

Il problema dello *scale-up* nelle industrie di chimica fine: approccio calorimetrico e di simulazione

The scale-up problem in fine chemical industries: a calorimetric and simulation approach

Lucia Gigante¹, Angelo Lunghi¹, Simone Martinelli¹, Paolo Cardillo^{1(*)}, Luca Picello², Roberto Bortolaso², Marco Galvagni², Renato Rota³

¹ Stazione sperimentale per i Combustibili, V.le A. De Gasperi 3, 20097 San Donato Milanese (MI); (*) tel. +39 02 51604209; fax +39 02 514286; e-mail: cardillo@ssc.it

² Fabbrica Italiana Sintetici, Via Milano 26, 36041 Alte di Montecchio Maggiore (VI)

³ Politecnico di Milano, Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica G. Natta, Via Mancinelli 7, 20131 Milano

RIASSUNTO

Questo studio presenta una applicazione dell'uso combinato di tecniche calorimetriche e di metodi di simulazione che consente lo scale up di processi chimici sia in termini di sicurezza che economici. Il processo industriale scelto riguarda una reazione di acilazione di Friedel-Crafts. Grazie ad un numero limitato di prove con il calorimetro Mettler RC1 unitamente alla simulazione con il software BatchCAD è stato possibile produrre un idoneo modello cinetico che è stato verificato e validato dal confronto con prove adiabatiche e prove su impianto pilota. La simulazione in differenti condizioni industriali ha consentito di ottimizzare l'intero processo sia in termini di produttività che di sicurezza. In particolare, questa metodologia ha permesso di ridurre drasticamente la durata del processo e di evitare l'iniziale raffreddamento della massa di reazione.

PAROLE CHIAVE: scale-up, acilazione di Friedel-Crafts, calorimetria, simulazione, BatchCad

SUMMARY

The present study, on the optimisation of the scale-up of a Friedel Crafts acylation, joined together with experimental calorimetric techniques and simulation techniques.

The adopted methodology involved the execution of isothermal tests at different temperatures, using the reaction calorimeter RC1, in order to obtain the heat flow data versus time. These data were used to perform a kinetic study of the above reaction by using the simulation software BatchCad. The kinetic model was confirmed comparing the experimental data, obtained operating the desired reaction in adiabatic mode (Phi-Tec II), with the data obtained by simulation in the same conditions.

Several large scale production plant simulations were run in order to maximise the yield and minimise the thermal risks, varying both dosing time and reaction temperature. At the end of the study a high quality and safer reaction was obtained, saving time (and money) usually spent in traditional scale-up procedures.

KEYWORDS: scale-up, Friedel-Crafts acylation, calorimetry, simulation techniques, Batch-Cad