

Proyecto 2 de la asignatura de Modelado y Simulación de procesos químicos. Curso 2006-2007

HIDRODEALQUILACIÓN DE TOLUENO

Se quiere estudiar el proceso de hidrodealquilación de tolueno. Este proceso es una reacción no catalítica a alta temperatura de tolueno con hidrógeno para la producción de benceno (y metano).

La reacción se lleva a cabo con exceso de hidrógeno para minimizar las reacciones secundarias y evitar la formación de puntos calientes donde se puede producir coque.

Para poder tener un mayor conocimiento del proceso se ha propuesto desarrollar un modelo en estado estacionario empleando el programa Aspen Plus.

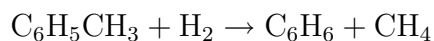
A continuación se describe el proceso mencionado así como las condiciones de operación relativas al caso base de estudio. El caso base se refiere a una alimentación de tolueno de 125 kmol/h.

Descripción del proceso

La estructura para la producción de benceno a partir del tolueno se describe en el diagrama de flujo de la figura 1.

Química del proceso

A altas temperaturas el hidrógeno consigue separar el grupo metil del tolueno formando metano con el mismo y formándose benceno. La reacción es la siguiente:

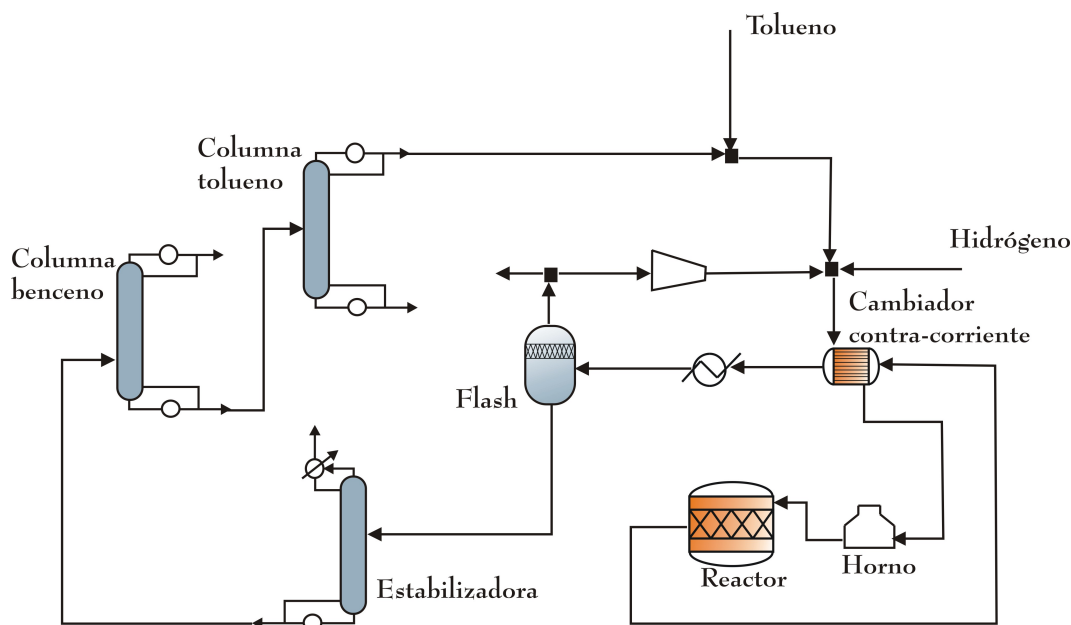


Pese al exceso de hidrógeno no se puede evitar la presencia de una reacción secundaria. Esta reacción es la dimerización del benceno para la formación de difenil. La reacción es:



Corrientes de proceso

- El tolueno está disponible a 42atm y a 25°C .
- El hidrógeno está disponible a 42atm y a 40°C . Su composición es de un 95 %de H_2 y el resto de metano.
- Se dispone de agua de refrigeración a 30°C siendo la temperatura de retorno inferior a 50°C



Cambiador de proceso y horno

Toda la alimentación se precalienta a través de un cambiador en contra corriente y después en un horno antes de ser alimentada al reactor. El cambiador tiene una pérdida de carga (tanto en tubos como en carcasa) de 2.5atm y el horno tiene igualmente una pérdida de carga de 2.5atm. Para los cambiadores de carcasa y tubo tómese un coeficiente global de transmisión de calor de $50W/m^2K$ y un $\Delta T_{min} = 10C$

El resto de cambiadores del proceso se asume que tienen una pérdida de carga de 0.35atm.

Reactor

Una mezcla de tolueno fresco, tolueno reciclado del tren de destilación, de hidrógeno y de gas de reciclo se alimenta al reactor. Toda la alimentación debe de calentarse a $620^{\circ}C$ y 35atm antes de entrar al reactor. El reactor es adiabático con una temperatura máxima de salida de $700^{\circ}C$. La pérdida de carga en el mismo es de 2.5atm. Inicialmente tiene la reacción principal de deshidrogenación del tolueno, para esta reacción se considera una conversión de un 75 % de tolueno. Además de esta reacción está la dimerización del benceno, la cual tiene una conversión del 3 % del benceno total (es decir, el presente en la alimentación más el generado por la reacción principal).

Esta conversión y selectividad se ha conseguido con relaciones molares de hidrógeno a compuestos orgánicos (benceno más tolueno más difenil) superiores o iguales a 5:1.

Separador de fases

La salida del reactor contiene bastante hidrógeno que no ha reaccionado además de tolueno. Estos reactivos deben de ser recuperados y reciclados para aumentar la productividad y eficiencia del proceso. Como primer paso la salida se enfría en el cambiador contra-corriente y posteriormente en un cambiador con agua de refrigeración. La salida de este último cambiador es de $40^{\circ}C$ y se alimenta a un separador de fases donde el vapor (rico en hidrógeno) se comprime y recicla. Una

fracción de este vapores necesario purgarla. El caudal de esta purga es 0.082 veces el caudal total de vapor saliente del separador de fases.

Columna estabilizadora

El líquido procedente del flash se alimenta al tren de destilación. En primer lugar esta la columna estabilizadora en la cual se separa el hidrógeno y metano restante. El destilado de esta columna se destina a fuel como vapor a 10atm y 50°C .

Se han realizado unos cálculos preliminares que indican que con 10 etapas teóricas se puede conseguir una buena separación y que la alimentación se debería introducir en la novena etapa (contando desde la cabeza de la columna). La columna se debe operar para que la fracción molar de metano en la corriente de fondos sea inferior a 0.0002.

Columna de destilación de benceno

Los fondos de la columna estabilizadora contienen principalmente benceno y tolueno, pero también difenil y algo de las especies gaseosas. Esta columna de destilación separa la mezcla obteniéndose un destilado rico en benceno y unos fondos ricos en tolueno. Un diseño preliminar de la misma ha proporcionado la cifra de 30 platos teóricos para realizar esta separación. La alimentación debe ser introducida en la etapa 15 (contando desde la cabeza de la columna). La columna opera a presión atmosférica. Se debe operar la misma de forma que se obtenga una fracción molar de tolueno en el destilado de 0.0003 y una fracción molar de benceno en los fondos de 0.015.

Columna de destilación de tolueno

Esta columna separa el difenil del tolueno para purgarlo. El destilado es por tanto rico en tolueno y se recicla y mezcla con el tolueno fresco. Los fondos son ricos en difenil. Un diseño preliminar indica que los platos necesarios para esta separación son cinco y que la alimentación debe de ser introducida en el segundo plato (comenzando por la cabeza). La es atmosférica y debe operarse para obtener una fracción molar de difenil en el destilado de 0.0003 y una fracción de tolueno en los fondos de 0.05.

Resultados

Se debe realizar el balance de materia y de energía del diagrama de flujo propuesto. Se pueden realizar las suposiciones y simplificaciones que se considere oportuno pero siempre justificándolas. De igual manera se puede alterar (si se considera necesario y de forma justificada) la estructura del diagrama para obtener la producción pedida.

Se debe entregar un informe con los siguiente apartados:

- Descripción del particionado del sistema y de los conjuntos de corte posibles.
- Resumen y análisis de los resultados obtenidos, que debe incluir:
 - Indicar el modelo de Aspen empleado en la simulación de cada equipo, así como sus condiciones de operación
 - Poner la tabla resumen con los resultados de las corrientes
- Dificultades (y soluciones en su caso) durante el desarrollo de la simulación.
- Suposiciones y/o simplificaciones realizadas (en caso de hacerlas)
- Archivos .inp y .bkp de Aspen con el modelo.

Notas para la realización de la simulación:

1. Desarrollar la simulación de forma gradual (grabar cada versión con un nombre diferente antes de cualquier modificación importante).
2. Simular primero el proceso sin reciclos e irlos añadiendo progresivamente.
3. Emplear los cálculos de simulaciones anteriores como estimaciones para las siguientes simulaciones (especialmente en el caso de reciclos).
4. Empezar por modelos más sencillos (por ejemplo en el caso de las columnas se puede empezar por separadores o por modelo DISTL) y posteriormente pasar a los más rigurosos.
5. Considerar la posibilidad de dar valores iniciales a ciertas corrientes que tome como estimación para el comienzo del cálculo.
6. Considerar la posibilidad de cambiar el método de integración así como la tolerancia, el número de iteraciones que realiza,... (por ejemplo, emplear el algoritmo de Broyden en lugar del de Wegstein)