

## 쿠몰생산공정의 개선을 위한 Aspen Plus 모의결과에 대한 해석

김성민, 정승호

경애하는 최고령도자 김정은동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《금속공업과 화학공업은 경제강국을 떠받드는 쌍기둥이며 금속, 화학공업을 발전시키는것은 경제건설과 인민생활향상을 위한 중요한 담보입니다.》

페놀과 아세톤생산의 기본원료인 쿠몰은 보통 프로필렌에 의한 벤질의 알킬화반응으로 합성한다. 이때 주생성물인 쿠몰(IPB)과 함께 디이소프로필벤질(DIPB), 트리이소프로필벤질(TIPB)을 비롯한 폴리알킬벤질들이 생성된다.

현재 쿠몰생산공정들에서는 쿠몰생성반응의 선택률을 높이기 위하여 과잉의 벤질(물질량비 4 : 1~8 : 1)을 리용하므로 미반응벤질을 분리하여야 한다.[1, 2] 따라서 반응선택률을 높이며 에너지를 소비를 최대한으로 줄이는것이 공정설계의 기본문제로 되고있다.

우리는 반응과 분리를 하나로 통합시킨 반응증류법을 예견한 생산공정을 새롭게 제기하고 Aspen Plus로 공정모의하여 그 정확성을 검토하였다.

### 1. 모의조건의 설정

공정흐름도 선행연구[2]에서는 반응과 분리가 서로 다른 탑에서 진행되며 분리된 벤질은 다시 가열되어 반응기로 들어가게 설계하였다.

그러나 우리는 반응증류법을 리용하여 반응과 분리가 동시에 반응증류탑에서 진행되며 미반응벤질은 다시 반응증류탑으로 들어가도록 공정흐름도를 새로 구성하였다.(그림)

모의조건 모의조건은 표 1-4와 같다.

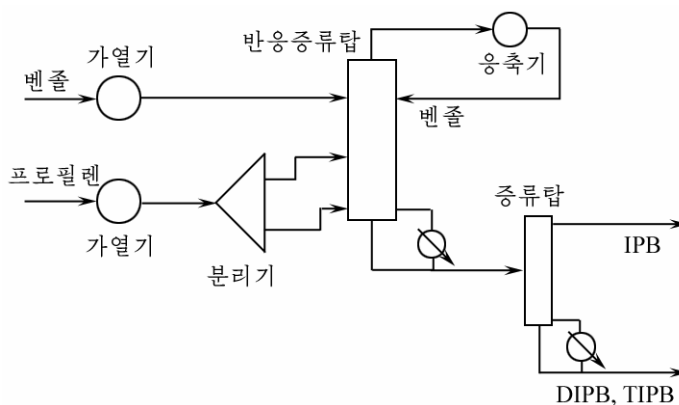


그림. 공정 흐름도

표 1. 입구흐름에 대한 모의조건

온도/°C	원료흐름속도/(kmol·h <sup>-1</sup> )	압력/kPa
20	100	18

표 2. 반응기에 대한 모의조건

온도/°C	길이/m	반응기형태	압력/kPa	직경/m
20	8	RPlug	30	1.2

표 3. 반응운동학

반응	반응속도	속도상수
BZ + PRO = IPB	$kC_p C_b^{0.7}$	$2.6 \cdot 10^6 \exp(-77\ 000/RT)$
IPB + PRO = DIPB	$kC_p C_{IPB}$	$2.0 \cdot 10^6 \exp(-80\ 000/RT)$

표 4. 반응증류탑에 대한 모의조건

단수	프로필렌입구단	반응진행단	벤졸입구단	압력/MPa
40	20, 35	1~39	1	1.4

쿠물은 벤졸과 프로필렌보다 끓음점이 높으며 따라서 쉽게 분리할수 있다. 프로필렌은 벤졸보다 끓음점이 낮지만 파잉의 벤졸에 의하여 완전히 반응하므로 분리할 필요는 없다. 반응증류탑은 2개의 구역 즉 반응 및 생성물분리구역으로 이루어지며 미반응벤졸은 응축되어 다시 반응증류탑으로 들어간다.

기타 조건은 선행연구[3]에서와 같으며 모두 RK-SOAVE물성모형을 리용하였다.

모의는 연간 5만t생산능력의 쿠물합성공정을 예견하여 진행하였으며 목적하는 쿠물의 순도는 99.9%로 하였다.

## 2. 모의결과분석

벤졸/프로필렌물질량비에 따르는 반응의 선택률 선행연구[3]조건에서 벤졸/프로필렌물질량비에 따르는 반응의 선택률변화는 표 5와 같다.

표 5에서 보는바와 같이 쿠물생성반응의 선택률은 벤졸/프로필렌의 물질량비가 커질수록 커지다가 7일 때 제일 크며 그 이상에서는 다시 작아진다.

표 5. 물질량비에 따르는 반응의 선택률변화

물질량비	4	5	6	7	8	9
선택률	0.82	0.84	0.86	0.88	0.85	0.84

우리의 조건에서 물질량비에 따르는 쿠물생성반응의 선택률변화는 표 6과 같다.

표 6. 물질량비에 따르는 쿠물생성반응의 선택률변화

물질량비	1	2	3	4	5	6	7
선택률	0.855	0.861	0.863	0.865	0.866	0.867	0.866

과잉량 넣지 않아도 된다는것을 알수 있다.

벤졸/프로필렌의 물질량비에 따르는 공정의 열부하 선행연구[3]조건에서 벤졸/프로필렌의 물질량비에 따르는 공정의 열부하는 표 7과 같다.

표 7에서 보는바와 같이 벤졸/프로필렌의 물질량비가 7이상일 때 열부하가 급격히 커진다.

표 7. 벤졸/프로필렌의 물질량비에 따르는 열부하

물질량비	4	5	6	7	8	9
Q/kW	3 510	3 689	3 740	4 312	4 823	5 534

선택률과 에네르기소비의 견지에서 가장 적합한 물질량비는 6이다.

우리의 모의조건에서 물질량비에 따르는 열부하는 표 8과 같다.

표 8에서 보는바와 같이 벤졸/프로필렌의 물질량비가 1.6이상에서 열부하가 크게 증가

하였다.

표 8. 벤졸/프로필렌물질량비에 따르는 열부하

물질량비	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9
$Q/kW$	2 817	2 845	2 889	2 845	2 889	3 045	3 130	3 215	3 411

모의결과로부터 선택률과 열부하를 고려하여 가장 적합한 벤졸/프로필렌의 물질량비는 1.6이다. 이때 쿠몰생성반응의 선택률은 0.86, 열부하는 3 045kW로서 선행연구에서와 같은 선택률을 유지하면서도 에너지를 82%로 절약할수 있다.

### 맺 는 말

반응증류법에 의한 쿠몰합성공정을 설계하고 화학공정 모의프로그램 Aspen Plus에 의하여 반응의 선택률과 열부하에 미치는 벤졸/프로필렌물질량비의 영향을 모의한 결과 물질량비가 1.6일 때 반응의 선택률을 0.86으로 높이면서도 에너지를 82%로 줄일수 있다.

### 참 고 문 헌

- [1] 김형락 등; 화학공업편람 14, 공업출판사, 52~54, 1988.
- [2] A. C. Dimian et al.; Chemical Process Design, Wiley-VCH, 173~200, 2008.
- [3] S. I. Sandler; Using Aspen Plus in Thermodynamics Instruction, Wiley, 252~273, 2015.

주체105(2016)년 9월 5일 원고접수

## Interpretation on the Results of Simulation using Aspen Plus to Improve Process for Cumene Synthesis

*Kim Song Min, Jong Sung Ho*

We designed the conceptual process for cumene synthesis using reactive distillation and considered the effects of molar benzene/propylene ratio on the selectivity of reaction and energy consumption by using Aspen Plus.

As the result, we confirmed that a large excess of benzene and the energy spent for benzene recycling can be reduced considerably in this method.

Key words: cumene, process design, Aspen Plus