



化学プロセス工学

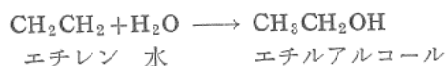
樽 田 栄 一*

1. はじめに

“システム工学”はすでに広く一般になじまれ、我が国においてもシステム工学に関する図書が数多く出版されているが、“プロセス工学”はまだなじみの少ない言葉である。しかし最近公式の名称としてプロセス工学あるいはプロセスシステム工学という言葉が使用されはじめた^{注)}ので、この機会にプロセス工学とくに化学プロセス工学とはどのような工学の分野であるのかを探ってみたい。なおここではたまたま工業的な化学プロセスについてのみふれるが、化学プロセスとしては化学工業においてみられるもの以外にも数多くあることをおことわりしておく。

2. 工業化学プロセスのモデル化

ここに一枚のフローシートがある(図1)。この図にはエチレンを原料としてエチルアルコールを製造する工程(エチレンの直接水和法)の一部が描かれている。図中の矢印は物質の流れを表わしている。原料のエチレンと水を混合し、リン酸触媒を充填した反応塔に供給する。反応塔の中ではつぎのような反応が起こりエチルアルコールができる。



この反応とともに幾つかの副反応が起こる。反

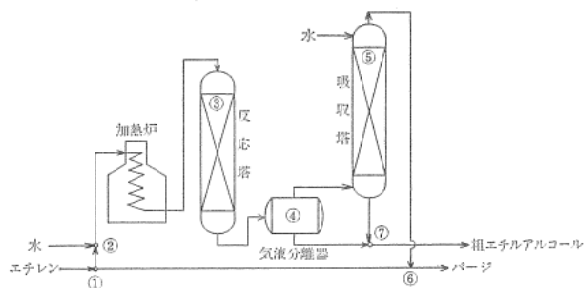


図1 エチレンの直接水和法によるエチルアルコールの製造

応塔から出た流体中には目的生成物であるエチルアルコールおよび未反応原料である水、エチレンが存在する。さらに副反応によって生成した物質が不純物として含まれている。反応塔から出た流体を一部液化し気相と液相における。未反応のエチレンは主として気相に、反応によって生成したエチルアルコールおよび未反応の水は液相に入る。気液両相を分離し、気相中に入ったエチルアルコールを水で吸収する。吸収塔から出た気体中には未反応のエチレンが含まれているので、これを循環し新しい原料と混合し再び反応塔に供給する。循環流中に不活性成分が蓄積してくるのを防ぐため、循環流の一部をつねにパーズしておく。

このように図1のフローシートは幾つかの段階をへて(装置を通して)原料のエチレンと水が製品であるエチルアルコールに順次変化していく様子を表わしている。各段階での変化の特徴を流量と濃度(組成)の変化に着目し分類するとつぎのようになる。

(i) 合流点(図1中の①, ②, ⑦)

2つの流れが合流する点で、ここでは流れの中の各成分について流量がそれぞれ和となって流れ出る。

(ii) 分流点(図1中の⑥)

1つの流れが2つ以上の流れに分けられる点で、この点より上流と下流においては流れ中の各成分の濃度は不変であるが、各成分についてそれぞれ下流の各流れの和が上流の流れになっている。

(iii) 気液分離器(図1中の④)

1つの流れが2つの流れに分けられるが、この装置を出る2つの流れ中の各成分濃度は同一

* 樽田栄一(Eiichi Kunugita), 大阪大学, 基礎工学部, 化学工学科教授, 工学博士, 化学プロセス工学

注) 本年度から大阪大学大学院工学研究科にプロセス工学専攻が設置された。また最近, 日本学術振興会にプロセスシステム工学第143委員会が発足した。

ではない。分離器から出る気相の流れ中にはエチレンが、液相の流れ中にはエチルアルコールと水が濃縮されている。

(iv) 吸収塔 (図1中の⑤)

気液分離器を出た気相中には、まだエチルアルコールが含まれているので、これを水で洗滌している。この型式の装置では供給される流れが2つ、排出される流れが2つあり、それぞれの濃度が異なる。

(v) 反応塔 (図1中の③)

化学反応の起こる部分で、ここでは原料中のある成分が消失し、新しい成分が生成して行く。そして消失量と生成量の間には化学量論関係が成り立っている。

以上のような働きをする5種の部分(これを要素と呼ぶ)を組合せ結合することによって、エチレンと水からエチルアルコールを製造する工程がつくられている。したがって、それぞれの要素について要素へ入る流れの量と要素から出る流れの量の間を数式で表現することができる。さらにこれらを組合せて工程全体の特性を数式で表現することができることになる。このように工程全体あるいは各要素についてそれぞれの特性を数式で表現することをモデル化とよんでいる。

3. システムとプロセス

プロセス (process) という言葉を辞書で調べてみると“ある特定の結果へ向っての一連の変化あるいは変化を起こさせる手続、操作”と書かれてある。前節の例によってもおわかりいただけたことと思うが、化学工業では、原料の流れに物理的、化学的な変化を起こさせ、原料とは質的に異なる製品の流れに変換することが行われている。したがって化学工業には多くのプロセスがみられることになる。これらのプロセスはさらに細かく幾つかの要素に分けられ、それぞれの要素において変化が起こっている。これらを単位操作 (unit operation)、単位プロセス (unit process) と呼んでいるが、これらはまたそれぞれ小さいプロセスとなっている。これまでの習慣として物理的変化を起こさせるものを単位操作、化学反応が関係したものを単位プロセスと呼んでいる。これらの操作を実

現するものとして装置があり、装置の組合せ全体をプラントと呼んでいる。他方、システム (system) という言葉は“全体としてある特定の目的を達成するためにつくられた要素の有機的な組合せ”であるといわれている。そしてシステムを構成する要素自体がさらに細かい幾つかの要素から構成されたシステムになっている。この関係をはっきり表わすためにその構成要素のことをサブシステムと呼んでいる。

プロセスはシステムの一分類であり、システムにはプロセスシステムの他に機械加工などにみられるジョブショップシステム (job shop system)、電気、ガス、水道などの供給にみられるネットワークシステム (network system) がある。化学プロセスというのはプロセスシステムの中とくに化学的変化(化学反応による新しい成分の生成あるいは濃縮、分離などによる組成の変化)が起こるものをさすことになる。化学プロセスを建造物としてみたとき化学プラントと呼ばれる。化学プロセスを構成する単位操作、単位プロセスはシステムとしてみたときにはサブシステムにあたり、建造物としてみたとき装置(化学プロセスでは槽型、塔型の装置が多く用いられるので、反応槽、反応塔、蒸留塔、吸収塔などの名前が付けられている)である。プロセス内の流れの状態を規定する量を状態変数と呼んでいる。化学プロセス中には多くの流れがあり、それぞれの流れの状態を規定するためには流れの温度、圧力および流れ中の各成分の濃度をそれぞれ数量化しなければならない。図1のような簡単な例においても、13の流れがみられ、各流れの中にはエチレン、水およびエチルアルコールの他に原料中の不純物であるメタン、エタン、アセチレンおよび副反応によって生成するアセトアルデヒド、ジエチルエーテルなど少くとも8成分が含まれることになる。したがって化学プロセス全体の状態変数の数は非常に多くなっている。

4. 工業化学プロセスの合成

つぎにある化合物を製造する工業的な化学プロセスをつくり出す手順について考えてみよう。原料と異なる物質をつくり出すためには化学反応を利用しなければならない。したがって化

学プロセス合成の第一段階はどのような化学反応（多くの場合に複数の反応の組合せ）を選ぶかの問題となる。ある化合物をつくる化学反応は一つとは限らず、一般には多数考えられる。これらの中から最適なものを選択されなければならない。例えば塩化ビニール (CH_2CHCl) を製造するために利用できる反応としてはつぎのようなものが考えられる。

(i) アセチレンと塩化水素とを反応させる。



アセチレン 塩化水素 塩化ビニール

(ii) エチレンと塩素から二塩化エチレンをつくり、これを分解する。

エチレンと塩素の反応



エチレン 塩素 二塩化エチレン

二塩化エチレンの分解反応としては希酸性

ソーダ水溶液を用いる反応

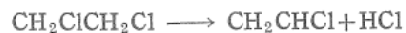


二塩化エチレン カ性ソーダ



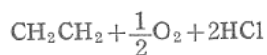
塩化ビニール 食塩 水

あるいは熱分解する反応がある。



二塩化エチレン 塩化ビニール 塩化水素

この2種の経路を比較してみるとつぎのようなことがいえる。まず原料の面からみると、アセチレンよりもエチレンがはるかに多量に石油化学工業から供給されるため(ii)が有利と考えられる。しかしエチレンを原料としたときには副生物として塩化水素（あるいは中和された食塩）が排出される。これは資源的に損失であるのみならず、環境汚染の原因ともなる。そこで、エチレンを原料として塩化水素を反応させる経路として考え出されたのが、オキシクロリネーション法である。



また(ii)の反応によって副生した塩化水素を(i)の反応に利用し、塩素を完全に利用しプロセス外に出ないようにしようとした混合ガス法が考え出されている。このように化学プロセス構成の基本となる化学反応の選択は化学プロセス合成

の第一段階であるとともに化学プロセスの計画における最も重要な問題であるといえる。化学反応が選択されると、そのような反応を行うに必要な反応条件の決定、反応器から排出される流体中から目的生成物を分離、精製するための単位操作が決定される。そしてこれらの単位操作を行うため最適な装置類の設計が行われることになる。

装置の最適設計にあたっては、最適とはどのような状態をさすのかをあらかじめ定量的な形で決めておく必要がある。それらが目的関数あるいは評価関数と呼ばれる関数である。この関数を決めるにあたっては最も簡単にはその装置の効率あるいは処理量、生産量がとられるが、ただそれだけでは不十分で、その装置の経済性なども含まなければならないのはもちろん、さらにその安全性あるいは環境に対する影響なども含めるべきである。そして評価関数を極値とするような設計あるいは操業条件が決められる。この決定には各種の数理計画法が応用され、その計算には大型の電子計算機が利用される。このようにして設計されたプロセスが必ずしもプロセス全体として最適になっているとはいえないので、再び化学反応の選択、単位操作の組合せ決定および装置の設計の順で再検討が行われ、必要に応じて修正が加えられる。

5. おわりに

化学プロセスがシステムの一つの型であるとの立場で、その2、3の特徴について述べてみた。化学プロセスの特徴としては、プロセスの状態を規定する変数が非常に多いことおよびプロセスの合成にあたっては、そのプロセスで利用される化学反応の選択がプロセスの最適化に決定的な影響をもつことを指摘した。従来新しい化学プロセスの開発は主として工業化学の応用として、計画設計は化学工学の応用としてみられてきたが、化学プロセスの大型化、複雑化にともなってシステム工学的立場から統一し、体系化された工学の分野が必要となってきた。これにこたえるものが化学プロセス工学であるといえよう。