



第 44 回秋季大会

第 11 回 プロセスデザイン学生コンテスト

～提出資料の事後公開版～

- 開催日時 : 2012年9月21日(金) 9:00～3:20 pm
場 所 : 東北大学 E 会場 (講義棟 A 棟 1 階 A106 号室)
主 催 : 化学工学会 SIS 部会 情報技術教育分科会
共 催 : 化学工学会 人材育成センター
分科会賛助 : 株式会社オメガシミュレーション
コンテスト協賛 : 株式会社アスペンテックジャパン
出光興産株式会社
インベンシス プロセス システムズ株式会社
株式会社クレハ
住友化学株式会社
千代田化工建設株式会社
東洋エンジニアリング株式会社
ピーエスイージャパン
株式会社 PreFEED
三井化学株式会社
三菱化学エンジニアリング株式会社

目 次

0. コンテスト	
0.1 日程	1
0.2 発表会プログラム	2
0.3 結果	4
1. プロセスシミュレーション部門	
1.1 プロセスシミュレーション課題 (Rev.3)	6
1.2 提出資料要項 (Ver.1)	11
1.3 優秀賞以上のチームの提出資料	13
< 最優秀賞 > 京都大学チーム	13
岡村 惇也 (B4), 野口 敦史 (B4), 高瀬 洋志 (B4)	
所属: 工学部 工業化学科・化学工学専攻 プロセスシステム工学研究室	
< 優秀賞 > 東京大学チーム	26
高山 慎史 (M1), Baharuddin Maghfuri (M1)	
所属: 大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻 平尾研究室	
2. プロセス設計部門	
2.1 プロセス設計課題 (Rev.1)	50
2.2 提出資料要項 (Ver.1)	51
2.3 優秀賞以上のチームの提出資料	52
※該当チームは、ありませんでした。	

0. コンテスト

0.1 日程

- コンテスト Web サイト開設 : 2012 年 4 月 14 日 (土)
- 課題ダウンロード開始 : 2012 年 4 月 18 日 (水)
- コンテストエントリー期間 : 2012 年 7 月 23 日 (月) ~ 8 月 23 日 (木) 6:00 pm
- 資料提出期間 : 2012 年 7 月 23 日 (月) ~ 9 月 3 日 (月) 6:00 pm
- 事前審査期間 : 2012 年 9 月 4 日 (火) ~ 9 月 13 日 (木)
※ SIS 部会 IT 分科会会員および協賛各社の審査員の方のみ。
- 発表会 : 2012 年 9 月 21 日 (金)

0.2 発表会プログラム

化学工学会 第44回秋季大会

第11回プロセスデザイン学生コンテスト 発表会プログラム

日 時 : 2012年9月21日(金) 9:00 ~ 15:50
場 所 : 東北大学 講義棟A棟1階A106号室 (化学工学会 第44回秋季大会 E会場)
主 催 : 化学工学会 システム・情報・シミュレーション(SIS)部会 情報技術教育分科会
共 催 : 化学工学会 人材育成センター
分科会賛助 : 株式会社オメガシミュレーション
コンテスト協賛 : 株式会社アスペンテックジャパン, 出光興産株式会社,
インベンシス プロセス システムズ株式会社, 株式会社クレハ,
住友化学株式会社, 千代田化工建設株式会社,
東洋エンジニアリング株式会社, ピーエスイージャパン,
株式会社PreFEED, 三井化学株式会社,
三菱化学エンジニアリング株式会社

(1) 概要説明等

8:45 : 発表する学生は集合してください。(参加費補助手続き および 事前説明等)
9:00 ~ 9:20 : コンテスト課題の概要説明

(2) プロセスシミュレーション部門

課題:「2-ButanolからのMEK(Methyl Ethyl Ketone)製造プロセスの設計」

9:20 ~ 9:38 : **徳島大学Aチーム**
福重 拓哉 (M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
尾崎 友紀 (M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
久保田 智史 (M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
竹ノ内 雅典 (M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
新居 良平 (M2, 環境創生工学専攻 移動操作工学研究室)

9:40 ~ 9:58 : **九州大学チーム**
古賀 脩平 (M1, 化学システム工学専攻 第7講座(柘植研))
小林 慧 (M1, 化学システム工学専攻 第7講座(柘植研))
板垣 亮 (M1, 化学システム工学専攻 第7講座(柘植研))
久保 恭兵 (M1, 化学システム工学専攻 第7講座(柘植研))

10:00 ~ 10:18 : **東京工業大学チーム**
中谷 啓悟 (B4, 化学工学科 化学工学コース 大川原研究室)
横崎 祐太 (B4, 化学工学科 化学工学コース 下山研究室)
楠 祐一郎 (B4, 化学工学科 化学工学コース 鈴木研究室)

10:20 ~ 10:38 : **東京農工大学チーム**
西 直志 (B4, 化学システム工学科 山下研究室)
甘利 俊太郎 (B4, 化学システム工学科 亀山・櫻井研究室)
小出 健太郎 (B4, 化学システム工学科 銭研究室)

10:40 ~ 10:58 : **京都大学チーム**
岡村 惇也 (B4, 工業化学科 プロセスシステム工学研究室)
野口 敦史 (B4, 工業化学科 プロセスシステム工学研究室)
高瀬 洋志 (B4, 工業化学科 プロセスシステム工学研究室)

11:00 ～ 11:18 : **東京大学チーム**
高山 慎史 (M1, 化学システム工学専攻 平尾研究室)
Baharuddin Maghfuri (M1, 化学システム工学専攻 平尾研究室)

(3) プロセス設計部門

課題:「バイオ原料由来エタノールからプロピレンの合成」

11:20 ～ 11:38 : **徳島大学Bチーム**
坂東 巧野 (M2, 環境創生工学専攻 杉山研究室)
星野尾 知也 (M1, 環境創生工学専攻 中川研究室)
治徳 純 (M1, 環境創生工学専攻 中川研究室)

(4) 審査

12:00 ～ 13:20 : 昼食 + 審査 + 結果集計 (**審査委員のみ**)

(5) 招待講演

13:20 ～ 13:40 : 「東北大学化学・バイオ学科における情報技術関連教育への取り組み」
(東北大学 大学院工学研究科 化学工学専攻) **久保 正樹** 准教授

13:40 ～ 14:00 : 「プロセスシミュレータの教育への活用」
(株式会社 アスペンテックジャパン) **吉田 正裕** 氏

(6) 総評・総合討論・表彰 (**発表した学生は、必ず出席して下さい**)

14:00 ～ 15:20 : コンテスト総評, 総合討論

15:20 ～ 15:50 : 表彰式 (**※会場の都合で、表彰式の開始が早まる可能性があります。**)

※1 各チームの発表時間は、18分(発表12分 + 質疑応答6分)です。

プロジェクターは会場にありますが、PCは各自で用意して下さい。

※2 コンテストの冒頭に設計課題についての説明がありますので、各チームの発表では、課題そのものに関する説明は省略して下さい。

コンテストWebサイト:

http://altair.chem-eng.kyushu-u.ac.jp/scej_contest2012/

第11回プロセスデザイン学生コンテスト ～ 結果 ～

(1) プロセスシミュレーション部門

- 最優秀賞(株式会社オメガシミュレーション賞)
- 千代田化工建設株式会社賞(プロセス最適化賞)

京都大学チーム

岡村 惇也	(B4, 工業化学科 プロセスシステム工学研究室)
野口 敦史	(B4, 工業化学科 プロセスシステム工学研究室)
高瀬 洋志	(B4, 工業化学科 プロセスシステム工学研究室)

- 優秀賞(東洋エンジニアリング株式会社賞)
- インベンスプロセスシステムズ株式会社賞(コスト検討賞)

東京大学チーム

高山 慎史	(M1, 化学システム工学専攻 平尾研究室)
Baharuddin Maghfuri	(M1, 化学システム工学専攻 平尾研究室)

- 三井化学株式会社賞(反応セクション賞)
- 住友化学株式会社賞(プロセスイノベーション賞)

徳島大学Aチーム

福重 拓哉	(M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
尾崎 友紀	(M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
久保田 智史	(M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
竹ノ内 雅典	(M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
新居 良平	(M2, 環境創生工学専攻 移動操作工学研究室)

- 株式会社PreFEED賞(プロセスシミュレータ賞)

九州大学チーム

古賀 脩平	(M1, 化学システム工学専攻 第7講座(柘植研))
小林 慧	(M1, 化学システム工学専攻 第7講座(柘植研))
板垣 亮	(M1, 化学システム工学専攻 第7講座(柘植研))
久保 恭兵	(M1, 化学システム工学専攻 第7講座(柘植研))

- 株式会社アスペンテックジャパン賞(プロセスシミュレーション賞)

- 三菱化学エンジニアリング株式会社賞(プロセス構成賞)

東京工業大学チーム

中谷 啓悟	(B4, 化学工学科 化学工学コース 大川原研究室)
横崎 祐太	(B4, 化学工学科 化学工学コース 下山研究室)
楠 祐一郎	(B4, 化学工学科 化学工学コース 鈴木研究室)

- 出光興産株式会社賞(省資源賞)

- 株式会社クレハ賞(サステイナブル賞)

東京農工大学チーム

西 直志	(B4, 化学システム工学科 山下研究室)
甘利 俊太郎	(B4, 化学システム工学科 亀山・櫻井研究室)
小出 健太郎	(B4, 化学システム工学科 銭研究室)

(3) プロセス設計部門

- ピーエスイージャパン賞(プロセス改良賞)

徳島大学Bチーム

坂東 巧野	(M2, 環境創生工学専攻 杉山研究室)
星野尾 知也	(M1, 環境創生工学専攻 中川研究室)
治徳 純	(M1, 環境創生工学専攻 中川研究室)

(3) 共通

- 審査員特別賞(ベストプレゼンテーション賞)

徳島大学Aチーム

福重 拓哉	(M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
尾崎 友紀	(M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
久保田 智史	(M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
竹ノ内 雅典	(M1, 物質生命システム専攻 移動操作工学研究室)
新居 良平	(M2, 環境創生工学専攻 移動操作工学研究室)



Last Modified : 24 Sep. 2012

This page validated as "XHTML 1.0 Transitional" and "CSS level 2.1".

1. プロセスシミュレーション部門

1.1 プロセスシミュレーション課題 (Rev.3)

平成24年5月25日 Version 3

平成24年度「第11回 プロセスデザイン学生コンテスト」 プロセスシミュレーション部門

「2-Butanol からのMEK (Methyl Ethyl Ketone) 製造プロセスの設計」

主催: 化学工学会・SIS 部会・情報技術教育分科会

共催: 化学工学会・人材育成センター

【1】概要

MEK (Methyl Ethyl Ketone) は、溶剤としての優れた特性を持ち、保護コーティング、接着剤、化学物質の中間体、磁気テープ生産の溶剤、潤滑油の脱蠟、食品加工等に用いられる。

MEK は、おもにエチレンプラントから副生するブタン/ブテン(BB)留分より、ブタジエンとイソブチレンを分離した後の n-ブテンの水和反応により、2-ブタノールを生成し、これを脱水素・精製することにより製造される。

本課題では、2-ブタノールを出発原料とする、MEK 製造プロセスの設計を行う。

【2】課題

2. 1 純度 99wt%以上の MEK を 80,000 ton/year 生産するプロセスを設計する。

2. 2 設計条件

(1) プラント稼働時間: 1日24時間連続操業で、年 8,000 時間稼働とする。

(2) 原料供給条件:

2-Butanol: 圧力 1.013bar , 温度 25°C, 純度 100%

(3) 製品払出し条件:

MEK 99wt%以上, 圧力 2bar, 温度 40°C

(4) 用役

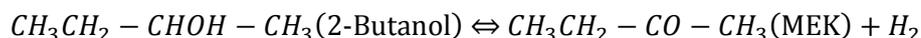
冷却水(30°C供給, 40°C戻り), 冷水(7°C供給, 12°C戻り), 蒸気(140°C飽和, 20bar 280°C), 熱媒体(500°C供給, 400°C戻り, 比熱 1.56 kcal/kgK), (蒸気を発生させるための)脱気水, 燃料(ブタン相当), 電気

これ以外の用役(高温蒸気など)が必要な場合には、BL内で製造することとする。

【3】主な仮定と課題実施上、考慮すべき点

3. 1 反応工程

原料の 2-ブタノールは、固体金属触媒(径 3.2mm, 長さ 3.2mm の円柱)の入った固定床反応器で以下の気相反応により MEK を生成する。



この反応における 2-Butanol の反応速度 r [kmol/m² h] は以下で与えられる。

$$r = \frac{C \left[p_B - \left(\frac{p_M p_H}{K} \right) \right]}{p_M \left[1 + K_B p_B + K_{BM} \left(\frac{p_B}{p_M} \right) \right]}$$

$$\log_{10} C = -(5964/T) + 8.464$$

$$\log_{10} K_B = -(3422/T) + 5.326$$

$$\log_{10} K_{BM} = (269.2/T) - 0.1959$$

$$\log_{10} K = -2790/T + 1.510 \log_{10} T + 1.871$$

T : bulk temperature [K]

p_H : partial pressure of hydrogen [bar]

p_M : partial pressure of MEK [bar]

p_B : partial pressure of 2-Butanol [bar]

この触媒の比表面積 s は

$$s = 1889 \text{ [m}^2\text{/m}^3\text{]}$$

であり、反応器に触媒を充填した際の空隙率 ε は

$$\varepsilon = 0.393 \text{ [-]}$$

である。したがって、反応器体積当たりの表面積 v は以下の式で与えられる。

$$v = s (1 - \varepsilon) = 1147 \text{ [m}^2\text{/m}^3 \text{ of bed]}$$

3. 2 課題実施上、考慮すべき点

- ・ 副反応は無視できるものとする。
- ・ 反応は 500°C 以下の範囲で行うこと。
- ・ 主反応も含め反応熱は、適宜求めること。
- ・ 反応器の圧力損失は、適宜考慮すること。
- ・ 配管や塔内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(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。
- ・ 総括転化率 95% 以上とする。
- ・ 加熱炉や反応炉を使用してもよい。
- ・ 制御系を考慮する必要はない。
- ・ 各装置から大気中への熱損失は無視してよい

【4】装置のサイジング

下記のプロセス機器についてサイジングは以下のとおりとする。反応器については、3. 1にしたがって物質収支、熱収支に基づきサイジングを行うこと。

4. 1 蒸留塔

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. 2 熱交換器

総括熱伝達係数 U [W/m²-K] として、流速に関係なく表1の値を用いる。また、次式を用いて伝熱面積 A [m²] を求める。

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{in}$$

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_{in} の計算には、Weighted(セクションで区切る)を用いる必要があるので注意すること。

表1 総括伝熱係数

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. 3 回転機

4-3-1 ポンプ

所要動力を求める。ドライバは電動機(モーター)を用いる。ポンプ効率は80%、電動機の機械的ロス、所要動力の2%とする。

4-3-2 コンプレッサ

必要があれば、コンプレッサの導入を計画してもかまわない。但し、コンプレッサは断熱効率80%で所要動力を求め、ドライバは電動機でも、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、復水器出口圧力は、0.28bar)でもかまわない。また蒸気タービンの場合、断熱効率は80%とする。ドライバの機械的ロス、所要動力の2%とする。

4. 4 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】コストデータ

5.1 ユーティリティコスト

- ・ 20bar スチーム(280°C) :\$35/ton
- ・ 加熱用飽和低压スチーム(140°C) :\$30/ton
- ・ 冷却水(30°C供給, 40°C戻り) :\$13/1000ton
- ・ 冷水(7°C供給, 12°C戻り) :\$0.6/ton
- ・ 熱媒体(500°C供給, 400°C戻り, 比熱 1.56 kcal/kg K) :\$18/ton (Version 3 で修正)
- ・ (蒸気を発生させるための)脱気水
(3bar 飽和脱気水, 使用後は 3bar 液の状態です外へ戻す) :\$3.5/ton (Version 2 で追加)
- ・ 燃料油(ブタン) :\$400/ton
- ・ 電力 :\$0.2/KWh
- ・ 触媒 :\$12,500/m³(反応器体積)

5.2 原料, 製品価格

原料: 2-Butanol : \$1,000/ton

製品: MEK : \$1,700/ton

水素 :純度 95mol%以上, 圧力 20bar であれば \$0.3/Nm³で販売可能

【6】課題と評価基準

6.1 課題

- ・ 指定した製品仕様を満たすような適切なブロックフローダイアグラムおよびプロセスフローダイアグラムを作成し, どのような考え方で設計したかを説明しなさい。
- ・ 各プロセスユニットの適切な設計を行い, 設計結果とともにどのような考え方で設計したかを説明しなさい。
- ・ 機器のサイジングとコストの関係は計算表を提示すること。

6.2 評価基準

設計の妥当性と論理性および設計結果を評価します。

- ・ 設計方針の妥当性を論じているか
- ・ コストなどの評価によって代替案を比較して設計しているか
- ・ 設計根拠を明示しているか

6.3 レポート形式

別紙の資料提出要領に従うこと。

※改訂履歴

- Version 1 :2012年4月18日 初版公開
- Version 2 :2012年5月10日
 - 「5.1 ユーティリティコスト」に脱気水のコスト追加
- Version 3 :2012年5月10日
 - 「5.1 ユーティリティコスト」
 - 熱媒体の比熱の単位を修正
 - 誤:kg/kcal K → 正: kcal/kg K

平成24年度「第11回 プロセスデザイン学生コンテスト」
プロセスシミュレーション部門
「2-Butanol からのMEK (Methyl Ethyl Ketone) 製造プロセスの設計」

提出資料要項 Ver.1

次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3日(月) 6:00 pm 締切です。

1. 審査用資料(Word または PDF ファイル)

(1) Block-Flow-Diagram, および, PFD (Process Flow Diagram)

- 設計で得られた最終的なプロセスの Block-Flow-Diagram と PFD をできるだけ分かりやすく各 1 枚にまとめるとともに、プロセスの概略や特徴の説明を簡単に記す。
- 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。
- Block-Flow-Diagram については、各 Block 内にその主な名称を記載し、Block 間のストリームには主な成分名と温度、圧力、気相か液相かを記載する。
- PFD については、下記を記入する。
 - ◇ 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、制御系は記述しなくてよい。

(2) 機器サイズ

PFD に現れる主要な機器を一覧表にして、機器サイズおよび操作条件をまとめる。

例えば、

- ◇ 反応器: 直径, 長さなどの形状を表す値, 触媒量, 操作温度と圧力
- ◇ 熱交換器: 流体の相, 伝熱面積, 操作温度と圧力
- ◇ 圧縮機: 流体の流量, 動力, 操作温度と圧力
- ◇ 蒸留塔などの塔槽類: 段数, 塔径, 操作温度(塔頂と塔底)と圧力

など。

(3) 物質収支 Stream-Data-Table

PFD に stream 番号を付与し、主な Stream について、圧力、温度、流量(kmol/h, kg/h の両単位で表示)、組成、液化率を表にまとめる。

(4) 本課題でのプラント機器コストと建設費、および、運転費 推算結果

- ◇ (2)の機器に対応して機器のコストを記入した表を添付する。

- ◇ 機器費以外の建設費を推算した場合は、分類項目を決めて表に加える。
- ◇ プラントの運転費については、原料、製品、使用した用役を項目とする表を作成し、使用量(単位は課題で示した単位に準じる)、年間の費用を纏める。

(5) 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)

設計方針、設計根拠、比較した代替案について簡潔に示して、最終的なプロセスフロー選定に至った経緯を述べる。

★ この部分が課題として重要な部分なので、要点を出来るだけ箇条書きで書くこと。なぜその設計になったのか、その設計根拠を明示すること。

★ 必要に応じて、図や表を利用しても良い。

(6) 提出資料について

提出していただいた資料は、コンテスト後に公開する場合があります。

最優秀賞



平成 24 年度

**「第 11 回 プロセスデザイン学生コンテスト」
プロセスシュミレーション部門**

「2-Butanol からの MEK

(Methyl Ethyl Ketone) 製造プロセスの設計」

審査用資料

平成 24 年 9 月 3 日提出

京都大学工学部工業化学科化学プロセスコース

○ 岡村 惇也

野口 敦史

高瀬 洋志

1. Block-Flow-Diagram, および, Process-Flow-Diagram

最終的なプロセスの Block-Flow-Diagram を図 1-1 に、Process-Flow-Diagram (PFD) を図 1-2 にそれぞれ示す。

まず、Block-Flow-Diagram について説明する。反応工程で 2-ブタノールから Methyl Ethyl Ketone (MEK) と水素が生成し、水素分離工程を経て製品 MEK が得られる。

次に、PFD について説明する。PFD の装置名称は、Reactor (反応器)、D (デカンタ)、Pump (ポンプ)、VLV (バルブ)、Compressor (圧縮機)、TEE (分離器)、MIX (ミキサー)、Heater (ヒーター)、Cooler (クーラー)、E (熱交換器) とする。ただし、E-i と E-i' は、同一の熱交換器を表わしプロセス流体同士による熱交換を表わす。また、ヒーターとは、熱媒との熱交換器を表わし、クーラーとは冷媒との熱交換を表わす。

反応工程では、中間熱交換・多段断熱反応形式と多管式熱交換型反応形式を比較検討した結果、前者 (3 段) を採用した (詳細は 5 節に示す)。その際、反応器間に熱交換器及びヒーターを導入し、吸熱反応により低下した反応器出口流体を昇温した。水素分離工程では、仕様を満たす MEK と水素を得るために 4 個のデカンタを使用した。2 個目以降の各デカンタ前では、水素と MEK を高純度で気液分離するためにコンプレッサによる昇圧とクーラーによる冷却を行なった。各デカンタから得られた精製済み MEK を回収して製品とした。

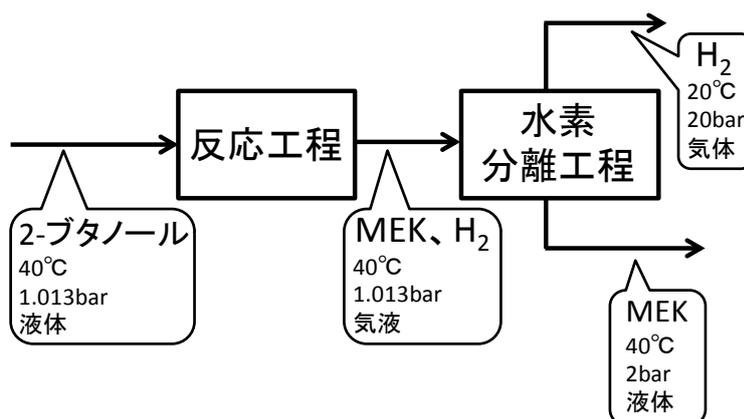
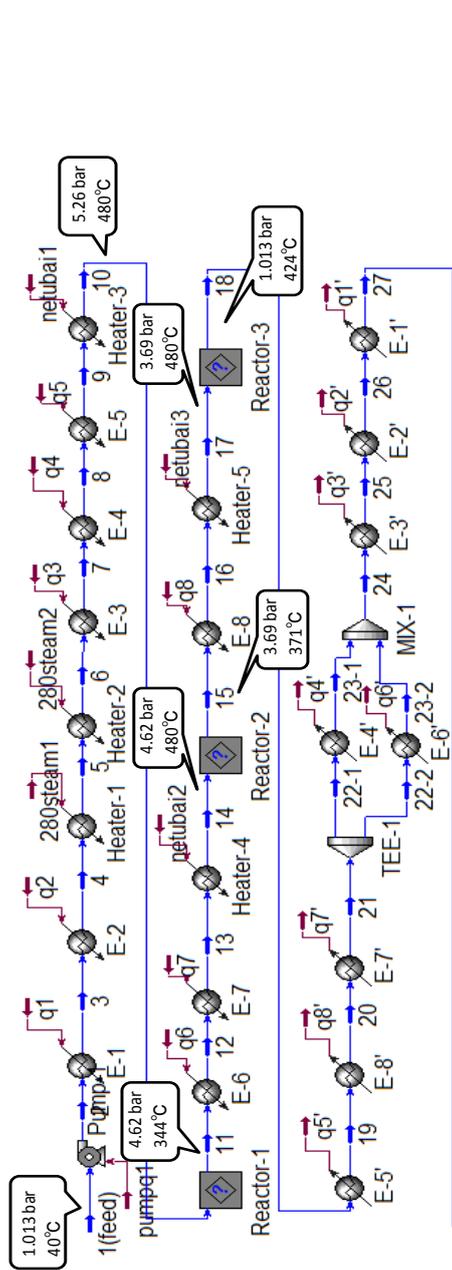


図 1-1 Block-Flow-Diagram

反应工程



水素分離工程

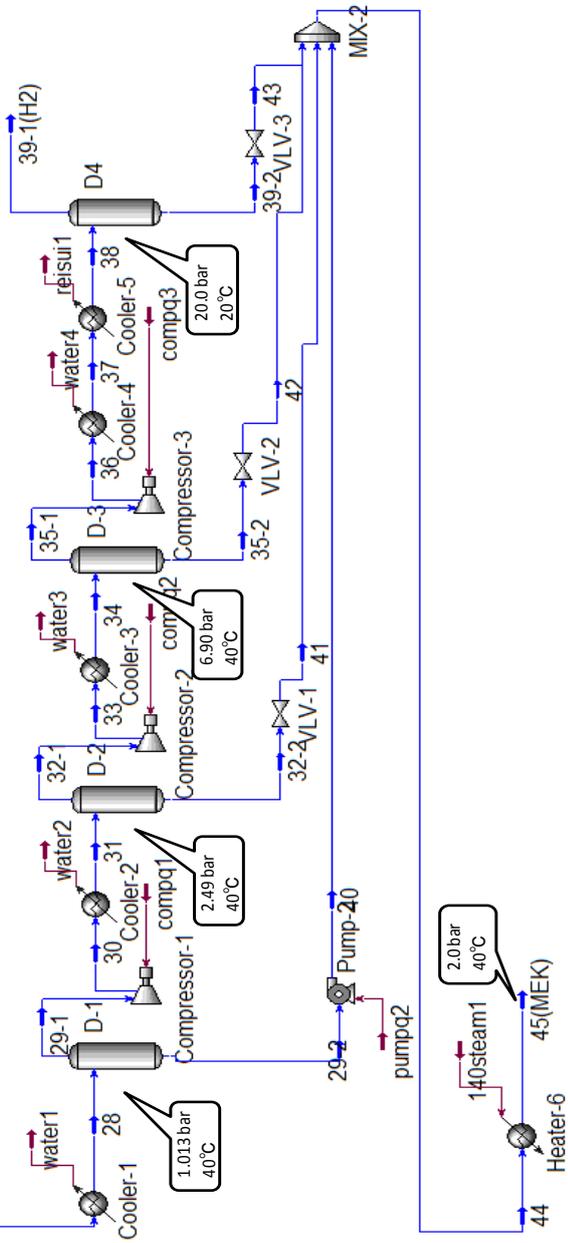


图 1-2 Process-Flow-Diagram

1	 KYOTO UNIVERSITY Burlington, MA USA		Case Name: PFD_FINAL.HSC			
2			Unit Set: NewUser			
3			Date/Time: Sat Sep 01 22:41:21 2012			
4						
5	Workbook: Case (Main)					
6	Material Streams 1					
7					Fluid Pkg: All	
8						
9						
10						
11	Name	1(feed)	2	3	4	5
12	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000
13	Temperature (C)	40.00	40.25	153.2	153.3	153.3
14	Pressure (bar)	1.013	5.260	5.260	5.260	5.260
15	Molar Flow (kgmole/h)	139.4	139.4	139.4	139.4	139.4
16	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
17	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
18	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
19	Name	6	7	8	9	10
20	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
21	Temperature (C)	240.0	343.8	370.7	378.0	480.0
22	Pressure (bar)	5.260	5.260	5.260	5.260	5.260
23	Molar Flow (kgmole/h)	139.4	139.4	139.4	139.4	139.4
24	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
25	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
26	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
27	Name	11	12	13	14	15
28	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
29	Temperature (C)	343.8	370.7	378.0	480.0	370.7
30	Pressure (bar)	4.622	4.622	4.622	4.622	3.666
31	Molar Flow (kgmole/h)	198.1	198.1	198.1	198.1	250.2
32	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	0.4078	0.4078	0.4078	0.4078	0.1141
33	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.2962	0.2962	0.2962	0.2962	0.4429
34	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.2962	0.2962	0.2962	0.2962	0.4429
35	Name	16	17	18	19	20
36	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
37	Temperature (C)	378.0	480.0	424.3	418.0	413.0
38	Pressure (bar)	3.666	3.666	1.013	1.013	1.013
39	Molar Flow (kgmole/h)	250.2	250.2	277.7	277.7	277.7
40	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	0.1141	0.1141	0.0040	0.0040	0.0040
41	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.4429	0.4429	0.4980	0.4980	0.4980
42	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.4429	0.4429	0.4980	0.4980	0.4980
43	Name	21	22-1	22-2	23-1	23-2
44	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
45	Temperature (C)	408.0	408.0	408.0	343.8	358.0
46	Pressure (bar)	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013
47	Molar Flow (kgmole/h)	277.7	125.3	152.4	125.3	152.4
48	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	0.0040	0.0040	0.0040	0.0040	0.0040
49	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.4980	0.4980	0.4980	0.4980	0.4980
50	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.4980	0.4980	0.4980	0.4980	0.4980
51	Name	24	25	26	27	28
52	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.6477
53	Temperature (C)	351.6	280.0	171.1	62.10	40.00
54	Pressure (bar)	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013
55	Molar Flow (kgmole/h)	277.7	277.7	277.7	277.7	277.7
56	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	0.0040	0.0040	0.0040	0.0040	0.0040
57	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.4980	0.4980	0.4980	0.4980	0.4980
58	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.4980	0.4980	0.4980	0.4980	0.4980
59	Name	29-1	29-2	30	31	32-1
60	Vapour Fraction	1.0000	0.0000	1.0000	0.8488	1.0000
61	Temperature (C)	40.00	40.00	110.2	40.00	40.00
62	Pressure (bar)	1.013	1.013	2.490	2.490	2.490
63	Molar Flow (kgmole/h)	179.8	97.83	179.8	179.8	152.7
64	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	0.0007	0.0099	0.0007	0.0007	0.0001
65	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.2305	0.9897	0.2305	0.2305	0.0944
66	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.7688	0.0003	0.7688	0.7688	0.9055
67						
68						
69	Aspen Technology Inc.		Aspen HYSYS Version 7.3 (25.0.1.7337)		Page 1 of 2	
	Licensed to: KYOTO UNIVERSITY			* Specified by user.		

1	 KYOTO UNIVERSITY Burlington, MA USA		Case Name: PFD_FINAL.HSC			
2			Unit Set: NewUser			
3			Date/Time: Sat Sep 01 22:41:21 2012			
4						
5	Workbook: Case (Main) (continued)					
6						
7						
8						
9	Material Streams 1 (continued)					Fluid Pkg: All
10						
11	Name	32-2	33	34	35-1	35-2
12	Vapour Fraction	0.0000	1.0000	0.9374	1.0000	0.0000
13	Temperature (C)	40.00	147.6	40.00	40.00	40.00
14	Pressure (bar)	2.490	6.900	6.900	6.900	6.900
15	Molar Flow (kgmole/h)	27.19	152.7	152.7	143.1	9.562
16	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	0.0041	0.0001	0.0001	0.0000	0.0017
17	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.9950	0.0944	0.0944	0.0341	0.9957
18	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0009	0.9055	0.9055	0.9658	0.0026
19	Name	36	37	38	39-1(H2)	39-2
20	Vapour Fraction	1.0000	0.9772	0.9702	1.0000	0.0000
21	Temperature (C)	174.3	40.00	20.00	20.00	20.00
22	Pressure (bar)	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00
23	Molar Flow (kgmole/h)	143.1	143.1	143.1	138.8	4.258
24	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0006
25	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.0341	0.0341	0.0341	0.0047	0.9929
26	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.9658	0.9658	0.9658	0.9953	0.0086
27	Name	40	41	42	43	44
28	Vapour Fraction	0.0000	0.0002	0.0022	0.0062	0.0001
29	Temperature (C)	40.07	39.99	39.95	19.93	39.45
30	Pressure (bar)	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000
31	Molar Flow (kgmole/h)	97.83	27.19	9.562	4.258	138.8
32	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	0.0099	0.0041	0.0017	0.0006	0.0079
33	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.9897	0.9950	0.9957	0.9929	0.9913
34	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0003	0.0009	0.0026	0.0086	0.0008
35	Name	45(MEK)				
36	Vapour Fraction	0.0001				
37	Temperature (C)	40.00				
38	Pressure (bar)	2.000				
39	Molar Flow (kgmole/h)	138.8				
40	Master Comp Mole Frac (2-Butanol)	0.0079				
41	Master Comp Mole Frac (M-E-Ketone)	0.9913				
42	Master Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0008				
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	Aspen Technology Inc.		Aspen HYSYS Version 7.3 (25.0.1.7337)		Page 2 of 2	

表 1-3 物質収支

2. 機器サイズ

各機器サイズおよび操作条件を表 2-1~2-3 に示す。コンプレッサの動力、反応器の装置サイズ（直径、長さ）は等しくなるように設計を行なった（詳細は 5 節に示す）。

表 2-1-1 熱交換器サイズ（温度、圧力、相）

熱交換器	予熱流体				受熱流体			
	出口 温度 [°C]	入口 温度 [°C]	流体 圧力 [bar]	相	入口 温度 [°C]	出口 温度 [°C]	流体 圧力 [bar]	相
E-1	62	171	1.01	気体	40	153	5.26	液
E-2	171	280	1.01	気体	153	153	5.26	液（蒸発）
E-3	280	358	1.01	気体	240	344	5.26	気体
E-4	358	408	1.01	気体	344	371	5.26	気体
E-5	418	424	1.01	気体	371	378	5.26	気体
E-6	358	408	1.01	気体	344	371	4.62	気体
E-7	408	413	1.01	気体	371	378	4.62	気体
E-8	413	418	1.01	気体	371	378	3.67	気体
Heater-1	280	280	-	スチーム	153	153	5.26	液（蒸発）
Heater-2	280	280	-	スチーム	153	240	5.26	気体
Heater-3	400	500	-	熱媒	378	480	5.26	気体
Heater-4	400	500	-	熱媒	378	480	4.62	気体
Heater-5	400	500	-	熱媒	378	480	3.67	気体
Heater-6	140	140	-	スチーム	39	40	2.00	液体
Cooler-1	40	62	1.01	気液	30	40	-	冷却水
Cooler-2	40	110	2.49	気体	30	40	-	冷却水
Cooler-3	40	148	6.90	気体	30	40	-	冷却水
Cooler-4	40	174	20.00	気体	30	40	-	冷却水
Cooler-5	20	40	20.00	気体	7	12	-	冷媒

表 2-1-2 熱交換機器サイズ (熱量、伝熱面積)

熱交換器	熱量 [kJ/h]	対数平均温度差 [K]	伝熱面積 [m ²]
E-1	3.62E+06	20	252.2
E-2	3.59E+06	56	35.7
E-3	2.59E+06	25	145.5
E-4	6.77E+05	24	39.7
E-5	4.21E+05	46	12.6
E-6	8.23E+05	24	48.3
E-7	3.47E+05	42	11.5
E-8	3.20E+05	41	10.8
Heater-1	1.35E+06	127	2.0
Heater-2	2.25E+06	75	16.6
Heater-3	2.56E+06	10	356.1
Heater-4	3.12E+06	21	206.3
Heater-5	3.42E+06	21	226.3
Heater-6	1.20E+04	100	0.2
Cooler-1	7.00E+05	15	63.9
Cooler-2	1.52E+06	31	68.3
Cooler-3	9.27E+05	41	31.3
Cooler-4	7.19E+05	48	20.9
Cooler-5	1.26E+05	20	9.0

表 2-2 コンプレッササイズ

	動力 [kJ/h]	入口圧力 [bar]	出口圧力 [bar]	入口温度 [°C]	出口温度 [°C]	流体流量 [kmol/h]	流体流量 [kg/h]
Compressor-1	6.08E+05	1.013	2.49	40	110.2	179.8	3277.7
Compressor-2	6.08E+05	2.49	6.9	40	147.6	152.7	1318.8
Compressor-3	6.11E+05	6.9	20	40	174.3	143.1	631.1

表 2-3 反応器サイズ

反応器	入口温度 [°C]	出口温度 [°C]	反応率 [-]	出口圧力 [bar]	体積 [m ³]	長さ [m]	直径 [m]	出口流量 [kmol/h]
Reactor-1	480	343.8	0.421	4.622	0.638	1.941	0.647	198.0
Reactor-2	480	370.7	0.795	3.666	0.638	1.941	0.647	250.2
Reactor-3	480	424.3	0.992	1.013	0.638	1.941	0.647	277.7

3. 物質収支

物質収支は、表 1-3 に示した。なお、Fluid package は最も汎用性のある UNIQUAC を用いた。

4. コスト推算結果

各機器にかかるコストを表 4-1、プラントの運転費を表 4-2 にそれぞれ示す。コスト計算を行なうにあたり 1 ドル 80 円とした。

5. 今回の設計結果に至った経緯

本プロセス設計において最終的なプロセスフローに至るまでの主な検討事項をまとめる。

①蒸留塔を利用しないプロセスの選定

反応工程での単通反応率が 0.992 以上である場合、製品仕様を満たすために蒸留塔を導入する必要がないことがわかった。反応率を変えながらコスト比較を行った結果を図 5-1 に示す。なお、蒸留塔コストは、蒸留塔建設コスト、リボイラー&コンデンサーのユーティリティコストの合計とし、反応工程コストは、ユーティリティコスト、熱交換器装置コスト（クーラー、ヒーター含む。以後、熱交換器とは、ヒーター、クーラーを含めるものとする。）、反応器装置コストの合計とした。原料流量はほとんど変化しなかったため、原料コストは比較対象から除外した。図 5-1 より、本プロセス設計では蒸留塔を使用しないプロセスを選定した。

②反応器形式の選定

本反応は吸熱反応であり、高い反応速度を保つために熱交換操作による反応温度制御が必要である。本プロセス設計では、中間熱交換・多段断熱反応器と多管式熱交換型反応器の比較検討を行なった。比較検討にあたって、多段断熱反応器では 2 段、3 段、4 段の 3 種類、多管式反応器では並流、向流の 2 種類、計 5 種類について、反応工程におけるコスト（反応器装置コスト、ユーティリティコスト、熱交換器装置コスト）の比較を行なった。

表 4-1 各機器にかかるコスト

	機器名	装置コスト[億円/year]
熱交換器	E-1	0.273
	E-2	0.077
	E-3	0.191
	E-4	0.082
	E-5	0.039
	E-6	0.093
	E-7	0.037
	E-8	0.035
熱交換器 (クーラー)	Cooler-1	0.112
	Cooler-2	0.117
	Cooler-3	0.070
	Cooler-4	0.054
	Cooler-5	0.031
熱交換器 (ヒーター)	Heater-1	0.012
	Heater-2	0.047
	Heater-3	0.342
	Heater-4	0.240
	Heater-5	0.254
	Heater-6	0.002
反応器	Reactor-1	0.108
	Reactor-2	0.108
	Reactor-3	0.108
コンプレッサ	Compressor-1	0.168
	Compressor-2	0.168
	Compressor-3	0.168

反応は高温域（約 400℃付近）で行なうと設定したため、反応工程では 40℃の原料を高温域まで昇温する必要があり、また反応器出口高温流体を次の分離工程で MEK と水素を高純度で分離するために 40℃付近まで冷却する必要がある。そのため、両者を熱交換して最適化を行なう。中間熱交換・多段断熱反応器（以下多段断熱とする。）と多管式熱交換型反応器（以下、多管式とする。）の反応工程でのフロー図を図 5-2（3 段の場合を例として示す。）、図 5-3 にそれぞれ示す。また最適化変数&制約条件を表 5-1 に示す。

図 5-4 より、多管式（並流、向流）は、多段断熱（断熱 3 段）に比べてユーティリティコ

表 4-2 プラント運転費

		生産量	収入[億円/年]
製品	MEK [ton/年]	8.00E+04	1.09E+02
	水素 [Nm ³]	2.72E+07	6.52E+00
		使用量	コスト[億円/年]
原料	2-ブタノール [kmol/h]	8.27E+04	6.61E+01
固定費	触媒 [m ³]	1.91E+00	6.70E-02
ユーティリティ	熱媒体 [ton/年]	1.12E+05	1.61E+00
	280°Cスチーム [ton/年]	1.27E+04	3.57E-01
	140°Cスチーム [ton/年]	4.24E+01	1.02E-03
	冷却水 [ton/年]	7.39E+05	7.69E-03
	冷水 [ton/年]	2.41E+04	1.16E-02
	電力 [KWh]	5.20E+06	8.33E-01

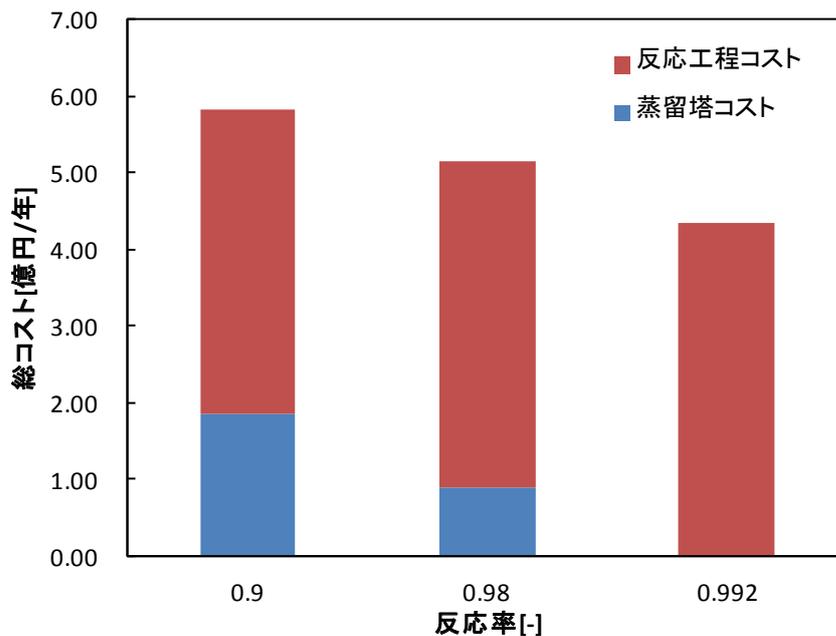


図 5-1 蒸留塔有無によるコスト比較

スト、熱交換器装置コスト、反応器装置コストともコストがかかるため、本反応工程では、多段断熱が最適なプロセスであると判断した。また多段断熱において、断熱3段が最適となった。段数増加に伴い、反応器内温度を高温に保てるため、平均反応速度が上昇し反応器装置コストが減少するが、ユーティリティが増加する。また段数増加に伴い熱交換器数も増加することや、熱媒との温度差が減少するため伝熱面積を必要とし熱交換器装置コス

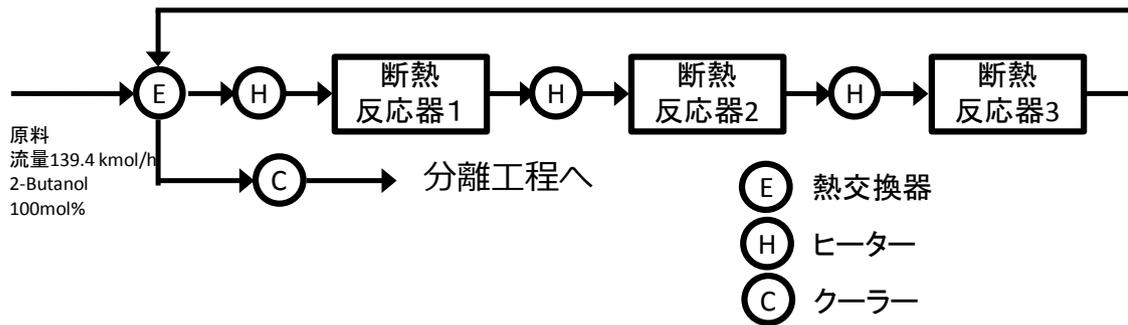


図 5-2 反応工程（断熱多段・3 段）のフロー図

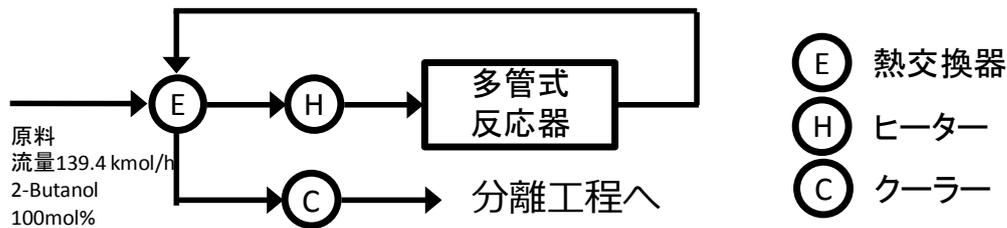


図 5-3 反応工程（多管式）のフロー図

表 5-1 反応器形式最適化における最適化変数と制約条件

	多段断熱(2 段、3 段、4 段)	多管式 (並流、向流)
最適化変数	反応器入口温度	反応器入口温度 熱媒出口温度
制約条件	反応器出口圧力が 1atm 以上 反応器の直径と長さの比は 3 ヒーターにおいて、熱媒体の使用	反応器出口圧力が 1atm 以上 2inch 管の使用 熱交換において、熱媒体の使用

トが上昇する。そのため、反応器装置コストと熱交換器装置コスト、ユーティリティコストがトレードオフの関係となり 3 段が最適となったと考えられる。

③水素（副生成物）の取り扱い

反応工程で生じた水素について、加熱炉で燃焼させて熱を得るプロセス（燃焼プロセス）と、売却して収益を得るプロセス（売却プロセス）の比較検討を行なった。その結果を表 5-2 に示す。燃焼プロセスにおける収入とは、加熱炉で得た熱を本プロセス内で使用することにより削減できる最大のユーティリティコストを示す。コストは加熱炉の装置コストを示す。また、売却プロセスのコストとは製品仕様を満たすために使用したコンプレッサと熱交換器の装置コスト、コンプレッサのユーティリティコストと冷却水コストの合計とする。表 5-2 より、本プロセスでは、水素売却プロセスを採用した。

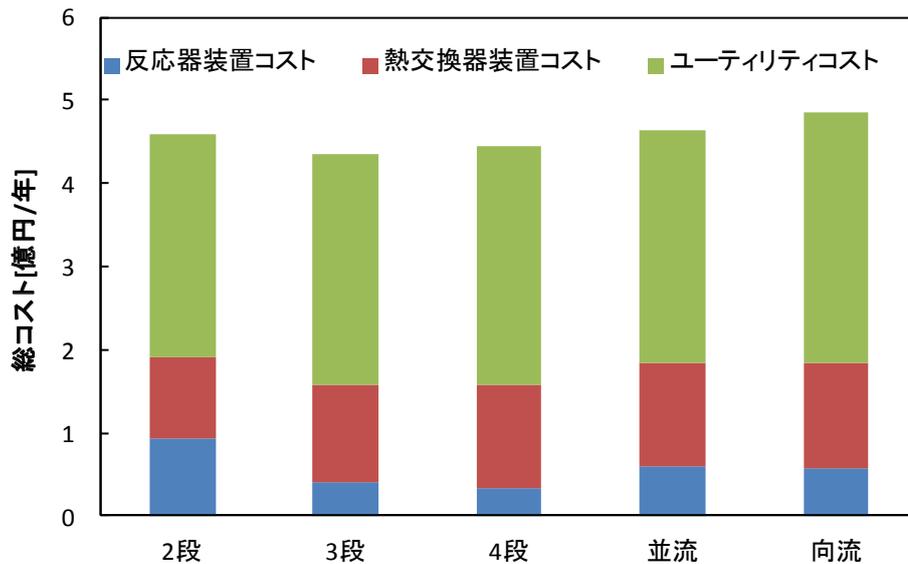


図 5-4 反応器形式の最適化結果

表 5-2 売却プロセスと燃焼プロセスのコスト比較

	売却プロセス	燃焼プロセス
収入[億円/年]	6.5	5.0
コスト[億円/年]	1.6	3.3
収益[億円/年]	4.9	1.7

④水素売却プロセスにおけるコンプレッサ数の最適化

水素売却プロセスにおいて、水素圧力を 20 bar にする必要があるため、コンプレッサを使用する。コンプレッサの耐熱温度を 200℃として設定すると、コンプレッサは 3 個以上が必要であることが分かった。そこで、コンプレッサ数を 3、4、5 個の場合それぞれにおけるコンプレッサと熱交換器の装置コスト、コンプレッサのユーティリティコストと冷却水コストの合計を比較した。その結果を図 5-5 に示す。比較を行なうにあたりコンプレッサの各動力が等しくなるように圧力を決定した。

図 5-5 より、コンプレッサ数増加に伴いコンプレッサ一個あたりの平均流入流量は減少するため、コンプレッサのユーティリティコスト&装置コストは減少していることがわかる。しかし、コンプレッサ数増加に伴いクーラーの個数が増加するため熱交換器装置コスト（クーラー）は増加していることがわかる。後者の影響がより大きいため、本プロセスでは、コンプレッサ 3 個使用する時、コストが最小となったと考えられる。以上より、本プロセスではコンプレッサ 3 個使用するプロセスを選定した。

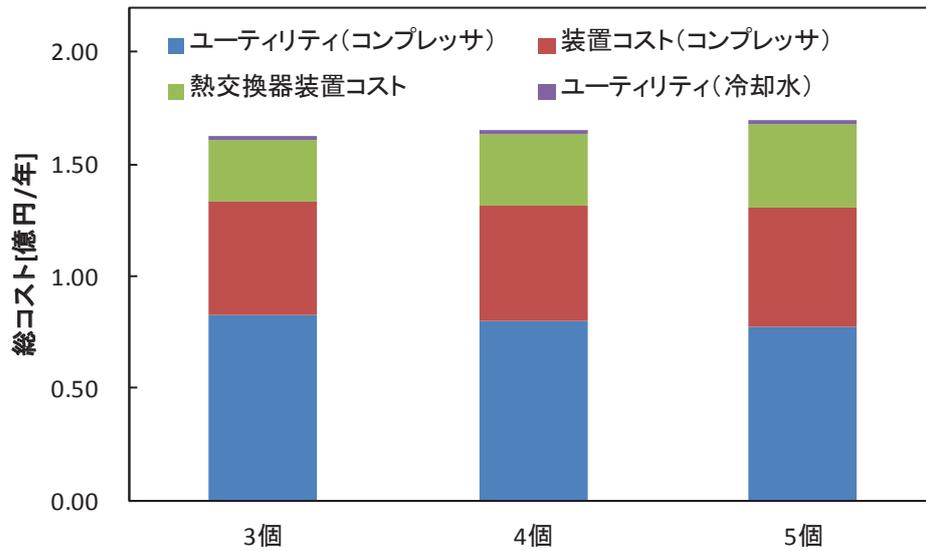


図 5-5 コンプレッサの個数による水素分離工程のコスト比較

⑤ ヒートインテグレーションを考慮したプロセス全体の最適化

最終的なプロセスの反応工程における T-Q 線図を図 5-6 に示す。分離工程で扱う熱量が小さいため、分離工程での熱交換を考慮しなかった。②で示した反応器形式の最適化に基づいて得られたプロセスよりも熱交換器装置コストは 0.65 億円/年 増加したが、ユーティリティコストは 0.8 億円/年 削減できたため、全体で 0.15 億円/年 のコスト削減に成功した。

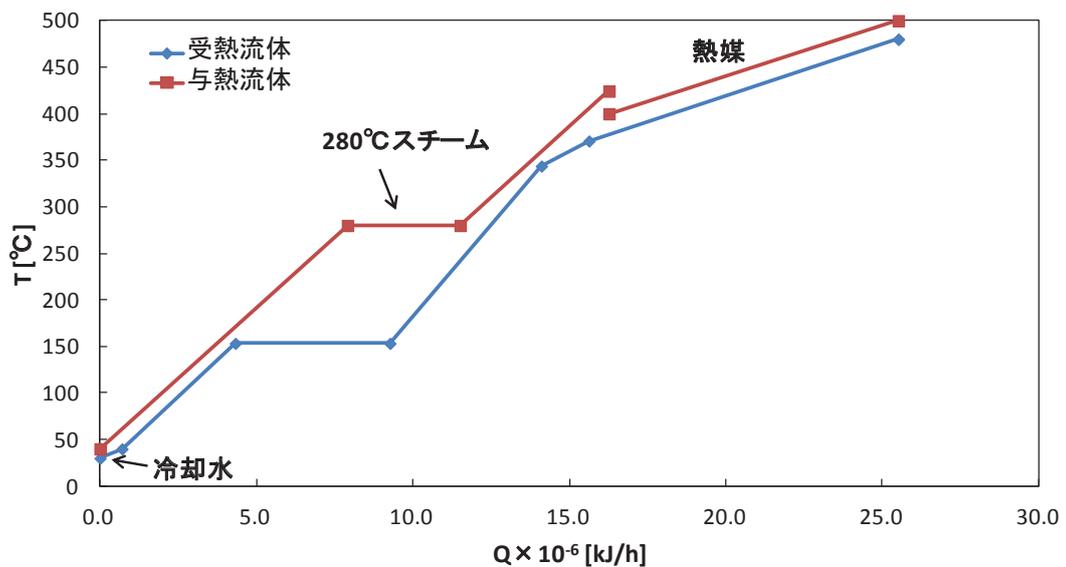


図 5-6 T-Q 線図



化学工学会 第44秋季大会

第11回 プロセスデザイン学生コンテスト

プロセスシミュレーション部門

「2-Butanol から MEK(Methyl Ethyl Ketone)

製造プロセスの設計」

審査用資料

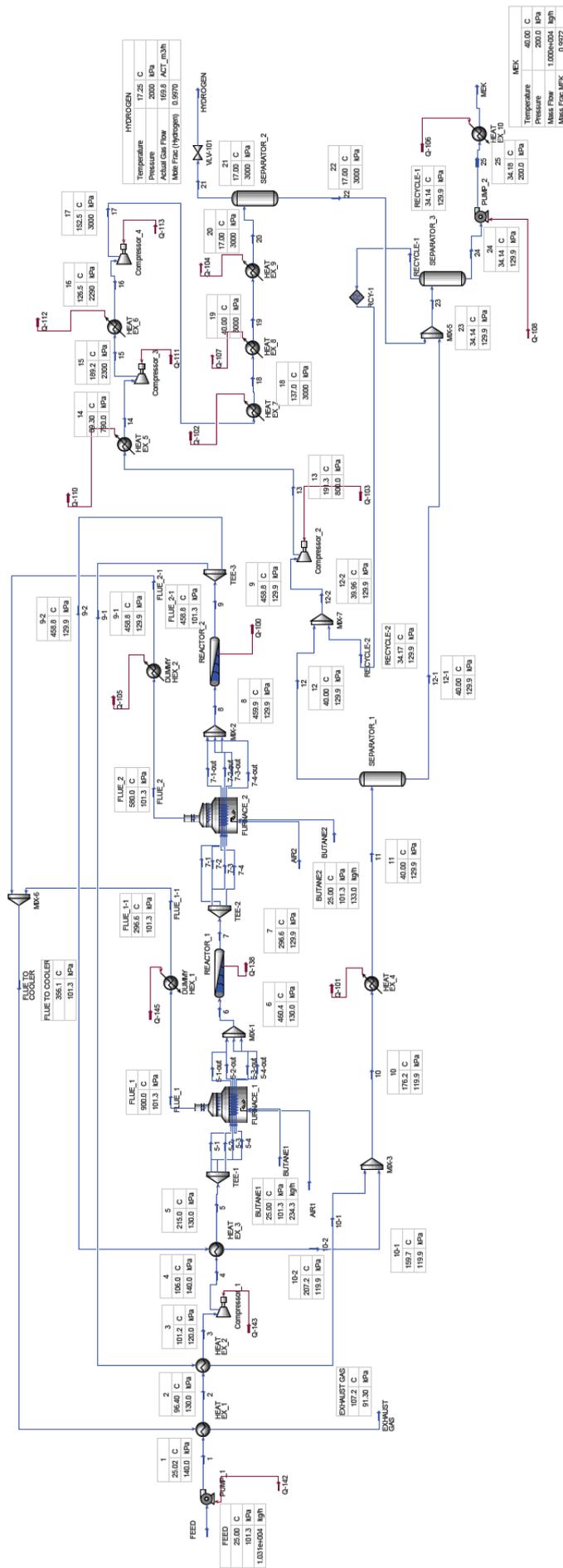
東京大学大学院 工学系研究科
化学システム工学専攻 平尾研究室

バハルディン マグフリ
高山 慎史

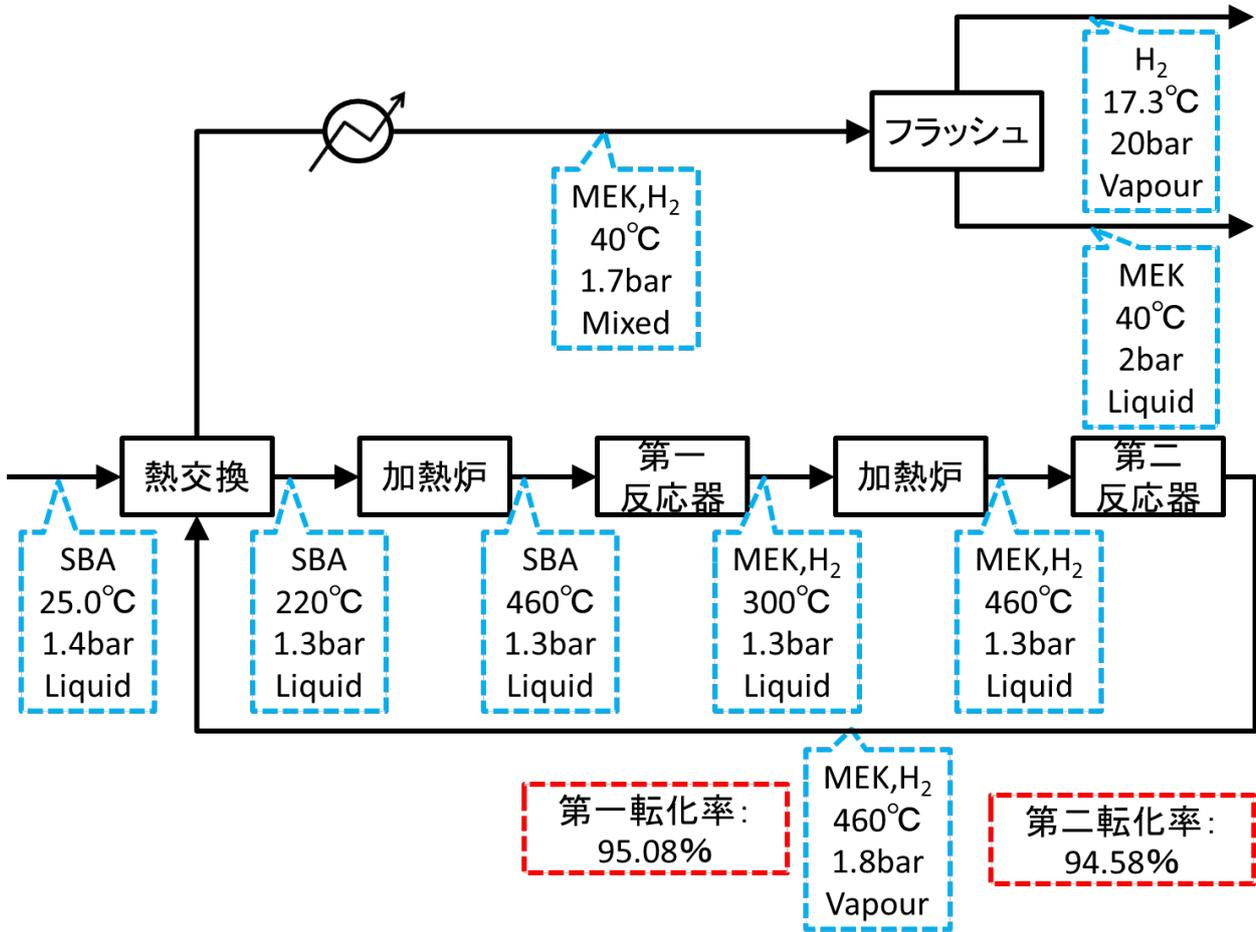
1. PFD 及び BFD

1.1 PFD

Aspen HYSYS 7.3 (Aspentech 社製)を用いて作成したプロセスフローダイアグラムは以下の通りである。



1.2 ブロックフローダイアグラム



2 機器サイズ

2.1. 反応器

	形式	ユーティリティ の方向	伝熱量 (kJ/h)	管 本数	管長さ (m)	管直径 (m)	伝熱面積 (m ²)	操作温度		操作圧力					
								原料物	ユーティリティ	原料物	ユーティリティ				
								入口	出口	入口	出口				
Reactor_1	多管式 反応器	並流	2342745	5000	0.5	0.125	981.7	460	296.6	900	316.3	130	129.9402	101.3	101.3
Reactor_2	多管式 反応器	並流	608343	5000	0.1	0.125	196.3	460	458.8	580	458.8	129.9	129.9402	101.3	101.3

2.2. 熱交換器

機器名称	相状態		伝熱 面積 (m ²)	操作温度(°C)				操作圧力(kPa)	
				高温流体		低温流体		高温 流体	低温 流体
	高温流体	低温流体		入口	出口	入口	出口		
HEAT EX_1	ガス	液	16.16	356.1	107.2	25.0	96.4	101.3	140.0
HEAT EX_2	ガス(凝縮)	液(蒸発)	5.69	458.8	159.7	96.4	101.2	101.2	130.0
HEAT EX_3	ガス	ガス	19.82	458.8	207.2	106.0	215.0	129.9	140.0
HEAT EX_4	ガス(凝縮)	液	37.21	176.2	40.0	30.0	40.0	129.9	101.0
HEAT EX_5	ガス	液	12.00	191.3	89.3	30.0	40.0	800.0	101.0
HEAT EX_6	ガス	液	6.17	189.2	126.5	30.0	40.0	2300.0	101.0
HEAT EX_7	ガス	液	1.68	152.5	137.0	30.0	40.0	3000.0	101.0
HEAT EX_8	ガス(凝縮)	液	13.07	137.0	40.0	30.0	40.0	3000.0	101.0
HEAT EX_9	ガス(凝縮)	液	3.82	40.0	17.0	7.0	12.0	3000.0	101.0
HEAT EX_10	ガス凝縮	液	0.34	140.0	140.0	34.2	40.0	361.3	200.0

2.3. 圧縮機

機器名称	流体 流量 (kg/h)	動力 (kW)	操作温度 (°C)		操作圧力 (kPa)	
			入口	出口	入口	出口
PUMP_1	10309.8	0.18	25.00	25.02	101.30	140
PUMP_2	10000.0	0.35	34.14	34.18	129.93	200
Compressor_1	10309.8	343.71	101.23	105.99	120.00	140
Compressor_2	2656.4	336.97	39.96	191.29	129.93	800
Compressor_3	2656.4	231.18	89.30	189.21	790.00	2300
Compressor_4	2656.4	58.65	126.54	152.49	2290.00	3000

2.4. フラッシュセパレータ

機器名称	蒸気流速 (m/s)	気相流量 (m3/s)	直径 (m)	高さ (m)	操作温度 (°C)	操作圧力 (kPa)
SEPARATOR_2	1.18	0.03	0.28	0.83	17.00	3000.00
SEPARATOR_3	2.43	0.01	0.09	0.27	34.14	129.93

2.5. 加熱炉

機器名称	熱量 [kJ/h]	燃焼ガス操作温度 (°C)		低温流体温度(°C)		操作圧力(kPa)	
		入口	出口温度	入口	出口	低温流 体	燃焼ガ ス
FURNACE_1	6.46E+06	25	900	215	460	130	101.3
FURNACE_2	4.59E+06	25	580	296.6	459.9	129.9	101.3

1	 THE UNIVERSITY OF TOKYO Burlington, MA USA		Case Name: FINAL VERSION.HSC			
2			Unit Set: SI			
3			Date/Time: Mon Sep 03 12:57:49 2012			
4						
5						
6	Workbook: Case (Main)					
7						
8						
9	Material Streams					
10						Fluid Pkg: All
11	Name	10-1	FEED	3	1	4
12	Vapour Fraction	1.0000	0.0000	1.0000 *	0.0000	1.0000
13	Temperature (C)	159.7	25.00 *	101.2	25.02	106.0
14	Pressure (kPa)	119.9	101.3 *	120.0	140.0 *	140.0 *
15	Molar Flow (kgmole/h)	183.4	139.1 *	139.1	139.1	139.1
16	Mass Flow (kg/h)	6804	1.031e+004	1.031e+004	1.031e+004	1.031e+004
17	Heat Flow (kJ/h)	-2.011e+007	-4.650e+007	-3.948e+007	-4.650e+007	-3.940e+007
18	Name	5	5-1	5-2	5-3	5-3-out
19	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
20	Temperature (C)	215.0 *	215.0	215.0	215.0	460.4
21	Pressure (kPa)	130.0	130.0	130.0	130.0	130.0
22	Molar Flow (kgmole/h)	139.1	34.77	34.77	34.77	34.77
23	Mass Flow (kg/h)	1.031e+004	2577	2577	2577	2577
24	Heat Flow (kJ/h)	-3.708e+007	-9.271e+006	-9.271e+006	-9.271e+006	-7.657e+006
25	Name	5-2-out	FLUE_1	6	5-4-out	5-4
26	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
27	Temperature (C)	460.4	900.0 *	460.4	460.4	215.0
28	Pressure (kPa)	130.0	101.3	130.0	130.0	130.0
29	Molar Flow (kgmole/h)	34.77	141.1	139.1	34.77	34.77
30	Mass Flow (kg/h)	2577	4014	1.031e+004	2577	2577
31	Heat Flow (kJ/h)	-7.657e+006	-6.989e+006	-3.063e+007	-7.657e+006	-9.271e+006
32	Name	5-1-out	FLUE_1-1	9	7	7-1
33	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
34	Temperature (C)	460.4	296.6 *	458.8	296.6	296.6
35	Pressure (kPa)	130.0	101.3 *	129.9	129.9	129.9
36	Molar Flow (kgmole/h)	34.77	141.1	277.8	271.3	67.83
37	Mass Flow (kg/h)	2577	4014	1.031e+004	1.031e+004	2577
38	Heat Flow (kJ/h)	-7.657e+006	-9.999e+006	-2.256e+007	-2.750e+007	-6.875e+006
39	Name	7-3	7-2	7-4	BUTANE1	AIR1
40	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
41	Temperature (C)	296.6	296.6	296.6	25.00 *	25.00 *
42	Pressure (kPa)	129.9	129.9	129.9	101.3 *	101.3 *
43	Molar Flow (kgmole/h)	67.83	67.83	67.83	4.031	131.0 *
44	Mass Flow (kg/h)	2577	2577	2577	234.3 *	3779
45	Heat Flow (kJ/h)	-6.875e+006	-6.875e+006	-6.875e+006	-5.097e+005	-887.0
46	Name	BUTANE2	AIR2	FLUE_2	7-3-out	7-2-out
47	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
48	Temperature (C)	25.00 *	25.00 *	580.0 *	459.9	459.9
49	Pressure (kPa)	101.3 *	101.3 *	101.3	129.9	129.9
50	Molar Flow (kgmole/h)	2.288	74.57 *	80.29	67.83	67.83
51	Mass Flow (kg/h)	133.0 *	2151	2284	2577	2577
52	Heat Flow (kJ/h)	-2.894e+005	-504.9	-4.896e+006	-5.727e+006	-5.727e+006
53	Name	7-4-out	7-1-out	8	12	12-1
54	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000
55	Temperature (C)	459.9	459.9	459.9	40.00	40.00
56	Pressure (kPa)	129.9	129.9	129.9	129.9	129.9
57	Molar Flow (kgmole/h)	67.83	67.83	271.3	171.4	106.4
58	Mass Flow (kg/h)	2577	2577	1.031e+004	2641	7669
59	Heat Flow (kJ/h)	-5.727e+006	-5.727e+006	-2.291e+007	-7.706e+006	-2.887e+007
60	Name	11	20	21	22	13
61	Vapour Fraction	0.6168	0.8051	1.0000	0.0000	1.0000
62	Temperature (C)	40.00 *	17.00 *	17.00	17.00	191.3
63	Pressure (kPa)	129.9 *	3000 *	3000	3000	800.0 *
64	Molar Flow (kgmole/h)	277.8	172.6	139.0	33.64	172.6
65	Mass Flow (kg/h)	1.031e+004	2656	309.7	2347	2656
66	Heat Flow (kJ/h)	-3.657e+007	-9.073e+006	-1.297e+005	-8.943e+006	-6.538e+006
67						
68						
69	Aspen Technology Inc.		Aspen HYSYS Version 7.3 (25.0.0.7336)		Page 1 of 5	

1	 THE UNIVERSITY OF TOKYO Burlington, MA USA			Case Name: FINAL VERSION.HSC		
2				Unit Set: SI		
3				Date/Time: Mon Sep 03 12:57:49 2012		
4						
5	Workbook: Case (Main) (continued)					
6	Material Streams (continued)					
7						Fluid Pkg: All
8						
9						
10						
11	Name	18	23	FLUE 2-1	RECYCLE-1	24
12	Vapour Fraction	1.0000 *	0.0091	1.0000	1.0000	0.0000
13	Temperature (C)	137.0	34.14	458.8 *	34.14	34.14
14	Pressure (kPa)	3000 *	129.9	101.3 *	129.9	129.9
15	Molar Flow (kgmole/h)	172.6	140.1	80.29	1.272	138.8
16	Mass Flow (kg/h)	2656	1.002e+004	2284	15.76	1.000e+004
17	Heat Flow (kJ/h)	-7.030e+006	-3.781e+007	-5.235e+006	-4.446e+004	-3.776e+007
18	Name	HYDROGEN	19	25	14	9-1
19	Vapour Fraction	1.0000	0.8115	0.0000	1.0000 *	1.0000
20	Temperature (C)	17.25	40.00 *	34.18	89.30	458.8
21	Pressure (kPa)	2000 *	3000 *	200.0 *	790.0 *	129.9
22	Molar Flow (kgmole/h)	139.0	172.6	138.8	172.6	183.4
23	Mass Flow (kg/h)	309.7	2656	1.000e+004	2656	6804
24	Heat Flow (kJ/h)	-1.297e+005	-8.832e+006	-3.776e+007	-7.386e+006	-1.489e+007
25	Name	9-2	10	10-2	15	16
26	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000 *
27	Temperature (C)	458.8	176.2	207.2	189.2	126.5
28	Pressure (kPa)	129.9	119.9	119.9	2300 *	2290 *
29	Molar Flow (kgmole/h)	94.46	277.8	94.46	172.6	172.6
30	Mass Flow (kg/h)	3505	1.031e+004	3505	2656	2656
31	Heat Flow (kJ/h)	-7.672e+006	-3.010e+007	-9.986e+006	-6.570e+006	-7.108e+006
32	Name	17	FLUE TO COOLER	EXHAUST GAS	2	RECYCLE-2
33	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000
34	Temperature (C)	152.5	356.1	107.2 *	96.40	34.17 *
35	Pressure (kPa)	3000 *	101.3	91.30	130.0	129.9 *
36	Molar Flow (kgmole/h)	172.6	221.4	221.4	139.1	1.267 *
37	Mass Flow (kg/h)	2656	6298	6298	1.031e+004	15.71
38	Heat Flow (kJ/h)	-6.897e+006	-1.523e+007	-1.703e+007	-4.470e+007	-4.432e+004
39	Name	MEK	12-2			
40	Vapour Fraction	0.0000	1.0000			
41	Temperature (C)	40.00 *	39.96			
42	Pressure (kPa)	200.0 *	129.9			
43	Molar Flow (kgmole/h)	138.8	172.6			
44	Mass Flow (kg/h)	1.000e+004	2656			
45	Heat Flow (kJ/h)	-3.764e+007	-7.751e+006			
46	Compositions					
47						Fluid Pkg: All
48	Name	10-1	FEED	3	1	4
49	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.4993	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
50	Mole Frac (2-Butanol)	0.0013	1.0000 *	1.0000	1.0000	1.0000
51	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
52	Mole Frac (Hydrogen)	0.4993	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
53	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
54	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
55	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
56	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
57	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
58	Name	5	5-1	5-2	5-3	5-3-out
59	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
60	Mole Frac (2-Butanol)	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
61	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
62	Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
63	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
64	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
65	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
66	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
67	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
68						
69	Aspen Technology Inc.			Aspen HYSYS Version 7.3 (25.0.0.7336)		Page 2 of 5

Licensed to: THE UNIVERSITY OF TOKYO

* Specified by user.

1	 THE UNIVERSITY OF TOKYO Burlington, MA USA		Case Name: FINAL VERSION.HSC			
2			Unit Set: SI			
3			Date/Time: Mon Sep 03 12:57:49 2012			
4						
5						
6	Workbook: Case (Main) (continued)					
7						
8						
9	Compositions (continued)					
10						Fluid Pkg: All
11	Name	5-2-out	FLUE_1	6	5-4-out	5-4
12	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
13	Mole Frac (2-Butanol)	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
14	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.1429	0.0000	0.0000	0.0000
15	Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
16	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.7336	0.0000	0.0000	0.0000
17	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0093	0.0000	0.0000	0.0000
18	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
19	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.1143	0.0000	0.0000	0.0000
20	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
21	Name	5-1-out	FLUE_1-1	9	7	7-1
22	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.0000	0.0000	0.4993	0.4874	0.4874
23	Mole Frac (2-Butanol)	1.0000	0.0000	0.0013	0.0252	0.0252
24	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.1429	0.0000	0.0000	0.0000
25	Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.4993	0.4874	0.4874
26	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.7336	0.0000	0.0000	0.0000
27	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0093	0.0000	0.0000	0.0000
28	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
29	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.1143	0.0000	0.0000	0.0000
30	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
31	Name	7-3	7-2	7-4	BUTANE1	AIR1
32	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.4874	0.4874	0.4874	0.0000 *	0.0000 *
33	Mole Frac (2-Butanol)	0.0252	0.0252	0.0252	0.0000 *	0.0000 *
34	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000 *
35	Mole Frac (Hydrogen)	0.4874	0.4874	0.4874	0.0000 *	0.0000 *
36	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.7900 *
37	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.2100 *
38	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000 *	0.0000 *
39	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000 *
40	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000 *
41	Name	BUTANE2	AIR2	FLUE_2	7-3-out	7-2-out
42	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.4874	0.4874
43	Mole Frac (2-Butanol)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0252	0.0252
44	Mole Frac (H2O)	0.0000 *	0.0000 *	0.1425	0.0000	0.0000
45	Mole Frac (Hydrogen)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.4874	0.4874
46	Mole Frac (Nitrogen)	-0.0000 *	0.7900 *	0.7337	0.0000	0.0000
47	Mole Frac (Oxygen)	0.0000 *	0.2100 *	0.0098	0.0000	0.0000
48	Mole Frac (n-Butane)	1.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
49	Mole Frac (CO2)	0.0000 *	0.0000 *	0.1140	0.0000	0.0000
50	Mole Frac (CO)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000	0.0000
51	Name	7-4-out	7-1-out	8	12	12-1
52	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.4874	0.4874	0.4874	0.1908	0.9960
53	Mole Frac (2-Butanol)	0.0252	0.0252	0.0252	0.0003	0.0030
54	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
55	Mole Frac (Hydrogen)	0.4874	0.4874	0.4874	0.8089	0.0010
56	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
57	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
58	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
59	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
60	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
61						
62						
63						
64						
65						
66						
67						
68						
69	Aspen Technology Inc.		Aspen HYSYS Version 7.3 (25.0.0.7336)		Page 3 of 5	

1	 THE UNIVERSITY OF TOKYO Burlington, MA USA			Case Name: FINAL VERSION.HSC		
2				Unit Set: SI		
3				Date/Time: Mon Sep 03 12:57:49 2012		
4						
5	Workbook: Case (Main) (continued)					
6						
7	Compositions (continued)					
8	Fluid Pkg: All					
9						
10						
11	Name	11	20	21	22	13
12	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.4993	0.1905	0.0030	0.9650	0.1905
13	Mole Frac (2-Butanol)	0.0013	0.0003	0.0000	0.0014	0.0003
14	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
15	Mole Frac (Hydrogen)	0.4993	0.8092	0.9970	0.0336	0.8092
16	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
17	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
18	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
19	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
20	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
21	Name	18	23	FLUE_2-1	RECYCLE-1	24
22	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.1905	0.9886	0.0000	0.1478	0.9963
23	Mole Frac (2-Butanol)	0.0003	0.0026	0.0000	0.0002	0.0027
24	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.1425	0.0000	0.0000
25	Mole Frac (Hydrogen)	0.8092	0.0088	0.0000	0.8520	0.0011
26	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.7337	0.0000	0.0000
27	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0098	0.0000	0.0000
28	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
29	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.1140	0.0000	0.0000
30	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
31	Name	HYDROGEN	19	25	14	9-1
32	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.0030	0.1905	0.9963	0.1905	0.4993
33	Mole Frac (2-Butanol)	0.0000	0.0003	0.0027	0.0003	0.0013
34	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
35	Mole Frac (Hydrogen)	0.9970	0.8092	0.0011	0.8092	0.4993
36	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
37	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
38	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
39	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
40	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
41	Name	9-2	10	10-2	15	16
42	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.4993	0.4993	0.4993	0.1905	0.1905
43	Mole Frac (2-Butanol)	0.0013	0.0013	0.0013	0.0003	0.0003
44	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
45	Mole Frac (Hydrogen)	0.4993	0.4993	0.4993	0.8092	0.8092
46	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
47	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
48	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
49	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
50	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
51	Name	17	FLUE TO COOLER	EXHAUST GAS	2	RECYCLE-2
52	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.1905	0.0000	0.0000	0.0000	0.1480 *
53	Mole Frac (2-Butanol)	0.0003	0.0000	0.0000	1.0000	0.0002 *
54	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.1427	0.1427	0.0000	0.0000 *
55	Mole Frac (Hydrogen)	0.8092	0.0000	0.0000	0.0000	0.8519 *
56	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.7336	0.7336	0.0000	0.0000 *
57	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0095	0.0095	0.0000	0.0000 *
58	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *
59	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.1142	0.1142	0.0000	0.0000 *
60	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *
61						
62						
63						
64						
65						
66						
67						
68						
69	Aspen Technology Inc.		Aspen HYSYS Version 7.3 (25.0.0.7336)		Page 4 of 5	

Licensed to: THE UNIVERSITY OF TOKYO

* Specified by user.

1	 THE UNIVERSITY OF TOKYO Burlington, MA USA			Case Name: FINAL VERSION.HSC		
2				Unit Set: SI		
3				Date/Time: Mon Sep 03 12:57:49 2012		
4						
5						
6	Workbook: Case (Main) (continued)					
7						
8						
9	Compositions (continued)				Fluid Pkg:	All
10						
11	Name	MEK	12-2			
12	Mole Frac (M-E-Ketone)	0.9963	0.1905			
13	Mole Frac (2-Butanol)	0.0027	0.0003			
14	Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000			
15	Mole Frac (Hydrogen)	0.0011	0.8092			
16	Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000			
17	Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000			
18	Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000			
19	Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000			
20	Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000			
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	Aspen Technology Inc.		Aspen HYSYS Version 7.3 (25.0.0.7336)		Page 5 of 5	

4. プラントコスト推算結果

本プロセスの建設費の推算は第 9 回プロセスデザイン学生コンテストのプラント建設コスト推算用スプレッドシート(エクセルファイル)にしたがって行った。その結果は以下の表に示す。

Equipment Category	Bare Module Cost (Equipment Direct and Indirect Cost: CEPCI=382)
Process Vessels	\$40,412
Trays	\$0
Heat Exchangers (Inc. Reactors)	\$130,865
Pump with Electric Driver	\$33,212
Compressor	\$1,492,377
Compressor Driver	\$122,907
Furnace	\$608,895
Total Bare Module Cost	\$2,428,668
Plant Construction Cost Including 18% contingency	\$2,865,828
Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) in 2009	521.90
Plant Construction Cost in 2009	\$3,915,381

また、原料費およびユーティリティコストは以下のようになった。

ユーティリティコスト

ユーティリティ種類	使用量	年間費用
電力	5.263E+06 kWh/year	\$1,052,680.48
加熱用飽和低圧スチーム	4.740E+02 ton	\$14,221.47
ブタン燃料	2.938E+03 ton	\$1,175,339.36
触媒	3.375E+01 m3	\$421,844.72
冷水	9.284E+04 ton	\$55,705.40
冷却水	1.854E+06 ton	\$24,096.90
合計		\$2,739,470.19

原料コスト

種類	使用量	年間費用
2-ブタノール	8.25.E+04 ton/year	\$82,478,259.09

5. 設計結果に至った経緯

5.1. 物性推算の選定

物性推算は分離挙動に強く影響する。選定経緯として、まず、Aspen HYSYS の Property package selection の中に、Chemical System 用の物性推算を選び、次に高圧（10 bar 以上）のための物性推算法を選定した。まず、メチルエチルケトン(以下、MEK) と 2-ブタノール（以下、SBA）の分離挙動について調べる。この二成分の分離には BWRS, GCEOS, Glycol Package, Kabadi-Danner, Lee-Kesler Plcoker, MBWR, Peng-Robinson, PR-Twu, PRSV, Sour SRK, Sour PR, SRK-Twu, Zudkevitch-Joffee が HYSYS から推薦された。しかし、BWRS, GCEOS, Glycol Package, PR-Twu, PRSV, SRK-Twu しか MEK-SBA 間のバイナリーパラメータを推算できないため、それらの物性推算法について以下の図のように X-Y 線図を描いた。

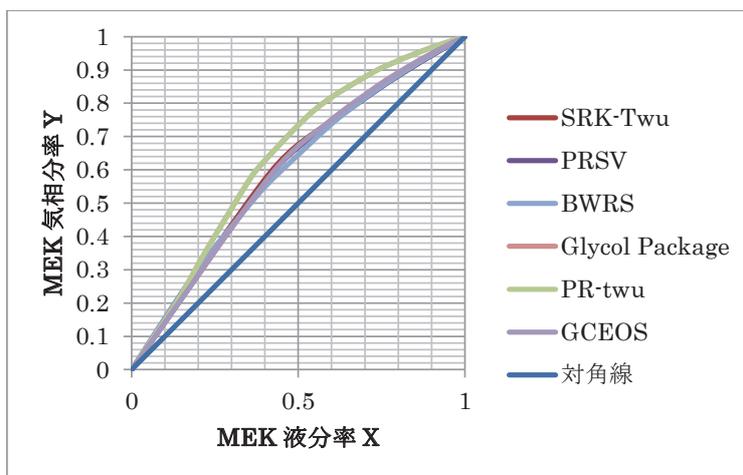


Figure 1 MEK-SBA の XY-線図

また、フラッシュ分離における MEK と水素の物性推算による分離挙動の違いについて調べてみた。結果は以下のグラフに示す。

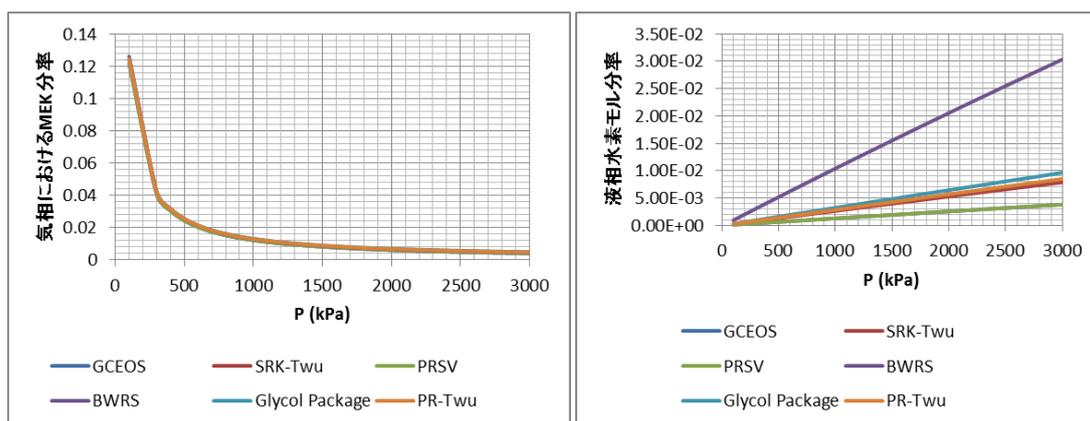


Figure 2 各物性推算の液相における水素、気相における MEK の分離挙動

以上のグラフから、BWRS (Benedict-Webb-Rubin-Starling) 状態方程式による物性推算は MEK-SBA と MEK-水素のほかと比べて最も厳しい分離挙動を示すため、設計する装置に余裕を持たせるために、BWRS を選定した。

5.2. 転化率の考え方および設計方針

この反応は以下の平衡定数を持つ平衡反応である。

$$\log K = \frac{-2790}{T} + 1.51 \log T + 1.871$$

以上の式に基づき、平衡転化率 X を計算した結果が以下のグラフに示す。

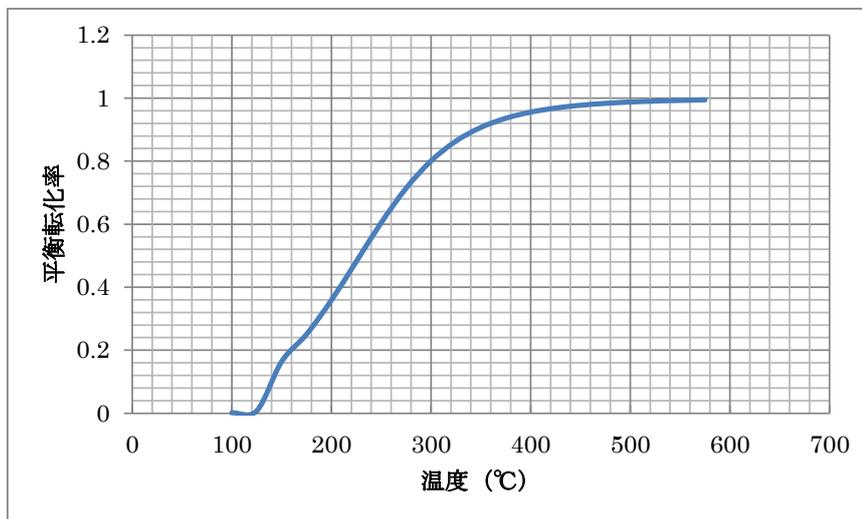


Figure 3 平衡転化率

反応温度は 500°C 以下である。また、500°C のときの平衡転化率が 99.6% である。すなわち 500°C を保つことができれば、そのような転化率が得られる。また、Le Chatelier の原理の通り、生成物は平衡を左に移動し、転化率を低くするため、反応器に入る原料、あるいはリサイクルする未反応物の中に生成物を含まないようにする。さらに、同原理より、全圧を低くすることで平衡は右へ移行するため、なるべく低圧で行い、1.3 bar と設定した。

扱っている反応では、副反応が起きないため、選択率は常に 100% である。しかし、高い転化率を得るために、熱をより多く供給しなければならない。一方、低い転化率を設定する場合には、分離にかかるエネルギーが大きくなる。そのようなトレードオフが存在するため、反応・分離を含めて最適な転化率を考える必要がある。方針として、いくつかの転化率の値を設定して、反応器から出る生成物の実行可能な分離法を考え、全体的なランニングコストを比較する。もっともコストの低い候補をさらに最適化を行うことにした。また、設計を行う際、プロセスの余裕、安定性、安全性を配慮する。

5.3. 反応器の検討

この反応は吸熱反応である ($\Delta H = 54.3 \text{ kJ/mol}$) ため、熱を反応器に供給する必要がある。まず、原料を許容温度まで加熱し、反応器に入れる。さらに、反応をさせながら反応器に熱を供給する。一本の管型反応器に熱媒体を流すためのジャケットを設置するだけでは、反応器の内部まで熱が届かないほか、圧力損失が大きいため、固定床触媒多管式反応器を考える。決定しなければならない設計変数として、反応器長さ、管の本数、管の直径、そしてユーティリティの条件 (入り口温度、流量) がある。

回の課題では、吸熱反応であり、また、生成物の MEK が 500°C 以上になると熱分解してしまうことを考慮すると、反応器入り口温度を高く保ち、反応器出口温度を 500°C 以下にする必要がある。

向流では、向流の入り口である反応器出口温度に高温の熱媒体が接触すると、出口付近ではすでに高い転化率になっており、吸熱反応が起こりにくいため、プロセス流体の温度上昇を抑制する要因がなく、MEKの熱分解を起こる可能性がある。そのため、向流の投入温度は高くとも600℃程度にしかできない。

一方、並流の場合は、熱媒体の投入温度が高くとも、まだ転化率は低いため、吸熱反応が十分に起こる。そのため、向流よりも高い温度で投入することが可能である。そのため、我々は、並流による反応器設計を行った。固定床触媒多管式反応器の概略図を以下の図に示す。

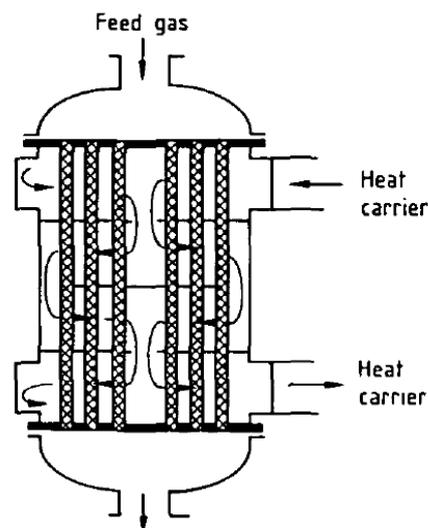


Figure 4 固定床触媒多管式反応器の概略図 (Eigenberger(1992)より)

ところで、以上のような熱の供給方法のほかに、ナフサ改質に用いられるような多段型断熱反応器 (Multibed Adiabatic Reactor) を設計し、各段の間に熱交換を行う方法も考えられる。この方法では熱媒体を用いて、受熱流体を490℃まで昇温できる。しかし、熱媒体のコストというがブタンを燃やすことよりも高いことが見込まれる。また、格段の間に、新たに加熱炉を設置しなければならないため、建設費が高くなる。この反応器のサイジング・コスト計算を行う際熱交換器とみなす。

5.4. 反応器への熱供給：加熱炉

前述のように、扱っている反応は吸熱反応のため、温度をできるだけ高くする必要がある。今回、500℃以下という制約があるため、なるべく500℃に近づけるように熱を供給する。問題文に記されているユーティリティのなかに、500℃熱媒体があるが、ブタンを燃料とした加熱炉で原料を加熱する方がコストが安いので、加熱炉の設計を考える。加熱炉の塔頂から出る燃焼ガス (Flue Gas) を反応器の shell 側に供給し、反応器を加熱することが可能である。

燃料 (ブタン) と空気を完全燃焼燃料比 (32.5 倍) で供給し、炉内で燃焼反応が起こり、受熱流体を加熱した後、排ガス (Flue Gas) として炉から出る。また、受熱流体は輻射熱といった形で加熱される。原料加熱のために、HYSYS 上では以下に示す炉の設計を行う。

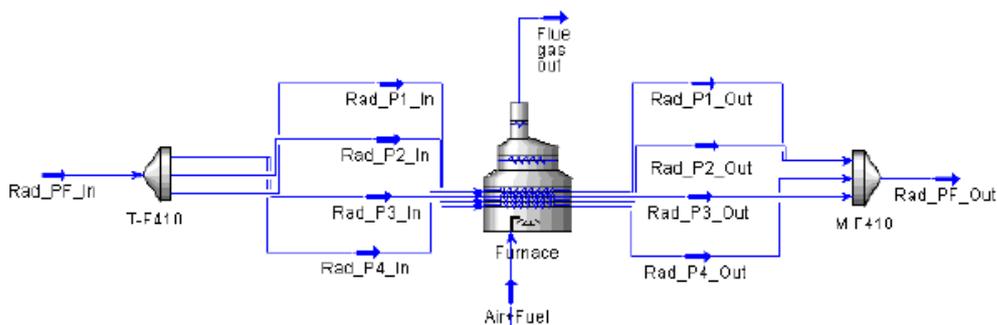


Figure 5 反応器熱供給用の加熱炉の設計

また、加熱炉・反応器の組み合わせの概略図は以下の図に示す。

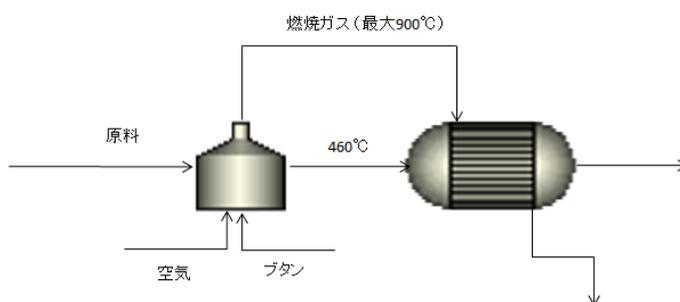


Figure 6 加熱炉と反応器の配置

決定しなければならない項目は以下のとおりである。

1. 燃焼ガスの温度

加熱炉の燃焼ガスの温度を以下のほう背印で設定することにした。

(ア) 燃焼ガスを反応器の加熱に使う場合、反応物との伝熱を確保するために、反応物の温度との差を 100°C 以上に設定する。すなわち、500°C まで原料を加熱する場合、排ガスの温度を 600°C 以上にする。しかし、温度が高くなることで、高価な反応器の寿命が短くなるため、燃焼ガスの最高温度を 900°C とする。

燃焼ガスの温度設定について不確実性があるため、900°C 付近で燃焼ガスの温度を変化させて、ランニングコストへの影響を後述の第 3 代替案を用いて調べた。結果が以下の図に示す。

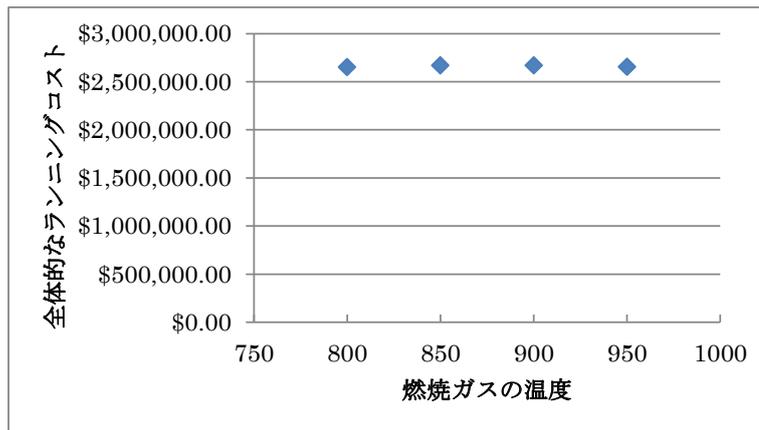


Figure 7 第一段反応器燃焼ガス温度を変化させたときの全体的なランニングコストに対する影響

他の用途にユーティリティーも変わってくるため、燃焼ガスを変化させてもランニングコストは変わらないのである。そこで、900°Cの設定は十分妥当であると考えた。

- (イ) 燃焼ガスを反応器の加熱に使わない場合、その受熱流体の温度と差を 100°C とする。すなわち、ある流体が 100°C で炉に入り、200°C で炉を出る場合、排ガスの温度を 300°C と設定する。排ガスの温度を低くするに伴い、伝熱効率が增加する。このような排ガスの設定は後述する LP Steam の BL 内での製造にて詳しく説明する。
- (ウ) 反応器出口の燃焼ガスの温度は 300°C 以上であり、そのまま大気中に出すと、環境負荷を与えるほか、スタック（煙突）の腐食の原因になるため、原料加熱に再利用し、排ガスの許容温度まで冷却するといった二つのメリットが得られる。

2. 受熱流体の目的温度

- (ア) 加熱炉の燃焼状態によって、燃焼ガスの温度やプロセス流体の温度は変動する。原料を反応器の許容温度 500°C に設定すれば、加熱炉の変動によって 500°C 以上になり、原料の分解の恐れがあるため、40°C の余裕をもって加熱することにした。すなわち、原料は最大 460°C まで加熱することにした。

3. 燃料・空気の流量

燃料の流量は 2. の温度設定を目標にして HYSYS の Adjust 操作を用いて調節する。また、空気の流量はすべてのボタンが完全燃焼すると仮定する場合の理論空気流量、すなわちボタンのモル流量の 32.5 倍である。

4. 輻射伝熱領域での受熱流体の分割

効率的に輻射伝熱を行うために、伝熱面積を大きくする必要がある。受熱流体を分割することで、伝熱面積が増加する。そのため、受熱流体を 4 つに分割し、加熱炉を通す。

5.5. 反応器の設計変数の決定

まず、長さ 1 m、ユーティリティーの流量、温度管を固定して、直径 D と本数 N を変えてみた。本数が多くなるにつれ、各管反応器における流量が小さくなり、滞留時間が大きくなるが反応器体積も大きくなる。また、各管の直径が大きくなるにつれて、流速も小さくなり、平均滞留時間も大きくなり、反応器体積も大きくなるのが考えられる。以下のグラフから、各本数の値に最大転化率を与える直系が存在することがわかる。反応器の本数が多くなるに従って、反応器が複雑化し、建設費が高くなると考

えられる。5000 本以上の本数では、最大転化率を与える直系はさほどかわらないため、5000 本で 0.125 m の直径の反応器を決定した。そのときの反応器中の MEK の流量の挙動は一番下のグラフに示す。そこからわかるように、長さ 0.5 以上であれば、ほぼ平衡に達していることがわかる。そのため、反応器の長さを 0.5 m とした。

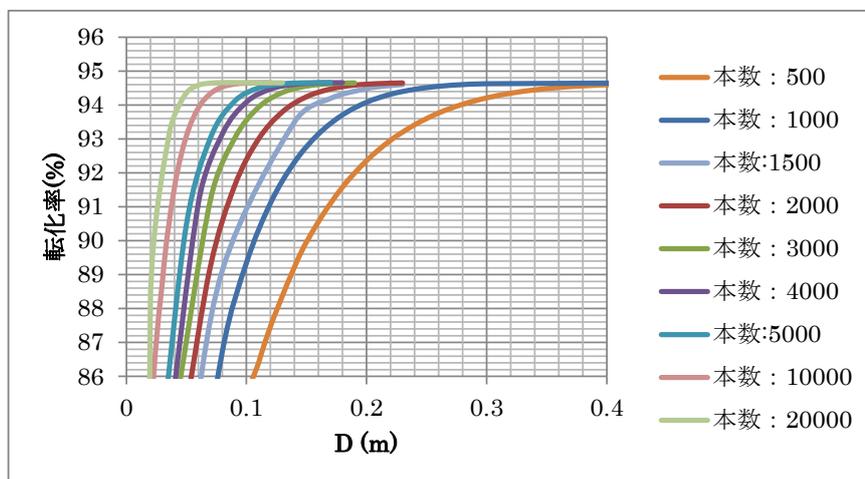


Figure 8 長さ 1 m, ユーティリティー流量 130 kmol/h、入り口温度 500°Cにおける転化率の変化

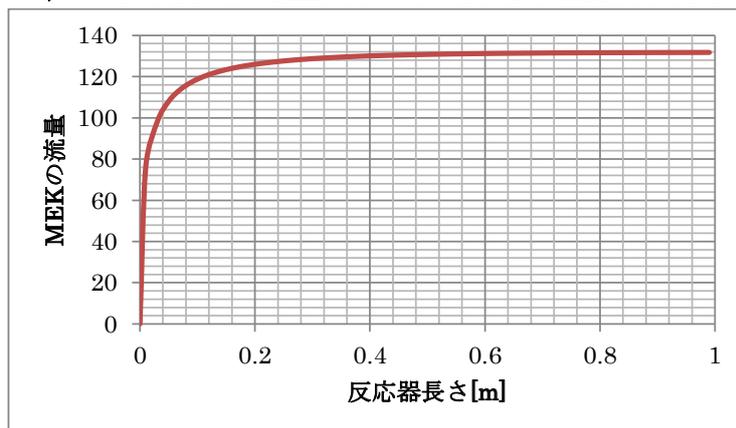


Figure 9 反応器内の MEK 流量の変化

後述する代替案の中に、第二段反応器を設置し、最大転化率を得る代替案がある。第二段反応器の設計は第一段反応器と同じ本数、管直径、原料の入口温度で設計し、第二段反応器用の加熱炉の燃焼ガスの温度の設定と反応器長さを変更した。第一段反応器と同じ燃焼ガス温度に設定をすると、反応器内の原料の温度が 460°C よりも高くなり、上述ののように、加熱炉の温度の変動によって原料温度が 500°C まで上昇し、原料が分解する恐れがあるため、原料温度を 460°C になるように加熱炉の燃焼ガスの温度を 580°C に設定した。また、以下の図に示すように、反応は短い滞留時間（反応器長さ）で進むため、0.05 m と設定した。

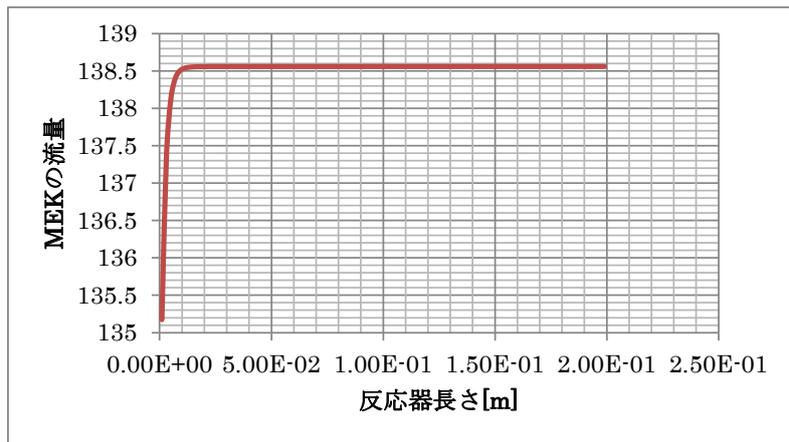


Figure 10 第二反応器の内の MEK 流量の変化

5.6. 分離の検討

それぞれの化学種のアントアン定数は以下の表にまとめ、それを Figure 12 に P-T 線図として描く。

Table 1 それぞれの化学種のアントアン定数 p/mmHg, T/°C

	A	B	C
H2	5.92086	71.6151	276.34
MEK	6.38469	916.01	181.84
SBA	7.69369	1414.27	194.35

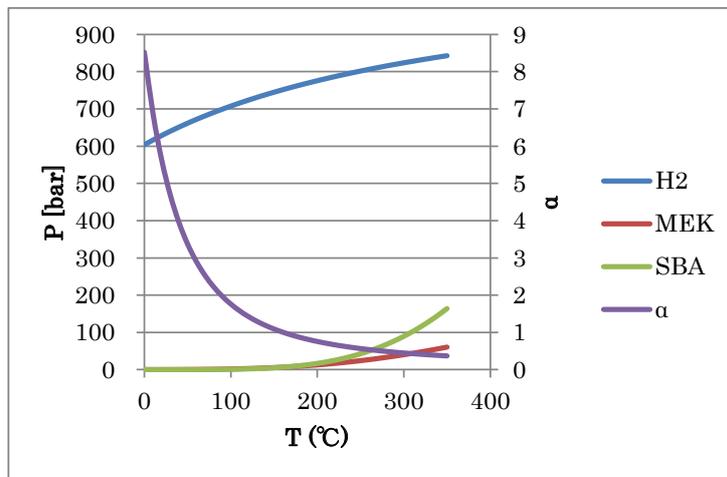


Figure 11 MEK と SBA と水素の比揮発度及び飽和蒸気圧の温度変化

Figure 12 から、水素の沸点が低いことがわかるため、まず水素を分離し、その後 SBA と MEK を分離する。具体的な分離順番として以下図に示すとおりである。まず、冷却水で 40°C まで温度を下げ、80% 以上の MEK および SBA をフラッシュの下部から取り出す。一方、フラッシュの上部から MEK および水素を取り出し、MEK・水素分離工程を経て、水素を副製品として回収し、MEK を冷却水フラッシュの MEK と混合させ、それを減圧蒸留塔に入れ、MEK を生成する。塔低から出る SBA を反応器に戻す。

水素分離の候補として、フラッシュによる分離と放散塔による分離を考える。また、MEKとSBAの分離は蒸留塔を考える。それぞれの単位操作を5.6から5.9まで説明する。また、リサイクルが必要な分離工程の概略図は以下の図に示す。

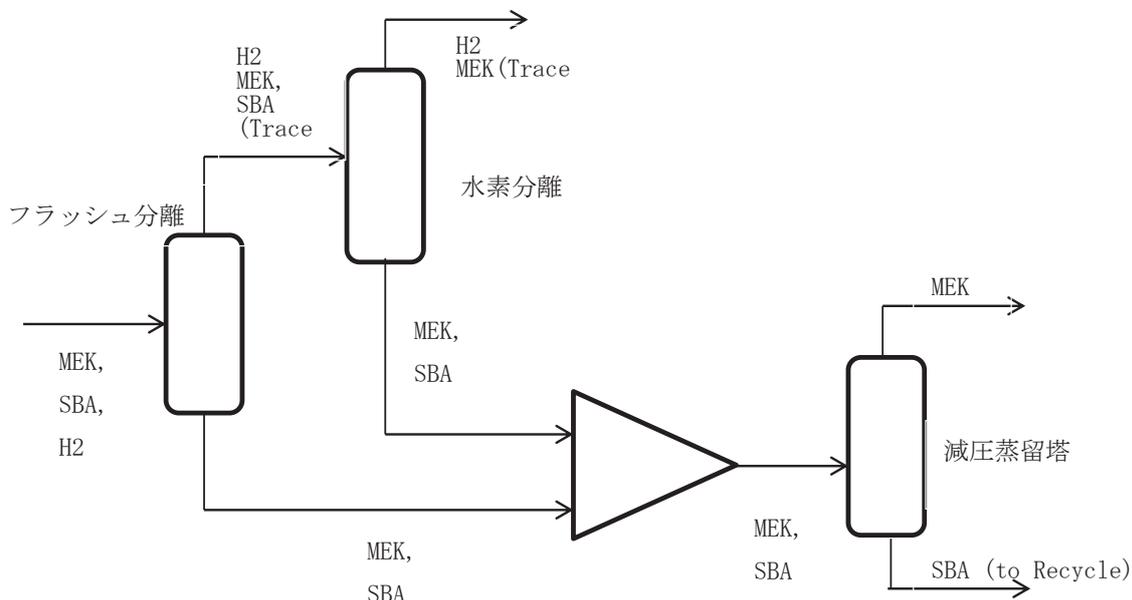


Figure 12 分離工程のBFD

5.7. 蒸留塔の設計

上述の Antoine 定数から、MEK 及び SBA の比揮発度 α が以下の図に示す。150°C以下の条件下温度が低い方が、比揮発度が大きいいため、低温で行った方がよいことがわかる。低温で行う場合、分離するための操作圧力も常圧より低い、すなわち減圧蒸留が必要となる。しかし、減圧蒸留の建設費が高くなるというデメリットがある。

操作温度に関しては、利用可能なユーティリティーから検討する。Figure 14 に最小温度差を 10°Cとして、LPsteam と冷却水の操作温度を描く。そこからわかるように、操作圧力は 20kPa から 3bar までである。しかし、操作圧力が大きくなるにつれてリボイラの負担が大きくなるため、なるべく低い圧力が好ましい。よって、操作圧力を 20kPa にした。

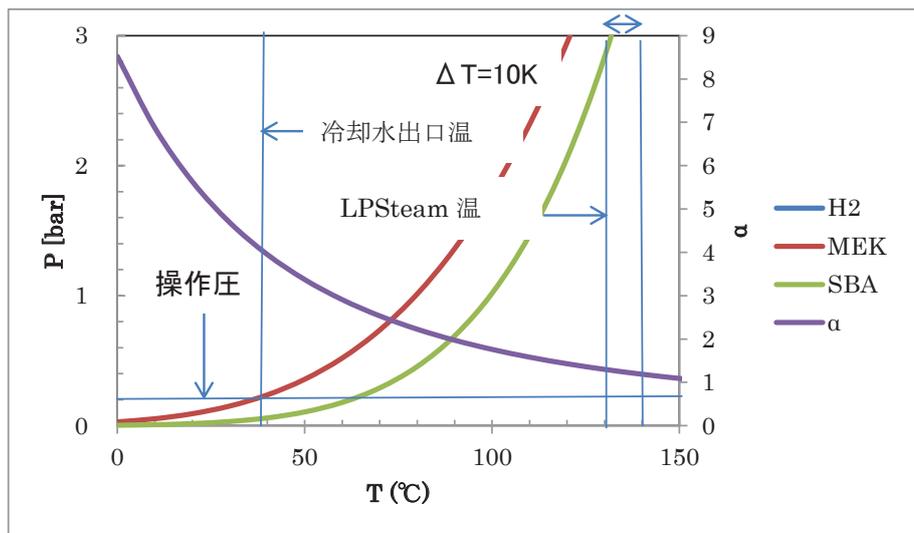
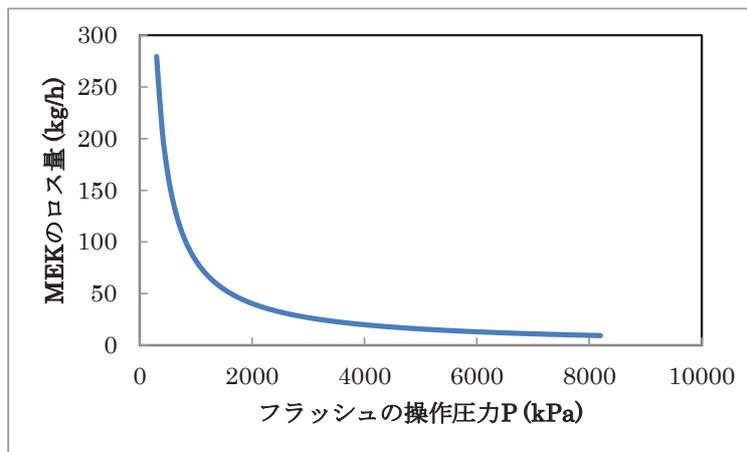


Figure 13 低温における MEK と SBA の比揮発度及び飽和蒸気圧の温度変化

5.8. フラッシュ分離

、水素を MEK 及び SBA の混合物から分離するとき MEK 及び SBA も水素とともに気体としてフラッシュの上部からでる可能性があるため、原料・生成物のロスを押さえるためにフラッシュの温度を低く、圧力を高く操作する必要がある。操作圧力と MEK のロス量の関係は以下のグラフに示す。3000kPa 以上の条件下で操作してもロス量の変化が鈍くなるため、3000 kPa に設定した。



5.9. 放散塔による分離

水素分離を行うために、フラッシュによる分離のほかに、放散塔、用いて分離することも考えられる。放散塔についても検討してみた。溶媒として、SBA を以下の理由で選んだ。

1. 新しい溶媒をなるべく選ばない。新しい溶媒を入れることで、その溶媒の回収・リサイクルを行うときに、新たな装置とエネルギーによるコストが必要になる。
2. MEK は SBA に可溶である上に、SBA の蒸気圧が MEK よりも低いため、MEK が SBA に混合されると、SBA が存在しない場合よりも蒸気圧が下がり、フラッシュ分離よりも低い圧力で水素とともに排出されることが抑えられる。

操作条件（圧力、温度）に関しては 10 bar の圧力で冷却水の冷却温度（40℃）で、段数を 5 段で放散塔を設計した。SBA 溶媒の流量は次の蒸留塔のランニングコストに影響するため、蒸留塔のランニングコストと放散塔の塔頂のロス量を最小化することを目的とし、SBA の流量を決定した。

5.10. LP Steam の製造

前述のように、LP Steam（加熱用飽和低圧スチーム）は蒸留塔のリボイラの熱供給に用いられる。ランニングコスト削減のために BL 内で製造することを考えた。LP Steam は以下の図に示すように製造・利用されるシステムを作る。

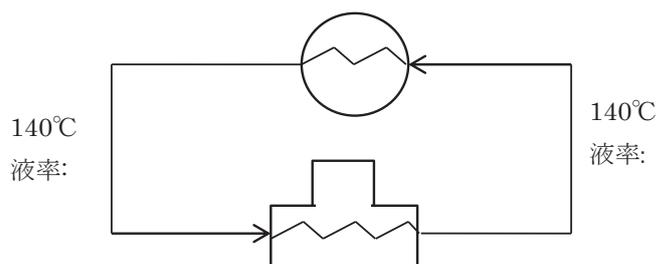


Figure 14 LP Steam の製造・利用の概略図

LP Steam の製造に用いられる加熱炉は前述の原料加熱用の加熱炉と異なる設計をする。なぜなら、排ガスはすでに使わないほか、環境負荷を下げるためにできるだけ低い温度で系外に排出する。前述のように、受熱流体の温度と差を 100℃とする。すなわち、LP Steam は 140℃で炉に入り、140℃で炉を出るため、排ガスの温度を 240℃と設定する。排ガスの温度の設定以外は原料加熱用の加熱炉と同様な設計を行う。その結果、問題文に記されている値段（\$30/ton = 1.40×10^5 /kJ）に対して、ブタンを燃やす場合では、 9.65×10^5 /kJ と安いのであるが、第 3 代替案のように LP Steam が少ししか必要としない場合は BL 外部からの LP Steam を用いることにした。

5.11. コンプレッサー（圧縮機）の設計

生成物である MEK と水素をフラッシュを用いて分離するとき、30 bar という高い圧力が必要な場合がある。実際のコンプレッサの効率は温度が高くなると気体の密度が下がるため落ちてしまうことに加え、コンプレッサの潤滑油の酸化による劣化、安全性の問題、¹そして、高温になると原料物や生成物の分解してしまうことから、今回 200℃以上になる加圧は行わず、コンプレッサ数機を直列に接続して用いて途中に冷却を入れる設計を行う。

5.12. 代替案およびそのランニングコスト評価

5 つの代替案を考えた。それぞれの代替案を以下の通りである。全代替案について、MEK のロス量を 30kg/h の共通の条件として設定する。そうすることで、原料費に関して各代替案は同じとなり、比較が簡単になる。各代替案を左から順に説明する。

1. 加熱炉の排ガスの温度を 560℃（反応器加熱するための最低温度）に設定し、排ガス全量を反応器加

2020

¹ Maintenance Technology International, Inc. Troubleshooting Compressor Problems: Compressor Types and Applications

URL: <http://fileservur.urimarketing.com/LU/CourseCatalog/CompressorProblems.pdf> 2012/8/31 アクセス

熱に使う。この場合、81%の転化率が得られたため、残りの SBA をリサイクルする必要があるほかに、目標の生産量を得るために、反応器に余分に供給しなければならない。また、81%の転化率しか得られないのは反応器から出る生成物の温度が 273.15℃まで下がっているためだと考えられる。

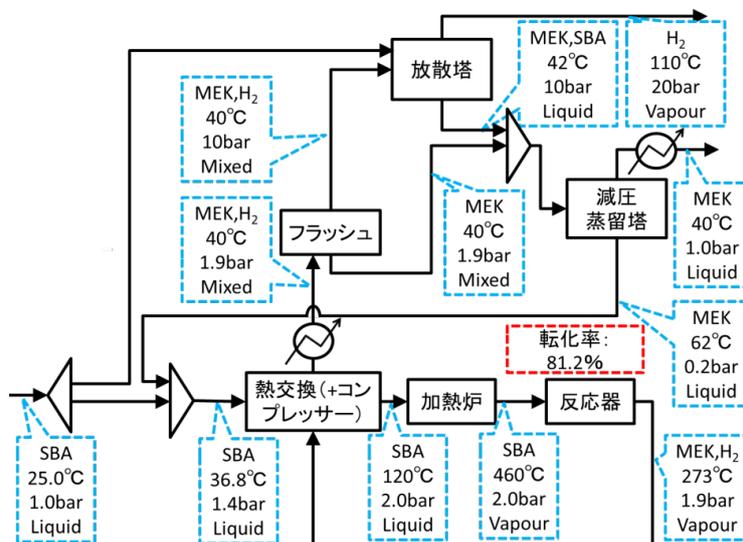


Figure 15 第1代替案のBFD

2. 1と同様な代替案であるが、LP Steam を Battery Limit 内にて製造される。
3. 2段反応器

加熱炉の排ガスの温度を 900℃（反応器加熱するための最高温度）に設定し、排ガス全量を反応器加熱に使う。この場合、95%と高い転化率が得られる。その後、生成物をさらに加熱炉を用いて加熱し、その排ガスを反応器の説明にもあったように 580℃に設定し、第二反応器を加熱する。この2段反応器を設置することで、99.64%の総括転化率が得られるため、残りの操作は反応器出口には MEK と水素との分離のみである。今回は、Flash 分離を2段で行うことにした。まず、反応器出口から、原料加熱で生成物が冷却され、その後さらに冷却水を用いて 40℃まで冷却する。そのような状態で、分離できるだけ MEK を第一段のフラッシュの下部から回収し、フラッシュの上部から MEK と水素を加圧、冷却し、残りの MEK を回収する。MEK のロスを抑えるためにかなりの圧力(30bar)が必要であるため、大きなコンプレッサーやそれに伴うランニングコスト（電力）が必要になる。この代替案の BFD は 2 ページに示す。

4. 加熱炉の排ガスの温度を 900℃（反応器加熱するための最高温度）に設定し、燃焼ガス全量を反応器加熱に使う。この場合、97.71 と高い転化率が得られ、この状態で分離工程に入る。今回は、冷却水で冷却し、フラッシュで分離した後、フラッシュの上部から MEK と水素を加圧・冷却し、SBA を溶媒とした放散塔に入れる。次に、放散塔の塔低から MEK, SBA を減圧蒸留塔を用いて分離し、塔頂から出る MEK を製品とし、塔低から出る SBA を反応工程にリサイクルする。

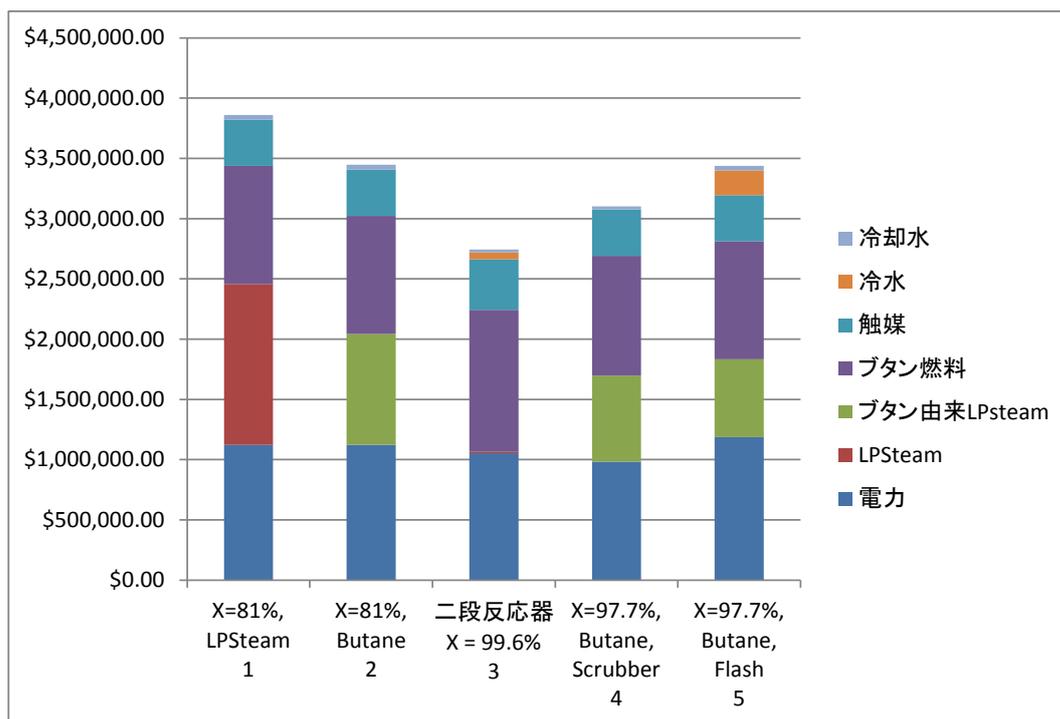


Figure 18 各代替案のランニングコストの計算結果

ユーティリティーの面から、第 3 代替案がもっともユーティリティコストが小さいほか、プロセスの複雑さは他の代替案と比べてシンプルであるため、最終的な設計として決定し、装置のサイジングや建設費の計算を行った。

参考文献

- [1] Eigenberger, Gerhart. 1992. Fixed-Bed Reactors. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Vol B4
- [2] Park, Young Cheol, Lee, Tai-yong. Computer-Aided Synthesis of MEK(Methyl Ethyl Keton)
- [3] Maintenance Technology International, Inc. Troubleshooting Compressor Problems: Compressor Types and Applications
URL: <http://fileservur.urimarketing.com/LU/CourseCatalog/CompressorProblems.pdf> 2012/8/31 アクセス
- [4] Seng-Rung Wu, Chien-Hua Chen, I-Lang Chung, Hom-Ti Lee, Combustion of low-calorific waste liquids in high temperature air, Fuel, Volume 90, Issue 8, August 2011, Pages 2639-2644

2. プロセス設計部門

2.1 プロセス設計課題 (Rev.1)

2012(平成24)年4月18日 Version 1

平成24年度「第11回 プロセスデザイン学生コンテスト」 プロセス設計部門

「バイオ原料由来エタノールからプロピレンの合成」

主催：化学工学会・SIS 部会・情報技術教育分科会

共催：化学工学会・人材育成センター

【課題】

現行のナフサ分解から得られるプロピレンは供給に限界がある。したがって、植物由来の非石油系資源からプロピレンを高効率に生産できれば、原料調達のセキュリティー向上に寄与するだけでなく、これを利用して合成したポリプロピレンは、カーボンニュートラルなバイオポリマーとして日本の化学産業の国際競争力強化につながると考えられる。このため、NEDO では既にバイオアルコールからのプロピレン合成プロセスについて多方面から研究開発を進めている。

昨年のコンテストでは、水分を含んだバイオ由来エタノールを原料としてプロピレンを製造するプロセスの設計を課題としたが、今年度は原料の範囲を、バイオエタノールに限らず、バイオ由来の様々な原料からのプロピレン製造プロセスの設計を課題とする。原料はバイオアルコールだけでなく、バイオ由来のものであれば何でも構わない。この部門では、プロセスシミュレーション部門のようにコストなどのシミュレーション結果を重視するのではなく、利用する反応スキームやそれを効果的に行う独創的なプロセス設計を重要な評価項目とする。このため、プロセスシミュレータを利用しても構わないが、ソフトを使わないでプロセスを設計しても構わない。

条件は以下の通りである。その他の条件は自由に決定して構わないが、必ず根拠（各種文献、実験結果、推定した場合にはその理論的説明）などに基づいて条件設定を行うこと。

なお、昨年度のコンテストでは NEDO の提案に比較的近いプロセスの設計が提案されましたが、このプロセスにとらわれない独創的なプロセスの提案を期待しています。

【サイトコンディション】

原料： バイオ由来の原料なら何でも構わない

また、この他に、化学プラントに通常供給される用役（水、スチーム、燃料、電気、冷水）は適宜、利用して構わない。

【重要な評価項目】

- ・ 反応および分離スキームを含めた独創的なプロセスであるか
- ・ カーボンニュートラルを意識したプロセスであるか
- ・ 実現性のあるプロセスであるか
- ・ 設定条件等が適切な根拠に基づいているか

平成24年度「第11回 プロセスデザイン学生コンテスト」
プロセス設計部門
「バイオ原料由来エタノールからプロピレンの合成」

提出資料要項 Ver.1

次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3日(月) 6:00 pm 締切です。

1. 審査用資料 (WordまたはPDFファイル)

(1) BFD (Block Flow Diagram)

設計で得られた最終的なプロセスのBFD (またはPFD (Process Flow Diagram) ; 両方提出しても構わない) 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。

- ・ 機器等の名称 (反応部・反応器, 分離部・蒸留塔, 熱交換器など)
- ・ 機器等の接続
- ・ 可能な限り、主なStreamに条件 (圧力・温度など) を記述すること。なお、制御系は記述しなくてよい。

(2) 反応式 (反応スキーム) および反応器

提案したプロセスにおける反応式 (反応スキーム) をまとめる。また、これを実現するための反応器の形式について可能であれば記述する。

(3) 物質収支 Stream-Data-Table

主な Stream について、可能な限りその条件 (圧力, 温度, 流量, 組成など) を表にまとめる。なお、電力を利用した場合には、その電力量もまとめる。

(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、述べる。

- ・ この部分が課題として重要な部分なので、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。
- ・ 以下の点に特に留意して述べること。

反応および分離スキームを含めた独創的なプロセスであるか
カーボンニュートラルを意識したプロセスであるか
実現性のあるプロセスであるか
設定条件等が適切な根拠に基づいているか

(5) 提出資料について

提出していただいた資料は、コンテスト後に公開する場合があります。

2.3 優秀賞以上のチームの提出資料

プロセス設計部門において優秀賞以上の受賞チームはありませんでした。