

CHEMCAD サンプルシミュレーション

本資料では CHEMCADにサンプルとして実装されているシミュレーションを紹介します。

1. 蒸留塔および吸収塔 -Distillation and Absorption-

- 大気圧蒸留による原油の分離
- 燃焼ガスの湿式脱硫
- 水-IPA 共沸蒸留
- 反応蒸留による酢酸エチル生産

2. 精製 -Refining-

- 接触分解器でのガス分離
- 水素処理装置

3. ガス処理 -Gas Processing-

- 廃水中の H₂S, NH₃除去
- サワーガスのMEA処理プラント

4. ユーティリティと動力 -Utility and Power-

- ガスタービン シミュレーション
- 動力装置の蒸気供給バランス
- 産業用発電プラントのフローシート

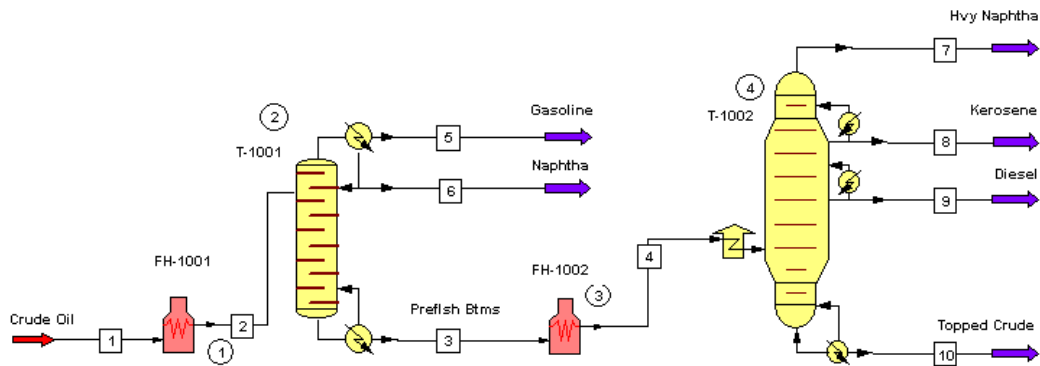
5. 特殊な化学プロセス -Specialty Chemistry Process-

- 感度解析(MEK製造プロセス)
- SBA脱水素によるMEK合成プロセス



CHEMCAD サンプルシミュレーション

大気圧蒸留による原油の分離



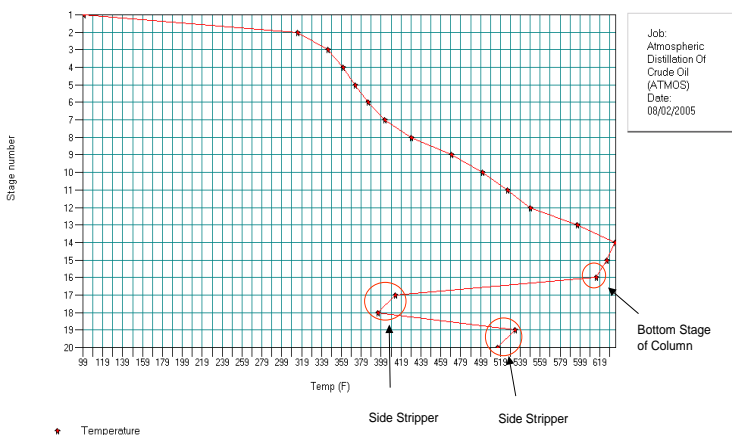
シミュレーション概要

原料である原油は加熱炉で 204°Cに加熱され、蒸留塔”T-1001”の塔底付近に供給されます。この蒸留塔はコンデンサー、サイドストリッパー(ナフサ用)、サイド交換器、循環ポンプを持つ 12段の塔です。T-1001の塔底製品は第二の加熱炉で 315°Cに加熱され、蒸留塔”T-1002”に供給されます。T-1002はコンデンサー、二つのサイドストリッパー(ケロシン用、軽油用)、サイド交換器、循環ポンプを持つ 15段の塔です。サイドストリッパーと同様に、蒸留塔のフィードにはシミュレーションで計算された流れが与えられます。

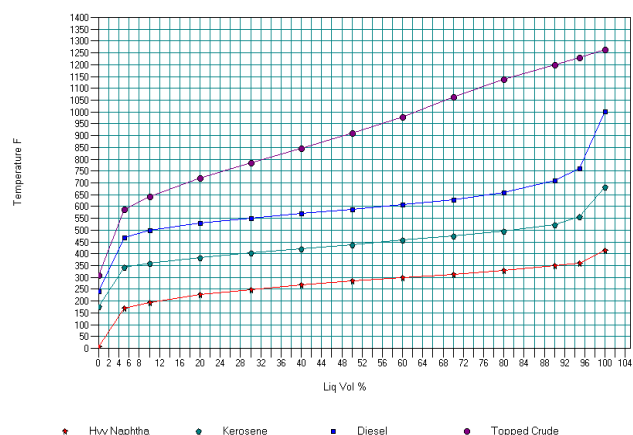
Notes ;

原油のような多種の炭化水素の混合物からなる原料をシミュレーションで取り扱う場合、構成成分を特定することが難しくなります。そのため、CHEMCADには原料の蒸留曲線から疑似成分を作成する機能が実装されています。このシミュレーションの計算では、これら疑似成分の物性値を使用しています。

Tray Temperature Profile, Unit 4

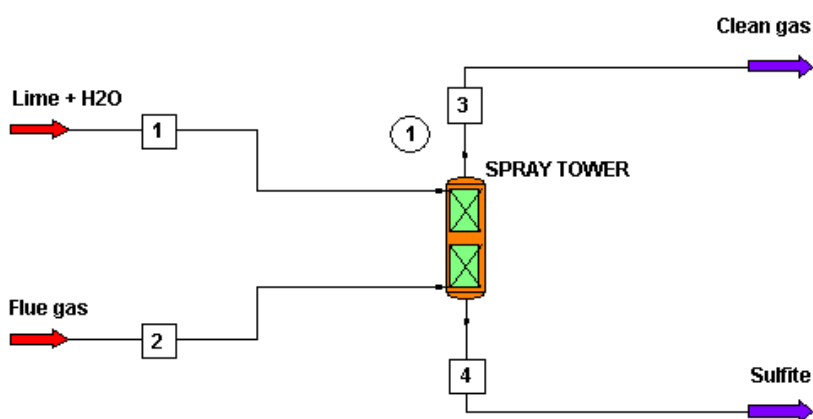


TBP at 1 atm



CHEMCAD サンプルシミュレーション

燃焼ガスの湿式脱硫



ストリーム番号	2	3
名前	Flue Gas	Clean Gas
-- 全体 --		
質量流量 kg/h	1800000.3750	1818687.2500
温度 C	40.0000	14.9609
圧力 bar	1.1000	1.0000
蒸気モル分率	1.000	1.000
液体積 m3/h	1464406.6250	1507187.6250
標準蒸気 0C m3/h	1387055.8750	1411109.5000
流量 kg/h		
Sulfur Dioxide	1798.2010	0.0000
Carbon Dioxide	179820.2188	180915.0000
CalciumCarbonate	0.0000	0.0000
Water	0.0000	19391.0273
Nitrogen	1618382.0000	1618381.2500
H+	0.0000	0.0000
OH-	0.0000	0.0000
SO3--	0.0000	0.0000
HSO3-	0.0000	0.0000
CO3--	0.0000	0.0000
HCO3-	0.0000	0.0000
Ca++	0.0000	0.0000

シミュレーション概要

このシミュレーションでは燃焼ガスの湿式のクリーンアッププロセスを計算します。スプレー塔の上部に炭酸カルシウムの懸濁液が塔頂に供給され、塔底から供給された燃焼ガスと向流で接触します。SO₂は亜硫酸塩となり、CO₂が放出されます。このシミュレーションは電解質モデルの典型的な使用例です。

Notes ;

湿式脱硫法は懸濁液中の炭酸カルシウムとSO₂の反応によるイオン吸着に基づきます。このプロセスでは気液平衡のほか、イオンの平衡を考慮する必要があります。このような計算を行うため、CHEMCADは電解質データを使用し、真の化学種によって計算を行います。

電解質データは、例えば $H_2O \rightarrow H^+ + OH^-$ のような電解反応の平衡データからなり、系を構成する全ての電解質のデータを基に各化学種の BIP を計算します。

選択した成分:

名前	CAS	最終修正日
Sulfur Dioxide	7446-09-5	2/27/2008 10..
Carbon Dioxide	124-38-9	2/27/2008 10..
CalciumCarbo...	1317-65-3	2/27/2008 10..
Water	7732-18-5	2/27/2008 10..
Nitrogen	7727-37-9	2/27/2008 10..

見かけの成分

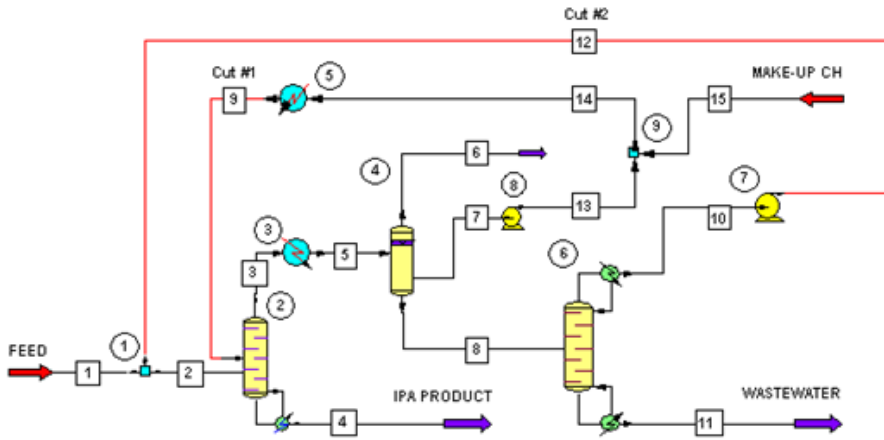
選択した成分:

名前	CAS	最終修正日
Sulfur Dioxide	7446-09-5	2/27/2008 10..
Carbon Dioxide	124-38-9	2/27/2008 10..
CalciumCarbo...	1317-65-3	2/27/2008 10..
Water	7732-18-5	2/27/2008 10..
Nitrogen	7727-37-9	2/27/2008 10..
H+		2/27/2008 10..
OH-		2/27/2008 10..
SO3--		2/27/2008 10..
HSO3-		2/27/2008 10..
CO3--		2/27/2008 10..
HCO3-		2/27/2008 10..
Ca++		2/27/2008 10..

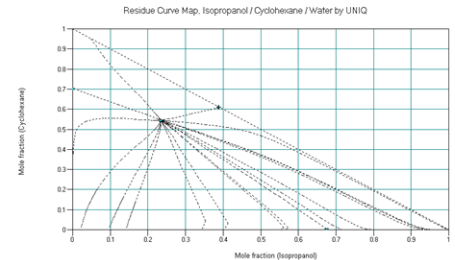
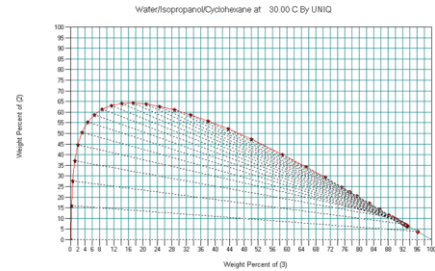
真の化学種

CHEMCAD サンプルシミュレーション

水-IPA 共沸蒸留



Stream No.	1	4	11	9	12
Name	FEED	IPA PRODUCT	WASTEWATER	Cut #1	
- - Overall - -					
Molar flow kmol/h	331.4059	615.0576	216.3475	1711.1920	39.3506
Mass flow kg/h	37000.0009	33097.0000	3902.9679	119242.2616	1023.5171
Temp C	123.3812	120.1878	119.9389	104.0272	98.6178
Press bar	4.5000	4.0000	2.0000	4.0000	4.5000
Flowsheet in kg/h					
Isopropanol	21450.0006	21442.1478	7.2090	39420.6427	1553.9932
Water	5550.0002	1654.8252	2095.1589	2447.9465	225.8519
Cyclohexane	0.0000	0.0152	0.0000	77272.6802	22.6714



Bubble point: 1.01 bar
 Isopropanol = 82.260 C
 Cyclohexane = 80.720 C
 Water = 100.000 C

Binary Azeotrope
 (Cyclohexane/Water) = (0.702, 9.298) at 69.104 C
 (Isopropanol/Water) = (0.874, 0.320) at 80.144 C
 (Isopropanol/Cyclohexane) = (0.208, 0.972) at 68.729 C
 Ternary Azeotrope
 (0.294, 0.648, 0.058) at 63.548 C

シミュレーション概要

フィードはイソプロピルアルコール (IPA) 85 wt% と水 15 wt% から成る飽和液 37 ton/h です。この系では、IPA 約 88 wt% で共沸します。このプラントではシクロヘキサンをエントレーナとして使用しています。要求されている IPA 純度は 95 wt% でした。環境面から、排水にもシクロヘキサンは含まれていない必要があります。

フィードは回収塔 #6 からの回収分 (エントレーナ) と混合された後、共沸蒸留塔 #2 に供給されます。塔頂にはシクロヘキサン - IPA - 水の飽和液が還流として戻り、塔底からは純 IPA が回収されます。3 成分共沸点近傍となる塔頂で蒸気は 30°C でサブクールされ凝縮します。フラッシュ #4 では、凝縮液が二液相に分離します。軽液相は共沸蒸留塔への還流として塔に戻ります。重液相は溶媒回収塔 #6 に送られます。回収塔の塔底からは排水が回収され、塔頂から回収された溶媒はフィードと混合されてリサイクルします。

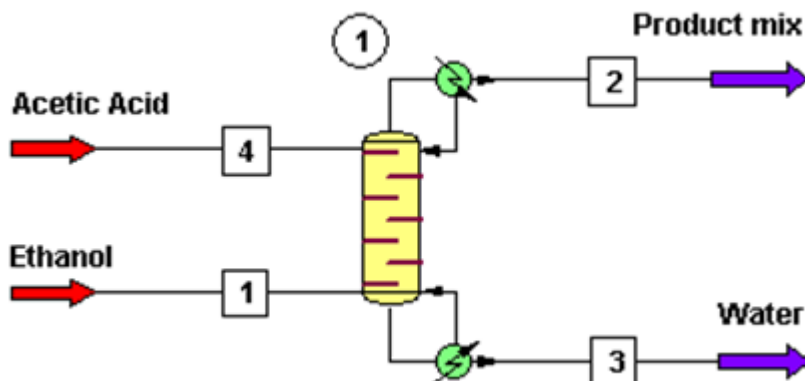
Notes ;

気液平衡は UNIQUAC モデルで計算されています。このモデルは非理想的な液液気平衡を精度良く予測できます。

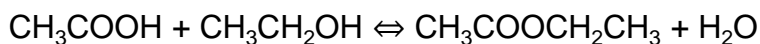
共沸蒸留塔の計算が難しいのは、リサイクルされる還流ストリームの組成と流量に信頼できる初期値が必要となるためです。さらに、この例ではプラントの制約からシクロヘキサンはリサイクルループと塔内のみが存在します。この問題を解決する方法として、まず初めに軽液のみを含むダミーのストリームを作成し還流を定義し、第 2 のリサイクルをなしとして共沸蒸留塔を計算します。様々なリボイラ熱負荷を共沸蒸留塔に指定することで分離の傾向を確認できます。ダミーストリームの流量と組成をいろいろ変更してシミュレーションすることも塔の挙動を理解することに役立ちます。

CHEMCAD サンプルシミュレーション

反応蒸留による酢酸エチル生産



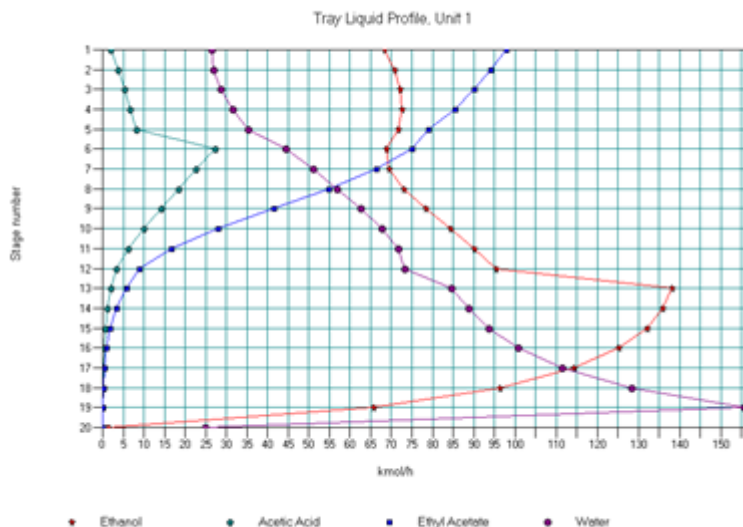
シミュレーション概要



上記の可逆エステル化反応は酸/アルコールの比が1:1の場合 70 °C, 酢酸の転化率 65%で平衡に達します。平衡を右辺側にシフトするには、反応物を過剰にするか、反応環境から生成物を除去します。エステルは揮発性であるため、反応蒸留による生産が有効です。

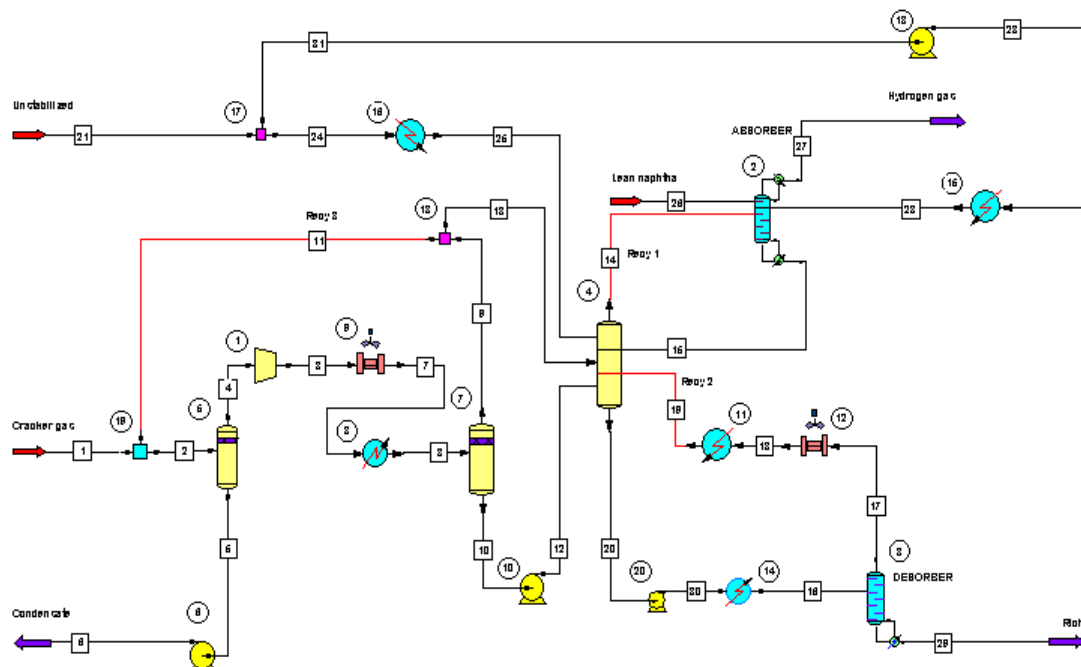
Notes ;

エタノール-水系は典型的な共沸系です。酢酸-水系は気相において酢酸分子の会合が起こる非理想的な系です。エステル-水は広い濃度範囲で2液相を形成します。非理想性を考慮するため、気液平衡はNRTLモデルを使用して二液相を予測し、気相会合モデル(Marek and Standartの方法)を適用しました。CHEMCADの蒸留塔単位操作モデル(SCDS塔)では反応を指定することができます。この例では、エステル化反応の順反応と逆反応についてアレニウス型の反応速度を与えています。



CHEMCAD サンプルシミュレーション

接触分解器でのガス分離



シミュレーション概要

このシミュレーションは多数のリサイクルループがあるプロセスをモデル化しています。

クラッカーガス(ストリーム 1)はリサイクル流れ(ストリーム 11)と混合されフラッシュ分離(操作 6)の後、12 [kg/cm² G]に圧縮(操作 1)、冷却され(操作 8, 9)、再びフラッシュ分離されます(操作 7)。ネットガスと圧縮された液体は、フローシートの中心であるコレクターに与えられます(操作 4)。コレクターからのオフガス(ストリーム 14)は吸収塔(操作 2)にナフサと併せて送られます。吸収塔の塔頂製品は水素リッチガスとして回収され、塔底製品はコレクターに戻されます。コレクターの液体製品は脱着塔に送られ、塔底からナフサが回収され(ストリーム 28)、塔頂製品はコレクターに戻されます。

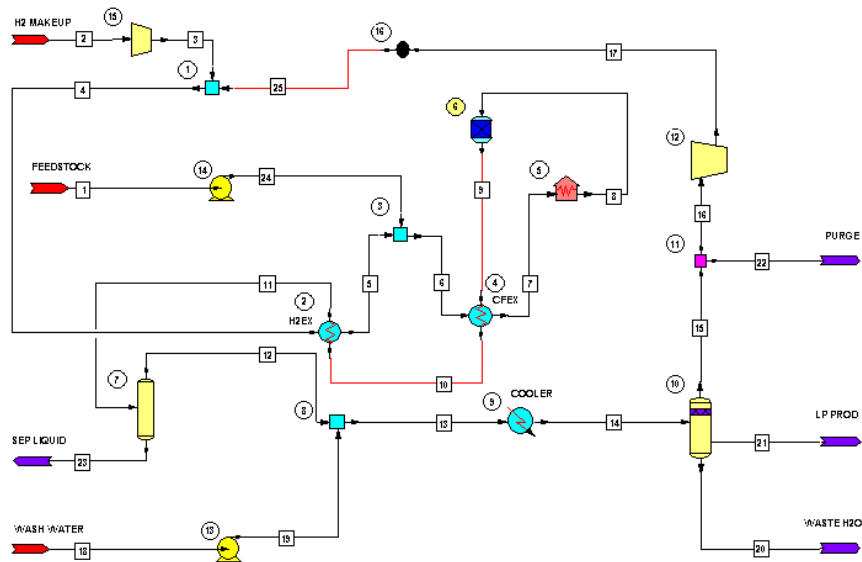
Notes ;

リサイクルループが存在すると、ループを分断するストリーム(=カットストリームが)赤く表示されます。このカットストリームはフローシート計算の出発点となります。

このプロセスは系の成分にエチレン、プロピレンを含んでいますので、エタン/エチレン、および、プロパン/プロピレンのための特別な熱力学の係数を使用しています。これらのデータは CHEMCAD に内蔵されています。

CHEMCAD サンプルシミュレーション

水素処理装置



シミュレーション概要

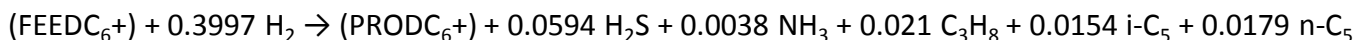
このプロセスは、水素化処理によって石油系炭化水素(C6以上)から硫黄と窒素を除去します。

フィードはポンプで昇圧され、リサイクルガスと混合された後に、熱交換器 CFEX内で反応後の高温ガスにより加熱されます。その後、フィードは反応温度近くまで加熱され、水素化処理リアクターに供給されます。リアクターでは、ナフサ中の硫黄と窒素はそれぞれ硫化水素とアンモニアに変換され、アルケンが飽和炭化水素となります。反応ガスの熱は熱交換器 CFEXで回収されます。熱交換器 H2EXで反応ガスから熱がさらに回収され、この熱はリサイクルされた水素の加熱に使用されます。

冷やされた混合物はフラッシュドラムに送られ、軽成分がガスとして分離されます。このガスは水で処理され、冷却された後にフラッシュドラムで軽炭化水素と廃水が分離されます。ガスの一部はプロセスで生じた過剰な H₂S, NH₃の除去のためパージされ、残りは再び圧縮され新たに供給された水素ガスと混合されて、リサイクルガスとしてプロセスに与えられます。

Notes ;

精製プロセスにおける化学反応を定義することは容易ではありません。しかしながら、プロセスの In-Outが明らかになっている場合、CHEMCADによるプロセスのモデル化は非常に簡単になります。以下の化学量論式が組み立てられ、;

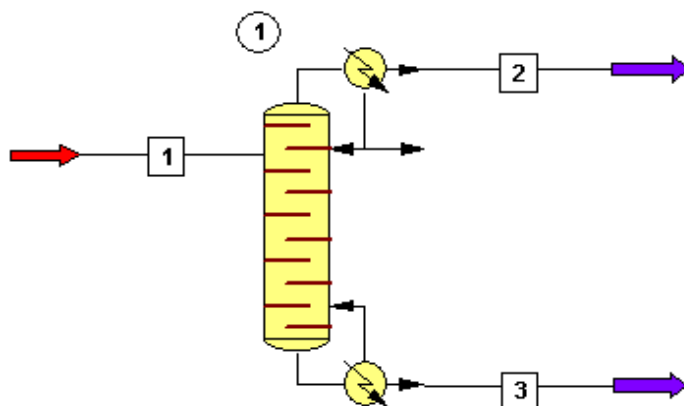


シミュレーションではリアクター内で、上記の反応の転化率が指定されます。

また、このシミュレーションではフィードおよびプロダクトの C₆₊成分を疑似成分として作成しています。CHEMCADは 入力された**分子量**, **沸点**, **比重**から、最小限の物性値を推算して疑似の炭化水素成分に与える機能を有しています。

CHEMCAD サンプルシミュレーション

廃水中の H₂S, NH₃ 除去



シミュレーション概要

このプロセスは廃水の H₂S と NH₃ を除去し、その濃度を 5ppm 以下とします。蒸留塔はリボイラーと内部還流を発生させるための循環ポンプを持ちます。

Notes;

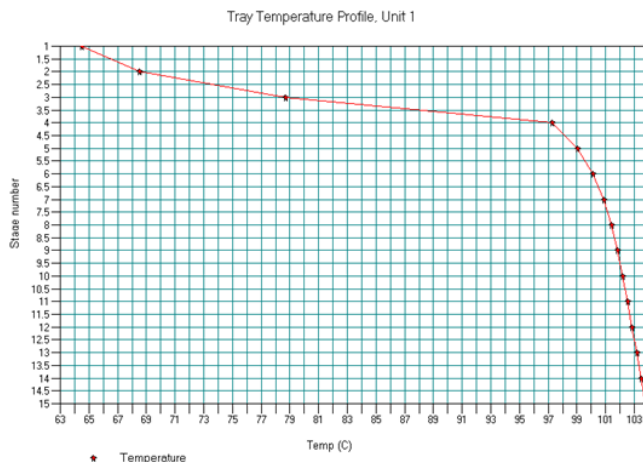
このシミュレーションでは “Sour Water” と呼ばれる、特殊な平衡値モデルが使用されています。Sour Water モデルは、実験によって得られたパラメータによって H₂O/NH₃/H₂S 系の気液平衡を計算します。

無機化学系のプロセスは CHEMCAD の電解質モデルによって精度良く計算されますが、このように精製プロセスにおいて古くから実験的に証明された平衡値モデルを使用することも有効です。

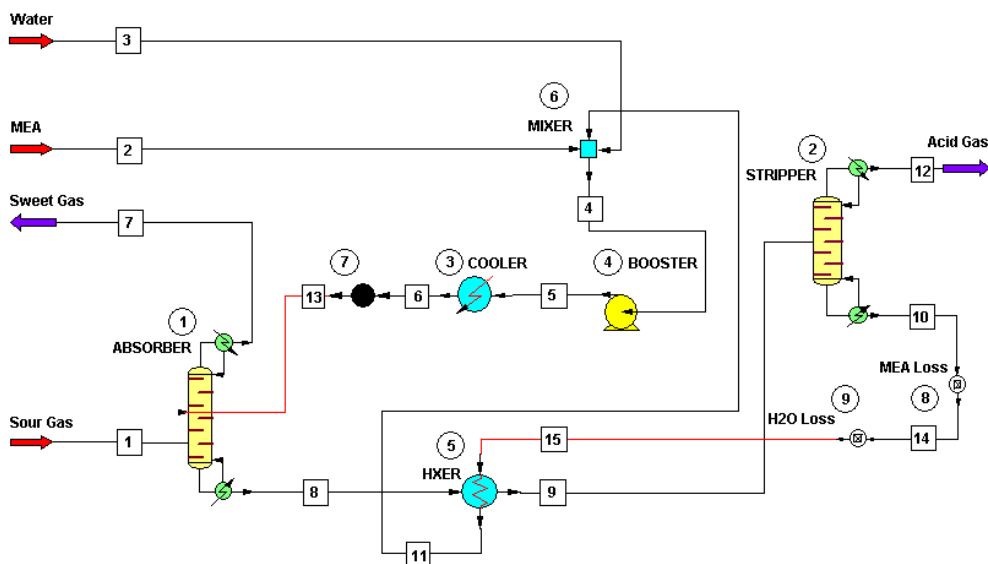
装置名: TPLS 装置名: 装置 ID: 1

段	温度 C	圧力 MPa	* 正味の流量 *		フィート kg/h	フット外 kg/h	負荷 MJ/h
			液 kg/h	気 kg/h			
1	64.3	0.10	36724.49			155.68	-8093
2	68.3	0.10	36134.09	5480.26	31399.71	* pa 戻り *	
3	78.5	0.10	3677.78	4889.86			
4	97.2	0.10	37425.74	3833.46	31526.42		
5	99.0	0.10	37431.29	6055.01			
6	100.1	0.10	37432.29	6060.56			
7	100.9	0.11	37451.93	6061.56			
8	101.4	0.11	37461.71	6081.19			
9	101.8	0.11	37491.11	6090.98			
10	102.2	0.11	37515.31	6120.38			
11	102.5	0.11	37537.42	6144.58			
12	102.9	0.11	37558.60	6166.69			
13	103.2	0.11	37578.81	6187.86			
14	103.5	0.11	37598.87	6208.08			
15	103.8	0.12		6228.13	31370.73	1.403E+004	

循環数: 1 段 # 1 への 18.1 C での戻り
熱負荷 -8092.5210 MJ/h



CHEMCAD サンプルシミュレーション サワーガスの MEA 処理プラント



シミュレーション概要

およそ 0.5mol% の H₂S および 2mol% の CO₂ を含む 32.2°C, 63.1bar のサワーガスが吸収塔に導入されます。酸性ガスは吸収塔内で MEA 水溶液により除去されます。その後、酸性ガスを吸着した MEA 水溶液は 1.8bar の放散塔で加熱、分離され再生されます。再生された MEA 水溶液は再生前の水溶液を予熱するため、熱交換器を通過します。その後、プロセスに新たに導入される MEA 水溶液と混合され、吸収塔の圧力に昇圧され、冷却されて吸収塔の塔頂に導入されます。

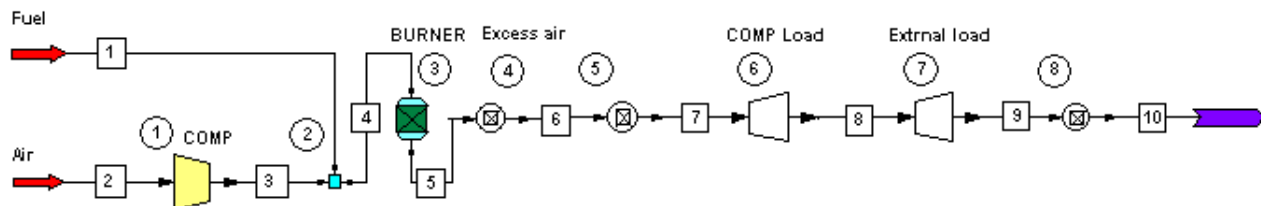
Notes ;

このシミュレーションでは ケントエイゼンベルグモデルという、ガス・スイートニング・システムにおける反応(および相平衡)をモデル化するための、単純化した熱力学モデルが使用されています。

また、収束を確実にするために、このシミュレーションには以下の特徴が加えられます。

- ・ ストリーム参照モジュール(装置番号 7)により、一定のリサイクル流量を保っています。
- ・ MEA と水の導入量を指定する二つのコントローラ(装置番号 8, 9)があります。コントローラはそれぞれ、ストリーム 7, 12 での各成分の損失の合計をフィードに渡し、プロセスの収支が合うようにします。

CHEMCAD サンプルシミュレーション ガスタービン



シミュレーション概要

このフローシートはガスタービンを模擬しています。

燃料ガスが圧縮空気と混合され、バーナーで燃焼します。空気は燃焼プロセスのコントロール、およびガスの温度を維持するため、バーナーに供給されます。燃焼後の高温ガスはエアコンプレッサーおよび発電機(図示されていない)を駆動するエキスパンダーを通して流れます。エキスパンダーは論理上、二つのセクションに分けられます(装置番号6, 7)。

装置番号6のエキスパンダーの動力はエアコンプレッサーを運転するために使用されます。

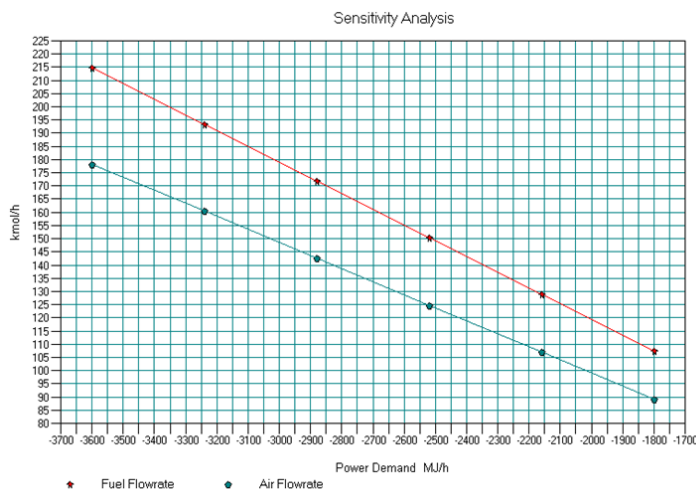
装置番号7のエキスパンダーの動力は発電機を運転するために使用されます。

このシミュレーションでは、燃料の流量はタービンシャフトに必要な力を供給するよう、調整されます。

Notes;

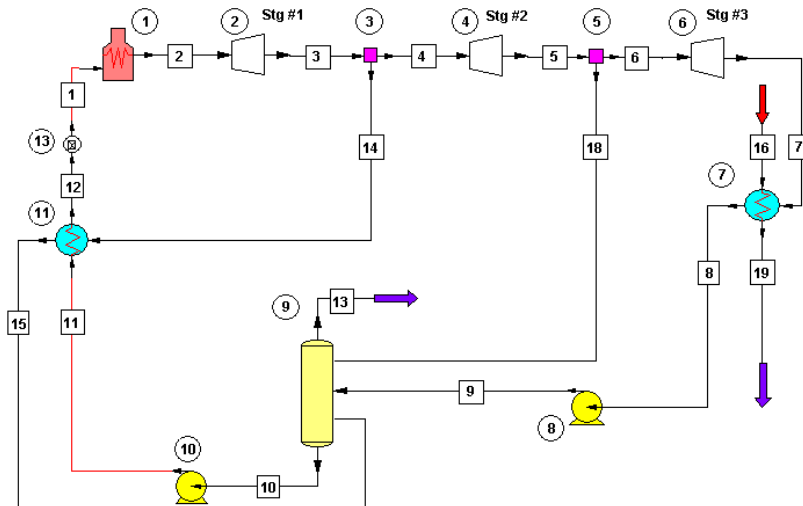
バーナーでは、ギブスの自由エネルギー最小化法に基づいた反応計算により燃焼後のガスの組成、熱的条件を計算しています。

装置番号4のコントローラーはバーナー出口でのガス温度を 649°Cに維持するため、空気流量を調節します。装置番号8のコントローラーは外部発電機の必要動力を満たすため、燃料流量を調節します。装置番号5のコントローラーはエアコンプレッサーの必要動力を装置番号6のエキスパンダーの仕様へ反映させます(これは装置番号6のエキスパンダーの仕事はエアコンプレッサーの駆動に要する動力を満たすことを表します)。



CHEMCAD サンプルシミュレーション

動力装置のスチームバランス



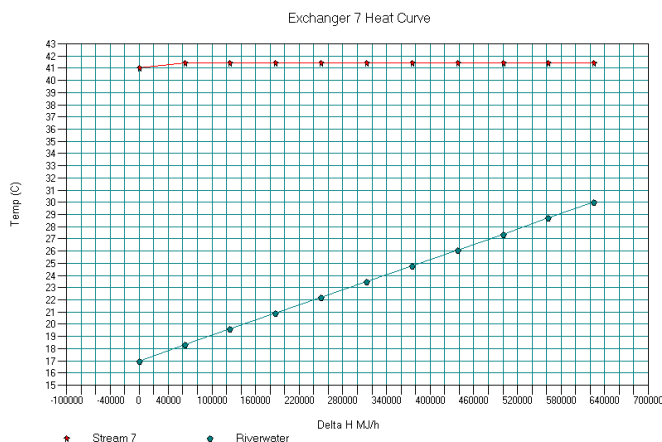
シミュレーション概要

このシミュレーションでは、80MWの発電装置(三段タービンから成る)のバランスを計算しています。ボイラーは 510°C, 110 barの蒸気を毎時 360トン生産しています。1番目の背圧タービンからの抜き出しはボイラー導入前の復水の予熱に使用されます(熱回収)。2番目の背圧タービンからの抜き出しは凝縮します。全ての凝縮液と過剰なスチームは復水タンクに捕集されます。

Notes;

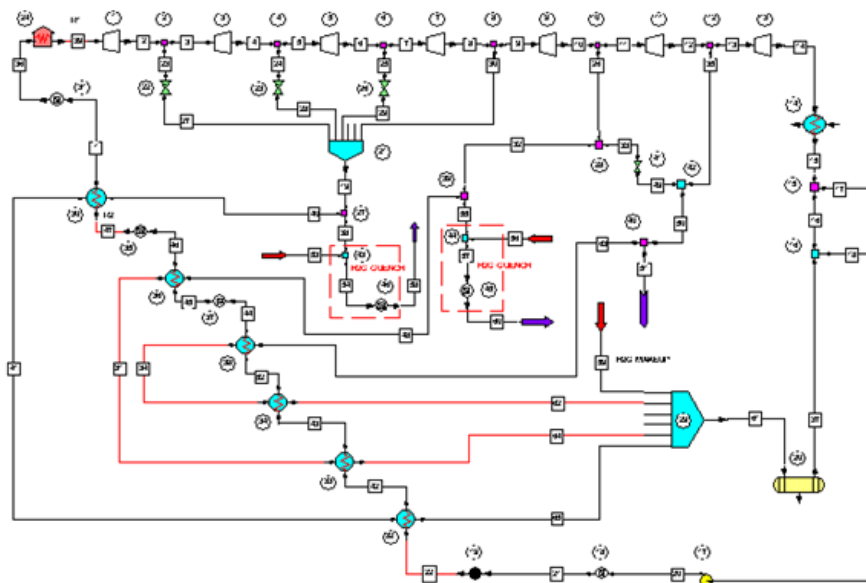
このシミュレーションはシステムの成分が水のみであり、理想溶液の蒸気圧モデルが使用されます。この場合、CHEMCADは内蔵されている蒸気圧表を使い、気液平衡計算が高精度となります。

このフローシートの正しい熱収支を得るキーは、復水タンクの適正な温度を見つけることです。そのため復水タンクでは、混合溶液の温度が断熱条件で求められています。



CHEMCAD サンプルシミュレーション

産業用発電プラントのフローシート



シミュレーション概要

この例は、スチーム生産を目的とした産業用発電プラントの単一ブロックの詳細なシミュレーションを表しています。タービンは7段で構成されています。6段は非凝縮タービンで、最後の段は凝縮タービンとして働きます。一部のスチームは抜き出され、エコマイザーや予熱器に送られます。抜き出されたスチームの大部分は捕集されて、水で冷却され、3.2、1.4、0.25 MPaのスチームとしてエンドユーザーに供給されます。

このようなモデルが確立すれば、毎日の操作のコントロールと変動するスチーム需要量の決定を行う発電プラントの管理者にとって、非常に役立つツールになります。

Notes;

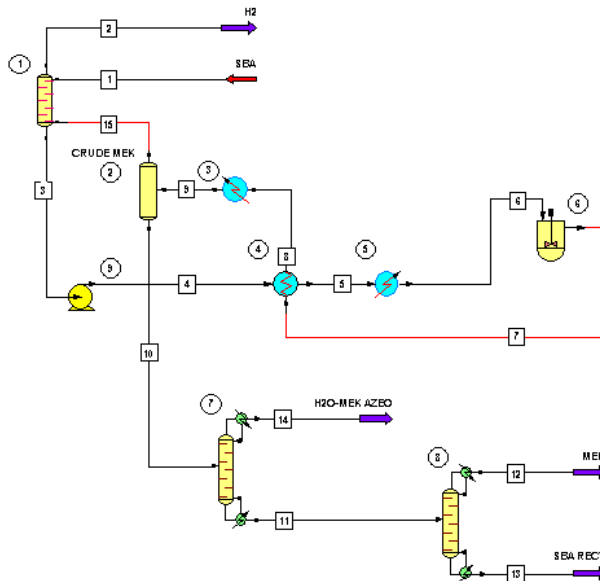
前頁の例題と似ていますが、より詳細なフローシートになっています。

要求される予熱器の流出温度を満たすよう、「コントローラ」単位操作モデルにより予熱器へのスチーム流量が調整されています。同じく、冷却水や循環の流量が調整されています。

このような複雑なフローシートでは収束を速めるために、「同時モジュール」を使用します。

CHEMCAD サンプルシミュレーション

MKE製造プロセス (感度解析)



シミュレーション概要

このシミュレーションはメチルエチルケトン(MKE)の生産で使用されるプロセスの最適化を行います。

最適化では、MKEを取り出す分離塔(装置番号 8)のコンデンサーとリボイラーの熱負荷が最小となるフィード段を決定するため、複数ケースのシミュレーションを行う必要があります。

Notes ;

CHEMCADではこのシミュレーションのような感度解析を行う機能が実装されています。この機能により、ユーザーは変動させる変数および記録する変数を指定した複数ケースのシミュレーションのバッチ処理が可能となります。

CHEMCAD 6.3.2

Page 1

シミュレーション : MEK Sensitivity Analysis

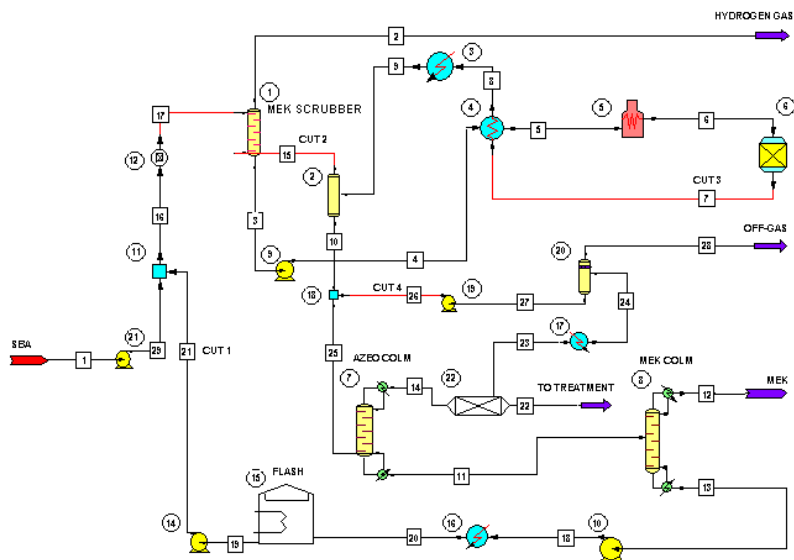
日付: 01/26/2012 時間: 17:36:39

感度分析レポート
test_wf

Run #	feed_tray	Condenser Duty kcal/h	Reboiler Duty kcal/h	Distillate kmol/h
0	1	-1.42662e+008	1.42666e+008	7.87077
1	2	-7.5404e+007	7.54083e+007	7.86814
2	3	-4.00138e+007	4.0018e+007	7.86807
3	4	-2.13904e+007	2.13947e+007	7.86808
4	5	-1.16186e+007	1.16228e+007	7.86809
5	6	-6.5192e+006	6.52345e+006	7.86807
6	7	-3.89223e+006	3.89643e+006	7.86807
7	8	-2.56838e+006	2.57263e+006	7.86807
8	9	-1.90177e+006	1.90602e+006	7.86807
9	10	-1.54992e+006	1.55418e+006	7.86808
10	11	-1.35274e+006	1.357e+006	7.86807
11	12	-1.24806e+006	1.25226e+006	7.86807
12	13	-1.22031e+006	1.22454e+006	7.86807
13	14	-1.27675e+006	1.28099e+006	7.86807
14	15	-1.45221e+006	1.45645e+006	7.86808
15	16	-1.83063e+006	1.83488e+006	7.86808
16	17	-2.61722e+006	2.62149e+006	7.86807
17	18	-4.3058e+006	4.31003e+006	7.86808
18	19	-7.96027e+006	7.96459e+006	7.86811
19	20	-1.58373e+007	1.58413e+007	7.86813

CHEMCAD サンプルシミュレーション

SBA脱水素による MKE合成プロセス



シミュレーション概要

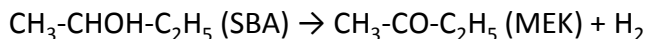
このシミュレーションは sec-ブタノール(SBA)の脱水素反応によってメチルエチルケトン(MKE)を年間 15000トン生産するプラントの設計検討を行います。

原料のSBAはスクラバー(装置番号 1)の塔頂に送られ、剰余な MEKが副生成物ストリームから取り除かれます。その後 SBAは加熱蒸発し、反応装置(装置番号 6)に送られます。反応装置では気相のSBAから固体触媒上の脱水素反応により MKEが得られます。反応装置からの製品流れは凝縮され、フラッシュ分離により水素が取り除かれます。粗製 MKEは蒸留塔(装置番号 7)に送られます。塔頂製品として MKEと水の共沸混合物が得られ、これらは岩塩層で脱水されます。脱水により得られた高濃度な MEK混合物は圧縮されて、再び蒸留塔 7に送られます。塔底製品の乾燥 MKE と未反応のSBAの混合物は装置番号 8の蒸留塔で分離され 99.5 wt% の MKEを製品として得ます。分離された SBAは原料として再利用されます。

Notes ;

このシミュレーションは平衡計算において三相の存在を考慮しており、非理想の系の非混和領域を発見することができます。

反応器内で起こる SBA脱水素反応は以下で表されます。



この反応は高給熱反応であり、一般に複数の直列あるいは並列に接続された反応器で行われます。文献によると、90%以上の転化率が容易に達成可能です。

装置番号 12のコントローラはストリーム 16での SBAの成分流量が 2070 [kg/h]となるよう、フィードの流量を調整します。2070 [kg/h]という流量は 年間 15000トンの MKE生産を満たすのに必要な原料の供給量です。このコントローラの仕様を変更することによりプロセスのスケールを容易に変更することが可能です。