

Progettazione di Processo e Analisi dei Costi

Prof. Davide Manca – Politecnico di Milano

Traccia Esercitazione 1

Bilanci materiali processo HDA

Esercitatore: ing. Roberto Totaro



Conceptual design

- È una procedura sistematica per valutare le diverse alternative impiantistiche su base economica
- In teoria le alternative possono essere dell'ordine di 10^4 - 10^9
- Elementi mancanti: considerazioni ambientali, di sicurezza, di controllabilità, facilità di start-up e shutdown,...



Conceptual design (2)

Procedura:

1. Selezione del tipo di processo
2. Identificazione della struttura input-output (EP2)
3. Identificazione dei ricicli (EP3)
4. Progettazione della sezione di separazione (EP4)
5. Integrazione termica del processo (EP5)

Aumento del dettaglio dal primo all'ultimo punto



Introduzione

Le esercitazioni del corso di Progettazione di Processo e Analisi dei Costi vertono sulla progettazione di base e sull'analisi economica del processo di idrodealchilazione (**HDA**) del toluene a dare benzene.

Toluene

Idrogeno

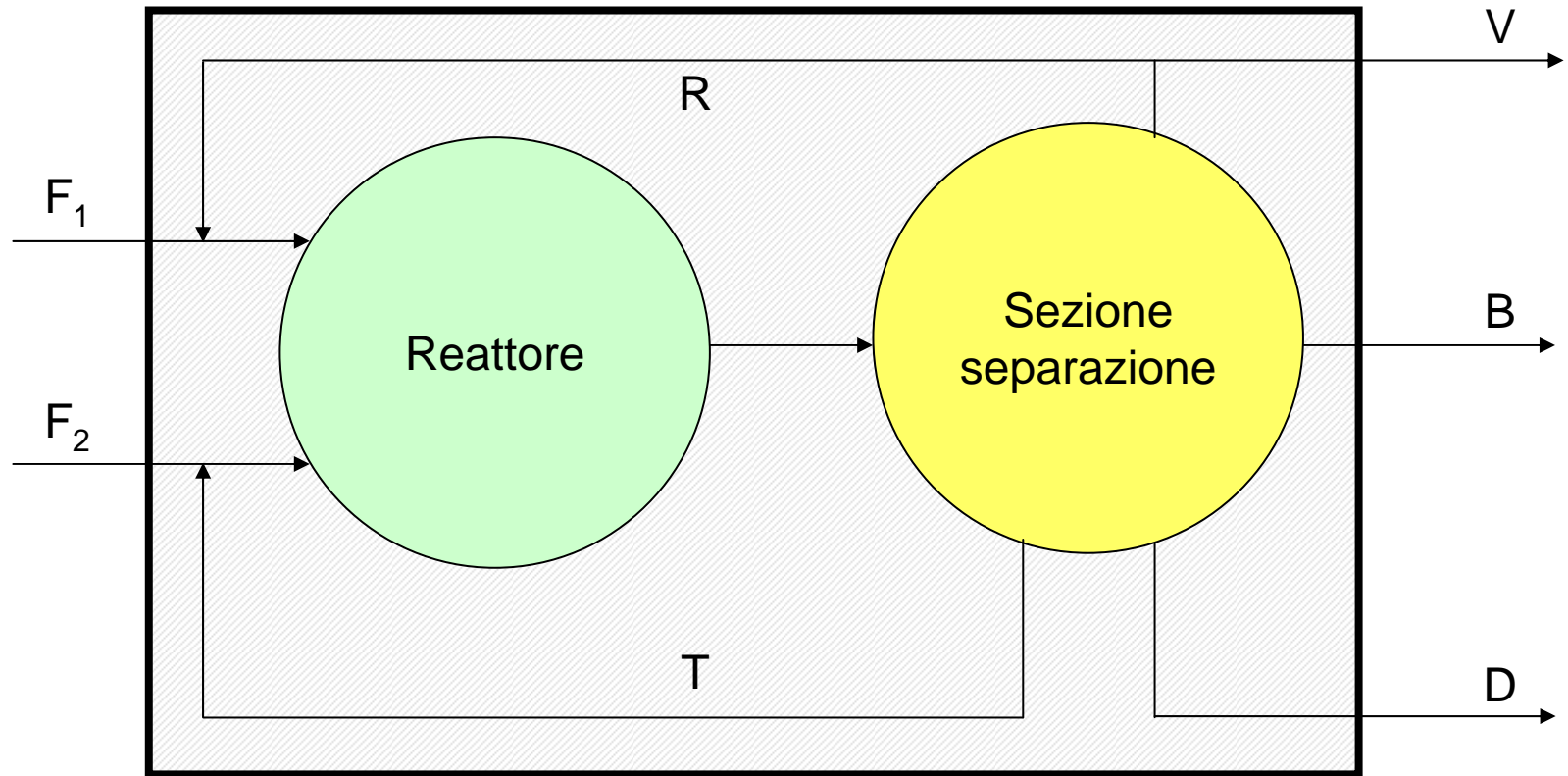


Sottoprodotti leggeri

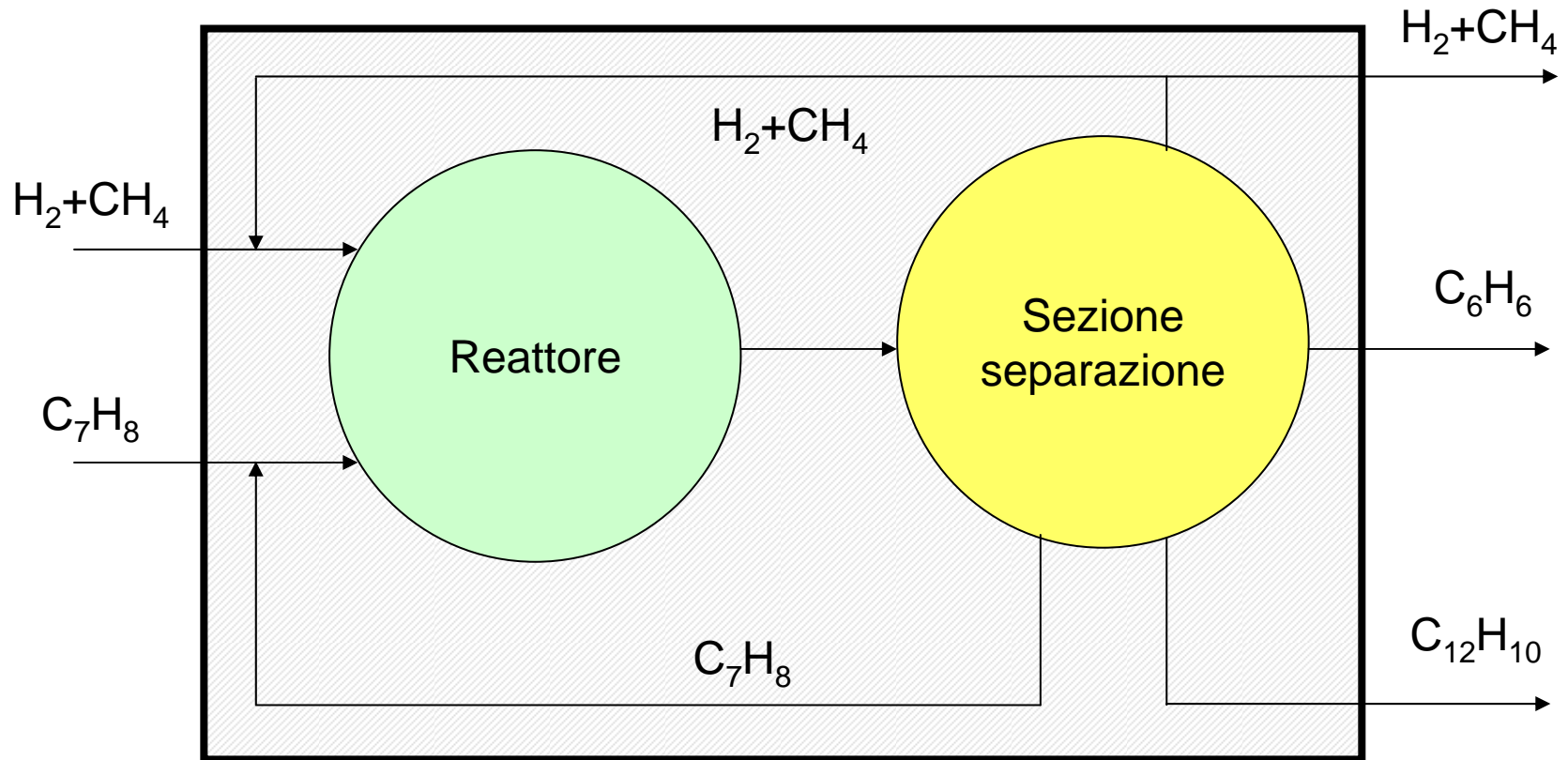
Benzene

Sottoprodotti pesanti

Processo HDA

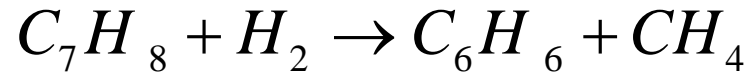


Processo HDA



Reazioni

Reazione desiderata



Reazione parassita



Gradi di libertà

Scelta del reattore

Presenza di ricicli?

Riciclo di toluene e idrogeno non reagiti

Presenza di spurghi?

Spurgo di parte della corrente gassosa per evitare l'accumulo di metano nel sistema

Gradi di libertà

Scelta del reattore

Condizioni delle correnti in ingresso

Tempo di residenza o volume del reattore

Condizioni di esercizio (pressione e temperatura)

Gradi di libertà

Condizioni delle correnti in ingresso

- La corrente di idrogeno fresco contiene il 5% mol di metano
- I reagenti sono a temperatura ambiente
- Il rapporto tra idrogeno e toluene in ingresso al reattore deve essere da una parte alto per evitare il *coking* e dall'altra basso per ridurre i costi di riciclo. Si suggerisce di utilizzare un rapporto pari a 5

Tempo di residenza e volume del reattore

Determinato dalle seguenti specifiche

- La selettività deve essere $\geq 96\%$
- La produttività di benzene deve essere = 265 kmol/h
- La purezza del benzene deve essere ≥ 0.9997

Gradi di libertà

Condizioni di esercizio

Pressione di esercizio

Non si sposta alcun equilibrio perché le reazioni sono equimolecolari.

PRO: aumentando la pressione si ha un aumento della concentrazione dei prodotti per aumento della velocità di reazione

CONTRO: aumentando la pressione si ha un aumento dei costi di compressione

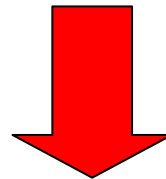
$$\Rightarrow P = 34 \text{ bar}$$

Gradi di libertà

Condizioni di esercizio

Temperatura di esercizio

- Non è necessario l'apporto di alcun catalizzatore.
- Le due reazioni sono entrambe endotermiche
⇒ necessario operare ad **alta temperatura!**
- La reazione parassita diventa più importante ad alte temperature (maggiore energia di attivazione)
⇒ necessario operare ad **bassa temperatura!**

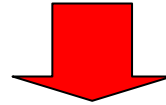


Range di interesse economico: 600 – 750 °C
(Effettuare prove ogni 50 °C)

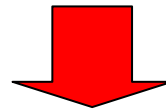
Gradi di libertà

Scelta del reattore

Lo schema di reazione è di tipo consecutivo:
Toluene \Rightarrow Benzene \Rightarrow Difenile



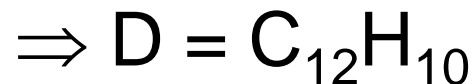
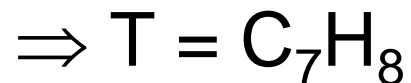
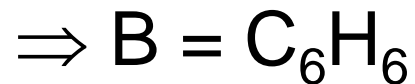
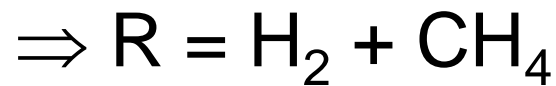
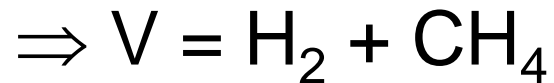
Necessario controllare tempo di contatto (mantenendo la selettività sopra 96%)



Necessario utilizzare un reattore di tipo PFR!

Ipotesi semplificative

- Il treno di separazione permette di ottenere correnti pure:



Matrice correnti/composizioni

	H ₂	CH ₄	C ₆ H ₆	C ₇ H ₈	C ₁₂ H ₁₀
F ₁	0.95	0.05	0	0	0
F ₂	0	0	0	1	0
B	0	0	1	0	0
D	0	0	0	0	1
V	x _v	1 - x _v	0	0	0
R	x _v	1 - x _v	0	0	0
T	0	0	0	1	0

Definizioni

- **Selettività:**
$$\sigma = \frac{\text{mol prodotto desiderato}}{\text{mol convertite}} = \frac{n_{C_6H_6}}{n_{C_7H_8}^{iniz} - n_{C_7H_8}^{fin}}$$
- **Conversione:**
$$\xi = \frac{\text{mol reagite}}{\text{mol iniziali}} = \frac{n_{C_7H_8}^{iniz} - n_{C_7H_8}^{fin}}{n_{C_7H_8}^{iniz}} = 1 - \frac{n_{C_7H_8}^{fin}}{n_{C_7H_8}^{iniz}}$$
- **Tempo di residenza:**
$$\tau = \frac{\text{Volume reattore}}{\text{Portata volumetrica}}$$

Richieste

1. Individuare i gradi di libertà del sistema
2. Scrivere i bilanci materiali globali espliciti, nota la stechiometria di reazione. Tali bilanci devono essere in grado di dare una stima delle portate entranti, uscenti e dei ricicli
3. Determinare da quali variabili dipende ogni corrente (temperatura, ...)



Computo delle incognite

- 7 portate (F_1 , F_2 , B , D , V , R , T)
- 1 composizione (x_v) o rapporto di splitting $R/(R+V)$
- 1 specifica (tempo di residenza o volume del reattore)

= 9 incognite

Equazioni di bilancio

$$\frac{d[j]}{d\tau} = -\sum_{i=1}^{NR} \nu_{ji} R_i \quad j = 1 \div NC$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[H_2]}{d\tau} = -R_1 + R_2 \\ \frac{d[CH_4]}{d\tau} = R_1 \\ \frac{d[C_6H_6]}{d\tau} = R_1 - 2R_2 \\ \frac{d[C_7H_8]}{d\tau} = -R_1 \\ \frac{d[C_{12}H_{10}]}{d\tau} = R_2 \end{array} \right.$$

5 equazioni ODE

Specifiche

Si hanno **3** specifiche:

- Selettività
- Produttività
- Rapporto idrogeno/toluene in ingresso al reattore (considerando i ricicli)

Manca una specifica per saturare i gdl

⇒ Composizione dello spurgo o rapporto di splitting $R/(R+V)$