

Integrated Optimization of Cyclohexane Production via Benzene Hydrogenation Incorporating Advanced Separation and Extended Distillation to Enhance Product Purity with Heat Exchanger Integration to Improve Energy Efficiency

Muhammad Trisna Mi'raji Artha^{1*}, Wildan Aunur Rofiq¹, Muhammad Ihsan Aqilah¹, Ru'ullah Khalif Umar¹, Nayyara Alifah Ardelia¹

¹ *Department of Chemical Engineering, Faculty of engineering, Diponegoro University, Semarang 50275, Indonesia*

Table S1. Material streams, mass balance, and compositions of the basic unmodified of cyclohexane production

Properties\Stream	Benzene in	1	Hydrogen	2	3	Bottom Product
Vapour Fraction	0,00	0,00	1,00	0,37	1,00	0,00
Temperature [C]	25,00	26,41	25,00	25,19	300,00	300,00
Pressure [kPa]	101,32	3.000,00	3.000,00	3.000,00	3.000,00	3.000,00
Molar Flow [kgmole/h]	25.000,00	25.000,00	14.880,95	39.880,95	25.000,00	0,00
Mass Flow [kg/h]	1.952.750,02	1.952.750,02	30.000,00	1.982.750,02	1.982.759,95	0,00
Liquid Volume Flow [m3/h]	2.213,53	2.213,53	429,44	2.642,96	2.308,29	0,00
Heat Flow [kJ/h]	1.254.064.802,59	1.262.718.210,76	-22.143,75	1.262.696.067,02	1.835.555.433,36	0,00
Comp Mole Frac (Benzene)	1,00	1,00	0,00	0,63	0,80	0,80
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,00	0,00	1,00	0,37	0,00	0,00
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	0,20

Comp Mole Frac (H2O)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Properties\Stream	4	Purge	5	CW in	CW out	6
Vapour Fraction	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Temperature [C]	190,00	190,00	190,00	25,00	32,00	30,00
Pressure [kPa]	3.000,00	3.000,00	3.000,00	101,32	101,32	3.000,00
Molar Flow [kgmole/h]	25.000,00	0,00	25.000,00	1.151.931,86	1.151.931,86	25.000,00
Mass Flow [kg/h]	1.982.759,95	0,00	1.982.759,95	20.752.168,12	20.752.168,12	1.982.759,95
Liquid Volume Flow [m3/h]	2.308,29	0,00	2.308,29	20.794,05	20.794,05	2.308,29
Heat Flow [kJ/h]	883.453.816,42	0,00	883.453.816,42	-329.706.703.010,68	-329.080.110.402,05	256.861.207,79
Comp Mole Frac (Benzene)	0,80	0,81	0,80	0,00	0,00	0,80
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0,20	0,19	0,20	0,00	0,00	0,20
Comp Mole Frac (H2O)	0,00	0,00	0,00	1,00	1,00	0,00
Properties\Stream	Top	7	8			
Vapour Fraction	1,00	0,00	0,00			
Temperature [C]	221,92	252,89	30,00			
Pressure [kPa]	2.000,00	3.000,00	101,32			
Molar Flow [kgmole/h]	24.914,69	85,31	85,31			
Mass Flow [kg/h]	1.975.796,96	6.962,99	6.962,99			
Liquid Volume Flow [m3/h]	2.299,79	8,50	8,50			
Heat Flow [kJ/h]	1.544.134.399,88	-2.142.211,65	-5.816.130,69			
Comp Mole Frac (Benzene)	0,80	0,42	0,42			

Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,00	0,00	0,00			
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0,20	0,58	0,58			
Comp Mole Frac (H2O)	0,00	0,00	0,00			

Table S2. Energy streams of the basic unmodified process of cyclohexane production

Properties\Stream	Q P-01	Q R-01	Q CL-01	QC DT-01	QR DT-01	Q CL-02
Heat Flow [kJ/h]	8.653.408,17	572.859.435,36	952.101.616,94	4.890.273.569,46	6.175.191.481,59	3.673.919,04

Table S3. Material streams, mass balance, and compositions of the modified process of cyclohexane production

Properties\Stream	1	H2 Feed	2	4	5	R-01 Liq
Vapour Fraction	0,00	1,00	0,98	1,00	1,00	0,00
Temperature [C]	26,41	25,00	33,05	300,00	300,00	300,00
Pressure [kPa]	3.000,00	3.000,00	3.000,00	3.001,00	3.001,00	3.001,00
Molar Flow [kgmole/h]	320,06	14.880,95	15.347,06	15.347,06	14.476,27	0,00
Mass Flow [kg/h]	25.000,00	30.000,00	66.658,45	66.658,45	66.659,03	0,00
Liquid Volume Flow [m3/h]	28,34	429,44	472,32	472,32	452,74	0,00
Heat Flow [kJ/h]	16.165.896,82	-22.143,75	10.335.507,59	152.426.707,76	89.140.558,17	0,00
Comp Mole Frac (Benzene)	1,00	0,00	0,02	0,02	0,01	0,00
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,00	1,00	0,97	0,97	0,97	0,97
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0,00	0,00	0,01	0,01	0,03	0,03

Comp Mole Frac (H2O)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Properties\Stream	7	11	8	9	14	Purge 2
Vapour Fraction	0,97	1,00	0,00	0,00	0,00	1,00
Temperature [C]	30,00	30,00	30,00	30,00	30,00	30,00
Pressure [kPa]	3.000,00	3.000,00	3.000,00	3.000,00	3.000,00	3.000,00
Molar Flow [kgmole/h]	14.476,27	14.102,65	373,62	336,26	37,36	0,00
Mass Flow [kg/h]	66.659,03	35.935,72	30.723,31	27.650,98	3.072,33	0,00
Liquid Volume Flow [m3/h]	452,74	413,98	38,76	34,88	3,88	0,00
Heat Flow [kJ/h]	-51.428.521,67	-6.376.639,99	-45.051.881,68	-40.546.693,52	-4.505.188,17	0,00
Comp Mole Frac (Benzene)	0,01	0,00	0,15	0,15	0,15	0,00
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,97	0,99	0,01	0,01	0,01	0,99
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0,03	0,01	0,83	0,83	0,83	0,01
Comp Mole Frac (H2O)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Properties\Stream	13	16	15	Recycle Stream	CW in	CW out 1
Vapour Fraction	0,00	1,00	0,00	0,60	0,00	0,00
Temperature [C]	30,00	144,07	182,46	246,91	25,00	32,00
Pressure [kPa]	3.000,00	500,00	1.000,00	3.000,00	101,32	101,30
Molar Flow [kgmole/h]	336,26	297,90	75,72	146,05	158.475,41	158.475,41
Mass Flow [kg/h]	27.650,98	24.355,56	6.367,75	11.658,45	2.854.950,38	2.854.950,38

Liquid Volume Flow [m3/h]	34,88	30,62	8,14	14,55	2.860,71	2.860,71
Heat Flow [kJ/h]	-40.546.693,52	-20.272.111,76	-9.407.758,64	-5.808.245,48	-45.358.936.579,71	-45.272.734.046,65
Comp Mole Frac (Benzene)	0,15	0,19	0,01	0,29	0,00	0,00
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,01	0,02	0,00	0,03	0,00	0,00
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0,83	0,79	0,99	0,68	0,00	0,00
Comp Mole Frac (H2O)	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	1,00
Properties\Stream	6	3	21	CW out 2	19	Purge 3
Vapour Fraction	1,00	1,00	0,60	0,00	0,00	1,00
Temperature [C]	190,00	123,96	246,95	32,50	33,00	30,00
Pressure [kPa]	3.001,00	3.000,00	3.000,00	101,30	2.999,70	3.000,00
Molar Flow [kgmole/h]	14.476,27	15.347,06	145,79	158.475,41	227,83	0,00
Mass Flow [kg/h]	66.659,03	66.658,45	11.640,36	2.854.950,38	19.082,95	0,00
Liquid Volume Flow [m3/h]	452,74	472,32	14,52	2.860,71	24,24	0,00
Heat Flow [kJ/h]	34.774.011,40	64.702.054,37	-5.780.434,80	-45.266.535.556,84	-31.970.856,64	0,00
Comp Mole Frac (Benzene)	0,01	0,02	0,29	0,00	0,07	0,00
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,97	0,97	0,03	0,00	0,00	0,99
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0,03	0,01	0,68	0,00	0,93	0,01
Comp Mole Frac (H2O)	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00

Properties\Stream	10	Cyclohexane to storage	Purge 1	12	20	17
Vapour Fraction	0,00	0,00	1,00	0,00	1,00	0,00
Temperature [C]	30,00	34,41	30,00	30,00	142,82	182,00
Pressure [kPa]	3.000,00	101,32	3.000,00	3.000,00	500,00	1.000,00
Molar Flow [kgmole/h]	336,26	227,83	14.102,65	0,00	145,79	152,11
Mass Flow [kg/h]	27.650,98	19.082,95	35.935,72	0,00	11.640,36	12.715,20
Liquid Volume Flow [m3/h]	34,88	24,24	413,98	0,00	14,52	16,10
Heat Flow [kJ/h]	-40.546.693,52	-31.970.856,64	-6.376.639,99	0,00	-6.675.719,14	-16.364.608,19
Comp Mole Frac (Benzene)	0,15	0,07	0,00	0,15	0,29	0,09
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,01	0,00	0,99	0,01	0,03	0,00
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0,83	0,93	0,01	0,83	0,68	0,91
Comp Mole Frac (H2O)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Properties\Stream	18	Benzene in				
Vapour Fraction	0,00	0,00				
Temperature [C]	182,15	25,00				
Pressure [kPa]	1.000,00	101,32				
Molar Flow [kgmole/h]	227,83	320,06				
Mass Flow [kg/h]	19.082,95	25.000,00				
Liquid Volume Flow [m3/h]	24,24	28,34				
Heat Flow [kJ/h]	-25.772.366,83	16.055.111,93				

Comp Mole Frac (Benzene)	0,07	1,00				
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,00	0,00				
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0,93	0,00				
Comp Mole Frac (H2O)	0,00	0,00				

Table S4. Energy streams of the modified process of cyclohexane production

Properties\Stream	Q R-01	QC DT-01	QR DT-01	Q HT-01	Q C-01	QC DT-02	QR DT-02	Q P-01
Heat Flow [kJ/h]	-63.286.149,59	78.445.525,41	93.816.340,92	87.724.653,39	895.284,33	38.773.046,14	36.004.896,37	110.784,89