

平成28年度「第15回 プロセスデザイン学生コンテスト」
「トルエンの脱アルキル化プロセスの設計」

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:

水素化脱アルキルプロセスは、トルエンを選択的にベンゼンに変換することを目的に、古くから開発されてきたプロセスである。工業化されたプロセスには非接触プロセスと接触プロセスがあるが、1970年代に接触プロセスから非接触への転換が行なわれるようになった。高温の水素の存在下で脱アルキルする非接触プロセスが、触媒の再生が不要なうえ、機器のメンテナンスが容易なことから主流となっている。

トルエンを水素存在下で熱的に脱アルキル化しベンゼンを製造するプロセスは、加熱・反応・分離リサイクルを含む工程からなる。加熱工程では、トルエンを水素と混合し、例えば加熱炉で反応温度まで加熱する。反応工程ではトルエンを水素存在下かつ加圧環境下で熱的に脱アルキル化する。分離リサイクル工程では、反応によって得られたベンゼンを分離精製するとともに、未反応水素、未反応トルエンなどをリサイクルする。

2. 課題

下記の条件を満たすプロセスを設計すること。

2-1 製品条件:ベンゼンの生産量と品質

製品純度 ベンゼン: 高沸不純物 0.01 wt% 以下、低沸不純物 0.01 wt% 以下

生産量(t/y) 100,000 MTA

年間稼働時間 8,000 (h/y)

圧力 1 atm、温度 40°C

注 MTA は metric-ton annually を示す。

2-2 原料(BL)条件

原料 トルエン 60.0 mol%, ベンゼン 40.0 mol% 30°C 大気圧

原料水素 95.0 mol%, メタン 5.0 mol% 30°C 16 barG

注 BL は Battery Limit を示す

2-3 ユーティリティ条件

●スチーム

加熱用スチームは系外から供給可能であり、以下の種類を想定する。

- (ア) HP Steam 230[°C] 飽和蒸気で供給、230[°C] 飽和液で戻しても、3[bar] 液で戻してもかまわない。コンデンセートの顕熱を利用してもかまわない。
- (イ) MP Steam 186[°C] 飽和蒸気で供給、186[°C] 飽和液で戻しても、3[bar] 液で戻してもかまわない。コンデンセートの顕熱を利用してもかまわない。
- (ウ) LP Steam 160[°C] 飽和蒸気で供給、160[°C] 飽和液で戻しても、3[bar] 液で戻してもかまわない。コンデンセートの顕熱を利用してもかまわない。

●冷却水 30[°C]供給、40[°C]戻り

●冷媒

冷却水以外の冷媒などを用いて冷却を行う場合は、冷媒の種類とその評価の考え方、製造方法などについて考察を加えること。

●電力

●燃料(メタンを想定する)、5[bar]、20[°C]

この他のユーティリティ(蒸気、冷媒)を利用する場合には、BL 内に内製する設備の設置を計画してもかまわない。但し、BL 内に設置される全ての機器は設計の対象に含まれるものとする。

2-4 単価

(1) 製品

| | |
|---------|-----------------|
| 製品ベンゼン | \$1,000/ton |
| その他副生成物 | 燃料(発熱量ベース)評価とする |

(2) 原料

| | |
|--------|-----------------------|
| 原料トルエン | \$400/ton |
| 原料水素 | \$0.3/Nm ³ |

(3) ユーティリティ

| | |
|--------------|--------------|
| スチーム HP | \$30/ton |
| スチーム MP | \$25/ton |
| スチーム LP | \$15/ton |
| 冷却水 | \$13/1000ton |
| 冷媒 | (各自で想定する) |
| 電力 | \$0.1/kWh |
| 燃料(メタンを想定する) | \$200/ton |

3. 設計上の注意点:

3-1 物性

物性推定は Peng Robinson 式を用いる。

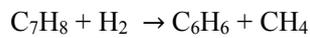
3-2 反応

※反応工程は加圧環境でコーキングなどの副反応を抑えるため、反応器入口の水素/トルエンのモル比は、2.0 以上を保ち、反応器内温度は 800℃以下でなければならない。

以下の非触媒、気相反応を仮定する



(1) 反応 1



上記反応の反応速度は、以下のとおりである。

$$\begin{aligned} -r_T &= k_1 p_T p_H^{0.5} [\text{kgmol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}] \\ k_1 &= 5.435 \times 10^7 \exp\left(-\frac{2.1284 \times 10^5}{RT}\right) [\text{kgmol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{bar}^{-1.5}] \end{aligned}$$

本来は不可逆反応であるが、本課題では逆反応を定義して、制約を設ける。逆反応の反応速度定数は以下の式から求める。

$$\begin{aligned} -r_B &= k_2 p_B p_M^{0.5} [\text{kgmol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}] \\ k_2 &= k_1 / 20 [\text{kgmol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{bar}^{-1.5}] \end{aligned}$$

(2) 反応 2



上記反応の正方向の反応速度は、以下のとおりである。

$$\begin{aligned} -r_B^{0.5} &= k_3^{0.5} p_B [\text{kgmol}^{0.5} \cdot \text{s}^{-0.5} \cdot \text{m}^{-1.5}] \\ k_3 &= 3.5222 \times 10^1 \exp\left(-\frac{1.2764 \times 10^5}{RT}\right) [\text{kgmol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{bar}^{-2}] \end{aligned}$$

逆方向の反応速度は、以下のとおりである。

$$\begin{aligned} -r_D &= k_4 p_D p_H [\text{kgmol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}] \\ k_4 &= 4.5625 \exp\left(-\frac{1.0168 \times 10^5}{RT}\right) [\text{kgmol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{bar}^{-2}] \end{aligned}$$

ただし p_T, p_H, p_B, p_M, p_D はトルエン、水素、ベンゼン、メタン、ビフェニルの分圧[bar]、 T は温度[K]、 R は気体定数 $8.314 [\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$ である。

3-3 コスト評価

・プロセス代替案の選択には、プラント建設費およびエネルギー使用量を適宜、評価して行なうこと。但し、総コストを年間コスト(プラントの収益など)として算出する必要はない。なお、プラント建設費の算出は別途用意した「プラント建設コスト推算(エクセルファイル)」を参照すること。

3-4 本課題における留意点および仮定

- 1) 配管や塔内での圧力損失は無視してよい。但し、加圧すべき箇所には、必ずコンプレッサー(ガス)か、ポンプ(液)を入れること。減圧すべき箇所には、バルブ(液、ガス)を入れること。
- 2) 系内における熱損失は無視してよい。
- 3) 加熱炉では、空気過剰率 5%の完全燃焼により発生したガスと流体との熱交換として取り扱う。
- 4) トルエンのベンゼンへの転化率を 90%以上とする。

4. 機器設計・サイジング

4-1 反応器サイズ

反応器は、Plug Flow Reactor としてサイジングを行い、反応容量と同等の Process Vessel として取り扱う。

4-2 蒸留塔の直径

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 : 液密度[kg/m³]、 ρ_v : 蒸気密度[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。

4-3 容器サイズ

液ホールドアップ量を滞留時間 3[min]をベースに求め、横置き容器(蒸留塔のオーバーヘッドのリザーバー等)、は、NL(Normal Liquid Level)を 50%、Length/Diameter=3.0 を用い、縦置き容器(フラッシュドラム等)は、NL=20%、Length/Diameter=2.0 を用いてサイジングせよ。

4-4 熱交換器サイズ

総括熱伝達係数 U [W/m²-K] は流速に関係なく下表の値を用いて、以下の式より伝熱面積 A [m²]を求める。

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

但し、熱交換器内部で沸点や露点を通過する場合は、沸点や露点前後で分割して計算する必要がある。

| 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 |

4-5 回転機

動力のみ求める。

4-5-1 ポンプ

所要動力を求める。ドライバーは電動機(モーター)を用いる。電動機の機械的ロス、所要動力の2%とする。

4-5-2 コンプレッサー

コンプレッサーは断熱効率80%で所要動力を求め、ドライバーは電動機でも、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、復水機出口圧力は、0.28[bar])でもかまわない。但し、蒸気タービンの断熱効率は80%とする。ドライバーの機械的ロスは、所要動力の2%とする。

水素濃度の高いガスにコンプレッサーを適用する場合、コンプレッサーの吐出温度は100℃以下とする。

4-6 加熱炉

熱量のみ求める。

4-7 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. プロセス設計評価基準

製品純度、年間生産量を満たした上で、プロセス設計評価基準として、以下を考える。

(1) 設計方針および設計案の特徴

「設計方針」、「設計案の特徴」を明確に述べること。

セクション(工程)の概要、設計方針、特徴などプロセスユニットの設計方針や設計根拠を明確に示すこと。

代替案がある場合には、それらを比較・検討した過程が分かるように説明すること。

(2) リサイクル

リサイクルの決め方(どこから戻すか、リサイクルの組成)、リサイクルの選定、リサイクルの温度・圧力について説明すること。

(3) 用役の制約条件と操作圧力および分離のシーケンス決定方法、決定論理について説明すること。

(4) プロセスフローシートなどのドキュメント類に関しても評価対象となるので、提出要領に従って、適宜、準備すること。

以上