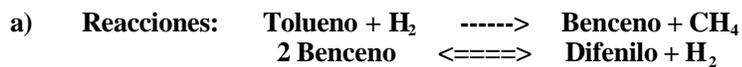


PROCESO HDA

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:



b) Temperatura de reacción > 1150°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.

Conversión (a) = moles de tolueno convertidos en el reactor / moles de tolueno alimentados al reactor.

$$S = 1 - 0.0036 / (1 - a)^{1.544}; \quad a < 0.97$$

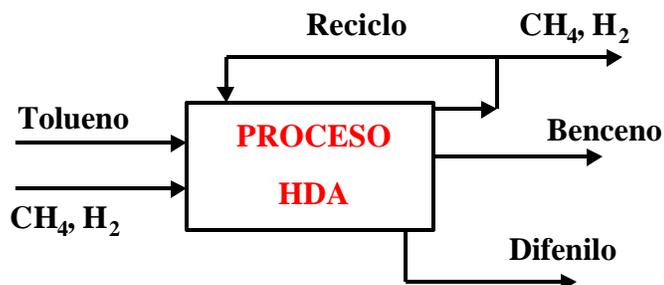
c) Fase gas.

e) No se utilizan catalizadores.

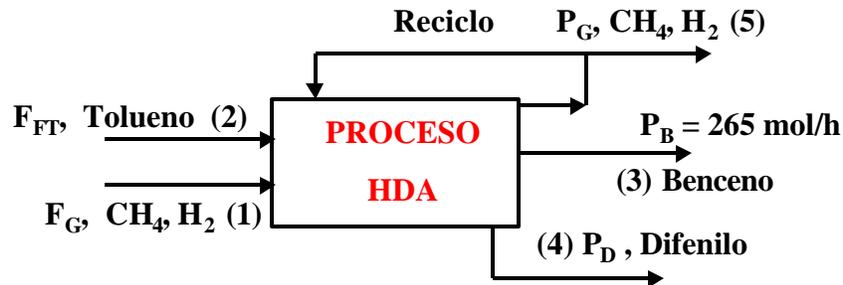
- 2- Flujo de producción de benceno = 265 mol/hr.
- 3- Pureza del benceno producido = $x_D = 0.9997$.
- 4- Materias primas: Tolueno puro en condiciones ambientales.
Corriente que contiene 95% de hidrógeno y 5% de metano, a 550 psia y 100°F.
- 5- Restricciones:
- H_2 / aromáticos ≈ 5 a la entrada del reactor (prevenir la coquización).
 - Temperatura de salida del reactor < 1300 °F (prevenir el hidrocraqueo).
 - 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_{H2} : 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 Difenido: $P_D = F_{FT} (1 - S) / 2 = (P_B / S) (1 - S) / 2$

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

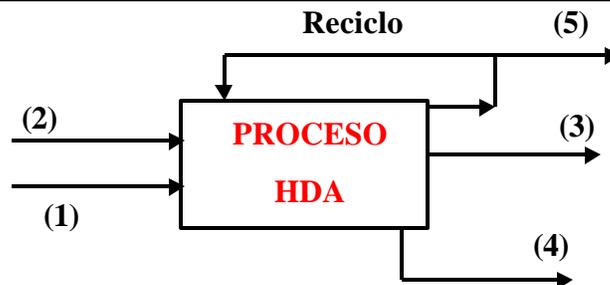
$$Y_{PH} = F_E / P_G$$

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
Tª, (°F)	100	100	100	100	100
P, (psia)	550	15	15	15	465
H ₂	F _{H2}	0	0	0	F _E
CH ₄	F _M	0	0	0	F _M + P _B /S
benceno	0	0	P _B	0	0
tolueno	0	P _B /S	0	0	0
difenilo	0	0	0	P _B (1-S)/2S	0

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

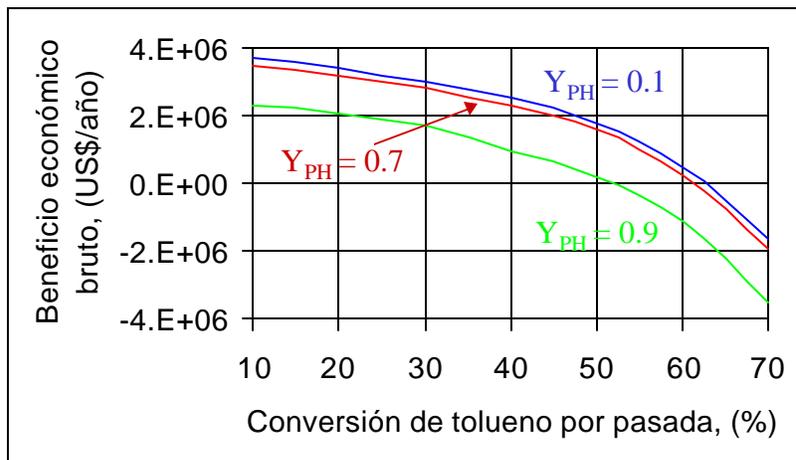
Valor del Benceno	0.85 US\$/gal	= 9.04 US\$/mol
Valor del Tolueno (*)	0.5 US\$/gal	= 6.4 US\$/mol
Valor del H ₂ alimentado	3 US\$/1000 ft ³	= 1.14 US\$/mol
Valor del Combustible	4 US\$/Mbtu	

Calores de Combustión:

H ₂	0.123 Mbtu/mol	Tolueno	1.68 Mbtu/mol
CH ₄	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

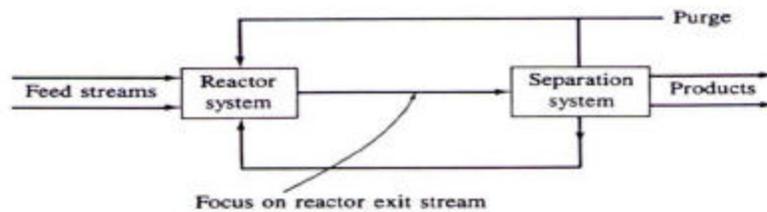


FIGURE Phase of the reactor effluent stream.

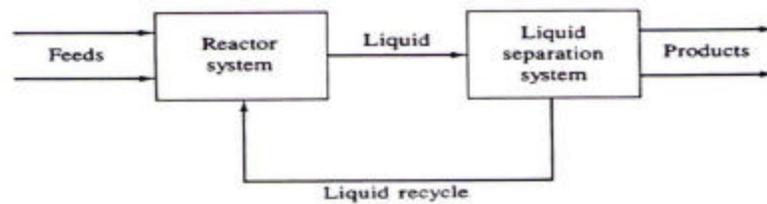


FIGURE Reactor exit is liquid. [From J. M. Douglas, *AIChE J.*, 31: 353 (1985).]

