

# PROCESO HDA

## HIDRO-DESALQUILACION DE TOLUENO PARA PRODUCIR BENCENO

### Información Preliminar del Proceso para producir benceno a partir de tolueno (Proceso HDA).

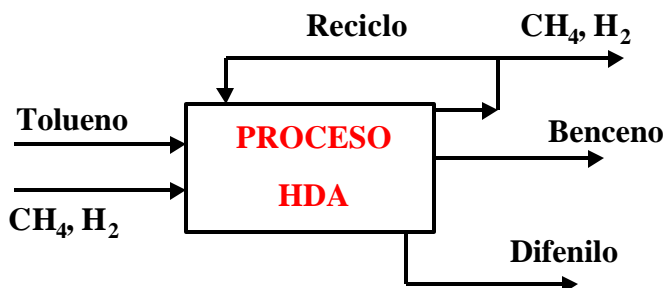
#### 1- Información de la reacción:

- a) Reacciones: 
$$\begin{array}{lcl} \text{Tolueno} + \text{H}_2 & \text{-----}> & \text{Benceno} + \text{CH}_4 \\ 2 \text{ Benceno} & <==== & \text{Difenilo} + \text{H}_2 \end{array}$$
- b) Temperatura de reacción  $> 1150^\circ\text{C}$  (velocidad de reacción alta).  
Presión en el reactor: 500 psia.
- c) Selectividad (S) = moles de benceno en la salida del reactor / moles de tolueno convertidos.
- Conversion (a) = moles de tolueno convertidos en el reactor / moles de tolueno alimentados al reactor.
- $$S = 1 - 0.0036 / (1 - a)^{1.544}; \quad a < 0.97$$
- c) Fase gas.
- e) No se utilizan catalizadores.

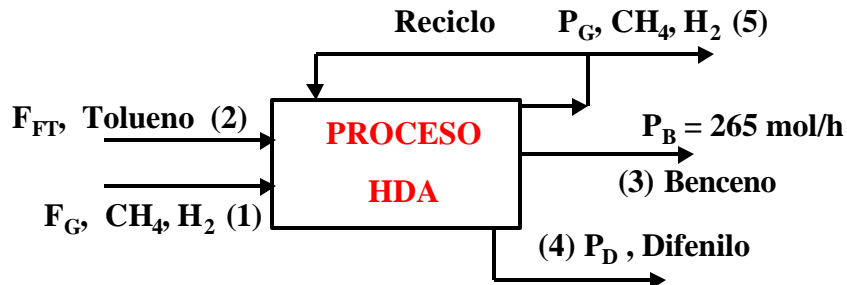
- 2- Flujo de producción de benceno = 265 mol/hr.
- 3- Pureza del benceno producido =  $x_D = 0.9997$ .
- 4- Materias primas: Tolueno puro en condiciones ambientales.  
Corriente que contiene 95% de hidrógeno y 5% de metano, a 550 psia y 100°F.
- 5- Restricciones:
- $H_2$  / aromáticos  $\approx 5$  a la entrada del reactor (prevenir la coquización).
  - Temperatura de salida del reactor < 1300 °F (prevenir el hidrocrackeo).
  - El efluente del reactor debe ser enfriado rápidamente a 1150 °F.
  - $\alpha < 0.97$  por la correlación de distribución del producto.

**Ejemplo: Encontrar el número de corrientes de productos para el proceso HDA.**

Componente	Tª de ebullición normal, °C	Destino
$H_2$	-253	reciclo y purga
$CH_4$	-161	reciclo y purga
benceno	80	producto primario
tolueno	111	reciclo
difenilo	253	combustible



## Ejemplo: Balances de masa en el proceso HDA



### Flujos de Entrada:

- $F_{FT}$ : Flujo molar de tolueno alimentado en el proceso, [mol/h]
- $F_G$ : Flujo molar total de gases ( $H_2$ ,  $CH_4$ ) en la alimentación, [mol/h]
- $F_E$ : Flujo molar de  $H_2$  alimentado en exceso al proceso, el cuál debe salir por la corriente de purga, [mol/h]
- $F_{H_2}$ : Flujo molar de  $H_2$  consumido en la reacción, [mol/h]

### Flujos de Salida:

- $P_B$ : Flujo molar de benceno que sale del reactor, [mol/h]
- $P_{RCH_4}$ : Flujo molar de metano producido, [mol/h]
- $P_{CH_4}$ : Flujo molar de metano en la purga, [mol/h]
- $P_D$ : Flujo molar de difenilo producido, [mol/h]
- $P_G$ : Flujo molar de purga, [mol/h]

### Fracciones molares:

- $Y_{FH}$ : Fracción molar de  $H_2$  en la alimentación
- $Y_{PH}$ : Fracción molar de  $H_2$  en la purga.

Selectividad,  $S = \text{Flujo de Benceno} / \text{Flujo de Tolueno}$



## Balances de Masa:

**Selectividad:**  $F_{FT} = P_B / S = P_{RCH4}$

**Producción de Difenilo:**  $P_D = F_{FT} (1 - S) / 2 = (P_B / S) (1 - S) / 2$

**Balance e Hidrógeno:**  $F_E + P_B (1 + S) / 2S = Y_{FH} F_G$

**Balance de Metano:**  $P_{CH4} = (1 - Y_{FH}) F_G + P_B / S$

**Flujo de Purga:**  $P_G = F_E + (1 - Y_{FH}) F_G + P_B / S$

$$Y_{PH} = F_E / P_G$$

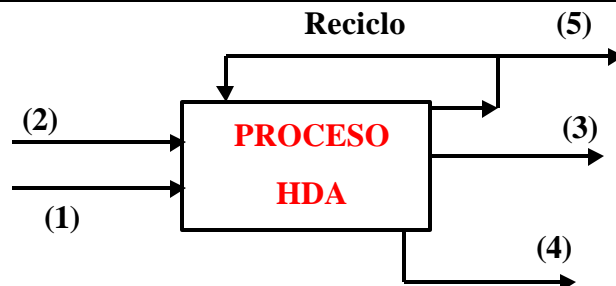
Conociendo  $\{ P_B, S \}$  ó  $\{ F_E, Y_{PH} \}$  (variables de diseño)

Se obtienen:  $F_{FT}$ ,  $P_D$ ,  $F_G$ ,  $P_G$  y luego se puede calcular el beneficio económico bruto ó el potencial económico.

## Tabla de Corrientes

	Corrientes				
	1	2	3	4	5
T <sup>a</sup> , (°F)	100	100	100	100	100
P, (psia)	550	15	15	15	465
H <sub>2</sub>	F <sub>H2</sub>	0	0	0	F <sub>E</sub>
CH <sub>4</sub>	F <sub>M</sub>	0	0	0	F <sub>M</sub> + P <sub>B</sub> /S
benceno	0	0	P <sub>B</sub>	0	0
tolueno	0	P <sub>B</sub> /S	0	0	0
difenilo	0	0	0	P <sub>B</sub> (1-S)/2S	0

$F_M = (1 - Y_{FH}) [F_E + P_B (1 + S) / 2S] / Y_{FH}$   
 $F_{H2} = F_E + (1 + S) P_B / 2S$   
 $S = 1 - 0.0036 / (1 - \alpha)^{1.544}$   
 $\alpha$  = conversión de tolueno por pasada



## Beneficio Económico Bruto:

$$BE = \{\text{valor producto} + \text{valor subprod(s)} - \text{valor materia prima(s)}\}, [\$/\text{año}]$$

No se consideran los costos de inversión ni los costos de servicios.

Si  $BE < 0$  entonces. i)- Desechar el diseño del proceso.  
ii)- Buscar una fuente de materias primas más baratas.  
iii)- Buscar procesos alternativos.

Para el Proceso HDA se tiene:  $BE =$

$$\{\text{valor del benceno} + \text{valor del difenilo} + \text{valor del combustible de la purga}\} \\ - \{\text{valor del tolueno} - \text{valor del gas consumido}\}$$

## Precios

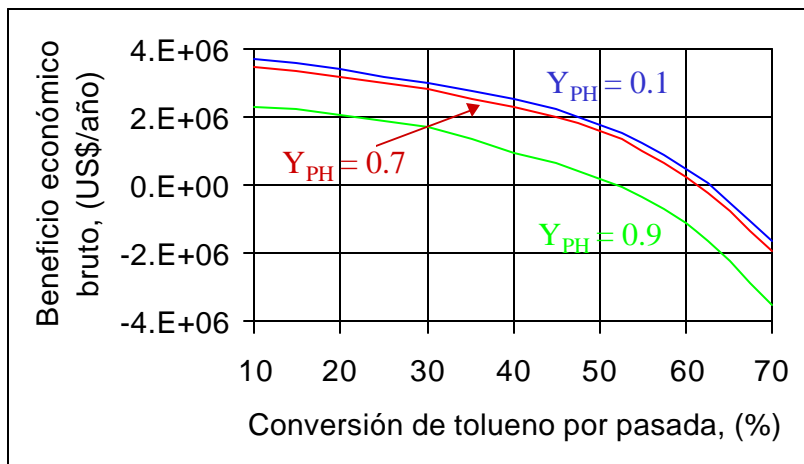
Valor del Benceno	0.85 US\$/gal	= 9.04 US\$/mol
Valor del Tolueno (*)	0.5 US\$/gal	= 6.4 US\$/mol
Valor del H <sub>2</sub> alimentado	3 US\$/1000 ft <sup>3</sup>	= 1.14 US\$/mol
Valor del Combustible	4 US\$/Mbtu	

### Calores de Combustión:

H <sub>2</sub>	0.123 Mbtu/mol	Tolueno	1.68 Mbtu/mol
CH <sub>4</sub>	0.383 Mbtu/mol	Difenilo	2.69 Mbtu/mol (**)
Benceno	1.41 Mbtu/mol		

(\*) Se asume un precio de transferencia interna (precio de mercado = 1.26 US\$/gal)

(\*\*) Se asume un valor del combustible difenilo de 5.38 US\$/mol



Beneficio Bruto del Proceso HDA en función de la conversión y de la fracción de hidrógeno en la corriente de purga

## Estructura de los Sistemas de Separación

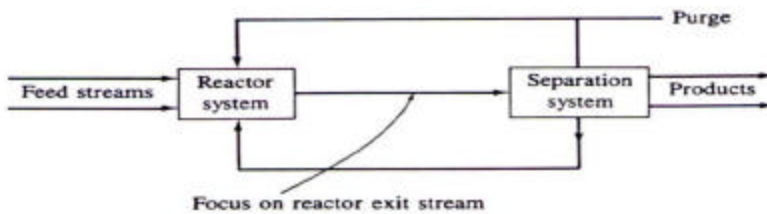


FIGURE Phase of the reactor effluent stream.

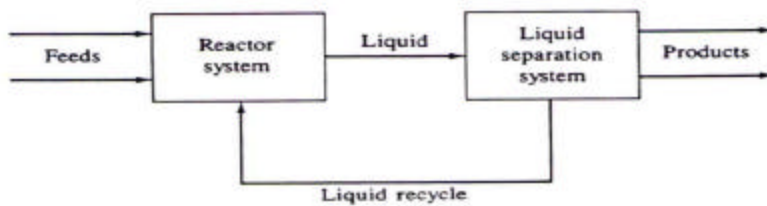


FIGURE Reactor exit is liquid. [From J. M. Douglas, *AIChE J.*, 31: 353 (1985).]

