解説/Review



スーパーストラクチャを用いたプロセス合成 _{長谷部 伸治*1}

Process Synthesis using Superstructures Shinji HASEBE^{*1}

Abstract– Process synthesis is one of the dominant research areas in chemical engineering. However, the development of general synthesis method is very difficult because the problems are usually formulated as complex combinatorial programming problems. One of the promising methods is to use a superstructure that includes all of the candidate structures in it for modelling. In this paper, two process synthesis problems of distillation processes are modeled by using superstructures. These problems are finally formulated as LP and/or MILP problems, and solved by a commercial solver. The results of these two problems show that there is high possibility to create new process structures that are difficult to imagine by human experience.

Keywords– process synthesis, distillation process, superstructure, energy conservation, dombinatorial optimization, linear programming

1. はじめに

各人が専門としている分野により、「デザイン」という 言葉は様々な意味を持つ. 化学工学を専門としている筆 者にとって、デザインと聞いてまず頭に浮かぶのは、化 学プラントを建設するための「プロセス設計」である. 化学プラントの設計は、概念設計、基本設計、詳細設計 という手順を踏む. このなかで, 概念設計の最初に行わ れるのが, 所与の原料と製品仕様から使用する装置の種 類とその結合関係(プロセス構造と呼ぶ)を求めること である. この段階は、プロセス合成 (Process synthesis) と呼ばれるが、現実のプロセス合成問題は、対象とする 範囲(システムバウンダリ),前提条件,目的関数の設 定が難しく、数理計画問題として定式化すること自体が 困難な場合が少なくない、また定式化された場合も、連 続変数に関する最適化問題を内部に含んだ組合せ最適化 問題となる場合が多い.よって、計算機が進歩した現在 においても、現実的な計算時間で実問題を解くシステマ ティックな解法がなく、アートの世界と言われている.

この様な理由により、プロセス合成はこれまで比較 的限定された対象に対して研究が進められてきており、 様々な問題に統一的に適用可能は手法は開発されていな

*1京都大学工学研究科化学工学専攻 京都市西京区京都大学桂

い.本報告では,検討すべき全ての構造をその部分構造 として含んだ構造(スーパーストラクチャと呼ぶ)を考 え,その構造をもとにプロセス合成問題を(混合整数) 線形計画問題として定式化し,解を求める方法を説明し, その適用例を紹介する.

2. スーパーストラクチャ

Fig. 1 は、石油化学プロセスにおけるナフサ分解炉 を出た混合ガスの分離方法の一例を簡略化して示したも のである [1]. ナフサ分解炉を出たガスは、沸点の違い を利用した分離装置である蒸留塔を用いて、順々に分離 される. この例では、原料は最終的に 7 つの製品流れ に分離されている. 蒸留塔では、塔底で熱を加えて液を 蒸気にし(Fig. 1 中の赤丸)、塔頂で蒸気を凝縮して液 にして(青丸)塔に戻していることから、典型的なエネ



Fig.1: エチレンプラントの分離シーケンス

^{*1}Department of Chemical Engineering, Kyoto University, Katsura Campus, Nishikyo-ku, Kyoto, 615-8510

Received: 18 January 2016, Revised: 17 February 2016, Accepted: 23 February 2016.

ルギー多消費装置であり、そのエネルギー消費は石油精 製、石油化学プロセスの消費エネルギーの半分を占めて いる [2]. よって、数%の省エネルギーであっても、我 が国のエネルギー消費削減に大きく寄与する.

では、なぜ Fig. 1 に示す経路で製品に分離されている のであろうか. Fig. 1 では最終的に 7 製品に分離されて いるが、4 製品に分離しようとしたときであっても、通 常の 1 入力 2 出力の蒸留塔を用いると、Fig. 2 に示すよ うな 5 通りの構造が考えられる. この 5 通りの各構造に ついて建設コストや運転コストを考慮した最適設計問題 を解き、その中から最も評価の良い構造を選べば、最適 な構造が得られる [3]. しかしながら、製品数や利用可 能な装置の種類が増えたとき、その全ての組合せに対し て最適化し、それを比較することは多大な労力が必要と なる.



Fig. 2: 通常蒸留塔を用いた4製品の分離構造

上述した問題を1つの組合せ最適化問題として定式 化するには、まず考え得る全ての構造が解に含まれるよ うにプロセス合成問題を定式化しなければならない.こ の定式化を見通しの良いものにするために、検討すべき 全ての構造を部分構造として含むスーパーストラクチャ が用いられる [4]. Fig. 3 は、通常の蒸留塔を用いた4 製品分離のスーパーストラクチャ例である.四角は蒸留 塔を表し、四角中の A/BC は、A、B、C の混合物を、A と BC に分離することを意味している.楕円は原料およ び製品である.塔を結んでいる線のいくつかを消すこと により、Fig. 2 の全ての構造が得られることに注意され たい.

原料の流量と組成,および製品組成が与えられ,各製品は1つの装置からのみ得られると仮定すると,Fig.3

の各装置の入出力組成は、物質収支より一意に定まる. よって、標準的な処理量を仮定すれば、Fig. 3 中の各装 置について、単位量の原料を分離する際の最適な設計条 件(段数、フィード段)や運転条件(Fig. 2 で赤丸で示 したリボイラでの加熱量、青丸で示したコンデンサーで の除熱量)を、プロセス構造の最適化を行う前に個々に 求めることができる.この最適化に関しては、一般にプ ロセスシミュレータが利用され、厳密な気液平衡関係や 熱収支などを考慮して最適な条件が導出される.



Fig. 3: 4製品への分離を表すスーパーストラクチャ



Fig. 4: 物質収支

このように、各装置についての情報をあらかじめ準備 できれば、プロセス全体の物質収支は、Fig.3の流れの 分岐点、合流点、および各装置において、線形式で表す ことができる、例えば、Fig.4で点線の丸で囲んだ3箇 所での物質収支は、以下の様に表せる、

$$F_0 = F_1 + F_2 + F_3 \tag{1}$$

$$F_4 = a_1 F_1 \tag{2}$$

$$F_5 = (1 - a_1)F_1 \tag{3}$$

$$F_8 = F_6 + F_7 \tag{4}$$

ここで, F_i は Fig. 4 中の各流れの流量である. a_1 は,分離 A/BCD を行う蒸留塔における原料に対する留出液の割合であり、事前に計算できる値である.

他の合流点, 分岐点, 装置に対しても, 式(1)~(4)の

1



Fig. 5: 一般化された設備コスト

ような関係式を導出できる.よって,各装置の設備コス トや運転コストが処理量に比例すると仮定できれば,年 あたりに換算された設備コストと運転コストの和を最 少にするプロセス構造を求める問題は,Fig.3の装置間 の流量を変数と見なした線形計画問題として定式化で きる.

装置kの設備コスト C_k が原料流量 F_k の非線形関数であったり、下限値を持つ場合は、区分的に線形な関数で近似すれば良い.設備容量に下限値があり、かつ下限値以上で C_k を F_k の線形関数で近似できるケースを**Fig.5**に示す.

この例では、0-1変数 δ_k を導入することにより、設備 コストは式 (5) のように表すことができる.よって、こ の様な場合、最適合成問題は 0-1変数を含む混合整数線 形計画問題(MILP 問題)となる.

$$C_{k} = a_{k}F_{k} + b_{k}\delta_{k}$$

$$F_{m}^{min}\delta_{k} \leq F_{k} \leq F_{k}^{max}\delta_{k}$$
(5)

これまでの説明で定式化された問題を解くことにより、最適なプロセス構造が導出できる。例えば、Fig. 3 に示すスーパーストラクチャをもとに定式化した問題を 解いて得られた解において、Fig. 3 で太線で示す流路の みが値を持った(あとの流路の流量は0)とすれば、それはFig. 2 中のダイレクトシーケンスが最適な構造とし て選ばれたことを意味する。

3. 熱交換を考慮した蒸留プロセスの合成

本章では,前章で説明したプロセス合成法がどのよう に使われるかを,例題を用いて説明する.

3.1 複合塔

1入力2出力の通常の蒸留塔を2塔用いて3成分を 分離する構造は、Fig.6に示す2通りのみであるが、蒸 留で3成分を分離する構造は、これ以外にも存在する. Fig.7は、塔の中間からの気液の抜き出し、流入がある 構造で、複合塔と呼ばれる、赤線が蒸気、青線が液の流 れを示す.(a),(b)の構造は、リボイラーあるいはコンデ ンサーを2つの塔で共有する構造である.(c)はPetlyuk



Fig. 6: ダイレクトシーケンス(左)とインダイレクト シーケンス(右)



Fig. 7: 複合塔

塔と呼ばれ,第1塔はリボイラー,コンデンサー共に持たない.これらの構造を用いることで,設備コストや使用エネルギーが削減できることが報告されている.

3.2 熱交換

素留塔では、塔頂の蒸気をコンデンサーで冷却して 液にし、塔底の液をリボイラーで加熱して蒸気にしてい る.したがって、塔頂蒸気をその塔のリボイラーの加熱 に利用できれば、大きなエネルギー削減ができるが、残 念ながら塔底より塔頂の方が温度が低いことから、その ような熱交換はできない、そこで、ある塔の塔頂蒸気と 別の塔の塔底液の間で熱交換を行うことになる.ただ、 この様な熱交換も対象とする塔の数が少ないと多くは期 待できない、そこで、ある組成の原料を同じ組成の製品 に分離する塔(Fig.3の1つの四角)であっても、圧力 の異なる塔を設定する.塔の操作圧力を上げれば、塔頂、 塔底共に温度が上昇し、それに伴い塔頂蒸気と別の塔の 塔底液の間での熱交換の可能性も増加する.

Fig. 8 左図は, 3 製品分離のスーパーストラクチャを示している. このスーパーストラクチャにおいて,赤線



Fig. 8: 3 製品分離のスーパーストラクチャ(左) とその実現構造(右)



Fig. 9: 圧力を考慮した3製品分離のスーパーストラクチャ



Fig. 10: 熱交換を考慮したプロセス構造

で示したような構造が選ばれたとすると、それは、Fig.8 右図のようなプロセス構造が選ばれたことに対応してい る.このスーパーストラクチャに対して、各塔が4つの 圧力レベルをとれる場合、スーパーストラクチャはFig. 9のように変化する.圧力に違いを考慮することにより、 その候補数は非常に多くなる.なお、Fig.9では、ポン プによる昇圧動力は無視できるとして、流れの圧力の違 いは考慮せずに作図している.

Fig. 9 に示す各塔においても、最適な設計条件、運転 条件はあらかじめ求める事ができる.言い換えれば、最 適な段数とフィード段、および単位フィード量あたりに 必要なリボイラー加熱量と加熱温度、コンデンサー除熱 量と除熱温度はあらかじめ計算できる.詳細は省略する が、装置間の熱交換を考えた全体の熱収支についても、 装置間の流量の線形関係式で表現できる.よって、装置 間の熱交換を考慮した最適なプロセス構造についても、 前章で説明した方法により、求めることができる.

例えば, Fig. 9 で赤線で示した構造が選ばれ, かつその構造において, 高圧で運転される A/BC 分離の塔頂蒸気を, B/C 分離のリボイラーでの加熱に利用できる場合, 熱交換を考慮したプロセス構造は, Fig. 10 の様になる.

3.3 問題設定

エタノール (A), イソプロパノール (B), n-プロパノー ル (C), イソブタノール (D), n-ブタノール (E) のアルコー ル 5 成分系を分離する問題を,これまで説明した方法 で解いた結果を紹介する.原料,製品組成は,**Table 1** に示すとおりである.利用可能ユーティリティとそのコ ストを,**Table 2** にまとめた.また,各塔の設備コスト *CCost* [**k**¥] は式(6)で与えられるとし,10年での定額償 却を仮定する.

$$CCost = 4000D^{1.066}H^{0.82}(P+0.8987)$$
(6)

ここで, Dは塔径[m], Hは塔高[m], Pは塔内圧力[MPa] である.

対象とする塔は、1入力2出力の通常の蒸留塔以外に、 Fig. 7 に示す3種類の複合塔が利用可能とした。そして、 これらの塔は、1 atm、2 atm、4 atm、8 atm のいずれかの 圧力で運転されるものとした。原料と製品組成が与えら れていることから、中間生成物流れの組成も物質収支か ら Table 3 のように計算できる。

以上の情報をもとに,本問題を MILP 問題として定式 化すると,変数 1784(うち整数変数 500),制約条件式 2271 という規模の問題となる.

Table 1: 原料および製品組成

	ABCDE	Α	В	С	D	E
Α	0.250	0.980	0.010	0.000	0.000	0.000
В	0.150	0.015	0.980	0.010	0.000	0.000
С	0.350	0.005	0.010	0.980	0.010	0.005
D	0.100	0.000	0.000	0.010	0.980	0.015
E	0.150	0.000	0.000	0.000	0.010	0.980
F [kmol/h]=	100.00	25.36	14.56	35.26	9.61	15.21

Table 2: ユーティリティコスト

冷却水(25℃)	: 0.1 yen/MJ
高圧蒸気(250℃)	: 3.0 yen/MJ
中圧蒸気(180℃)	: 2.1 yen/MJ
低圧蒸気(130℃)	: 1.5 yen/MJ

Table 3: 中間生成物組成

	ABC	BCD	CDE	ABCD	BCDE
А	0.333	0.002	0.000	0.295	0.002
В	0.200	0.246	0.006	0.177	0.196
С	0.463	0.586	0.578	0.412	0.467
D	0.005	0.164	0.166	0.115	0.134
E	0.000	0.002	0.250	0.001	0.201
	AB	BC	CD	DE	
A	AB 0.626	BC 0.003	CD 0.000	DE 0.000	
A B	AB 0.626 0.367	BC 0.003 0.293	CD 0.000 0.008	DE 0.000 0.000	
A B C	AB 0.626 0.367 0.007	BC 0.003 0.293 0.697	CD 0.000 0.008 0.772	DE 0.000 0.000 0.007	
A B C D	AB 0.626 0.367 0.007 0.000	BC 0.003 0.293 0.697 0.007	CD 0.000 0.008 0.772 0.218	DE 0.000 0.000 0.007 0.389	
A B C D E	AB 0.626 0.367 0.007 0.000 0.000	BC 0.003 0.293 0.697 0.007 0.000	CD 0.000 0.008 0.772 0.218 0.002	DE 0.000 0.000 0.007 0.389 0.604	



Fig. 11: 最適化の結果 [5]

3.4 最適化結果

最適合成問題を解いて得られた構造を, Fig. 11 に示 す.この構造は、通常の蒸留塔4塔とPetlyuk塔からな る. Petlyuk 塔を高圧(4 atm) で運転することにより、 その塔頂蒸気を別の3塔の加熱に利用している(Fig. 11 中の赤破線).また,通常塔3塔を中圧(2 atm)で運転 することにより、その塔頂蒸気を1気圧で運転する塔の 加熱に用いている(Fig. 11 中の青破線). Petlyuk 塔に より3製品に分離できることから、Petlyuk 塔と通常の 蒸留塔2塔があれば5成分を分離できる.しかしながら. 得られた構造では、原料を分割して2つの塔にフィード することにより、プロセス流体間の熱交換量を増やし、 省エネルギー化を図っている. その結果, Petlyuk 塔の リボイラーへの中圧スチームと、A/BCDE分離を行う塔 への低圧スチームの供給以外、他のリボイラーへの加熱 は全て他の塔の塔頂蒸気でまかなえている. この様な構 造をとることにより、ユーティリティコストの大幅な削 減が達成できる.

4. 新たな構造の導出

Fig. 11 で得られたプロセスは、最低限必要な塔数以上の塔を使ったり、原料を分岐して複数の塔に供給する など、経験のある技術者でもなかなか見いだすことが難 しいプロセス構造である.しかしながら、そこで用いら れている要素技術は予め設定したものであった.これま での多くの研究は、前章で説明したように装置を単位と してプロセス合成問題を定式化している [6], [7].当然 ではあるが、装置を単位としてプロセス構造を最適化し たのでは、新たな装置構造を創造することはできない. 例えば、Fig. 8 に示した 3 成分分離のスーパーストラク チャからは、Fig. 6 に示す構造は導けるが、Fig. 7 に示



Fig. 12: 組成の離散化と分離モジュールへの割り当て



Fig. 13: 分離モジュールの入出力

すような構造は出てこない.この様な点を考えると,新たな要素技術を開発するには、より小さな範囲を単位として構造最適化を行う必要がある [8].

一般に蒸留塔は、液を保持する段が積み重なった構造 を有している [9]. 筆者らはこの点に着目し、蒸留塔の 1つの段をプロセス合成の最小単位として、最適なプロ セス構造を求める手法を開発してきた [10]. ここでは、 ベンゼン、トルエン、o-キシレンの3成分を等モルで含 む原料を、主成分濃度 90 mol%となる3 製品に分離す る問題を例として、開発した手法を説明する [11]. 設計 条件としては、操作圧力は 1 atm、原料流量は 300 kmol h⁻¹ とした.

4.1 分離モジュール

提案手法では、考慮すべき組成の空間を離散化し、その1つ1つを蒸留塔の1段に相当する Fig. 12 に示すような1つの分離モジュールに割り当てる.

Fig. 13 は1つの分離モジュールを示したものである. 各分離モジュールの液相,気相は均一であり,かつ液組 成は Fig. 12 で示した組成平面の格子点にあるとする. 液組成と圧力が与えられれば,平衡状態を仮定するこ とにより蒸気組成や気液のモルエンタルピーは一意に 定まる.各モジュールに対して液組成をあらかじめ与え る,という考え方でモデル化することにより,非理想系 であってもプロセスシミュレータなどを用いて,蒸気組 成や気液エンタルピーを前もって計算可能となる.

4.2 スーパーストラクチャーと定式化

Fig. 13 に示すモジュールでは、他のモジュールからの物質入力と熱入力の端子を有し、他のモジュールへの

気液の出力,熱出力の端子を有する.各モジュールの気 液の出力は自分以外の全てのモジュールの入力とでき, また製品は各モジュールの液出力から得られると仮定す ると, Fig. 14 に示すスーパーストラクチャが得られる. この図では,接続関係を見やすくするために,1つのモ ジュールを2つに分割し,出力側を左に,入力側を右に 示している.よって,同じ番号のモジュールは,同じモ ジュールである.また,原料および加熱用蒸気は出力の みを有するモジュールとして,製品および冷却水は入力 のみを有するモジュールとして示される.蒸留塔の段に 対応する全てのモジュールは,加熱,冷却が可能である.

定常状態を考えれば、各モジュールについて、以下の 物質収支、熱収支式が得られる。

$$\sum_{j=0}^{N} (L_{ji} \mathbf{x}_{j} + V_{ji} \mathbf{y}_{j}) = \sum_{j=1}^{N+3} (L_{ij} \mathbf{x}_{i} + V_{ij} \mathbf{y}_{i})$$

$$(i = 1, 2, \cdots, N)$$

$$(7)$$

$$\sum_{j=0}^{N} (L_{ji}H_{j} + V_{ji}h_{j}) + Q_{i} = \sum_{j=1}^{N+3} (L_{ij}H_{i} + V_{ij}h_{i}) + q_{i}$$
$$(i = 1, 2, \cdots, N)$$
(8)

ここで, y_j , x_j はモジュール j の気液組成, V_{ij} , L_{ij} はモジュール i からモジュール j への気液流量, h_i , H_i はモジュール i の気液のモルエンタルピー, Q_i , q_i はモジュール i での加熱・冷却量を示す.

式 (7), (8) 中赤字で示した y_j , x_j , h_i , H_i はあらかじ め計算された定数であることから,全ての制約式は流 量に関して線形式となる.また,あらかじめ定められ た原料流量を F_F ,製品 i 中の第 i 成分分率の下限値を x_i^* (i = 1,2,3) とすれば,次式が成り立たなければなら



Fig. 14: 分離モジュールを要素としたスーパーストラ クチャ.

ない.

$$\sum_{i=1}^{N} L_{0i} = \mathbf{F}_{\mathbf{F}} \quad , \quad \sum_{i=1}^{N} V_{0i} = 0 \tag{9}$$

$$\sum_{j=1}^{N} L_{j,N+i} \mathbf{x}_{ji} \ge \mathbf{x}_{i}^{*} \sum_{j=1}^{N} L_{j,N+i} \quad (i = 1, 2, 3)$$
(10)

ここで, x_{ii}は, x_iの第 i 成分分率である.

以上,全ての関係式が気液流量の線形式で表される ことから,加熱蒸気量と冷却水量から定まるユーティリ ティコストを最少にする構造を求める問題は,線形計画 問題として定式化できることがわかる.

4.3 最適化結果

液組成刻み幅を0.025 (希薄部分は0.005) として,前 項で示したように問題を定式化した.最適化変数の数は 約300万であるが,線形式であることから通常のPCで十 分計算できる.ソルバーとしては,IBM ILOG CPLEX[®] V12.6.1 使用した.得られた結果をFig. 15 に示す.図中 太線は,流量が製品流量の1/10より大きい流れを,ま た細線はそれより小さい流れを示す.また,四角はある 程度の流量を有するモジュールを示す.モジュール数を 最適化変数に入れていないことから,非常に多くのモ ジュールを用いる解が選択されている.

Fig. 15 に示した解と同程度のユーティリティコスト で、利用するモジュールの数が最少となる構造を求めた い.しかしながら、各モジュールが選択されるか否かを 0-1 変数を用いて表そうとすると、非常に多くの 0-1 変 数が必要となる.そこで、ユーティリティコストを最小 とする解から、コスト増が 1%以内と言う制約を課し、 微少な流量の流れが選ばれにくくなるような評価指標を 設定し、選択されるモジュールができるだけ少ない解を 求めた [11].その結果を Fig. 16 に示す.Fig. 15 の解と 較べ、選ばれているモジュールや流れの数が減少してい ることがわかる.

Fig. 16の結果を装置構造として示すと, Fig. 17 となる. 見やすくするために微少流量流れを表示していないため,入出力の無いモジュールが表示されているが,ほぼ8 器の蒸留塔からなる構造となっていることがわかる. 注意すべき点は,加熱と除熱が図中一番右に示した部分の最下部(赤記号)と最上部(青記号)のみで行われていることである. よって,赤線で囲んだ部分をそれぞれ1つの蒸留塔と見なせば,この構造は Fig. 7 右のPetlyuk 塔に近い構造となっている.

あらかじめ Petlyuk 塔を仮定し,対象とした問題を解 くと,装置内各段の液組成は, Fig. 18 のようになる.こ の図は Fig. 16 に非常に近いものになっており,設定し た条件下では, Petlyuk 塔がエネルギー効率の高い構造 であるといえる.







Fig. 16: 微少流量流れの削除

5. 様々なスーパーストラクチャ

スーパーストラクチャは、これまで説明したような 問題以外にも様々な分野で使われている。本章では、筆 者の研究室で扱ってきた2つの異なるスーパーストラ クチャを用いたプロセス合成問題について、簡単に紹介 する.

5.1 石油精製プロセスの構造最適化

石油は超多成分混合物であり、これまで沸点分布によ りその特性が定められていた.しかしながら、石油から 効率的に窒素や硫黄を除去したり、石油に含まれる高付 加価値成分を選択的に取り出すためには、石油精製プロ セス中の各種の処理を組成に基づいて行う必要がある.

この様な考え方のもと、石油構成成分の分析手法が開

発されている [12]. Fig. 19 は、新たに開発が期待される要素技術を含む、石油精製プロセスのスーパストラクチャの一例である(橙色四角が今後開発が期待される要素技術).各要素技術の特徴を考えると、図中の流れの組成をあらかじめ定める事はできない.この研究では、各流れを 321 成分のモル流量からなる流れ(石油中に含まれる成分数からするとごく一部である)で近似し、また要素技術 iの入力 \mathbf{x}_i と出力 \mathbf{y}_i の関係を、式(11)で近似した.

$$\mathbf{y}_i = A_{ai} A_{bi} \cdots A_{ki} \, \mathbf{x}_i \tag{11}$$

ここで, *A_{ai}*, *A_{bi}*, *A_{ki}* は要素技術 *i* を構成する基本反応・ 分離(脱硫,開環,アロマ分離など)の入出力関係を表 す行列である.1つの流れが 321 次元のベクトルである







Fig. 18: Petlyuk 塔の塔内組成

ことから、スーパーストラクチャ全体の物質収支を表す のに必要な変数は非常に多くなるが、最適合成問題を MILP 問題として表すことができ、製品価格変動が最適 プロセス構造に与える影響などについて検討できる[13].

5.2 バイオマスの有効利用

カーボンニュートラルの観点から、木質系バイオマ スの利用が検討されているが、広く薄く分布しているこ とと不定形であることから、その収集や運搬コストが無 視できない、そのような点を考えると、どこのバイオマ スをいつ収集し、どこでどのような処理を施し、何を生 産するかが問題となる、言い換えれば、設備配置問題と サプライチェーン最適化問題を同時に考慮する必要があ る.この様な問題にも、スーパーストラクチャを利用で きる.

Fig. 20 左は、バイオマスの発生地や設備の設置候補 地におかれるスーパーストラクチャの例である.この様 なスーパーストラクチャ間の輸送を考えることにより、 Fig. 20 右上のような対象地域全体のスーパーストラク チャを構築できる. さらにバイオマスの特徴である季節 性を考慮することにより,多期間スーパーストラクチャ (Fig. 20 右下)を考えることもできる. これらのスー パーストラクチャに基づいて対象をモデル化すれば,サ プライチェーンを考慮したバイオマス生産プロセスの最 適配置を検討できる [14].

6. おわりに

スーパーストラクチャという考え方を中心に、プロセ ス合成について説明した.プロセス合成問題は一般に組 合せ最適化問題になることから、これまで単純な問題に しか適用されて来なかった.計算機能力と最適化手法の 進歩は、複雑な現実規模の問題に対しても解を導出でき るレベルになりつつある.本報がそのような研究を目指 す研究者を増やすきっかけになれば幸いである.

参考文献

- [1] (社)石油学会編,石油化学プロセス,講談社,2001.
- [2] The U.S. Department of Energy: "Hybrid Separations/Distillation Technology," April 2005, http://www1.eere.energy.gov/manufacturing/resources /chemicals/pdfs/hybrid separation.pdf (2016.2.21 アクセス).
- [3] R. W. H. Sargent and K. Gaminibandara: "Optimum Design of Plate Distillation Columns," Optimization in Action, pp. 267-314, 1976.
- [4] L. T. Biegler, et *al*.: "Systematic Methods of Chemical Process Design." Prentice Hall, 1997.
- [5] 中尾:「ヒートインテグレーションを考慮した蒸留シーケンスの最適化」,京都大学工業化学科卒業論文,2005.
- [6] J. R. Alcántara-Avila, S. Hasebe and M. Kano: "New Synthesis Procedure to Find the Optimal Distillation Sequence with Internal and External Heat Integrations," Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 52, pp. 4851-4862, 2013.
- [7] J. A. Caballero and I. E. Grossmann: "Optimal synthesis of thermally coupled distillation sequences using a novel MILP approach," Comput. Chem. Eng., Vol. 61, pp. 118-135, 2014.
- [8] P. G. Ghougassian and V. Manousiouthakis: "Globally Optimal Networks for Multipressure Distillation of Homogeneous Azeotropic Mixtures," Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 51, pp. 11183-11200, 2012.
- [9] 相良: 蒸留プラント設計, 日刊工業新聞社, 2009.
- [10] H. Takase and S. Hasebe: "Optimal Structure Synthesis of Internally Heat Integrated Distillation Column," J. of Chem. Eng. of Japan, Vol. 48, pp. 222-229, 2015.
- [11] H. Takase and S. Hasebe: "Optimal Stracture Synthesis of Ternary Distillation System," Comp. Aided Chem. Eng., Vol. 37, pp. 1097-1103 2015.
- [12] JPEC: "ペトロリオミクス技術開発への取り組み" http://www.pecj.or.jp/japanese/business/tech01.html (2016.2.21 アクセス).



Fig. 19: 石油精製プロセスのスパーストラクチャ



Fig. 20: バイオマス有効利用のための階層的スーパーストラクチャ

- [13] 中西:「石油精製プロセスにおける成分表現法と最適構 造導出システムの開発」,京都大学工業化学科卒業論文, 2016.
- [14] 川島:「Biomass-SC 構築支援システムの開発」,京都大学 化学工学専攻修士論文, 2009.

長谷部 伸治



1953 年 8 月 27 日生. 1981 年京都大学大学院博士 課程研究指導認定退学.京都大学工学部化学工学科 助手,講師,助教授を経て,2003 年工学研究科化学 工学専攻教授,現在に至る.プロセスシステム工学に 関する研究に従事.工学博士.化学工学会,システム 制御情報学会,計測自動制御学会,分離技術会,米国 化学工学会などの会員.