

プロセスの工業化と シミュレーション技術

アスペンテックジャパン 熊谷 善夫*

はじめに

アメリカ化学工学会 (AIChE) が 1980 年代に行った化学工学の将来に関する調査報告書(通称 Amundson Report)に、報告当時の 20 年後にあたる 2008 年 4 月のプロセスエンジニアの一日を想像している箇所がある¹⁾。プロセスエンジニアであるその女性は、人工知能技術と数学モデルが統合されたコンピュータシステムを使うことにより、目的化合物を入力し、初期のプロセス設計を数十分で完了する。同時にコンピュータからは、設計結果の不正確な点、最終案に残らなかった他のプロセス案も示されるので、彼女はどの案をさらに詳細な検討をすべきかを決定することができる。数個の案を選んで、コンピュータに詳細検討を実行するように指示すると、その結果詳細検討に足りない実験データ、実プラントの制御のために不可欠なセンサーなど、追加に必要な情報が表示される。彼女はさらに、実験管理のコンピュータに自動実験を指示し、他の人工知能コンピュータでの検索によりどこの会社がそのようなセンサーを開発しているかを知ることができる。2 年後にプラントは完成する。そこでは、運転データがダイナミックシミュレーションモデルのパラメータチューニングに用いられて、プラント運転が行われる。またプラントと挙動が同じモデルを用い

ることで、生産のスケジューリングも同時に検討することができる。彼女は短期間に新しい事業を立ち上げることに成功した...

これらのいくつかはすでに実現されている。比較的単純な分子の気液系連続プロセスで蒸留を用いた分離精製の場合は、実験なしにかなりの精度でプロセスの性能とコストを計算で決めることができる。運転におけるリアルタイムのダイナミックシミュレーションについても応用は始まっている。

いっぽう、報告書が予測した 21 世紀初頭と比べると、異なる点もある。2002 年の現在プロセス産業では、環境・安全へのより強い責任が求められる、1 系列能力が年産 100 万トンへとエチレンプラントの大型化が進み、純度だけが品質でない機能材料へのニーズが高まっている。

平衡物性、単位操作、反応操作、速度論、プロセス工学、流体解析などの化学工学諸分野の発展とコンピュータ技術の発達が発展がシミュレーション技術を大きく発展させた。

本稿では、筆者の経験の制約から主としてプロセスシミュレーション分野に絞りを絞る。過去の成果と今後開発が求められる点について論じたい。

シミュレーション技術とは

プロセスの工業化ではさまざまなスケールでの実験が行われ、得られた事実に基づいた設計計算でプラントを建設する。実験が中心の工業化初期においても、机上検討も多く行われ、典型的な検討には以下のようなものがある。

取り扱う物質の性質(物性)、装置構造、操作条

オートメーション

*くまがえ よしお：代表取締役社長 工学博士
〒102 0083 東京都千代田区麹町4 1 5
TEL 03(3262)2624 FAX 03(3264)6425

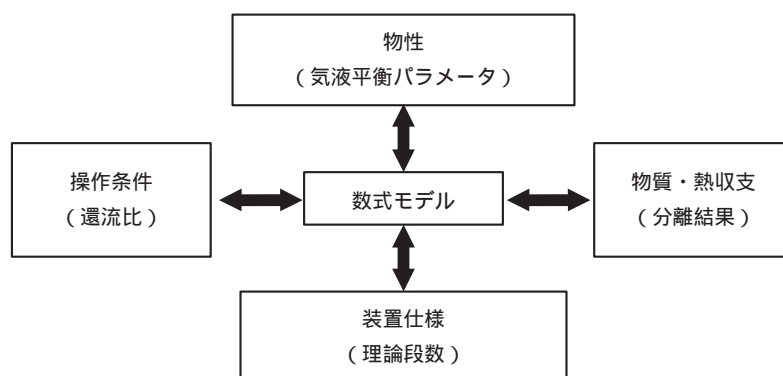


図1 シミュレーションの要素

(カッコ内は、蒸留塔の場合の例)

件が決められた時、数学モデルに基づいて物質がどのように分離されるのか(物質・熱収支)を計算で知りたい。

装置構造を他の条件(物性、操作条件、物質・熱収支、数学モデル)から決定したい。

実験結果と実験条件から、現象を記述した数学モデルのパラメータを決定したい。

与えられた装置で、目的とした分離を達成するために操作条件を最適化したい。

実験データの挙動を説明できる数学モデルを確立して、他の条件下での挙動を推定したい。

本稿では、上記のように物性、装置、操作条件、物質・熱収支、数学モデルのどれかを他の情報から決めることをシミュレーション技術であると広義に解することにするが、物性、装置、操作条件、物質・熱収支、数学モデルの関係を図1に示す。このように数学モデルを中心にしたさまざまな検討の全体がシミュレーション技術であり、物性、数値計算、単位操作の要素技術で支えられている。

物性データベースとパラメータ推算を内蔵した汎用シミュレータが登場してからプロセスの工業化は大きく効率化されたが、Amundson Reportの予想範囲を越えてシミュレーション技術に対する期待と要求は高まっている。

プロセスの工業化のステップ

プロセスの工業化は、研究開発、設計保全、プラント運転、環境安全などのさまざまな技術要素によって支えられているが、検討のステップを表1に示す。

工業化は、実験室やプラント自体で行う実証的な検討と、計算を主体に行う机上検討を補完的に

表1 工業化のステップ

検討段階	内容
小スケール研究	新規化合物の発明(スクリーニング)、環境安全性・防災物質(安全性研究)、合成ルート・処方の確率(応用研究)、分析・物性研究、商品化研究
サンプル製造	需要家への品質打診、大量生産の問題点
概念設計	応用研究結果を利用したプロセス概要検討
パイロット実験	応用研究結果の確認、単位操作・機種・材質の選定、設計データ(流動状態、物性)、スケールアップ則の検討、設計可能範囲の検討
データ解析	設計パラメータ(ケーキ比抵抗etc)の解析、定性的知見のノウハウ化、プロセスの構成決定、スケールアップ則決定
基本設計	フローシート(工程分割と機種の考え方)、単位操作計算、プロセスの静・動特性、ノウハウ(スケールアップ)の考え方、サイジングの許容範囲)、最適化
詳細設計・建設	構造(強度、インターナル)決定
運転・合理化	安定操業条件と外乱の影響、スタートアップ・停止方法、最適コスト条件、ボトルネック解析

用いながら進められる。工業化の前半においては実験を主体とした実証的な検討が重要であり²⁾、新しい発見は特許という成果になる。いっぽう、後半になると実験検討に加えて机上検討も重要になってくる。コンピュータが現在ほど普及してなかった過去においても机上検討は活発に行われ³⁾、実験的な研究を補完することで、プロセスの工業化を支えていた。

以下ではプロセスの工業化の主要なステップについてその特徴を見てみる。

1. 概念設計

小スケール研究が完了してから商業生産プラントが完成するまでを一つのプロジェクトと考えた時、最もコストが集中しているのは機器調達・建設段階である。概念設計はその業務自体にはコストがあまりかからないが、その検討結果はプロジェクト全体のコストを大きく左右する。運転方式として連続とバッチのどちらを選ぶのか、反応方式、分離方法、スケールアップの難易、投資コストと製造コストなど検討すべき課題は多い。これらの検討を限られた情報で行い、費用と時間のかかるパイロットプラントの目的を明確にすることが求められる。

さまざまなプロセスの代替案を検討する概念設計段階では、現在プロセスシミュレータを用いた検討が一般化している。蒸留操作を中心にした分離プロセスは、実験なしに計算でかなりの部分を検討することが可能である。たとえば、共沸成分を含む混合物の蒸留分離、熱交換システム、さらに設備投資額の推算についてはシミュレーション技術の応用が一般化している。

ポリマーについてはプロダクト開発(工業化の前半)とプロセス開発(後半)が同時に進行する部分があり、工業化の初期からかなり精度の高い検討が求められる。この必要性に応えるために、ポリマー分野のシミュレーション技術が最近進展してきている。

2. パイロット実験

プロセスの基本的な構成を決めた後では、スケールアップ則を確立することが最も重要な課題で

ある。商業生産プラントにおいて、品質と収率を小スケールと同じにするには装置・操作条件をどのようにする必要があるのかを実験を用いて明らかにする段階である。

また、操作条件の許容範囲を明らかにすることも必要である。たとえばコンデンサの操作温度によって、高温では製品が着色する、あるいは低温では固体が析出するような場合は、詳細設計で行う機器のサイジングの前に、設計の許容範囲を実験的に明らかにしておく必要がある。

パイロット実験は多額の費用と期間を必要とするために、実験条件を的確に選ぶことが何より重要である。建設するプラントの設計データ、リサイクルによる不純物の蓄積、スケールアップ則検討を予めシミュレーションで行っておくことが必要である。

3. データ解析

気液系、固液系のような異相系の単位操作では、スケールアップすることで品質、収率が変化することが多い。対象としている現象のメカニズムを定量的に把握することが、トラブルのないスケールアップの必要条件である。より一般的にいえば、数学モデルを確立することで異なる条件下での挙動を正確に推定することができるようになるが、スケールアップもその応用の一つと考えることができる。数学モデルを作る一般的な手法はまだ開発されていず、各種の方程式解法ソフトを利用して試行錯誤的にモデル開発が行われている。

プラント設計のために、実験データを解析して設計パラメータ(ろ過の場合のケーキ比抵抗 etc)を決定することも必要である。気液平衡のように共通性の高いデータについては、一般のプロセスシミュレータにパラメータ回帰機能が内蔵されている場合が多い。それ以外のパラメータ回帰や反応解析については、各種の方程式解法ソフトの利用が広がってきている。

4. 基本設計

商業生産では、需要家に約束した品質と供給能力を達成し、さらに製造コストを支配する収率を保つことが求められる。基本設計では、品質・能

力・収率を達成できるプロセスフロー，機器，操作条件を決定するとともに，品質・能力・収率間にある特性(収率を犠牲にすれば品質は向上できる etc)も明らかにする必要がある。

基本設計は，現時点でプロセスシミュレータが最も広く用いられかつ最も効果を上げている分野である。

5. 運転・合理化

プラントは，スタートアップ，シャットダウン，外乱による変動など動的な要素を取り扱うことが多い。これらは環境・安全に影響があるだけでなくコストアップの要因でもある。稼動した後はプラントに固有な情報を把握することが重要である。プラントの合理化で最も多いのは，増産(デボトルネック)，省エネルギー，環境・安全対策などである。

いずれの場合においても最も重要な情報は，機器の能力限界であり，さまざまな機会を利用して情報の蓄積に努める必要がある。

運転におけるシミュレーション技術の応用は，測定されていない部分のプラントの運転状態を推定する，ダイナミックシミュレーションを用いて制御性を検討する，オペレータ訓練，安全性検討を行うなど最近大いに進展してきた。

シミュレーション技術と今後の課題

1. プロセス産業が直面する課題

石油および石油化学産業においては，業界の再編によるプラントの大型化が続いている。アメリカの石油精製企業数は吸収合併により，過去50年間コンスタントに減少し，過去20年間でその数は半減した。石油化学の代表である高密度ポリエチレンでは，世界最大の生産会社はDow UCC社であり，その生産能力は年産800万トンにも上るが，この数値は日本の総エチレン生産量以上である。生産規模が拡大したことから数パーセントの差が利益の増減に大きく影響する。そのため，プラント設計と運転においてより精度の高い扱いが求められるようになり，各種シミュレータの改良も進んでいる。

ファインケミカルおよび製薬産業においては，

既存製品の機能を新製品で代替・改善することが求められており，新規製品の迅速な開発・上市が重要である。そのため企業の関心は，石油・石油化学産業に比べると，工業化の上流である小スケール研究からパイロット実験に多くの関心が払われている。特に目標化合物とその合成処方が最も重要であるが，化合物自体がポリマーや複雑な構造を有する物質が多く物性の取り扱いが難しい。

多額の費用と期間を必要とするパイロット実験を省略して製品上市を早めようとするが，一方ではトラブルのないプラントを設計することが不可欠なので，データ解析と概念設計が従来にも増して重要になってきた。

プラントエンジニアリング産業においては，石油，石油化学，ファインケミカル，製薬などの従来分野に加え，油田・ガス田まわりのプラント建設が重要性を増してきている。採掘を長期的に安定して行うための操業条件の検討，採掘した原油・ガスの輸送前の処理などシミュレーション技術の対象が拡大している。

2. シミュレーション技術の課題

これまで述べてきた分野も含め，各種シミュレータはより優れたアルゴリズム，他の設計ソフトとのインタフェース，使いやすいソフトウェアを目指して改良が続けられている。以下ではプロセスの工業化に大きなインパクトのある課題について述べる。

(1) 物性

20年前は平衡物性，輸送物性を便覧と手計算で行うことが一般的であったが，物性データベースを内蔵した汎用シミュレータの登場により，物性値の検索も推算も大幅に効率化された。分離プロセスの検討の基礎になる気液平衡は，SRK式に代表される3次状態方程式とWilson式に代表される局所モル分率活量係数モデルが，工業化に大きな寄与をしてきた。

現在増えつつある極性の高い化合物や会合を伴う系に対しては，“溶液をミクロ的に見ると，分子が均一に分散しているのではなく局所におけるモル分率を考慮する必要がある”という考え方は不十分な場合がある。化学反応により新しい化

学種が生成していることを考慮できる⁴⁾(いわゆる Chemical Theory)ソフトウェアが必要である。

(2) プロセス合成

蒸留塔の分離順序を決める、あるいは最適な熱交換ネットワークを設計するようなプロセスの構成を決める分野はプロセス合成と呼ばれ、概念設計段階で検討されることが多い。蒸留シーケンスと熱交換操作についてはそれぞれ、蒸留残渣曲線を用いる方法⁵⁾、ピンチテクノロジーによる方法⁶⁾が広く用いられている。

プロセス合成に対しては、最適化手法を用いることも提案されている。考えうるプロセスの構成を重ね書きしたフローシートを考え (Superstructure)、機器とそのつながりについては、“有るか無いか、有るなら何個か”という整数問題を、操作条件については非線形問題を解く (MINLP) 方法である⁷⁾。同じ単位操作で構成される蒸留精製系、ユーティリティプラント、反応器群の最適化問題に対しては有効な方法であり、汎用シミュレータの機能として追加されることが望ましい。

(3) 現象を記述する数学モデルの開発

スケールアップに限らず、異なる条件下でプロセスの挙動を推定することは、新しい合成技術の確立に次いでプロセスの工業化の最も本質的な部分である。一般的な理論を特定の場合に修正することで数学モデル化を図ることが多いが、試行錯誤的な要素も多く残っている。エンジニアの創造性が最も求められる分野であり、非線形・常微分、偏微分方程式解法機能、データマイニング(データ解析)機能、物性推算を含めたプロセスシミュレータとのリンク機能などさまざまな道具を簡単に使えるようなソフトウェアが望まれる。

(4) 流体解析

装置内の流動は、流体解析ソフトウェア(CFD)の発達により、異相系や攪拌機のある場合にも流れの状態を計算することができるようになってきた。最も関心のある分野は反応操作のスケールアップであり、流動状態と反応成績の関係を同時に解くことができれば応用範囲はきわめて広い。そのためには、流動ネックになっていない条件下で反応速度を決定する必要があり⁸⁾、実験手法と解

析手法について、今後いっそうの発展が望まれる。

おわりに

1950年代に始まった日本のエチレン生産は、50年を経た現在、エチレンを年間700万トン生産し誘導体として各種ポリマーやファインケミカル製品を生産するに至った。この間多様な特性をもつ化合物が開発され、さまざまな温度、圧力、装置を用いたプラントが設計され運転されてきたが、プロセスの工業化は、研究開発、設計保全、プラント運転、環境安全などの技術要素によって支えられ、シミュレーション技術も大きく寄与してきた。

Amundson Report から15年経った現在、“難しい操作条件でない限り、計算するよりも実験をした方が結局は早くて確実だ”という見方は過去のものになりつつある。しかしいっぽうでは、残された課題も多く、今後への期待も高い。今後の20年間のシミュレーション技術をイメージして、技術開発の方向の議論が活発になることを期待したい。

参考文献

- 1) Committee on Chemical Engineering Frontiers: “Frontiers In Chemical Engineering (通称 Amundson Report) (National Academy Press) 1988
- 2) 宗像英二: “化学の研究と工業化”(日刊工業新聞社) 昭和39年
- 3) 西村肇, 矢木栄: “化学プロセス工学”(丸善株式会社) 昭和44年
- 4) プリゴジヌ, デフェイ: “化学熱力学”(みすず書房) 1977年
- 5) 松山久義: “不均一2成分共沸物を利用する共沸蒸留プロセスのエントレーナの選択法”旭硝子工業技術奨励会研究報告, p255, 40, 1982
- 6) 巽浩之, 松田一夫: “ピンチテクノロジー 省エネルギー解析の手法と実際”(省エネルギーセンター) 2002年
- 7) T. F. Yee and I. Grossmann: “A Screening and Optimization Approach for the Retrofit of Heat Exchanger Networks” Ind. Eng. Chem. Res. 1991, 30, 146-162
- 8) J. R. Bourne and G. Tovstiga: “Micromixing and Fast Chemical Reactions in A Turbulent Tubular Reactor” Ind. Eng. Res. Des. Vol. 66, January 1988