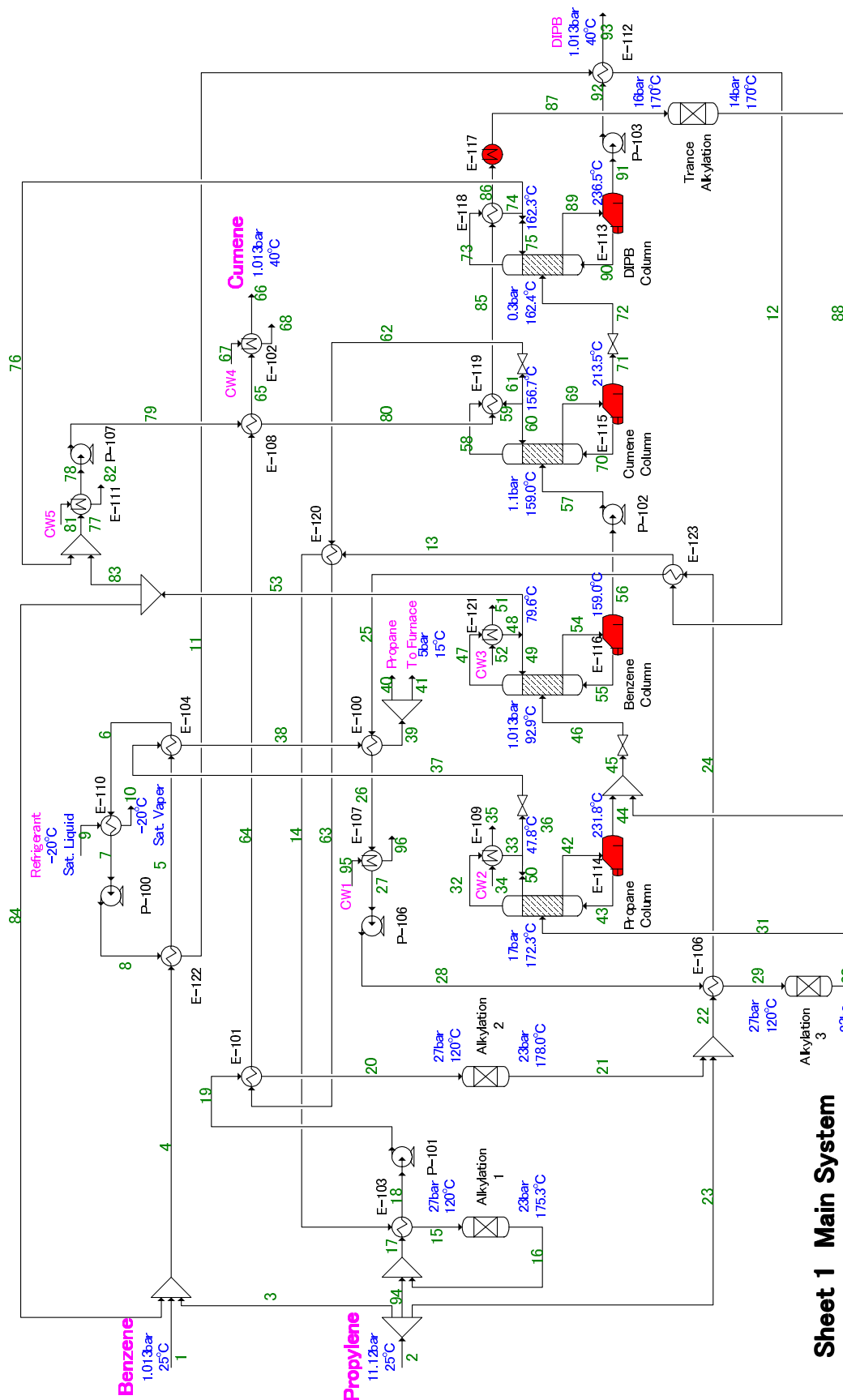
以上で全体の循環を説明したが、これから途中 Propylene を大量に加えても 2 つ目のアルキレーション反応器(反応器 3)で出口温度が 180 を越えなかった理由を説明する。

反応器 3 に入る直前(Mixer-2)、循環によって大量の DIPB と Benzene がトランスアルキレーション反応器(反応器 2)に流れ込んでいるため、Cumene が多く含まれる液が反応器 3 に流れ込むことになる(Stream No.5)。アルキレーション反応では Propylene を Benzene と Cumene とが取り合うように 2 つの反応が競争するため、ここでは Cumene が多く含まれている結果、DIPB 生成側に有利に反応が進んでいるのである。A1、A2 の反応では A2 の方が有利に働けば反応熱が少なく済む、これが 2 つ目のアルキレーション反応器が温度上限を超えていない理由である。Cumene を消費しているが、その消費分を考慮しても全体として、収率 100%を満たしながら目的量の Cumene 生成に成功している。

シミュレーションの上では簡単のため無視したが、製作したプロセスを運転するとアルキレーション反応器において転化率 0.03%で生成されている DIPP は DIPB とともにプロセス内を循環し、しかも DIPB のように反応で消費されることは無い。したがって長くプロセスを運転しているといずれ蓄積した DIPP が製品に影響を及ぼす量にまで達してしまうことになる。そのため標準的な蒸留塔(蒸留塔 6 : 塔径 3 m , 段数 30 段)を設計し分離・排出を行った。同時に、DIPP をパージの制限内(圧力 1.013 bar、温度上限 40)で排出するために熱交換器-6 と Pump-8 を追加したが、これらはシミュレーションを行っていないため運転費は求められなかった。よって、今追加した装置については建設費のみをプラントコストとして計算した。DIPP と同時に生成される H₂は、その低沸点性と各蒸留塔の配置から、残余物質として Propane や n-Hexane とともに排出されるようにしてある。

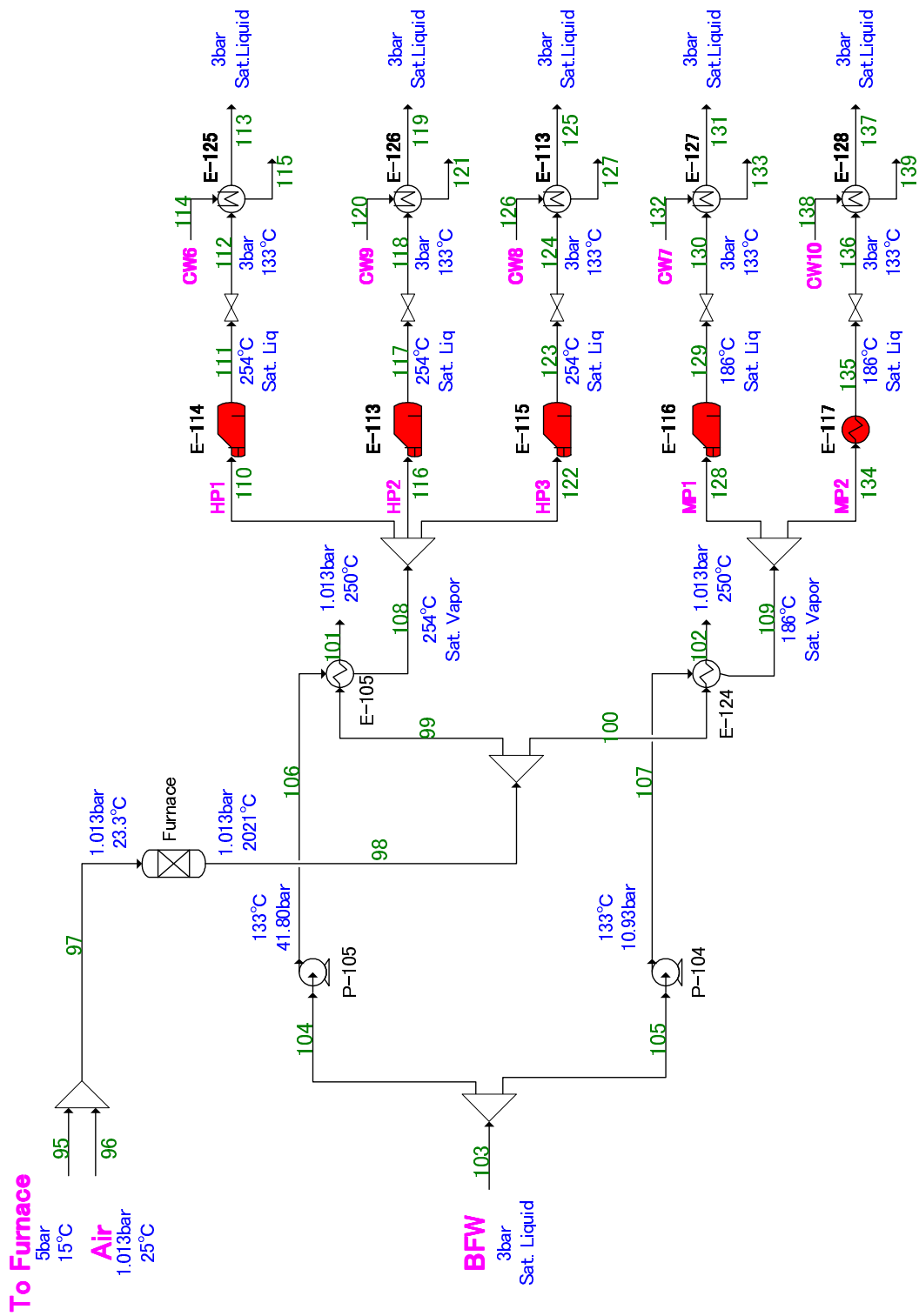
設計上の要点

- ・ 反応器の数を減らすことで、熱交換器やポンプなどの機器も削減している
- ・ 原料を複数の箇所から供給することで、冷却水の使用量を節約している
- ・ 残余物質が低温で排出されることを製品の冷却に利用し、冷却水の使用量を節約している
- ・ 蒸留塔の数やその段数を増やすのではなく、液を分割しその一部を蒸留塔間を循環させることで純度を高めている
- ・ 減圧蒸留を行い、分離能を高めている
- ・ Cumene の多量供給によって反応器 3 におけるオリゴマー生成の抑制を達成している



Sheet 1 Main System

* 赤い機器の熱交換は
Sheet 2 に記載



Sheet 2 Furnace System

(2) 物質収支

(組成はモル分率)

1、原料

流体番号		1	2
液化率		0.0	0.0
温度(°C)		25.0	25.0
圧力(bar)		1.0	11.1
流量(kmol/h)		260.6	371.5
組成	Propylene	0.000	0.700
	Benzene	0.998	0.000
	Cumene	0.000	0.000
	14-DiisopropylBenzene	0.000	0.000
	H2	0.000	0.000
	22-DiphenylPropane	0.000	0.000
	n-Hexane	0.002	0.000
	Propane	0.000	0.300

2、アルキレーション反応

流体番号		15	16	20	21	29	30
液化率		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
温度(°C)		120.0	175.3	120.0	178.1	120.0	173.4
圧力(bar)		27.0	23.0	27.0	23.0	27.0	23.0
流量(kmol/h)		854.0	776.1	906.2	815.1	945.2	854.1
組成	Propylene	0.091	0.000	0.100	0.000	0.096	0.000
	Benzene	0.866	0.859	0.736	0.727	0.627	0.611
	Cumene	0.000	0.087	0.075	0.155	0.133	0.206
	14-DiisopropylBenzene	0.000	0.007	0.006	0.026	0.023	0.049
	H2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	22-DiphenylPropane	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	n-Hexane	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003
	Propane	0.039	0.043	0.080	0.089	0.118	0.131

3、蒸留

流体番号		31	33	44	46	53	56
液化率		0.0	0.0	0.0	0.6	0.0	0.0
温度(°C)		172.3	47.8	231.9	93.0	79.7	159.1
圧力(bar)		17.0	17.0	17.0	1.0	1.0	1.0
流量(kmol/h)		854.1	112.1	742.1	1920.2	1606.5	313.7
組成	Propylene	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	Benzene	0.611	0.005	0.703	0.832	0.995	0.001
	Cumene	0.206	0.000	0.237	0.135	0.000	0.829
	14-DiisopropylBenzene	0.049	0.000	0.057	0.028	0.000	0.170
	H2	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
	22-DiphenylPropane	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	n-Hexane	0.003	0.000	0.004	0.004	0.005	0.000
	Propane	0.131	0.994	0.000	0.000	0.000	0.000

流体番号	57	61	71	72	76	91	
液化率	0.0	0.0	0.0	0.4	0.0	0.0	
温度(°C)	159.1	156.7	213.5	162.4	162.3	236.5	
圧力(bar)	1.1	1.1	1.1	0.3	0.3	0.3	
流量(kmol/h)	313.7	260.0	53.6	53.6	53.5	0.1	
組成	Propylene	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	Benzene	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
	Cumene	0.829	0.999	0.000	0.000	0.000	0.000
	14-DiisopropylBenzene	0.170	0.000	0.997	0.997	1.000	0.046
	H2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	22-DiphenylPropane	0.000	0.000	0.002	0.002	0.000	0.954
	n-Hexane	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	Propane	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

4、トランスアルキレーション反応

流体番号	87	88	
液化率	0.0	0.0	
温度(°C)	170.0	170.4	
圧力(bar)	16.0	14.0	
流量(kmol/h)	1178.0	1178.0	
組成	Propylene	0.000	0.000
	Benzene	0.950	0.914
	Cumene	0.000	0.072
	14-DiisopropylBenzene	0.045	0.010
	H2	0.000	0.000
	22-DiphenylPropane	0.000	0.000
	n-Hexane	0.005	0.005
	Propane	0.000	0.000

5、製品

流体番号	66	40	41	93	
液化率	0.0	1.0	1.0	0.0	
温度(°C)	40.0	15.0	15.0	40.0	
圧力(bar)	1.0	5.0	5.0	1.0	
流量(kmol/h)	260.0	69.7	42.4	0.1	
組成	Propylene	0.000	0.000	0.000	0.000
	Benzene	0.001	0.005	0.005	0.000
	Cumene	0.999	0.000	0.000	0.000
	14-DiisopropylBenzene	0.000	0.000	0.000	0.046
	H2	0.000	0.001	0.001	0.000
	22-DiphenylPropane	0.000	0.000	0.000	0.954
	n-Hexane	0.000	0.000	0.000	0.000
	Propane	0.000	0.994	0.994	0.000

6、ファーンネス

流体番号	95	96	97	98	
液化率	1.0	1.0	1.0	1.0	
温度(°C)	15.0	25.0	23.4	2021.1	
圧力(bar)	5.0	1.0	1.0	1.0	
流量(kmol/h)	42.4	1052.7	1095.1	1137.2	
組成	Propylene	0.000	0.000	0.000	0.000
	Benzene	0.005	0.000	0.000	0.000
	Cumene	0.000	0.000	0.000	0.000
	14-DiisopropylBenzene	0.000	0.000	0.000	0.000
	H2	0.001	0.000	0.000	0.000
	22-DiphenylPropane	0.000	0.000	0.000	0.000
	n-Hexane	0.000	0.000	0.000	0.000
	Propane	0.994	0.000	0.038	0.000
	CO2	0.000	0.000	0.000	0.111
	O2	0.000	0.210	0.202	0.009
	N2	0.000	0.790	0.759	0.731
H2O	0.000	0.000	0.000	0.148	

7、ボイラー給水

流体番号	103	110	116	122	128	134
液化率	0.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
温度(°C)	133.5	254.0	254.0	254.0	184.0	184.0
圧力(bar)	3.0	41.8	41.8	41.8	10.9	10.9
流量(kmol/h)	1889.8	435.5	53.6	532.1	766.3	102.4
組成	H2O	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000

(3) 本課題でのプラントコスト推算結果

(3-1) 反応器

Reactor	Alkylation 1	Alkylation 2	Alkylation 3	TranceAlkylation
Volume(m ³)	36.40	74.08	84.25	98.88
Length(m)	9.05	11.47	11.97	14.65
Diameter(m)	2.26	2.87	2.99	2.93

(3-2) プラント建設費

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$1,636,224
Trays	\$118,979
Heat Exchangers	\$852,497
Pump with Electric Driver	\$558,613
Compressor	\$0
Compressor Driver	\$0
Furnace	\$3,206,072
Total Bare Module Cost	\$6,372,385
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$7,519,414
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$11,326,363

(3-3) 運転費

		単価	使用量	\$/yr
原料	ベンゼン	0.657 (\$/kg)	162905119.6 (kg/yr)	107,028,664
	プロピレン	0.736 (\$/kg)	126861367.1 (kg/yr)	93,369,966
ユーティリティ	冷却水	14.8 (\$/1000t)	17552.0 (1000t/yr)	259,769
	冷媒(-20°C)	7.89 (\$/GJ)	12601.9 (GJ/yr)	99,429
	電力	0.06 (\$/kWh)	218.4 (kW)	104,842
	ボイラー給水	2.45 (\$/t)	272363.9 (t/yr)	667,292
合計				201,529,962

(3-4) プロセス設計評価結果

本設計は、純度 99.96(wt%)のクメンが収率 99.91(%)で 249,994(t/yr)製造するプロセスとなった。

(3-2) プラント建設費で得られた結果と、触媒の費用を合わせた費用は以下のようになった。

Plant Construction Cost(\$)	11,326,363
Catalyst(\$)	1,468,032
Plant Total(\$)	12,794,396

プラント償却期間を10年として1年間の償却費用を算出し、これと1年間の直接運転費を合わせると以下のようになった。

Plant Total/10(\$/yr)	1,279,440
Running Cost(\$/yr)	201,529,962
Plant Total(\$/yr)	202,809,401

以上の結果から製品クメンの原価は 0.811(\$/kg)となった。

(4) 今回の設計結果に至った経緯

- アルキレーション反応器について

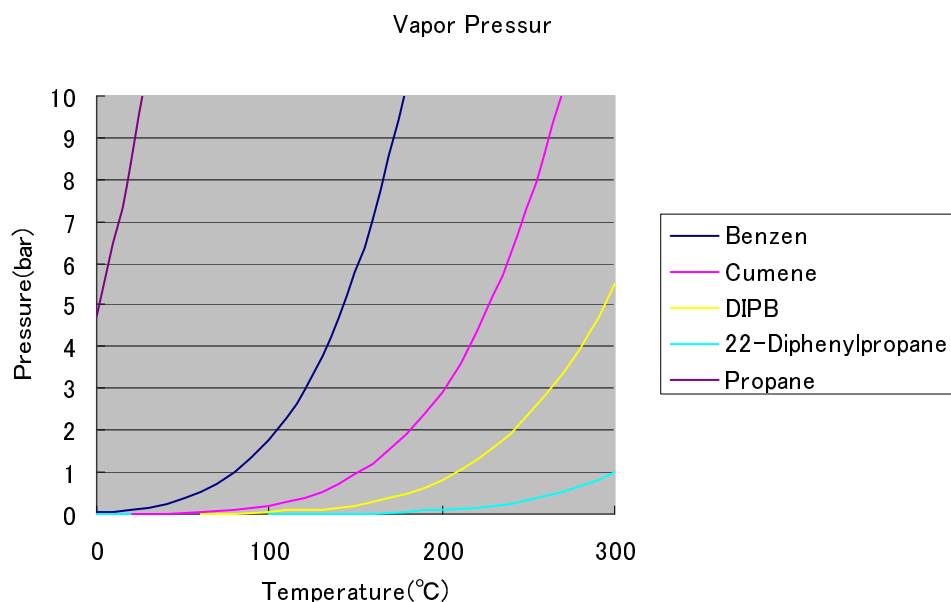
アルキレーション反応は 120℃～180℃の範囲で行わなければならない。この条件を満たし、かつ反応器の数を抑えた結果、反応器を3段としてその間の2箇所外部熱交換器により 120℃まで温度を下げる設計とした。

アルキレーション反応の原料となるベンゼンは、プロセスへの供給分とベンゼンカラムから分離した一部をリサイクルした分を合わせたものである。これとプロセスへ供給されるプロピレンのモル比（ベンゼン過剰率；ベンゼン/プロピレン）は 2.8 となり、燐酸触媒を用いた気相アルキレーションプロセスのベンゼン過剰率の約 10 と比べて小さい値となった。

原料プロピレンの3つの反応器への供給比と反応器の温度は以下のような結果となった。

反応器	Alkylation 1	Alkylation 2	Alkylation 3
プロピレン供給比	0.30	0.35	0.35
入口温度(℃)	120.0	120.0	120.0
出口温度(℃)	175.3	178.1	173.4

- 分離順序について



アルキレーション反応器を出た流体の成分は、蒸気圧の高い順に hydrogen、propane、n-hexane、benzene、cumene、14-diisopropyl benzene、22-Diphenylpropane である。このうち、hydrogen、n-hexane は他の成分に比べて少量なのでプロパンと共に分離する。上図は、propane、benzene、cumene、14-diisopropyl benzene、22-Diphenylpropane の蒸

気圧曲線である。

揮発度から、蒸留による分離順序を以下のように決定した。

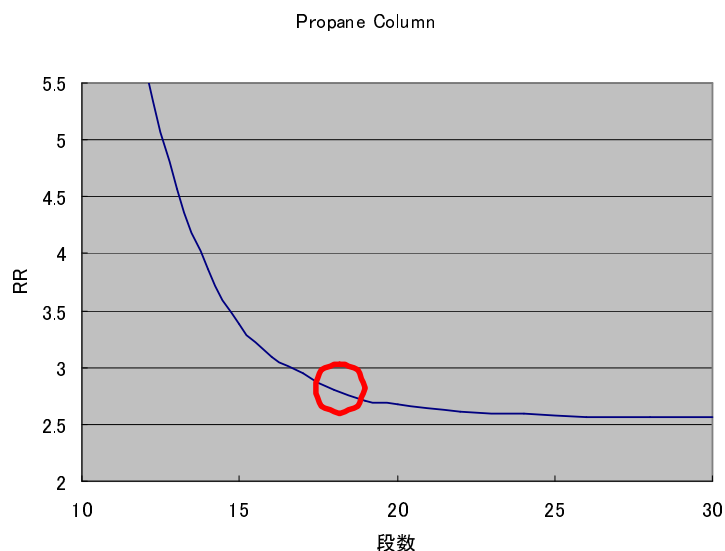
順序	Column Name	Light End	Heavy End
1	Propane Column	Propane	Benzene
2	Benzene Column	Benzene	Cumene
3	Cumene Column	Cumene	DIPB
4	DIPB Column	DIPB	22-Diphenylpropane

・ Propane Column について

揮発度とユーティリティを考慮して操作圧力を 17bar とした。スペックはプロパンの回収率 99.99%、ベンゼンの回収率 99.99%とした。

供給段は還流比が最小となる塔頂から 40%の位置とした。段数は、RR (Reflux Ratio) vs 段数グラフから 18 段とした (供給段は塔頂から 7 段目)。

供給段(%)	RR
30	2.75
40	2.68
50	2.91

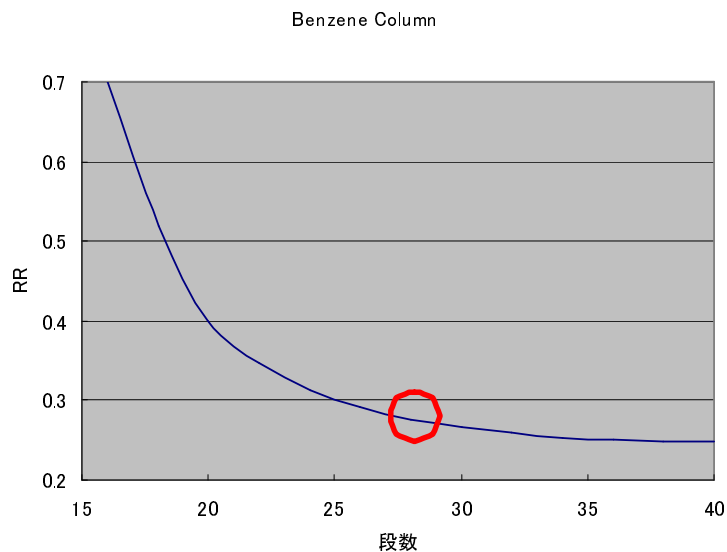


・ Benzene Column について

揮発度とユーティリティを考慮して操作圧力を 1bar とした。スペックはベンゼンの回収率 99.99%、クメンの回収率 99.99%とした。

供給段は還流比が最小となる塔頂から 70%の位置とした。段数は、RR vs 段数グラフから 28 段とした (供給段は塔頂から 20 段目)。

供給段(%)	RR
60	0.29
70	0.27
80	0.31

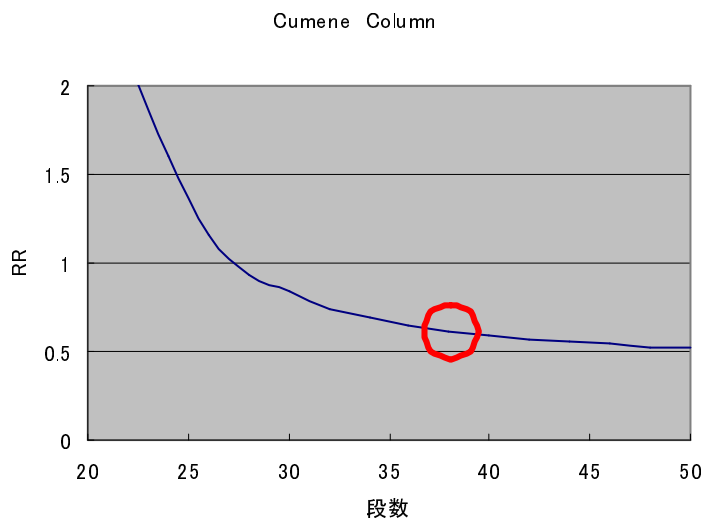


・ Cumene Column について

揮発度とユーティリティを考慮して操作圧力を 1.1bar とした。スペックはクメンの回収率 99.99%、DIPB の回収率 99.99%とした。得られたクメンは純度 99.96(wt%)であり、課題の条件を満たしている。

供給段は還流比が最小となる塔頂から 70%の位置とした。段数は、RR vs 段数グラフから 38 段とした (供給段は塔頂から 27 段目)。

供給段(%)	RR
60	0.85
70	0.84
80	1.81

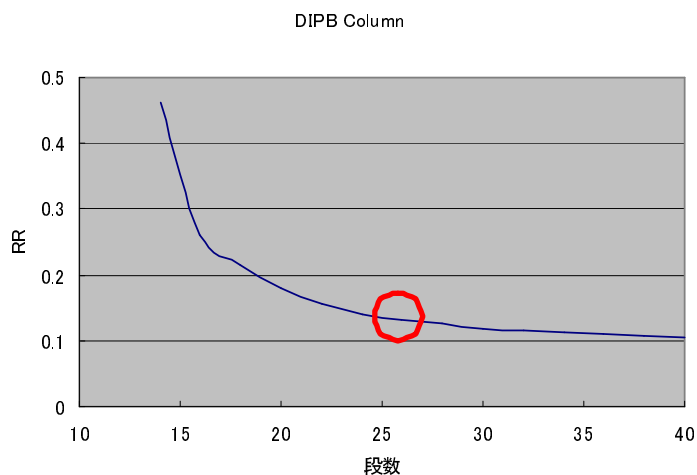


・ DIPB Column について

揮発度とユーティリティを考慮して操作圧力を 0.3bar の減圧蒸留とした。スペックは DIPB の回収率 99.99%、2,2-Diphenylpropane の回収率 99.99%とした。

供給段は還流比が最小となる塔頂から 80%の位置とした。段数は、RR vs 段数グラフから 26 段とした (供給段は塔頂から 21 段目)。

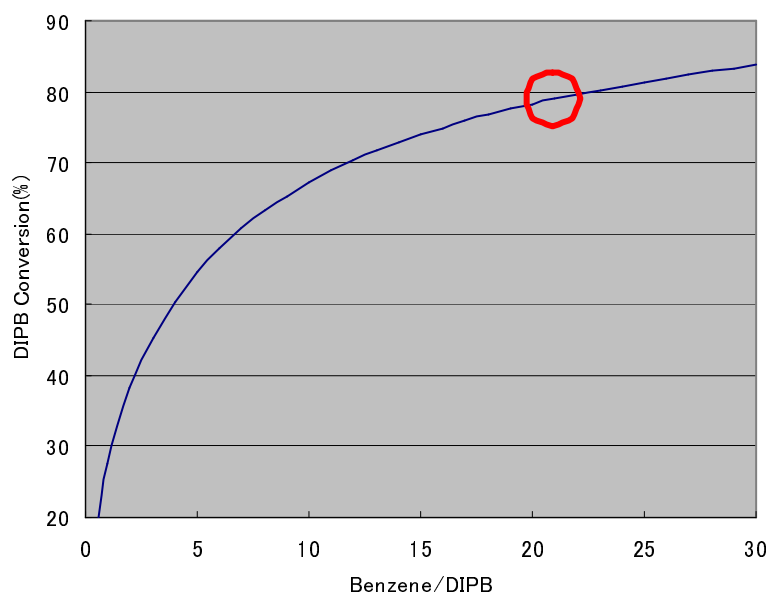
供給段(%)	RR
70	0.13
80	0.12
90	0.14



・ トランスアルキレーション反応器について

蒸留による分離で得られたベンゼンと DIPB を原料とする。Benzene Column 出口のベンゼンのモル量と、DIPB Column 出口の DIPB のモル量の比はベンゼン/DIPB=30.0 であった。ここで、トランスアルキレーション反応における原料のベンゼン/DIPB に対する DIPB の転化率を調べてみると下図となった。このグラフから、ベンゼン/DIPB ≧ 21 以上では DIPB の転化率の増加量は緩やかになっており、それ以上ベンゼンを過剰に供給しても効果は小さい。よって、トランスアルキレーション反応器入り口においてベンゼン/DIPB = 21 になるようにベンゼンの供給量を決定し、残りをアルキレーション反応の原料としてリサイクルした。

その結果、収率（原料ベンゼンの製品クメンの転化率）は収率 99.91(%)となり、課題の条件を満たしている。



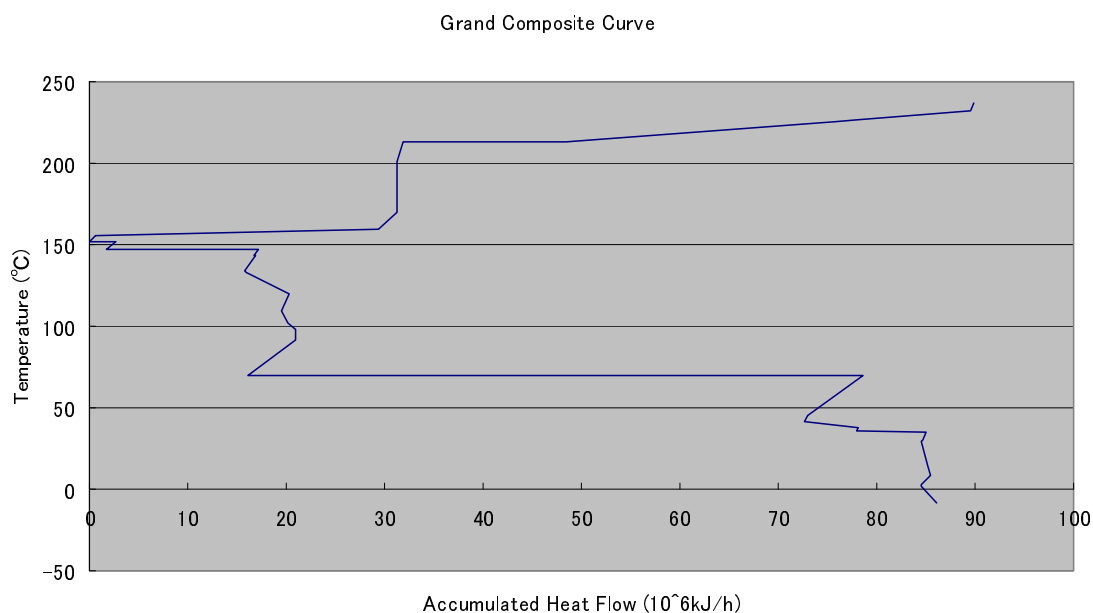
- リサイクルについて

本設計では二箇所で行った。一つはベンゼンカラムで得られるベンゼンの一部をアルキレーション反応器へ戻す部分と、もう一つはトランスアルキレーション反応で得られたクメンを分離する為にベンゼンカラムへ戻す部分である。この二箇所のリサイクル流体の前後の流量誤差は共に $0.5(\text{kmol/h})$ に抑えた。

- 熱回収システムについて

本設計で得られた熱量流量 vs 温度グラフが下図である (最小必要温度差は 10°C とした)。ユーティリティによる必要加熱量は $89.81(10^6\text{kJ/h})$ 、必要冷却量は $86.02(10^6\text{kJ/h})$ となった。

蒸留塔の圧力を調整し、プロセス内の流体温度の上限を加熱ユーティリティの利用可能範囲内 ($254^\circ\text{C}-10^\circ\text{C}=244^\circ\text{C}$) に収めた。また冷却では冷却水の利用に加えて、 1.78°C まで冷却する流体が 1 本あるので (流体番号 6)、他の流体との熱交換で可能な限り冷却し、以降は冷媒 (-20°C) を利用して冷却した。



- 加熱ユーティリティについて

加熱ユーティリティは、スチームを購入するか、オフガスとして得られるプロパンを利用してファーンレスによりスチームを発生させるかの 2 つの方法が考えられる。

以下では、1) プラント建設費、2) 運転費、3) 比較 としてまとめ、この 2 つの方法を検討した。

1) 運転費

本設計では HP スチームと MP スチームによる加熱が必要なので、購入すると費用は以下のようなになる。

	流体番号	流量(t/yr)	単価(\$/t)	運転費(\$/yr)
HP1	110	62,767		1,881,133
HP2	116	7,687	29.97	230,394
HP3	122	76,160		2,282,506
MP1	128	111,230	20.08	2,233,506
MP2	134	14,816		297,500
Total		272,660		6,925,039

一方、プロパンを利用してファーネスを建設する場合、ボイラー給水(Boiler Feed Water ; BFW) を利用するので費用は以下のようなになる。

	流体番号	流量(t/yr)	単価(\$/t)	運転費(\$/yr)
BFW	103	272,364	2.45	667,292
Total		272,364		667,292

以上より、運転費はファーネスを建設した場合、スチームを購入する場合の約 1/10 となる。

2) プラント建設費

ファーネス建設費を含めたプラント建設費と、スチームを購入する(ファーネスを建設しない)場合のプラント建設費をまとめた。ファーネス建設費は約 6,000,000 \$ となった。

	Furnace	Steam
Plant Construction Cost(\$)	11,326,363	5,408,109
Catalyst(\$)	1,468,032	1,468,032
Plant Total(\$)	12,794,396	1,468,032

3) 比較

1)、2) を合わせると、クメンを 250,000(t/yr) 製造した場合の原価は以下のようなになった。

	Furnace	Steam
Prant Total/10(\$/yr)	1,279,440	146,803
Runnning Cost(\$/yr)	201,529,962	207,478,267
Plant Total(\$/yr)	202,809,401	207,625,070
Cumene(\$/kg)	0.811	0.831

ファーネスを建設すると、建設費は大きくなる一方で、運転費にかかるボイラー給水はスチームを購入するより安価なので、このことがクメンの原価を小さくすることに大きく作用している。

以上より、加熱ユーティリティは、プロパンを原料としたファーネスにより発生させたスチームを利用することに決定した。また、**Propane Column** で得られたプロパンは全量をファーネスに供給するのではなく、スチームを必要量生成させ、かつスタック出口温度を 250℃で回収できる量だけをファーネスに供給し、反応器サイズと伝熱面積を抑えた。その結果、プロパン（オフガス）：ファーネス供給量=0.62：0.38 となった。

1. PFD

ピンチテクノロジーを適用後のPFDは複雑であるため、適用前のPFDをFig.1に示す。

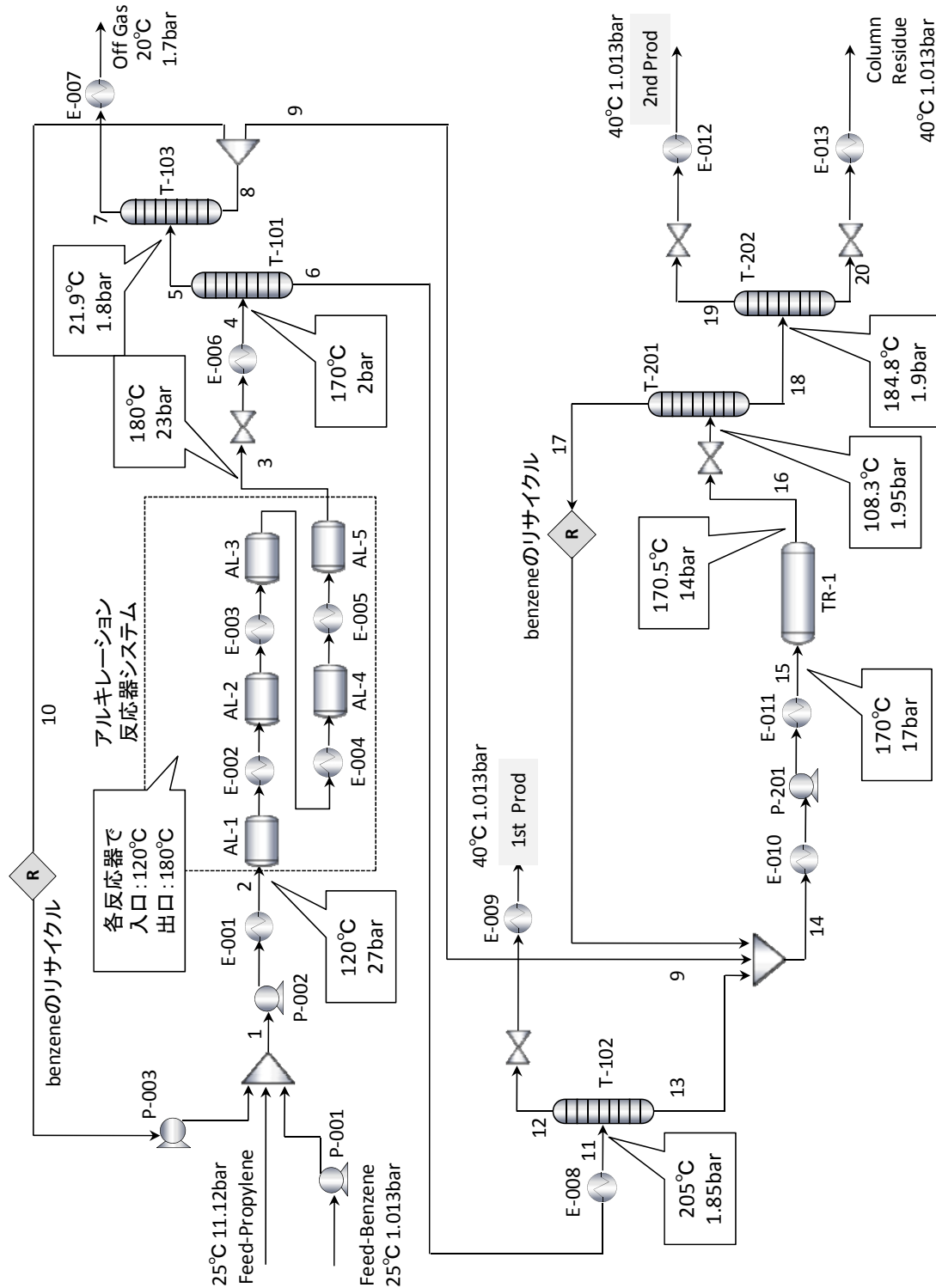


Fig.1 PFD

2. Stream Data Table

主な Stream の圧力、温度、流量、液化率、組成を Table 1、Table 2 に示す。

Table 1 Stream Data-1

Stream	液化率	温度	圧力	モル流量	質量流量	Stream	液化率	温度	圧力	モル流量	質量流量
	[-]	[°C]	[kPa]	[kgmol/h]	[kg/h]		[-]	[°C]	[kPa]	[kgmol/h]	[kg/h]
Feed-Benzene	1.0000	25.0	101.3	275.00	21484.69	8	1.0000	99.2	175.0	862.00	67339.74
Feed-Propylene	1.0000	25.0	1112.0	393.00	16775.41	9	1.0000	99.2	175.0	30.17	2356.89
1st Prod	1.0000	40.0	101.3	198.00	23797.64	10	1.0000	99.2	175.0	831.83	64982.85
2nd Prod	1.0000	40.0	101.3	59.70	7177.12	11	0.0000	205.0	185.0	236.70	30078.33
Off Gas	0.0000	20.0	170.0	118.70	5252.04	12	1.0000	174.8	170.0	198.00	23797.64
Column Residue	1.0000	40.0	101.3	9.07	1473.57	13	1.0000	235.2	175.0	38.70	6280.69
1	1.0000	70.3	1112.0	1492.50	102669.33	14	1.0000	101.1	175.0	760.87	62740.02
2	1.0000	120.0	2700.0	1492.50	102669.33	15	1.0000	170.0	1600.0	760.87	62740.02
3	1.0000	180.0	2300.0	1217.40	102670.11	16	1.0000	170.5	1400.0	760.87	62740.25
4	0.0000	170.0	200.0	1217.40	102670.11	17	1.0000	100.1	180.0	692.10	54089.56
5	0.9898	27.4	180.0	980.70	72591.78	18	1.0000	184.5	190.0	68.77	8650.69
6	1.0000	184.4	185.0	236.70	30078.33	19	1.0000	173.6	165.0	59.70	7177.12
7	0.9916	-33.7	170.0	118.70	5252.04	20	1.0000	233.6	170.0	9.07	1473.57

Table 2 Stream Data-2

Stream	組成(mole基準)										組成(質量基準)					
	Hydrogen	Propylene	Propane	n-Hexane	Benzene	Cumene	DIPB	Diphenyl	Hydrogen	propylene	propane	n-hexane	benzene	cumene	DIPB	Diphenyl
Feed-Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0020	0.9980	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0022	0.9978	0.0000	0.0000	0.0000
Feed-Propylene	0.0000	0.7000	0.3000	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
1st Prod	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.9999	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.9999	0.0000	0.0000
2nd Prod	0.0014	0.0000	0.9933	0.0032	0.0022	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.9899	0.0062	0.0000	0.0039	0.0000	0.0000	0.0000
Off Gas	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0107	0.9711	0.0182	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0079	0.9701	0.0219
Column Residue	0.0000	0.1843	0.0790	0.0010	0.7357	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0506	0.0012	0.8354	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	0.0000	0.1843	0.0790	0.0010	0.7357	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0506	0.0012	0.8354	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	0.0001	0.0000	0.0968	0.0012	0.7074	0.1627	0.0316	0.0001	0.0000	0.0506	0.0012	0.6552	0.2319	0.0607	0.0003	0.0000
3	0.0001	0.0000	0.0968	0.0012	0.7074	0.1627	0.0316	0.0001	0.0000	0.0506	0.0012	0.6552	0.2319	0.0607	0.0003	0.0000
4	0.0002	0.0000	0.1202	0.0015	0.8781	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0716	0.0018	0.9266	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.8369	0.1623	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.7916	0.2073	0.0011	0.0000
6	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0022	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.9899	0.0062	0.0039	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
7	0.0014	0.0000	0.9933	0.0013	0.9987	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0014	0.9886	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
8	0.0000	0.0000	0.0000	0.0013	0.9987	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0014	0.9886	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
9	0.0000	0.0000	0.0000	0.0013	0.9987	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0014	0.9886	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
10	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.8369	0.1623	0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.7916	0.2073	0.0011	0.0000
11	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.8369	0.1623	0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.7916	0.2073	0.0011	0.0000
12	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.9999	0.0000	0.0043	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.9999	0.0000	0.0000	0.0000
13	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.9999	0.0000	0.0043	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.9999	0.0000	0.0000	0.0000
14	0.0000	0.0000	0.0000	0.0048	0.9437	0.0008	0.0505	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0050	0.8939	0.0012	0.0994	0.0005
15	0.0000	0.0000	0.0000	0.0048	0.9437	0.0008	0.0505	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0050	0.8939	0.0012	0.0994	0.0005
16	0.0000	0.0000	0.0000	0.0048	0.9437	0.0008	0.0505	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0050	0.8939	0.0012	0.0994	0.0005
17	0.0000	0.0000	0.0000	0.0048	0.9437	0.0008	0.0505	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0050	0.8939	0.0012	0.0994	0.0005
18	0.0000	0.0000	0.0000	0.0052	0.9947	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0058	0.9942	0.0000	0.0000	0.0000
19	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.8689	0.1287	0.0024	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.8303	0.1660	0.0037	0.0000
20	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.9993	0.0006	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.9991	0.0009	0.0000	0.0000
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0107	0.9711	0.0182	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0079	0.9701	0.0219	0.0000

3. プラントコスト推算結果

3.1. 反応器のサイジングおよび触媒量の決定

3章以降の文章では、アルキレーション反応を AL 反応、トランスアルキレーション反応を TR 反応と表記する。

・アルキレーション(AL)反応器

断熱管型反応器の場合、次の物質収支および熱収支が成り立つ。

$$F_t \bar{C}_{p,m} \frac{dT}{dx_p} + S(-r_p)\Delta H_R = 0 \quad (1)$$

$$\frac{F_{p0}}{2S} \frac{dx_p}{dz} = -r_p \quad (2)$$

これらを解くと、以下の2式が得られる

$$\frac{F_{p0}}{C_{p0}^2} \frac{1}{(\theta_{b,p}-1)k_1 + (\theta_{c,p}-1)k_2} \ln \frac{k_1\theta_{b,p} + k_2\theta_{c,p} - (k_1+k_2)x_{p2}}{(k_1\theta_{b,p} + k_2\theta_{c,p}) \cdot (1-x_{p2})} = \frac{\pi}{96} z^3 \quad (3)$$

$$T - T_0 = C_{p0} \frac{-\Delta H_R}{\rho \bar{C}_{p,m}} \cdot x_p \quad (4)$$

式(3)、(4)から反応器の長さ z 、反応率 x_p を推定し、反応器のサイジングを決定した。触媒量は、各反応器の容積の 1/2 とした。

また、AL 反応は逐次・並列反応であり、反応器出口の各成分の濃度の推定には以下の式を用いた。

$$\frac{C_C}{C_{B0}} = \frac{1}{1 - k_2/k_1} \left[\left(\frac{C_B}{C_{B0}} \right)^{\frac{k_2}{k_1}} - \frac{C_B}{C_{B0}} \right] + \frac{C_{C0}}{C_{B0}} \left(\frac{C_B}{C_{B0}} \right)^{\frac{k_2}{k_1}} \quad (5)$$

$$C_{B0} + C_{C0} + C_{D0} = C_B + C_C + C_D \quad (6)$$

$$C_{p0} + C_{C0} + 2C_{D0} = C_p + C_C + 2C_D \quad (7)$$

これらの式より、反応器の出口濃度を推定し、次の反応器の入口濃度とした。

・トランスアルキレーション(TR)反応器

この反応は等温反応とみなせるので、反応器のサイジングは次の物質収支のみを考える。

$$\frac{F_{p0}}{2S} \frac{dx_p}{dz} = -r_p \quad (8)$$

この式を解くと、

$$\frac{F_{D0}}{2S \cdot z} = \frac{1}{k_3 C_{D0} (\theta_D - 1)} \ln \frac{\theta_b - x_D}{1 - x_D} \quad (9)$$

以上より、反応器の長さ z を計算し、サイジングした。また、触媒量は反応器容積の 1/2 とした。

各変数の定義は以下のとおりである。

F_t : 全物質質量流量 $\bar{C}_{p,m}$: 平均モル熱容量 S : 反応器断面積 ΔH_R : 反応熱

$\bar{c}_{p,m}$: 混合物の平均比熱容量 $\theta_{i,j} = F_{i0}/F_{j0}$

3.2. プラント建設費

プラント建設費、触媒費用を Table 3、Table 4 に示す。

Table 3 プラント建設費

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$1,314,413.5
Trays	\$45,292.1
Heat Exchangers	\$4,625,660.6
Pump with Electric Driver	\$188,153.5
Compressor	\$0.0
Compressor Driver	\$0.0
Furnace	\$0.0
Total Bare Module Cost	\$6,173,519.8
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$7,284,753.4
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	\$575.4
Plant Construction Cost in 2008	\$10,972,898.1

Table 4 触媒費用

Category	Cost
catalyst(Alky)	\$106,032.4
catalyst(TransAlky)	\$31,417.0
Total catalyst Cost	\$137,449.4

3.3. 直接運転費

原料とユーティリティから 1 年間の運転費を計算した結果を Table 4 に示す。

Table 4 直接運転費

(1)原料	単価	必要量	年間額[\$/yr]
ベンゼン	0.657 [\$/kg]	171,877,500 [kg/yr]	113,000,000
プロピレン	0.736	134,141,554 [kg/yr]	98,700,000
原料費計			212,000,000
(2)ユーティリティ			
HPスチーム	29.97 [\$/ton]	426,345 [ton/yr]	12,780,000
MPスチーム	20.08 [\$/ton]	2,669 [ton/yr]	53,600
LPスチーム	17.08 [\$/ton]	408 [ton/yr]	6,975
冷却水	14.80 [\$/1000ton]	10,439 [1000ton/yr]	154,500
冷媒1	4.43 [\$/GJ]	660,280 [GJ/yr]	2,925,000
冷媒2	7.89 [\$/GJ]	0 [GJ/yr]	0
冷媒3	13.11 [\$/GJ]	73,603 [GJ/yr]	964,900
電力	0.06 [\$/kWh]	1,289,228 [kWh/yr]	77,350
燃料	11.10 [\$/GJ]	0 [GJ/yr]	0
ボイラー給水	2.45 [\$/ton]	0 [ton/yr]	0
ユーティリティ費計			16,960,000
直接運転費計			229,000,000

3.4. プロセス設計評価結果

プラント建設費、直接運転費からクメンの単価[\$/ton]を以下の式で求めた。

$$\text{クメンの単価}[\$/\text{ton}] = \frac{\text{プラント建設費}/10 + \text{触媒費用} + \text{直接運転費}}{250000}$$

(10)

この式から求めたクメンの単価は 921[\$/ton]であった。

4. 今回の設計結果に至った経緯

4.1. 概念設計および物質収支

まず、プロセス全体の概念設計を行った。Fig.2 は、最終的に採用したブロックフローである。また、与えられた条件（収率、年間の製造量）から物質収支を構築し、原料供給量と必要な製品生産量を決定した。

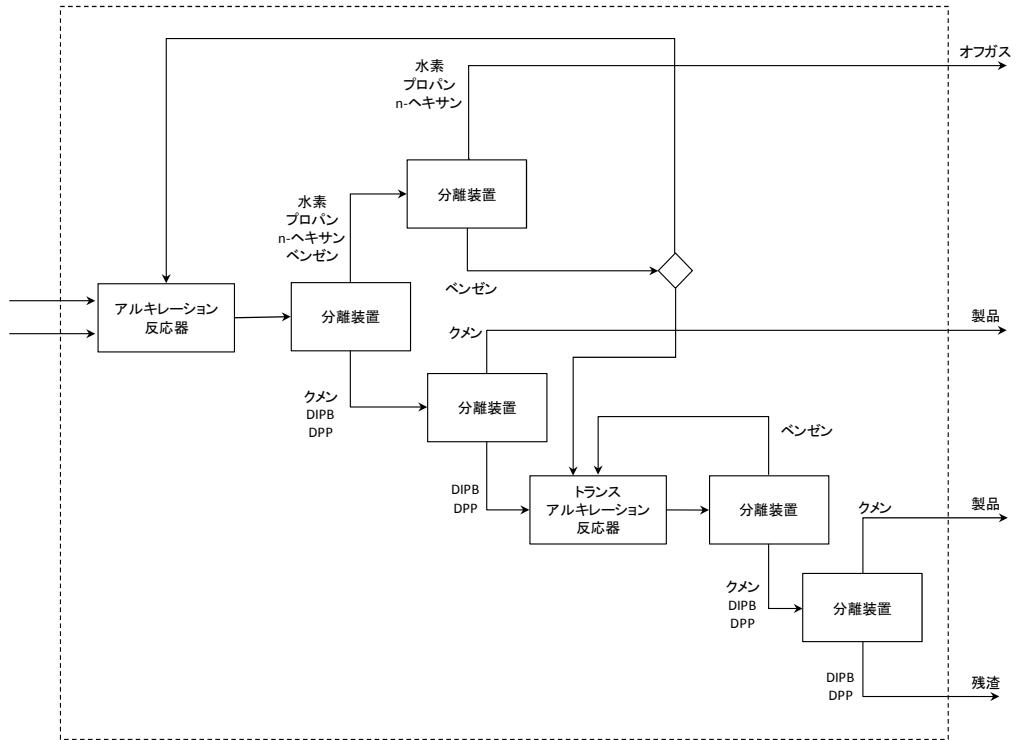


Fig.2 ブロックフロー

4.2. 反応工程

・アルキレーション(AL)反応器システム

平衡反応器を仮定し、AL 反応器システムの入口のベンゼン過剰率と出口のプロピレン基準のクメンの選択率および DIPB の選択率、また、DIPB の生成量から、TR 反応で収率 95%を満足するために必要な DIPB の転化率の関係について検討した結果を Fig.3 に示す。AL 反応器間の温度を下げる方法としては、外部熱交換器を用いた。

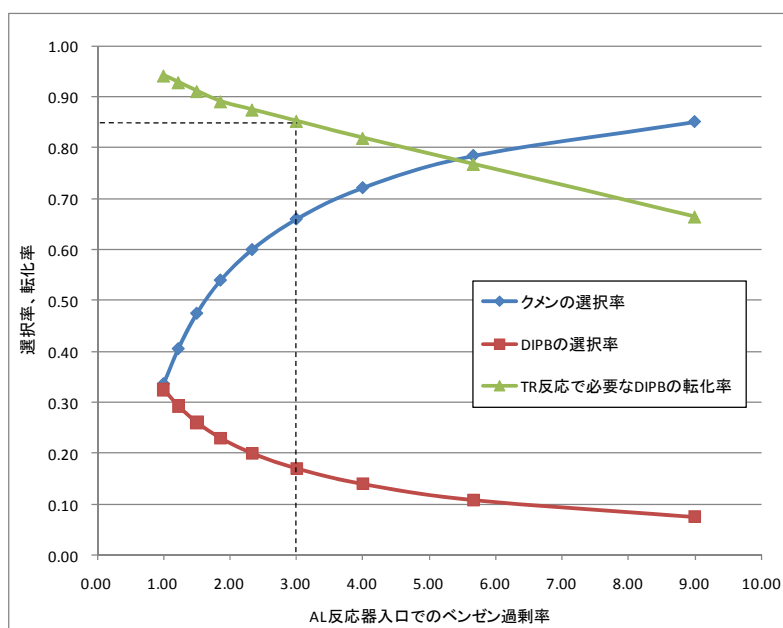


Fig.3 アルキレーション(AL)反応器の特性

・トランスアルキレーション(TR)反応器

この反応器でも、平衡反応器を仮定し、TR 反応器入口のベンゼン過剰率と出口のDIPB 基準のクメンへの転化率の関係について検討した。その結果、この反応器にもリサイクルが必要だと考えた。

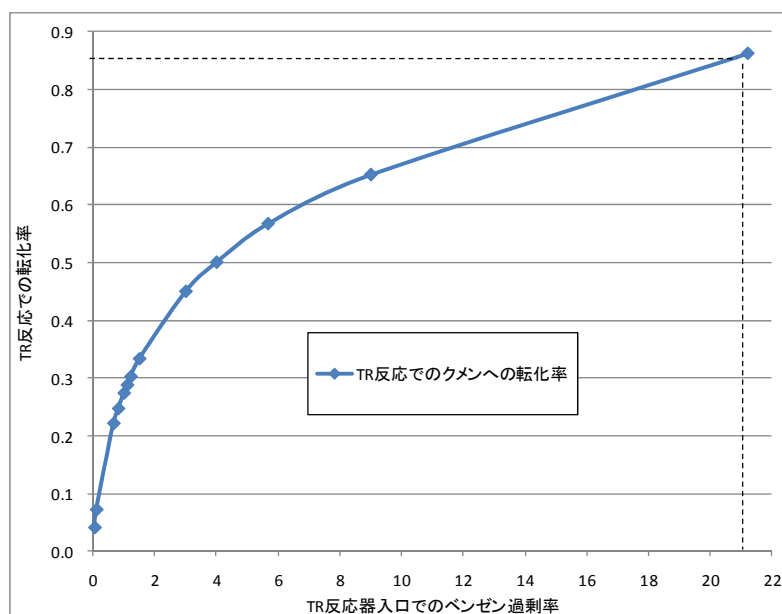


Fig.4 トランスアルキレーション(TR)反応器の特性

- ・ベンゼン過剰率の最小値

これらの結果より、AL 反応器でのベンゼン過剰率が低いと、TR 反応器での必要な転化率が大きくなり、TR 反応器に高いベンゼン過剰率が必要となってしまう。そのため、AL 反応器のベンゼン過剰率の最小値を 3 倍として設計を進めることにした。このとき TR 反応器で必要なベンゼン過剰率は 21 倍であり、TR 反応器はこの値が最大値として、これ以下の過剰率で設計を進めることになる。最終的なベンゼン過剰率は、分離装置のサイジングが大きくならないよう考慮し、AL 反応器入口のベンゼン過剰率は 3.99 倍、TR 反応器入口のベンゼン過剰率は 18.6 倍となった。

4.3. 分離工程

- ・分離工程には、すべて蒸留塔を用いた。
- ・反応器出口の圧力がそれぞれ 23bar、14bar と高圧であり、装置コストへの影響を考慮し、操作圧力が 1.5~2bar の範囲となるよう設定した。
- ・最小還流比と最小理論段数を計算し、その値を基に初期設計をし、最適化を行った。
- ・AL 反応器のベンゼンをリサイクルする過程において、蒸留塔 T-103 を用いてベンゼンと不活性成分の分離し、純度の高いベンゼンをリサイクルすることを検討した。

4.4. 熱交換器

- ・プロセス流体間に熱交換器を設置することにより熱回収を図る際に、Aspen HX-Net というソフトウェアを用いてピンチテクノロジーを適用した。
 - ・プロセス内の最大熱回収量を明らかにするため、加熱すべき流体（与熱流体）と冷却すべき流体（受熱流体）のデータを抽出し、Composite Curves (Fig.5) を作成した。ここで、Fig.5 において与熱流体と受熱流体が最も接近する点をピンチポイントと呼び、この点における最小接近温度差 ΔT_{min} を決定しなければならないが、化学・石油化学プロセスにおける推奨 ΔT_{min} が 10-20°C であることから、 ΔT_{min} を 10°C とした。
- Composite Curves を作成した結果、最小冷却用役量は 1.7×10^8 kJ/h、最小加熱用役量は 8.1×10^7 kJ/h、最大熱回収量は 9.0×10^7 kJ/h となった。

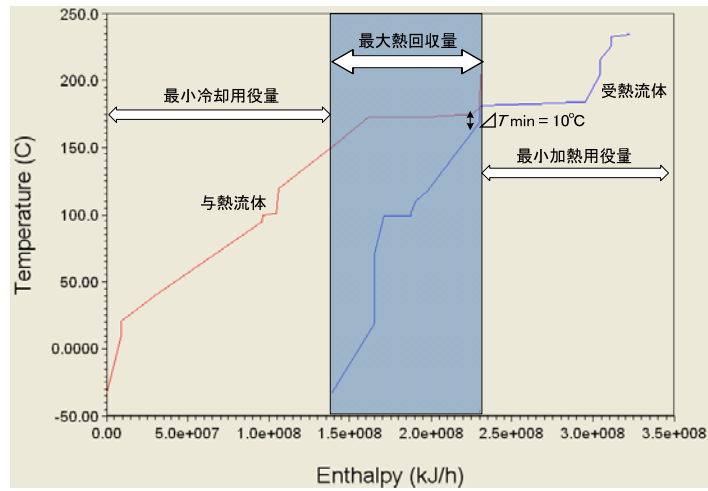


Fig.5 Composite Curves

・最大熱回収量を達成する熱交換器網を Grid Diagram という表現方法にて設計した。このソフトウェアには推奨 Grid Diagram 設計案の自動生成機能が付いているが、用役の最適配分は自動で行ってくれない（最高温度の加熱用役、最低温度の冷却用役のみを用いてしまう）。そのため、推奨 Grid Diagram 設計案を自動生成したのち、手動にて用役の最適配分を検討した。最終的に決定した Grid Diagram を Fig.6 に示す。

・熱回収後、熱交換器の数は多くなり、熱交換器の装置コストは増したが、用役コストが大幅に減少し、合計として熱交換器+用役コストは 26.8%安くなった。

Table 5 ピンチテクノロジー適用前後でのコスト

	熱交換器数	熱交換器コスト [\$/yr]	用役コスト [\$/yr]	熱交換器+用役コスト [\$/yr]
前	23	253,000	23,600,000	23,900,000
後	37	463,000	170,00,000	17,500,000

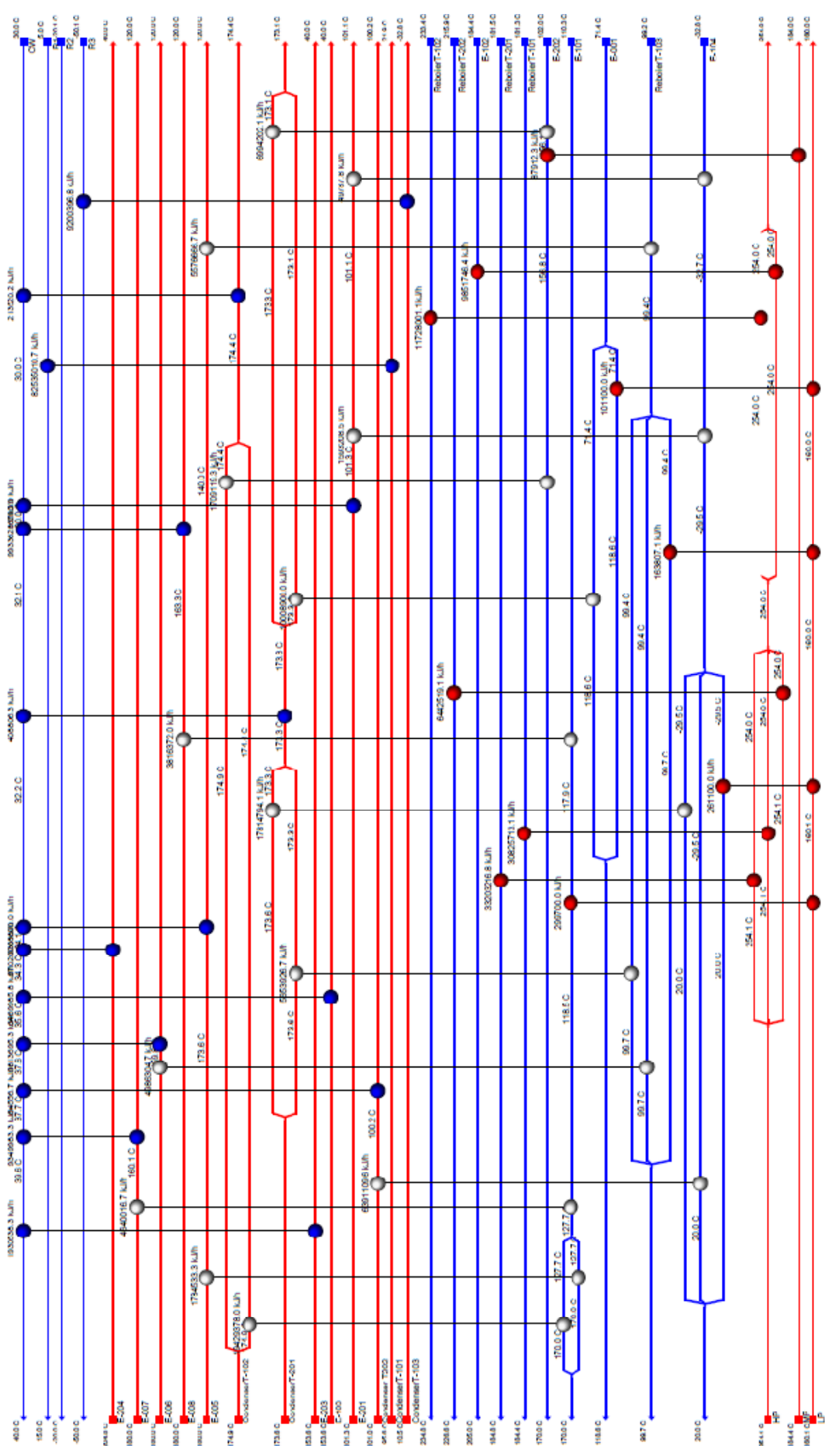


Fig.6 Grid Diagram

クメン製造プロセスの設計

京都大学
プロセスシステム研究室

B4 小枝 祐揮
児玉 伸崇
満洲 裕幸

1 設計結果に至った経緯

本プロセス設計での検討事項をまとめる。

- ・アルキレーション反応器の形式
アルキレーション反応は発熱反応なので、決められた温度範囲で反応を行うためには、反応によって生じた熱を除熱する必要がある。そのため、反応器の間にクーラーをいれて除熱を行う多段断熱反応器を採用した。また、一度に原料のプロピレンを反応器に投入してしまうと、低沸点成分であるプロパン、プロピレンのモル分率が高くなり、反応器中で気体が発生してしまう。気体が発生すると反応速度が低下するので、気体の発生を防ぐ必要がある。そのため、原料プロピレンを各反応器に分割して供給を行い、流れ中の低沸点成分のモル分率を低くし、気体の発生を抑制した。
- ・分離シーケンス
プロパン、未反応ベンゼン、副生成物の DIPB、製品のクメンの 4 成分を蒸留塔を用いて分離する。プロパンは沸点が低く分離が容易なため 1 番最初に分離を行った。また、クメンと DIPB の分離が最も困難であるため、できるだけ流量が少ない最後に分離した。以上より、分離シーケンスでは、プロパン、ベンゼン、DIPB の順に分離を行うことにした。
- ・ヒートインテグレーションを考慮した最適化
最適化を行うにあたり、熱媒コストおよび反応器コストで評価を行ったが、各ケースの熱媒コストを求める際にヒートインテグレーションを考慮した。主に、アルキレーション反応で放出される熱と DIPB 分離塔コンデンサから放出される熱を用い、ベンゼン分離塔リボイラで必要となる熱量を賄った。最終的な TQ 線図を図 1 に示す。
- ・アルキレーション反応器出口温度の決定

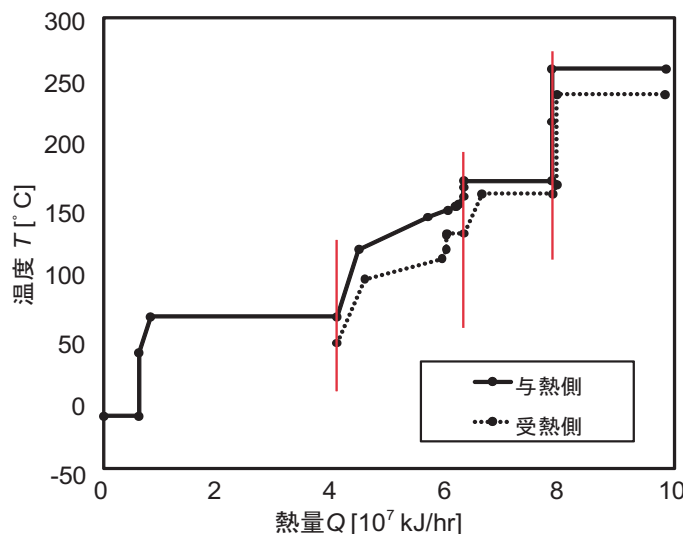


図 1 クメン製造プロセスの TQ 線図

表1 ユーティリティ価格

加熱用	HP スチーム (254 []sat.)	17.16 \$/GJ
	MP スチーム (184 []sat.)	11.50 \$/GJ
	LP スチーム (160 []sat.)	9.78 \$/GJ
冷却用	冷却水 (30 供給 40 戻り)	0.35 \$/GJ
	冷媒 1 (5 供給 15 戻り)	4.43 \$/GJ
	冷媒 2 (-20 供給 -20 戻り)	7.89 \$/GJ
	冷媒 3 (-50 供給 -50 戻り)	13.11 \$/GJ

アルキレーション反応器の設計を行うにあたり、プロセス全体を考慮して決定すべき変数は、アルキレーション反応器出口温度と、アルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量の二つである。簡単のためまずアルキレーション反応器出口温度を決めた。アルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量は 200 kmol/hr で、トランスアルキレーション反応は平衡に達していると仮定した。また、蒸留塔の設計は次項で述べる方法で行った。熱交換を考慮して熱媒コストを求め、アルキレーション反応器コストと熱媒コストの合計で評価を行った。出口温度 160 の時に反応器コストと熱媒コストの合計が最小になったので、アルキレーション反応器出口温度が 160 となるようアルキレーション反応器体積を決定した。

- 蒸留塔操作条件の決定

蒸留塔の操作条件は、熱媒コストが最小となるよう決めた。各熱媒の詳細を表 1 に示す。最小接近温度差を 10 とし、ヒートインテグレーションを行った。プロパン分離塔の圧力を、冷媒 2 とプロパン分離塔コンデンサで熱交換できるように、コンデンサ温度が -10 となるよう決めた。これは、冷媒 1 や冷却水を用いると、リボイラ温度が高くなり、スチームコストが増加するためである。また、冷媒 3 は価格が高いので用いないこととした。DIPB 分離塔塔頂から出てくるクメンの沸点が高いためコンデンサ温度が高くなることを利用し、DIPB 分離塔のコンデンサから得られる熱をベンゼン分離塔のリボイラへ与えた。コストの高い減圧蒸留塔を避けるためベンゼン分離塔の圧力を 101.3 kPa とし、DIPB 分離塔の塔内圧力を上げ、DIPB 分離塔のコンデンサ温度をベンゼン分離塔のリボイラ温度より 10 高くした。また、ベンゼン分離塔のリボイラの加熱に必要な熱量を減らすため、アルキレーション反応器から得られる反応熱を主として用いてベンゼン分離塔入口流体を加熱した。

- トランスアルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量の決定

トランスアルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量はプロセス全体に必要なスチームコスト (HP スチームコスト) が最小となるよう決定した。トランスアルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量が減ると、DIPB リサイクル量が増え、DIPB 分離塔にかかる負荷が増し、スチームコストが増加する。また、トランスアルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量が増えすぎると、ベンゼン分離塔リボイラの加熱に必要な熱量が増加し、DIPB 分離塔コンデンサなどから熱交換で賄える量を超えてしまい、スチームコストが急増する。

- トランスアルキレーション反応器体積とアルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量の決定

アルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量を 200, 300, 400 kmol/hr とし、トランスアルキレーション反応器体積を変化させて、アルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量と、トランスアルキレーション反応器体積の最適な組み合わせを求めた。各組み合わせに対する反応器コストと熱媒コストの和で評価を行った。アルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル量を増やすと、DIPB 生成量が減り、トランスアルキレーション反応器が小さくてすむため反応器コストが減るが、その一方でベンゼン流量が増え、ベンゼン分離塔リボイラの加熱に必要な熱量が増し、スチームコストが増加する。アルキレーション反応器へのベンゼンリサイクル流量は 300 kmol/hr、トランスアルキレーション反応器の大きさは 86 m³ の時最適であった。

- ・ 廃プロパンの脱水素化によるプロピレンの生成
クメン製造プロセスの運転に必要なコストの 46 % を原料プロピレンが占めていて、その内の 3 割がプロパンである。このプロパンを、プロピレンへ転換し、原料と同じ組成のプロパン、プロピレン混合液を製造することにより、原料コストの削減をおこなった。
- ・ プロパン脱水素化反応におけるラジアルフロー型反応器の利用
この反応は気相反応であり、反応器内での圧力損失が大きいと非常に大きなコンプレッサコストが必要となる。そこで圧力損失を抑えることができるラジアルフロー型反応器を用いた。ラジアルフロー型反応器はガスを半径方向に流すため、原料を軸方向に流す反応器に比べて触媒層を通過する距離が短くなり、圧力損失を減らすことができる。軸方向の温度、流速、濃度などの分布は無視し、物質収支と熱収支をとり、RKG 法を用いて数値積分を行い、反応器内の濃度分布と温度分布を求めた。
- ・ 反応工程の設計
主反応は吸熱反応であるため、温度が高いほうが平衡組成は有利になる。しかし、ラジアルフロー型反応器は構造が複雑であるため、外部からの加熱が困難である。そこで、同じサイズの反応器を多段にして、反応器出口ガスを 600 に加熱して次の反応器に供給した。反応器サイズは、反応工程入口のプロピレンのモル流量を 0 とした時に出口温度が 550 以下とならない、内管半径 0.50 m、外管半径 0.70 m、塔高 3.0 m で統一した。反応器の基数はプロピレンの選択率が 0.8 以上になる 7 基とした。また、同様の反応器をもう 1 組用意して、1 組を脱水素化反応を行う反応器、もう 1 組を空気燃焼によって触媒を再生させている反応器とした。
- ・ 分離シーケンス
分離工程では水素、メタン、エチレン、未反応プロパンを分離し、製品プロピレンを精製する。水素は他の成分に比べて極端に沸点が低く、反応工程出口においてその流量が非常に大きいことから最初に分離することが最適である。またプロパンとプロピレンは沸点が非常に近いことから、分離が最も困難であると考えられるので、最後に分離する。これらのことを考えて、最初に気液分離器によって水素を分離し、次に蒸留塔によってメタン・エチレン、プロパンの順で分離することにした。

上記の検討事項を考慮し、プロセス設計を行うことによって、1.87 億\$ でクメンを年間 25 万トン生産するプラントを設計した。

2 プラントコスト推算結果

2.1 反応器

最終段以外のアルキレーション反応器体積は、反応器入口流体温度を 120 とした時、出口温度が 160 となるよう決定した。最終段のアルキレーション反応器体積は、単通反応率が 99.95 % で、出口温度が 160 となるよう決めた。トランスアルキレーション反応器体積は、反応器コストと熱媒コストの和が最小となるよう決めた。各反応器体積を表 2 に示す。

プロピレン製造プロセスのラジアルフロー型反応器サイズは、反応工程入口のプロピレンのモル流量を 0 とした時に出口温度が 550 以下とならない、内管半径 0.50 m、外管半径 0.70 m、塔高 3.0 m で統一した。反応器の基数はプロピレンの選択率が 0.8 以上になる 7 基とした。

表2 反応器長さや管径

	アルキレーション反応器					トランスアルキレーション反応器
	1基目	2基目	3基目	4基目	5基目	
長さ [m]	5.1	5.3	5.8	6.6	6.8	14
管径 [m]	1.3	1.3	1.5	1.7	1.7	2.8

2.2 プラント建設コスト

プロピレン製造プロセス導入後のプラント建設コストを図2に、導入前のプラント建設コストを図3に示す。

2.3 運転コスト

プロピレン製造プロセス導入前と導入後の運転コストを表3に示す。

2.4 プロセス設計評価結果

プロピレン製造プロセス導入前と導入後の総コストを表4に示す。プロピレン製造プロセスを導入し、クメンを0.748 \$/kgで製造するプロセスを設計した。プロピレン製造プロセスを導入しなかった場合のクメン製造コストは0.813 \$/kgである。プロピレン製造プロセスの導入により、プラント建設費やユーティリティコストは約3倍になったが、このプロセスでは製造コストにおける原材料コストの割合が非常に大きいため、全体では約8%のコスト削減に成功した。

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$10,076,465
Trays	\$227,266
Heat Exchangers	\$752,353
Pump with Electric Driver	\$638,228
Compressor	\$4,621,838
Compressor Driver	\$115,136
Furnace	\$2,422,560
Total Bare Module Cost	\$18,853,846
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$22,247,538
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$33,511,082

図2 プラント建設コスト（プロピレン製造プロセス導入後）

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$4,443,060
Trays	\$110,724
Heat Exchangers	\$439,715
Pump with Electric Driver	\$562,137
Compressor	\$0
Compressor Driver	\$0
Furnace	\$1,003,849
Total Bare Module Cost	\$6,559,485
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$7,740,193
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$11,658,918

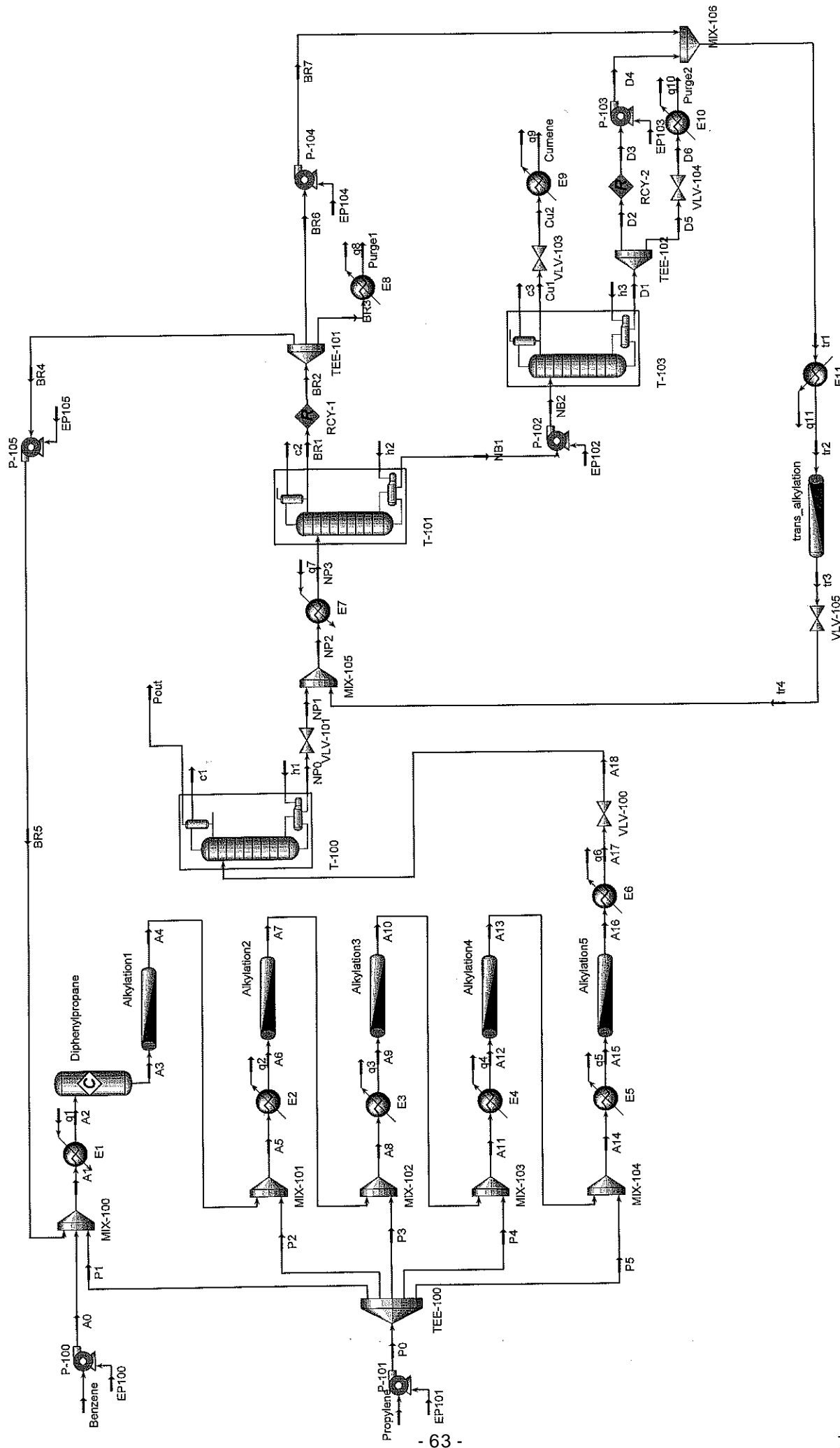
図3 プラント建設コスト(プロピレン製造プロセス導入前)

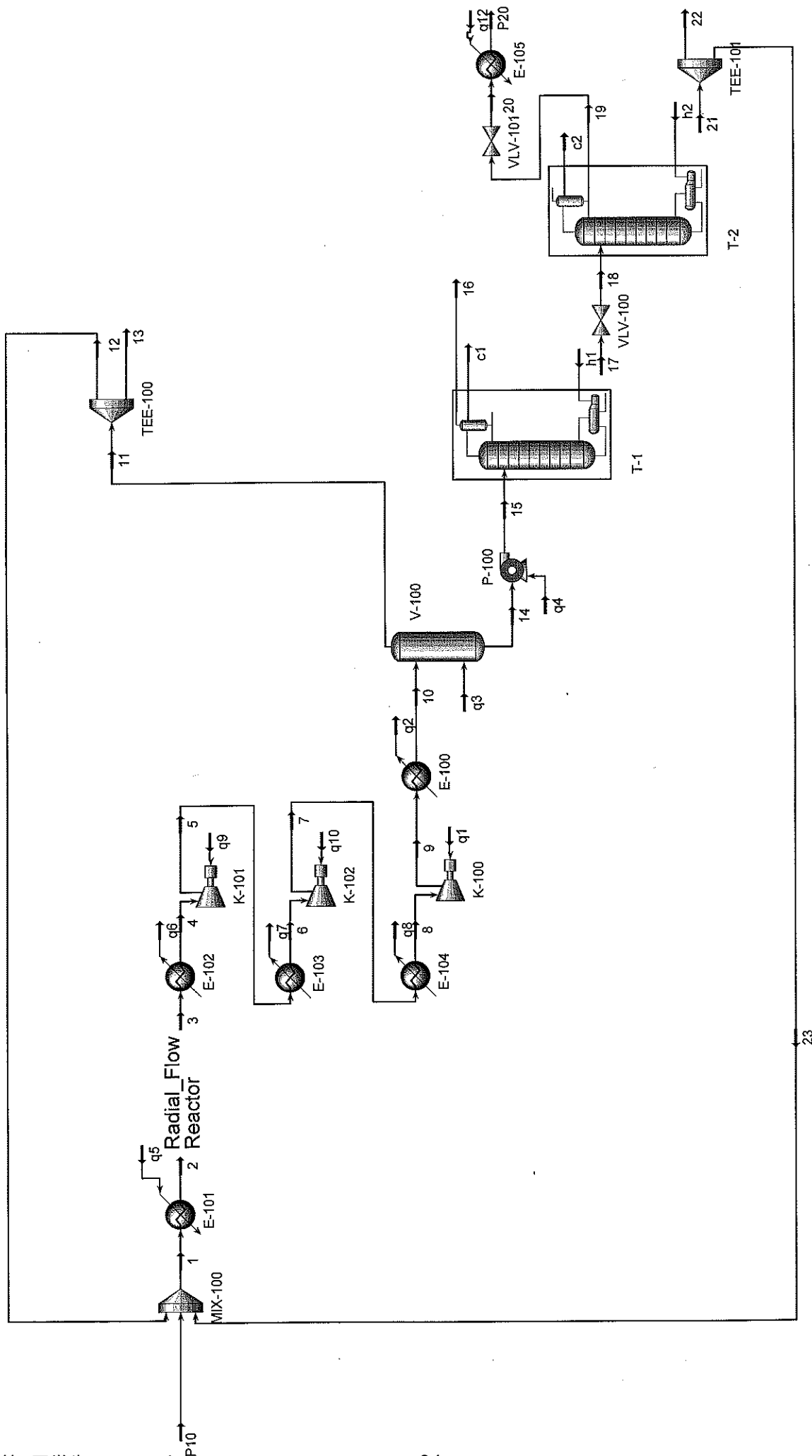
表3 プロピレン製造プロセス導入前, 導入後の運転コスト

		導入前 [k\$/yr]	導入後 [k\$/yr]
原料	ベンゼン	107,768	107,768
	プロピレン	93,557	72,711
固定費	触媒	70	641
	ユーティリティ		
	冷却水	98	146
	冷媒 1	0	0
	冷媒 2	384	447
	冷媒 3	0	210
	ボイラー給水	221	697
	電力	54	1,022
	合計	202,152	183,642


表4 プロピレン製造プロセス導入前, 導入後の総コスト

		導入前 [k\$/yr]	導入後 [k\$/yr]
原料	ベンゼン	107,768	107,768
	プロピレン	93,557	72,711
固定費	触媒	70	641
	プラント建設費	1,166	3,351
ユーティリティ		757	2,522
	合計	203,318	186,993






23

1	 KYOTO UNIVERSITY Calgary, Alberta CANADA	Case Name: --(Si"x+»-(" -EFINAL REPORT.HSC
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Wed Aug 26 15:49:18 2009
4		
5		

Workbook: Case (Main)

		Material Streams				Fluid Pkg:	All
11	Name	A0	A1	A2	A3	A4	
12	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
13	Temperature (C)	26.27	47.44	120.0 *	120.0	164.1	164.1
14	Pressure (kPa)	2700 *	2700	2700	2700	2620	2620
15	Molar Flow (kgmole/h)	262.5	689.1	689.1	689.1	637.3	637.3
16	Mass Flow (kg/h)	2.051e+004	4.984e+004	4.984e+004	4.984e+004	4.984e+004	4.984e+004
17	Liquid Volume Flow (m3/h)	23.26	63.17	63.17	63.16	61.59	61.59
18	Heat Flow (kJ/h)	1.312e+007	8.513e+006	1.570e+007	1.570e+007	1.570e+007	1.570e+007
19	Name	A5	A6	A7	A8	A9	
20	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
21	Temperature (C)	150.5	120.0 *	163.1	153.2	120.0 *	120.0 *
22	Pressure (kPa)	2620	2620 *	2540	2540	2540 *	2540 *
23	Molar Flow (kgmole/h)	741.6	741.6	685.5	767.5	767.5	767.5
24	Mass Flow (kg/h)	5.429e+004	5.429e+004	5.429e+004	5.779e+004	5.779e+004	5.779e+004
25	Liquid Volume Flow (m3/h)	70.21	70.21	68.51	75.28	75.28	75.28
26	Heat Flow (kJ/h)	1.232e+007	8.430e+006	8.431e+006	5.775e+006	1.219e+006	1.219e+006
27	Name	A10	A11	A12	A13	A14	
28	Vapour Fraction	0.0000	0.0100	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
29	Temperature (C)	162.5	155.2	120.0 *	161.1	161.1	161.1
30	Pressure (kPa)	2460	2460	2460 *	2380	2380	2380
31	Molar Flow (kgmole/h)	708.3	767.9	767.9	708.4	708.4	708.4
32	Mass Flow (kg/h)	5.779e+004	6.033e+004	6.033e+004	6.033e+004	6.033e+004	6.033e+004
33	Liquid Volume Flow (m3/h)	73.48	78.40	78.40	76.59	76.59	76.59
34	Heat Flow (kJ/h)	1.219e+006	-7.126e+005	-5.822e+006	-5.822e+006	-5.822e+006	-5.822e+006
35	Name	A15	A16	A17	A18	Benzene	
36	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.3526	0.0000	0.0000
37	Temperature (C)	145.0 *	168.1	155.0 *	117.7	25.00 *	25.00 *
38	Pressure (kPa)	2380 *	2300	2300	312.0 *	101.3 *	101.3 *
39	Molar Flow (kgmole/h)	708.4	674.4	674.4	674.4	262.5 *	262.5 *
40	Mass Flow (kg/h)	6.033e+004	6.033e+004	6.033e+004	6.033e+004	2.051e+004	2.051e+004
41	Liquid Volume Flow (m3/h)	76.59	75.55	75.55	75.55	23.26	23.26
42	Heat Flow (kJ/h)	-8.152e+006	-8.152e+006	-1.007e+007	-1.007e+007	1.304e+007	1.304e+007
43	Name	BR1	BR2	BR3	BR4	BR5	
44	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
45	Temperature (C)	67.67	67.66 *	67.66	67.66	68.54	68.54
46	Pressure (kPa)	101.3	101.3 *	101.3	101.3	2700 *	2700 *
47	Molar Flow (kgmole/h)	680.8	680.0 *	1.000 *	300.0 *	300.0	300.0
48	Mass Flow (kg/h)	5.429e+004	5.422e+004	79.74	2.392e+004	2.392e+004	2.392e+004
49	Liquid Volume Flow (m3/h)	66.80	66.72	9.811e-002	29.43	29.43	29.43
50	Heat Flow (kJ/h)	-1.325e+006	-1.326e+006	-1949	-5.848e+005	-5.019e+005	-5.019e+005
51	Name	BR6	BR7	Cu1	Cu2	Cumene	
52	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.1430	0.0000	0.0000
53	Temperature (C)	67.66	68.50	173.2	153.6	40.00 *	40.00 *
54	Pressure (kPa)	101.3	1600 *	164.0	101.3 *	101.3 *	101.3 *
55	Molar Flow (kgmole/h)	379.0	379.0	260.2	260.2	260.2	260.2
56	Mass Flow (kg/h)	3.022e+004	3.022e+004	3.127e+004	3.127e+004	3.127e+004	3.127e+004
57	Liquid Volume Flow (m3/h)	37.19	37.19	36.17	36.17	36.17	36.17
58	Heat Flow (kJ/h)	-7.388e+005	-6.599e+005	-1.220e+006	-1.220e+006	-9.608e+006	-9.608e+006
59	Name	D1	D2	D3	D4	D5	
60	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
61	Temperature (C)	240.2	240.2	240.2 *	240.8	240.2	240.2
62	Pressure (kPa)	164.0	164.0	164.0 *	1600 *	164.0	164.0
63	Molar Flow (kgmole/h)	93.62	93.12	93.40 *	93.40	0.5000 *	0.5000 *
64	Mass Flow (kg/h)	1.573e+004	1.565e+004	1.569e+004	1.569e+004	84.02	84.02
65	Liquid Volume Flow (m3/h)	17.77	17.67	17.73	17.73	9.489e-002	9.489e-002
66	Heat Flow (kJ/h)	-2.204e+006	-2.192e+006	-2.206e+006	-2.174e+006	-1.177e+004	-1.177e+004

1	 KYOTO UNIVERSITY Calgary, Alberta CANADA	Case Name: (S) x ± () - FINAL REPORT.HSC
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Wed Aug 26 15:49:18 2009
4		
5		

Workbook: Case (Main) (continued)

Material Streams (continued)							Fluid Pkg:	All
11	Name	D6	NB1	NB2	NP0	NP1		
12	Vapour Fraction	0.2110	0.0000	0.0000	0.0000	0.2537		
13	Temperature (C)	218.9	163.1	163.2	132.5	95.82		
14	Pressure (kPa)	101.3 *	101.3	200.0 *	310.0	101.3 *		
15	Molar Flow (kgmole/h)	0.5000	353.8	353.8	562.2	562.2		
16	Mass Flow (kg/h)	84.02	4.701e+004	4.701e+004	5.538e+004	5.538e+004		
17	Liquid Volume Flow (m3/h)	9.489e-002	53.93	53.93	65.79	65.79		
18	Heat Flow (kJ/h)	-1.177e+004	-6.972e+006	-6.966e+006	-1.301e+006	-1.301e+006		
19	Name	NP2	NP3	P0	P1	P2		
20	Vapour Fraction	0.3775	0.6547	0.0000	0.0000	0.0000		
21	Temperature (C)	96.99	112.8 *	26.90	26.90	26.90		
22	Pressure (kPa)	101.3	101.3	2700 *	2700	2700		
23	Molar Flow (kgmole/h)	1035	1035	372.5	126.7	104.3		
24	Mass Flow (kg/h)	1.013e+005	1.013e+005	1.590e+004	5406	4452		
25	Liquid Volume Flow (m3/h)	120.7	120.7	30.79	10.47	8.621		
26	Heat Flow (kJ/h)	-9.196e+004	1.189e+007	-1.207e+007	-4.104e+006	-3.380e+006		
27	Name	P3	P4	P5	Pout	Propylene		
28	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000		
29	Temperature (C)	26.90	26.90	26.90	-9.260	25.00 *		
30	Pressure (kPa)	2700	2700	2700	310.0	1112 *		
31	Molar Flow (kgmole/h)	81.95	59.60	0.0000	112.1	372.5 *		
32	Mass Flow (kg/h)	3498	2544	0.0000	4951	1.590e+004		
33	Liquid Volume Flow (m3/h)	6.773	4.926	0.0000	9.762	30.79		
34	Heat Flow (kJ/h)	-2.656e+006	-1.932e+006	0.0000	-1.195e+007	-1.214e+007		
35	Name	Purge1	Purge2	tr1	tr2	tr3		
36	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
37	Temperature (C)	40.00 *	40.00 *	130.9	170.0 *	170.8		
38	Pressure (kPa)	101.3 *	101.3 *	1600	1600 *	1400		
39	Molar Flow (kgmole/h)	1.000	0.5000	472.4	472.4	472.4		
40	Mass Flow (kg/h)	79.74	84.02	4.592e+004	4.592e+004	4.592e+004		
41	Liquid Volume Flow (m3/h)	9.811e-002	9.489e-002	54.91	54.91	54.94		
42	Heat Flow (kJ/h)	-5977	-4.724e+004	-2.833e+006	1.209e+006	1.209e+006		
43	Name	tr4						
44	Vapour Fraction	0.5207						
45	Temperature (C)	99.22						
46	Pressure (kPa)	101.3 *						
47	Molar Flow (kgmole/h)	472.4						
48	Mass Flow (kg/h)	4.592e+004						
49	Liquid Volume Flow (m3/h)	54.94						
50	Heat Flow (kJ/h)	1.209e+006						

Compositions							Fluid Pkg:	All
53	Name	Pout	NP1	Cu1	BR6	tr1		
54	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0007	0.4919	0.0004	0.7620	0.6113		
55	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0013	0.1236	0.0000	0.2303	0.1848		
56	Comp Mole Frac (Propane)	0.9963	0.0039	0.0000	0.0072	0.0058		
57	Comp Mole Frac (Propene)	0.0010	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
58	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0000	0.2973	0.9991	0.0005	0.0004		
59	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0000	0.0832	0.0004	0.0000	0.1642		
60	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000	0.0335		
61	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
62	Name	tr3	Benzene	A0	Propylene	P0		
63	Comp Mole Frac (Benzene)	0.5128	0.9980 *	0.9980	0.0000 *	0.0000		
64	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.1848	0.0020 *	0.0020	0.0000 *	0.0000		
65	Comp Mole Frac (Propane)	0.0058	0.0000 *	0.0000	0.3000 *	0.3000		
66	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.7000 *	0.7000		
67	Comp Mole Frac (Cumene)	0.1974	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000		
68	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0657	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000		
69	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0335	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000		
70	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000 *	0.0000		

Workbook: Case (Main) (continued)


Compositions (continued)							Fluid Pkg:	All
11	Name	tr2	NP2	BR1	BR2	BR5		
12	Comp Mole Frac (Benzene)	0.6113	0.5015	0.7619	0.7620 *	0.7620		0.7620
13	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.1848	0.1515	0.2303	0.2303 *	0.2303		0.2303
14	Comp Mole Frac (Propane)	0.0058	0.0047	0.0072	0.0072 *	0.0072		0.0072
15	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000		0.0000
16	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0004	0.2517	0.0006	0.0005 *	0.0005		0.0005
17	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.1642	0.0752	0.0000	0.0000 *	0.0000		0.0000
18	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0335	0.0154	0.0000	0.0000 *	0.0000		0.0000
19	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000		0.0000
20	Name	tr4	D4	A1	A3	D1		
21	Comp Mole Frac (Benzene)	0.5128	0.0000	0.7118	0.7117	0.0000		0.0000
22	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.1848	0.0000	0.1010	0.1010	0.0000		0.0000
23	Comp Mole Frac (Propane)	0.0058	0.0000	0.0583	0.0583	0.0000		0.0000
24	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0000	0.1286	0.1286	0.0000		0.0000
25	Comp Mole Frac (Cumene)	0.1974	0.0000	0.0002	0.0002	0.0002		0.0002
26	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0657	0.8307	0.0000	0.0000	0.8302		0.8302
27	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0335	0.1693	0.0000	0.0001	0.1697		0.1697
28	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000		0.0000
29	Name	D5	Cu2	Cumene	D6	Purge2		
30	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.0004	0.0004	0.0000	0.0000		0.0000
31	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
32	Comp Mole Frac (Propane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
33	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
34	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0002	0.9991	0.9991	0.0002	0.0002		0.0002
35	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.8302	0.0004	0.0004	0.8302	0.8302		0.8302
36	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.1697	0.0000	0.0000	0.1697	0.1697		0.1697
37	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
38	Name	Purge1	P1	P2	P3	P4		
39	Comp Mole Frac (Benzene)	0.7620	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
40	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.2303	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
41	Comp Mole Frac (Propane)	0.0072	0.3000	0.3000	0.3000	0.3000		0.3000
42	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.7000	0.7000	0.7000	0.7000		0.7000
43	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0005	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
44	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
45	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
46	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		0.0000
47	Name	A4	A5	A7	A6	A8		
48	Comp Mole Frac (Benzene)	0.6922	0.5948	0.5713	0.5948	0.5103		0.5103
49	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.1092	0.0939	0.1016	0.0939	0.0907		0.0907
50	Comp Mole Frac (Propane)	0.0630	0.0963	0.1042	0.0963	0.1251		0.1251
51	Comp Mole Frac (Propene)	0.0578	0.1481	0.0784	0.1481	0.1448		0.1448
52	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0736	0.0633	0.1311	0.0633	0.1171		0.1171
53	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0039	0.0034	0.0132	0.0034	0.0118		0.0118
54	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001		0.0001
55	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001		0.0001
56	Name	A9	A10	A11	A12	NB2		
57	Comp Mole Frac (Benzene)	0.5103	0.4847	0.4470	0.4470	0.0003		0.0003
58	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0907	0.0983	0.0907	0.0907	0.0000		0.0000
59	Comp Mole Frac (Propane)	0.1251	0.1356	0.1484	0.1484	0.0000		0.0000
60	Comp Mole Frac (Propene)	0.1448	0.0733	0.1219	0.1219	0.0000		0.0000
61	Comp Mole Frac (Cumene)	0.1171	0.1799	0.1659	0.1659	0.7348		0.7348
62	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0118	0.0281	0.0259	0.0259	0.2200		0.2200
63	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0449		0.0449
64	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000		0.0000

65
66
67
68
69
70

Workbook: Case (Main) (continued)

Compositions (continued)						Fluid Pkg:	All
11	Name	D2	BR7	NP0	BR3	A13	
12	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.7620	0.4919	0.7620	0.4208	
13	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000	0.2303	0.1236	0.2303	0.0983	
14	Comp Mole Frac (Propane)	0.0000	0.0072	0.0039	0.0072	0.1608	
15	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0482	
16	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0002	0.0005	0.2973	0.0005	0.2234	
17	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.8302	0.0000	0.0832	0.0000	0.0483	
18	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.1697	0.0000	0.0001	0.0000	0.0001	
19	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	
20	Name	A15	A18	P5	A14	NB1	
21	Comp Mole Frac (Benzene)	0.4208	0.4102	0.0000	0.4208	0.0003	
22	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0983	0.1032	0.0000	0.0983	0.0000	
23	Comp Mole Frac (Propane)	0.1608	0.1689	0.3000	0.1608	0.0000	
24	Comp Mole Frac (Propene)	0.0482	0.0002	0.7000	0.0482	0.0000	
25	Comp Mole Frac (Cumene)	0.2234	0.2479	0.0000	0.2234	0.7348	
26	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0483	0.0694	0.0000	0.0483	0.2200	
27	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0001	0.0001	0.0000	0.0001	0.0449	
28	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0001	0.0001	0.0000	0.0001	0.0000	
29	Name	NP3	A16	D3	A17		
30	Comp Mole Frac (Benzene)	0.5015	0.4102	0.0000 *	0.4102		
31	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.1515	0.1032	0.0000 *	0.1032		
32	Comp Mole Frac (Propane)	0.0047	0.1689	0.0000 *	0.1689		
33	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0002	0.0000 *	0.0002		
34	Comp Mole Frac (Cumene)	0.2517	0.2479	0.0000 *	0.2479		
35	Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0752	0.0694	0.8307 *	0.0694		
36	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0154	0.0001	0.1693 *	0.0001		
37	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0001	0.0000 *	0.0001		

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
69
70

1	 KYOTO UNIVERSITY Calgary, Alberta CANADA	Case Name: PROPANEPROPYLENE:HSC
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Wed Aug 26 15:48:12 2009
4		
5		

Workbook: Case (Main)

Material Streams							Fluid Pkg:	All
11	Name	1	2	3	4	5		
12	Vapour Fraction	0.8911	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
13	Temperature (C)	-13.51	596.9 *	564.0 *	51.00 *	98.12		
14	Pressure (kPa)	320.0	320.0	100.0 *	100.0	200.0 *		
15	Molar Flow (kgmole/h)	369.1	369.1	446.9 *	446.9	446.9		
16	Mass Flow (kg/h)	1.145e+004	1.145e+004	1.143e+004	1.143e+004	1.143e+004		
17	Liquid Volume Flow (m3/h)	24.90	24.90	26.86	26.86	26.86		
18	Heat Flow (kJ/h)	-2.239e+007	-1.369e+006	6.713e+006	-1.074e+007	-9.573e+006		
19	Name	6	7	8	9	10		
20	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.6004		
21	Temperature (C)	51.00 *	98.27	51.00 *	98.56	-40.00 *		
22	Pressure (kPa)	200.0	400.0 *	400.0	800.0 *	800.0		
23	Molar Flow (kgmole/h)	446.9	446.9	446.9	446.9	446.9		
24	Mass Flow (kg/h)	1.143e+004	1.143e+004	1.143e+004	1.143e+004	1.143e+004		
25	Liquid Volume Flow (m3/h)	26.86	26.86	26.86	26.86	26.86		
26	Heat Flow (kJ/h)	-1.076e+007	-9.593e+006	-1.079e+007	-9.633e+006	-1.630e+007		
27	Name	11	12	13	14	15		
28	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000		
29	Temperature (C)	-40.00 *	-40.00	-40.00	-40.00	-39.24		
30	Pressure (kPa)	800.0	800.0	800.0	800.0	2000 *		
31	Molar Flow (kgmole/h)	268.3	171.5	96.80 *	178.6	178.6		
32	Mass Flow (kg/h)	3092	1977	1115	8338	8338		
33	Liquid Volume Flow (m3/h)	11.54	7.377	4.163	15.32	15.32		
34	Heat Flow (kJ/h)	-4.046e+006	-2.586e+006	-1.459e+006	-1.225e+007	-1.223e+007		
35	Name	16	17	18	19	20		
36	Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.2236		
37	Temperature (C)	-39.94	60.78	60.78	49.95	24.91		
38	Pressure (kPa)	2000	2000	2000 *	2000	1112 *		
39	Molar Flow (kgmole/h)	9.113	169.5	169.5	82.99	82.99		
40	Mass Flow (kg/h)	219.8	8118	8118	3537	3537		
41	Liquid Volume Flow (m3/h)	0.6071	14.71	14.71	6.855	6.855		
42	Heat Flow (kJ/h)	1.868e+005	-1.041e+007	-1.041e+007	-2.384e+006	-2.384e+006		
43	Name	21	22	23	P10	P20		
44	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.3666		
45	Temperature (C)	73.29	73.29	73.29	-6.131 *	25.00 *		
46	Pressure (kPa)	2000	2000	2000	320.0 *	1112		
47	Molar Flow (kgmole/h)	86.49	1.000 *	85.49	112.0 *	82.99		
48	Mass Flow (kg/h)	4581	52.96	4528	4947	3537		
49	Liquid Volume Flow (m3/h)	7.859	9.087e-002	7.768	9.754	6.855		
50	Heat Flow (kJ/h)	-7.972e+006	-9.218e+004	-7.880e+006	-1.193e+007	-2.213e+006		

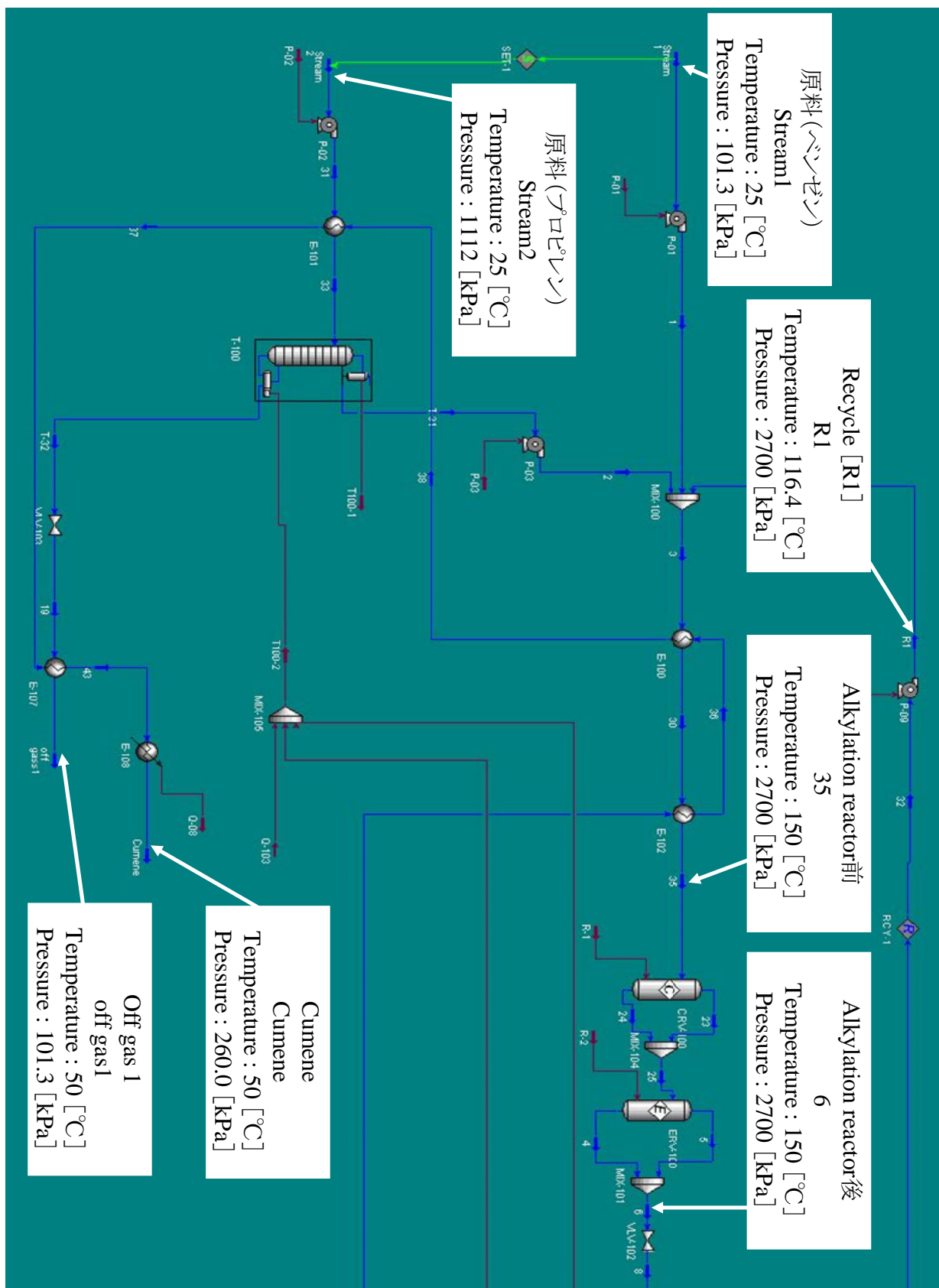
Compositions							Fluid Pkg:	Basis-1
53	Name	1	2	3	4	5		
54	Comp Mole Frac (Methane)	0.0578	0.0578	0.0786 *	0.0786	0.0786		
55	Comp Mole Frac (Propane)	0.5127	0.5127	0.2473 *	0.2473	0.2473		
56	Comp Mole Frac (Propene)	0.0333	0.0333	0.1717 *	0.1717	0.1717		
57	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.3079	0.3079	0.3988 *	0.3988	0.3988		
58	Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0317	0.0317	0.0569 *	0.0569	0.0569		
59	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0363	0.0363	0.0302 *	0.0302	0.0302		
60	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0202	0.0202	0.0166 *	0.0166	0.0166		
61	Name	6	7	8	9	10		
62	Comp Mole Frac (Methane)	0.0786	0.0786	0.0786	0.0786	0.0786		
63	Comp Mole Frac (Propane)	0.2473	0.2473	0.2473	0.2473	0.2473		
64	Comp Mole Frac (Propene)	0.1717	0.1717	0.1717	0.1717	0.1717		
65	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.3988	0.3988	0.3988	0.3988	0.3988		
66	Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0569	0.0569	0.0569	0.0569	0.0569		
67	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0302	0.0302	0.0302	0.0302	0.0302		
68	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0166	0.0166	0.0166	0.0166	0.0166		

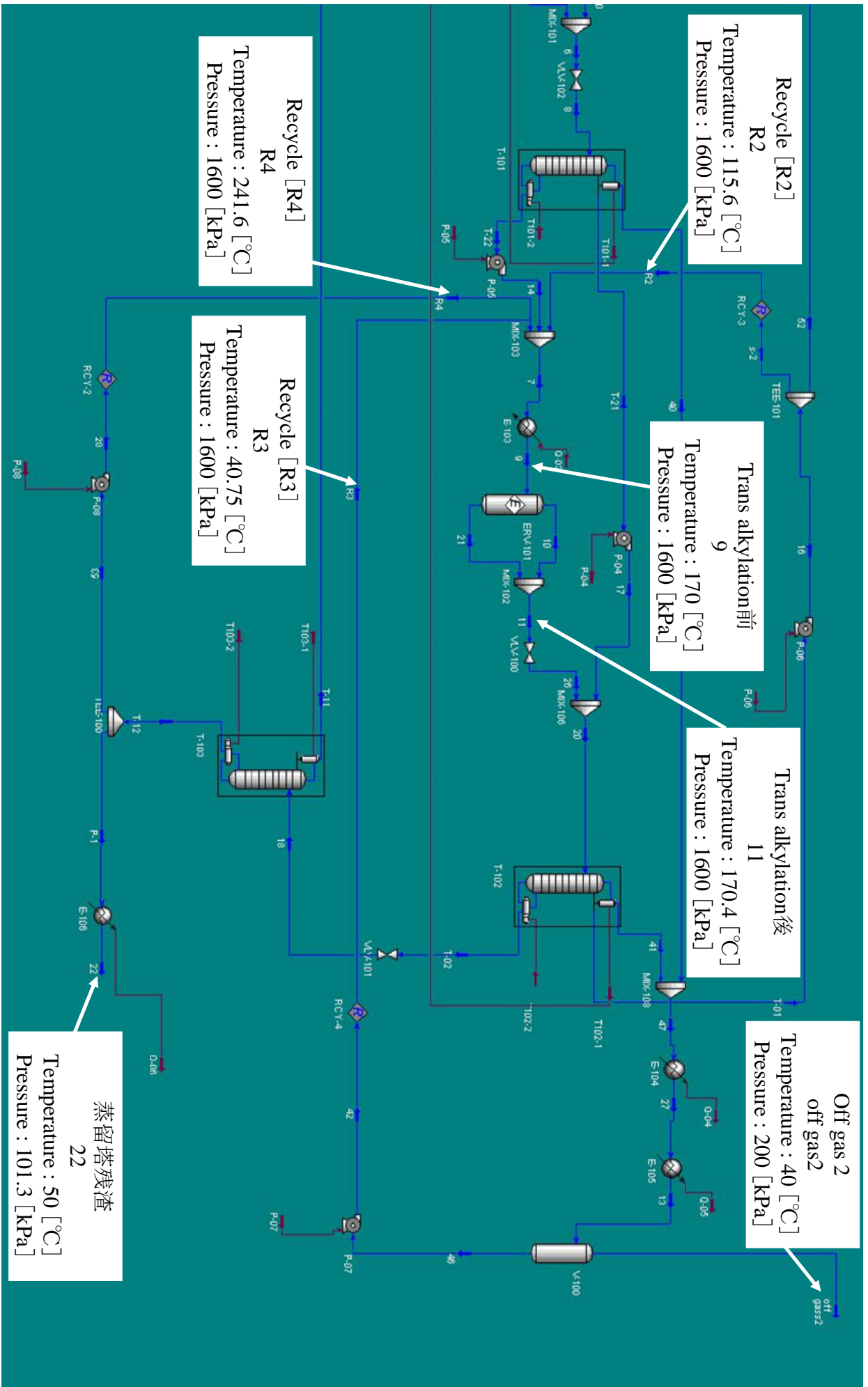
Workbook: Case (Main) (continued)

Compositions (continued)						Fluid Pkg:	Basis-1
Name	11	12	13	14	15		
12 Comp Mole Frac (Methane)	0.1243	0.1243	0.1243	0.0099	0.0099		
13 Comp Mole Frac (Propane)	0.0797	0.0797	0.0797	0.4990	0.4990		
14 Comp Mole Frac (Propene)	0.0655	0.0655	0.0655	0.3314	0.3314		
15 Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.6621	0.6621	0.6621	0.0032	0.0032		
16 Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0683	0.0683	0.0683	0.0397	0.0397		
17 Comp Mole Frac (Benzene)	0.0001	0.0001	0.0001	0.0754	0.0754		
18 Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0414	0.0414		
Name	16	17	18	19	20		
20 Comp Mole Frac (Methane)	0.1934	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
21 Comp Mole Frac (Propane)	0.0005	0.5259	0.5259	0.2959	0.2959		
22 Comp Mole Frac (Propene)	0.0024	0.3491	0.3491	0.7000	0.7000		
23 Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0634	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
24 Comp Mole Frac (Ethylene)	0.7403	0.0020	0.0020	0.0041	0.0041		
25 Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.0794	0.0794	0.0000	0.0000		
26 Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000	0.0436	0.0436	0.0000	0.0000		
Name	21	22	23	P10	P20		
28 Comp Mole Frac (Methane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000		
29 Comp Mole Frac (Propane)	0.7465	0.7465	0.7465	0.9973 *	0.2959		
30 Comp Mole Frac (Propene)	0.0123	0.0123	0.0123	0.0000 *	0.7000		
31 Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0006 *	0.0000		
32 Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0041		
33 Comp Mole Frac (Benzene)	0.1557	0.1557	0.1557	0.0007 *	0.0000		
34 Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0855	0.0855	0.0855	0.0013 *	0.0000		

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
69
70

(1) PFD





(2) 物質収支 Stream-Data-Table

	Stream 1	Stream 2	35	6	9	11
	原料(ベンゼン)	原料(プロピレン)	alkylation reactor 前	alkylation reactor 後	Trans alkylation 前	Trans alkylation 後
Conditions						
Vapour / Phase Fraction	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Temperature [C]	25.0	25.0	150.0	150.0	170.0	170.4
Pressure [kPa]	101.3	1112.0	2700.0	2700.0	1600.0	1600.0
Molar Flow [kgmole/h]	261.5	373.5	1199.2	938.9	790.6	790.6
Mass Flow [kg/h]	2.043E+04	1.594E+04	8.542E+04	8.542E+04	6.372E+04	6.372E+04
Composition						
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
Propene	0.0000	0.7000	0.2171	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.3000	0.0072	0.0092	0.0854	0.0854
n-Hexane	0.0020	0.0000	0.1462	0.1867	0.2860	0.2860
Benzene	0.9980	0.0000	0.6295	0.5549	0.5923	0.5590
14-iP-BZ	0.0000	0.0000	0.0000	0.0283	0.0345	0.0011
Cumene	0.0000	0.0000	0.0001	0.2206	0.0003	0.0670
DiPhenyl C3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0014	0.0014

	22				R1	R2	R3	R4
	蒸留塔底流	off gas1	off gas2	Cumene	Recycle [R1]	Recycle [R2]	Recycle [R3]	Recycle [R4]
Conditions								
Vapour / Phase Fraction	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Temperature [C]	50.0	15.0	40.0	50.0	116.4	115.6	40.7	241.6
Pressure [kPa]	101.3	101.3	200.0	101.3	2700.0	1600.0	1600.0	1600.0
Molar Flow [kgmole/h]	0.2	110.5	3.2	260.0	674.8	168.7	593.6	1.8
Mass Flow [kg/h]	3.628E+01	4.871E+03	1.547E+02	3.125E+04	5.391E+04	1.348E+04	4.560E+04	3.266E+02
Composition								
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0354	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propene	0.0000	0.6100	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.9900	0.8079	0.0000	0.0089	0.0089	0.1113	0.0000
n-Hexane	0.0000	0.0000	0.0706	0.0000	0.2591	0.2590	0.3074	0.0000
Benzene	0.0000	0.0000	0.0661	0.0063	0.7320	0.7320	0.5810	0.0000
14-iP-BZ	0.4323	0.0000	0.0000	0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.4323
Cumene	0.0010	0.0000	0.0000	0.9993	0.0001	0.0001	0.0004	0.0010
DiPhenyl C3	0.5665	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.5665

(3) プランコスト推算結果

(3-1) 反応器

アルキレーション反応の反応装置の体積は下記の要領で求めた。

まず、課題に示された平衡定数を用いて転化率を計算したところ、この反応装置におけるプロピレンの反応率が 99.9%となることが分かった。そこで、速度式を用いて、プロピレンの反応率が 99.9%となる反応器体積を算出した。

反応速度式として以下の式を仮定した。

$$r_1 = k_1 \cdot C_p \cdot C_b \qquad r_2 = k_2 \cdot C_p \cdot C_c$$
$$k_1 = 1.20 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-1.04 \times 10^5}{RT}\right) \qquad k_2 = 2.0 \times 10^{15} \exp\left(\frac{-1.04 \times 10^5}{RT}\right)$$

ここで、 r_1 は、Cumene 生成の反応速度であり、 r_2 は DIPB 生成の反応速度である。

これらより反応器体積と各成分の濃度の関係は次のように書ける。

$$\frac{dC_c}{dV} = \frac{r_1 - r_2}{v_0} \quad \frac{dC_p}{dV} = \frac{-r_1 - r_2}{v_0} \quad \frac{dC_d}{dV} = \frac{r_2}{v_0} \quad \frac{dC_b}{dV} = \frac{-r_1}{v_0}$$

数値計算により、以上の式を解き、反応率が 99.9%となる条件を求めたところ、 $V=28.9\text{m}^3$ となった。

なお、このとき、温度は 150 で一定であるとして計算を行っている。実際には発熱反応であるので、反応器の平均温度はこれよりも高いと思われる。したがってここで求められた体積は実際に必要な体積よりも大きな値が得られていると考えられる。しかし、これは安全側への誤差であるので、ここで求められた値を反応器体積として採用した。

このとき、必要な触媒量は、 $28.9 / 0.5 = 57.80 \text{ m}^3$ となった。

トランスアルキレーションの反応装置体積についても同様に計算を行った。まず、課題中の平衡定数を用いて反応率を計算すると 96.78%となった。そこで、速度式を用いてこの反応率を達成するのに必要な体積を計算した。トランスアルキレーションの反応装置では、1,4DIBP とベンゼンからクメンが生じる反応のみが生じていると仮定できるので、設計方程式は次の通りとなる。

$$v_0 \frac{dC_d}{dV} = r_2 = k_2 \cdot C_d \cdot C_b$$

これは解析的に解くことができ、

$$V = \frac{v_0}{k} \frac{1}{(C_{b0} - C_{d0})} \left(\ln \frac{C_d}{C_{d0}} - \ln \frac{C_{b0} - C_{d0} + C_d}{C_{b0}} \right)$$

となる。これに数値を代入して計算したところ、反応器体積は 278.8m^3 となった。なお、この反応装置は、課題に示されている通り、170 の定温で操作されていると仮定している。

(3-2) プラント建設費

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$1,298,736
Trays	\$466,492
Heat Exchangers	\$1,731,972
Pump with Electric Driver	\$401,277
Compressor	\$0
Compressor Driver	\$0
Furnace	\$0
Total Bare Module Cost	\$3,898,477
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$4,600,203
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$6,929,206

触媒	反応容器(m ³)	触媒(\$/m3)	cost(\$)
アルキレーション	57.80	1,000	578,000
トランスアルキレーション	278.76	1,000	2,787,604
		Total Cost	3,365,604

(3-3) 運転費

	必要量 (kg/h)	必要量 (kg/year)	コスト(\$/kg)	原料費(\$)
ベンゼン	20431.54719	163452377.6	0.657	107,388,212
プロピレン (リファイナリーグレード)	15940.93155	127527452.4	0.736	93,860,205
			Total	201,248,417

HP スティーム			
	使用量(kJ/h)	ユーティリティ(ton)	cost(\$)
T-101R	49,554,652	229,517	6,878,634
T-102R	49,934,407	231,276	6,931,347
T-103R	16,737,941	77,523	2,323,378
		Total	16,133,358
MP スティーム			
	使用量(kJ/h)	ユーティリティ(ton)	cost(\$)
E-103	14,178,969	56,203	1,169,025
		Total	1,169,025
LP スティーム			
	使用量(kJ/h)	ユーティリティ(ton)	cost(\$)
	0	0	0
		Total	0
冷却水			
	使用量(kJ/h)	ユーティリティ(ton)	cost(\$)
E-104	21,012,103	390	5,766
E-106	14,135	0.2621	4
E-108	1,950,894	36	535
Alkylation	25,620,069	475	7,031
T-100-C	79,708,284	1,478	21,875
T-101-C-2	11,957,262	222	3,281
T-103-C	11,069,771	205	3,038
		Total	41,531

冷媒 (5[°C] 供給、15[°C] 戻り)			
	使用量(kJ/h)	ユーティリティ(GJ)	cost(\$)
E-105	1,282,792	10,262	45,462
		Total	45,462
電力			
	使用量(kW)	使用量(kWh)	cost(\$)
P-101	23	184,177	11,051
P-102	11	85,186	5,111
P-103	6	50,737	3,044
P-104	6	48,844	2,931
P-105	3	27,208	1,632
P-106	45	362,376	21,743
P-107	32	259,179	15,551
P-108	0	1,937	116
P-109	32	254,764	15,286
		Total	76,464
Utilities Total Cost		17,465,841	
年間直接運営費		218,714,258	

(3-4) プロセス設計評価結果

1. コンプレッサーを用いないように配慮して設計を進めたことで、建設費および電気料金を削減できている。
2. クメンの年間製造コストが 2.2 億ドルであるに対して、建設費は約 0.11 億ドルとなり非常に小さい。これを 10 年で償却すると考えると、年間の製造コストに対する償却費は 0.5%程度となった。なお、1 キログラム当たりのクメンの製造コストは、0.878 ドルである。なお、研究室にある試薬カタログによればクメンの価格はキログラムあたり

3200 円程度である。工場間での取引における価格はこれよりもかなり安いと予想される。

(4) 今回の設計結果に至った経緯

設計チーム内で最適なプロセスフローについて意見を募ったところ、2つのプロセスが提案された。それらを図1、2に示す。いずれも、まず、原料のプロピレンに含まれるプロパンを除く点は共通している。これらの提案の大きな違いはアルキレーション後に生成したクメンを分離するかどうかである。図1に示すプロセス1では、分離は行わず、すべてをトランスアルキレーション反応器にフィードしている。プロセスがシンプルとなるが、反応装置の負荷が上昇すると予想される。一方の図2に示すプロセス2では、クメンを除いているので、トランスアルキレーションの反応装置の負荷を小さくできる。しかし、分離プロセスを追加する必要があるため、プロセスが複雑となり、建設コスト、ユーティリティ使用量が増大すると予想される。

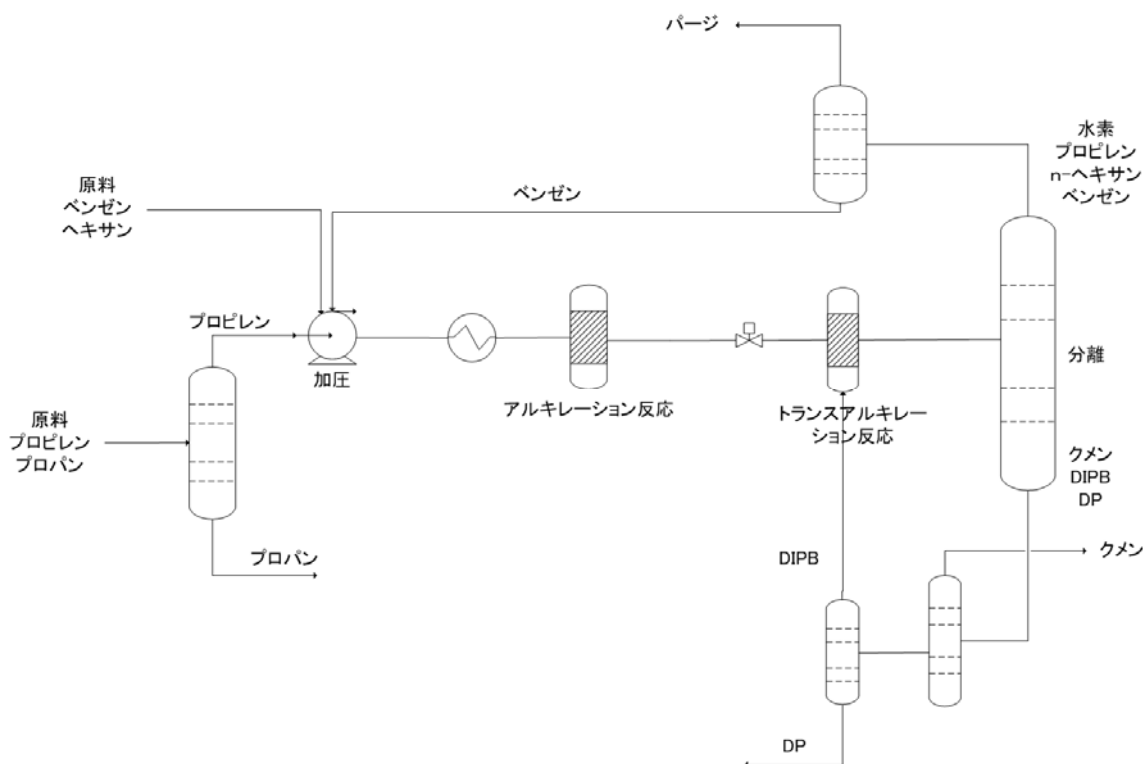


図1. プロセス1

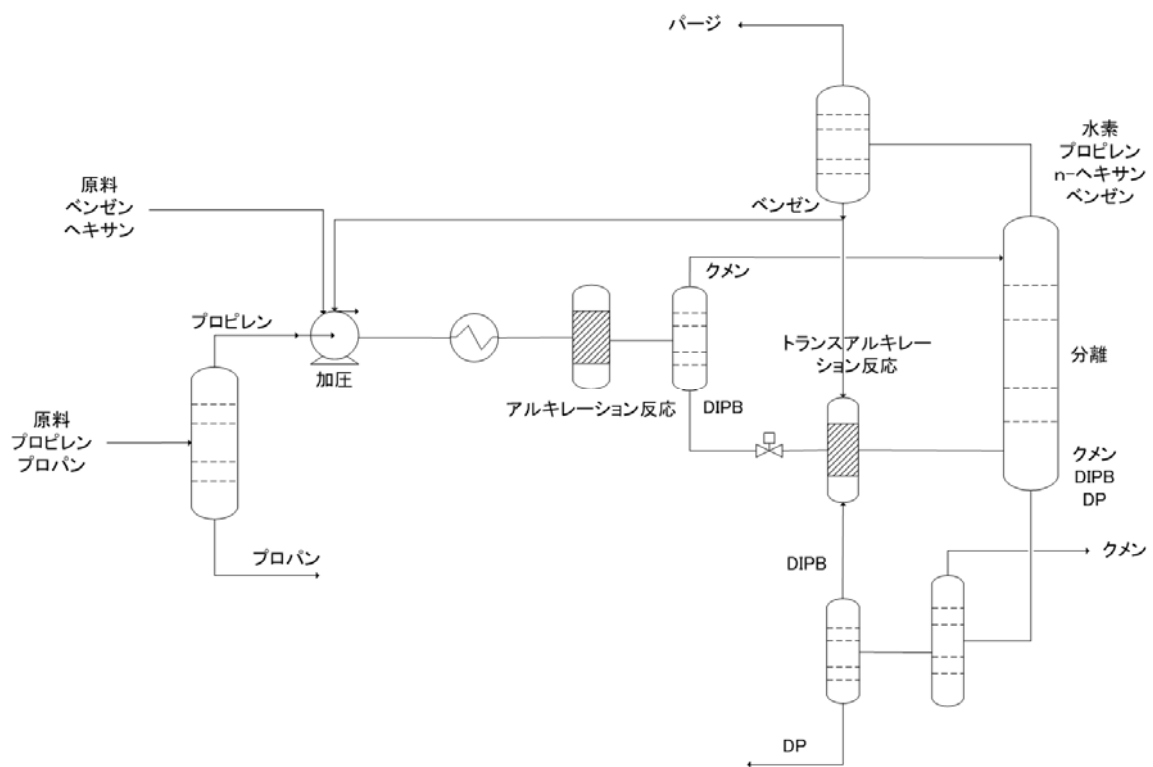


図2 . プロセス2

これらの2つについて設計を行い、コストを比較した結果を以下に示す。

各プロセスの比較

・建設費

Table 1 . プラント建設費の比較 (左：プロセス 1、右：プロセス 2)

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$6,788,133	\$1,298,736
Trays	\$418,820	\$466,492
Heat Exchangers	\$1,481,177	\$1,731,972
Pump with Electric Driver	\$331,315	\$401,277
Compressor	\$0	\$0
Compressor Driver	\$0	\$0
Furnace	\$0	\$0
Total Bare Module Cost	\$9,019,446	\$3,898,477
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$10,642,946	\$4,600,203
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$16,031,286	\$6,929,206

Table2. 触媒費用

	プロセス 1	プロセス 2
触媒		
アルキレーション	832,000 \$	578,000 \$
トランスアルキレーション	31,831,415 \$	2,787,604 \$
Total	32,663,415 \$	3,365,604 \$

・直接運転費

Table3. 直接年間運転費の比較

	プロセス 1	プロセス 2
原料		
ベンゼン	107,790,630 \$	107,388,212 \$
プロピレン (リ ファイナリーグレード)	94,211,930 \$	93,860,205 \$
Total	202,002,560 \$	201,248,417 \$
Utilities		
HP スティーム(254[°C]sat.)	10,029,654 \$	16,133,358 \$
MP スティーム(186[°C]sat.)	3,229,866 \$	1,169,025 \$
LP スティーム(160[°C]sat.)	216,536 \$	0 \$
冷却水(30[°C]供給、40[°C]戻り)	36,859 \$	41,531 \$
冷媒 (5[°C] 供給、15[°C] 戻り)	105,625 \$	45,462 \$
電力	105,744 \$	76,464 \$
Utilities Total Cost	13,724,284 \$	17,465,841 \$

Table4. 年間費用

	プロセス 1		プロセス 2	
建設費	16,031,286	\$	6,929,206	\$
原料費	202,002,560	\$	201,248,417	\$
運転費	13,724,284	\$	17,465,841	\$
触媒費	32,663,415	\$	3,365,604	\$
年間費用	220,596,314	\$	219,743,739	\$
Cumene 最低販売額	0.882385257	\$/kg	0.878974956	\$/kg

- ・プロセス1とプロセス2を比較した結果、以下の違いが見られた。

建設費

- ・ Process Vessels の費用が、プロセス1のほうが多くなった、理由としては、アルキレーション反応後、蒸留により、トランスアルキレーション反応に関与しない物質を除いたため、トランスアルキレーション反応の体積を削減することができたためと考えられる。
- ・ Tray、Heat Exchangers、Pump with Electric Driver に関しては、蒸留塔、熱交換器の数が増えたため、プロセス2の費用が多くなっている。
- ・ 建設費全体としては、Process Vessels の費用の削減の効果が大きく、プロセス2の費用が約900万ドル削減することができた。

触媒費用

- ・ 触媒費用に関しては、プロセス2では、プラント内の流量が減少し、反応器容積が小さくなったため必要触媒量が大幅に削減することができた。

直接年間運転費

- ・ 原料を比較すると、プロセス1と比較してプロセス2のほうが収率がよくなったため、原料費が約100万ドル削減することができた。
- ・ Utilities の使用に関しては、プロセス2では蒸留操作が1つ増えたため、HP スチームと冷却水の使用量が増加しているが、プラント内の流量が減少したため、電力と冷媒の使用量が減少している。
- ・ Utilities のトータルコストを比較すると、HP スチームの増加の影響が大きいいため、プロセス2のほうが高くなっている。

年間費用

- ・ 建設費、触媒費ともにプロセス1が非常に多くなっている。
- ・ プロセス2は、原料費を約100万ドル削減できているが、運転費は、400万ドル増加している。
- ・ プラント償却期間を10年として、単純償却によって年間償却費用を算出してい

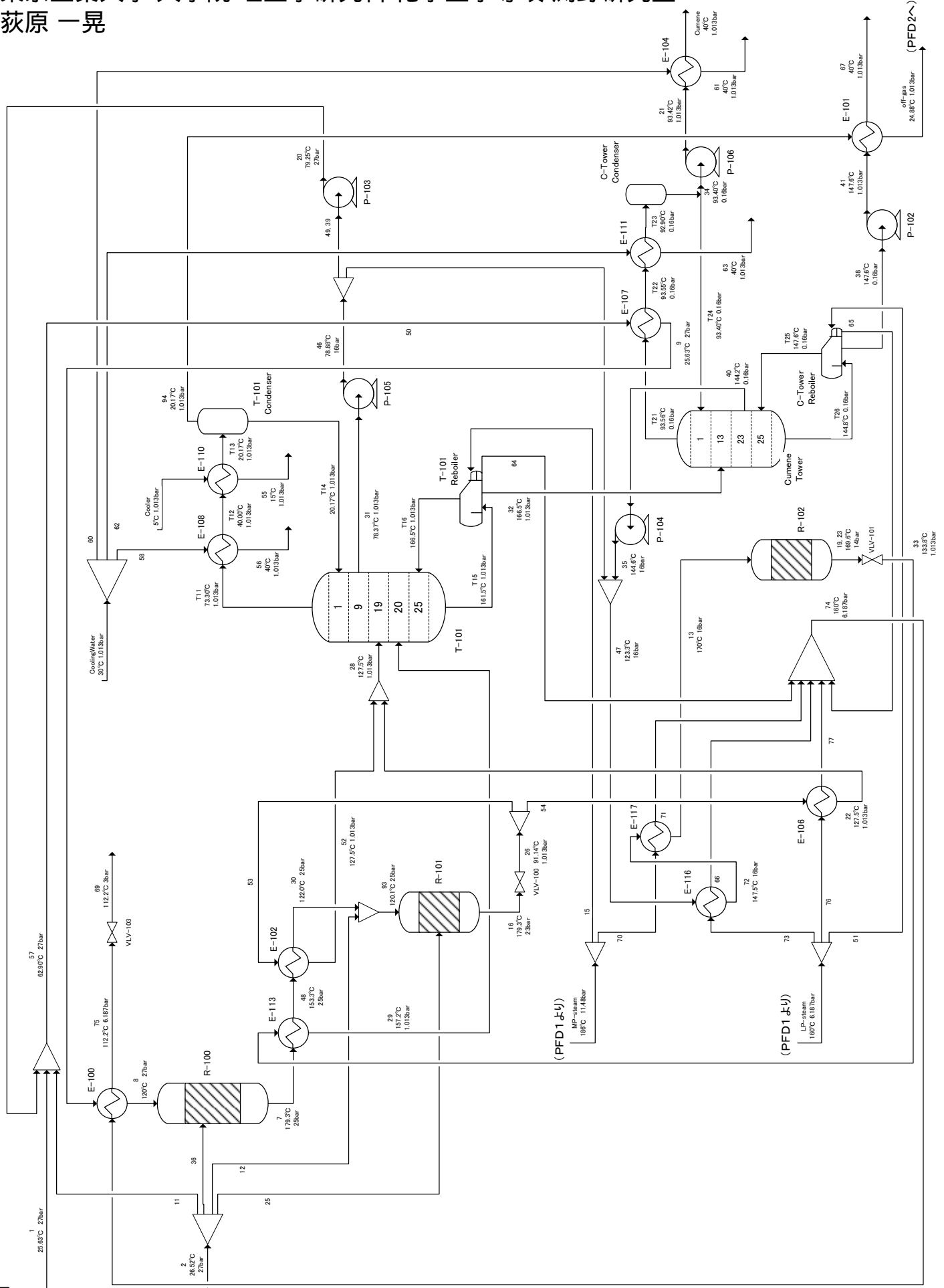
るため、年間費用に対する影響は小さくなっており、原料費、運転費の影響が大きい。しかし、年間費用を比較すると、プロセス 2 が約 100 万ドル削減することができた。

結論

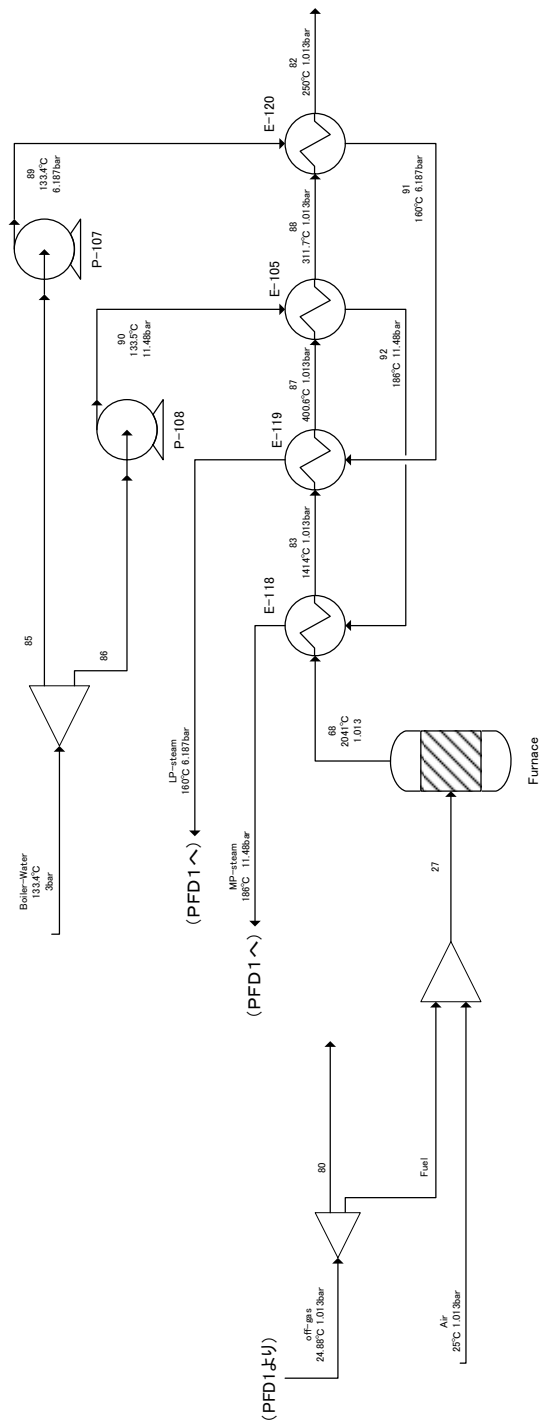
プラント建設費用、触媒費用、直接年間運転費用から、全体の年間コストを計算した結果、プロセス 2 の費用が約 100 万ドル安いためプロセス 2 を選んだ。

(1) PFD 1

SCEJ第8回学生コンテスト



PFD 2



Stream Name	60	61	62	63	64	65	66	67	69	70	71	72	73	74	75	76	77
Vapour Fraction	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0.02315	0	1	0
Temperature [°C]	30	40	30	40	186	160	160	40	112.2	186	186	147.5	160	160	112.2	160	160
Pressure [bar]	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	6.187	6.187	1.013	3	11.48	11.48	16	6.187	6.187	6.187	6.187	6.187
Molar Flow [kmol/h]	4232	4232	19130	19130	450.4	266.7	48.68	1.225	1184	49.13	49.13	288.8	48.68	1184	1184	368.7	368.7
Mass Flow [kg/h]	76240	76240	344600	344600	8114	4805	877	203.4	21320	885.1	885.1	34700	877	21320	21320	6643	6643
H ₂	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Propylene	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Propane	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00085	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
n-Hexane	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00014	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Benzene	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.49900	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Cumene	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00002	0.00000	0.00000	0.00000	0.00092	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14-diisopropyl benzene	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.89008	0.00000	0.00000	0.00000	0.49847	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
22-Diphenylpropane	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.10990	0.00000	0.00000	0.00000	0.00063	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
H ₂ O	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000

Stream Name	93	94	T11	T12	T13	T14	T15	T16	T21	T22	T23	T24	T25	T26
Vapour Fraction	0	1	1	1	0.1355	0.07835	0	0	1	1	0.8563	3E-06	0	0
Temperature [°C]	120.1	20.17	73.3	40.02	20.13	20.16	161.5	166.5	93.57	93.55	93.4	93.4	147.6	144.8
Pressure [bar]	25	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16
Molar Flow [kmol/h]	979.7	125	1594	1594	1594	1489	810.1	404.5	399	399	399	139	204.7	205.9
Mass Flow [kg/h]	78900	5936	117300	117300	117300	113000	105500	50620	47960	47960	47960	16710	33270	33480
H ₂	0.00014	0.00108	0.00008	0.00008	0.00008	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Propylene	0.02004	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Propane	0.06383	0.89915	0.13651	0.13651	0.13651	0.07160	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
n-Hexane	0.00073	0.00438	0.01495	0.01495	0.01495	0.01585	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Benzene	0.80000	0.09540	0.84845	0.84845	0.84845	0.91255	0.00163	0.00288	0.00061	0.00061	0.00061	0.00061	0.00061	0.00000
Cumene	0.10398	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.75862	0.87665	0.99894	0.99894	0.99894	0.99894	0.00010	0.00010
14-diisopropyl benzene	0.01114	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.23934	0.12045	0.00045	0.00045	0.00045	0.00045	0.00113	0.99053
22-Diphenylpropane	0.00014	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00040	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00877	0.00937
H ₂ O	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

PFD 2

Stream Name	Boiler-Water	Fuel	80	83	85	86	87	88	89	90	91	92
Vapour Fraction	1	0	1	1	1	0	0	1	0	0	0	0
Temperature [°C]	25	133.4	24.88	2041	24.88	133.4	400.6	311.7	133.4	133.5	160	186
Pressure [bar]	1.013	3	1.013	1.013	1.013	3	1.013	1.013	6.187	11.48	6.187	11.48
Molar Flow [kmol/h]	640.4	1184	24.38	664.8	688.1	684.1	499.5	688.1	684.1	499.5	684.1	499.5
Mass Flow [kg/h]	18480	21320	1158	19630	19630	19630	8999	19630	19630	8999	12320	8999
H ₂	0.00000	0.00000	0.00108	0.00004	0.00000	0.00108	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Propylene	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Propane	0.00000	0.00000	0.89915	0.03298	0.00000	0.89915	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
n-Hexane	0.00000	0.00000	0.00438	0.00016	0.00000	0.00438	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Benzene	0.00000	0.00000	0.09540	0.00350	0.00000	0.09540	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Cumene	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14-diisopropyl benzene	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
22-Diphenylpropane	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
H ₂ O	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.13869	0.13869	0.13869	0.13869	0.13869	0.13869
O ₂	0.21000	0.00000	0.00000	0.20230	0.00931	0.00000	0.00931	0.00931	0.00931	0.00931	0.00931	0.00931
CO ₂	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.11679	0.00000	0.11679	0.00000	0.11679	0.00000	0.11679	0.00000
N ₂	0.79000	0.00000	0.00000	0.76103	0.73521	0.00000	0.73521	0.00000	0.73521	0.00000	0.73521	0.00000

(3)

(3-1) 反応器

反応速度式が与えられているので、シミュレーターAspen HYSYS を用いて、以下の手順に従い反応器サイズの決定をした。

- 反応速度式を入力
- Plug Flow Reactor を利用
- 反応器入り口条件を入力
- 出口条件が一致するように Plug Flow Reactor のサイズを決定
- アルキレーション反応でのクエンチは、Reactor を分けそれぞれ計算した。

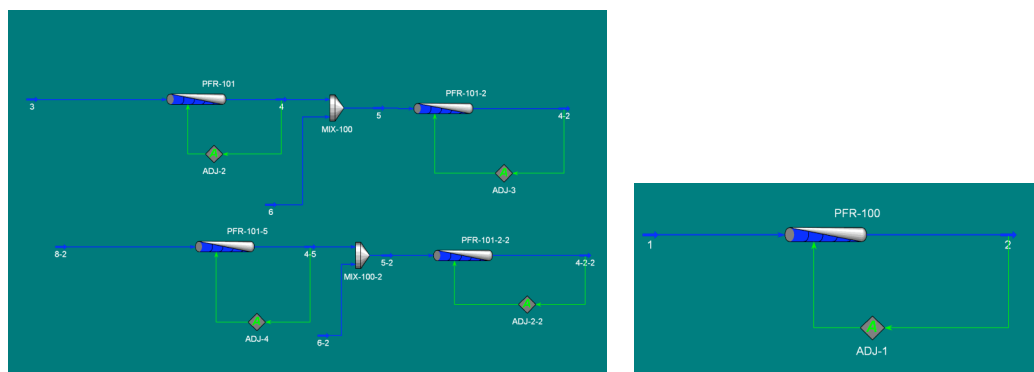


図 3-1.1 反応器サイズの計算 (左がアルキレーション、右がトランスアルキレーション)

反応器サイズは次のようになった。

- アルキレーション : 293.92 m³
- トランスアルキレーション : 21.26 m³

触媒量は、反応器サイズの半分である。

(3-2) プラント建設費

機器費用は図 3-4.1 の結果となる。

建設費用には、さらに触媒の費用が必要となる。これを表 3-4.1 に示す。

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$2,523,300
Trays	\$90,919
Heat Exchangers	\$680,019
Pump with Electric Driver	\$458,886
Compressor	\$0
Compressor Driver	\$0
Furnace	\$1,845,096
Total Bare Module Cost	\$5,598,221
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$6,605,901
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$9,950,355

図 3-4.1 機器コスト

	体積	単価	
触媒	m ³	\$/m ³	
アルキレーション	146.96	10000	1,469,601
トランスアルキレーション	10.63	10000	106,321

表 3.4-1 触媒コスト

(3-3)運転費用

	流量	単価	年間費用
	kg/h	\$/kg	\$
Benzene	21394.8	0.657	112,450,967
propylene	15994.1	0.736	94,173,294
ユーティリティ	ton/h	\$/ton	
HP	0	29.97	0
MP	0	20.08	0
LP	0	17.08	0
冷却水	1628.3	0.0148	192,790
冷媒	GJ/h	\$/GJ	
5°C-15°C	5.905	4.43	209,277
電力	kW	\$/kWh	
	100.86	0.06	48,414
ボイラー給水	ton/h	\$/ton	
	21.32	2.45	417,872
直接運転費		合計	207,492,615

(3-4) プロセス設計評価結果

(3-1)、(3-2)、(3-3) より Cumene の原単位を求めたものを表 3-4.1 に示す。

直接運転費		207,492,615
機器コスト		9,950,354
触媒コスト		1,575,922
年間総コスト	直接運転費+(建設コスト/10)	\$208,645,242
	Cumene 原単位	0.8346 [\$/kg]

表 3-4.1 Cumene 原単位

今回の設計では、建設費を抑え、必要なユーティリティを安価な物を利用しているので、運転費とフランと建設費のバランスとしてはよいものとなっています。

しかし、建設費用が相対的に低すぎるように感じます。原料で必要とされているコストよりもはるかに低い値となっており、プラント建設費を 10 年の単純償却として、年間償却費用は、直接運転費用の 0.6% 以下です。

もしも、この建設費用の値が適当な値であったとすれば、プラント建設費を抑えるよりも原料ベンゼンの製品転化率を上げたほうがよいでしょう。建設費の年間償却費用は原料ベンゼンの購入価格の約 1 % です。今回の設計では、ベンゼンの製品への転化率を約 95% として設計しているので、転化率を向上させることは可能です。よって、建設費を上げたとしてもベンゼンのロスを抑えたほうが総コストは抑えられるでしょう。

建設費用が間違っていたとし、建設費が妥当な値となっていれば、蒸留塔を 2 塔にした建設費用の優位性が出てきます。また、MP steam・LP steam を内製としましたが、これも Farnace の建設費用が上がったとすれば、購入することにしたほうがよいでしょう。HP steam や、さらに高温のユーティリティを必要としていないので、直接運転費も低い値となる可能性があります。

代替案として考えられる、Benzene の製品への転化率を 99.5% まで上げたプロセスを紹介します。



図 3-4.1 代替案 PFD

図 3-4.1 は 99.5%を達成した PFD で、熱交換器網を作成する前のものです。反応プロセスの変更は行わず、蒸留塔を増やし、原料のロスを削減しました。

この結果、約 1.2 倍の建設費用が必要になりましたが、年間の総コストは約 2.75%の削減が可能となり、Cumene 原単位は 81.16 \$/kg でした。

よって、こちらの代替案の方が Cumene 原単位は小さい値となりますが、先にも述べたように、建設費の値が妥当とは思えない値であるので、図 3-4.1 のプロセスは却下しました。

(4) 設計結果に至った経緯

1.反応プロセス

◇ アルキレーション反応

反応条件より、propylene の反応率はほぼ 100% と考えられる。よって、ベンゼンリサイクル量を減らすために propylene 供給量に対する Benzene 供給比を小さくした。

クエンチでは、propylene 供給量が最大となるようにした場合、2段から3段への効果は少ないので、2段とした。表 4.1 ではベンゼン量を固定した場合の原料プロピレンの最大投入量を表している。

表 4.1 クエンチ効率

		プロピレン投入量[mol/h]		
		1 段目	2 段目	3 段目
クエンチ段数	1	100		
	2	16.4	100	
	3	3	18	100

反応後に冷却しさらに propylene を加え反応させることにより、ベンゼン供給比を小さくした。中間冷却を 1 回とした理由は、これより多くの冷却を行うと、副反応 B) が多く起こり (図 4.1)、下流のトランスアルキレーション反応への負荷が大きくなるからである。

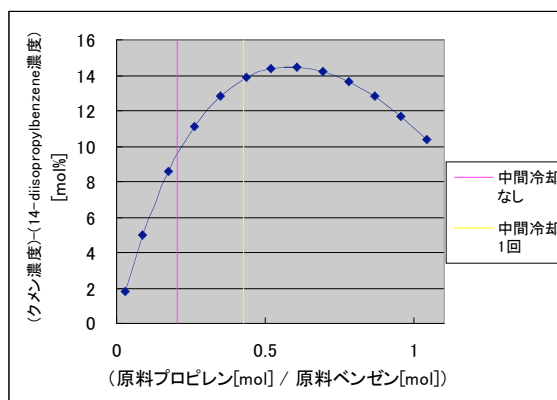


図 4.1 プロピレン投入比 (Propylene/Benzene)

◇ トランスアルキレーション反応

反応の際に Cumene が含まれると 14-diisopropylbenzene の反応率が落ちる。よって、反応の際に Cumene 濃度が小さいように、14-diisopropylbenzene の分離後に反応を行った。

Benzene も 14-diisopropylbenzene も、どちらを過剰にして反応させても優位性はほとんど変わらなかったため 1:1 での供給とした。

2.分離プロセス

蒸留による分離を利用した。

分離の際に濃度が重要となるのは製品 **Cumene** のみである。よって **side cut** を利用して蒸留塔の数を減らした。分離成分の沸点差が大きいので 2 塔とした。

- **Cumene** を蒸留塔の塔頂から回収（製品スペックが重要となるので）
- **Benzene**、**14-diispropylbenzene** への **Cumene** のスリップを減らした（トランスアルキレーションの際に **Cumene** 含有量を減らすため）
- **Propylene** 濃度が低いので回収は考えない（アルキレーション反応ではほぼ完全に反応している）
- **Benzene** と **Cumene** の沸点差が大きいので、1 塔目（T-101）で分離をする。
- 蒸留塔操作圧力について

- T-101

操作圧力の変化による還流比への影響が大きいので低圧とし、**off-gas** のコンプレッサーによる昇圧を避けるために 1 気圧とした。

- **Cumene Tower**

操作圧力の変化による還流比への影響が大きいので低圧とした。リボイラーで **LP-steam** が使える範囲とした。

- 塔のスペック

- T-101

Benzene 濃度 99.8%。リサイクルの際に反応器の安定性を増すため。

Cumene 回収率 99.99%。**Benzene** への **Cumene** スリップを減らすため。

Benzene 回収率 98.45%。コンデンサーの操作温度を上げるために、少し緩い条件とした。

- **Cumene Tower**

Cumene 濃度 99.9w%。製品スペックから。

Cumene 回収率 99.9%。**14-diispropylbenzene** への **Cumene** スリップを減らすため。

缶出液の **22-Diphenylpropane** の濃度 11%。流量が少ないので、原料ロスはず、リボイラーの操作温度を低くするために緩い条件とした。

- 蒸留塔の段数は段数変化における還流比の変化をプロットし（図 4.3、図 4.4）、感度分析により決定。T-101、**Cumene Tower** ともに 25 段。

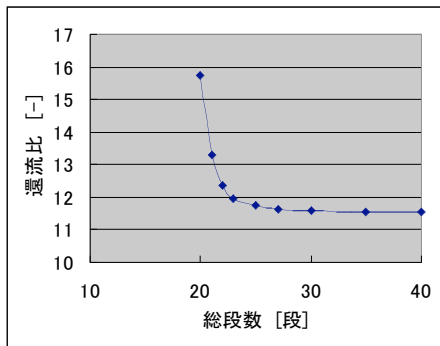


図 4.3 T-101 段数計算

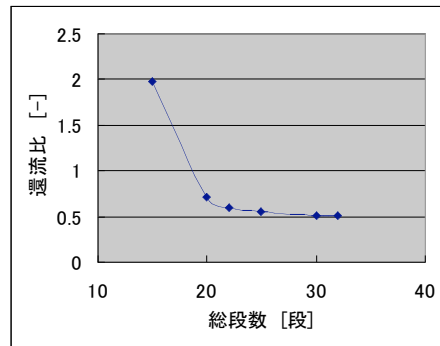


図 4.4 Cumene Tower 段数計算

- 蒸留塔の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値とし、決定した。

3.熱交換

熱交換する流体の組み合わせにより、総括伝熱係数が異なる。最小熱交換温度差を次のようにした。

- 熱交換する流体の両方が相変化を伴う場合は 10°C
- 片方のみ相変化を伴う場合は 12.5°C
- 両方とも相変化をしない場合は 15°C

ただし、冷却水を利用する熱交換器は 10°C を最小熱交換温度差とした。

この条件より problem table を作成し、Grand Composit Curve (図 4.5) を作成した。

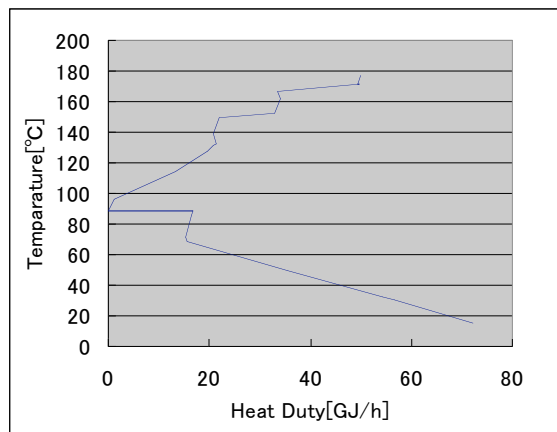


図 4.5 Grand Composit Curve

- pinch point は 88.57°C
- 必要とされる理論最小ユーティリティ

Hot utility は 49.96 GJ/h

Cold utility は 72.09GJ/h

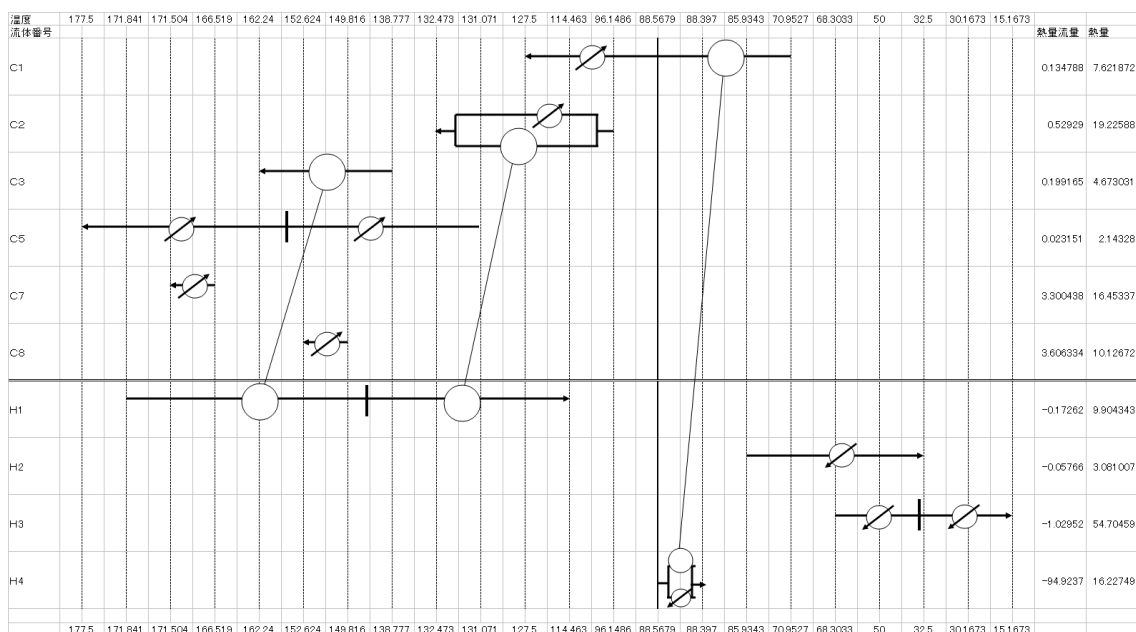


図 4.6 熱交換器網の計算

図 4.6 より、pinch point より高温側では流体数 7、使用するユーティリティは 2 種類。よって最小熱交換器数は 8 であるので、この計算結果はそれを満たしている。

また、pinch point よりも低温側は、流体数 4、使用するユーティリティは 2 種類。よって最小熱交換器数は 5 であるので、この計算結果はそれを満たしている。

この結果と、ユーティリティの顕熱以外の熱も利用することにより、必要とするユーティリティ量を削減した。

4. 使用ユーティリティ

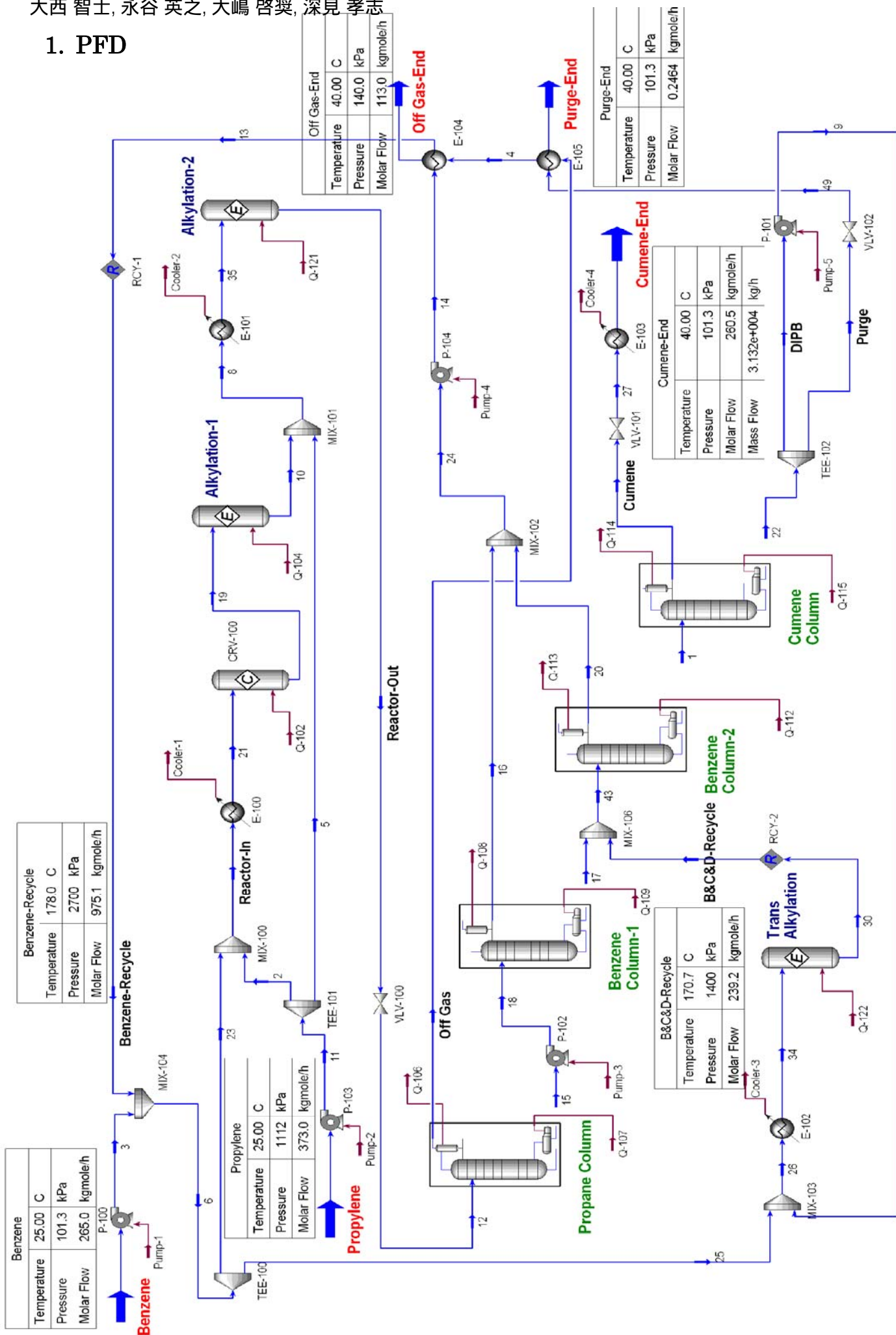
本課題では、液層反応を利用しており、反応の温度条件により、反応熱は 180°C が利用可能な最高温度となる。よって、多量のユーティリティを利用することは予想できる。利用するユーティリティができるだけ安価なものになるように、プロセス全体の温度が高温にならないようにした。

使用するスチームは内製した。これは機器コストが非常に小さいからである。また、オフガスには原料由来のプロパンが大量に含まれており、さらに、本課題ではオフガスのクレジットはしないので、使用しても損益とならない。

5. 代替案

コスト評価の際にも記述したが、機器コストがあまりにも低いのでベンゼンの転化率を上げ、原料ベンゼンのロス小さくするプロセスが考えられるが、バランス的にはこちらの案の方がよいものであろう。

1. PFD



2. Stream Data Table

表 1 及び表 2 に主な Stream の圧力・温度・流量・液化率・組成を示す。

表 1 主な Stream の圧力、温度、流量、液化率

Name	Benzene	Propylene	Reactor-In	Off Gas	Cumene	25	DIPB
Vapour Fraction	0.000	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000
Temperature [C]	25.0	25.0	137.1	-17.6	269.6	150.3	341.6
Pressure [kPa]	101.3	1112.0	2700.0	140.0	1000.0	2700.0	1000.0
Molar Flow [kgmole/h]	265.0	373.0	1325.1	113.0	260.5	100.0	139.3
Mass Flow [kg/h]	20703.4	15921.7	97032.4	5013.1	31315.2	7818.1	22614.1
Actual Volume Flow [m ³ /h]	23.8	31.7	139.2	1653.8	51.7	10.7	40.8
Name	Purge	B&C&D-Recycle	Benzene-Recycle	2	5	35	Reactor-Out
Vapour Fraction	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Temperature [C]	341.6	170.7	178.0	26.9	26.9	120.0	174.9
Pressure [kPa]	1000.0	1400.0	2700.0	2700.0	2700.0	2500.0	2300.0
Molar Flow [kgmole/h]	0.2	239.2	975.1	185.0	188.0	1383.6	1252.0
Mass Flow [kg/h]	40.0	30403.5	76250.3	7896.8	8024.9	105057.7	105058.1
Actual Volume Flow [m ³ /h]	0.072	41.1	110.6	15.6	15.9	147.1	156.1
Name	Cumene-End	34	Purge-End	Off Gas-End	19		
Vapour Fraction	0.000	0.000	0.000	1.000	0.000		
Temperature [C]	40.0	170.0	40.0	40.0	120.0		
Pressure [kPa]	101.3	1600.0	101.3	140.0	2700.0		
Molar Flow [kgmole/h]	260.5	239.3	0.246	113.0	1324.9		
Mass Flow [kg/h]	31315.2	30432.2	40.0	5013.1	97032.4		
Actual Volume Flow [m ³ /h]	37.0	40.9	0.047	2059.0	134.6		

表 2 主な Stream の組成

Name	Benzene	Propylene	Reactor-In	Off Gas	Cumene	25	DIPB
Master Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.7000	0.0977	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Master Comp Mole Frac (Benzene)	0.9980	0.0000	0.8583	0.0048	0.0003	0.9976	0.0000
Master Comp Mole Frac (Cumene)	0.0000	0.0000	0.0013	0.0000	0.9990	0.0015	0.0019
Master Comp Mole Frac (Propane)	0.0000	0.3000	0.0419	0.9900	0.0000	0.0000	0.0000
Master Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0020	0.0000	0.0008	0.0036	0.0000	0.0009	0.0000
Master Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0007	0.0000	0.9945
Master Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0037
Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0015	0.0000	0.0000	0.0000
Name	Purge	B&C&D-Recycle	Benzene-Recycle	2	5	35	Reactor-Out
Master Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.7000	0.7000	0.0951	0.0000
Master Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.2845	0.9975	0.0000	0.0000	0.7355	0.7254
Master Comp Mole Frac (Cumene)	0.0019	0.2668	0.0019	0.0000	0.0000	0.0804	0.1585
Master Comp Mole Frac (Propane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.3000	0.3000	0.0809	0.0894
Master Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000	0.0004	0.0006	0.0000	0.0000	0.0007	0.0008
Master Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.9945	0.4468	0.0000	0.0000	0.0000	0.0072	0.0256
Master Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0037	0.0014	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001
Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001
Name	Cumene-End	34	Purge-End	Off Gas-End	19		
Master Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0976		
Master Comp Mole Frac (Benzene)	0.0003	0.4168	0.0000	0.0048	0.8582		
Master Comp Mole Frac (Cumene)	0.9990	0.0017	0.0019	0.0000	0.0013		
Master Comp Mole Frac (Propane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.9900	0.0419		
Master Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000	0.0004	0.0000	0.0036	0.0008		
Master Comp Mole Frac (14-iP-BZ)	0.0007	0.5789	0.9945	0.0000	0.0000		
Master Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0000	0.0021	0.0037	0.0000	0.0001		
Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0015	0.0001		

3. プラントコスト推算結果

3-1-1 反応器

課題資料 4-1 節に従い、反応器サイズを決定した。

表 3 各反応器の実触媒容量と反応器体積

Alkylation-1

実触媒容量[L _{cat}]	必要反応器体積[m ³]	反応器 D[m]	反応器 L[m]	反応器体積[m ³]
965.47	1.93	1.00	4.00	3.14

Alkylation-2

実触媒容量[L _{cat}]	必要反応器体積[m ³]	反応器 D[m]	反応器 L[m]	反応器体積[m ³]
822.97	1.65	1.00	4.00	3.14

TransAlkylation

実触媒容量[L _{cat}]	必要反応器体積[m ³]	反応器 D[m]	反応器 L[m]	反応器体積[m ³]
9359.71	18.72	2.00	10.00	31.42

3-1-2 蒸留塔

課題資料 4-2 節に従い蒸留塔の許容蒸気質量速度を求め、 $D = 2\sqrt{\frac{V \cdot \rho_v}{G^* \pi}}$ により塔径を算出した。ここで、Vは塔内蒸発上昇量[m³/s]である。

表 4 各蒸留塔の塔径

		Propane Column	Benzene Column-1	Benzene Column-2	Cumene Column
G*	許容蒸気質量速度[kg/(m ² ・s)]	2.01	4.87	4.79	5.34
SF	系補正係数	0.8	0.8	0.8	0.8
K	許容蒸気速度係数[m/s]	0.05	0.05	0.05	0.05
ρ vapor	蒸気密度[kg/m ³]	3.19	24.9	24.9	34.3
ρ liquid	液密度[kg/m ³]	798.2	620.0	599.5	554.4
V	塔内蒸発上昇量[m ³ /s]	6.13	1.84	0.53	0.83
D	塔径[m]	3.51	3.46	1.87	2.61

3-2 プラント建設費

推算の結果プラント建設費は表 5 の通りとなった。

表 5 プラント建設費

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$148,218
Trays	\$267,634
Heat Exchangers	\$568,380
Pump with Electric Driver	\$212,507
Compressor	\$0
Compressor Driver	\$0
Furnace	\$3,423,040
Total Bare Module Cost	\$4,619,779
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$5,451,339
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$8,211,258

3-3 運転費

表 6 直接運転費

原料

ベンゼン供給量[kg/h]	20700
プロピレン供給量[kg/h]	15920

触媒量

Alkylation-1[m ³]	0.965
Alkylation-2[m ³]	0.822
TransAlkylation[m ³]	9.359

ユーティリティ

LP-Steam

機器名	使用量[ton/h]
Q-107 Reboiler	5.34

-20℃冷媒

機器名	使用量[GJ/h]
Q-106 Condenser	28.7

冷却水

機器名	使用料[ton/h]
Cooler-1	80.98
Cooler-2	241.2
Cooler-3	227
Cooler-4	248.2
Q-108 Condenser	770
Q-113 Condenser	161.5
Q-114 Condenser	538.8
冷却水計[ton/h]	2267.68

燃料[GJ/h]	56.68
----------	-------

電力供給量

機器名	使用量[kWh]
P100	22.86
P101	9.063
P102	39.95
P103	18.64
P104	70.52
電力合計[kWh]	161.033

原料

ベンゼン供給量[kg]	165,600,000
プロピレン供給量[kg]	127,360,000

ユーティリティ

HP-Steam[ton/year]	0
MP-Steam[ton/year]	0
LP-Steam[ton/year]	42,720
冷却水供給量[ton/year]	18,141,440
-20℃冷媒供給量[GJ/year]	229,600
電力供給量[kWyear]	1,288,264
燃料供給量[GJ/year]	453,440
ボイラー給水供給量[ton/year]	0

原料

ベンゼン[\$]	108,799,200
プロピレン[\$]	93,736,960

触媒

Alkylation-1[\$]	9,650
Alkylation-2[\$]	8,220
TransAlkylation[\$]	93,590

ユーティリティ

HP[\$]	0
MP[\$]	0
LP[\$]	760,416
冷却水[\$]	268,493
冷媒[\$]	1,811,544
電力[\$]	77,296
燃料[\$]	5,033,184
ボイラー給水[\$]	0

原料[\$]	202,536,160
触媒[\$]	111,460
ユーティリティ[\$]	7,950,933
直接運転費[\$]	210,598,553

3-4 プロセス設計結果の評価

1章の PFD および 2章の Stream Data Table から、ベンゼンに対するクメンの収率は 98.3%であり、年間生産量 250,000 ton 以上を達成している。

3-2 より、プラント建設費は\$8,211,258 であり、10年の単純償却として年間償却費用を考えると1年当たり**\$821,125.8**となる。

3-3 より、年間の直接運転費は**\$210,598,553**である。

プラントの年間保全費用を建設費の3%と仮定して算出すると**\$246,337.7**となる。

年間の人件費を**\$4,000,000**と仮定する。

以上より1年当たりにかかる費用は**\$215,666,017**となる。

ここで、クメンの価格を 1.00\$/kg とすると、

$$\mathbf{\$250,000,000 - \$215,666,017 = \$34,333,983}$$

1年あたり**\$34,333,983**のプラント収益が見込める。

4. 今回の設計に至った経緯

反応工程

- ・ アルキレーション反応器は2段式に設定し、反応器前に熱交換器を設置することで反応温度 120℃～180℃を満たすよう設計した。
- ・ トランスアルキレーション反応器において必要な物質は DIPB とベンゼンのみである。そこで、アルキレーション反応器と直列に設置するのではなく、あらかじめ分岐させておいたベンゼンと最終的に蒸留塔から得られる DIPB とが反応器へ流れるよう並列に設置している。これにより、アルキレーション反応器と直列に設置した時よりも、実触媒容量を少なく設計できる。

分離行程

- ・ 本プロセスではクメンを高純度で得なければならない。そこで蒸留塔を4基設置し蒸気圧の高い順に1成分ずつ高純度で分離していくこととした。
- ・ クメンを分離する際、ベンゼンのモル分率が高いと必要な純度を得られなくなる。そこでベンゼンの蒸留塔を2基設置した。1つ目の蒸留塔で大部分のベンゼンを分離し、残るベンゼンとトランスアルキレーション反応器からリサイクルされるベンゼンとを2つ目の蒸留塔で分離しリサイクルしている。
- ・ 分離プロセスの最後に残る DIPB はモル分率が 99.4wt%と高いため、ジフェニルプロパンまで分離せず、一部をパージした後トランスアルキレーション反応器へ送ることとした。仮に、他の副生成物が発生する、またはジフェニルプロパンへの転化率が高くなる場合は、DIPB とそれ以外の重成分とを分離する蒸留塔を新たに設置する必要があると考える。
- ・ Propane Column 以外の蒸留塔3基を 10bar と高圧で運転しているため、缶出液の温度が総じて高くなっている。そのため、3基の蒸留塔でリボイラに Steam を用いることができず、加熱炉を設置したことでプラント建設コストが高くなったことが問題点として挙げられる。
- ・ 蒸留塔の塔径については、塔内における蒸発上昇量の最大値を用いてフラiddiingが生じないように設計している。

熱回収

- ・ 本プロセスでは低温流体が少なく、全体的に高温の流体が多い。そのため、無理に熱交換をせずに製品・オフガス・パージの冷却、そして反応温度の調節目的で反応器前にのみ熱交換器を設置し、その他に熱交換器を設置しないことで設備費を抑えるものとした。
- ・ オフガスとして得られるプロパンを加熱炉に送り込むことでブタン燃料の消費量を抑えている。

化学工学会 第 41 秋季大会
第 8 回ソフトウェア・ツール学生コンテスト
プロセス設計部門 提出資料

九州大学大学院工学府化学システム工学専攻

小関 慶一・松本 雄一郎

(1)PFD

設計したプロセスを 2 枚の PDF ファイルにまとめた。(ファイル名 : PFD.pdf)

1 枚目は全体のフローを表し、2 枚目は 1 枚目において「Rxn_ABC」として省略した部分を表したものである。「Rxn_ABC」は、HYSYS 上で再現できないアルキレーション反応を仮想的に再現したものである。

PFD 中で機器名称は適宜省略して表記しており、その表記方法を以下に示す。

P : ポンプ (Pump)

H : 熱交換器 (Heat Exchanger)

V : バルブ (Valve)

T : 蒸留塔 (Tower)

R : 反応器 (Reactor)

また、主な Stream に通し番号と機器の接続における名称を付け、圧力[bar]と温度[°C]を記述した。

(2)物質収支 Stream-Data-Table

(1)で取り上げた主な Stream について、その詳細を表にまとめた。

≡

表 1. Stream-Data-Table

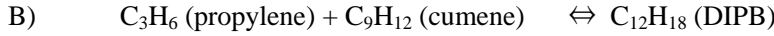
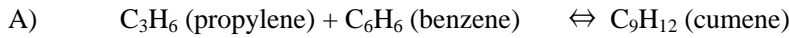
Stream名	1.Feed Benz	2.Feed Propy	3.Rxn_ABC in	4.Rxn_ABC out	5.T1 in	
圧力[bar]	0.01	0.111	0.27	0.23	0.05	
温度[°C]	25	25	120	180	143.7	
質量流量[kg/hr]	21406.6	15887.6	54885.3	54885.8	54885.8	
体積流量[m3/hr]	24.3	30.8	75	67	67	
液化率	1	1	0.99	1	0.63	
組成	Hydrogen	0	0	0	0	
	Propene	0	0.7	0.299	0	
	Propane	0	0.3	0.12814	0.18282	0.18282
	n-Hexane	0.002	0	0.00063	0.0009	0.0009
	Benzene	0.998	0	0.57217	0.48593	0.48593
	Cumene	0	0	0.00006	0.23391	0.23391
	14-iP-BZ	0	0	0	0.09632	0.09632
DiPhenylC3	0	0	0	0.00012	0.00012	
Stream名	6.T2 in	7.T2_top	8.T2_bot	9.T3_in	10.T3_top	
圧力[bar]	0.035	0.02	0.03	0.02	0.012	
温度[°C]	24.8	36.4	120.5	197	160.3	
質量流量[kg/hr]	28158.2	5973.3	22184.8	26727.6	17157.8	
体積流量[m3/hr]	36.1	10.9	25.1	31	19.8	
液化率	1	0	1	0.65	1	
組成	Hydrogen	0	0.00001	0	0	0
	Propene	0	0	0	0	0
	Propane	0.27298	0.89299	0	0	0
	n-Hexane	0.00134	0.00438	0.00001	0	0
	Benzene	0.72558	0.10262	0.99986	0	0
	Cumene	0.00009	0	0.00013	0.70801	0.99998
	14-iP-BZ	0	0	0	0.29162	0.00002
DiPhenylC3	0	0	0	0.00037	0	
Stream名	11.T3_bot	12.Rxn R in	13.Rxn R out	14.T4 in	15.T4_top	
圧力[bar]	0.018	0.16	0.14	0.025	0.011	
温度[°C]	236.7	170	170	151.4	82.9	
質量流量[kg/hr]	9569.8	19724.8	19725.1	19725.1	5559.9	
体積流量[m3/hr]	11.1	22.6	22.7	22.7	6.3	
液化率	1	1	1	0.85	1	
組成	Hydrogen	0	0	0	0	0
	Propene	0	0	0	0	0
	Propane	0	0	0	0	0
	n-Hexane	0	0	0	0	0.00001
	Benzene	0	0.68782	0.37672	0.37672	0.99997
	Cumene	0.00131	0.0005	0.6227	0.6227	0.00002
	14-iP-BZ	0.99742	0.31128	0.00018	0.00018	0
DiPhenylC3	0.00127	0.0004	0.0004	0.0004	0	
Stream名	16.T4_bot	17.Product	18.RCY			
圧力[bar]	0.021	0.01	0.111			
温度[°C]	184.2	40	100			
質量流量[kg/hr]	14165.1	31323	17591.2			
体積流量[m3/hr]	16.4	36.2	19.9			
液化率	1	1	1			
組成	Hydrogen	0	0	0		
	Propene	0	0	0		
	Propane	0	0	0		
	n-Hexane	0	0	0.00001		
	Benzene	0.00011	0.00005	0.99975		
	Cumene	0.99896	0.99952	0.00024		
	14-iP-BZ	0.0003	0.00015	0		
DiPhenylC3	0.00063	0.00029	0			

=2=

(3) 本課題でのプラントコスト推算結果

(3-1) 反応器

○cumene 生成反応(アルキレーション反応)



よって、propylene の減少速度($-r_p$) [$\text{mol}/(\text{m}^3_{\text{cat}} \cdot \text{s})$]は次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} -r_p &= k_1 C_p C_b + k_2 C_p C_c \\ &= k_1 C_{p0} (1 - x_p) \cdot C_{p0} (C_{b0}/C_{p0} - x_p) + k_2 C_{p0} (1 - x_p) \cdot C_{p0} (C_{c0}/C_{p0} - x_p) \quad \text{こ こ で、} \\ &= C_{p0}^2 (1 - x_p) \{A - Bx_p\} \end{aligned}$$

$$A = k_1 (C_{b0}/C_{p0}) + k_2 (C_{c0}/C_{p0})$$

$$B = k_1 + k_2$$

C_p [mol/L]: propylene の濃度

C_b [mol/L]: benzene の濃度

C_c [mol/L]: cumene の濃度

x_p [-]: 反応器入口に対する距離 z [m]での成分 propylene の反応率

[m^3_{cat}]: 触媒体積の単位

※ 設計課題において、 k_1, k_2 の係数の触媒体積の単位は L であるが、参考文献^{*1}において、 m^3 が利用されていたので m^3 に統一して、計算することとする。

非等温管型反応器に対する設計方程式^{*1}

・熱収支式

$$\frac{dT}{dx_a} = \frac{y_{A0}(-\Delta H_R)}{C_{p,m}} + \frac{y_{A0} U A_h}{S C_{p,m}} \cdot \frac{T_c - T}{-r_{Ab}}$$

断熱反応の場合、総括伝熱係数 $U = 0$ とおけることから、上式は次のようになる。

$$\frac{dT}{dx_a} = \frac{y_{A0}(-\Delta H_R)}{C_{p,m}} \tag{a-1}$$

・物質収支式

$$\frac{dz}{dx_a} = \frac{F_{A0}}{S(-r_{Ab})} \tag{b-1}$$

ここで、 T [K]: 反応器入口から距離 z [m]の位置の温度

x_a [-]: 反応器入口に対する距離 z [m]での成分 A の反応率

ΔT_{ad} [K]: 断熱温度上昇

y_{A0} [-]: 反応器入口の成分 A のモル分率

S [m^2]: 管断面積

$C_{p,m}$ [J/(mol·K)]: 反応流体の平均モル比熱量

z [m]: 反応器入口からの距離

F_{A0} [mol/s]: 反応器入口での成分 A の流入量

ΔH_R [J/mol]: 反応熱

propylene に対して、(a)式を解く

$$\int_{T_0}^T dT = \frac{y_{p0}(-\Delta H_R)}{C_{p,m}} \int_0^{x_p} dx_p$$
$$T - T_0 = \frac{y_{p0}(-\Delta H_R)}{C_{p,m}} x_p \quad (\text{a-2})$$

ここで、 $C_{p,m}$ は、温度と組成によって変化するので、反応器内のある距離において、算出することは簡単ではない。反応器のサイジング計算において、反応 C は無視できることから、反応 A, B が起こる反応器出入口の 2 流体の $C_{p,m}$ の平均を計算に用いることとする。また、 $aA + bB \rightarrow cC + dD$ の反応熱 ΔH_R は、次のようにして算出することができる。

$$\Delta H_R = \left(\frac{c}{a} H_C + \frac{d}{a} H_D \right) - \left(H_A + \frac{b}{a} H_B \right)$$

反応 A, B の反応熱を計算したところ、

反応 A の反応熱: -106807 [J/mol]

反応 B の反応熱: -106090 [J/mol]

となり、ほぼ似たような値となったことので、propylene はどちらの反応にも関与していることから、(a-2)式中 ΔH_R に一方の値を使えば計算が可能である。今回は、反応 A が主反応であることから、反応 A の反応熱を採用した。

propylene に対して、(b)式を解く

$$Sdz = \frac{F_{A0} dx_p}{C_{p0}^2 (1-x_p) \{A - Bx_p\}}$$
$$\frac{\pi z^2}{64} dz = \frac{F_{A0} dx_p}{BC_{p0}^2 (1-x_p) \{A/B - x_p\}}$$
$$\int_0^z z^2 dz = D \int_0^{x_p} \frac{dx_p}{(1-x_p)(E-x_p)}$$
$$\frac{1}{3} z^3 = D \int_0^{x_p} \left(\frac{\alpha}{1-x_p} - \frac{\beta}{E-x_p} \right) dx_p$$
$$= D\alpha \left\{ \ln \left| \frac{E-x_p}{1-x_p} \right| - \ln|E| \right\}$$
$$z = \sqrt[3]{3D\alpha \left\{ \ln \left| \frac{E-x_p}{1-x_p} \right| - \ln|E| \right\}} \quad (\text{b-2})$$

=4=

ここで、

$$D = \frac{64F_{p0}}{\pi BC_{p0}^2}$$

$$E = A/B$$

これから、反応器のサイジングを行っていく。流体のモル流量は、propylene が減った分だけ減少すると考えることができるので、直列につないだ n 番目の管型反応器の設計方程式に用いる変数は次のようにまとめることができる。

$$T - T_0 = 180 - 120 = 60[K]$$

$$F_{p,n-1} = F_{p0} \left(1 - \frac{C_{p,n-1} - C_{p,0}}{C_{p,0}} \right)$$

$$C_{total,n-1} = C_{total,0} \left(1 - \frac{C_{p,n-1} - C_{p,0}}{C_{p,0}} \right)$$

$$y_{p,n-1} = C_{p,n-1} / C_{total,n-1}$$

$$-\Delta H_R = 106807 = \text{const}$$

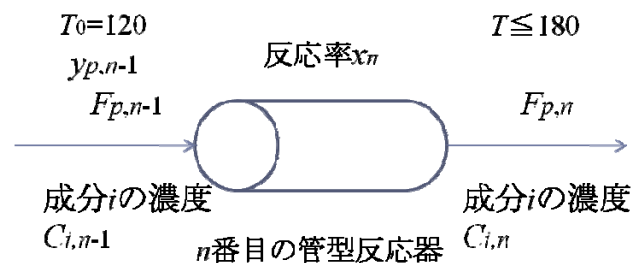
$$C_{p,m} = \frac{(150.60 + 220.65)/2}{2} = 186.63$$

$$\text{Length / Diameter} = z / D = 4.0$$

$$S = \frac{\pi}{4} D^2 = \frac{\pi}{4} \left(\frac{z}{4} \right)^2 = \frac{\pi z^2}{64}$$

$$k_1 = \text{const}$$

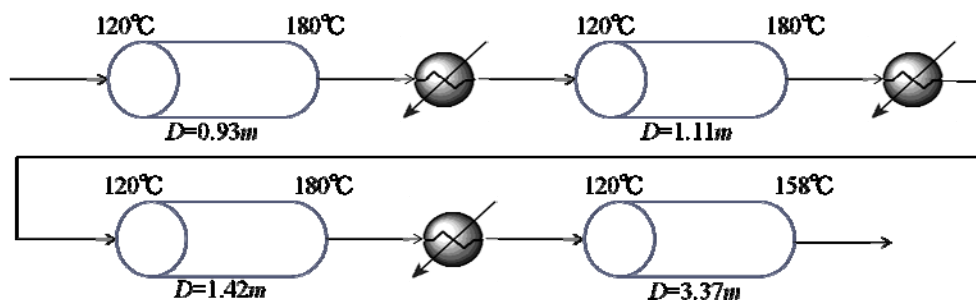
$$k_2 = \text{const}$$



反応器サイジングの手順は、次のように行った。

- (1) (a-2)式より、180°Cに達するときの反応率を算出
- (2) (b-2)式より、反応器長さ z を算出後、反応器体積および必要触媒体積を算出

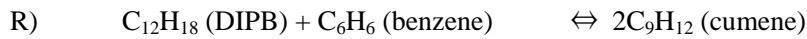
この手順 1~2 を繰り返し、n 番目の反応器から流出する Propylene 量が HYSYS 上で再現した反応器出口の値より小さくなったとき、この n 番目の出口成分を HYSYS 上で再現した反応器出口に置き換えて反応率を計算し、手順 2 を行うことで、アルキレーション反応のサイジング計算を終了することとした。



アルキレーション反応のサイジング結果

=5=

○cumene 生成反応(トランスアルキレーション反応)



よって、DIPB の触媒質量基準の減少速度($-r_{dm}$) [$\text{mol}/(\text{L}_{cat} \cdot \text{s})$]は次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} -r_{dm} &= k_3 C_d C_b \\ &= k_3 C_{d0} (1-x_d) \cdot C_{d0} (C_{b0}/C_{d0} - x_d) \\ &= k_3 C_{d0}^2 (1-x_d)(F-x_d) \end{aligned} \quad (\text{c})$$

ここで、 $F = C_{b0}/C_{d0}$

固体触媒を充填した管型反応器の設計方程式*2

$$\frac{W}{F_{A0}} = \int_0^{x_a} \frac{dx_a}{-r_{Am}}$$

ここで、 $W[\text{L}]$: 触媒体積

F_{A0} [mol/s]: 反応器流入量

x_a [-]: 成分 A の反応率

r_{Am} [mol/(L_{cat}·s)]触媒質量基準の反応速度

[L_{cat}]: 触媒体積の単位

DIPB に対して、(c)式を解く。

$$\begin{aligned} \frac{W}{F_{d0}} &= \int_0^{x_d} \frac{dx_d}{-r_{dm}} \\ &= \frac{1}{k_3 C_{d0}^2} \int_0^{x_d} \frac{dx_d}{(1-x_d)(F-x_d)} \\ &= \frac{1}{k_3 C_{d0}^2} \int_0^{x_d} \left(\frac{\gamma}{1-x_d} + \frac{\delta}{F-x_d} \right) dx_d \\ &= \frac{\gamma}{k_3 C_{d0}^2} \int_0^{x_d} \left(\frac{1}{1-x_d} - \frac{1}{F-x_d} \right) dx_d \\ &= G \int_0^{x_d} \left(\frac{1}{1-x_d} - \frac{1}{F-x_d} \right) dx_d \\ &= G \left(\ln \left| \frac{F-x_d}{1-x_d} \right| - \ln |F| \right) \\ \underline{\underline{W[L] = GF_{d0} \left(\ln \left| \frac{F-x_d}{1-x_d} \right| - \ln |F| \right)}} \end{aligned}$$

触媒体積が求まることから、触媒空隙率 0.5 および Length/Diameter=5.0 から、反応器サイジングが行える。

参考文献

*1 : 化学工学便覧改訂 6 版化学工学会編 丸善 p.207

*2 : 反応工学 橋本健治 倍風館 p.58

(3-2)プラント建設費

プラント建設費は以下のようにになった。

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$2,504,190
Trays	\$93,591
Heat Exchangers	\$2,205,595
Pump with Electric Driver	\$534,623
Compressor	\$0
Compressor Driver	\$0
Furnace	\$0
Total Bare Module Cost	\$5,337,998
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$6,298,838
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$9,487,831
アルキレーション反応触媒コスト	\$678,833
トランスアルキレーション反応触媒コスト	\$442,504
Total Cost	\$2,070,120

図 1. プラント建設費

Total Cost = Plant Construction Cost in 2008 ÷ 10 + 触媒コスト として、プラント建設費を算出した。

(3-3)運転費

直接運転費は以下のようにになった。

表 2. 直接運転費

	名称	年間コスト[\$/year]
原料	ベンゼン	\$112,512,887
	プロピレン	\$93,545,899
ユーティリティ	HPスチーム(254[°C]sat.)	\$5,912,441
	MPスチーム(184[°C]sat.)	0
	LPスチーム(160[°C]sat.)	0
	冷却水(30[°C]供給、40[°C]戻り)	0
	冷媒(5°C供給、15°C戻り)	0
	冷媒(-20°C供給、-20°C戻り)	\$104,042
	冷媒(-50°C供給、-50°C戻り)	\$8,999,580
	電力	\$10,142,758
	合計	\$231,217,607

=7=

(3-4)プロセス設計評価結果

(3-2)、(3-3)の結果から、製品クメンの販売価格を計算した。

一年間の生産コストは、図 1 中の Total Cost の値と表 2 の直接運転費を足し合わせたものであり、本プロセスでは 233,287,727[\$]となった。クメンは年間 250,408[ton]生産されるため、販売価格は 931.6[\$/ton]となった。

(4)今回の設計結果に至った経緯

- プロセスの設計にあたり、まず原料となる benzene と propylene の必要量を算出し、作成するプロセスの方針として以下のようなブロック図を作成した。

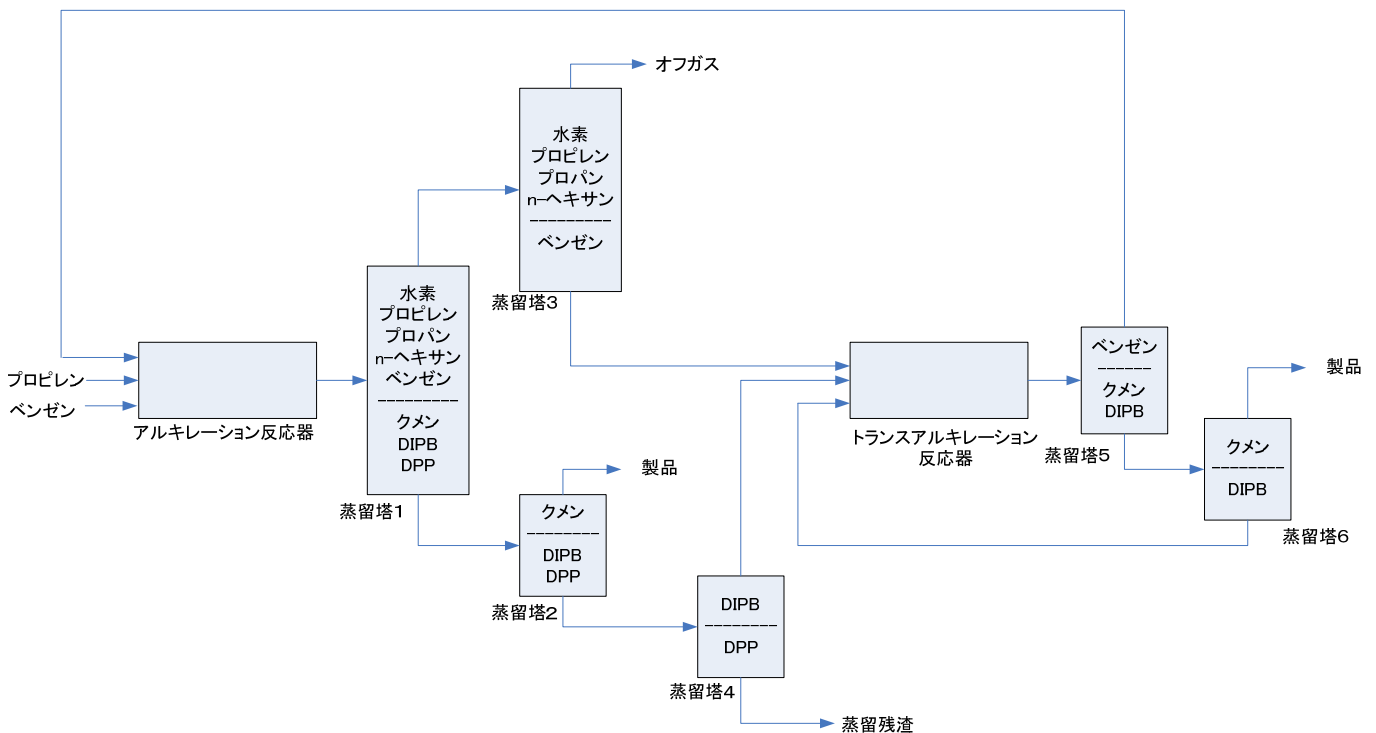
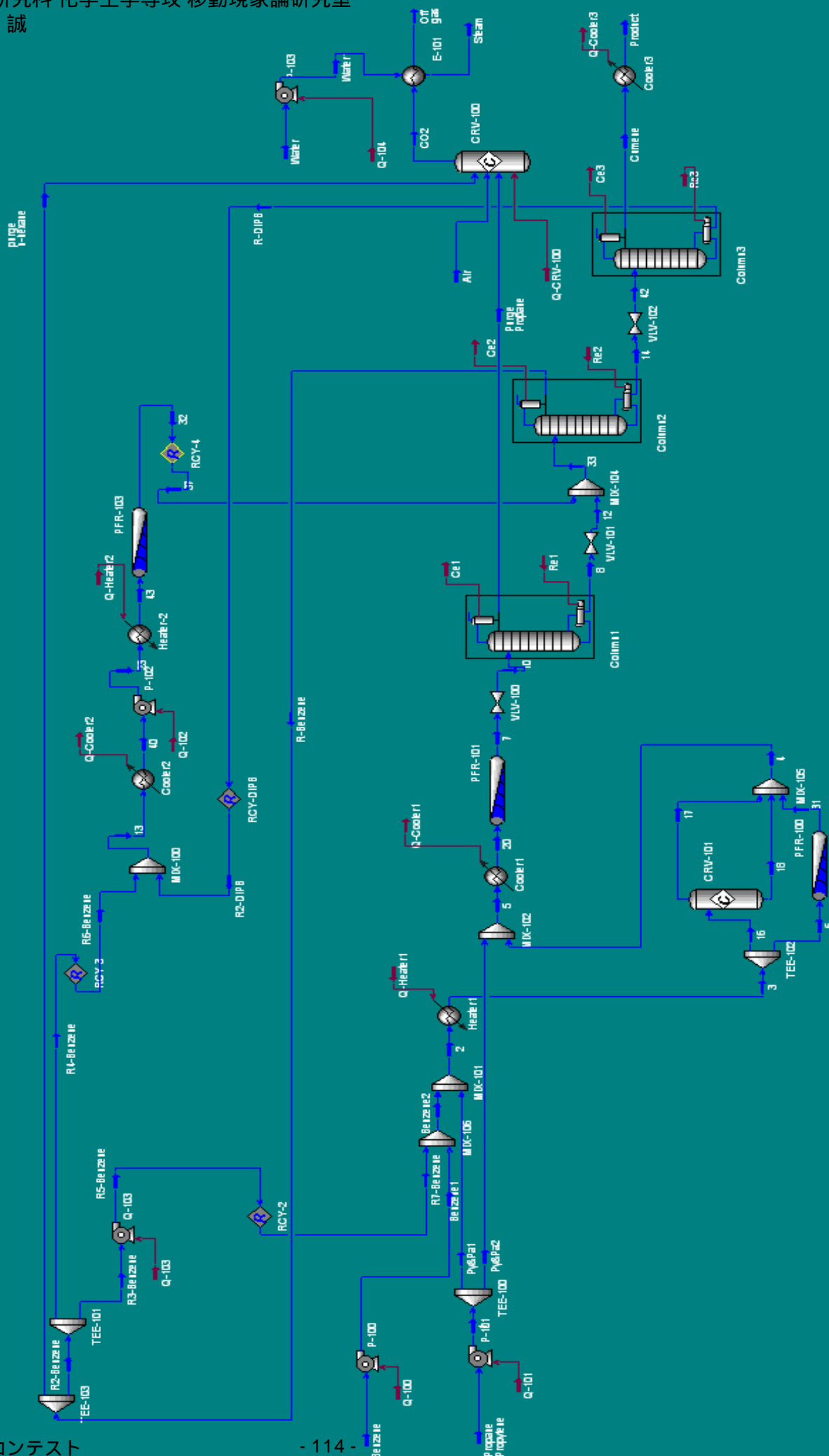


図 2. ブロック図

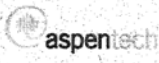
- アルキレーション反応において、benzene の propylene に対する過剰率と、propylene の cumene への転嫁率の関係をグラフ化した。その結果、過剰率を 6 以上にすれば十分な転嫁率が得られることが分かった。
- トランスアルキレーション反応において、原料成分の組成が生成 cumene に与える影響をシミュレーションした。その結果、原料における DIPB と benzene の比が 1 : 2 以上の時、十分な反応率が得られることが分かった。

- ・ アルキレーション反応の副反応である反応 C は、反応器入口の benzene 流量に対して転嫁率 0.03% の反応が起こるため、反応器入口の benzene を過剰にしすぎると 22-Diphenylpropane が多く生成してしまう。そこで、リサイクルする benzene 量を減らすことにより 22-Diphenylpropane 生成を抑制すれば、図 2 中の蒸留塔 4 を削減できるのではないかと考えた。リサイクル量を減らして検証したところ、アルキレーション反応における転嫁率は優れているとは言えないものの、目的通り蒸留塔を削減することができ、かつ cumene の製品条件を満たすことができた。さらに、リサイクル量が減ったことにより各装置の流量が小さくなったため、結果的に装置コストやユーティリティの削減にもつなげることができた。
- ・ 蒸留塔の設計には Underwood の式や Fenske の式を用いて最小還流比および最小理論段数を求め、その結果をもとに蒸留塔の概略設計を行った。その後、詳細にシミュレーションを行って最適な運転条件を検討した。
- ・ 使用可能なユーティリティの最高温度は 254[°C]であるため、各装置での温度がこれを超えないように留意した。
- ・ HYSYS 上でプラントを設計した後、Aspen HX-Net というソフトウェアを使用して熱回収を図った。しかし、熱回収検討後の熱交換器網を HYSYS 上で再現するには至っていない。

(1) PFDの概略図

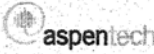


(2) 物質収支 stream-Data-Table

 KYOTO UNIVERSITY Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\Users\y-euzuki\Documents\2009fy\Z\FXY\EW1-1\FX@16-1				
		Unit Set: Field13				
		Date/Time: Mon Jun 06 19:39:40 2009				
Workbook: Case (Main)						
Material Streams						
						Fluid Pkg: All
11	Name	Propane Propylene	1	Py&Pa1	Py&Pa2	Benzene
12	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
13	Temperature (C)	25.00	26.54	26.54	26.54	25.00
14	Pressure (bar)	11.12	27.00	27.00	27.00	1.013
15	Molar Flow (gmole/h)	3.692e+005	3.692e+005	1.754e+005	1.939e+005	2.858e+005
16	Mass Flow (kg/h)	1.575e+004	1.575e+004	7481	8269	2.232e+004
17	Liquid Volume Flow (barrel/day)	4602	4602	2186	2416	3822
18	Heat Flow (kW)	-3145	-3131	-1487	-1644	3955
19	Name	2	3	4	5	6
20	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
21	Temperature (C)	63.00	120.0	177.7	162.6	120.0
22	Pressure (bar)	27.00	27.00	25.00	25.00	27.00
23	Molar Flow (gmole/h)	1.313e+006	1.313e+006	1.187e+006	1.381e+006	1.313e+006
24	Mass Flow (kg/h)	9.643e+004	9.643e+004	9.643e+004	1.047e+005	9.640e+004
25	Liquid Volume Flow (barrel/day)	1.746e+004	1.746e+004	1.689e+004	1.931e+004	1.746e+004
26	Heat Flow (kW)	1.529e+004	1.820e+004	1.820e+004	1.655e+004	1.819e+004
27	Name	7	12	14	Air	CO2
28	Vapour Fraction	0.0000	0.7361	0.0000	1.0000	1.0000
29	Temperature (C)	177.7	100.6	169.0	25.00	297.7
30	Pressure (bar)	23.00	1.000	1.000	1.000	1.000
31	Molar Flow (gmole/h)	1.243e+006	1.138e+006	5.007e+005	3.000e+007	3.023e+007
32	Mass Flow (kg/h)	1.047e+005	1.001e+005	6.923e+004	8.655e+005	8.710e+005
33	Liquid Volume Flow (barrel/day)	1.867e+004	1.729e+004	1.212e+004	1.510e+005	1.528e+005
34	Heat Flow (kW)	1.379e+004	1.925e+004	-5346	-67.30	-3332
35	Name	Purge Propane	16	17	18	20
36	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000
37	Temperature (C)	43.04	120.0	151.3	151.3	120.0
38	Pressure (bar)	15.00	27.00	27.00	27.00	25.00
39	Molar Flow (gmole/h)	1.053e+005	393.9	49.86	306.4	1.381e+006
40	Mass Flow (kg/h)	4643	28.93	1.153	27.78	1.047e+005
41	Liquid Volume Flow (barrel/day)	1383	5.239	0.3624	4.683	1.931e+004
42	Heat Flow (kW)	-3434	5.459	0.1737	5.286	1.379e+004
43	Name	10	Benzene2	Benzene1	8	31
44	Vapour Fraction	0.0102	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
45	Temperature (C)	176.7	67.21	25.65	215.8	177.7
46	Pressure (bar)	15.00	27.00	27.00	15.00	25.00
47	Molar Flow (gmole/h)	1.243e+006	1.138e+006	2.858e+005	1.138e+006	1.187e+006
48	Mass Flow (kg/h)	1.047e+005	8.895e+004	2.232e+004	1.001e+005	9.640e+004
49	Liquid Volume Flow (barrel/day)	1.867e+004	1.528e+004	3822	1.729e+004	1.688e+004
50	Heat Flow (kW)	1.379e+004	1.677e+004	3974	1.925e+004	1.819e+004
51	Name	Cumene	purge n-hexane	dghggghg	R7-Benzene	R-Benzene
52	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
53	Temperature (C)	153.1	79.16	297.7	80.08	79.16
54	Pressure (bar)	1.000	1.000	1.000	27.00	1.000
55	Molar Flow (gmole/h)	2.857e+005	1.134e+004	0.0000	8.518e+005	9.219e+005
56	Mass Flow (kg/h)	3.435e+004	887.0	0.0000	6.663e+004	7.211e+004
57	Liquid Volume Flow (barrel/day)	5997	152.5	0.0000	1.146e+004	1.240e+004
58	Heat Flow (kW)	-809.1	169.4	0.0000	1.280e+004	1.377e+004
59	Name	R2-Benzene	R5-Benzene	R3-Benzene	R4-Benzene	R6-Benzene
60	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
61	Temperature (C)	79.16	80.07	79.16	79.16	79.18
62	Pressure (bar)	1.000	27.00	1.000	1.000	1.000
63	Molar Flow (gmole/h)	9.106e+005	8.514e+005	8.514e+005	5.919e+004	5.911e+004
64	Mass Flow (kg/h)	7.122e+004	6.659e+004	6.659e+004	4630	4623
65	Liquid Volume Flow (barrel/day)	1.225e+004	1.145e+004	1.145e+004	796.2	794.9
66	Heat Flow (kW)	1.360e+004	1.278e+004	1.272e+004	884.1	884.7
67						
68						
69						
70						
71	Hyprotech Ltd.		Aspen HYSYS Version 2006 (20.0.0.6728)			Page 1 of 6

Licensed to: KYOTO UNIVERSITY

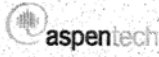
* Specified by user.

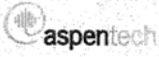
1	 KYOTO UNIVERSITY. Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\Users\y.suzuki\Documents\2009\fy\jz\XYEV1-1-%1:1%215-1				
2			Unit Set: Field13				
3			Date/Time: Mon Jul 06 19:39:40 2009				
4	Workbook: Case (Main) (continued)						
5	Material Streams (continued)						
6							Fluid Pkg: All
7	Name	R-DIPB	40	13	R2-DIPB	32	
8	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.2506	0.0000	0.0000	
9	Temperature (C)	209.2	50.00 *	171.1	209.2 *	170.6	
10	Pressure (bar)	1.000	1.000	1.000	1.000 *	1.000	
11	Molar Flow (gmole/h)	2.149e+005	2.740e+005	2.740e+005	2.149e+005 *	2.740e+005	
12	Mass Flow (kg/h)	3.488e+004	3.950e+004	3.950e+004	3.488e+004	3.950e+004	
13	Liquid Volume Flow (barrel/day)	6122	6917	6917	6122	6921	
14	Heat Flow (kW)	-3979	-6386	-3094	-3979	-3722	
15	Name	33	37	Product	C02	Steam	
16	Vapour Fraction	0.6288	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	
17	Temperature (C)	116.3	170.6 *	40.00 *	243.7	250.0 *	
18	Pressure (bar)	1.000	14.00 *	1.000	1.000	40.00	
19	Molar Flow (gmole/h)	1.423e+006	2.850e+005 *	2.857e+005	3.023e+007	2.693e+006	
20	Mass Flow (kg/h)	1.413e+005	4.128e+004	3.435e+004	8.710e+005	4.851e+004	
21	Liquid Volume Flow (barrel/day)	2.452e+004	7234	5997	1.528e+005	7338	
22	Heat Flow (kW)	1.528e+004	-3973	-2935	-1.735e+004	-2.000e+005	
23	Name	Water1	42	23	43	Water	
24	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
25	Temperature (C)	25.00 *	169.0	50.20	170.0 *	24.95	
26	Pressure (bar)	40.00 *	1.000	16.00 *	16.00	3.000 *	
27	Molar Flow (gmole/h)	2.693e+006	5.007e+005	2.740e+005	2.740e+005	2.693e+006	
28	Mass Flow (kg/h)	4.851e+004 *	6.923e+004	3.950e+004	3.950e+004	4.851e+004	
29	Liquid Volume Flow (barrel/day)	7338	1.212e+004	6917	6917	7338	
30	Heat Flow (kW)	-2.141e+005	-5346	-6366	-3722	-2.141e+005	
31	Name	Off gas					
32	Vapour Fraction	1.0000					
33	Temperature (C)	40.00 *					
34	Pressure (bar)	1.000					
35	Molar Flow (gmole/h)	3.023e+007					
36	Mass Flow (kg/h)	8.710e+005					
37	Liquid Volume Flow (barrel/day)	1.528e+005					
38	Heat Flow (kW)	-6.886e+004					
39	Compositions						
40							Fluid Pkg: All
41	Name	Propane Propylene	f	Py&Pa1	Py&Pa2	Benzene	
42	Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	
43	Comp Mole Frac (Propane)	0.2846 *	0.2846	0.2846	0.2846	0.0000 *	
44	Comp Mole Frac (Propene)	0.7154 *	0.7154	0.7154	0.7154	0.0000 *	
45	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.9986 *	
46	Comp Mole Frac (14-IP-BZ)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	
47	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	
48	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0014 *	
49	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	
50	Comp Mole Frac (Methane)	***	***	***	***	***	
51	Comp Mole Frac (Air)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	
52	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	
53	Comp Mole Frac (123-EBenzene)	***	***	***	***	***	
54	Comp Mole Frac (CO)	***	***	***	***	***	
55	Comp Mole Frac (H2O)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	
56	Comp Mole Frac (CO2)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	
57	Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	
58							
59							
60							
61							
62							
63							
64							
65							
66							
67							
68							
69							
70							
71	Hvprotech Ltd		Aspen HYSYS Version 2006 (20.0.0.6728)			Page 2 of 6	

Licensed to: KYOTO UNIVERSITY

* Specified by user.

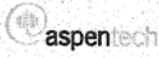
1	 KYOTO UNIVERSITY Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\Users\y.suzuki\Documents\2009\rv\YZ\XY\CV1-1%*174@15			
2			Unit Set: Field13			
3			Date/Time: Mon Jul 06 19:39:40 2009			
4						
5						
6						
7						
8						
9						
10						
11						
12						
13						
14						
15						
16						
17						
18						
19						
20						
21						
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						
69						
70						
71	Aspen HYSYS Version 2006 (20.0.0.6728)		Page 3 of 6		Licensed to: KYOTO UNIVERSITY	

1	 KYOTO UNIVERSITY Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\Users\y-suzuki\Documents\2009\Hyfz\XYCEV*-%.*%@15 1			
2			Unit Set: Field13			
3			Date/Time: Mon Jul 08 19:39:40 2009			
4						
5						
6						
7						
8						
9						
10						
11						
12						
13						
14						
15						
16						
17						
18						
19						
20						
21						
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						
69						
70						
71						

1	 KYOTO UNIVERSITY Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\Users\y-suzuki\Documents\2009\vfjz\XYCEW1-1%*.xls			
2			Unit Set: Field 13			
3			Date/Time: Mon Jul 06 19:39:40 2009			
4						
5	Workbook: Case (Main) (continued)					
6						
7	Compositions (continued)					
8	Fluid Pkg: All					
9						
10						
11	Name	R-DIPB	40	13	R2-DIPB	32
12	Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
13	Comp Mole Frac (Propane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
14	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
15	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	0.2128	0.2128	0.0000 *	0.0669
16	Comp Mole Frac (14-IP-BZ)	0.9972	0.7821	0.7821	0.9972 *	0.6362
17	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0018	0.0014	0.0014	0.0018 *	0.0014
18	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000	0.0029	0.0029	0.0000 *	0.0029
19	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
20	Comp Mole Frac (Methane)	***	***	***	***	***
21	Comp Mole Frac (Air)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
22	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0010	0.0008	0.0008	0.0010 *	0.2926
23	Comp Mole Frac (123-EBenzene)	***	***	***	***	***
24	Comp Mole Frac (CO)	***	***	***	***	***
25	Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
26	Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
27	Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
28	Name	33	37	Product	CO2	Steam
29	Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.7840	0.0000
30	Comp Mole Frac (Propane)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
31	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
32	Comp Mole Frac (Benzene)	0.6391	0.0665 *	0.0000	0.0000	0.0000
33	Comp Mole Frac (14-IP-BZ)	0.1508	0.6525 *	0.0007	0.0000	0.0000
34	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0003	0.0012 *	0.0000	0.0000	0.0000
35	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0089	0.0028 *	0.0000	0.0000	0.0000
36	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
37	Comp Mole Frac (Methane)	***	***	***	***	***
38	Comp Mole Frac (Air)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
39	Comp Mole Frac (Cumene)	0.2009	0.2770 *	0.9993	0.0000	0.0000
40	Comp Mole Frac (123-EBenzene)	***	***	***	***	***
41	Comp Mole Frac (CO)	***	***	***	***	***
42	Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0151	1.0000
43	Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0127	0.0000
44	Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.1882	0.0000
45	Name	Water1	42	23	43	Water
46	Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
47	Comp Mole Frac (Propane)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
48	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
49	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000 *	0.0000	0.2128	0.2128	0.0000
50	Comp Mole Frac (14-IP-BZ)	0.0000 *	0.4285	0.7821	0.7821	0.0000
51	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0000 *	0.0008	0.0014	0.0014	0.0000
52	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000 *	0.0000	0.0029	0.0029	0.0000
53	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
54	Comp Mole Frac (Methane)	***	***	***	***	***
55	Comp Mole Frac (Air)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
56	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0000 *	0.5707	0.0008	0.0008	0.0000
57	Comp Mole Frac (123-EBenzene)	***	***	***	***	***
58	Comp Mole Frac (CO)	***	***	***	***	***
59	Comp Mole Frac (H2O)	1.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000
60	Comp Mole Frac (CO2)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
61	Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
62						
63						
64						
65						
66						
67						
68						
69						
70						
71	Hyprotech Ltd.		Aspen HYSYS Version 2006 (20.0.0.6728)		Page 5 of 6	

Licensed to: KYOTO UNIVERSITY

* Specified by user.

1	 KYOTO UNIVERSITY Calgary, Alberta CANADA	Case Name: C:\Users\y-suzuk\Documents\2009\FV\FZ\FYCEV3-1%*.%15
2		Unit Set: Field13
3		Date/Time: Mon Jul 06 19:39:40 2009
4		
5		

Workbook: Case (Main) (continued)

Compositions (continued)			Fluid Pkg:		All
Name	Of gas				
12	Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.7840			
13	Comp Mole Frac (Propane)	0.0000			
14	Comp Mole Frac (Propene)	0.0000			
15	Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000			
16	Comp Mole Frac (14-IP-BZ)	0.0000			
17	Comp Mole Frac (DiPhenylC3)	0.0000			
18	Comp Mole Frac (n-Hexane)	0.0000			
19	Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000			
20	Comp Mole Frac (Methane)	***			
21	Comp Mole Frac (Air)	0.0000			
22	Comp Mole Frac (Cumene)	0.0000			
23	Comp Mole Frac (123-EBenzene)	***			
24	Comp Mole Frac (CO)	***			
25	Comp Mole Frac (H2O)	0.0151			
26	Comp Mole Frac (CO2)	0.0127			
27	Comp Mole Frac (Oxygen)	0.1882			

Energy Streams							Fluid Pkg:		All
Name		Re2	Ce2	Ce3	Re3	Ce1			
31	Heat Flow (kW)	5631	1.249e+004	5165	5724	3576			
32	Name	Re1	Q-100	Q-101	Q-103	Q-CRV-100			
33	Heat Flow (kW)	5610	18.86	14.10	60.72	0.0000			
34	Name	Q-102	Q-Heater2	Q-Heater1	Q-Cooler2	Q-Cooler1			
35	Heat Flow (kW)	19.85	2645	2912	3292	2769			
36	Name	Q-Cooler3	Q-104	Q-Cooler4					
37	Heat Flow (kW)	2126	50.45	5.151e+004					

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
69
70

(3-1)反応器

① 反応器 FLOW の最適化

反応器 FLOW について以下の 4 つを考え、最適な FLOW を選択した。

この FLOW の最適化での問題点は、アルキレーション反応が、

A) プロピレン + ベンゼン ⇌ クメン

B) プロピレン + クメン ⇌ DIPB

の反応が起こるが、A)の平衡反応をできるだけ進行させたいという点である。

そのため入り口でのベンゼンの割合が高いほうが良い。そこで各々の反応器入り口のベンゼン割合を考えると以下の図のようになった。

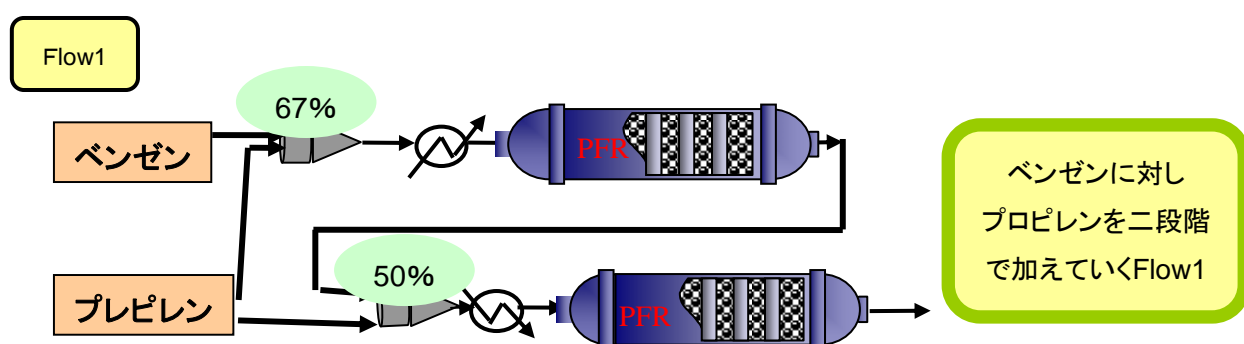


Fig.3.7.1

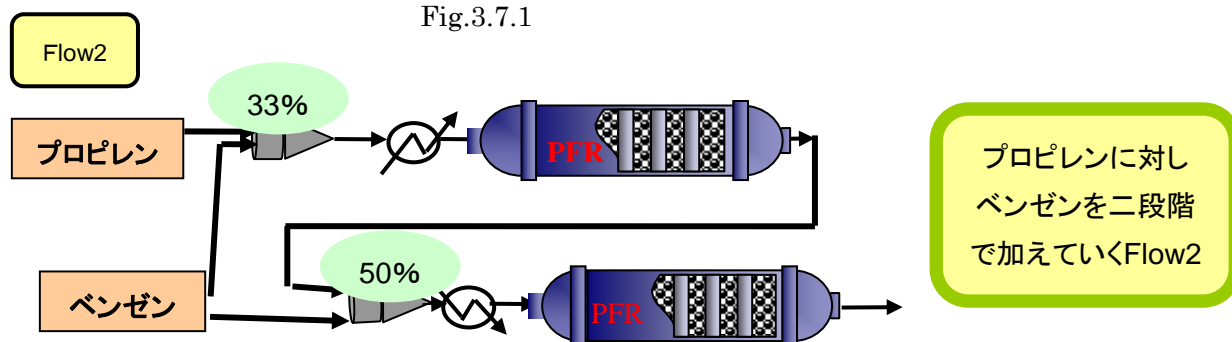


Fig.3.7.2

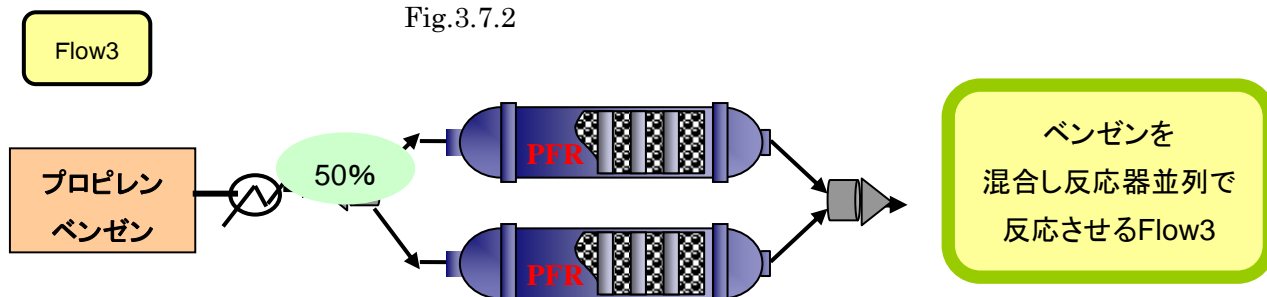


Fig3.7.3

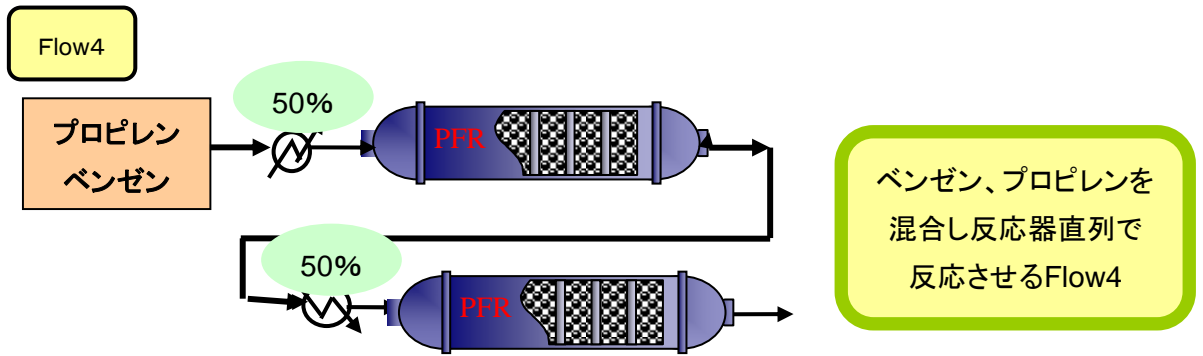


Fig3.7.4

よって上記の FLOW の中で入り口でのベンゼンモル比が高い FLOW1 を採用した。以下ベンゼンに対し、プロピレンを加えていく FLOW1 を用いて設計する。

② 反応器の本数の検討

少ない断熱反応器数(Fig.3.7.5)で一度に反応させると、断熱反応器を仮定しているので適正温度(120~180℃)以上で反応してしまう。そこで反応器を分割して(Fig.3.7.6)、冷却して反応器に入れなおすという操作を行う必要がある。この反応器分割により全体としての反応器体積を決めることができる。以下の図は反応器分割本数に対してアルキレーション反応器建設コストとアルキレーション触媒コストの合計値を比較したものである。

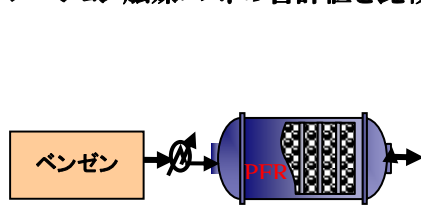


Fig .3.7.5

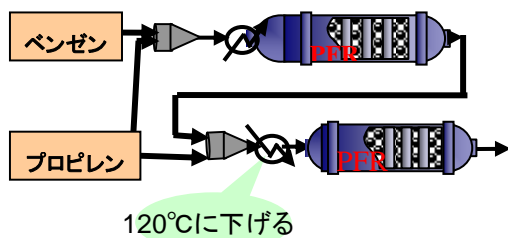
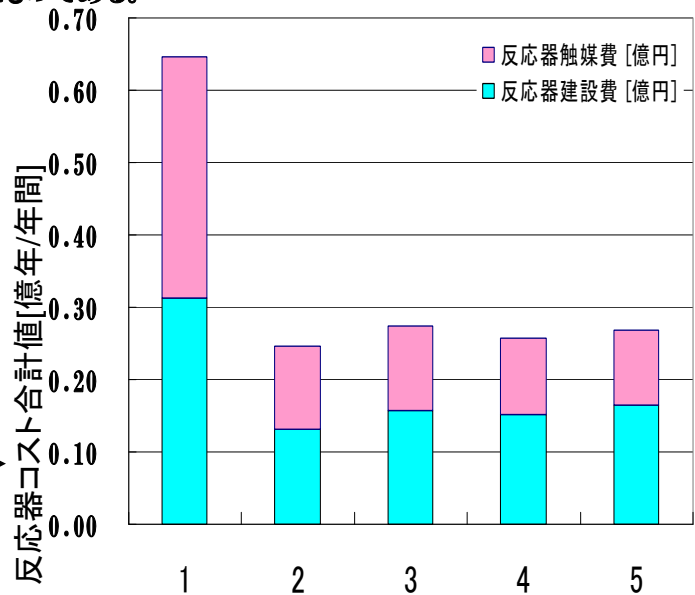


Fig .3.7.6



反応器本数

Fig.3.7.7

③ 反応器体積の設計

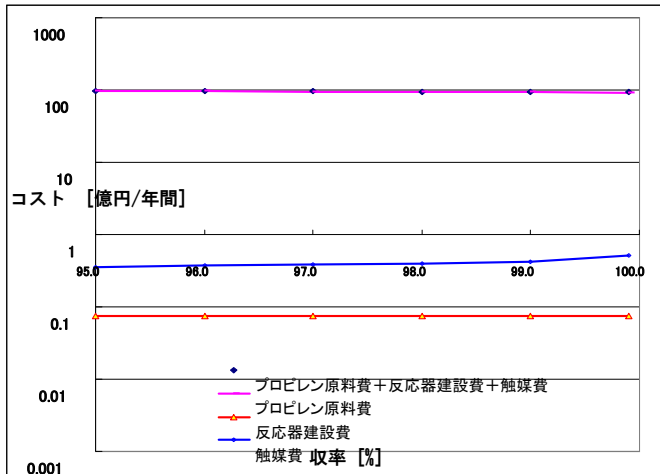


Fig.3.7.8

設計条件をみたしつつ収率に対しプロピレン原料費、反応器建設費、触媒費を比較すると、総コストはプロピレン原料費に依存する。プロピレン原料費を抑えるため、できるだけ収率を上げるように反応器を設計する。(Fig.3.7.8)

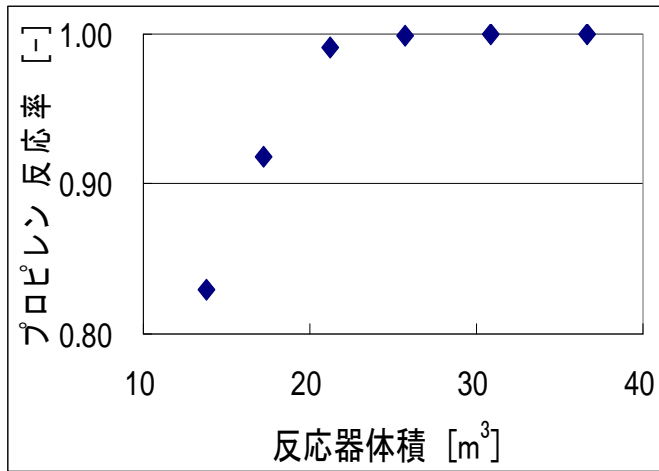


Fig.3.7.9

アルキレーション反応器は、収率をあげるためプロピレンが 99.9%反応しきるように体積を決定。(Fig.3.7.9)
トランスアルキレーション反応器に関しては
逆反応がある平衡反応として、生産要求などの設計条件を満たしつつ反応の大きさを決定した。

(3 - 2) プラント建設費

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$2,667,990
Trays	\$160,296
Heat Exchangers	\$814,162
Pump with Electric Driver	\$174,217
Compressor	\$0
Compressor Driver	\$0
Furnace	\$636,879
Total Bare Module Cost	\$4,453,544
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$5,255,182
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$7,915,791

(3 - 3) 運転費

原料	原料質量[kg]	原料費(単位質量当)[\$/kg]	原料費[\$]
ベンゼン	178560000	0.66	117313920
プロピレン(リファイナリーグレード)	126000000	0.74	92736000
原料費合計			210049920

触媒(反応器 2 本)	触媒体積[m3]	触媒費(単位質量当)[\$/m3]	触媒費[\$]
アルキレーション触媒	51	10000.00	514719
トランスアルキレーション触媒	63	10000.00	628319
触媒費合計[¥/10year]			1143037

ユーティリティ	スチーム量 [ton]	単位質量あたりのコスト [\$/ton]	スチームコスト[\$]
HP スチーム(254°Csat.)	0	29.97	0
MP スチーム(184°Csat.)	0	20.08	0
LP スチーム(160°Csat.)	0	17.08	0
	水量[ton]	単位質量あたりのコスト [\$/ton]	冷却水コスト[\$]
冷却水(30°C供給、40°C戻り)	35628786	0.00	5273
	熱量[GJ]	単位数あたりのコスト[\$/GJ]	冷媒コスト[\$]
冷媒(5°C供給、15°C戻り)	0	4.43	0
冷媒(-20°C供給、-20°C戻り)	0	7.89	0
冷媒(-50°C供給、-50°C戻り)	0	13.11	0
	電気量[kWh]	単位数あたりのコスト[\$/kWh]	電力コスト[\$]
電力	522423	0.06	31345
	熱量[GJ]	単位数あたりのコスト[\$/GJ]	燃料コスト[\$]
燃料	0	11.10	0
	水量[ton]	単位質量あたりのコスト [\$/ton]	ボイラー給水コスト [\$]
ボイラー給水	0	2.45	0
ユーティリティコスト合計			36618

(3 - 4)

経済収支

Benzene \$0.657/kg
Propylene \$0.736/kg

		金額[万\$/年]
収入	製品売上	22000
支出	原料費	21005
	触媒費	11
	建設費	79
	運転費	3.6
	総支出	901

$$\begin{array}{|c|} \hline \text{総収入} \\ \hline 22000\text{万\$} \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|} \hline \text{総支出} \\ \hline 21099\text{万\$} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \text{年間利益} \\ \hline 901\text{万\$} \\ \hline \end{array}$$

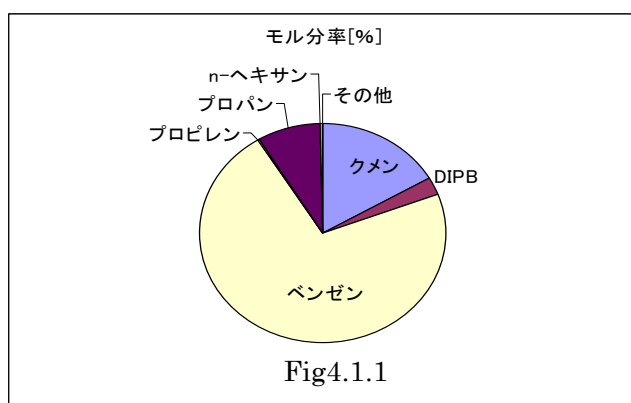
利益率13.0%

(4) 今回の設計結果に至った経緯

分離工程では、アルキレーション触媒反応工程から出てくる成分は以下の通りである。

Table4.1.1

7成分混合物 (表 4.1)		モル分率
プロピレン	(未反応分)	0.000183
プロパン	(不活性成分)	0.084552
ベンゼン	(未反応分)	0.716295
クメン	(製品)	0.166384
DIPB	(副生成物)	0.022977
n-ヘキサン	(不純物)	0.001949
水素	(副生成物)	0.00003
22-ジフェニルプロパン	(副生成物)	0.00003



フローの反応器出口での組成は、Fig.4.1.1 のようになる。

左図のようにアルキレーション反応器出口での組成は、ベンゼンが多く、水素、22-ジフェニルプロパンが少量であることがわかる。今回の設計の分離には、気液平衡曲線から、蒸留を用いることにした。水素、22-ジフェニルプロパンが非

常で少量であり、製品中の不純物として含まれても、クメン99.9%の純度は保てると考えたため、その二種のために蒸留塔を設計することはしないことにした。また、プロピレンに関しても、反応過程でほぼ全て使いきるように設計したのでこれも蒸留塔は設計しない。

よって、分離しなければならない成分は以下の5つとした。沸点の低いものから、

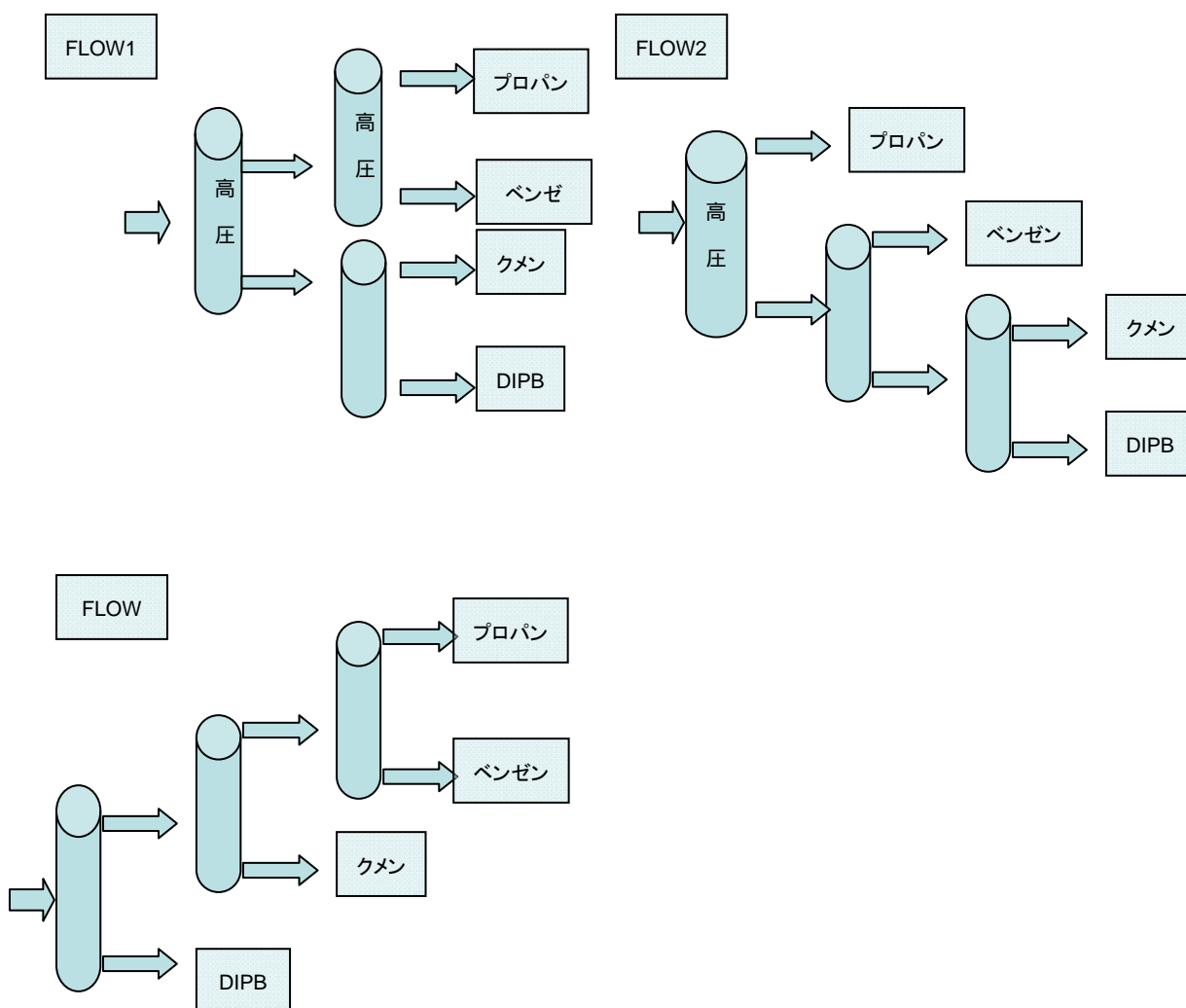
プロパン n-ヘキサン ベンゼン クメン DIPB

である。

つまり、5成分を分離するためには、4本の蒸留塔が必要である。
 しかし、実際に4本で設計すると、ベンゼン-n-ヘキサン間分離の蒸留塔において、
 ベンゼン-n-ヘキサン間の沸点がかなり近く、蒸留塔で分離するにはあまり適して
 いない。
 分離効率の割に蒸留塔体積が大きくなり、コストがかかる。
 n-ヘキサン量が全体の0.1~0.2%程度の量である。
 などの理由から、ベンゼン-n-ヘキサン間の分離は分配器でパーズするのみにした。
 具体的なコスト比較はコスト計算の項で示すことにする。

4.2 分離順序

分離には、プロパン-ベンゼン間、ベンゼン-クメン間、クメン-DIPB間の蒸留塔が必要となる。分離の順序を考えると全部で5つのフローが考えられる。



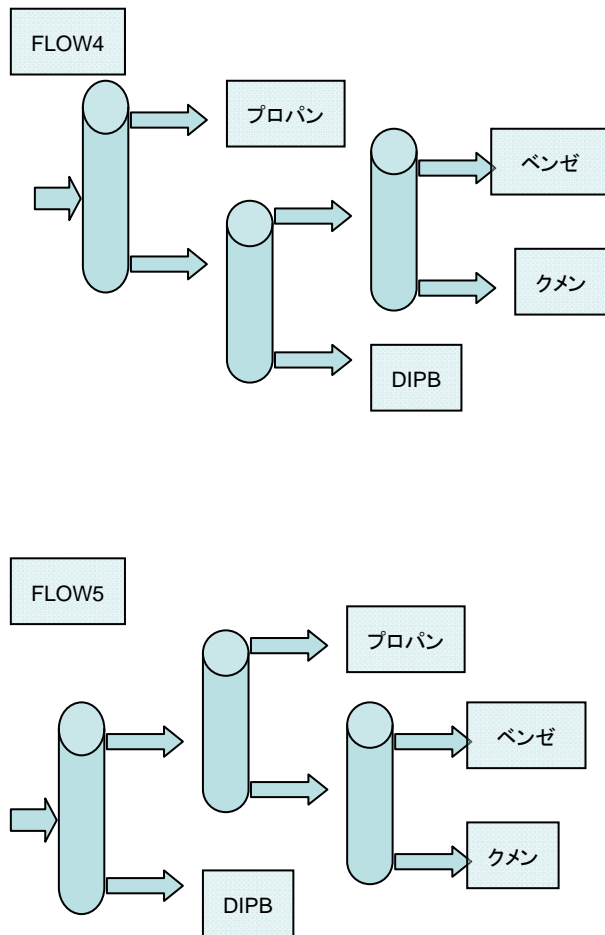


Fig4.2.1

5つのフローについて、2段階で検討してフローを決定した。

Fig4.1を見ると、DIPBの量が他に比べ少量であるので、DIPBを上流で分離するのは装置、熱コストの両方の点で不利である。よって、FLOW3, FLOW4, FLOW5は詳細に考える必要はない。

FLOW1, FLOW2であるが、気液平衡線を見ると、どの分離も蒸留塔を低圧で運転するほうが有利であることがわかる。ただし、プロパン-ベンゼン間の分離は塔内圧力を下げすぎるとコンデンサー温度が、低くなり(仮に運転してみると0以下となった)結果、0以下となるため高価な冷媒を使用することになる。つまり、冷却水で冷却コストを下げようとする最適な塔内圧力が必要となる。これについて、FLOW1は蒸留塔2本を高圧の状態で行うことや、また高圧を保ったままベンゼンを低沸点成分側に炊き上げる必要が出てくる。

一方 FLOW2 に関しては、プロパン-ベンゼン間の分離を最初に行うことにより FLOW1

の問題点を解決している。

よってこの2つの理由から FLOW2 を採用した。

トランスアルキレーション行程

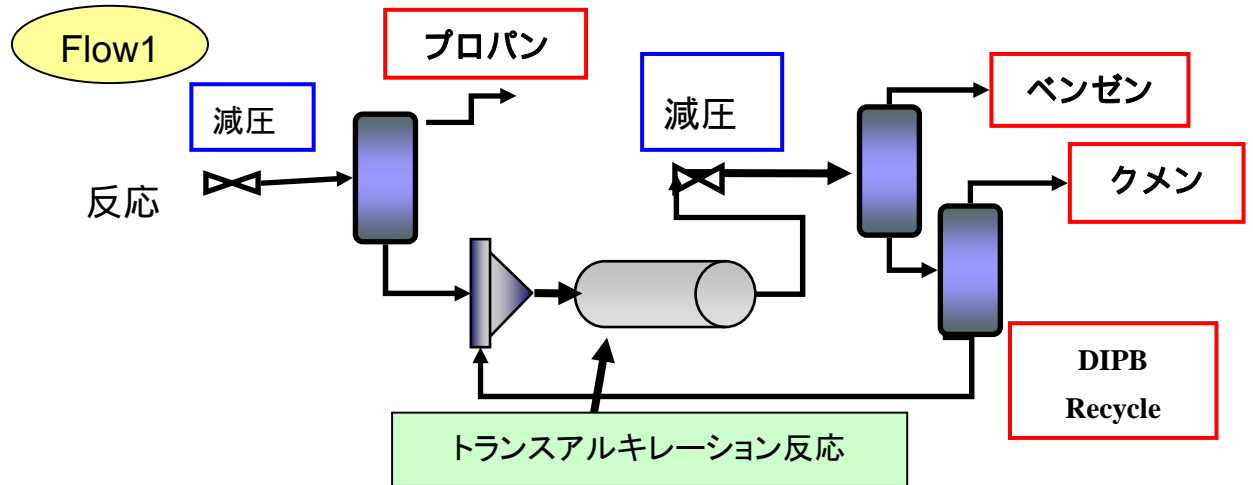


Fig3.4.1

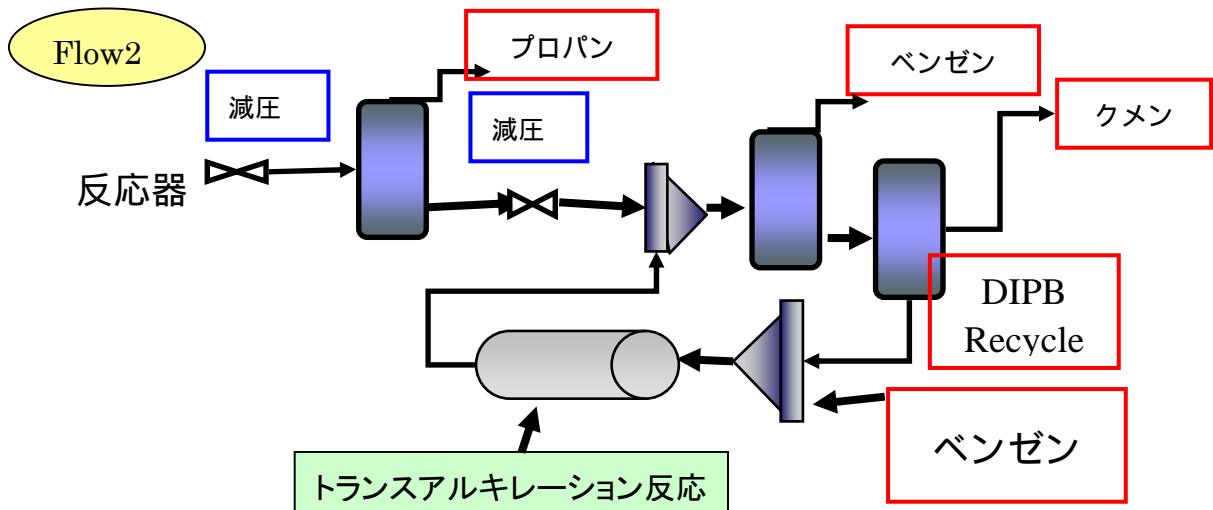


Fig3.4.2

FLOW1、FLOW2について考えてみました。

プロパン分離後にトランスアルキレーション反応を行う FLOW1

Recycle-ベンゼンを使用しトランスアルキレーション反応をおこなう FLOW2

FLOW 内にクメンを含まず平衡反応が進行しやすい Flow2 を採用！

プロパン-ベンゼン間の分離は塔内圧力を下げすぎるとコンデンサー温度が、低くなり（仮に運転してみると0 以下となった）結果、0 以下となるため高価な冷媒を使用することになる。

そこで、塔内圧力を変化させて、熱コストとユーティリティコストの和のコストの変化を調べてみた。

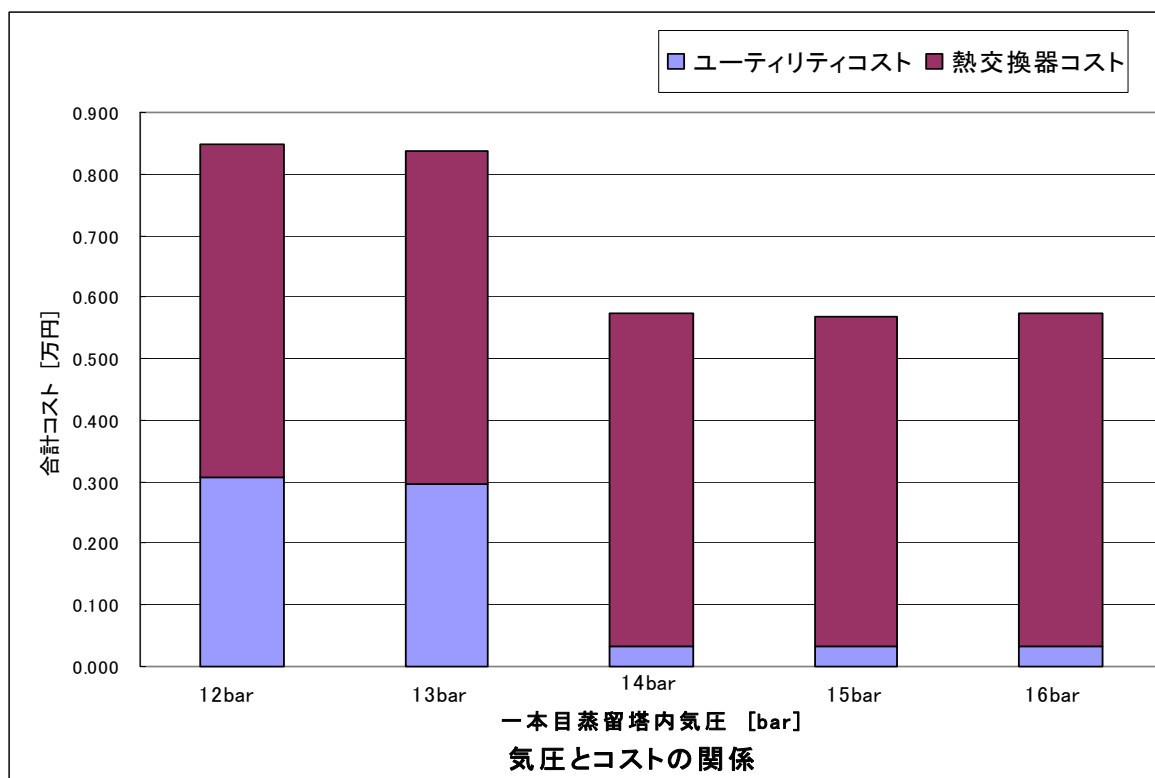


Fig4.4.1

13bar 以下の場合、コンデンサーの温度と冷却水の温度差が小さいため、冷媒を使用しなければいけなかった。徐々に気圧をあげてみたところ、15bar の時、コストが小さくなった。

2 本目以降の蒸留塔では、気圧を上げてしまうと、リボイラーの温度が高くなってしまい、それに対するスチームが作ることができないので、それぞれ、大気圧下で運転した。

それぞれでの 蒸留塔でコストと段数で最適化をした結果を下のグラフ(Fig4.4.1 Fig4.4.2 Fig4.4.3)に示した。

またその時の蒸留塔における段数などをTable4. 4. 1Table4. 4. 2Table4. 4. 3 に示した。

一通り終えてコストを考えたところ、プロピレン原料費、反応器建設費、触媒費を比較すると、総コストはプロピレン原料費に依存することがわかりプロピレン原料費を抑えるため、できるだけ収率を上げるように反応器を設計する方針にした。

化学工学会 第41秋季大会

第8回 ソフトウェア・ツール学生コンテスト

プロセス設計部門 審査用資料

東京工業大学理工学研究科化学工学専攻

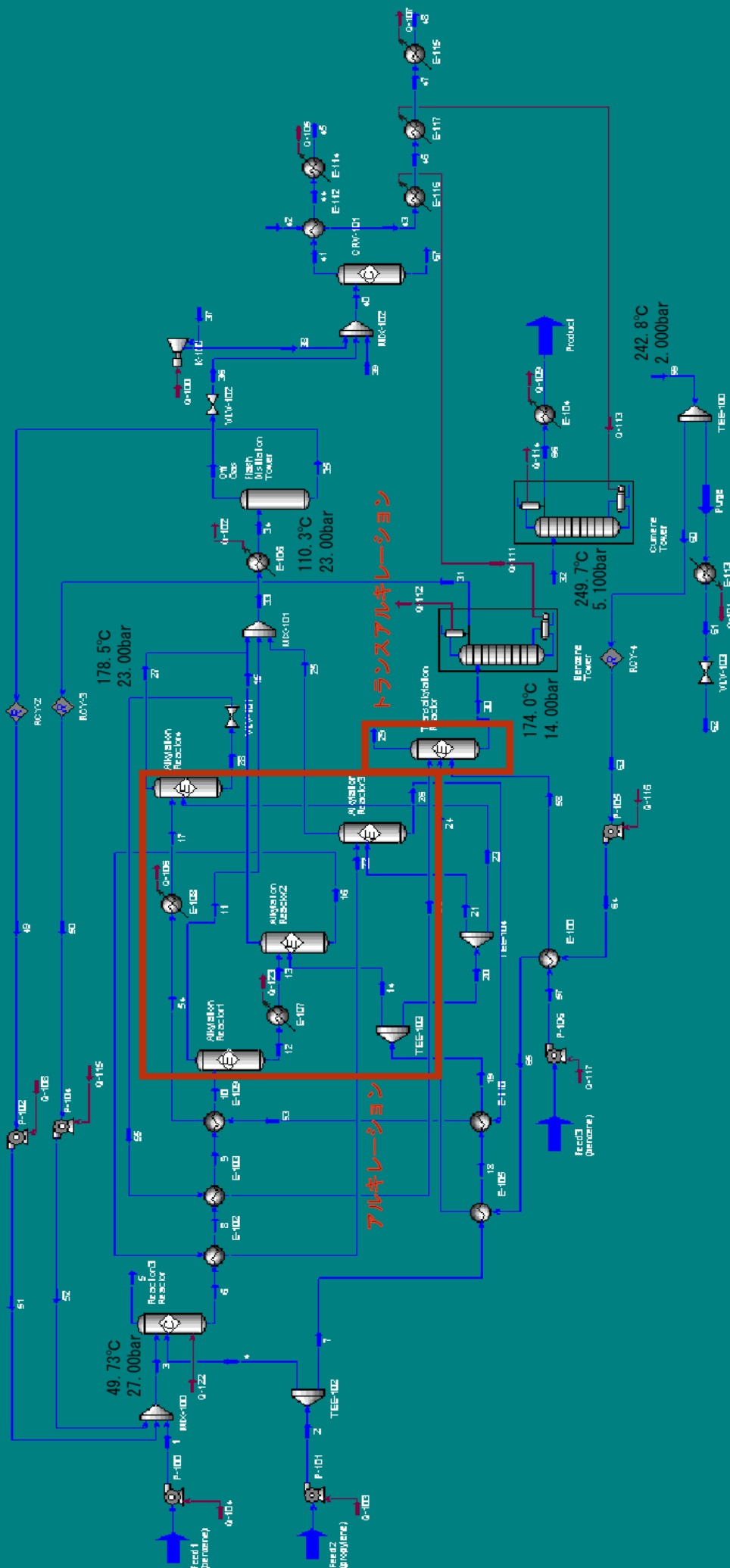
関口研究室

高橋 祐介

石毛 克弥

キム サンユン

(1) PFD



(2)物質収支 Stream-Data-Table

Stream No.	3	27	30	34	32	59
圧力[bar]	27	23	14	23	5.1	2
温度[°C]	4.973E+01	1.785E+02	1.740E+02	1.103E+02	2.497E+02	2.428E+02
流量[kmol/h]	6.113E+02	4.125E+01	7.401E+02	2.506E+02	4.463E+02	1.862E+02
液化率[-]	1.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	5.033E-01	1.000E+00	1.000E+00
組成						
Propene	2.728E-01	3.569E-09	6.210E-10	1.613E-09	6.232E-23	1.917E-42
Benzene	7.674E-02	2.029E-01	2.537E-01	2.872E-01	4.206E-04	9.950E-14
Cumene	2.381E-04	4.250E-02	3.515E-01	2.842E-02	5.829E-01	1.397E-03
14-iP-BZ	9.596E-06	7.623E-03	2.465E-01	2.953E-03	4.088E-01	9.796E-01
n-Hexane	3.483E-03	9.950E-03	8.976E-03	1.039E-02	1.140E-06	3.647E-17
Propane	6.441E-01	7.370E-01	1.345E-01	6.709E-01	3.319E-14	1.021E-30
DiphenylC3	8.907E-09	3.753E-07	4.788E-03	3.933E-07	7.939E-03	1.903E-02
Hydrogen	2.607E-03	6.455E-06	1.249E-07	1.070E-04	7.992E-33	8.352E-33

(3)本課題でのプラントコスト推算結果

(3-1) 反応器

今回のプロセスでは、アルキレーション反応で4つ、トランスアルキレーション反応で1つの平衡反応器を使用した。それぞれの入口、出口での流量、温度、組成より、PFR(Plug Flow Reactor)を使用してシミュレーション反応を行い、最適反応器サイズを決定した。その後、触媒空隙率を用いて触媒量を決定した。

(3-2) プラント建設費

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$2,286,533
Trays	\$113,602
Heat Exchangers	\$682,135
Pump with Electric Driver	\$213,011
Compressor	\$2,305,394
Compressor Driver	\$0
Furnace	\$636,879
Total Bare Module Cost	\$6,237,554
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$7,360,314
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2008	575.40
Plant Construction Cost in 2008	\$11,086,713

図 3-1 プラント建設費

	触媒量(m ³ /year)	コスト(\$/year)
Alkylation Reactor1	24.54	24543.69261
Alkylation Reactor2	24.54	24543.69261
Alkylation Reactor3	12.57	12566.37061
Alkylation Reactor4	24.54	24543.69261
Transalkylation Reactor	125.66	125663.7061

図 3-2 触媒量およびコスト

(3-3) 運転費

	使用量(ton/year)	コスト(\$/year)
原料(ベンゼン)	171272	112525704
原料(プロピレン)	128240	94384640
ユーティリティ(冷却水)	43039757	636988
ユーティリティ(ボイラー給水)	99443	243636
	使用量(kWh/year)	
ユーティリティ(電力)	8829956	529797
	使用量(GJ/year)	
ユーティリティ(燃料)	4551	50518

図 3-3 原料、ユーティリティの使用量およびコスト

(3-4) プロセス設計評価結果

以上の結果より年間の総コストを考察する。題意よりプラント償却期間は10年間なので、触媒のコストとプラント建設費を考慮すると、年間の総コストは\$209501141と考えられる。今回のプロセスでは、1年間に250005148 kgのクメンが生産されるので、クメンの原価は0.838[\$/kg]と求めることができる。また、建設や運転するには人件費、安全点検等のコストがかかると考えられるので、実際に設計するときには、このような事項も変動費に加えて検討する必要がある。

(4) 今回の設計結果に至った経緯

(4-1) 反応器

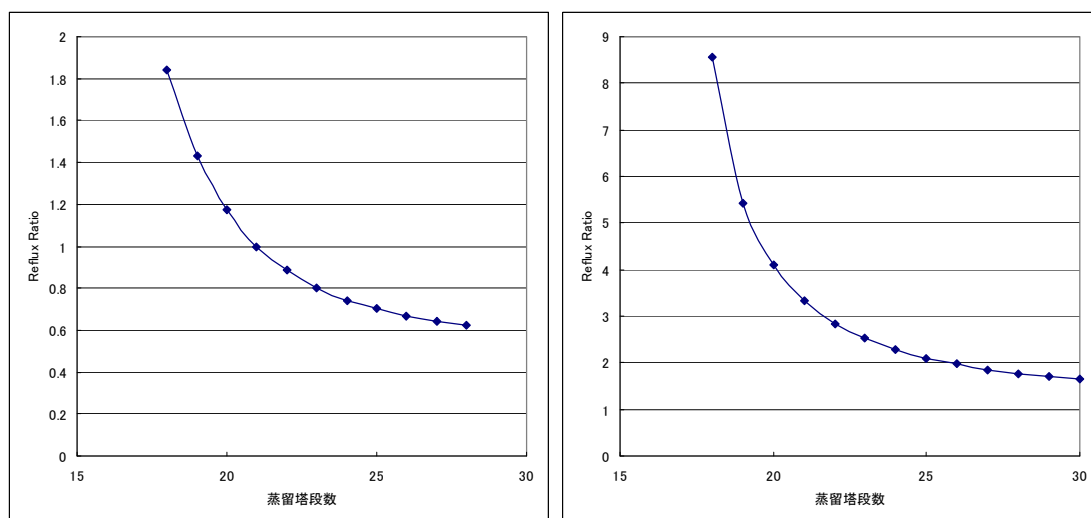
アルキレーション反応の(C)の反応が反応器入り口のベンゼンモル流量に対し転嫁率 0.03%で起こることが条件としてあったので、最初にコンバージョンリアクターを設置し(C)の反応だけを起こさせた。アルキレーション反応器が断熱であることから、原料のプロピレンを何回かに分けていくつかの反応器に入れ、各反応器の入り口温度が 120 度、出口が 180 度以下になるように設計した。その結果アルキレーション反応器は四台になった。プロピレンの各流量は試行錯誤により決定した。

トランスアルキレーション反応器の入り口ではアルキレーション反応器出口流体のほか、新たに原料のベンゼンを加えた。

(4-2) 蒸留

反応器の気体側の出口流体をフラッシュ蒸留してプロパンをプロセスから排出した。フラッシュ蒸留塔に入る前の温度は試行錯誤して求めた。フラッシュ蒸留の液側はリサイクルしてアルキレーション反応器に回した。

蒸留塔の分離順序は、分離困難度を計算することにより決定した。分離困難度は、ベンゼンを先に分離した場合は約 270 で、DIPB が先の場合は 320 であった。一つ目の蒸留塔で分離した後のベンゼンはアルキレーション反応器に回した。二つ目の蒸留塔で分離した後の DIPB はトランスアルキレーション反応器に回した。一つ目の蒸留塔の段数は図 4-1(a) から 25 段、二つ目の蒸留塔の段数は図 4-1(b) から 28 段と設定した。また蒸留塔の操作圧力はコンデンサー側の温度が冷却水だけで冷やせる温度になり、リボイラー側の温度が HP Steam で加熱できる範囲の温度になるように設定した。



4-1(a)

4-1(b)

図 4-1 蒸留塔の段数と Reflux Ratio の関係

(a)一つ目の蒸留塔、(b)二つ目の蒸留塔

(4-3) 熱交換器

熱交換器網の設計のため Grand Composite Curve を作成した。ここでは蒸留塔の低温流体の温度が高いため熱交換はできないこと、そして他の流れだけで十分に熱交換できることから蒸留塔の duty を除いたものを作成した。図 4-2 から、高温流体のエネルギーを回収することができるため、図 4-3 のように熱交換器網を組んだ。

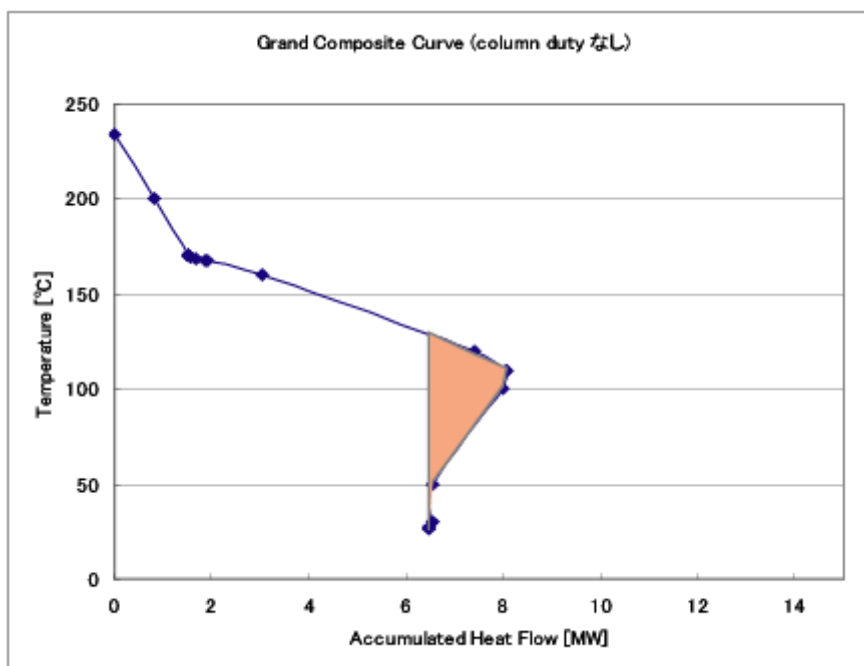


図 4-2 Grand Composite Curve (column duty なし)

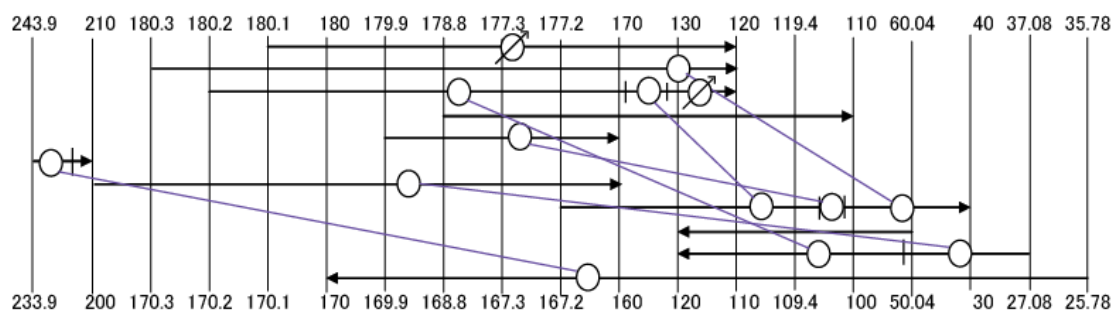


図 4-3 熱交換器網

(4-4) オフガス

蒸留塔における加熱のユーティリティのコストが高いことからフラッシュ蒸留におけるオフガスを燃焼させ、その熱を利用することを考えた。この熱を利用するときにはボイラー給水を用い、オフガスにブタンも加えて燃焼させることにより、二つの蒸留塔の熱を補うことにした。ここで、コンバージョンリアクターの圧力損失を 0.5bar と仮定し設計した。

オフガスを利用せず排出した場合は、オフガスを冷却させるクーラーの建設費を固定費、蒸留塔のリボイラーのユーティリティのコストを変動費とし、オフガスを再利用する場合は、クーラー、熱交換器、コンプレッサー、コンバージョンリアクターのコストを固定費、燃料であるブタン、ボイラー給水、コンプレッサーの電力、クーラーのユーティリティのコストを変動費とし、どちらが有利であるかを検討した。オフガス排出の場合の固定費は1996年基準で1.22万ドル、変動費は年間546万ドルであり、オフガス再利用の場合の固定費は667万ドル、変動費は年間141万ドルであった。建設費を10年で原価償却するとしてコストを比較するとオフガスを利用したほうが有利であることがわかったのでプロセスに取り入れた。図4-4からわかるように、2年目の途中から固定費を含めてコストを削減することができた。

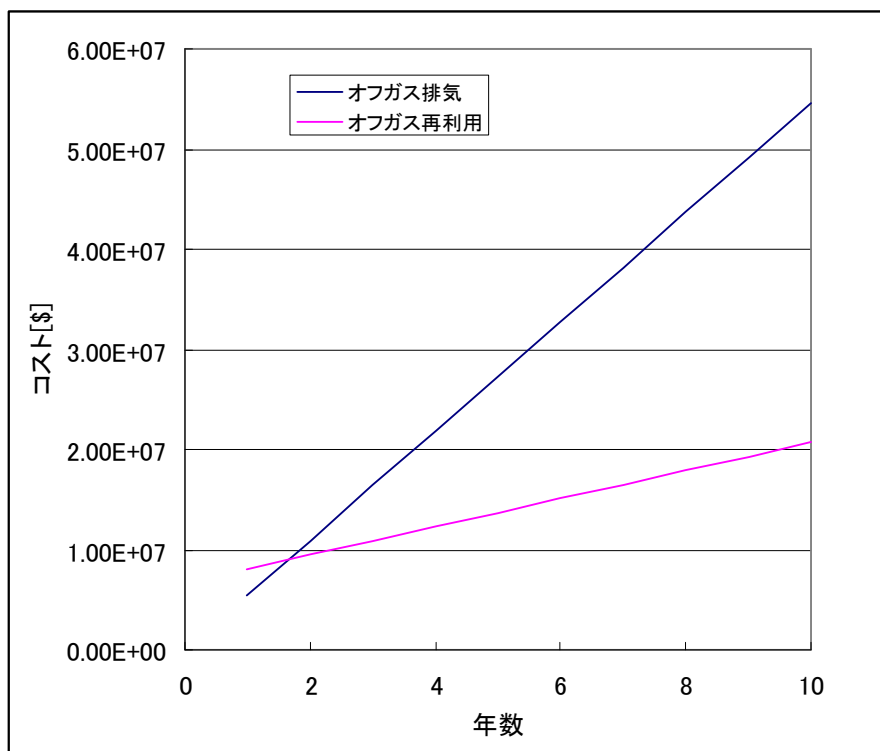


図 4-4 オフガスのプロセスにおける運転年数とコストの関係

2. モデリング・シミュレーション部門

課 題

化学工学の分野、もしくは自然現象や社会現象を対象として、現象を数式モデルを用いて表現し、シミュレーションした結果を発表ください。なお、モデリング対象は自由とし、自分の研究に関するものでもよく、解法のツールはプログラミング言語、Excel、ソルバー、シミュレーションソフトなど何を用いても構いません。なお、研究成果の発表が目的ではなく応募者がモデリング・シミュレーション・ソフトの汎用化などシステム的な観点でどのように創意工夫したかを課題としていますのでご注意ください。(研究成果は通常の研究発表で行ってください)

評価方法

作成したモデルやシミュレーションの中身について評価します。モデリングにおいて工夫した点、従来のモデルとの違い、ツールでの実現方法などをアピールしてください。仮定の与え方やモデルの範囲、その詳細度は適切か、現象の表現が工夫されているか、ツールの応用技術は優れているかなどで総合的に評価します。なお、優れた発表は表彰いたします。

1件の応募があり、本ページ下部に応募(8月5日締切)時に記載の概要を示す。また次ページ以降に提出資料要項を掲載する。発表要旨(9月2日締切)については、9月4日5:00 pmの時点で未提出である。

概要(300字以内)

(11) 名古屋大学 鈴木 博貴

二次元(平面)乱流噴流に関する知見は工学的に有用である。このため、実験計測されたデータを用いた解析がこれまでに広く行われている。一方、数値計算による検討は非常に少なく、かつその境界条件は適切に考慮されていない。

乱流噴流は流れの空間発展にエントレイメントを伴う。しかし、このエントレイメントが、これまでの計算では適切に考慮されていない。

本研究では、エントレイメントが適切に考慮された、空間的に発達する二次元乱流噴流場に関する直接数値計算を行い、モデルの影響のない系の数値解を求解する。