

シミュレーションとモデル化の成果と課題

(株式会社 preFEED)(正)熊谷 善夫

<http://www.prefeed.com> / yoshio.kumagae@prefeed.com / kumagae@gakusikai.jp

1. はじめに

プロセス産業では経済効率のためのスケールメリットの追求が行われて来たが、最近では、プラントの大型化が過去にないレベルで進行している。LNGプラントにおいては、数年前に 300 万トンプラントが大型と呼ばれたが、現在では 800 万トンクラスが計画されている¹⁾。ダウストリームの石油化学産業においても、現在のポリエチレンプラントは、一系 50 万トンが海外では標準となりつつある²⁾。大型化には精度の高い設計技術、信頼性のある装置技術、安定運転技術が不可欠であるが、コンピュータによるプロセスシミュレーションは設計技術を支える重要な要素になっている。

一方、年間に数トンから数 10 トンしか生産しない高機能化学品は、LNG やポリエチレンの大型化とは異なった技術課題を有している。固体を含むバッチ単位操作が多いため、プロセスごとに測定技術、解析技術、スケールアップ技術を開発している。この分野は、気液連続系で培われた厳密な解析が困難であり統一的な取り扱いが未確立であるが、ファインケミカル産業の成長が技術の進歩を求めている。

本稿では、プロセス産業の設計技術を支えるシミュレーションとモデリング技術の発展を取り上げ、将来に向けての課題を考察する。

2. 化学技術とシミュレーションの成果

2.1 戦後から石油危機まで

第二次世界大戦で壊滅的な打撃を受けた日本の化学産業は、合成肥料等の無機化学を中心に復興が始まった。1950 年代後半には、技術導入によるエチレン生産が開始され、化学産業は著しい成長を示すようになった。海外から導入された技術であっても品質・能力・製造コストを改善するにはプラントの特性を定量的に理解することが必要になり、化学工学の研究と教育も活発になった。研究が盛んになるにつれ成果は、産業界のための教科書として公開された。「化学機械の理論と計算」(1949 年)³⁾、「物性定数推算法」(1954 年)⁴⁾、「有機合成における単位反応操作」(1960 年)⁵⁾等、日本でのオリジナルな成果が利用できるようになった。

さらに、戦前の化学工学の対象が主として単体機器の設計に重点を置いていたのとは異なり、新しく出現した大型プラントの運転と改良のために、プラント全体の特性を理解するための工学が求められ始めた。この要請に応える工学としてプロセスシステム工学の研究が盛んになった。1969 年に刊行された「化学プロセス工学」⁶⁾では、“新しい化学プロセスを生み出すには、まずその基礎となる反応の発見と解明が必要であるが、それを工業的に成立させるためには関連した数多くの物理操作を必要とし、それを伴う工学的問題を解決することが必要になる。いうまでもなく、化学および化学工学はこれらのそれぞれの面を目的としており、各領域における研究の発展は目覚ましいものがある。しかしながら、工業的な新しいプロセスを作り出すにはこれで十分であろうか。プロセスを全体的にとらえ、プロセスを評価し、プロセスを組み上げて行くというような仕事がさらに必要であろう”と述べて、このような仕事を理論化し、体系化する学問としての化学プロセス工学あるいはプロセスシステム工学を提唱した。プロセスシステム工学の成果により、物性モデル、反応モデル、単位操作モデルをベースに系全体を計算するプロセスシミュレータの開発が可能になり、相互に関連した単位操作の集まりとしてプラントを捉えることが出来るようになった。

2.2 石油危機以降

1970 年代の 2 度の石油ショックを契機に化学産業には新たな課題が出現した。

(1) 資源・エネルギー問題

原油価格の高騰と共に、国内のエネルギーコストが著しく増加した。より投資効率の高い省エネルギー案件を見出すことが課題になり、ピンチテクノロジーに代表される省エネルギー技術⁷⁾が開発され、ソフトウェアの開発により産業界において広範に活用された。また大型石油化学プロセスの開発においては、より安価な原料の利用あるいは精製工程の省略を目指した高機能触媒の検討が中長期的なテーマとして取り上げられるようになり、さまざまな反応をフレキシブルにモデリングするためのソ

ソフトウェアが開発され利用されて来た^{8,9)}。さらに蒸留を用いた精製工程の開発に対しては、蒸留残渣曲線のタイプに基づいて共沸蒸留システムを構築する手法が提案され¹⁰⁾、ソフトウェアが利用できるようになった。

(2) 環境・安全問題

1960年代後半から公害問題とプラント事故が多発し、化学産業は多大の努力を払ってそれらを解決した。現在においても、環境・安全はプロセス設計の重要な課題として多くの注意が払われている。環境においては化学プラント内に比べて物質の種類が多く条件も多様である。系の挙動に対しては新しい理解が求められ、界面、電解質、高分子等について基本的な研究が盛んに行われている¹¹⁾。またプラントの安全設計を支える技術の一つとしてダイナミックシミュレーションの利用が進み始めた。

このように石油危機以降は、プロセスシミュレーションの普及と定常シミュレーション周辺の新しい手法と複雑な分子についての物性研究が大学で進み、基本設計についての体系の整備が進んだ。シミュレーションに関係の深い化学技術の発展の経過を表-1に示す。

表-1 シミュレーション関連技術の発展

西暦	化学産業	物性	単位操作	ソフトウェア
50年代	日本でのエチレン生産開始			
60年代	高度成長	Wilson, NRTL モデル提唱	化工便覧第3版('68)	Flowtran開発(Monsanto社) SimSci設立
70年代	石油危機	SRK, UNIFAC, Hayden- O'Connell提唱		"Process Flowsheeting" 出版 Hyprotech 設立
80年代	産業構造改革	Database充実 (純物質、気 液平衡)	化工便覧第5 版('88) SI単 位化	AspenTech 設 立
90年代	バブルと景 気後退	ポリマー、電 解質等への展 開		方程式解法ソフト の出現 日本 国内にシミュ レータ普及
00年代	設備の大型 化とアジア 進出		石油化学から ファイブ特有 の操作へ	PCの能力='80 年代のスパコン

3. シミュレーション・モデリング技術の広がり

3.1 プラント運転分野

プラントの長期安定運転と日本企業のアジア進出が進んでいる現在、プラント運転分野に対するシミュレーションの新たな役割が出現し、次のよう

な高度な機能が求められている。

- (1) ロバスト性： 制御への応用の場合は特に重要であり、計算が異常終了しない、解が安定して見つかるという数値計算上の要件がある。
- (2) プラント挙動の厳密な再現性： 制御への応用では現場に設置されている特定のバルブの動特性までも厳密に再現することが必要な場合がある。また、最適な反応器運転条件を計算する場合には触媒活性、冷却水の流れ等を詳細なレベルでモデル化することが求められる¹²⁾。
- (3) エンジニアリング検討への対応： 訓練シミュレータはオペレータの技能アップが主目的であるが、訓練の過程では運転手順、異常時の対応手順も検討する。安定に操業出来ている一点だけを再現するだけでなく、他の条件下での挙動を定量的に予測するには、物性、装置のモデル化等高度なテクニックが求められる。
- (4) オープン性： プラントの状態を正確に計算できると、その結果を使ってさまざまな応用が可能になる。ポリマーの品質等、結果が出るまでに測定時間を要する特性を、プラントの他の状態量から計算することでより良い制御に結びつけることが出来る。さらには、収率・原単位・製造コスト等の KPI (Key Performance Indicator) をリアルタイム計算することで収益性の向上を図ることが可能であるが、そのためには運転や経営に関する他のシステムとの連携をとるためのオープン性が求められる。

プラント運転分野に関する上記の課題に対してはベンダーサイド、ユーザサイドからも関心が高く、現在急速に応用が進んでいる。

3.2 研究開発分野

化学品の国際競争の激化に伴い、企業はより高付加価値の製品の開発にシフトしている。これにより開発研究の重要性が過去にない程度に高まっている。理由の一つは、図-1に示すように、開発研究段階までは比較的プロセス設計の自由度がある上に、検討に要する費用はプロジェクト全体から言えばかなり小さいからである。

他の理由としては、開発の焦点が、プロセスからプロダクトに移って来たことがあげられる。石油化学においては、製品スペックは組成や純度という計算による推定が比較的容易な指標であった。ここでは、ケミストがプロダクトを開発し、ケミカルエンジニアがプロセスを開発するという分担が確立されていた。一方、医薬品、複合材料、機能化学品

等に代表されるファインケミカルでは、効能と副作用、強度と耐環境性、粒度分布等、これまで化学工学理論が十分には確立されていない指標を対象としているため、サンプル提供に使った装置と同一機種を実機でも使わざるを得ない状況があり、装置の機種選定を行う開発研究段階が以前にも増して重要になって来ている。

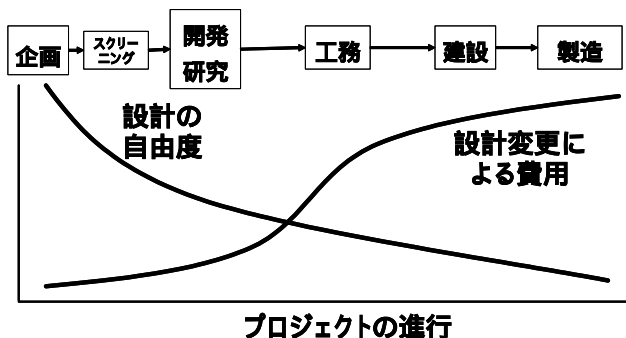


図-1 開発の進展と設計変更の経済的影響

4. 求められる新しいアプローチ

以上見て来たように、いまやシミュレーションは技術者の日常業務に不可欠の道具となった。設計段階においては、定常シミュレータに加え、周辺技術もソフトウェア化され、統合エンジニアリング環境が整いつつある。また、プラント運転に対しては高い難度の課題が多いが、多くの努力で実用レベルのソフトウェアが出来つつある。

一方、研究開発分野は、創薬等の非常に基礎的な分野については産官学連携で開発が進展している¹³⁾ものの、スクリーニングが完了してから初期設計に至るまでのステップは、その重要性にもかかわらず現時点では手法が確立されているとは言い難い。その理由としては以下の点があげられる。

- 対象物質が複素環、高分子量のような複雑な分子で、物性の測定・推算が困難である。
- 気液連続操作だけでなく晶析、吸着等、理論的にも現象の解明が進んでいない単位操作が用いられることが多い。
- 開発段階であり、処方の変更も頻繁にありその段階で厳密な設計データを取る必要がない。

このような研究開発段階での検討の困難性にもかかわらず、実プラントで企業経営に影響するほど重大な環境・安全問題が起こるケースはまれである。しかし、スケールアップの誤りによりパイロットで（あるいは実プラントで）再度条件検討を行わざるを得ないトラブルは比較的多いようである¹⁴⁾。研究開発の重要性からすると、このようなトラブルを防止することは、研究開発効率を大幅に高める可能性があり、きわめて重要な分野であり、以下に新し

いアプローチを確立するための課題を考察する。

4.1 対象分野

スクリーニングが終了し、反応のモル比・溶媒、精製法を検討した実験データが出始めてからパイロットプラントの立案までの期間であり、初期設計 (FEED; Front End Engineering Design) の前段階という意味で preFEED と呼ぶことが出来よう。この段階では研究者・技術者は、実験データ解析、現象のメカニズムを表すモデルの確立、モデルから導かれる必要な実験条件の検討、バッチ対連続の選定も含めたプロセス設計条件の決定、概念設計を行う。

4.2 手法

preFEED 段階では“与えられたデータからプロセスを構築する”ことが目的である。プロセスシステム工学はプロセスの解析と合成に関する工学として誕生したが、熱交換器ネットワーク等いくつかの分野を除いて、研究開発段階での解析と合成の手法が確立しているとは言えない。以下では、いくつかの解析手法を取り上げ考察することで、本分野の重要性を明らかにしたい。

化学プロセスの解析・合成の手法として、J.M.Douglasは、問題を最も簡単な形に分解し、その後詳細さを段階的に付け加えることが重要であるとし、“Problem Decomposition”（問題分割）という概念を提唱した¹⁵⁾。

(1) Hierarchical Decomposition (階層的分割法)

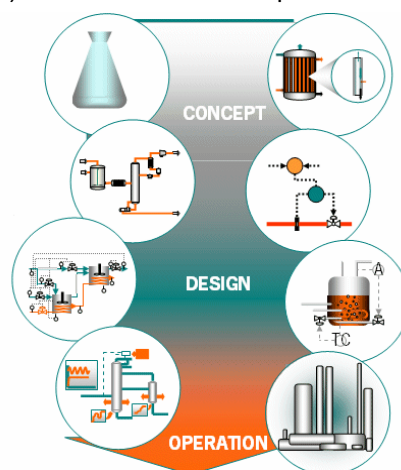


図-2 Hierarchical Decompositionの例¹⁶⁾

J.M.Douglas, PSE社¹⁶⁾, 西村¹⁷⁾, Bodo Linnhoff (Onion Diagram)¹⁸⁾等が提唱している最も一般的な手法である。プラント内の現象をミクロからマクロまでさまざまなレベルでモデル化することで系を理解しようとするものである。データが十分に揃っている場合は有効な手法であるが、研究開発段階

への応用は今後の課題である。現象レベルの分け方はさまざまであるが、図-2にPSE社の例を示す。

(2) Dynamic Decomposition (動的分割法)

西村¹⁷⁾による手法であり、反応を例に取れば、濃度が反応速度を決め、反応速度が濃度に影響するように、系は示強性変数に関する状態方程式と速度方程式の釣り合いで決まる、とする考え方であり、環境研究で有効性を発揮した。

問題分割の手法は、これら以外にも属人的なノウハウとして用いられ、数多くの研究開発の中で有効に活用されていると思われるが、公開された手法は必ずしも多くないが、まず最初にそのようなノウハウを調査・整理し、体系的に確立することが重要である。

4.3 ソフトウェア

研究開発とpreFEED分野の一部の目的に有効なソフトウェアとして物性データベース、表計算ツール、方程式解法等がある。しかしながら、プロセスの解析・合成を効率よく行うためのソフトウェアはまだ開発されていないようである。また、研究開発が多くの部門との共同作業でなされることからすると、パソコンのデスクトップのようにさまざまなソフトウェアを一元管理する機能、他の研究者や下流のエンジニアリング業務のための技術移転用ドキュメンテーションのためのシステムも必要であり、今後新しい解析・合成手法と効率的なシステムの開発が望まれる。

5. おわりに

日本の化学工学教育の黎明期である1930年頃、すでに国内の化学産業界においては、アメリカの教科書を取り寄せてプラントの設計が行われていたという¹⁷⁾。40年後の1970年代には熱交換器ネットワーク⁷⁾、共沸蒸留システム¹⁰⁾について世界トップレベルの先駆的な仕事が行われ、2度の石油危機後の省エネルギー・プロセス合理化への大きな成果となって結実した。それからさらに30年経ち、“21世紀は化学の時代”と呼ばれる現在、化学産業を支える工学の一つとして化学工学が大きな役割を果たすことが求められている。20年前に提起されたスピリット“ロマンを持って大胆にミクロの荒海にこぎ出でよ¹⁹⁾”を持って新たな課題に挑戦する時が来ていると感じる。この分野の技術者として、シミュレーションとモデル化分野における産業界での成果に少しでも寄与できればと願っている。

参考文献

1. “LNGプラント - 巨大化へのハードル(上)” 日経産業新聞 (2005年4月19日12面)
2. 経済産業省 “高密度ポリエチレンプラントについての国際比較”(石油化学産業競争力強化問題懇談会報告書、2000年7月
<http://www.meti.go.jp/policy/chemistry/index.html>)
3. 亀井三郎 “化学機械の理論と計算 初版”(産業図書 1949年)
4. 佐藤一雄 “物性定数推算法”(丸善 1954年)
5. 小田良平、村橋俊介、井本稔 “有機合成における単位反応操作”(化学同人 1960年)
6. 矢木栄、西村肇 “化学プロセス工学”(丸善 1969年)
7. 梅田富雄、城子克夫 “化学プラントの運用と省エネルギー化”(化学装置 1979年10月号)
8. <http://www.aspentech.co.jp>
9. <http://www.omegasim.co.jp>
10. 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
11. 荒井康彦、岩井芳夫、迫口明浩、長谷昌紀、東内秀機、福地賢治、三島健司 “工学のための物理化学”(朝倉書店 1991年)
12. 渡辺和則 “複雑な反応機構を伴う固定床反応器の非定常解析”(2005年3月31日 最新のソフトウェア技術セミナー 分離技術会主催)
13. 小池秀耀 “戦略的基盤ソフトウェアの開発”(化学経済 2005年4月号)
14. 日本プロセス化学会編 “医薬品のプロセス化学”(化学同人 2005年)
15. Douglas, J. M. “Conceptual Design of Chemical Processes” (McGraw-Hill, 1988)
16. <http://psenterprise.com>
17. 西村肇、岡本達明 “水俣病の科学”(日本評論社 2001年)
18. Smith, R and B.Linnhoff “The Design of Separators in the Context of Overall Processes” (Chem. Eng. Res. Des. Vol.66, May 1988, p195)
19. 化学工学協会 産業部門委員会 1016 R&D 専門委員会編 “化学工学の挑戦 ロマンを持って大胆にミクロの荒海にこぎ出でよ”(化学工学テクニカルレポート No. 8)