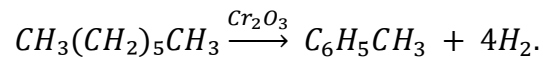


4^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Μονάδα παραγωγής τολουολίου με αφυδρογόνωση *n*-επτανίου”

Η **αφυδρογόνωση (dehydrogenation)** είναι μια χημική αντίδραση που περιλαμβάνει την απομάκρυνση του υδρογόνου, συνήθως από ένα οργανικό μόριο. Είναι το αντίστροφο της υδρογόνωσης. Σε αυτό το εργαστήριο θα σχεδιάσουμε μια διεργασία παραγωγής τολουολίου ($C_6H_5CH_3$) με αφυδρογόνωση επτανίου ($CH_3(CH_2)_5CH_3$). Το τολουόλιο παράγεται από *n*-επτάνιο με αφυδρογόνωση χρησιμοποιώντας καταλύτη Cr_2O_3 . Η αντίδραση δίνεται παρακάτω:



Σε αυτήν τη διαδικασία το τολουόλιο σχηματίζεται μαζί με το υδρογόνο όπως φαίνεται στην παραπάνω αντίδραση. Το διάγραμμα ροής της διαδικασίας της αφυδρογόνωσης δείχνει τη μετατροπή του *n*-επτανίου σε τολουόλιο χρησιμοποιώντας έναν καταλυτικό αντιδραστήρα που εισάγεται στην παραπάνω αντίδραση. Η διαδικασία παραγωγής τολουολίου ξεκινάει με την θέρμανση του *n*-επτανίου από 65 έως 800°F με την χρήση θερμοαντήρα. Έπειτα, το ρεύμα ροής τροφοδοτείται στον καταλυτικό αντιδραστήρα, ο οποίος λειτουργεί ισοθερμικά και μετατρέπει το 15 mol% του *n*-επτανίου σε τολουόλιο. Η εκροή του ρεύματος ροής ψύχεται στους 65°F και τροφοδοτείται σε μια μονάδα διαχωρισμού. Υποθέτοντας ότι όλες οι μονάδες του διαγράμματος ροής λειτουργούν υπό ατμοσφαιρική πίεση, ο ρυθμός ροής των ρευμάτων καθώς και οι άλλες ιδιότητες προσαρμόζονται κατάλληλα σε κάθε ροή ρεύματος.

Ανοίγουμε το πρόγραμμα **DWSIM**.

1. Δημιουργούμε μια νέα προσομοίωση: **File -> New Steady-state simulation**.
2. Από την καρτέλα «**Compounds**» προσθέτουμε τα εξής στοιχεία-αντιδραστήρια:
 - N-heptane
 - Toluene
 - Hydrogen
3. Από την καρτέλα «**Property Packages**» επιλέγουμε την εξίσωση επίλυσης «**Peng-Robinson**».
4. Από την καρτέλα «**System of Units**» επιλέγουμε «**C5**» και αλλάζουμε την **πίεση** (pressure) από **bar** σε **atm** και την **θερμοκρασία** (temperature) από **°C** σε **°F**. Τέλος πατάμε «**Finish**».

5. Από το βασικό μενού επιλέγουμε «**Settings**» και πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Reactions**» και έπειτα οδηγούμαστε στην καρτέλα «**Chemical Reactions**» και επιλέγουμε «**Add Reaction**» - > «**Conversion**» θέτοντας:

- Name = Toluene Formation
- Description = Production of toluene
- Όλα τα στοιχεία στο include
- Στο BC (βασικό στοιχείο) θέτουμε το N-heptane
- N-heptane = -1 (αντιδρών)
- Toluene = 1 (παράγωγο)
- Hydrogen = 4
- Phase = Vapor
- Στο conversion θέτουμε την τιμή στο 15%

6. Εισάγουμε ένα «**Material Stream**» με ονομασία «**feed**» και θέτουμε τα εξής «**Compound Ammounts**»:

- N-heptane = 1
- Toluene = 0
- Hydrogen = 0

και «**Stream conditions**»:

- Pressure = 1 atm
- Temperature = 65 °F
- Mass flow rate = 3600 kg/h
- Molar flow = 35.9274 kmol/h
- Volumetric flow = 5.24272 m³/h

7. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε έναν «**Heater**» (με ονομασία «**Heater**») με παραμέτρους:

- Inlet Stream = feed
- Outlet stream = heat_outlet
- Energy Stream = heat_power
- Calculation Type = Outlet Temperature
- Pressure drop = 0

- Efficiency = 100%
 - Outlet Temperature = 800 °F
8. Από την καρτέλα «**Reactors**» εισάγουμε έναν «**Conversion Reactor**» (με ονομασία «**C-Reactor**») με τις εξής παραμέτρους:
- Inlet stream = heat_outlet
 - Outlet Stream 1 = reactor_outlet
 - Outlet Stream 2 = waste
 - Energy stream = reactor_power
 - Calculation Mode = Isothermic
9. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε «**Cooler**» (με ονομασία «**Cooler**») τις εξής παραμέτρους:
- Inlet stream = reactor_outlet
 - Outlet Stream = cool_outlet
 - Energy stream = cool_power
 - Calculation Type = Outlet Temperature
 - Pressure drop = 0
 - Efficiency = 100%
 - Outlet Temperature = 65 °F
10. Από την καρτέλα «**Separators/Tanks**» εισάγουμε «**Gas-Liquid Separator**» (με ονομασία «**Separator**») με παραμέτρους:
- Inlet stream = cool_outlet
 - Vapor Stream = vapor_outlet
 - Light Liquid Stream = liquid_outlet
 - Outlet Pressure Calculation = Inlet Minimum
11. Εισάγουμε «**Master Property Table**» με τις ροές ρεύματος:
- feed,
 - heat_outlet,
 - reactor_outlet,
 - cool_outlet,

- vapor_outlet,
- liquid_outlet.

και με τις εξής παραμέτρους:

- Temperature,
- Pressure,
- Mass flow,
- Molar flow,
- Volumetric flow.

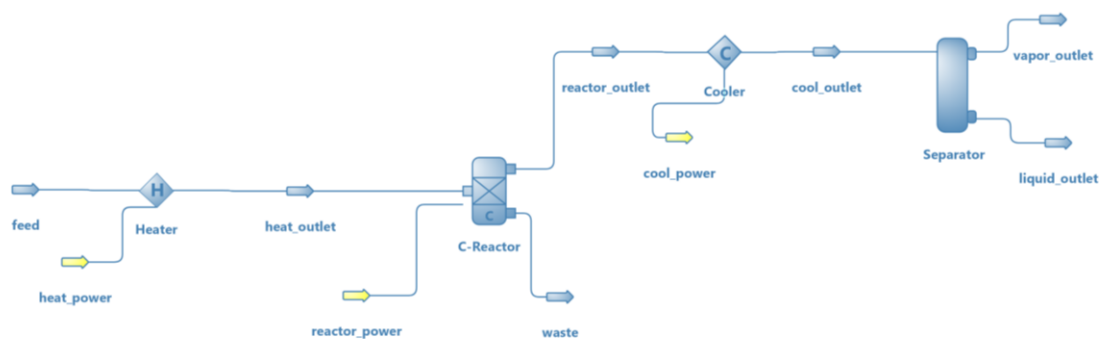
12. Εισάγουμε «Property Table» και θέτουμε στο **object**:

- C-Reactor,

με **Properties**:

- Toluene Formation: Extent,
- N-heptane: Conversion.

Τι παρατηρείτε;



Master Property Table						
Object	vapor_outlet	reactor_outlet	liquid_outlet	heat_outlet	feed	
Temperature	18,3333	426,667	18,3333	426,667	18,3333	C
Pressure	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	bar
Mass Flow	140,875	3600	3459,13	3600	3600	kg/h
Molar Flow	22,5022	57,4839	34,9817	35,9274	35,9274	kmol/h
Volumetric Flow	538,07	3294,47	4,87186	2051,58	5,24272	m3/h
Vapor Phase Molar Fraction	1	1	0	1	0	
Phases	Vapor Only	Vapor Only	Liquid Only	Vapor Only	Liquid Only	
Energy Flow	-1,45227	1014,22	-363,17	991,73	-373,598	kW

PROPERTIES TABLE		
C-Reactor	N-heptane: Conversion	15 %
C-Reactor	Toluene Formation: Extent	15 %

Σχήμα 1. Το διάγραμμα ροής της 4^{ης} εργαστηριακής άσκησης.

Αναφορές

[1] HYSYS:An Introduction to Chemical Engineering Simulation by Mohd. Kamaruddin Abd Hamid chapter-13 page no-146.