

「EQUATRAN-M」技術計算用連立方程式解法言語

(6)

EQUATRAN-M によるプロセス設計と解析 (その2)

工 東 光 夫*
小 口 梧 郎**
宮 原 昱 中***

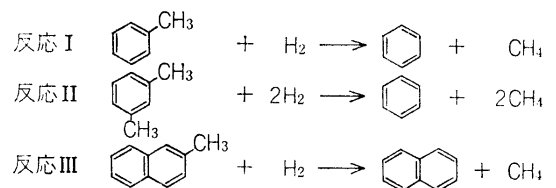
前回は単一成分プロセスと二成分プロセスについて物質収支・熱収支式の取り扱い方法を例をあげて説明した後、多成分系プロセスについての一般的な取り扱いについて述べた。そこで今回は多成分系プロセスの例としてトルエンの脱アルキルによるベンゼン製造プロセス¹⁾をとりあげ、まず簡単なモデル化によるバランス計算を、次に各単位操作についてやや詳細なモデル化の例を紹介し、最後に全プロセスのやや詳細なバランス計算について解説する。

1. プロセスの概要

本プロセスのブロックフロー図を図6-1に示す。ベンゼン、トルエン、キシレンなどを含む原料油は予備処理として水添脱硫により、ジェン類

の飽和化とイオウ化合物の脱硫を行う。この水添脱硫油は水素およびリサイクル油とともに加熱炉で昇温された後脱アルキル反応器に送られる。

脱アルキル反応器では下記のような脱アルキル反応が同時に進行する。



反応器を出た反応生成物は冷却されて高压フラッシュドラムに入り、ここで反応器で生成した分解ガスは水素とともに脱アルキル油から分離されて一部は脱アルキル反応系へリサイクルされ、残りは水素回収工程へ送られる。

水素回収工程においては分解ガスに同伴するベンゼン分を回収除去した後深冷分離装置により水素を回収し、再び脱アルキル反応原料として反応系へ戻す。残りのメタンリッチガスはオフガスと

* Mitsuo Kudo 三井東圧化学(株)システム部主査
 ** Goro Oguchi 三井東圧化学(株)システム部主査
 *** Koreatsu Miyahara 三井東圧化学(株)システム部次長

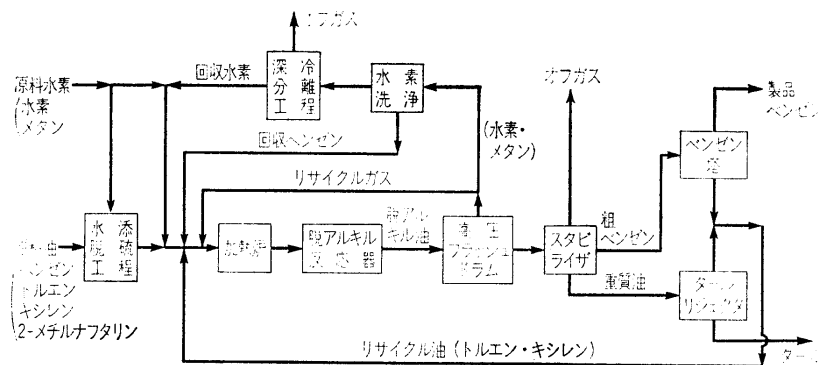


図 6-1 脱アルキル法ベンゼン製造プロセスのブロックフロー図

して系外へ排出される。

一方脱アルキル油はスタビライザへフィードされ、塔頂より高圧フラッシュドラムで未分離の水素や分解ガスを抜き出し、塔底より脱アルキル副反応で生成した少量のナフタリン、タールなどの高沸点重質油を抜き出す。この重質油はさらにタールリジクタに送られ、真空蒸留にて塔底よりタール状物質を除き、塔頂より比較的軽い留分を回収し反応系へリサイクルする。

またスタビライザ中段よりサイドカットされた粗ベンゼンはベンゼン塔に供給される。製品のベンゼンは塔頂より留出し、トルエン、キシレンを中心とする塔底油は反応原料として反応系へリサイクルされる。

2. 簡略計算による物質収支

このようなプロセスの物質収支を EQUATRA N-M により求めてみよう。前所述たようにいきなり詳細モデルを作成するのではなく、まず簡略なモデルを用いて概略の物質収支を把握することから始めよう。

<例題 6.1：簡略計算による物質収支(1)>

図 6-2 に計算の対象とするプロセスのフローを示す。物質収支上あまり重要でない水添脱硫工程および水素の深冷分離工程はここでは省略するものとした。また熱収支はとらないので、加熱炉や冷却器も省略されている。原料となる水素・原料油の成分流量が表 6-1 に、また各分

離操作における分離比が表 6-2 のように与えられているときこのプロセスの物質収支を求めよ。なお、脱アルキル反応 I, II, III の 1 パスの転化率を r_1, r_2, r_3 とすると

$$r_1 = 0.93$$

$$r_2 = 0.8$$

$$r_3 = 0.7$$

であることが分っているものとする。さらにフラッシュドラムから反応器へリサイクルされるリサイクルガスすなわちストリーム<12>の、ストリーム<11>に対する割合をリサイクル率と呼ぶことにし、この値が 0.28 であるとする。

解) 必要な条件は全て与えられているので、プロセス中の各単位操作すなわち、反応、分離、分流および合流のそれぞれについて成立する物質収支の式を順次書き並べればよい。表 6-3 に必要なリストを示した。表中の 2 行目では各ストリームの成分流量 f と総流量 $total$ の変数定義を行うとともに総流量 $total$ の計算式を与えている。5 行目では GLOBAL 文によって成分番号の代わりに成分名の略号が使えるようにパラメータ定義がなされている。このパラメータは例えば 15~24 行目のように使うことができる。

なお分流点の物質収支についてはこの例のリサイクル率 (branch) のように分流比を用いて表現することが大切である (表 6-3 の 61 行目)。同じ分流を、分流の前後で組成が同じであるという式を用いて表現することもできるが、こうすると成

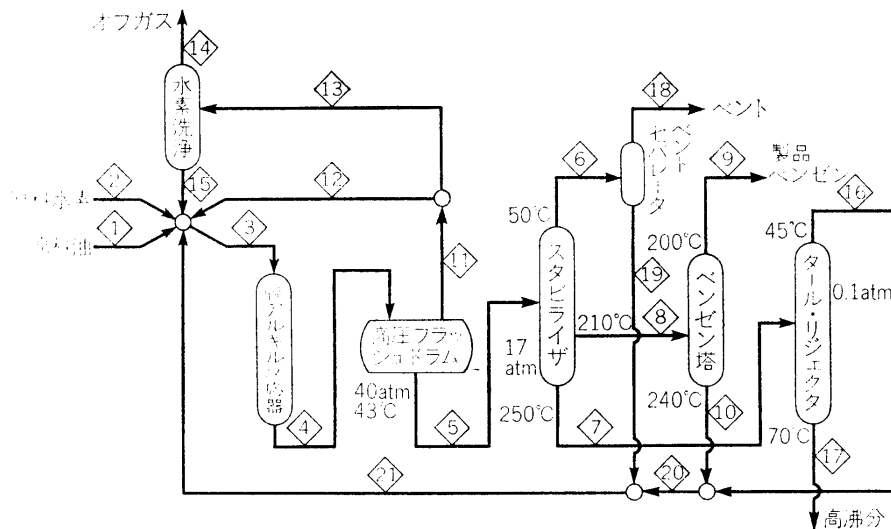


図 6-2 脱アルキル法によるベンゼン製造プロセスのフローシート

表 6-1 原料の内訳 (kgmol/h)

| 成分 | 原料水素 | 原料油 |
|------------|------|-----|
| 水素 | 652 | — |
| メタン | 34 | — |
| ベンゼン | — | 94 |
| トルエン | — | 230 |
| m-キシレン | — | 34 |
| ナフタリン | — | — |
| 2-メチルナフタリン | — | 26 |
| 計 | 686 | 384 |

分流量について非線形な式がたくさんできて余分な収束計算が必要となったり、あるいは独立でない式を余計に書いてしまったりしやすいので使わない方が良い。

さて上記の例は分離比が全て定数として与えられているので全ての式が線形となり、収束計算を必要としないで直ちに解が得られる。次の例を見よう。

<例題 6.2：簡略計算による物質収支(2)>

<例題 6.1>と同じプロセスにおいて反応器入口では反応当量（すなわち、トルエン量+キシレン量の2倍+2-メチルナフタリン量）の2.2倍の水素が必要である。また反応器入口におけるメタン/水素比は0.2としたい。この条件を満たすように原料水素の供給量とリサイクルガス量とを決めて物質収支を計算せよ。

解) この例題では原料水素の供給量とリサイクル率とが未知数となり、その代わりに反応器の入口条件として2つの式が追加されることになる。リサイクル率 branch が未知数になったため分流点の式は非線形となり収束計算が必要となること

表 6-3 例題6.1のリスト

```

1: /* トルエンの脱アルキルプロセスの物質収支 */
2: VARIABLE f(21,7),total(21); total=sum(f)
3: VARIABLE kf1s(7),etas(7),etar(7),etab(7),...
4: etat(7)
5: GLOBAL Hy=1,Me=2,Bz=3,Tl=4,Xy=5,Na=6,MNa=7
6:
7: /* 成分 ...
8: 水素,メタン,ベンゼン,トルエン,mキシレン,ナフタリン,2メチルナフタリン*/
9:
10: /* フォット */
11: f(1) = ( 0, 0, 94, 230, 34, 0, 26 )
12: f(2) = ( 652, 34, 0, 0, 0, 0, 0 )
13:
14: /* 反応器 */
15: f(4, Hy) = f(3, Hy) - r1 - 2*r2 - r3
16: f(4, Tl) = f(3, Tl) - r1
17: f(4, Xy) = f(3, Xy) - r2
18: f(4, MNa) = f(3, MNa) - r3
19: f(4, Me) = f(3, Me) + r1 + 2*r2 + r3
20: f(4, Bz) = f(3, Bz) + r1 + r2
21: f(4, Na) = f(3, Na) + r3
22: r1 = f(3, Tl) * gamma1
23: r2 = f(3, Xy) * gamma2
24: r3 = f(3, MNa) * gamma3
25: gamma1=0.93 ; gamma2=0.8 ; gamma3=0.7
26:
27: /* フラッシュ */
28: f(11) + f(5) = f(4)
29: f(11) = f(4) * kf1s
30: kf1s = ( 0.99, 0.95, 0.05, 0, 0, 0, 0 )
31:
32: /* 水素洗浄 */
33: f(13) = f(14) + f(15)
34: f(15,Hy,Me) = 0
35: f(14,Bz:MNa) = 0
36:
37: /* スタビライザ */
38: f(5) = f(6) + f(7) + f(8)
39: f(6) = f(5) * etas
40: f(8) = f(5) * etar
41: etas = ( 1, 1, 0.02, 0, 0, 0, 0 )
42: etar = ( 0, 0, 0.98, 0.9, 0.5, 0, 0 )
43:
44: /* ベンゼン塔 */
45: f(6) = f(18) + f(19)
46: f(18,Bz:MNa) = 0
47: f(19,Hy,Me) = 0
48:
49: /* ベンゼン塔 */
50: f(8) = f(9) + f(10)
51: f(9) = f(8) * etab
52: etab = ( 1, 1, 1, 0.01, 0, 0, 0 )
53:
54: /* タールリジエクタ */
55: f(7) = f(16) + f(17)
56: f(16) = f(7) * etat
57: etat = ( 1, 1, 1, 1, 1, 0, 0 )
58:
59: /* 分流 */
60: f(11) = f(12) + f(13)
61: f(12) = f(11) * branch
62: branch = 0.28
63:
64: /* 混合 */
65: f(3) = f(1)+f(2)+f(12)+f(15)+f(21)
66: f(21) = f(20) + f(19)
67: f(20) = f(16) + f(10)
68:
69: OUTPUT f,total,r1,r2,r3,branch

```

表 6-2 単位操作の分離比

| 成分 | 単位操作 | 高圧フラッシュ | スタビライザ | | ベンゼン塔 | タールリジエクタ | ベントセバレータ | 水素洗浄 |
|------------|-------|---------|--------|--------|-------|----------|----------|------|
| | ストリーム | ガス | 塔頂 | サイドカット | 製品 | 塔頂 | ベント | オフガス |
| 水素 | | 0.99 | 1 | 0 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| メタン | | 0.95 | 1 | 0 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| ベンゼン | | 0.05 | 0.02 | 0.98 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| トルエン | | 0 | 0 | 0.9 | 0.01 | 1 | 0 | 0 |
| m-キシレン | | 0 | 0 | 0.5 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| ナフタリン | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2-メチルナフタリン | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

判る。このような場合には、このリサイクル率を独立変数とする収束計算を行えばよい。リサイクル率を独立変数に選ぶことにより、これに仮定値が与えられるので分流の式は見かけ上線形と考えてよくなるからである。収束の判定は反応器入口条件のメタン/水素比が指定の値になっているかどうかで行えばよい。表 6-4 に必要なリストを表 6-3 からの変更分についてのみ示した。74行が上記のリサイクル率に対する収束計算を指定する RESET 文である。この計算結果を表 6-5 に示す。

3. やや詳細な物質収支

以上でこのプロセスの概略の物質収支が明らかになったので次にこれを詳細化してみることにする。そのため、まず単位操作の詳細化を高圧フラッシュドラムと蒸留塔を例に説明する。

<例題 6.3 : 高圧フラッシュドラム>

本プロセスの高圧フラッシュドラムの物質収支を求めよ。なおこの系の気液平衡については理想系であると仮定して良い。また各成分の Antoine 定数³⁾は表 6-6 に示す通りであるとする。

表 6-6 Antoine 定数

| 成分 | A | B | C |
|------------|--------|---------|--------|
| 水 | 6.4182 | -99.39 | 280.88 |
| メタン | 7.0957 | -516.69 | 284.37 |
| ベンゼン | 7.4787 | -1701.1 | 293.96 |
| トルエン | 7.4195 | -1738.1 | 273.54 |
| m-キシレン | 7.3597 | -1784.1 | 254.23 |
| ナフタリン | 6.7680 | -1549.6 | 180.66 |
| 2-メチルナフタリン | 7.0847 | -1853.3 | 199.82 |

解) ストリーム <4>, <11>および<5>の総モル流量を F , V および L , 第 i 成分のモル流量を f_i , v_i および l_i とする。操作温度 (43°C) における第 i 成分の蒸気圧を p_i° , 操作圧力 (40atm) を π とすると物質収支は、

$$\frac{V}{F} K_i \frac{l_i}{L} + \left(1 - \frac{V}{F}\right) \frac{l_i}{L} = \frac{f_i}{F} \quad (6-1)$$

ここに、 K_i は気液平衡定数 (K 値) で

$$K_i = p_i^\circ / \pi \quad (6-2)$$

表 6-4 例題 6.2 のリスト (表 6-3 からの変更分のみ)

```

9:
10: /* フィット */
11: f(1) = ( 0, 0, 94, 230, 34, 0, 26 )
12: f(2,Hy) = 0.95 * total(2)
13: f(2,Bz:MNa) = 0
14:

60: /* 分流 */
61: f(11) = f(12) + f(13)
62: f(12) = f(11) * branch
63:
64: /* 混合 */
65: f(3) = f(1)+f(2)+f(12)+f(15)+f(21)
66: f(21) = f(20) + f(19)
67: f(20) = f(18) + f(10)
68:
69: /* 反応器入口条件 */
70: f(3,Hy) = ( f(3,Tl) + f(3,Xy) * 2 + ..
71:             f(3,MNa) ) * 2.2
72: eq2 : f(3,Me) = f(3,Hy) * 0.2
73:
74: RESET branch#0.3 [ 0,1 ] BY eq2 UNTIL 0.01%
75:
76: OUTPUT f,total,r1,r2,r3,branch

```

表 6-5 例題 6.2 の解

```

[ 計算結果 ]
f =
( 1) ( 2) ( 3) ( 4) ( 5)
1) 0 0 94 230 34
2) 660.394245 34.757592 0 0 0
3) 787.917697 157.583567 120.521221 247.144408 42.5
4) 471.873398 473.627866 384.36552 17.300109 8.5
5) 4.718734 23.681393 365.147244 17.300109 8.5
6) 4.718734 23.681393 7.302945 0 0
7) 0 0 0 1.730011 4.25
8) 0 0 357.844299 15.570098 4.25
9) 0 0 357.844299 0.155701 0
10) 0 0 0 15.414397 4.25
11) 467.154664 449.946473 19.218276 0 0
12) 127.523451 122.825975 5.246187 0 0
13) 339.631212 327.120498 13.972089 0 0
14) 339.631212 327.120498 0 0 0
15) 0 0 13.972089 0 0
16) 0 0 0 1.730011 4.25
17) 0 0 0 0 0
18) 4.718734 23.681393 0 0 0
19) 0 0 7.302945 0 0
20) 0 0 0 17.144408 8.5
21) 0 0 7.302945 17.144408 8.5

( 6) ( 7)
1) 0 26
2) 0 0
3) 0 26
4) 18.2 7.8
5) 18.2 7.8
6) 0 0
7) 18.2 7.8
8) 0 0
9) 0 0
10) 0 0
11) 0 0
12) 0 0
13) 0 0
14) 0 0
15) 0 0
16) 0 0
17) 18.2 7.8
18) 0 0
19) 0 0
20) 0 0
21) 0 0

total =
1) 384 2) 695.151837 3) 1381.666892 4) 1381.666892
5) 445.34748 6) 35.703072 7) 31.980011 8) 377.664397
9) 358 10) 19.664397 11) 936.319412 12) 255.595614
13) 680.723799 14) 666.75171 15) 13.972089 16) 5.980011
17) 26 18) 28.400127 19) 7.302945 20) 25.644408
21) 32.947352
r1 = 229.844299
r2 = 34
r3 = 18.2
branch = 0.272979

```

と書ける。(6-1) 式はまた次式

$$\frac{V}{F} K_i l_i = \left(1 - \frac{V}{F}\right) v_i \quad (6-3)$$

のように変形できる。一方,

$$v_i + l_i = f_i \quad (6-4)$$

$$\sum_i v_i = V \quad (6-5)$$

$$\sum_i f_i = F \quad (6-6)$$

が成り立つことから, V/F の値を仮定すると(6-3), (6-4) 式は v_i と l_i を未知数とする連立一次方程式に帰着する。これを解いて v_i と l_i を求め(6-4)~(6-6) 式により V/F の値を求め, 先に仮定した値と一致しているかどうかをチェックすれば良い。すなわち, V/F に RESET 文を用いることで問題を線形化していることになる(注1)。リストでは後に示す表 6-9 の53~58行目がこれに相当する。

<例題 6.4 : スタビライザ>

本プロセスのスタビライザの最小理論段と物質収支を求めよ。なおこの系も気液平衡は理想系であるとし, Antoine 定数は表 6-6 の値を用いること。ただし, スタビライザは図 6-3 に示すように上部と下部に分けて考え, 各々について個別に Fenske の式を適用して良いとする。表 6-7 に各々の部分における限界成分とそのフィードに対する塔頂への分離比を示す。

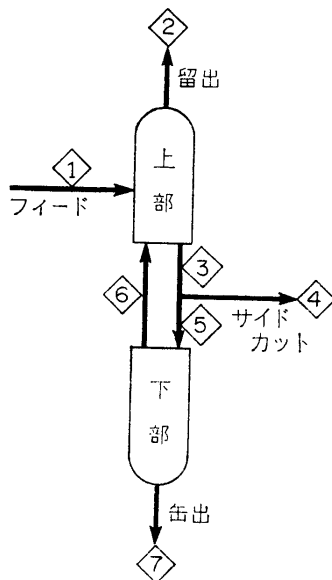


図 6-3 スタビライザのモデル

(注1) 本連載の第3回⁴⁾に同じくフラッシュ計算の例が示してあるが, ここでは少し異なる計算方法を用いている。

表 6-7 蒸留塔の限界成分と分離比

| 蒸留塔 | 低沸限界成分 | 高沸限界成分 |
|------------|---------------|---------------|
| スタビライザ(上部) | メタン (0.99999) | ベンゼン (0.02) |
| スタビライザ(下部) | トルエン (0.900) | キシレン (0.0025) |
| ベンゼン塔 | ベンゼン (0.999) | トルエン (0.0005) |
| タール・リジェクタ | キシレン (0.99) | ナフタリン(0.0001) |

解) 最小理論段数を N_m , 低沸限界成分を lk , 高沸限界成分を hk の添字で表すと Fenske の式は

$$N_m + 1 = \frac{\log \left\{ \left(\frac{y_{lk}}{y_{hk}} \right) \left(\frac{x_{hk}}{x_{lk}} \right) \right\}}{\log(\alpha_{lk, hk})_{av}} \quad (6-7)$$

と書ける。ここに y は留出, x は缶出組成を意味する。また $(\alpha_{lk, hk})_{av}$ は塔内における lk と hk 成分の平均相対揮発度である。

いま第 i 成分のフィードに対する留出量の割合を分離比 η_i と定義すると

$$\eta_i = \frac{D}{F} \frac{y_i}{z_i} \quad (6-8)$$

であるから, $F z_i = D y_i + W x_i$ を考慮すると次式のように変形できる。

$$\frac{1}{\eta_i} - 1 = \frac{W}{D} \frac{x_i}{y_i} \quad (6-9)$$

同様に j 成分についても

$$\frac{1}{\eta_j} - 1 = \frac{W}{D} \frac{x_j}{y_j} \quad (6-10)$$

であることから,

$$\frac{y_i}{x_i} \frac{x_j}{y_j} = \left(\frac{\eta_i}{1 - \eta_i} \right) \left(\frac{1 - \eta_j}{\eta_j} \right) \quad (6-11)$$

と書けることが分る。すなわち(6-7) 式は

$$N_m + 1 = \frac{\log \left\{ \left(\frac{\eta_{lk}}{1 - \eta_{lk}} \right) \left(\frac{1 - \eta_{hk}}{\eta_{hk}} \right) \right\}}{\log(\alpha_{lk, hk})_{av}} \quad (6-12)$$

となり, また限界成分以外の成分については

$$N_m + 1 = \frac{\log \left\{ \left(\frac{\eta_i}{1 - \eta_i} \right) \left(\frac{1 - \eta_j}{\eta_j} \right) \right\}}{\log(\alpha_{ij})_{av}} \quad (6-13)$$

で表せる。

そこで, η_{lk} , η_{hk} および $(\alpha_{lk, hk})_{av}$ が既知ならば(6-12) 式より N_m が求まり, さらに $(\alpha_{ij})_{av}$ も既知ならば限界成分以外の成分についての物質収支式と(6-13) 式とで η_i を求めることができる。表 6-8 にリスト(注2) と計算結果を示す。な

(注2) Fenske の式を用いた例は他にも文献 5) にあるので参照されたい。

お、相対揮発度は塔内各部最下段の温度を用いて算出してある。また図6-3においてストリーム④のストリーム③に対する分流比を cut として定義してある(45行目)。さらに、(6-12)、(6-13)式は1つの式にまとめて書いてある(25~29, 35~39行目)ので注意されたい。

これで各ユニットのモデルを詳細化する準備ができたので、つぎにプロセス全体についてより詳細な物質収支計算を行ってみよう。

表 6-8 例題 6.4 の解

```

1: /* スタビライザの物質収支 */
2: VARIABLE f(7,7),total(7): total=sum(f)
3: VARIABLE ak(7),bk(7),ck(7)
4: VARIABLE alps(7),etas(7),ks(7)
5: VARIABLE alpb(7),etab(7),kb(7)
6: GLOBAL Hy=1,Me=2,Bz=3,Tl=4,Xy=5,Na=6,MNa=7
7:
8: /* 成分 ...
9: 水素,メタン,エタン,トルエン,キシレン,ナフタリン,2メチルナフタリン */
10:
11: /* Antoine 定数 */
12: ak = ( 6.4182, 7.0957, 7.4787, 7.4195...
13:       7.3597, 6.7680, 7.0847 )
14: bk = ( -99.39, -516.69, -1701.1, -1738.1...
15:       -1784.1, -1549.6, -1853.3 )
16: ck = ( 280.88, 284.37, 293.96, 273.54...
17:       254.23, 180.66, 199.82 )
18:
19: /* フィット */
20: f(1)=(4.7, 23.7, 365.1, 17.3, 8.5, 18.2, 7.8)
21:
22: /* スタビライザ */
23: f(1) + f(6) = f(2) + f(3)
24: f(2) = (f(1)+f(6)) * etas
25: nms+1 = loge(etas(Hy,Me,Tl:MNa)..
26:            / (1-etas(Hy,Me,Tl:MNa)))..
27:            *(1-etas(Bz)) / etas(Bz))..
28:            / loge(alps(Hy,Me,Tl:MNa))
29:            alps = ks / ks(Bz)
30: ks = 10^( ak+bk / (210+ck) ) / (17*760)
31: etas(Me,Bz) = (0.99999, 0.02)
32:
33: f(5) = f(6) + f(7)
34: f(6) = f(5) * etab
35: nmb+1 = loge(etab(Hy:Tl,Na:MNa)..
36:            / (1-etab(Hy:Tl,Na:MNa)))..
37:            *(1-etab(Xy)) / etab(Xy))..
38:            / loge(alpb(Hy:Tl,Na:MNa))
39:            alpb = kb / kb(Xy)
40: kb = 10^( ak+bk / (250+ck) ) / (17*760)
41: etab(Tl,Xy) = (0.900, 0.0025)
42:
43: /* 分流 */
44: f(3) = f(4) + f(5)
45: f(4) = f(3) * cut
46:
47: INPUT cut
48: OUTPUT cut,f,total,nms,nmb,etas,etab

```

【計算結果】
cut = 0.6
f =

| (1) | (2) | (3) | (4) | (5) |
|------------------|---------------|------------|----------|----------|
| 1) 4.7 | 23.7 | 365.1 | 17.3 | 8.5 |
| 2) 4.699992 | 23.699858 | 12.009349 | 0.060832 | 0.001675 |
| 3) 1.272408E-005 | 0.000237 | 588.458084 | 26.9362 | 8.506832 |
| 4) 7.634451E-006 | 0.000142 | 353.07485 | 16.16172 | 5.104099 |
| 5) 5.089634E-006 | 9.480038E-005 | 235.383234 | 10.77448 | 3.402733 |
| 6) 5.089634E-006 | 9.480038E-005 | 235.367433 | 9.697032 | 0.008507 |
| 7) 0 | 0 | 0.015801 | 1.077448 | 3.394226 |

f(6) =

| (6) | (7) |
|------------------|---------------|
| 1) 18.2 | 7.8 |
| 2) 1.250932E-005 | 8.099610E-007 |
| 3) 18.199987 | 7.799999 |
| 4) 10.919992 | 4.68 |
| 5) 7.279995 | 3.12 |
| 6) 0 | 0 |
| 7) 7.279995 | 3.12 |

total =

| (1) | (2) | (3) | (4) |
|---------------|---------------|---------------|---------------|
| 1) 445.3 | 2) 40.471719 | 3) 649.901352 | 4) 3*9.940811 |
| 5) 259.900541 | 6) 245.073071 | 7) 14.887469 | |

nms = 2.435593
nmb = 11.780861
etas =

| (1) | (2) | (3) | (4) |
|-------------|------------------|------------------|-------------|
| 1) 0.999997 | 2) 0.99999 | 3) 0.02 | 4) 0.002253 |
| 5) 0.000197 | 6) 6.873252E-007 | 7) 1.038412E-007 | |

etab =

| (1) | (2) | (3) | (4) |
|-----------|------------------|------------------|--------|
| 1) 1 | 2) 1 | 3) 0.999933 | 4) 0.9 |
| 5) 0.0025 | 6) 1.176551E-011 | 7) 2.805757E-014 | |

<例題 6.5: 全系の物質収支>

ベンゼン塔とタールリジェクタについても前記スタビライザと同様の詳細化を行い、全系の物質収支を求めよ。なお各塔の限界成分とその分離比を表6-7に示す。

解) 蒸留塔については最小理論段と成分の分離比を求める点がいずれも共通であることから、EQ UATRAN-M のマクロ化の機能を用いてこの部分を記述する。表6-9にリスト、表6-10に計算結果を示す。ここでは Fenske という名前のマクロを用いており(22~33行)、またそれぞれの式は(6-12)、(6-13)式と比較すればその意味は自明であろう。

このマクロはそれぞれの蒸留塔を定義する箇所のマクロコール文により参照され、マクロ内の変数やパラメータがマクロコール文の変数、数値およびパラメータで置き換えられる。ベンゼン塔を例にとれば、90~92行目のマクロコール文は表6-11のように書いたのと同じになる。この表は EQUATRAN-M のオプション機能を用いて、マクロやパラメータの処理後のソーステキスト(ソースリスト2)を出力させたものである。この表の左側にある

\$045. \$001

は個々の式を区別するために付けられたラベルであり、ピリオドの左側はマクロコール文のラベル、右側はマクロ内の式のラベルを意味する。

このような式群をそれぞれの蒸留塔について書くことを考えればマクロ機能が大変便利なものであることがわかる。

以上で EQUATRAN-M によるプロセスの物質・熱収支計算方法の解説は終りとする。今回はトルエンの脱アルキル法によるベンゼン製造プロセスを例としてとり上げ、やや規模の大きい多成分系のバランス計算を行ってみた。各ユニットのモデルについても一部詳細化の方法を示した。もちろん必要に応じてより詳細化を進めたり、またシミュレーションの範囲を広げることにも可能である。

ところでこのような物質・熱収支計算を行った

表 6-9 例題 6.5 のリスト

```

1: /* トルエンの脱アルキルプロセスの物質収支 */
2: VARIABLE f(24,7),total(24); total=sum(f)
3: VARIABLE kf1s(7),alps(7),etas(7),ks(7),...
4: alpr(7),etar(7),kr(7),alpb(7),...
5: etab(7),kb(7),alpt(7),etat(7),...
6: kt(7)
7: VARIABLE ak(7),bk(7),ck(7)
8: GLOBAL ak=ak,bk=bk,ck=ck,Hy=1,Me=2,Bz=3,...
9: T1=4,Xy=5,Na=6,MNa=7
10:
11: /* 成分 ...
12: 水素,メタン,ベンゼン,トルエン,キシレン,ナフタリン,2メチルナフタリン */
13:
14: /* Antoine 定数 */
15: ak = ( 6.4182, 7.0957, 7.4787, 7.4195,...
16: 7.3597, 6.7680, 7.0847
17: bk = ( -99.39, -516.69, -1701.1, -1738.1,...
18: -1784.1, -1549.6, -1853.3
19: ck = ( 280.88, 284.37, 293.96, 273.54,...
20: 254.23, 180.66, 199.82 )
21:
22: MACRO Fenske
23: nm+1 = loge( eta(nkey) / ( 1-eta(nkey) )..
24: *( 1-eta(hkey) )/eta(hkey) )..
25: / loge( alp(nkey) )
26: nm+1 = loge( eta(lkey) / ( 1-eta(lkey) )..
27: *( 1-eta(hkey) )/eta(hkey) )..
28: / loge( alp(lkey) )
29: alp = k / k(hkey)
30: k = 10^( ak+bk/( t+ck ) ) / ( p*760 )
31: eta(lkey) = etal
32: eta(hkey) = etah
33: END Fenske
34:
35: /* フィット */
36: f(1) = ( 0, 0, 94, 230, 34, 0, 26 )
37: f(2,Hy) = 0.95 * total(2)
38: f(2,Bz:MNa) = 0
39:
40: /* 反応器 */
41: f(4,Hy) = f(3,Hy) - r1 - 2*r2 - r3
42: f(4,T1) = f(3,T1) - r1
43: f(4,Xy) = f(3,Xy) - r2
44: f(4,MNa) = f(3,MNa) - r3
45: f(4,Me) = f(3,Me) + r1 + 2*r2 + r3
46: f(4,Bz) = f(3,Bz) + r1 + r2
47: f(4,Na) = f(3,Na) + r3
48: r1 = f(3,T1) * gamma1
49: r2 = f(3,Xy) * gamma2
50: r3 = f(3,MNa) * gamma3
51: gamma1=0.93 ; gamma2=0.8 ; gamma3=0.7
52:
53: /* フラッシュ */
54: f(11) + f(5) = f(4)
55: f(11) = f(5) * kf1s * ( vbyf/( 1-vbyf ) )
56: eq1: vbyf = total(11) / total(4)
57: kf1s = 10^( ak+bk/( 43+ck ) ) / ( 40*760 )
58: RESET vbyf # 0.5 [ 0, 1 ] BY eq1 UNTIL 0.01%
59:
60: /* 水素洗浄 */
61: f(13) = f(14) + f(15)
62: f(15,Hy:Me) = 0
63: f(14,Bz:MNa) = 0
64:
65: /* スタビライザ 上部 */
66: f(5) + f(24) = f(6) + f(22)
67: f(6) = ( f(5) + f(24) ) * etas
68:
69: CALL Fenske( alp=alps,eta=etas,k=ks,t=210,...
70: p=17,lkey=Me,hkey=Bz,nkey=Hy,T1:MNa,...
71: etal=0.99999,etah=0.02,nm=nms )
72:
73: /* スタビライザ 下部 */
74: f(23) = f(7) + f(24)
75: f(24) = f(23) * etar
76:
77: CALL Fenske( alp=alpr,eta=etar,k=kr,t=250,...
78: p=17,lkey=T1,hkey=Xy,nkey=Hy:Bz:Na:MNa,...
79: etal=0.900,etah=0.0025,nm=nmr )
80:
81: /* アンソレータ */
82: f(6) = f(18) + f(19)
83: f(18,Bz:MNa) = 0
84: f(19,Hy:Me) = 0
85:
86: /* アンソレータ */
87: f(8) = f(9) + f(10)
88: f(9) = f(8) * etab

```

```

89: CALL Fenske( alp=alpb,eta=etab,k=kb,t=240,...
90: p=15,lkey=Bz,hkey=T1,nkey=Hy:Me:Xy:MNa,...
91: etal=0.999,etah=0.0005,nm=nmb )
92:
93:
94: /* ターリシヤクタ */
95: f(7) = f(16) + f(17)
96: f(16) = f(7) * etat
97:
98: CALL Fenske( alp=alpt,eta=etat,k=kt,t=70,...
99: p=0.1,lkey=Xy,hkey=Na,nkey=Hy:T1:MNa,...
100: etal=0.99,etah=0.0001,nm=nmt )
101:
102: /* 分溜 */
103: f(8) = f(22) * cut
104: f(22) = f(8) + f(23)
105: f(11) = f(12) + f(13)
106: f(12) = f(11) * branch
107:
108: /* 混合 */
109: f(3) = f(11)+f(2)+f(12)+f(15)+f(21)
110: f(21) = f(20) + f(19)
111: f(20) = f(16) + f(10)
112:
113: /* 反応器入口条件 */
114: f(3,Hy) = ( f(3,T1) + f(3,Xy) ) * 2 + ..
115: f(3,MNa) * 2.2
116: eq2 : f(3,Me) = f(3,Hy) * 0.2
117:
118: RESET branch#0.3 [ 0, 1 ] BY eq2 UNTIL 0.01%
119:
120: INPUT cut
121: OUTPUT f,total,nms,nmb,nmr,nat,r1,r2,r3
122: OUTPUT vbyf,branch,cut

```

表 6-10 例題 6.5 の解

[計算結果]

| f = | (1) | (2) | (3) | (4) | (5) |
|-------------------|----------------|----------------|----------------|---------------|----------|
| 1) 0 | 0 | 94 | 230 | 34 | 0 |
| 2) 671.353733 | 35.334407 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 3) 800.639175 | 160.128312 | 112.86735 | 247.30313 | 42.457675 | 8.491535 |
| 4) 480.519797 | 480.24769 | 376.825401 | 17.311219 | 8.479339 | 0.001871 |
| 5) 5.814662 | 22.034399 | 370.520035 | 0.060547 | 3.385976 | 5.091693 |
| 6) 5.814653 | 22.034267 | 12.187632 | 0.060547 | 1.072399 | 0.008874 |
| 7) 0 | 0 | 0.016035 | 16.085985 | 0.012196 | 0.008874 |
| 8) 9.445053E-006 | 0.000132 | 358.316398 | 0.008043 | 2.764712E-010 | 0.008874 |
| 9) 9.445053E-006 | 0.000132 | 357.958051 | 0.008043 | 2.764712E-010 | 0.008874 |
| 10) 0 | 0 | 0.358316 | 16.077942 | 5.091693 | 0.012196 |
| 11) 474.705135 | 458.213291 | 6.305367 | 0.092288 | 0.02196 | 0.003322 |
| 12) 129.285442 | 124.793905 | 1.71726 | 0.025135 | 0.003322 | 0.008874 |
| 13) 345.419693 | 333.419386 | 4.588107 | 0.067153 | 0.008874 | 0 |
| 14) 345.419693 | 333.419386 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 15) 0 | 0 | 4.588107 | 0.067153 | 0.008874 | 0.033216 |
| 16) 0 | 0 | 0.016035 | 1.072353 | 0.03386 | 0 |
| 17) 0 | 0 | 5.490369E-003 | 4.595680E-005 | 0.008874 | 0 |
| 18) 5.814653 | 22.034267 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 19) 0 | 0 | 12.187632 | 0.060547 | 0.001671 | 8.443809 |
| 20) 0 | 0 | 0.374352 | 17.150295 | 8.445479 | 8.486154 |
| 21) 0 | 0 | 12.561983 | 17.210842 | 3.394462 | 0.008486 |
| 22) 1.574176E-005 | 0.00022 | 597.193946 | 26.809975 | 8.486154 | 3.394462 |
| 23) 6.296702E-006 | 8.813795E-005 | 238.877578 | 10.72399 | 3.394462 | 0.008486 |
| 24) 6.296702E-006 | 8.813795E-005 | 238.861543 | 9.651591 | 0.008486 | |
| (6) | (7) | | | | |
| 1) 0 | 26 | | | | |
| 2) 0 | 0 | | | | |
| 3) 33.30079 | 31.707409 | | | | |
| 4) 55.495977 | 9.512223 | | | | |
| 5) 55.493553 | 9.512052 | | | | |
| 6) 3.814212E-005 | 9.877425E-007 | | | | |
| 7) 22.197406 | 3.804821 | | | | |
| 8) 33.296109 | 5.707231 | | | | |
| 9) 9.980578E-026 | 1.052165E-031 | | | | |
| 10) 33.296109 | 5.707231 | | | | |
| 11) 0.002423 | 0.00017 | | | | |
| 12) 0.00066 | 4.637348E-005 | | | | |
| 13) 0.001763 | 0.000124 | | | | |
| 14) 0 | 0 | | | | |
| 15) 0.001763 | 0.000124 | | | | |
| 16) 0.00222 | 6.852971E-006 | | | | |
| 17) 22.195186 | 3.804814 | | | | |
| 18) 0 | 0 | | | | |
| 19) 3.814212E-005 | 9.877425E-007 | | | | |
| 20) 33.298329 | 5.707238 | | | | |
| 21) 33.298367 | 5.707239 | | | | |
| 22) 55.493515 | 9.512051 | | | | |
| 23) 22.197406 | 3.804821 | | | | |
| 24) 2.611638E-010 | 1.067540E-013 | | | | |
| total = | | | | | |
| 1) 384 | 2) 706.68814 | 3) 1428.403843 | 4) 1428.403843 | | |
| 5) 489.072972 | 6) 40.098808 | 7) 30.476637 | 8) 418.497527 | | |
| 9) 357.966236 | 10) 60.531291 | 11) 939.33087 | 12) 255.82577 | | |
| 13) 683.505101 | 14) 678.839079 | 15) 4.666022 | 16) 4.442731 | | |
| 17) 26.033906 | 18) 27.84892 | 19) 12.249889 | 20) 64.974022 | | |
| 21) 77.223911 | 22) 697.495878 | 23) 278.998351 | 24) 248.521715 | | |
| nms = 2.435593 | | | | | |
| nmb = 23.426952 | | | | | |
| nmr = 11.780861 | | | | | |
| nat = 3.716467 | | | | | |
| r1 = 229.991911 | | | | | |
| r2 = 33.96614 | | | | | |
| r3 = 22.195186 | | | | | |
| vbyf = 0.657609 | | | | | |
| branch = 0.272349 | | | | | |
| cut = 0.6 | | | | | |

表 6-11 ベンゼン塔マクロ展開部のリスト

```

$045.$001      *      nab=1+logc(etab(1.2,5:7)/(1-etab(1.2,5:7))+(1-etab
$045.$002      *      (4))/etab(4))/logc(s1pb(1.2,5:7)
$045.$003      *      nab=1+logc(etab(3)/(1-etab(3))+(1-etab(4))/etab(4)
$045.$004      *      )/logc(s1pb(3))
$045.$005      *      s1pb=kb/kb(4)
$045.$006      *      kb=10*(ak+bb/(240*ck))/(15*760)
$045.$007      *      etab(3)=0.999
$045.$008      *      etab(4)=0.0005
    
```

表 6-12 例題の計算時間
(IBM 5540, 数値演算プロセッサなし)

| ステップ | 例題 | 5.1 | 5.2 | 5.3 | 5.4 |
|-------|----|-----|-----|-----|-----|
| コンパイル | | 4 | 6 | 33 | 4 |
| ゴ | — | 2 | 103 | 12 | 2 |

| ステップ | 例題 | 6.1 | 6.2 | 6.4 | 6.5 |
|-------|----|-----|-----|-----|-----|
| コンパイル | | 28 | 30 | 22 | 85 |
| ゴ | — | 12 | 27 | 7 | 82 |

(単位：秒)

場合、どのくらい計算時間がかかるか気になるところであろう。表6-12に前回と今回の例題についての実測値を示しておく。

なお次回は EQUATRAN-M による統計計算について紹介する予定である。

参考文献

- 1) 化学工学協会, 「化学プロセス集成」, 東京化学同人 (1970).
- 2) 平田, 頼実: 「蒸留工学ハンドブック」, 朝倉書店 (1966).
- 3) 大江: 「電子計算機による蒸気圧データ」, データブック出版社 (1976).
- 4) 須藤, 佐渡友, 宮原: ケミカルエンジニアリング, 1985年10月号, p. 67.
- 5) 宮原, 林田, 須藤: 分離技術懇話会 夏季研究討論会資料 (昭和60年8月).