

21 maart 9.30

FVO Nr.

3115

Fabrieksvoorontwerp
Vakgroep Chemische Procestechologie

Onderwerp

Van methaan naar
methanol en hogere alcoholen
via het MAS-proces

Auteurs

Telefoon

Hollanders, B.	01829 - 3681
Serafini, E.A.	010 - 4184554
Smits, R.J.A.	070 - 3520588
Strien, R. van	01731 - 7443

Keywords

MAS-proces, methanolproductie, hogere alcoholen,
brandstofadditief, synthese gas

Datum opdracht : 13 september 1994

Datum verslag : 13 december 1994

**TU Delft**

Technische Universiteit Delft

Faculteit der Scheikundige Technologie en der Materiaalkunde

VOORWOORD

Wij danken dhr. B. de Maglie van Snamprogetti, dhr. P.E. Arend van Lurgi en dhr S.A. Posthuma van Shell voor hun hulp en het toesturen van informatie. Tevens willen wij dhr. S.T. Sie bedanken voor het beantwoorden van onze vragen en dhr J.Smit voor het kopiëren van het verslag.

SAMENVATTING

De interesse voor methanol als brandstofadditief is de laatste tijd toegenomen door met name de goede brandstofeigenschappen. Een andere reden is de grote hoeveelheid aardgas, welke in de bodem aanwezig is en kan dienen als grondstof voor de methanolproductie. Als brandstofadditief is methanol alleen niet voldoende, maar moet het vermengd zijn met hogere alcoholen. Het Italiaanse Snamprogetti heeft een proces ontwikkeld om dit mengsel van methanol met hogere alcoholen gelijktijdig te produceren.

In dit fabrieksvoorontwerp is dit zogenaamde MAS-proces (Metanolo più Alcoli Superiori) bekeken. Het MAS-proces gebruikt drie adiabatische 'fixed bed' reactoren in serie. De reactie vindt plaats bij 131 bar en in het temperatuurgebied van 350 tot 420 °C.

Er is achtereenvolgens gezocht naar een geschikte methode en naar goede condities om synthesesgas te maken en een effectieve methode voor koolstofdioxideverwijdering. Vervolgens zijn de MAS-reactoren gesimuleerd. De nadruk bij dit ontwerp ligt met name bij de daadwerkelijke MAS-synthese en in mindere mate bij de synthesesgasproductie. Het synthesesgas wordt gemaakt met het niet-catalytische Shell Gasification Proces (SGP). De koolstofdioxideverwijdering met het Giammarco-Vetrocoke proces is wel bekeken, maar niet uitgebreid doorgerekend.

Met het 8000 uur per jaar in bedrijf zijn van de fabriek is er een productiecapaciteit bereikt van 455 kiloton per jaar. Tevens is de verhouding van de verschillende alcoholen in overeenstemming met de specificatie. Het MAS-produkt mag slechts 0.1 gewichtsprocent water bevatten, wat na simulatie niet bereikt is. Ons produkt bevat 0.4 gewichtsprocent water.

De investeringskosten zijn berekend met behulp van de methode van Taylor en de methode van Zevnik-Buchanan. Voor de totale investeringen is dan volgens de methode van Taylor 540 miljoen gulden nodig. Tevens kunnen de produktiekosten van het proces bepaald worden. Deze zijn berekend volgens "het beste model" en zijn dan gelijk aan 615 miljoen gulden. Met een gestelde verkoopprijs van 1800 gulden per ton MAS-produkt is de winst van de fabriek gelijk aan 52 miljoen gulden op jaarbasis.

INHOUDSOPGAVE

1. Inleiding	- 1 -
2. Uitgangspunten van het ontwerp	- 3 -
3. Keuze van de processtructuur	- 6 -
3.1. Inleiding	- 6 -
3.2. Synthesegasproductie	- 6 -
3.2.1. Inleiding	- 6 -
3.2.2. Het 'Shell Gasification Process' (SGP)	- 6 -
3.3. Koolstofdioxide verwijdering	- 7 -
3.3.1. Inleiding	- 7 -
3.3.2. Het Warm Kaliumcarbonaat proces (WKC)	- 8 -
3.4. Het MAS proces (Metanolo più Alcoli Superiori)	- 9 -
3.5. Opwerkingssectie	- 10 -
3.6. Procesbeschrijving	- 10 -
Flowsheet	- 12 -
4. Ontwerp en berekeningen van de apparatuur	- 14 -
4.1. De SGP-reactor	- 14 -
4.1.1. CHEMCAD-simulatie van de SGP-reactor	- 14 -
4.1.2. Berekening van de SGP-reactor	- 14 -
4.2. De CO ₂ -verwijderingssectie	- 15 -
4.2.1. CHEMCAD-simulatie van de CO ₂ -verwijderingssectie	- 15 -
4.2.2. Berekening van de CO ₂ -verwijderingssectie	- 15 -
4.3. De MAS-reactoren	- 16 -
4.3.1. CHEMCAD-simulatie van de MAS-reactoren	- 16 -
4.3.2. Berekening van de MAS-reactoren	- 17 -
4.4. De opwerkingssectie	- 18 -
4.4.1. CHEMCAD-simulatie van de opwerkingssectie	- 18 -
4.5. De settler	- 19 -
4.5.1. CHEMCAD-simulatie van de settler	- 19 -
4.5.2. Berekening van de settler	- 19 -
4.6. De warmtewisselaars	- 21 -
4.6.1. Algemene beschouwing op de warmtewisselaars	- 21 -
4.6.2. Rekenvoorbeeld van een warmtewisselaars	- 22 -
4.7. Pompen en compressoren	- 23 -
5. Massa- en warmtebalans	- 24 -
6. Overzicht specificatie apparatuur	- 36 -
7. Procesregeling	- 48 -
8. Procesveiligheid	- 50 -
8.1. Inleiding	- 50 -
8.2. Brand- en explosiegevaar	- 50 -
8.3. Toxicologische aspecten	- 50 -
8.4. Corrosie	- 51 -
8.5 HAZOP analyse	- 51 -

9. Kosten	- 54 -
9.1. De investeringskosten	- 54 -
9.1.1. De methode van Zevnik-Buchanan	- 54 -
9.1.2. De methode van Taylor	- 55 -
9.2. De produktiekosten	- 56 -
9.3. De rentabiliteit	- 57 -
10. Conclusies en aanbevelingen	- 59 -
11. Symbolenlijst	- 60 -
12. Literatuurlijst	- 63 -

Bijlagen:

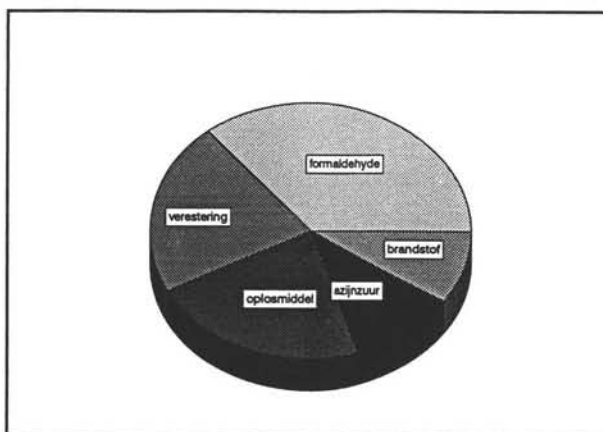
- B1. Stofeigenschappen.
- B2. Chemiekaarten.
- B3. Rekenmethode voor CO₂-verwijderingssectie.
- B4. Berekening van de MAS-reactoren.
 - B4.1. Pascal-programma.
 - B4.2. PSI-module.
- B5. Rekenmethode voor warmtewisselaars.
- B6. Rekenmethode voor reboilers.
- B7. Rekenmethode voor condensors.
- B8. Specificatieformulieren.
 - B8.1. Specificatieformulieren van warmtewisselaars.
 - B8.2. Specificatieformulieren van distillatietorens.
- B9. Apparaatstromen.
- B10. Berekening van de costliness factor.
- B11. Berekening van de kosten.
- B12. Rentabiliteit.

1. INLEIDING

Methanol is één van de belangrijkste chemicaliën in de industrie. In 1993 werd er ongeveer 24 megaton geproduceerd [1]. Deze hoeveelheid blijft nog jaarlijks stijgen. De belangrijkste toepassing in de chemische industrie is het gebruik als oplosmiddel en als tussenprodukt (intermediate). Tevens wordt het steeds vaker gebruikt in de energiesector.

Een belangrijke toepassing van methanol als tussenprodukt is bijvoorbeeld de synthese van formaldehyde.

Formaldehyde vormt het basismateriaal voor thermohardende kunststoffen als ureumformaldehyde (bindmiddel in spaanplaat) en fenolformaldehyde (bakeliet). Een tweede toepassing is voor het bereiden van esters. Hier worden dan weer polymeren van gemaakt (bijv. polyetheenteraftalaat). Een andere, interessante toepassing is de carboxylering van methanol naar azijnzuur. Dit wordt niet alleen gebruikt als voedingsmiddel, maar dient ook als grondstof voor veel andere chemicaliën [2,3].



Figuur 1.1: Verdeling van het methanolverbruik (1986)

In de energiesector bestaat om verschillende redenen een toenemende belangstelling voor methanol. Methanol wordt in combinatie met isobuteen gebruikt voor de productie van methylterbutylether (MTBE). MTBE heeft een hoog octaangetal en wordt aan benzine toegevoegd om betere ontbrandingseigenschappen te krijgen. Het dient als vervanging voor het schadelijke tetraethyllood. Ook is er interesse om methanol als brandstof te gaan gebruiken. Men verwacht, dat de toepassing van methanol als brandstof in de komende jaren sterk zal toenemen. Hiervoor zijn twee redenen denkbaar. Methanol heeft namelijk uitstekende brandstofeigenschappen. Tevens zijn er grote overschotten van de grondstof, aardgas, op afgelegen delen van de wereld.

Een andere mogelijkheid in de energiesector is het gebruik van methanol als toevoeging aan benzine vanwege het hoge octaangetal. Als er echter alleen methanol aan de benzine wordt toegevoegd, dan treedt er ontmenging van het mengsel op door de aanwezigheid van water in de benzine. Dit probleem kan opgelost worden door aan het methanol/benzine mengsel wat hogere alcoholen toe te voegen. Het is mogelijk om een mengsel te produceren, waarbij methanol samen met de benodigde hogere alcoholen bereid wordt [4].

De industriële methanolsynthese was het tweede grootschalige proces, dat met een katalysator bij hoge druk werd uitgevoerd. In 1923 had BASF een proces ontwikkeld, dat uitgevoerd werd bij een druk van 250 tot 300 bar en een temperatuur van 300 tot 400°C. Dit proces bleef 40 jaar onveranderd tot in 1966 ICI een koper/zinkoxide katalysator ging gebruiken. Deze katalysator heeft een hogere activiteit en selectiviteit (>99%) dan de oude en opereert bij mildere condities, namelijk temperatuur minder dan 300°C en druk tussen 50 en 100 bar.

Voor de toepassing als additief aan benzine moet er een mengsel van methanol met hogere alcoholen geproduceerd worden. De verschillende mogelijkheden staan in tabel 1.1 weergegeven.

Onze opdracht was het uitwerken van het MAS-proces.

Tabel 1.1 : De verschillende karakteristieken van verschillende industriële processen [4].

	MAS	Octamix	IFP	DOW
temperature [°C]	400	285	290	330
pressure [psi]	1900	1000	1200	3000
space velocity [hr ⁻¹]	7000	5000	4000	5000
H ₂ /CO ratio	1.5-2	0.5-1	2-2.5	0.9-1.2
CO-conversion per pass [%]	14	20	13	20
total alcohol selectivity [%]	90	95	75	85
C ₂ + alcohol selectivity [%]	30	33.2	32	42
productivity [kg.l ⁻¹ .hr ⁻¹]	0.234	0.46	0.15	0.2
product slate [wt%]				
methanol	70	66.2	57.5	49
ethanol	2	12.5	28.5	26
C ₃	3	4.9	7.1	13
C ₄	15	6.6	2.8	6
C ₅ +	10	9.7	2.5	5
catalyst life [hr]	8000	>8000	≈2000	<6000
catalyst cost [\$.ft ⁻³]	550	375	380	---
thermal efficiency [%]	56	60	54	52
net product cost [c.gal ⁻¹]	96	90	104	116

2. UITGANGSPUNTEN VAN HET ONTWERP

Het doel van deze FVO-opdracht is het doorrekenen van het MAS-proces van Snamprogetti S.p.A.

Het produkt van het MAS-proces kan omschreven worden als een mengsel van alcoholen, met hoofdcomponent methanol. Een dergelijk mengsel is bij uitstek geschikt als additief voor brandstof. Wanneer het mengsel als brandstofadditief wordt gebruikt, geldt dat er niet meer dan 0.1 gewichtsprocent water in het mengsel aanwezig mag zijn. Recent onderzoek heeft aangetoond, dat gebruik van het alcoholmengsel als additief uitstekend voldoet [5]. De vooruitzichten zijn, dat tegen het jaar 2000 de vraag naar deze alcoholen aanzienlijk gestegen zal zijn. Om deze reden zijn wij ervan overtuigd, dat de produkten van een middelgrote plant goed verkocht kunnen worden.

Er wordt gestreefd naar een produktie van 0.5 megaton alcoholmengsel per jaar. Uitgaande van een fabriek die jaarlijks 8000 uur on-stream is, betekent dit een produktie van ongeveer 1500 ton/dag. De beoogde samenstelling van het alcoholmengsel is weergegeven in tabel 2.1.

Tabel 2.1: De samenstelling van het alcoholmengsel.

	samenstelling [wt-%]	produktie [ton/dag]
Methanol	70	1050
Ethanol	2	30
n-Propanol	3	45
n-Butanol	15	225
C ₅ + alcohol	10	150

Voor het vereenvoudigen van de berekeningen is in het verdere ontwerp n-pentanol genomen in plaats van het gecompliceerde mengsel van C₅+alcoholen.

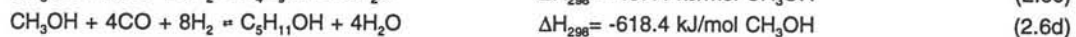
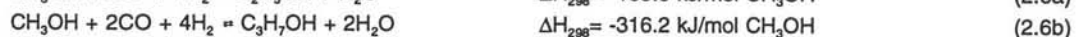
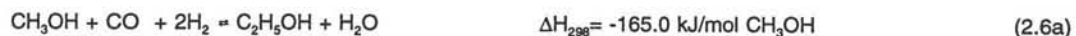
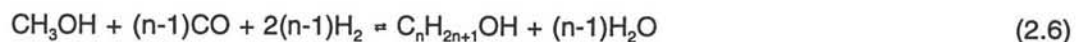
Er is aangenomen dat de voeding (aardgas) naar de synthese gas reactor bestaat uit 85% methaan en 15% stikstof. Het aardgas wordt aangeleverd op 7 bar. De partiële oxidatie van het natural gas wordt uitgevoerd met zuiver zuurstof, afkomstig van bijvoorbeeld het MOLTOX-proces [6].

De volgende reacties zijn van belang in het proces:

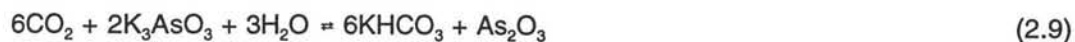
A) Synthese gas produktie [7].



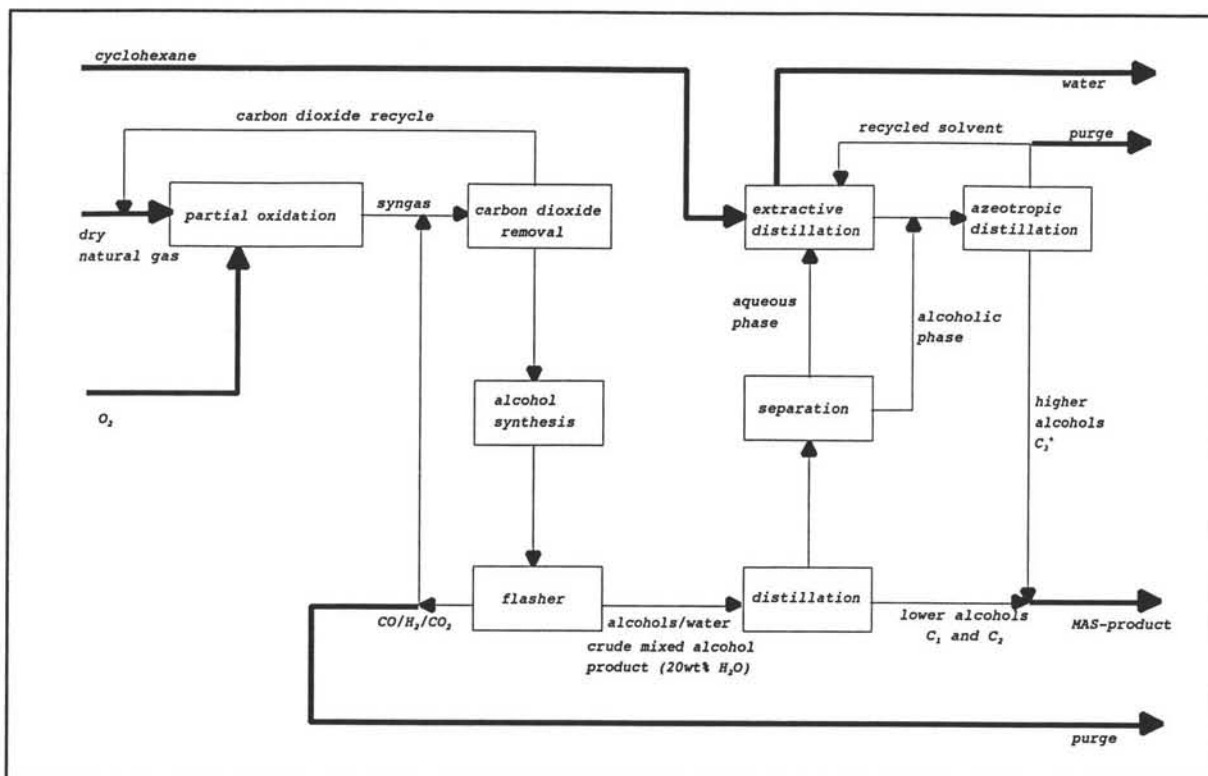
B) Alcohol productie [8].



C) Koolstofdioxide verwijdering [9].



De afvalstromen die het proces verlaten moeten behandeld worden. De uitgaande waterstroom moet naar een waterzuiveringsinstallatie om de verontreinigingen te verwijderen. De purgestroom bevat voornamelijk stikstof, koolstofmonoxide en waterstof. Deze stroom kan bijvoorbeeld door affakkelen worden behandeld. De gebruikte katalysator, kalium gedoteerd zink-chroom-oxide, heeft een levensduur van 8000 uur, zodat na één jaar 'on-stream' deze katalysator moet worden vervangen. De gebruikte katalysator wordt dan geregenereerd. Tenslotte is de stroom met het daarin opgeloste koolstofdioxide zeer corrosief, hiermee moet rekening worden gehouden bij de keuze van de constructiematerialen.



Figuur 2.1: Blokschema MAS-proces.

3. KEUZE VAN DE PROCESSTRUCTUUR

3.1. Inleiding

De opdracht was een bestaand proces (MAS) door te rekenen, waardoor de algemene opzet van het ontwerp vast lag. Er is uitgegaan van het in hoofdstuk 2 gegeven blokschema (figuur 2.1). Vervolgens is gezocht naar goede processen en condities voor de aparte onderdelen in het ontwerp. Er is voornamelijk gekeken naar een geschikte methode en condities voor de synthese-gasproductie en een goede methode voor de koolstofdioxideverwijdering. Voor het MAS proces hebben wij weinig tot geen keuzes, wat betreft de processtructuur moeten maken, omdat bijna alles in de literatuur beschreven stond. In de opwerkingssectie stonden we nog voor de keuze van het onder druk, dan wel atmosferisch bedrijven van de distillatiekolommen. Tenslotte is aan de hand van de flowsheet het proces uitvoerig besproken.

3.2. Synthesegasproductie

3.2.1. Inleiding

In de industrie wordt voor de productie van synthese gas gebruik gemaakt van een drietal typen processen, te weten steam reforming, autothermische reforming en partiële oxidatie.

In ons geval moet aardgas partieel geoxideerd worden. In de praktijk wordt voor de productie van synthese gas uit aardgas meestal gebruik gemaakt van steam reforming of autothermische reforming, terwijl de zwaardere aardoliefracties over het algemeen partieel geoxideerd worden. Een belangrijke reden hiervoor is dat bij partiële oxidatie gebruik gemaakt wordt van een vrijwel zuivere zuurstof stroom (>95%), wat een dure oxygen-plant vereist.

Partiële oxidatie kan zowel met als zonder katalysator worden uitgevoerd. Voor de partiële oxidatie van aardgas zijn een drietal geschikte processen gevonden. Dit zijn het ongekatalyseerde Shell Gasification Process (SGP) en het Texaco Gasification Process (TGP), en een nikkel gekatalyseerd proces [7]. Een belangrijk voordeel voor de flexibiliteit van de beide niet katalytische processen is, dat deze geschikt zijn voor zowel de lichte als de zware aardoliefracties.

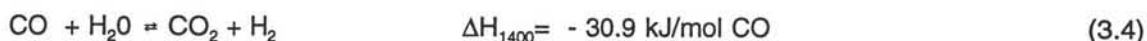
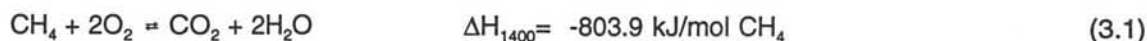
Het door ons gebruikte proces voor de synthese gas productie is het Shell Gasification Process.

3.2.2. Het 'Shell Gasification Process' (SGP)

SGP is begin jaren vijftig door het Koninklijk Shell Laboratorium te Amsterdam (KSLA) ontwikkeld. In 1956 kwam de eerste vergasser, waarbij gebruik gemaakt werd van een zware aardoliefractie als voeding, in bedrijf.

Het proces is zeer flexibel met betrekking tot de procesdruk (atmosferisch tot 60 bar) en de voeding. Hierdoor kan het geproduceerde synthese gas gebruikt worden voor veel vervolgproucessen, zoals de synthese van methanol, oxo-alcoholen, ammonia, en Fischer-Tropsch syntheses [13].

Er zijn standaard reactoren verkrijgbaar die een voedingscapaciteit hebben variërend van 100 tot 1000 ton per dag. Deze reactoren worden geleverd en gebouwd door Lurgi Öl-Gas-Chemie GmbH.



SGP is een volwaardig proces voor het produceren van synthese gas met minimale belasting van het milieu. Het proces reduceert de CO₂ uitstoot ten opzichte van de conventionele routes met 10-15%.

3.3. Koolstofdioxideverwijdering

3.3.1. Inleiding

In de procesindustrie zijn er een aantal methoden om CO₂ te verwijderen. Deze processen zijn eenvoudig in te delen in twee groepen, te weten fysische en chemische CO₂-verwijderingsprocessen.

Voorbeelden van fysische processen zijn Pressure Swing Absorptie (PSA) processen en membraan-processen.

PSA is een proces, dat op dit moment zeer sterk in opkomst is. Dit proces is gebaseerd op het verschil in de mate van absorptie bij verschillende drukken. Bij dit proces wordt gebruik gemaakt van twee kolommen, welke bij zeer verschillende drukken werken, zodat in de ene kolom het CO₂ wordt geabsorbeerd en in de andere kolom wordt gedesorbeerd. Een nadeel van dit proces is dat het een erg jong proces is in de industrie en vooral wordt toegepast bij kleinere processtromen. Dit is de reden, waarom wij niet voor dit proces gekozen hebben.

Membraan-processen voor gasscheiding worden ook nog niet zo veel in de industrie toegepast. Op laboratoriumschaal wordt er de laatste jaren enorm veel met membranen gewerkt, maar in de industrie zijn de toepassingen nog zeer beperkt. Waarschijnlijk is dit te wijten aan de onbetrouwbaarheid van de membranen. Tot op dit moment zijn de membranen nog erg gevoelig voor 'fouling'. Hieronder verstaan we scheuren, snelle slijtage en andere oorzaken, waardoor de semipermeabiliteit verloren gaat.

De keuze tussen een fysisch en chemisch CO₂ verwijderingsproces is dus niet erg moeilijk te maken. Vervolgens moet er gekozen worden tussen verschillende chemische processen.

De chemische processen zijn ook absorptieprocessen, maar hierbij is sprake van chemische absorptie aan een absorber. Het verschil tussen de chemische processen zit in de keuze van de absorber. Hierbij kan gekozen worden uit processen met aminen en met alkalische zouten. Uit economisch oogpunt, wat vooral te maken heeft met de energie voor de warmtewisselaars, is gekozen voor het goedkopere proces met alkalische zouten.

Het meest gebruikte en tevens door ons gekozen alkalische zout is kaliumcarbonaat.

3.3.2. Het Warm Kaliumcarbonaat Proces (WKC)

Het Warm Kaliumcarbonaat (WKC) proces is in de jaren vijftig door het United States Bureau of Mines ontwikkeld voor commerciële aardgas zuivering en bulk CO₂ en H₂S verwijdering uit verschillende gasmengsels. Het proces is ongeschikt voor gasmengsels die geen CO₂ bevatten, omdat het gevormde kaliumbisulfide dan moeilijk te regenereren is. In ons geval ontbreekt H₂S, zodat het proces alleen gebruikt wordt om het aanwezige CO₂ te verwijderen.

Het principe van het proces is als volgt. In een absorptiekolom wordt het CO₂ geabsorbeerd via een exotherme reactie. Vervolgens wordt in een stripkolom het aan het kaliumzout gebonden CO₂ via een endotherme reactie met stoom gestript.

In de loop der jaren is het WKC proces verbeterd door toevoegingen aan het absorptiemiddel. De opnamecapaciteit en de reactiesnelheid zijn hierdoor vergroot en de regeneratiewarmte is verlaagd. Wij hebben voor het Giammarco-Vetrocoke proces gekozen [9,10]. Bij dit proces worden de absorptie- en desorptiereacties geactiveerd met arseentrioxide (As₂O₃). De optredende reacties zijn als volgt:

Absorptie:



Desorptie:

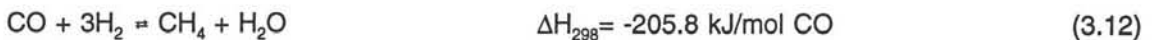
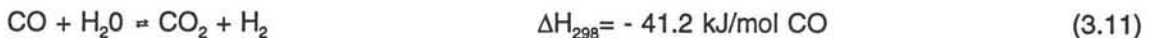
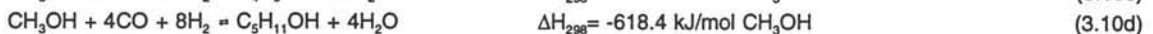
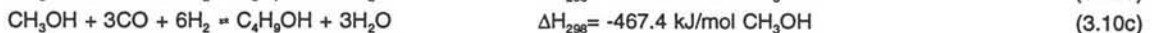
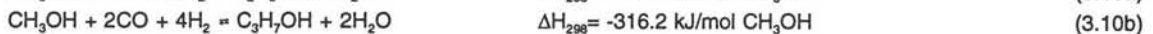
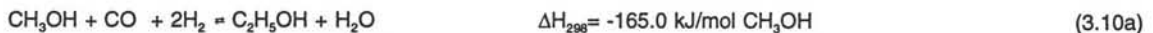
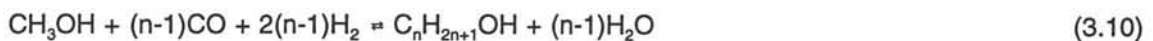
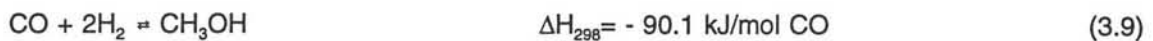


3.4. Het MAS proces (Metanolo più Alcoli Superiori)

Het is al geruime tijd bekend, dat door de keuze van een geschikte katalysator en procescondities het mogelijk is om een mengsel van hogere alcoholen met methanol te produceren uit synthese gas. In 1979 begon Snamprogetti aan een project ter ontwikkeling van de synthese van hogere alcoholen. [14].

Het Snamprogetti MAS-proces (Metanolo più Alcoli Superiori) gaat uit van 3 in serie geschakelde adiabatische fixed-bed-reactoren met tussenkoeling. De reacties vinden plaats bij een druk van 131 bar en een temperatuur van 400 °C over een met kalium gedoteerd chroom-zink-oxide katalysator.

Volgens Tronconi [8] vinden voornamelijk de volgende reacties plaats:



Het kinetische model is te beschrijven met de onderstaande reactiesnelheidsvergelijkingen:

$$r_1 = k_1 (p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2}^2 - p_{\text{CH}_3\text{OH}} / K_1) \quad (3.13)$$

$$r_2 = k_2 p_{\text{CH}_3\text{OH}} / (1 + K_W p_{\text{H}_2\text{O}}) \quad (3.14)$$

$$r_3 = k_3 (p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2\text{O}} - p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2} / K_3) \quad (3.15)$$

$$r_4 = k_4 p_{\text{H}_2} \quad (3.16)$$

Bij de gekozen procescondities gelden de volgende numerieke waarden voor constanten en parameters:

$$K_1 = 1.57 \cdot 10^{-5} \text{ Atm}^{-2}$$

$$K_3 = 14.8$$

$$k_1 = 4.3 \cdot 10^{-7} \text{ mol g}^{-1} \text{ h}^{-1} \text{ Atm}^{-3}$$

$$k_2 = 3.0 \cdot 10^{-3} \text{ mol g}^{-1} \text{ h}^{-1} \text{ Atm}^{-1}$$

$$k_3 = 1.3 \cdot 10^{-3} \text{ mol g}^{-1} \text{ h}^{-1} \text{ Atm}^{-2}$$

$$k_4 = 1.0 \cdot 10^{-5} \text{ mol g}^{-1} \text{ h}^{-1} \text{ Atm}^{-1}$$

$$K_W = 8.84 \text{ Atm}^{-1}$$

3.5. Opwerkingssectie

Een mogelijkheid voor het uitvoeren van de opwerking waarbij energie kan worden bespaard is de volgende. In de turbine wordt de druk afgelaten naar bijvoorbeeld 5 bar. Vervolgens wordt iedere distillatiekolom op een iets lagere druk bedreven dan de voorgaande. Op deze manier zijn er in de opwerkingssectie een minimaal aantal pompen nodig.

Toch hebben wij gekozen voor het atmosferisch bedrijven van de drie distillatiekolommen. Dit hield wel in dat wij de nodige pompen in de opwerkingssectie hebben moeten plaatsen. In alle drie de kolommen hebben we een drukval aangenomen van 0.007 bar per schotel.

De uiteindelijke produktstroom heeft een temperatuur van 76 °C en moet voor opslag eerst gekoeld worden. Dit kan bijvoorbeeld gedaan worden met behulp van de synthesesegasspui die een temperatuur heeft van -50 °C.

3.6. Procesbeschrijving

Zowel de zuurstof- (2) als de aardgasvoeding (3) worden op 7 bar aangeleverd en moeten opgewarmd worden, alvorens ze de synthesesegasreactor ingaan. De zuurstofstroom (2) wordt in H1 voorverwarmd tot 260 °C met het geproduceerde synthesesegas (8). De aardgasstroom (3) wordt samen met de CO₂ recycle (4) in H2 voorverwarmd tot 400 °C. Hierbij wordt gebruik gemaakt van het alcohol/syngas mengsel dat uit de eerste MAS-reactor (17) komt en dat wordt afgekoeld van 412 tot 370 °C. In de synthesesegasreactor worden de reactanten verder opgewarmd tot de reactietemperatuur van ± 1300 °C. Het geproduceerde synthesesegas (8) moet gekoeld worden tot 100 °C, alvorens het naar de CO₂-verwijderingssectie gaat. De vrijkomende warmte wordt zowel gebruikt om de zuurstofstroom op te warmen in H1 als om lage druk stoom te maken in H4.

De CO₂-verwijderingssectie bestaat uit twee kolommen (T11, T12). In de eerste kolom (T11) wordt het CO₂ gebonden aan heet kaliumcarbonaat (K₂CO₃), dat de kolom over de bodem verlaat (31). Schoon (CO₂ vrij) synthesesegas verlaat de kolom als topproduct (21). De met CO₂ verrijkte kaliumcarbonaatoplossing (31) gaat naar de tweede kolom (T12), waar met stoom de CO₂ van het kaliumcarbonaat wordt gestript. De topstroom (25) wordt partieel gecondenseerd, waarbij het gecondenseerde water (28) gedeeltelijk gerefluxed wordt en gedeeltelijk, na compressie (C14) en warmtewisseling (H13), aan de schone synthesesegasstroom (21) wordt toegevoegd. Het CO₂ (12) wordt na compressie gerecycled naar de aardgasstroom (3) en de schone kaliumcarbonaat oplossing (27) gaat weer terug naar de top van de eerste kolom.

Het schone synthesesegas (21) wordt vervolgens nog door een vat (V10) geleid om de eventueel aanwezige vloeistof eruit te halen, dit wordt terug gevoerd naar de top van de stripkolom (T12). Dit afscheiden van de vloeistof dient ter bescherming van de compressors (C9), die gekoppeld is aan de turbine (C26), en (C6) waarin gecompriemd wordt tot 131 bar. Aangezien dit een beveiliging is voor de compressors en er in onze simulatie geen vloeistof in deze synthesesegasstromen zit, is er geen vloeistofstroom (20) terug naar de top van T12. Vervolgens wordt het synthesesegas in H7 gekoeld tot 342 °C, waarna het de eerste MAS-reactor (R8) ingaat. De uitgaande alcohol/syngas stroom (17) wordt gebruikt voor het opwarmen van de aardgasstroom (6) in H2, waarna het de tweede MAS-reactor (R23) ingaat. Het alcohol/syngas mengsel uit deze tweede

MAS-reactor (38) wordt afgekoeld van 416 tot 366 °C in H24, waarna het de derde MAS-reactor (R25) ingaat.

De alcohol/syngas stroom uit deze laatste MAS-reactor (40) wordt door een turbine (C26), die gekoppeld is met compressor (C9) geleid, waarna in een condensor (H27, V28) het alcoholen/water mengsel (46) wordt gecondenseerd tot -50 °C en gescheiden van het ongereageerde synthesegas (45).

Voor het koelen tot -50 °C wordt gebruik gemaakt van een speciaal koelsysteem. Als koelmiddel is gekozen voor CH₃F, dat minder milieubelastend is dan bijvoorbeeld freon-12 (CCl₂F₂) en in ons geval net zo goed voldoet. Het koelsysteem is niet opgenomen in de berekeningen en de flowsheet, maar het principe is als volgt:

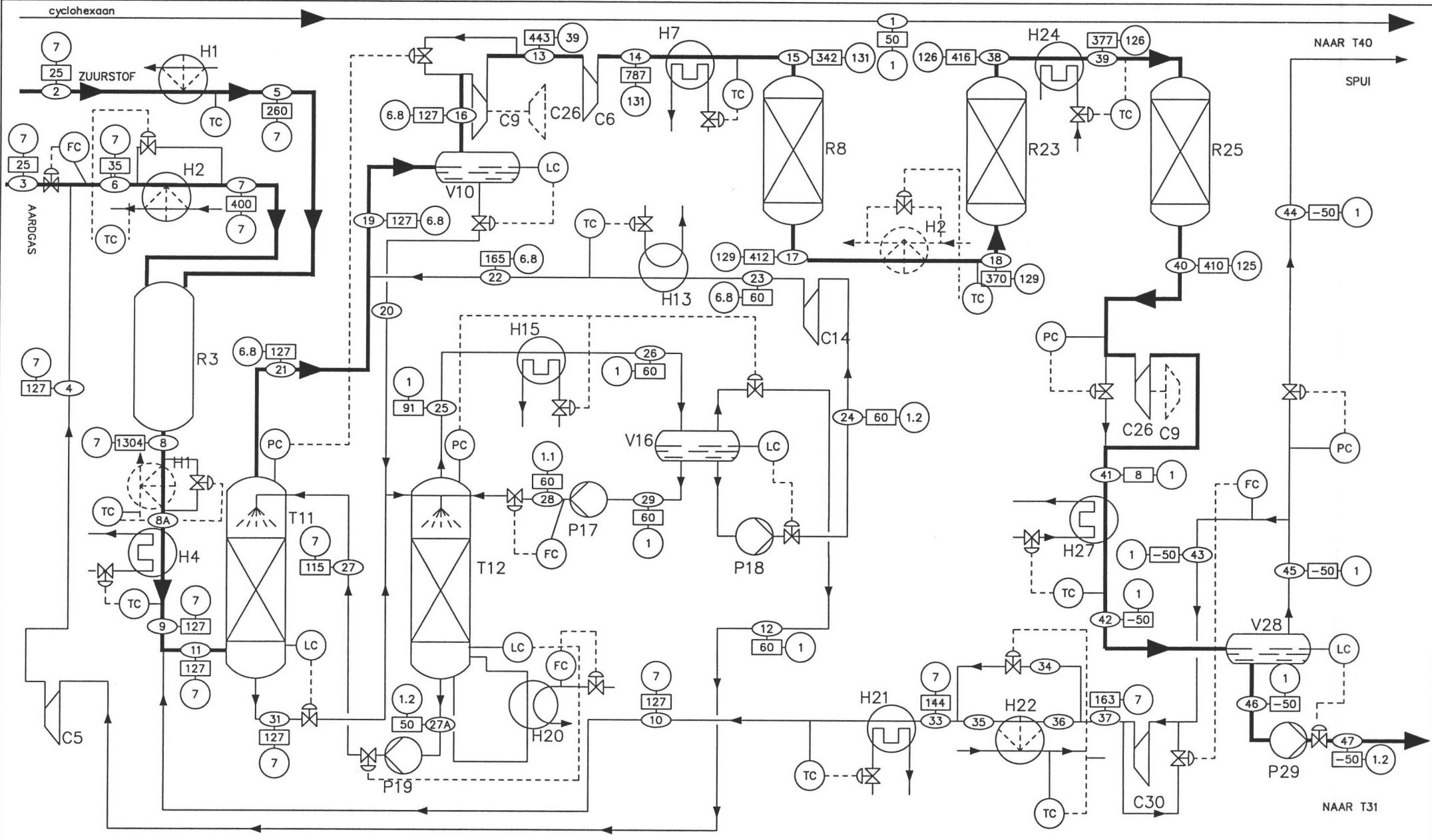
In de koeler (H27) wordt het koelmiddel, CH₃F, verdampt bij een druk van 2.5 bar en een temperatuur van -60.5 °C. Vervolgens wordt het koelmiddel gecompriemd tot een druk, waarbij het nog juist gas is, en een temperatuur van ongeveer 50 °C heeft. Bij deze druk en temperatuur wordt de stroom gecondenseerd en geëxpandeerd, zodat het koelsysteem gesloten is.

Een gedeelte van het synthesegas wordt gespuid (44), de rest (43) wordt gecompriemd tot 7 bar (C30) om vervolgens gebruikt te worden om het alcohol/water mengsel (47) op te warmen van -50 tot 67 °C in H22. Het synthesegas koelt hierbij van 163 tot 144 °C. Vervolgens wordt het synthesegas nog verder gekoeld tot 100 °C in H21 en omdat het synthesegas ook CO₂ bevat wordt deze stroom (10) gerecycled naar de CO₂-stripper (T11, T12).

Het alcohol/water mengsel (47) wordt met P29 uit het vat gepompt en in H22 opgewarmd van -50 tot 67 °C, waarna het de eerst distillatiekolom (T31) wordt ingeleid. Methanol en ethanol verlaten de kolom bij een druk van 1 bar over de top (54), terwijl het water en de C₃+alcoholen als bodemstroom (55) de kolom verlaten. De bodemstroom (55) wordt in H38 gekoeld van 93 tot 70 °C, waarna in een settler (V39) een water- (59) en een alcoholfase (58) van elkaar gescheiden worden.

De waterfase wordt extractief gedistilleerd met cyclohexaan in de tweede kolom (T40), waarbij bijna schoon water over de bodem gaat (68). Dit water bevat een kleine hoeveelheid cyclohexaan en wordt dus naar een waterzuiveringsinstallatie geleid. De topstroom bestaat uit C₃+alcoholen en cyclohexaan (65) en wordt opgemengd met de alcoholfase (58) uit de settler (V39). Deze opgemengde stroom (66) wordt in de derde kolom (T46) azeotropisch gedistilleerd. Cyclohexaan en water worden als topstroom (75) afgetapt, gedeeltelijk gespuid (76) en het resterende deel (69) wordt teruggevoerd naar de tweede kolom (T40). De bodemstroom (77) bestaande uit C₃+alcoholen en wat water worden gemengd met de topstroom van de eerste kolom (54) tot het uiteindelijke produkt (78).

De spuiromen (44, 76) zouden eventueel nog kunnen worden gebruikt als brandstof in een fornuis, maar worden afgefakkeld. De productstroom (78) moet gekoeld worden tot kamertemperatuur met oog op opslag en vervoer, hiervoor kan gebruik worden gemaakt van de koude spuiromen (44).



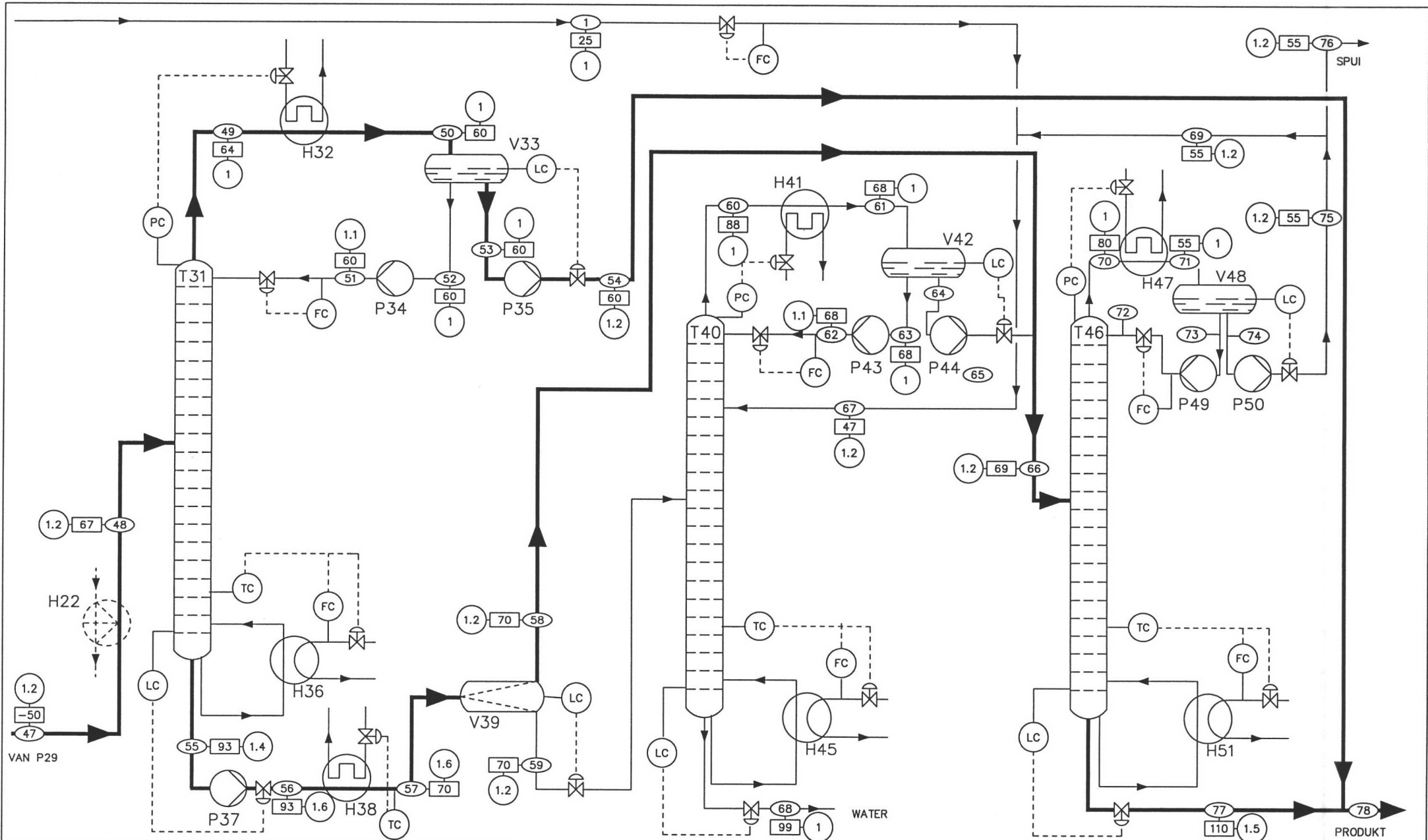
H 1	WARMTEWISSELAAR	T 11	CO2-ABSORBER	H 21	KOELER
H 2	WARMTEWISSELAAR	T 12	CO2-STRIPPER	H 22	WARMTEWISSELAAR
R 3	REAKTOR	H 13	VERWARMER	R 23	GEPAKT BED REAKTOR
H 4	KOELER	C 14	TURBINE	H 24	KOELER
C 5	TURBINE	H 15	KOELER	R 25	GEPAKT BED REAKTOR
C 6	COMPRESSOR	V 16	VLOEISTOF-GAS SCHEIDER	C 26	EXPANDER
H 7	KOELER	P 17	POMP	C 26	TURBINE
R 8	GEPAKT BED REAKTOR	P 18	POMP	H 27	KOELER
C 9	COMPRESSOR	P 19	POMP	V 28	VLOEISTOF-GAS SCHEIDER
V 10	VLOEISTOF-GAS SCHEIDER	H 20	VERWARMER	P 29	POMP
				C 30	TURBINE

Van methaan naar (hogere) alcoholen
via het MAS-proces

FVO 3115
december 1994

B. Hollanders R.J.A. Smits
E.A. Serafini R. van Strien

○ stroomnummer □ temp in C ⊙ abs. druk in bar (1)



T 31 METHANOLKOLOM
 H 32 CONDENSOR
 V 33 STABILIZER
 P 34 POMP
 P 35 POMP
 H 36 VERWARMER
 P 37 POMP
 H 38 KOELER
 V 39 LL SCHEIDER
 T 40 EXTRACTIEVE DEST

H 41 KOELER
 V 42 STABILIZER
 P 43 POMP
 P 44 POMP
 H 45 VERWARMER
 T 46 KOLOM
 H 47 KOELER
 V 48 STABILIZER
 P 49 POMP
 P 50 POMP

H 51 VERWARMER

Van methaan naar (hogere) alcoholen
 via het MAS-proces

B. Hollanders R.J.A. Smits
 E.A. Serafini R. van Strien

FVO 3115
 december 1994

○ stroomnummer □ temperatuur in C ● abs druk in bar (2)

4. ONTWERP EN BEREKENINGEN VAN DE APPARATUUR

4.1. De SGP-reactor

4.1.1. CHEMCAD-simulatie van de SGP-reactor

De SGP-reactor bestaat in principe uit twee onderdelen, een brander en een lege reactormantel. In de brander ontvlamt het binnenkomende mengsel aardgas en zuurstof. In de reactormantel stelt zich vervolgens een thermodynamisch evenwicht in. De binnenkomende temperatuur van aardgas is 400 °C, van zuurstof 260 °C. Bij de onsteken in de brander wordt de temperatuur ongeveer 1100 °C en vervolgens warmt de stroom zich bij het instellen van het evenwicht nog op tot ongeveer 1300 °C.

Dit is in CHEMCAD niet in één unit te simuleren. Aangezien in de reactor thermodynamisch evenwicht geldt, is als simulatieunit GIBS, een Gibbsreactor gekozen, welke gebruik maakt van een model dat de Gibbs vrije energie minimaliseert. CHEMCAD neemt het ontbranden van zuurstof en aardgas echter niet mee in deze unit. Zodoende zijn de beide voedingsstromen eerst gemengd, hiervoor is de unit MIXE, een mixer, gekozen. Vervolgens is deze mengstroom opgewarmd tot 1100 °C in een oven, unit FIRE.

4.1.2. Berekening van de SGP-reactor

Voor de berekening is uitgegaan van een aantal aannames, die voornamelijk zijn gebaseerd op een gesprek met prof. Sie. Dit is te wijten aan de zeer beperkte informatie die beschikbaar is.

Voor de bepaling van het reactorvolume wordt een verblijftijd van 10 seconden in de reactor aangenomen. Tevens wordt gesteld dat het volume van de brander, welke zich bovenin de reactor bevindt, verwaarloosbaar is.

$$\tau = \frac{V}{\phi_V} \quad (4.1)$$

Hierin is τ , de verblijftijd in de reactor gelijk aan 10 seconden en ϕ_V , het volumedebiet door de reactor gelijk aan 13.78 m³·s⁻¹. Voor het reactorvolume geldt nu:

$$V = \tau \cdot \phi_V = 10 \cdot 13.78 = 137.8 \text{ m}^3 \quad (4.2)$$

Voor het bepalen van de hoogte en de diameter van de reactor is een aanname gemaakt met betrekking tot de lengte/diameter verhouding. Hiervoor is een waarde van 5 genomen.

$$V = \frac{1}{4} \cdot \pi \cdot D^2 \cdot H \quad (4.3)$$

$$H = 5 \cdot D \quad (4.4)$$

$$V = \frac{5}{4} \cdot \pi \cdot D^3 \quad \text{zodat: } D = \left(\frac{137.8}{\frac{5}{4} \cdot \pi} \right)^{\frac{1}{3}} = 3.27 \text{ m} \quad (4.5)$$

De geometrie van de reactor is als volgt: diameter = 3.27 m
hoogte = 16.37 m

4.2. De CO₂-verwijderingssectie

4.2.1. CHEMCAD-simulatie van de CO₂-verwijderingssectie

De verwijdering van het in het synthesegas aanwezige CO₂ wordt gedaan met het Giammarco-Vetrocoke proces. Volgens dit proces bestaat de verwijderingssectie uit twee torens, een absorptietoren en een stripper. Als absorber is gebruik gemaakt van warm kaliumcarbonaat. Met CHEMCAD bleek dit proces niet eenvoudig te simuleren. Uit de literatuur bleek dat het aanwezige CO₂ bijna volledig te verwijderen was uit de betreffende stroom. Om de bovenstaande reden en omdat deze sectie door ons van minder belang werd gevonden ten opzichte van de synthesegas- en MAS produktie, is deze sectie in CHEMCAD in eerste instantie niet gesimuleerd, maar door middel van twee componentenseparatoren (CSEP) is de doorgaande stroom gedefinieerd. De eerste componentenseparator scheidt van de ingaande stroom alle CO₂ af, waarna deze CO₂-stroom met de aardgasvoeding wordt opgemengd. De tweede componentenseparator scheidt water af van de doorgaande stroom om accumulatie te voorkomen.

Achteraf is alsnog geprobeerd de CO₂-verwijderingssectie te simuleren, maar dit bleek niet te lukken binnen de resterende tijd.

4.2.2. Berekening van de CO₂-verwijderingssectie

Voor de berekening van deze sectie dienen de absorptiekolom en de stripper als gepakte kolommen uitgerekend te worden. De hiervoor gebruikte methode is beschreven in bijlage B3.

De belangrijkste berekende en afgelezen waarden zijn in de onderstaande tabel weergegeven.

Tabel 4.1 : Resultaten van de berekening van de CO₂-verwijderingssectie

grootheid		absorptietoren	stripper
K ₄		9	1
K _{4, at flooding}		10	6
K ₃		1	1
ψ _h		78	78
φ _h		0.15	0.05
beddiameter	[m]	8.1	7.1
bedhoogte	[m]	70	75

Voor de berekening is de diffusiecoëfficiënt van de gasstroom gesteld op $2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ en van de vloeistofstroom op $2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Het aflezen van de figuren voor het verkrijgen van de waarden voor K₄, K₃, ψ_h en φ_h is gedaan na extrapoleren van de lijnen. De verkregen waarden vallen buiten het bereik van de figuren, waardoor fouten niet uitgesloten zijn. Aan de hand van de bedhoogte en beddiameter kan de dimensie van de kolom afgeschat worden.

Voor de absorptiekolom zijn de dimensies: hoogte = 80 m.
diam. = 8.1 m.

De dimensies voor de stripper zijn: hoogte = 85 m.
diam. = 7.1 m.

4.3. De MAS-reactoren

4.3.1. CHEMCAD-simulatie van de MAS-reactoren

De synthese van de alcoholen volgens het MAS-proces vindt plaats in drie in serie werkende fixed bed reactoren. Deze reactoren worden niet door CHEMCAD gegenereerd. Als oplossing voor dit probleem hebben wij voor een stoichiometrische reactor (STOI) gekozen. Met behulp van een Pascal-programma (bijlage B4.1), een Psi-module (bijlage B4.2) en een spreadsheet-programma (Quattro), zijn de stoichiometrie en de verblijftijd berekend. Tevens is de drukval als gevolg van de verandering van het aantal moleculen tijdens de reactie bepaald.

Voor de simulatie is allereerst gebruik gemaakt van één reactor met een conversie van 14% ten opzichte van koolstofmonoxide. Later is deze ene reactor vervangen door het werkelijke aantal van drie reactoren.

Tabel 4.2 : De stoichiometrie en de genormeerde stoichiometrie in de MAS-reactoren

component	stoichio	genorm.	component	stoichio	genorm.
koolstofmonoxide	-2216	-1.000	zuurstof	--	--
waterstof	-3422	-1.544	methanol	1126	0.508
koolstofdioxide	346	0.156	ethanol	14	0.006
water	193	0.087	propanol	20	0.009
methaan	--	--	butanol	102	0.046
stikstof	--	--	pentanol	68	0.031

4.3.2. Berekening van de MAS-reactoren

In eerste instantie is voor de berekeningen gebruik gemaakt van één reactor met een conversie van 14% ten opzichte van koolstofmonoxide. In de literatuur is gevonden dat het proces in werkelijkheid gebruik maakt van 3 reactoren [14]. Hierbij hebben wij aangenomen dat alle reactoren hetzelfde volume zullen hebben.

Aan de hand van de bekende 'gas hourly space velocity' (GHSV) [4], is het reactorvolume berekend.

$$GHSV = \frac{\text{volumedebiet van het gas}}{\text{reactorvolume}} = \frac{1}{\tau} = 7000 \text{ h}^{-1} \quad [4] \quad (4.6)$$

Het volumedebiet van het gas (ϕ_v) door de reactor is gelijk aan $24122.2 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$.

$$V = \frac{\phi_v}{GHSV} = \frac{24122.2}{7000} = 3.45 \text{ m}^3 \quad (4.7)$$

De bovenstaande berekening geldt voor 1 van de 3 reactoren. Het berekende volume is het vrije reactorvolume.

Met behulp van het Pascal-programma (bijlage B4.1), de Psi-module (bijlage B4.2) en het spreadsheet-programma (Quattro) is de verblijftijd uitgerekend met de aanname dat er 1 kg katalysator aanwezig was. Voor de verblijftijd wordt 77.2 h gevonden. In de werkelijke reactoren is deze gelijk aan $77.2/3 = 25.7 \text{ h}$ per reactor.

De werkelijke verblijftijd wordt berekend aan de hand van de bekende GHSV.

$$GHSV = \frac{1}{\tau} = 7000 \text{ h}^{-1} \quad \text{dus:} \quad \tau = 3600 \cdot \frac{1}{7000} = 0.514 \text{ s} \quad (4.8)$$

Vervolgens kan de hoeveelheid katalysator berekend worden.

Wanneer 1 kg katalysator wordt gebruikt, geldt voor de verblijftijd: $\tau = 92520$ s. Om de verblijftijd te verkleinen tot $\tau = 0.514$ s, dient de hoeveelheid katalysator vergroot te worden. De hoeveelheid katalysator die hiervoor nodig is, bedraagt:

$$\frac{92520}{0.524} = 176564 \approx 180 \text{ ton katalysator} \quad (4.9)$$

Met het gegeven dat de dichtheid van de katalysator (ρ) $1.46 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ bedraagt [8], kan het katalysatorvolume berekend worden.

$$\text{katalysatorvolume} = \frac{\text{hoeveelheid kat.}}{\text{dichtheid kat.}} = 123288 \text{ l} \approx 123 \text{ m}^3 \quad (4.10)$$

Het totale reactorvolume komt nu dus op $3.45 + 123 \approx 125 \text{ m}^3$. Het berekende vrije volume, 3.45, is te klein ten opzichte van het katalysatorvolume, maar naar ons idee is voor beide volumina geen rekenfout gemaakt.

Voor het bepalen van de hoogte en de diameter van de reactor is een aanname gemaakt met betrekking tot de lengte/diameter verhouding. Hiervoor is een waarde van 5 genomen.

$$V = \frac{1}{4} \cdot \pi \cdot D^2 \cdot H \quad (4.11)$$

$$H = 5 \cdot D \quad (4.12)$$

$$V = \frac{5}{4} \cdot \pi \cdot D^3 \quad \text{zodat: } D = \left(\frac{125}{\frac{5}{4} \cdot \pi} \right)^{\frac{1}{3}} = 3.17 \text{ m} \quad (4.13)$$

De geometrie van de reactoren is als volgt: diameter = 3.17 m
hoogte = 15.85 m

4.4. De opwerkingssectie

4.4.1. CHEMCAD-simulatie van de opwerkingssectie

De opwerkingssectie bestaat uit een drietal distillatietorens. Het simuleren van de

distillatietorens wordt in eerste instantie gedaan met behulp van 'shortcut' berekeningen. Hiervoor wordt in CHEMCAD de unit SHOR gebruikt. Deze manier van berekenen is enkel geschikt voor het maken van een schatting. Vervolgens dienen de torens op een meer nauwkeurige manier doorgerekend worden. Hiervoor is bij alle torens gebruik gemaakt van de unit SCDS in plaats van de gebruikelijke unit TOWR. Dit is gedaan omdat over het algemeen de SCDS unit iets krachtiger blijkt te zijn.

Voor het berekenen van de eerste toren leverde de werkwijze zoals beschreven in de handleiding [28] weinig problemen op. De shortcut-benadering zorgde voor een goede schatting van de in te vullen parameters.

Het berekenen van de tweede en derde destillatietoren leverde veel meer problemen. Vooral door het grote aantal azeotropen tussen de aanwezige stoffen zorgde ervoor dat de meeste thermodynamische modellen de simulatie niet aankonden. Tevens bleken de schattingen bepaald aan de hand van de 'shortcut' berekeningen niet goed, omdat de 'shortcut' methode geen rekening houdt met de azeotropen. Uiteindelijk is gekozen voor een combinatie van NRTL, voor de tweede toren en UNIFAC, voor de derde toren als thermodynamisch model. Tussen toren twee en drie loopt een continue recyclestroom met hoofdzakelijk cyclohexaan. Het sluiten van deze stroom gaat niet in één keer. Waarschijnlijk is dit te wijten aan het grote aantal azeotropen, waardoor het torenprofiel dusdanig gewijzigd wordt, dat de torens niet meer convergeren.

Als oplossing voor het sluiten van de recyclestroom is gebruik gemaakt van een tijdelijke componentenseperator (CSEP), waardoor het mogelijk wordt om steeds een kleine hoeveelheid van één component toe te voegen. Op deze manier verandert het torenprofiel veel geleidelijker, zodat de torens wel blijven convergeren. Uiteindelijk is op deze manier de hele opwerkingssectie uitgerekend en de componentenseperator uit het systeem verwijderd.

4.5. De settler

4.5.1. CHEMCAD-simulatie van de settler

Aangezien CHEMCAD geen unit heeft die een settler kan simuleren, is ook hier voor een componentenseperator (CSEP) gekozen. De fracties welke in de water- dan wel alcoholfase zitten, zijn als splitfracties in deze componentenseperator ingevoerd.

4.5.2. Berekening van de settler

De splitfracties die in CHEMCAD zijn ingevoerd zijn bepaald met behulp van de Solubility Data Series [11]. Alleen voor propanol zijn de waarden in deze serie gevonden. De overige waarden zijn aan de hand van deze gegevens geschat.

Tabel 4.3 : In CHEMCAD ingevoerde splitfracties

component	H ₂ O	MeOH	EtOH	PrOH	BuOH	PeOH
fractie in alcoholfase	0.05	0.20	0.30	0.60	0.95	0.98

De fracties in de bovenstaande tabel zijn zo gekozen, dat van de totale inkomende hoeveelheid methanol 20 mol% de settler verlaat in de alcoholfase en 80 mol% in de waterfase.

De settler is berekend aan de hand van de methode beschreven in Coulson & Richardson [24]. De volgende gegevens van de ingaande stroom van de settler zijn nodig om die door te rekenen.

$$\begin{array}{ll} \phi_{alc}=4.37 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1} & \phi_w=2.96 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1} \\ \rho_{alc}=775 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3} & \rho_w=949 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3} \\ \eta_{alc}=8.87\cdot 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s} & \eta_w=4.19\cdot 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s} \end{array}$$

Als disperse fase wordt de waterfase gekozen. De grootte van de druppeldiameter van de disperse fase wordt op 150 μm verondersteld. Met deze aannamens kan de snelheid van de druppel van de disperse fase bepaald worden.

$$u_d = \frac{d_d^2 \cdot g \cdot (\rho_w - \rho_{alc})}{18\eta_{alc}} = 2.4 \frac{\text{mm}}{\text{s}} \quad (4.14)$$

Vervolgens is het volumedebiet bepaald.

$$L_c = \frac{\phi_{alc}}{\rho_{alc}} = 5.6\cdot 10^{-3} \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \quad (4.15)$$

Omdat de snelheid van de druppels in de continue fase niet groter mag zijn dan de snelheid van de druppels in de disperse fase, is uit de twee bovenstaande formules het oppervlak van het interface berekend.

$$A_i = \frac{L_c}{u_d} = 2.3 \text{ m}^2 \quad (4.16)$$

Aangezien de doorzet redelijk groot is, is gekozen voor een horizontale, cilindrische settler met een lengte/diameter verhouding van 5. Voor de settler wordt vervolgens de volgende geometrie gevonden.

$$\begin{array}{ll} w=0.66 \text{ m} & \text{Volume}=1.39 \text{ m}^3 \\ z_1=0.60 \text{ m} & \text{Lengte}=3.53 \text{ m} \\ z_2=0.58 \text{ m} & \text{Diameter}=0.71 \text{ m} \\ z_3=0.48 \text{ m} & \end{array}$$

Tenslotte moet er nog gecontroleerd worden, of de aangenomen druppelgrootte van de disperse fase wel toegestaan is.

$$u_c = \frac{\phi_w}{\rho_w \cdot A_j} = 1.3 \frac{mm}{s} \quad (4.17)$$

$$d_d = \sqrt{\frac{u_d \cdot 18 \cdot \eta_{alc}}{g \cdot (\rho_w - \rho_{alc})}} = 112 \mu m \quad (4.18)$$

Dit is ruim beneden de aangenomen 150 μm .

4.6. De warmtewisselaars

4.6.1. Algemene beschouwing op de warmtewisselaars

Voor het uitrekenen van de warmtewisselaars is gebruik gemaakt van de methode van Kern, zoals beschreven in Coulson & Richardson [24]. De gebruikte vergelijkingen staan in bijlage B5. De methode voor uitrekenen van reboilers en condensors is ook uit Coulson & Richardson [24] gehaald. Deze vergelijkingen zijn in respectievelijk bijlage B6 en B7 samengevat.

Aangezien de meeste stromen groot zijn, moet er in de meeste warmtewisselaars gebruik worden gemaakt van buizen met de maximaal toegestane diameter (nl. 50 mm). Tevens is er vaak voor een 'floating head' uitvoering gekozen, omdat die de grootste 'bundle clearance' toestaat.

Er is van uitgegaan dat het koelwater in koelers van 20 tot 40 °C wordt opgewarmd, zodat het koelwater zonder problemen geloosd kan worden. De stoom voor de reboilers komt binnen op 3 bar met een temperatuur van 190 °C en verlaat het apparaat nadat het gecondenseerd is bij 133.5 °C, met uitzondering van reboiler H20. Hier wordt gebruik gemaakt van middendruk stoom, dat binnenkomt op 10 bar met een temperatuur van 220 °C en het apparaat verlaat na condensatie bij 180 °C. Aangezien vrijwel alle stromen in het proces corrosief zijn, is bij het uitrekenen van de warmtewisselaars gebruik gemaakt van roestvrij staal, met een k_w gelijk aan 16.

Warmtewisselaar H2, die het aardgas voorverwarmd en het reactiemengsel afkoelt tussen de eerste en tweede MAS-reactor, wordt berekend op de eindtemperatuur van het reactiemengsel en geregeld op de hoeveelheid gebruikt aardgas. Deze regeling wordt toegepast omdat het reactiemengsel aan de ingang van de tweede MAS-reactor een bepaalde temperatuur vereist. De eindtemperatuur van het aardgas tolereert meer fluctuaties, aangezien deze stroom nog veel verder wordt opgewarmd in de synthesesegareactor.

Bij het ontwerpen van H4, waar lage druk stoom wordt geproduceerd, kan de synthesesegastroom slechts gekoeld worden tot 150 °C. Hier is te laat achter gekomen, zodat dit niet in het ontwerp is meegenomen. Er moet een extra koeler geplaatst worden na H4, die de

synthesegasstroom van 150 naar 127 °C brengt.

De partiële condensatie van het alcohol/syngas-mengsel verloopt tot -50°C [8]. Dit is met water niet haalbaar en vereist een ander soort koelmiddel. Het door ons gekozen koelmiddel is CH₃F, dat bij een druk van 2.5 bar wordt verdampt bij een temperatuur van -60.5 °C. Er is voor CH₃F gekozen als koelmiddel, aangezien deze stof minder milieubelastend is dan de meeste andere halogeenhoudende koelmiddelen. Bij de partiële condensatie van het mengsel gaan er geen lichte gassen, zoals syngas, met het product mee. Dat betekent dat de opwerkingssectie geen hinder meer ondervindt van deze lichte gassen. Aangezien er maar een klein gedeelte van de stroom (9 %-wt) condenseert, is de condensor als koeler uitgerekend. Bij het berekenen van de totaal uitgewisselde energie is wel rekening gehouden met de condensatiewarmte.

4.6.2. Rekenvoorbeeld van een warmtewisselaar

Het dimensioneren van de warmtewisselaars wordt geïllustreerd met de berekeningen voor H2. Deze warmtewisselaar warmt de aardgasstroom op van 35 (T₁) tot 400 °C (T₂) en koelt het alcohol/syngas-mengsel van 412 (t₁) tot 129 °C (t₂). Invullen van deze temperaturen in de formules B5.1 tot en met B5.5 geeft F_t=1 en $\Delta T_{lm} = \Delta T_m = 98$ °C.

De grootte van de stromen is 26.01 en 206.96 kg·s⁻¹ voor respectievelijk het aardgas en het alcohol/syngas-mengsel. Gezien de hogere druk van het alcohol/syngas-mengsel, 129 bar tegen 7 voor het aardgas, wordt deze stroom door de pijpen geleid. De hoeveelheid warmte die moet worden afgegeven door het alcohol/syngas-mengsel, en dus opgenomen door het aardgas, wordt met CHEMCAD berekend.

Voor de warmteoverdrachtscoëfficiënt wordt een beginschatting uit de literatuur [24] verkregen, waarmee een schatting voor het totaal uitwisselend oppervlak wordt berekend. Vervolgens wordt met de methode beschreven in bijlage B5 een nieuwe schatting voor U gevonden. Het bovenstaande wordt herhaald totdat U een constante waarde heeft bereikt, deze eindwaarde is 157 W·m⁻²·K⁻¹. Voor het benodigde warmtewisselend oppervlak wordt dan gevonden: A=1301 m².

Er is gekozen voor een uitvoering met vaste pijpplaten, met de volgende numerieke waarden voor d_o=38 mm, δ=2.6 mm, p_i=1.5·d_o en L=4.88 m volgt dan voor het aantal buizen N_t=2256 en voor de bundeldiameter D_b=2.487 m. Deze bundeldiameter is echter onacceptabel groot. Om niet met zulke grote apparaten te werken, worden de stromen opgesplitst over meerdere parallel opererende warmtewisselaars. Het doorrekenen van deze units verloopt zoals hierboven beschreven. De uitgewisselde hoeveelheid warmte en de grootte van de stromen wordt verkregen door de oorspronkelijke stromen te delen door het aantal warmtewisselaars. Het aantal gebruikte warmtewisselaars wordt telkens met één opgevoerd totdat een realistische dimensionering van de apparaten wordt verkregen.

Tabel 4.4 : Bepalende grootheden bij verschillend aantal parallel geschakelde warmtewisselaars

aantal parallel	A [m ²]	N _i [-]	D _b [m]
1	1301	2256	2.487
2	650	1128	1.838
3	434	752	1.540
4	325	564	1.358

De bundeldiameter bij vier parallele warmtewisselaars valt nog steeds buiten de figuur 12.10 van literatuur [24], daar de overdimensionering echter maar 15 cm bedraagt is deze uitvoering toch geaccepteerd. Bij deze bundeldiameter en met de gebruikte vaste pijpplaten volgt uit figuur 12.10 een 'bundle clearance', BC van 21 mm. De sheldiameter wordt berekend volgens $D_s = D_b + BC = 1.379$ m. Er is gekozen voor een 'baffle spacing', $l_b = D_s / 3.5 = 394$ mm.

Voor de snelheid in de shell wordt de volgende waarde berekend, $u_s = 9$ m·s⁻¹. Hieruit volgt een drukval aan de shellkant, $\Delta P_s = 10$ Pa. De snelheid in de tubes kwam uit op $u_t = 7$ m·s⁻¹. De hierbij behorende drukval in de tubes, $\Delta P_t = 8.5 \cdot 10^3$ Pa. Deze drukvallen zijn acceptabel.

4.7. Pompen en compressoren

Voor alle pompen en compressoren is gekozen voor het centrifugaal type. Dit is gedaan omdat deze veruit het meest toegepaste type is en zeer geschikt is voor onze toepassingen.

De meeste, zo niet alle pompen, hebben volgens de apparaatlijsten geen vermogen. De reden hiervan is dat het vermogen in de opgegeven eenheid van kilowatt (kW) een te verwaarlozen waarde heeft. Het lage energieverbruik komt ten eerste door de relatief kleine debieten welke verpompt dienen te worden en ten tweede gaat het bij deze pompen om zeer kleine drukverschillen. Voor alle compressoren en de turbine is een rendement aangenomen van 80 %.

Voor het afdalen van de druk, van 125 bar naar atmosferisch, ná de MAS-reactoren en vóór de opwerkingssectie is gekozen voor een expander (C26), welke gekoppeld is met compressor C9. Zowel de expander als de compressor hebben een rendement van 80 %, zodat het overallrendement 64 % bedraagt. Dit is economisch aantrekkelijker dan gebruik te maken van een stoomturbine en een door stoom aangedreven compressor.

Bij het simuleren in CHEMCAD is voor de compressoren (COMP) en de expander (EXPN) uitgegaan van een adiabatistische werking. De pompen zijn bedoeld om de processtromen door de fabriek te sturen en drukvallen in de leidingen en over de apparaten te compenseren. Aangezien de drukvallen bij de CHEMCAD-simulatie niet zijn meegenomen, zijn ook de pompen niet in CHEMCAD gesimuleerd.

5. MASSA- EN WARMTEBALANS

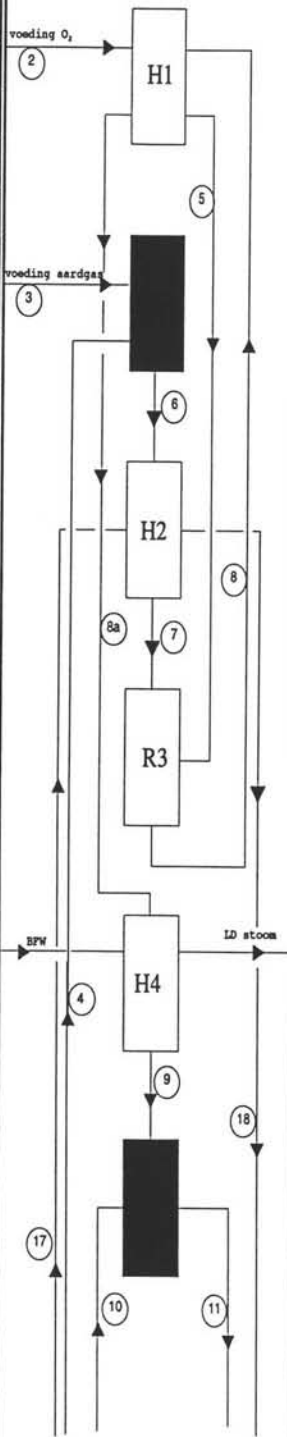
In de volgende figuren worden mengpunten van stromen door de zwarte blokken weergegeven. Op deze manier is een uniforme en overzichtelijke layout verkregen.

Het massadefect bedraagt $0.4 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ en wordt volledig veroorzaakt door de simulatie van de MAS-reactoren. Hoogstwaarschijnlijk wordt een geringe fout in de stoichiometrie door de grote stromen zodanig versterkt, dat deze fout niet meer verwaarloosbaar is.

Het energieverschil bedraagt 24055 kW. De enthalpieën van de stromen zijn bepaald aan de hand van de CHEMCAD-simulatie. Bij grote enthalpieën geeft CHEMCAD deze niet exact weer, maar als een getal met een exponent.

MASSA- EN WARMTE-BALANS.

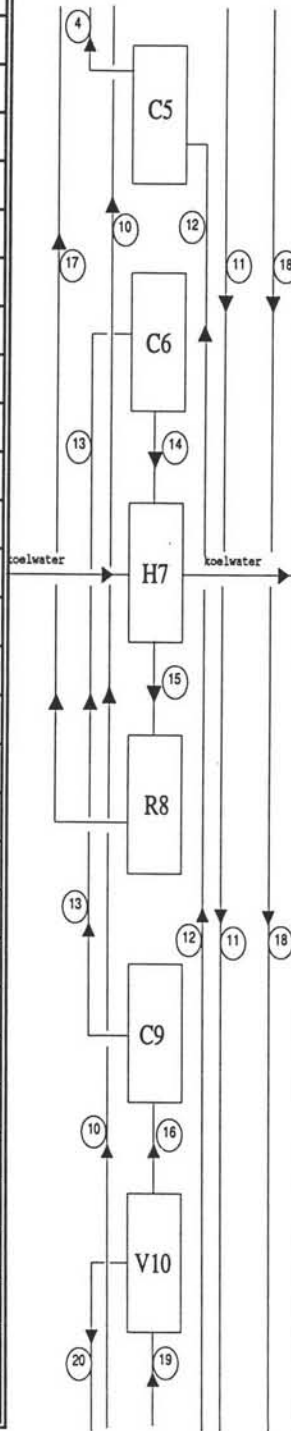
IN		Voorwaarts
M	Q	M
		Q
16.00 ⁽²⁾	-22 ⁽²⁾	
		16.00 ⁽⁵⁾
		3566 ⁽⁵⁾
21.02 ⁽³⁾	-74960 ⁽³⁾	
		26.01 ⁽⁶⁾
		-118510 ⁽⁶⁾
		42.02 ^(8a)
		-21775 ^(8a)
		26.01 ⁽⁷⁾
		-98459 ⁽⁷⁾
43.18 ^(BFW)	-685685 ^(BFW)	
		42.02 ⁽⁹⁾
		-141640 ⁽⁹⁾
		206.94 ⁽¹⁸⁾
		-726260 ⁽¹⁸⁾
		211.75 ⁽¹¹⁾
		-556220 ⁽¹¹⁾



Retour	UIT	
M	M	Q
Q		
42.02 ⁽⁶⁾		
-18187 ⁽⁶⁾		
	43.18 ^(LDS)	-566602 ^(LDS)
4.99 ⁽⁴⁾		
-43547 ⁽⁴⁾		
206.94 ⁽¹⁷⁾		
-405575 ⁽¹⁷⁾		
169.75 ⁽¹⁰⁾		
-414580 ⁽¹⁰⁾		

VERVOLG

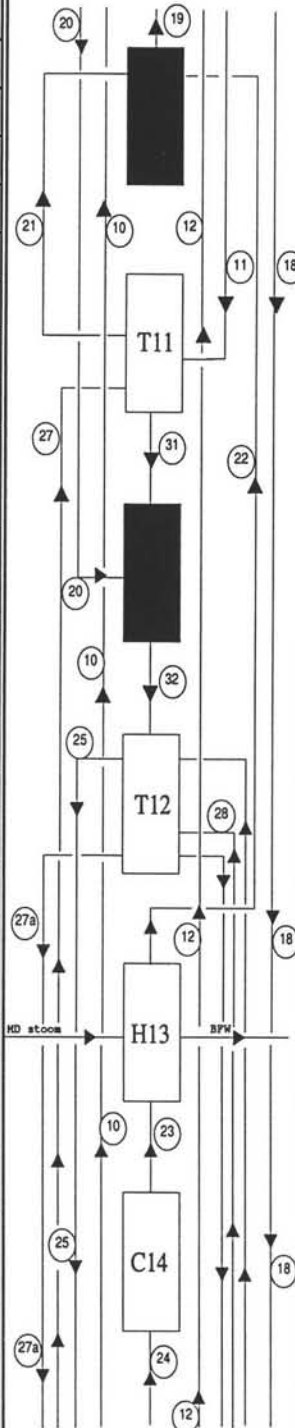
IN		Voorwaarts
M	Q	M
		Q
	935	
	178384	
		206.76 ⁽¹⁴⁾
		-179240 ⁽¹⁴⁾
2707.08 ^(KW)	-42987555 ^(KW)	
		206.76 ⁽¹⁵⁾
		-405550 ⁽¹⁵⁾
		211.75 ⁽¹¹⁾
		-556220 ⁽¹¹⁾
	154420	
		206.94 ⁽¹⁸⁾
		-726260 ⁽¹⁸⁾
		42.02 ⁽²⁰⁾
		-21775 ⁽²⁰⁾



Retour	UIT	
M	M	Q
Q		
4.99 ⁽⁴⁾		
-43547 ⁽⁴⁾		
206.94 ⁽¹⁷⁾		
-405575 ⁽¹⁷⁾		
169.75 ⁽¹⁰⁾		
-414580 ⁽¹⁰⁾		
	2707.08 ^(KW)	-42761152 ^(KW)
206.76 ⁽¹³⁾		
-357620 ⁽¹³⁾		
4.99 ⁽¹²⁾		
-44483 ⁽¹²⁾		
206.76 ⁽¹⁶⁾		
-512030 ⁽¹⁶⁾		
206.76 ⁽¹⁹⁾		
-512030 ⁽¹⁹⁾		

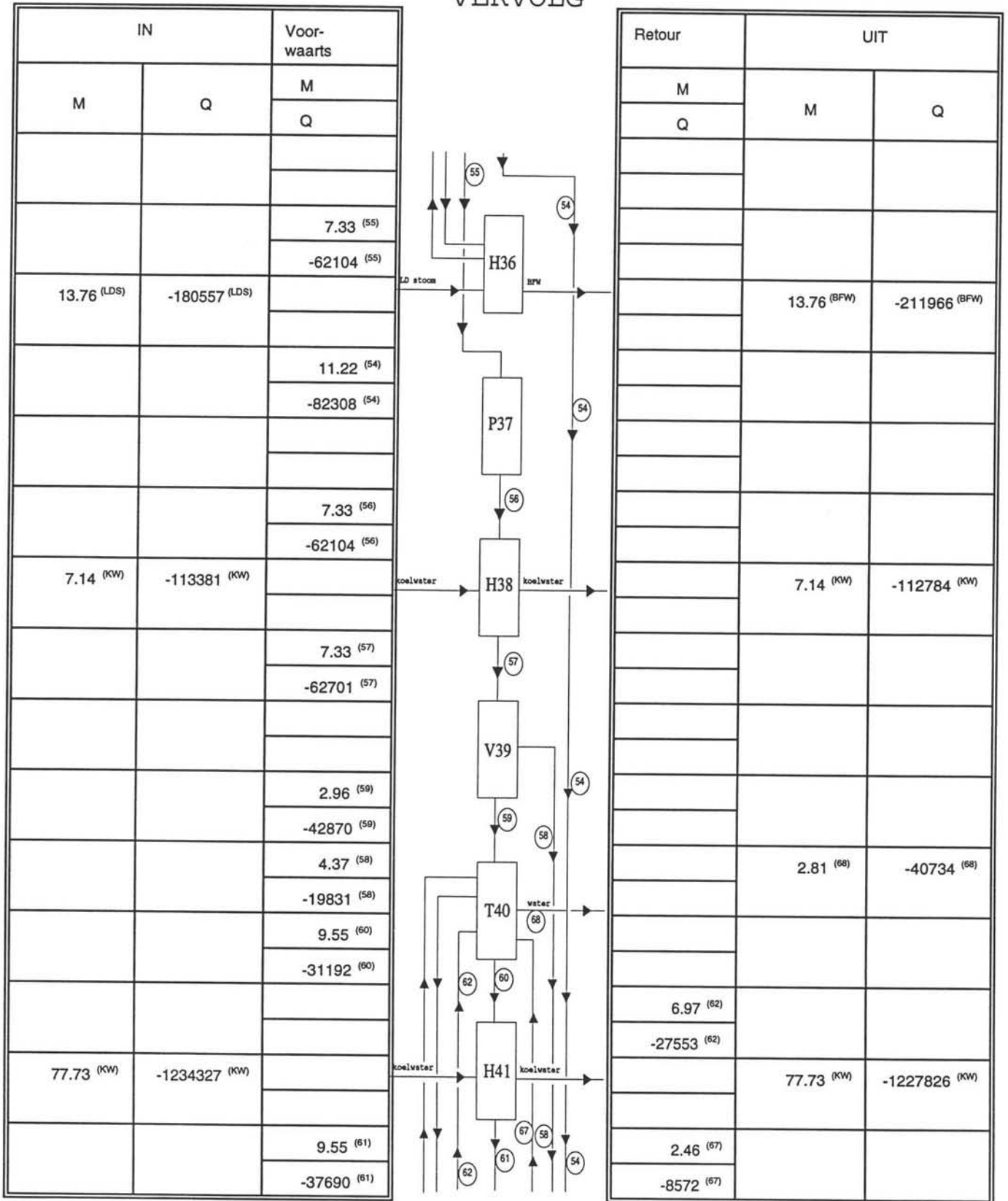
VERVOLG

IN		Voorwaarts
M	Q	M
		Q
		211.75 ⁽¹¹⁾
		-556220 ⁽¹¹⁾
		42.02 ⁽²⁰⁾
		-21775 ⁽²⁰⁾
		231.23 ⁽³¹⁾
		-3191100 ⁽³¹⁾
		206.94 ⁽¹⁸⁾
		-726260 ⁽¹⁸⁾
		231.23 ⁽³²⁾
		-3191100 ⁽³²⁾
1.61 ^(MDS)	-21099 ^(MDS)	
		10.18 ⁽²⁵⁾
		-113468 ⁽²⁵⁾
		224.51 ^(27a)
		-3102100 ^(27a)



Retour	UIT	
M	M	Q
Q		
206.76 ⁽¹⁹⁾		
-512030 ⁽¹⁹⁾		
205.03 ⁽²¹⁾		
-489132 ⁽²¹⁾		
169.75 ⁽¹⁰⁾		
-414580 ⁽¹⁰⁾		
4.99 ⁽¹²⁾		
-44483 ⁽¹²⁾		
224.51 ⁽²⁷⁾		
-3139100 ⁽²⁷⁾		
1.73 ⁽²²⁾		
-26688 ⁽²²⁾		
	1.61 ^(BFW)	-24474 ^(BFW)
1.73 ⁽²³⁾		
-27213 ⁽²³⁾		
1.73 ⁽²⁴⁾		
-27213 ⁽²⁴⁾		

VERVOLG



6. OVERZICHT SPECIFICATIE APPARATUUR

Apparatenlijst voor reactoren, kolommen en vaten

APPARAAT NO.	R3	R8	V10	T11	T12
Benaming :	syngasreactor	MAS-reactor	regelvat	CO ₂ -absorber	CO ₂ -stripper
Type :	buisreactor	gepakt bed			
Abs. druk [bar] :	7	131	6.8	7	1
Temp. [°C] :	1300	342	127	127	90
Inhoud [m³] :	138	125	76	4122	3365
Diameter [m] :	3	3	3.4	8	7
L of H [m] :	16	16	8.5	80	85
Vulling :					
Schotels (+ aantal) :					
Vaste pakking :					
Kat. type :					
Kat. vorm :					

Speciale constructie-materialen					
Aantal in					
- serie :	1	1	1	1	1
- parallel :	1	1	1	1	1
Overig :					

Apparatenlijst voor reactoren, kolommen en vaten

APPARAAT NO.	V16	R23	R25	V28	T31
Benaming :	topaccumul.	MAS-reactor	MAS-reactor	vat	C ₂ distil.
Type :	horizontaal	gepakt bed	gepakt bed		
Abs. druk [bar] :	1	129	126	1	1
Temp. [°C] :	60	370	377	-50	64/93
Inhoud [m³] :	235	125	125	432	532
Diameter [m] :	4.6	3	3	6	4
L of H [m] :	13.9	16	16	15	43
Vulling :					
Schotels					
(+ aantal) :					
Vaste pakking :					
Kat. type :					
Kat. vorm :					

Speciale constructie-materialen					
Aantal in					
- serie :	1	1	1	1	1
- parallel :	1	1	1	1	1
Overig :					

Apparatenlijst voor reactoren, kolommen en vaten

APPARAAT NO.	V33	V39	T40	V42	T46
Benaming :	topaccumul.	settler	extr.dist.	topaccumul.	azeotr.dist.
Type :	horizontaal	horizontaal		horizontaal	
Abs. druk [bar] :	1	1.2	1	1	1
Temp. [°C] :	60	70	88/99	68	80/110
Inhoud [m³] :	10.7	5.3	115	3.8	222
Diameter [m] :	1.4	1.1	2	1.0	2
L of H [m] :	7.0	5.5	32	4.9	54
Vulling :					
Schotels (+ aantal) :					
Vaste pakking :					
Kat. type :					
Kat. vorm :					

Speciale constructie-materialen					
Aantal in					
- serie :	1	1	1	1	1
- parallel :	1	1	1	1	1
Overig :					

Apparatenlijst voor reactoren, kolommen en vaten

APPARAAT NO.	V48				
Benaming :	topaccumul.				
Type :	horizontaal				
Abs. druk [bar] :	1				
Temp. [°C] :	55				
Inhoud [m³] :	3.4				
Diameter [m] :	1.0				
L of H [m] :	4.8				
Vulling :					
Schotels					
(+ aantal) :					
Vaste pakking :					
Kat. type :					
Kat. vorm :					

Speciale constructie-materialen					
Aantal in					
- serie :	1				
- parallel :	1				
Overig :					

Apparatenlijst voor warmtewisselaars en fornuizen

APPARAAT NO.	H1	H2	H4	H7	H13
Benaming :	warmtewis.	warmtewis.	verdamer	koeler	verdamer
Type :	floating-head	vaste pijpplaten	haarspeld	floating-head	haarspeld
Medium					
- pijpen :	zuurstof	alc/syngas	syngas	syngas	stoom
- mantel :	syngas	aardgas/CO ₂	water	water	water
Capaciteit					
Uitgewisselde warmte [kW] :	3588	5013	119865	56578	4315
Warmtewisselend oppervlak [m²] :	47	325	513	187	406
Aantal					
- serie :	1	1	1	1	1
- parallel :	1	4	1	4	1
Abs. druk [bar] :					
- pijpen :	7	128.5	7	131	10
- mantel :	7	7	3	1	7
Temp. in/uit [°C]					
- pijpen :	25/260	412/370	1304/150	731/342	220/180
- mantel :	1304/1272	35/400	20/190	20/40	60/165
Speciale constructie-materialen					
Overig :					

Apparatenlijst voor warmtewisselaars en fornuizen

APPARAAT NO.	H15	H20	H21	H22	H24
Benaming :	condensor	verdamer	koeler	warmtewis.	koeler
Type :	floating-head	haarspeld	floating-head	floating-head	floating-head
Medium					
- pijpen :	water	stoom	water	produkt	syngas/alc
- mantel :	CO2/water	water	syngas	syngas	water
Capaciteit					
Uitgewisselde warmte [kW] :	10846	35401	6680	3590	4825
Warmtewisselend oppervlak [m²] :	241	1221	262	520	81
Aantal					
- serie :	1	1	1	1	1
- parallel :	1	1	1	2	4
Abs. druk [bar] :					
- pijpen :	1	3	1	1.2	126
- mantel :	1	1.2	7	7	1
Temp. in/uit [°C]					
- pijpen :	20/40	190/133	20/40	-50/67	416/377
- mantel :	91/60	50/106	144/127	163/121	20/40
Speciale constructie-materialen					
Overig :					

Apparatenlijst voor warmtewisselaars en fornuizen

APPARAAT NO.	H27	H32	H36	H38	H41
Benaming :	condensor	condensor	verdamer	koeler	condensor
Type :	haarspeld	floating-head	haarspeld	vaste pijpplaten	floating-head
Medium					
- pijpen :	syn/prod	water	stoom	water	water
- mantel :	CH ₃ F	MeOH/EtOH	C ₃ +water	C ₃ +water	C ₃ +cyclohexaan
Capaciteit					
Uitgewisselde					
warmte [kW] :	24075	29560	30000	597	6498
Warmtewisselend					
oppervlak [m²] :	815	1271	969	16	222
Aantal					
- serie :	1	1	1	1	1
- parallel :	2	1	1	1	1
Abs. druk [bar] :					
- pijpen :	1	1	3	1	1
- mantel :	2.5	1	1.4	1.6	1
Temp. in/uit [°C]					
- pijpen :	8/-50	20/40	190/133	20/40	20/40
- mantel :	-61/-61	64/60	93/93	93/70	88/68
Speciale constructie-materialen					
Overig :					

Apparatenlijst voor warmtewisselaars en fornuizen

APPARAAT NO.	H45	H47	H51		
Benaming :	verdamer	condensor	verdamer		
Type :	haarspeld	floating-head	haarspeld		
Medium					
- pijpen :	stoom	water	stoom		
- mantel :	water	cyclohex/ water	C ₃ +alc.		
Capaciteit					
Uitgewisselde					
warmte [kW] :	7013	6674	69020		
Warmtewisselend					
oppervlak [m²] :	252	172	558		
Aantal					
- serie :	1	1	1		
- parallel :	1	1	1		
Abs. druk [bar] :					
- pijpen :	3	1	3		
- mantel :	1.4	1	1.5		
Temp.					
in/uit [°C]					
- pijpen :	190/133	20/40	190/133		
- mantel :	99/99	80/55	110/110		
Speciale					
constructie-					
materialen					
Overig :					

Apparatenlijst voor pompen, blowers en compressoren

APPARAAT NO.	C5	C6	C9	C14	P17
Benaming :	compressor	compressor	compressor	compressor	reflux-pomp
Type :	centrifugaal	centrifugaal	centrifugaal	centrifugaal	centrifugaal
Te verpompen medium :	CO ₂	synthese gas	synthese gas	water	water
Capaciteit [kg/s]:	4.99	206.76	206.76	1.73	3.46
Dichtheid [kg/m ³]	4.3	13.3	5.4	983	983
Zuig-/persdruk (abs./eff.) [bar] :	1/7 abs	39/131 abs	6.8/39 abs	1.2/6.8 abs	1/1.1 abs
Temp. In/Uit [°C] :	60/256	443/787	127/443	60/60	60/60
Vermogen [kW]					
- theorie :	748	142707	123536	-	-
- praktijk :	935	178384	154420	-	-
Aantal					
- serie :					
- parallel :					
Speciale constructie-materialen					
Overig :					

Apparatenlijst voor pompen, blowers en compressoren

APPARAAT NO.	P19	C26	P29	C30	P34
Benaming :	pomp	turbine	pomp	compressor	reflux-pomp
Type :	centrifugaal	centrifugaal	centrifugaal	centrifugaal	centrifugaal
Te verpompen medium :	K ₂ CO ₃ -opl.	reactor mengsel	alcoholen en water	synthese gas	C ₁ /C ₂ -alcoholen
Capaciteit [kg/s]:	224.51	207.16	18.55	169.75	15.50
Dichtheid [kg/m ³]	1205	14.6	873	1.6	753
Zuig-/persdruk (abs./eff.) [bar] :	1.2/7 abs	124.6/1 abs	1/1.2 abs	1/7 abs	1/1.1 abs
Temp. In/Uit [°C] :	50/115	410/8	-50/-50	-50/163	60/60
Vermogen [kW]					
- theorie :	29600	-241313	-	64176	-
- praktijk :	37000	-193050	-	80220	-
Aantal					
- serie :					
- parallel :					
Speciale constructie-materialen					
Overig :					

Apparatenlijst voor pompen, blowers en compressoren

APPARAAT NO.	P35	P37	P43	P44	P49
Benaming :	pomp	pomp	reflux-pomp	pomp	reflux-pomp
Type :	centrifugaal	centrifugaal	centrifugaal	centrifugaal	centrifugaal
Te verpompen medium :	C ₁ /C ₂ -alcoholen	C ₃ ⁺ -alc. en water	C ₃ ⁺ -alc.en cyclohex.	C ₃ ⁺ -alc.en cyclohex.	cyclohex.
Capaciteit [kg/s]:	11.22	7.33	6.97	2.62	6.38
Dichtheid [kg/m ³]	753	817	760	760	777
Zuig-/persdruk (abs./eff.) [bar] :	1/1.5 abs	1.4/1.6 abs	1/1.1 abs	1/1.2 abs	1/1.1 abs
Temp. In/Uit [°C] :	60/60	93/93	68/68	68/68	55/55
Vermogen [kW] - theorie :	-	-	-	-	-
- praktijk :	-	-	-	-	-
Aantal - serie :					
- parallel :					
Speciale constructie-materialen					
Overig :					

Apparatenlijst voor pompen, blowers en compressoren

APPARAAT NO.	P50	P18			
Benaming :	pomp	pomp			
Type :	centrifugaal	centrifugaal			
Te verpompen medium :	cyclohex.	water			
Capaciteit [kg/s]:	2.4	1.73			
Dichtheid [kg/m ³]	777	983			
Zuig-/persdruk (abs./eff.) [bar] :	1/1.2 abs	1/1.2 abs			
Temp. In/Uit [°C] :	55/55	60/60			
Vermogen [kW]					
- theorie :	-	-			
- praktijk :	-	-			
Aantal					
- serie :					
- parallel :					
Speciale constructie-materialen					
Overig :					

7. PROCESREGELING

Tijdens het operationeel zijn, moet het proces aan een aantal voorwaarden voldoen. Deze voorwaarden kunnen zijn opgelegd door de ontwerper, of zijn van zuiver technologische, economische of sociale aard. Een aantal van deze voorwaarden zijn produktspecificaties, procesconditiegrenzen, veiligheid en milieueisen. Door al deze voorwaarden is er behoefte aan een continu controlesysteem.

Er zijn drie belangrijke taken waar het controlesysteem voor moet zorgen. De eerste taak is het onderdrukken van de invloed van externe verstoringen. De tweede taak is het zorgen voor stabiliteit binnen het proces. De derde taak is het optimaliseren van het proces. Dit wordt bereikt met het in de flowsheet aangegeven regelsysteem, dat hieronder zal worden besproken.

Alle koelers en voorverwarmers, die bedreven worden met koelwater dan wel stoom worden op dezelfde manier geregeld. De temperatuur dient aan de uitgang constant te worden gehouden. Dit gebeurt door middel van een temperatuurcontroller (TC), die de hoeveelheid koelwater/stoom kan regelen.

De partiële zuurstofdruk vóór de synthesegasreactor (R3) wordt constant gehouden door een drukcontroller (PC) op de aanvoer, waarmee de voeding wordt gecontroleerd. De aardgasvoeding wordt op dezelfde wijze geregeld met een drukcontroller in stroom (6).

Door warmtewisseling van het geproduceerde synthesegas met 'Boiling Feed Water' (BFW) wordt lage druk stoom gemaakt. De temperatuur van het synthesegas na de stoomproductie wordt constant gehouden met een temperatuurcontroller door de hoeveelheid BFW te variëren.

In de CO₂-absorptiekolom (T11) wordt de grootte van de bodemstroom bepaald door de levelcontroller onderin de kolom. De CO₂-stripkolom (T12) wordt geregeld op de zelfde manier als de distillatietorens, die later behandeld zullen worden, met als enig verschil dat een partiële condensor wordt gebruikt in plaats van een totale condensor. De drukcontroller in de top van de kolom wordt gebruikt om tevens de flow van het gasvormige topproduct te regelen.

Ter bescherming van de compressor (C9) wordt stroom (19) door een vat (V10) gevoerd, waar alle vloeistof eruit wordt gehaald. Het vloeistof niveau in het vat wordt constant gehouden met een levelcontroller (LC) die is gekoppeld aan de vloeistofaftap. De gasdoorzet wordt met een flowcontroller (FC) geregeld.

De compressor (C9) wordt geregeld met een recycle over de compressor. De mate van recycle wordt bepaald door met een drukcontroller de druk in de top van de CO₂-absorptiekolom (T11) te meten.

De temperatuur aan de ingang van de tweede MAS-reactor (R23) moet constant worden gehouden. Dit wordt bereikt door met een temperatuurcontroller de hoeveelheid aardgas die door de bypass en dus niet door de warmtewisselaar (H2) gaat te variëren.

Na de laatste MAS-reactor (R25) wordt de stroom geëxpandeerd door een turbine (C26), welke ook met een bypass wordt geregeld. De hoeveelheid, die door de bypass gaat, wordt bepaald door de druk voor de turbine met een drukregelaar te controleren.

Na partieel te zijn gecondenseerd (H27, V28) wordt het produkt gescheiden van het synthesegas. Het synthesegas wordt opgesplitst in een spui- en een recyclestream. De grootte van de spuistroom wordt gecontroleerd door met een drukcontroller de druk te meten. De recyclestream wordt gecomprimeerd, de compressor wordt geregeld met een recycle. De hoeveelheid die wordt teruggevoerd wordt bepaald door de flowcontroller in recyclestream. Met een levelcontroller wordt het vloeistofniveau in het vat gemeten en constant gehouden door de grootte van de vloeistof-

stroom, die vervolgens opgewarmd wordt, te regelen.

De temperatuur die de warmtewisselaar (H22) verlaat wordt constant gehouden door de hoeveelheid synthesesgas dat door H22 gaat aan te passen met de flowcontroller op de bypass.

De hoeveelheid koelwater in de condensor van een destillatietoren wordt bepaald door met een drukcontroller de druk in de top van de kolom te meten. De hoeveelheid afgetapt vloeibaar topproduct wordt geregeld door het vloeistofniveau in het vat met een levelcontroller constant te houden. Het aftappen van de reflux wordt met een flowcontroller op constante grootte gehouden. De hoeveelheid te gebruiken stoom in de reboilers wordt geregeld met een flowcontroller op de stoomvoeding, die aangepast wordt door de temperatuurcontroller in de bodem van de kolom. De bodemstroom wordt zo afgetapt dat het vloeistofniveau in de kolom constant blijft. Dit geldt voor alle drie de destillatietorens (T31, T40, T46) uit de opwerkingssectie.

De settler (V39) na de eerste destillatietoren (T31) wordt geregeld met een level detecting interface, waarmee de flow van de waterfase naar de tweede toren (T40) wordt bepaald.

8. PROCESVEILIGHEID

8.1. Inleiding

Bij de productie van het MAS-produkt uit aardgas worden gevaarlijke stoffen gebruikt. Er zal een aantal maatregelen getroffen moeten worden om de risico's, die dit productieproces met zich mee brengt, tot een minimum voor de mens en de omgeving te beperken. Hiervoor dienen als eerste de risico's te worden vastgesteld.

Veiligheid speelt een belangrijke rol in de industrie. Tijdens het ontwerpen van een proces, het ontwerpen van de benodigde installatie en apparatuur, maar ook tijdens de procesvoering moet de grootst mogelijke aandacht worden besteed aan het voorkomen van procesonveiligheden, de preventie.

Stofeigenschappen spelen een grote rol in de procesveiligheidsanalyse. De eigenschappen zijn niet uitsluitend stofgebonden. In vele gevallen is het proces, of het systeem en de onderlinge interactie tussen stoffen en stof (omhulling) ook van belang, zoals druk, temperatuur en deeltjesgrootte. De genoemde eigenschappen zijn per stof ten dele vastgelegd voor standaard condities. Voor de eigenschappen van de stoffen wordt verwezen naar de tabel in bijlage B1 en de chemiekaarten VNCl in bijlage B2.

Procesonveiligheden, die ondanks goede preventie kunnen optreden, moeten worden bestudeerd en geminimaliseerd.

8.2. Brand- en explosiegevaar

De meeste stoffen, die bij dit proces gebruikt worden, zijn zowel brand- als explosiegevaarlijk. Tijdens de reacties in zowel de synthesegas reactor als de MAS-reactor is het reactiemengsel gasvorming. Het gehele proces vindt plaats bij hoge druk. Mocht er een lek ontstaan in een reactor of in een leiding, dan zal het onder druk staande gasmengsel naar buiten spuiten en vlam kunnen vatten. Dit kan leiden tot een explosie. Een temperatuur run-away in een synthese reactor kan leiden tot een overschrijding van de zelfontbrandingstemperatuur en tot een explosie. Het is dus noodzakelijk om de temperatuur goed te regelen.

Tevens moet er gelet worden, dat methanol kleurloos brandt. Een manier om een methanol-brand te blussen is door sproeien met water.

8.3. Toxicologische eigenschappen

De geproduceerde alcoholen werken prikkelend op de ogen, de huid en de ademhalingsorganen. In hoge concentraties kunnen ze aanleiding geven tot bewustzijnsverlaging en in ernstige gevallen zelfs tot bewusteloosheid.

Methaan, waterstof en stikstof kunnen vrijkomen door verdringing van lucht verstikkend werken.

Cyclohexaan werkt irriterend op de huid en kan inwerken op het centrale zenuwstelsel, blootstelling aan hoge concentraties kan verlaging van het bewustzijn veroorzaken.

Koolstofmonoxide werkt in op het bloed. Er kunnen bloedafwijkingen optreden en in ernstige gevallen is er kans op stoornissen van de ademhaling, hartritme, hart- en vaatletsel, bewusteloosheid, toevallen, dodelijke afloop. De stof werkt in op het centrale zenuwstelsel, hersenbeschadigingen kunnen optreden.

Koolstofdioxide kan bij inademing ademnood veroorzaken, in ernstige gevallen kans op bewusteloosheid. Door snel verdampen kan de vloeistof bevrozing veroorzaken.

8.4. Corrosie

De uitstroom van de synthesegas reactor bevat onder andere water, koolmonoxide en waterstof. Er moet rekening gehouden, dat deze stoffen corrosief zijn bij het ontwerpen en bedrijven van installaties, waar deze stroom (gedeeltelijk) door gaat.

Bij de kooldioxideverwijdering moet ook met corrosie rekening gehouden worden. Met name aan de bovenkant van de regeneratiekolom kan er corrosie optreden. Het kooldioxide vormt met water een corrosieve oplossing. Bij de keuze van de constructiematerialen dient hier rekening mee gehouden te worden.

Na de MAS-reactor(en) moet er rekening gehouden worden met de aanwezigheid van het alcohol-water mengsel, dat eveneens corrosief is. Dit alcohol-water mengsel speelt ook een rol bij de scheidingssectie.

8.5. HAZOP analyse

Op de volgende pagina's wordt in tabelvorm een HAZOP analyse weergegeven.

SLEUTELWOORD	VERSTORING	OORZAAK	GEVOLG	ACTIE
niet/geen	zuurstofvoeding	<ul style="list-style-type: none"> ▪ lek in leiding 2 ▪ defecte flowcontroller op stroom 2 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ temperatuur in R3 loopt op 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ methaanvoeding stoppen, totale fabriek stilleggen
	methaanvoeding	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op stroom 3 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ temperatuur in R3 loopt op 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ zuurstofvoeding stoppen, totale fabriek stilleggen
		<ul style="list-style-type: none"> ▪ lek in leiding 3 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ brand- en explosiegevaar 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ rampenplan in werking stellen
	cyclohexaan	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op stroom 1 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ te veel alcoholen met afvalwaterstroom 68 weggevoerd 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ afvalwaterstroom 68 gescheiden houden
<ul style="list-style-type: none"> ▪ lek in leiding 1 		<ul style="list-style-type: none"> ▪ brand- en explosiegevaar 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ rampenplan in werking stellen 	
te veel/meer	methaan	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op stroom 3 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ hoge H₂/CO-ratio 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ extra zuurstof toevoeren
	zuurstof	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op stroom 2 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ vollediger verbranding, lage H₂/CO ▪ veel CO₂ en H₂O 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ extra methaan toevoeren
	H ₂ (H ₂ /CO-ratio > 2)	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op stroom 2 en/of stroom 3 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ veel CH₄ en H₂O 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ minder methaan toevoeren ▪ extra zuurstof toevoeren
	CO ₂	<ul style="list-style-type: none"> ▪ te weinig K₂CO₃ in absorptiekolom 11 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ vorming van hogere alcoholen sterk verminderd 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ minder zuurstof toevoeren ▪ extra methaan toevoeren
	cyclohexaan	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op stroom 1 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ ophoping van cyclohexaan in T40 en T46 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ meer spuien, kraan op stroom 76 verder open
te weinig/minder	methaan	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op stroom 3 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ vollediger verbranding, lage H₂/CO ▪ veel CO₂ en H₂O 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ minder zuurstof toevoeren
	zuurstof	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op stroom 2 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ hoge H₂/CO-ratio 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ minder methaan toevoeren
	H ₂ (H ₂ /CO-ratio < 2)	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op stroom 3 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ meer hogere alcoholen t.o.v. methanol 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ minder zuurstof toevoeren ▪ extra methaan toevoeren

SLEUTELWOORD	VERSTORING	OORZAAK	GEVOLG	ACTIE
fractie	stikstof in methaan hoger	<ul style="list-style-type: none"> ▪ andere aardgas-samenstelling 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ ophoping stikstof in systeem 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ meer spuien, kraan op 44 verder open
	stikstof in methaan lager	<ul style="list-style-type: none"> ▪ andere aardgas-samenstelling 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ onnodig produkt-verlies door spui 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ minder spuien, kraan op 44 verder dicht
te hoog	temperatuur ingang MAS-reactor(en)	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte warmte-wisselaar H2, H7 of H24 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ sinteren van katalysator (vermindering van oppervlak) ▪ methaanvorming i.p.v. alcoholvorming 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ reactor overslaan d.m.v. by-pass, zodat de stroom direct naar de eerstvolgende warmtewisselaar gaat
	druk na compressoren	<ul style="list-style-type: none"> ▪ vernauwing in de leidingen door afzetting in de leidingen of door beschadiging van buitenaf ▪ blijven hangen van de kleppen 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ barsten/scheuren van de leidingen met als gevolg brandgevaar 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ rampenplan in werking stellen
te laag	temperatuur in zuurstof- en methaanvoeding	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte warmte-wisselaar H1 en/of H2 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ zelfontbranding moeilijker/onmogelijk 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ ontsteker in de synthesegas reactor
	druk in MAS-reactor	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte compressor C6 en/of C9 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ lage conversie tot MAS-produkt ▪ meer methanol t.o.v. hogere alcoholen 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ back-up compressor inschakelen
overige	onderhoud	<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op recycle-stroom 43 ▪ kraan op spui-stroom 44 defect 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ opbouw stikstof in systeem 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ nieuwe spui aanleggen op gunstig punt
		<ul style="list-style-type: none"> ▪ defecte flowcontroller op recycle-stroom 69 ▪ kraan op spui-stroom 76 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ opbouw cyclohexaan, methanol en ethanol 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ nieuwe spui aanleggen op gunstig punt

9. KOSTEN

9.1. De investeringskosten

De investeringskosten kunnen worden onderverdeeld in vier groepen:

1. De investeringskosten per proceseenheid (I_B).
2. De investeringskosten voor de hulpapparatuur, de off-site investering, inclusief andere indirecte kosten (I_H).
3. De investering in niet-tastbare zaken, zoals licenties, know-how, start-up kosten etc. (I_L).
4. Het werkkapitaal, voorraden, cash en terreinen (I_W).

Vaak wordt de som van I_B en I_H aangeduid met fixed-capital (I_F) en maakt deze voor 80% deel uit van de totale investeringskosten ($I_T = I_B/I_H/I_L/I_W = 0.64/0.16/0.14/0.06$). [25]

Er is een groot aantal schattingsmethoden om de totale investeringskosten te bepalen. Deze variëren van zeer grof tot zeer gedetailleerd. De methoden, die gebruikt kunnen worden bij de kostenschatting van een fabrieksvoorontwerp, kunnen worden onderverdeeld in een exponent- of factormodel en modulair of niet-modulair. Bij de modulaire methoden wordt wel onderscheid gemaakt tussen de investering per element (proceseenheid) in tegenstelling tot de niet-modulaire methoden. Het verschil tussen het factormodel en het exponentmodel is, dat bij het exponentmodel een belangrijke parameter van de fabriek (productiecapaciteit) als bepalende grootte wordt gebruikt.

In de volgende secties zullen twee methoden worden toegepast om de investeringskosten te bepalen. Dit zijn de methode van Zevnik-Buchanan (een niet-modulair exponentmodel) en de methode van Taylor (een modulair exponentmodel).

9.1.1. De methode van Zevnik-Buchanan

Deze methode is gebaseerd op het feit, dat de investeringen een functie zijn van twee variabelen, namelijk de procescapaciteit en de procescomplexiteit. Voor een schatting zijn slechts vier basisgegevens nodig. Dit zijn de procescapaciteit, het aantal functionele eenheden (N) uit het procesflowdiagram, de complexity factor (C_f) en de Plant Cost Index (C_i).

Ten eerste dient een aantal factoren berekend te worden om de complexity factor, C_f , te bepalen. Deze is als volgt gedefinieerd:

$$C_f = 2 \cdot 10^{(F_t + F_p + F_m)} \quad (9.1)$$

Hierin is F_t de temperatuurfactor, F_p de drukfactor en F_m de materiaalfactor. Voor de materiaalfactor is een waarde van 0.1 gebruikt [lit. 25]. De drukfactor wordt bepaald door bij de hoogste druk in het proces de juiste waarde van F_p af te lezen in grafiek III-17 [25]. Bij een druk van 131 bar volgt: $F_p = 0.22$. De temperatuurfactor kan gevonden worden met behulp van onderstaande formule:

$$F_t = 0.018 \cdot \left(\frac{T-290}{100} \right) \quad (9.2)$$

Deze formule geldt, indien de maximaal te bereiken temperatuur in het proces hoger is dan 290 K. De maximaal temperatuur is 1400 K, hetgeen leidt tot een temperatuursfactor van 0.1998. Vervolgens wordt nu een complexity factor van 6.620 berekend.

Met behulp van grafiek III-21 [25] kunnen de investeringen per functionele unit (I_E) bepaald worden. Bij een productie van ongeveer 455 kton per jaar wordt uit de grafiek een waarde afgelezen van 5 miljoen dollar, dat overeen komt met 15 miljoen gulden (1 dollar was in 1978 2.164 gulden; prijsindex 1980/1992=100/137).

De investeringen, I_F , kunnen nu worden berekend met behulp van onderstaande formule:

$$I_F = I_B + I_H = N \cdot I_E \cdot 1.33 \cdot \left(\frac{C_I}{219} \right) \quad (9.3)$$

De Plant Cost Index (C_I) wordt vastgesteld als 357.6 in 1990. Uit de literatuur [29] kunnen nu de prijsindices voor 1992 en 1990 bepaald worden (respectievelijk 137 en 137). Voor de Plant Cost Index wordt nu een waarde gevonden van 357.6. Het aantal functionele units (N) wordt gesteld op 10. De functionele units zijn één syngasreactor, twee kooldioxide torens, één compressor, drie MAS-reactoren en drie distillatietorens. De factor 1.33 is een factor, die extra investeringen voor utilities en algemene faciliteiten in rekening brengt. Hiermee wordt nu een waarde voor I_F gevonden van 326 miljoen gulden en dus voor de totale investeringen (I_T) 408 miljoen gulden.

9.1.2. De methode van Taylor

Voor de berekening van de investeringen (I) volgens Taylor zijn een drietal basisgegevens nodig. Dit zijn de costliness factor (f), de productiecapaciteit (P) en de EPE-index (C_I). In formulevorm leidt dit dan tot:

$$I = 93 \cdot f \cdot P^{0.39} \cdot \frac{C_I}{300} \quad (9.4)$$

Dit geeft de investeringskosten voor 1977 in k\$.

De costliness factor wordt als volgt gedefinieerd:

$$f = \sum_1^N (1.3)^{S_i} \quad (9.5)$$

De costliness factor geeft de complexiteit van de verschillende processtappen weer, waarin de invloeden van doorzet, constructiemateriaal, verblijftijd, druk en temperatuur verwerkt zijn. Verder is N het aantal benodigde processtappen en P de productie, die wordt uitgedrukt in kton per jaar. C_I is de EPE-index, die in 1977 vastgesteld is op 300. Deze bedraagt in 1990 echter 790. Uit de literatuur

[29] kunnen nu de prijsindices voor 1992 en 1990 bepaald worden (respectievelijk 219 en 201). Hiermee wordt nu de gecorrigeerde EPE-index (C_i) van 861 bepaald.

Voor elke processtap kan nu de score (S_i) en vervolgens de costliness factor (f) berekend worden. Hiervoor dient het proces in verschillende processtappen te worden onderverdeeld. De belangrijkste stappen in het proces zijn de syngasproductie, de kooldioxideverwijdering, de compressiesectie, het MAS-proces, de condensatiesectie en de distillatiesectie. De stoffen, die de costlinessfactor ook bepalen, zijn de volgende: de ingangskomponenten (aardgas, stikstof en zuurstof), het produkt (MAS) en nog vijf stromen, die gespuid of gerecycled worden (bijlage 10).

Voor de costliness factor (f) wordt een waarde van 62.77 gevonden. Bij een productie van 455 kton per jaar wordt berekend, dat I_B gelijk is aan 182 miljoen dollar, wat overeen komt met 346 miljoen gulden (1 dollar was in 1992 1.90 gulden). De totale investeringen zijn dan 540 miljoen gulden.

Er wordt gekozen om de totale investeringen te berekenen met behulp van de methode van Taylor, omdat deze methode een iets grotere nauwkeurigheid heeft ten opzichte van de methode van Zevnik-Buchanan.

9.2. De produktiekosten

De totale produktiekosten zijn opgebouwd uit fabricagekosten (productievolume afhankelijk), investeringskosten, semi-variabele kosten (bijv. loon), algemene kosten en de plant overhead. Voor de eenvoud worden de algemene kosten en de plant overhead gevoegd bij de investeringskosten en de semi-variabele kosten volgens een bepaalde verdeelsleutel. Een veel gebruikt model is het volgende ("het beste model"):

$$K_T = 1.13 \cdot K_p + 2.6 \cdot L + 0.13 \cdot I \quad (9.6)$$

Hierin zijn K_T de totale produktiekosten, K_p de productievolume afhankelijke kosten, L de loonkosten en I de investeringsafhankelijke kosten. De rente en afschrijvingen worden in dit model niet meegerekend.

De berekening van de kosten is terug te vinden in bijlage 11. De productie afhankelijke kosten bestaan uit grond-, hulpstoffen en utilities (lage druk stoom, koelwater en electriciteit) en het proceswater. De katalysator gaat één jaar mee. De aankoop prijs van zuurstof wordt verondersteld gelijk te zijn aan 306 gulden per ton. Dit is echter een schatting, omdat er vaak een zuurstofplant bij een proces, waarin zuurstof in grote hoeveelheid nodig is, wordt gebouwd.

Voor de berekening van de loonkosten wordt gebruik gemaakt van de afgeleide relatie van Wessel:

$$L = 32 \cdot N \cdot C^{0.24} \quad (9.7)$$

L is de totale loonsom in kf , N het aantal processtappen en C de capaciteit in kton per jaar. Deze relatie geldt voor een continu proces in 1986 op basis van 350 kf per functieplaats.

Voor het aantal stappen is zes genomen (syngasproductie, kooldioxide absorptie, compressie, MAS-productie, decompressie, scheidingssectie). De productiecapaciteit is 455 kton/j. Voor de totale loonsom wordt een waarde gevonden van 834 duizend gulden, wat overeen komt met 2.4 functieplaatsen.

De totale produktiekosten (K_T) kunnen nu berekend worden met bovenstaande gegevens. De totale kosten zijn gelijk aan 464 miljoen gulden. Bij de berekening van de kosten is echter geen rekening gehouden met de rente en de afschrijvingen. De baten, die hier tegenover staan, bestaan alleen uit de verkoop van het MAS-produkt. De verkoopprijs van het MAS-produkt is niet terug te vinden in de literatuur, omdat het een mengsel betreft. Er zou winst gemaakt worden, als het MAS-produkt verkocht wordt voor 1800 gulden per ton. Dit lijkt ons een aannemelijke prijs. Er wordt dan een winst gemaakt van 52 miljoen gulden per jaar.

9.3. De rentabiliteit

Bij de keuze voor het (verder) ontwikkelen van een procesontwerp spelen naast de procestechnologische aspecten ook de economische criteria een rol, of het proces wordt al dan niet wordt uitgevoerd. Om de economische criteria te toetsen zijn verschillende methoden voor handen. Hierin wordt een onderverdeling gemaakt in een statische methode, zoals return on investment (ROI) en een dynamische methode, zoals internal rate of return (IRR).

Een veel gebruikte methode in de ontwerpfase is de return on investment (ROI), omdat deze erg geschikt voor de vergelijking met procestechnologische alternatieven met gelijke levensduur en productiepatroon. Deze methode geeft het percentage van de totale investeringen, dat jaarlijks wordt terug verdiend. Nadelen van deze methode zijn, dat er geen rekening gehouden wordt met de waarde van geld in de tijd en dat er geen rekening gehouden wordt met de variatie van opbrengst en kosten in de tijd. Wanneer de fabriek een looptijd van tien jaar zou hebben, dan zou de minimale ROI gelijk moeten zijn aan 10% om toch winst te maken. De return on investment wordt berekend door de jaarlijkse winst te delen door de investeringen, bestaande uit fixed capital (I_F) en het werkkapitaal (I_W). Bij dit ontwerp wordt nu een ROI van 11.2% berekend.

Op grond van deze berekening zou het economisch aantrekkelijk dit proces uit te voeren. Er kunnen echter geen al te veel conclusies aan de berekening verbonden worden. Dit komt, omdat de jaarlijkse winst gebaseerd op de produktiekosten en een aangenomen verkoopprijs. Bij de produktiekosten wordt geen rekening gehouden met de rente en de afschrijvingen.

Een andere methode, die gebruikt kan worden om de rentabiliteit te bepalen, is de internal rate of return (IRR), ook wel discounted cash-flow rate of return (DCFRR) genoemd. Bij deze methode worden de cash-flows, waaronder de investeringen, over de looptijd van het project (10 jaar) omgerekend op de huidige waarde met een zodanig return percentage (r), dat de som van de verdisconteerde cash-flows gelijk is aan nul. De IRR-analyse houdt in tegenstelling tot ROI wel rekening met de waardeverandering van geld in de tijd. De berekening van de IRR is iteratief van karakter.

Om het netto cash-flowverloop te bepalen dient eerst de capital charge bepaald te worden. Dit is een factor, waarmee de waarde van de fabriek aan het begin van afschrijffperiode moet worden vermenigvuldigd om de jaarlijkse kosten aan rente en afschrijving te bepalen. Voor de berekening

van de capital charge en de netto cash-flow wordt verwezen naar bijlage 12. De capital charge, die gevonden wordt, is gelijk aan 22.6%. Vervolgens kan nu IRR berekend worden (bijlage 12). De berekende IRR is nu gelijk aan 10.534%, indien wordt aangenomen, dat de jaarlijks gemiddelde, verdisconteerde winst 10% bedraagt. Wanneer de IRR groter is dan de minimale rendementseis (10% winst), dan is het economisch aantrekkelijk om deze investering te doen (de eerste vraag van Lorie en Savage) [32].

Volgens de methode voor de return on investment (ROI) blijkt, dat het proces economisch rendabel is. In de berekening voor de bepaling van IRR is echter aangenomen, dat het MAS-produkt voor 1800 gulden per ton verkocht kan worden. Wanneer de internal rate of return (IRR) bepaald wordt, dan blijkt het MAS-proces tevens haalbaar te zijn. Deze methode is alleen gebaseerd op de totale investeringen. De totale investeringskosten worden niet gedetailleerd berekend, maar globaal. Wanneer de berekening gedetailleerder uitgevoerd wordt, kunnen de totale investeringen hoger of lager uitkomen. Het is dus moeilijk te zeggen, of het proces op economische gronden wel of niet uitgevoerd dient worden. Om deze reden is het zeker de moeite waard om dit proces aan een nadere, economische analyse te onderwerpen.

10. CONCLUSIE EN AANBEVELINGEN

Bij het doorrekenen van het MAS-proces van Snamprogetti, is uitgegaan van een productiecapaciteit van 0.5 miljoen ton MAS-produkt per jaar. In het ontwerp is vooral aandacht besteed aan de synthesesegasproductie volgens het 'Shell Gasification Process' (SGP) en aan het simuleren van de daadwerkelijke MAS-reactoren. Er is in mindere mate gekeken naar de CO₂-verwijdering volgens het Giammarco-Vetrocoke proces.

De reden dat minder aandacht wordt besteed aan de CO₂-verwijdering, is dat tijdens het literatuuronderzoek werd gevonden, dat bij het Giammarco-Vetrocoke proces koolstofdioxide vrijwel volledig uit de stromen verwijderd wordt. Tijdens de simulatie is vervolgens uitgegaan van een volledig CO₂ vrije synthesesegas-stroom. Uiteindelijk is geprobeerd om deze sectie alsnog te implementeren, maar dit bleek gezien de resterende tijd en de complexiteit van deze sectie, niet meer mogelijk.

Aan de ten doel gestelde capaciteit is voldaan, tevens is de alcoholverhouding van het produkt zoals gespecificeerd. In het MAS-produkt is echter een maximale hoeveelheid water toegestaan van 0.1 gewichtsprocent. Het lukte ons niet om deze hoeveelheid lager te krijgen dan 0.4 gewichtsprocent. De zuiverheidseis van het MAS-produkt is niet gehaald. De reden hiervoor is, dat er nogal wat problemen optraden bij het simuleren van de opwerkingssectie. Dit probleem zou verholpen kunnen worden, wanneer de distillatietorens intensiever doorgerekend zouden worden.

Een ander aspect, waaraan bij het verder ontwerpen gezien de hoge druk veel aandacht besteed moet worden, is het mechanische ontwerp van de MAS-reactoren en de warmtewisselaars vóór iedere MAS-reactor. Ook het veiligheidsaspect dient bij deze hoge druk veel aandacht te krijgen, omdat een brandbaar en explosief mengsel onder hoge druk aanwezig is.

Om de rentabiliteit van het proces te verhogen is het beter om de opwerking onder druk uit te voeren. Hiermee wordt bedoeld, dat de druk voor de opwerkingssectie niet helemaal tot atmosferische druk wordt verlaagd. De rest van de druk daalt in de distillatiesectie, naarmate de opwerking verder gevorderd is.

Tevens dient er bij een volgend ontwerp aandacht geschonken te worden aan de condensor, waarbij gekoeld wordt met fluormethaan (CH₃F). Deze zou beter gespecificeerd kunnen worden en ook kan er misschien voor een ander koelmiddel gekozen worden.

Uit de economische analyse blijkt dat het proces economisch rendabel kan zijn. Met een verkoopprijs van 1800 gulden per ton MAS-produkt wordt een winst van 52 miljoen gulden per jaar behaald .

11. SYMBOLENLIJST

A	Totaal uitwisselend oppervlak	m^2
A.	Dwarsoppervlak	m^2
$A_{1 \text{ tube}}$	Dwarsoppervlak van één buis	m^2
A_i	Oppervlak van de interface	m^2
A_{tot}	Totale dwarsoppervlak van de buizen	m^2
BC	Ruimte tussen de buizen	m
C	Constante afhankelijk van het fluïdum	-
C_p	Soortelijke warmte	$\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
D	Diameter van de reactor	m
D.	Diffusie coëfficiënt	$m^2 \cdot s^{-1}$
D_b	Bundel diameter	m
D_C	Kolom diameter	m
D_s	Mantel diameter	m
d_d	Druppel diameter	m
d_e	Equivalente diameter	m
d_i	Inwendige buis diameter	m
d_o	Uitwendige buis diameter	m
F_{LV}	Kolom gas-vloeistof factor	-
F_p	Pakkings factor	-
F_t	Temperatuur correctie factor	-
f_1	Vloeistof viscositeit correctie factor	-
f_2	Vloeistof dichtheid correctie factor	-
f_3	Oppervlakte spanning correctie factor	-
G.	Massa snelheid	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
g	Valversnelling	$\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$
H	Hoogte van de reactor	m
ΔH_{vap}	Verdampingswarmte	$\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1}$
H_G	Hoogte van de gasfase overdrachts unit	m
H_L	Hoogte van de vloeistoffase overdrachts unit	m
H_{OG}	Hoogte van de totale gasfase overdrachts unit	m
h	Hoogte van het vloeistofoppervlak boven het middelpunt van de mantel	m
h_{cb}	Warmteoverdrachtscoëfficiënt van het condensaat voor een bundel	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
h_i	Warmteoverdrachtscoëfficiënt film, buisfluïdum	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
h_{id}	Vervuilings factor binnenzijde	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
h_{nb}	Kookkerncoëfficiënt	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
h_o	Warmteoverdrachtscoëfficiënt film, mantelfluïdum	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
h_{od}	Vervuilings factor buitenzijde	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
j_r	Frictie factor	-

j_h	Warmteoverdrachts factor	-
K_b	Conctante voor de bepaling van de warmteflux	-
K_1	Constante voor de bepaling van het aantal buizen	-
K_3	Percentage 'flooding' correctie factor	-
K_4	Parameter	-
k_f	Thermische geleidbaarheid van het fluïdum	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
k_w	Thermische geleidbaarheid van het buiswandmateriaal	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
L	Lengte van de buizen	m
L_c	Volume debiet continue fase	$m^3 \cdot s^{-1}$
L_w	Massastroom vloeistof	$kg \cdot s^{-1}$
\dot{L}_w	Massastroom vloeistof per oppervlakte eenheid	$kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
l_B	Afstand tussen de keerschotten	m
M_{stoom}	Stoomdebiet	$kg \cdot s^{-1}$
M_w	Moleculair gewicht	$kg \cdot kmol^{-1}$
N_{av}	Aantal buizen in de verticale rij	-
N_r	Aantal buizen in de centrale rij	-
N_t	Aantal buizen in de bundel	-
n_1	Constante voor de bepaling van het aantal buizen	-
ΔP	Drukval	Pa
p_t	Afstand tussen de buizen	m
Q	Warmteoverdracht	W
q	Warmteflux	$W \cdot m^{-2}$
q_{cb}	Critische warmteflux	$W \cdot m^{-2}$
q_{max}	Maximaal toelaatbare warmteflux	$W \cdot m^{-2}$
R	Dimensieloze temperatuur verhouding	-
r	Straal van de mantel	m
S	Dimensieloze temperatuur verhouding	-
s	Vloeistofoppervlak	m^2
ΔT	Temperatuurverschil	K
ΔT_{lm}	Logaritmisch temperatuurverschil	K
ΔT_m	Gecorrigeerd logaritmisch temperatuurverschil	K
$T_{b, stoom}$	Kookpunt van de stoom	K
T_{mean}	Gemiddelde temperatuur van het condensaat	K
T_s	Gemiddelde temperatuur van het mantelfluïdum	K
T_w	Temperatuur aan de wand	K
T_1	Ingangstemperatuur van het mantelfluïdum	K
T_2	Uitgangstemperatuur van het mantelfluïdum	K

t_t	Gemiddelde temperatuur van het buisfluïdum	K
t_1	Ingangstemperatuur van het buisfluïdum	K
t_2	Uitgangstemperatuur van het buisfluïdum	K
t_{water}	Gemiddelde temperatuur van het water	K
U	Totale warmteoverdrachtscoëfficiënt	$\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$
U_o	Totale warmteoverdrachtscoëfficiënt	$\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$
u	Snelheid van het fluïdum	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
u_c	Snelheid van de druppel in de continue fase	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
u_d	Snelheid van de druppel in de disperse fase	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$u_{v,\text{max}}$	Maximale dampsnelheid	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
V	Volume van de reactor	m^3
V_w	Massastroom stoom	$\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$
V_w^*	Massastroom stoom per oppervlakte eenheid	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
W	Massastroom	$\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$
w	Breedte van de interface	m
Z	Hoogte van de pakking	m
z_1	Hoogte van de grond tot de overflow van de lichte vloeistof	m
z_2	Hoogte van de grond tot de overflow van de zware vloeistof	m
z_3	Hoogte van de grond tot de interface	m
Nu.	Nusselt kental	-
Pr.	Prandtl kental	-
Re.	Reynolds kental	-
Sc.	Schmidt kental	-
Γ	Massastroom per lengte eenheid	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
δ	Wanddikte van de buizen	m
η	Viscositeit	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
ρ	Dichtheid	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
σ	Oppervlaktespanning	$\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$
τ	Verblijftijd	h
Φ	Massadebiet	$\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$
Φ_h	Factor in H_L	-
Φ_v	Volumedebiet gas	$\text{m}^3\cdot\text{h}^{-1}$
Ψ_h	Factor in H_G	-

Subscript *:

alc	alcohol
c	condensaat
L,l	vloeistof
s	shell
t	tube
V,v	gas
w	water

12. LITERATUURLIJST

1. W.H. Cheng, H.H. Kung (Eds.), Methanol Production and Use, New York, 1994 (293).
2. J.A. Moulijn, M. Makkee, Process Technology (ST301), Delft, augustus 1993.
3. J.A. Wesselingh, G.H. Lameris, P.J. van den Berg, A.G. Montfoort, Van Aardgas naar Methanol, 1990.
4. A. Elsayy, D. Gray, Evaluation of synthesis gas based high octane oxygenates (The Mixed Alcohols Option), Presented to DOE/PETC Indirect Liquefaction Contractor's Review Meeting, 15-17 november 1988.
5. L. Morton, N. Hunter, H. Gesser, Methanol, A Fuel for Today and Tomorrow, Chemistry & Industry, 16 juli 1990 (457-462).
6. D.C. Erickson, Oxygen production by the Moltox process, Chemical Engineering, **90**(2), 17 oktober 1983 (28-29).
7. P.D.F. Vernon et al, Partial oxidation of Methane to Synthesis Gas, Catalysis Letters **6**, 1990 (181-186).
8. E. Tronconi et al, Synthesis of Alcohols from Carbon Oxides and Hydrogen. 4. Lumped Kinetics for the Higher Alcohol Synthesis over a Zn-Cr-K Oxide Catalyst, Industrial & Engineering Chemistry Research **26**, 1987 (2122-2129).
9. E. Jennett, Six case studies throw light on the GIAMMARCO-VETROCOKE PROCESS, The Oil and Gas Journal, 30 april 1962 (72-77).
10. G-Groep, CO₂-verwijdering uit afgas - Studie naar CO₂-verwijdering bij een hoogovengas-gestookte energiecentrale, 1991 (33-42).
11. A.F.M. Barton, Solubility Data Series (Volume 15: Alcohols with Water), Pergamon Press, Oxford, 1984.
12. G.M. Wells, Handbook of Petrochemicals and Processes, 1991 (236-241).
13. Lurgi Gas Production Technology: The Shell Gasification Process, folder Shell Den Haag.
14. A. Paggini et al., Implementation of the methanol plus higher alcohols process by SNAM Progetti, Enichem, Haldor Topsoe a/s "MAS Technology", Proceedings of International Symposium on Alcohol Fuels Technology **7**, 1986 (62-67).
15. R. Ricci et al., The Production of Methanol and Higher Alcohols from Synthesis Gas, Snamprogetti S.p.A., Assoreni, Milan.
16. MAS Technology (Methanol and Higher Alcohols), folder Snamprogetti.
17. F. Monti, F. Morandi, M. Sposini, Retail Distribution of MAS Blended Gasoline in the Commercial Network: First Large Scale Experience.
18. E. Tronconi et al., Mechanistic Kinetic Treatment of the Chain Growth Process in Higher Alcohol Synthesis over a Cs-Promoted Zn-Cr-O Catalyst, Journal of Catalysis **135**, 1992 (99-114).
19. E. Tronconi et al., A Mechanistic Kinetic Model for the Distribution of C₂⁺ Oxygenate Products in the Higher Alcohol Synthesis, Catalytic Science and Technology **1**, 1991 (255-260).
20. V. Fattore et al., Catalytic System and Proces for Producing a Mixture of Methanol and Higher Alcohols, US Patent 4,778,827, 18 oktober 1988.
21. A.A. Plakidkin, Study by Thermal Desorption of the Adsorption of Methanol on Zinc-Chromium and Zinc-Chromium-Potassium Catalysts, Russian Journal of Physical Chemistry

- 58(6), 1984 (934-936).
22. Hydrocarbon Processing's Gas Process Handbook '90, Hydrocarbon Processing, April 1990 (79).
 23. J.H. Brophy, Process for Producing Synthesis Gas by Partial Combustion of Hydrocarbons, WO 85/05094, 21 november 1985.
 24. J.M. Coulson, J.f. Richardson, R.K. Sinnott, Chemical Engineering, Volume 6, Design, Pergamon Press, 1991.
 25. A.G. Montfoort, De Chemische Fabriek, deel 2: Cost-engineering en economische aspecten, TU Delft, december 1991.
 26. B.H. Bibo, P. Bos, S.M. Lemkowitz, Chemical Risk Management, Delft 1993.
 27. G. Staphanopoulos, Chemical Process Control: an Introduction to Theory and Practice, Englewood Cliffs, New Jersey 1984.
 28. Chemstations Inc., Chemcad III Process Flowsheet Simulator User's Manual (versie 3.0), Houston.
 29. Nederlandse Stichting voor Kostentechniek (Ed), WEBCI/WUBO prijzenboekje ten behoeve van ramingen, Leidschendam 1992.
 30. D.R. Lide, Handbook of Chemistry and Physics (75thed.), CRC Press, 1994.
 31. L.P.B.M. Janssen, M.M.C.G. Warmoeskerken, Transport Phenomena Data Companion, DUM, Delft 1991.
 32. P.C. van Aalst et al., Financiering en belegging, deel1, Rhobeta Consultants, 1994.

	CH ₄ (g)	CO (g)	H ₂ (g)	H ₂ O (l)	MeOH (l)	EtOH (l)	n-PrOH (l)	n-BuOH (l)	n-PeOH (l)	CO ₂ (g)	C ₆ H ₁₂ (l)	N ₂ (g)	O ₂ (g)
M [g/mol]	16.04	28.01	2.02	18.02	32.04	46.07	60.10	74.12	88.1	44.01	84.16	28.02	32.00
T _b [K]	111.65	81.65	20.35	373.15	338.15	351.65	370.55	390.9	411.15	194.7	353.85	77.35	90.15
T _m [K]	90.7	68.1	14.0	273.15	175.5	159.1	146.9	183.9	195.0	216.6	279.7	63.3	54.4
η [10 ⁻³ Pa·s] ¹	11·10 ⁻³		8.90·10 ⁻³	1.002	0.584	1.201	2.231			14.8·10 ⁻³		17.7·10 ⁻³	20.5·10 ⁻³
ρ [kg·m ⁻³] ¹	0.657		0.082	998	792	789	804			1.81		1.15	1.31
c _p [kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹] ¹	2.23		14.3	4.185	2.50	2.40	2.35			0.846		1.04	0.913
λ [W·m ⁻¹ ·K ⁻¹] ¹	35·10 ⁻³		190·10 ⁻³	0.596	0.202	0.167	0.158			16·10 ⁻³		26·10 ⁻³	27·10 ⁻³
a [10 ⁻⁹ m ² ·s] ¹	24·10 ³		162·10 ³	143	102.0	88.2	83.6			10·10 ³		21·10 ³	23·10 ³
Pr [-] ¹	0.70		0.67	7.03	7.23	17.3	33.2			0.78		0.71	0.69
γ [10 ⁻³ K ⁻¹] ¹					0.21	1.19	1.10	0.98					
σ [10 ⁻³ N·m ⁻¹] ¹					72.8	22.6	22.8	23.8					
D [10 ⁻⁶ m ² ·s ⁻¹] ²			41.0	25.6	15.9	11.9				16.4			20.6
c _p ⁰ [J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹] ³				75.30	81.60								
	g	35.64	29.14	28.84	33.58	43.89				37.13		29.12	29.37
S ⁰ [J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹] ³				69.94	126.78								
	g	186.15	197.54	130.57	188.72	239.70				219.69		191.50	205.03
ΔH _f ⁰ [kJ·mol ⁻¹] ³				-285.84	-238.57								
	g	-74.87	-110.53	---	-241.83	-201.17				-393.52		---	---
ΔG _f ⁰ [kJ·mol ⁻¹] ³				-237.19	-166.23								
	g	-50.81	-137.16	---	-228.60	-162.51				-394.40		---	---
ΔH _{vap} [10 ⁶ J·kg ⁻¹] ⁴				2.26	1.11	0.841							
vlampunt [K]						284.15	285.15	288.15	308.15	306.15		255.15	
zelfontbranding [K]	810.15	878.15			728.15	643.15	678.15	613.15	573.15		533.15		
explosiegrenzen [%] ⁵	5-16	12-75	4-76		5.5-36.5	3.4-19	2.1-13.5	1.4-11.3	1.3-10.5		1.2-8.4		

¹ bij 20°C voor (l), bij 25°C voor (g)

² D = diffusiecoëfficiënt in lucht, bij atmosferische druk en 25°C

³ bij 298.15 K



⁴ uit Binas (blz 22)

⁵ %-volume in lucht

BIJLAGE B2: Chemiekaarten

1. Methaan
2. Koolstofmonoxide
3. Waterstof
4. Methanol
5. Ethanol
6. Propanol
7. Butanol
8. Pentanol
9. Koolstofdioxide
10. Cyclohexaan
11. Stikstof
12. Zuurstof

METHAAN
(drukhouder)




FYSISCHE EIGENSCHAPPEN	BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C – 162 Smeltpunt, °C – 182 Vlampunt, °C brandbaar gas Zelfontbrandingstemperatuur, °C 537 Relatieve dampdichtheid (lucht = 1) 0,6 Oplosbaarheid in water niet Explosiegrenzen, volume% in lucht 4,4-16 Minimum ontstekingsenergie, mJ 0,28 Relatieve molecuulmassa 16 Brutoformule: CH ₄	KLEURLOOS REUKLOOS SAMENGEPERST GAS Het gas is lichter dan lucht. MAC-waarde niet vastgesteld Wijze van opname: De stof kan worden opgenomen in het lichaam door inademing. Dit gas kan bij vrijkomen door verdringing van de lucht verstikkend werken.	
DIRECTE GEVAREN/ VERSCIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP
Brand: zeer brandgevaarlijk.	geen open vuur, geen vonken en niet roken.	toevoer afsluiten, indien niet mogelijk en geen gevaar voor omgeving, laten uitbranden, anders blussen met poeder, koolzuur, (halonen).
Explosie: gas met lucht explosief.	gesloten apparatuur, ventilatie, explosie veilige elektrische apparatuur en verlichting, aarden, vonkarm gereedschap.	bij brand: drukhouder koel houden door spuiten met water, brand bestrijden vanuit beschutte plaats.
Inademen: ademnood, hoofdpijn, sufheid, bewusteloosheid.	ventilatie, ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, onder geen beding filtermaskers.	frisse lucht, rust, zo nodig beademing, en naar ziekenhuis vervoeren.
Ogen:	gelaatsscherm.	
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA
ventilatie, (extra persoonlijke bescherming: persluchtmasker).	brandveilig, koel, ventilatie. WCA: D 5 KCA: VI	R: 12 S: 9-16-33  Zeer licht ontvlambaar 

OPMERKINGEN

Bij hoge concentraties in de lucht, bijvoorbeeld in een slecht geventileerde ruimte, ontstaat zuurstofgebrek met kans op bewusteloosheid. Na gebruik als lasgas afsluiter dichtdraaien; slangen en leidingen regelmatig controleren; aansluitingen afzepen. Deze maatregelen zijn van toepassing in alle gevallen waarbij gas kan vrijstromen en bij opslag. De maatregelen op deze kaart gelden ook voor aardgas (drukhouder). Drukhouder met speciale appendages toepassen.



KOOLMONOXIDE

(drukhouder)




FYSISCHE EIGENSCHAPPEN	BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C - 191 Smeltpunt, °C - 205 Vlampunt, °C brandbaar gas Zelfontbrandingstemperatuur, °C 605 Relatieve dampdichtheid (lucht = 1) 0,97 Dampspanning, bar bij 20 °C 58,8 Oplosbaarheid in water niet Explosiegrenzen, volume% in lucht 11,0-75 Minimum ontstekingsenergie, mJ 0,1 Relatieve molecuulmassa 28,0	KLEURLOOS EN REUKLOOS SAMENGEPERST GAS Het gas mengt zich goed met lucht, makkelijke vorming van explosieve mengsels.	
	Brutoformule: CO	MAC-waarde 25 ppm 29 mg/m ³ MAC TGG-15 min. *
DIRECTE GEVAREN/ VERSCIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP
Brand: zeer brandgevaarlijk.	geen open vuur, geen vonken en niet roken.	toevoer afsluiten, indien niet mogelijk en geen gevaar voor omgeving, laten uitbranden, anders blussen met poeder, koolzuur, (halonen).
Explosie: gas met lucht explosief.	gesloten apparatuur, ventilatie, explosie veilige elektrische apparatuur en verlichting, vonk-arm gereedschap.	bij brand: drukhouder koel houden door spuiten met water, brand bestrijden vanuit beschutte plaats.
Inademen: hoofdpijn, duizeligheid, bewusteloosheid.	ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, ademhalingsbescherming (filtertype CO).	frisse lucht, rust, beademing, zuurstof toedienen en onmiddellijk naar ziekenhuis vervoeren.
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA
omgeving ontruimen, deskundige waarschuwen, ventilatie, (extra persoonlijke bescherming: persluchtmasker).	brandveilig, koel. KCA: VI	R: 12-23 S: 7-16  Licht ontvlambaar  Vergiftig 
OPMERKINGEN		
Bij vergiftiging door koolmonoxide is specifieke eerste hulp noodzakelijk. De benodigde middelen met gebruiksaanwijzing moeten beschikbaar zijn. Opname in een ziekenhuis is altijd noodzakelijk wanneer verschijnselen optreden. * Voor werkperiodes korter dan 8 uur per dag zijn de volgende concentraties toegestaan: MAC TGG-15 min.: 150 ppm (174 mg/m ³); MAC TGG-30 min. 120 ppm (139 mg/m ³); MAC TGG-60 min.: 60 ppm (70 mg/m ³), mits gedurende de werkdag bij de arbeid geen verdere blootstelling plaatsvindt. Reukloos, dus gemakkelijke overschrijding van de MAC-waarde zonder dat dit waargenomen wordt. Koolmonoxide ontstaat bij onvolledige verbranding van bijvoorbeeld kolen, olie, hout en vele organische chemicaliën. Zie voor inertisering van explosieve gas, damp/luchtmengsels het Chemiekaartenboek hoofdstuk 'Tabellen en formules'. In PUBLIKATIEBLAD P 67 van de Arbeidsinspectie worden instructies gegeven voor het veilig werken met koolmonoxide.		
Transport Emergency Card TEC(R)-20G05		GEVI: 236; VN-nummer: 1016

WATERSTOF



(drukhouder)

FYSISCHE EIGENSCHAPPEN	BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C – 253 Vlampunt, °C brandbaar gas Relatieve dampdichtheid (lucht = 1) 0,07 Oplosbaarheid in water niet Explosiegrenzen, volume% in lucht 4-76 Minimum ontstekingsenergie, mJ 0,01 Relatieve molecuulmassa 2,0	KLEURLOOS REUKLOOS SAMENGEPERST GAS Het gas is lichter dan lucht. Vormt met chloor zgn. chloorknalgas dat o.a. door UV licht ontstoken kan worden. Reageert heftig met acetyleen, distikstofoxide, stikstofoxide, fluor met kans op brand en explosie. Vormt met zuurstof of lucht het zgn. knalgas. MAC-waarde niet vastgesteld Wijze van opname: Dit gas kan bij vrijkomen door verdringing van de lucht verstikkend werken.	
Brutoformule: H ₂		
DIRECTE GEVAREN/ VERSCHIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP
Brand: zeer brandgevaarlijk.	geen open vuur, geen vonken en niet roken.	toevoer afsluiten, indien niet mogelijk en geen gevaar voor omgeving, laten uitbranden, anders blussen met poeder, koolzuur, (halonen).
Explosie: gas met lucht explosief.	gesloten apparatuur, ventilatie, explosieveilige elektrische apparatuur en verlichting, vonkarm handgereedschap.	bij brand: drukhouder koel houden door spuiten met water.
Inademen: ademnood, hoofdpijn, duizeligheid, bewusteloosheid.		frisse lucht, rust, zo nodig beademing, en naar ziekenhuis vervoeren.
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA
ventilatie.	brandveilig indien binnen een gebouw, ventilatie langs het plafond. KCA: VI	R: 12 S: 9-16-33  Zeer licht ontvlambaar 
OPMERKINGEN		
Bij hoge concentraties in de lucht, bijvoorbeeld in een slecht geventileerde ruimte, ontstaat zuurstofgebrek met kans op bewusteloosheid. Bij krachtig uitstromen van waterstof uit gasfles of in geval van gaslek kan in de lucht zelfontbranding optreden. Waterstof aantonen met geschikte explosiemeter. De gewone explosiemeter niet gebruiken. Bij opslag ventilatie op het hoogste punt.		
Transport Emergency Card TEC(R)-20G04 GEVI: 23; VN-nummer: 1049		

METHANOL

FYSISCHE EIGENSCHAPPEN		BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C 65 Smeltpunt, °C -98 Vlampunt, °C 11 Zelfontbrandingstemperatuur, °C 455 Relatieve dichtheid (water = 1) 0,8 Relatieve dampdichtheid (lucht = 1) 1,1 Relatieve dichtheid bij 20 °C van verzadigd damp/luchtmengsel (lucht = 1) 1,01 Dampspanning, mbar bij 20 °C 127 Oplosbaarheid in water volledig Explosiegrenzen, volume% in lucht 5,5 - 36,5 Minimum ontstekingsenergie, mJ 0,14 Relatieve molecuulmassa 32 Log P octanol/water -0,7		KLEURLOZE VLOEISTOF MET TYPERENDE GEUR De damp mengt zich goed met lucht, makkelijke vorming van explosieve mengsels. Bij vullen, aftappen of verwerken geen perslucht als drijfgas toepassen. Reageert heftig met oxidatiemiddelen.	
		MAC-waarde	200 ppm 260 mg/m ³ H
		Wijze van opname: De stof kan worden opgenomen in het lichaam door inademing, inslikken en via de huid. Directe gevolgen: De stof werkt prikkelend op de ogen, de huid en de ademhalingsorganen. De vloeistof ontvet de huid. In aanzienlijke concentraties kan de stof aanleiding geven tot bewustzijnsverlaging en stoornissen van het gezichtsvermogen. In ernstige gevallen kans op bewusteloosheid en dodelijke afloop.	
Brutoformule:	CH ₄ O		
DIRECTE GEVAREN/ VERSCHIJSSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP	
Brand: zeer brandgevaarlijk.	geen open vuur, geen vonken en niet roken.	poeder, alcoholbestendig schuim, zeer veel water, koolzuur, (halonen).	
Explosie: damp met lucht explosief.	gesloten apparatuur, ventilatie, explosie veilige elektrische apparatuur en verlichting, vonk-arm gereedschap.	bij brand: tanks/vaten koel houden door spuiten met water.	
Inademen: hoesten, hoofdpijn, duizeligheid, sufheid, bewusteloosheid.	ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, ademhalingsbescherming (filtertype AX).	frisse lucht, rust, en arts waarschuwen.	
Huid: wordt opgenomen, roodheid.	handschoenen.	verontreinigde kleding uittrekken, huid spoelen met veel water of douchen, en zonnodig naar arts verwijzen.	
Ogen: roodheid, slecht zien.	veiligheidsbril.	eerst langdurig spoelen met veel water (contactlenzen verwijderen mits makkelijk mogelijk), dan naar arts brengen.	
Inslikken: hoesten, diarree, buikkrampen, hoofdpijn, sufheid.		onmiddellijk naar ziekenhuis vervoeren.	
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA	
lekvloeistof opvangen in afsluitbare vaten, restant wegspoelen met veel water, (extra persoonlijke bescherming: persluchtmasker).	brandveilig, gescheiden van oxidatiemiddelen. WCA: D 6 KCA: III	R: 11-23/25 S: 2-7-16-24  Licht ontvlambaar  Vergiftig 	
OPMERKINGEN			
Iemand die overgevoeligheidsverschijnselen heeft gekregen door blootstelling aan methanol, dient in de toekomst elke blootstelling aan deze stof te vermijden. Specifieke eerste hulp en behandeling is noodzakelijk. De geur waarschuwt onvoldoende bij overschrijding van de MAC-waarde.			
Transport Emergency Card TEC(R)-36		GEVI: 336; VN-nummer: 1230	



ETHANOL

FYSISCHE EIGENSCHAPPEN	BELANGRIJKE GEGEVENS	
<p>Kookpunt, °C 78 Smeltpunt, °C - 117 Vlampunt, °C 12 Zelfontbrandingstemperatuur, °C 370 Relatieve dichtheid (water = 1) 0,8 Relatieve dampdichtheid (lucht = 1) 1,6 Relatieve dichtheid bij 20 °C van verzadigd damp/luchtmengsel (lucht = 1) 1,04 Dampspanning, mbar bij 20 °C 58,5 Oplosbaarheid in water volledig Explosiegrenzen, volume% in lucht 3,4-19 Soortelijke geleiding, pS/m 1,3 x 10⁵ Relatieve molecuulmassa 46,1 Log P octanol/water - 0,3</p> <p>Brutoformule: C₂H₆O</p>	<p>KLEURLOZE VLOEISTOF MET TYPERENDE GEUR De damp mengt zich goed met lucht, makkelijke vorming van explosieve mengsels. Bij vullen, aftappen of verwerken geen perslucht als drijfgas toepassen. Reageert heftig met oxidatiemiddelen met kans op brand en explosie.</p> <p>MAC-waarde 1000 ppm 1900 mg/m³</p> <p>Wijze van opname: De stof kan worden opgenomen in het lichaam door inademing en inslikken. Een voor de gezondheid gevaarlijke concentratie in de lucht zal door verdamping van deze stof bij 20 °C vrij langzaam worden bereikt; bij vernevelen echter veel sneller. Directe gevolgen: De stof werkt prikkelend op de ogen, de huid en de ademhalingsorganen. De vloeistof ontvet de huid. De stof kan in hoge concentraties of na inslikken aanleiding geven tot opwinding en/of bewustzijnsverlaging. Gevolgen bij langdurige, herhaaldelijke blootstelling: Leverbeschadigingen kunnen optreden na orale opname.</p>	
DIRECTE GEVAREN/ VERSCIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP
Brand: zeer brandgevaarlijk.	geen open vuur, geen vonken en niet roken.	poeder, alcoholbestendig schuim, zeer veel water, koolzuur, (halonen), bij brand in directe omgeving: alle blusstoffen toegestaan.
Explosie: damp met lucht explosief.	gesloten apparatuur, ventilatie, explosieveilige elektrische apparatuur en verlichting, vonk-arm handgereedschap.	bij brand: tanks/vaten koel houden door spuiten met water.
Inademen: hoesten, hoofdpijn, duizeligheid, sufheid.	ventilatie, ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, ademhalingsbescherming (filtertype A).	frisse lucht, rust, en zonodig arts waarschuwen.
Huid: roodheid.	handschoenen.	verontreinigde kleding uittrekken, huid spoelen met veel water of douchen.
Ogen: roodheid, pijn.	veiligheidsbril.	eerst langdurig spoelen met veel water (contactlenzen verwijderen mits makkelijk mogelijk), dan naar arts brengen.
Inslikken: hoofdpijn, duizeligheid, sufheid.		mond laten spoelen, en zonodig naar arts vervoeren.
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA
lekvloeistof opvangen in afsluitbare vaten, restant wegspoelen met veel water.	brandveilig, gescheiden van oxidatiemiddelen. WCA: D 6 KCA: III	R: 11 S: 7-16  Licht ontvlambaar 
OPMERKINGEN		
Vlampunt van oplossingen in water: 95 vol.%: 14 °C; 80 vol.%: 20 °C; 70 vol.%: 21 °C; 60 vol.%: 22 °C; 50 vol.%: 24 °C; 40 vol.%: 26 °C; 30 vol.%: 29 °C; 20 vol.%: 36 °C; 10 vol.%: 49 °C; 5 vol.%: 62 °C.		
Transport Emergency Card TEC(R)-32		GEVI: 33; VN-nummer: 1170

n-PROPANOL

FYSISCHE EIGENSCHAPPEN	BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C	97	<p>KLEURLOZE VLOEISTOF MET TYPERENDE GEUR De damp mengt zich goed met lucht, makkelijke vorming van explosieve mengsels. Bij vullen, aftappen of verwerken geen perslucht als drijfgas toepassen. Reageert heftig met oxidatiemiddelen met kans op brand en explosie. Reageert met alkali- en aardalkalimetalen onder vorming van <i>waterstof</i> (zie aldaar).</p> <p>MAC-waarde 200 ppm 500 mg/m³ H</p> <p>Wijze van opname: De stof kan worden opgenomen in het lichaam door inademing, inslikken en via de huid. Een voor de gezondheid gevaarlijke concentratie in de lucht zal door verdamping van deze stof vrij langzaam worden bereikt; bij vernevelen echter veel sneller. Directe gevolgen: De stof werkt prikkelend op de ogen, de huid en de ademhalingsorganen. De vloeistof ontvet de huid. In aanzienlijke concentraties kan de stof aanleiding geven tot bewustzijnsverlaging. In ernstige gevallen kans op bewusteloosheid.</p>
Smeltpunt, °C	-126	
Vlampunt, °C	15	
Zelfontbrandingstemperatuur, °C	405	
Relatieve dichtheid (water = 1)	0,8	
Relatieve dampdichtheid (lucht = 1)	2,1	
Relatieve dichtheid bij 20 °C van verzadigd damp/luchtmengsel (lucht = 1)	1,02	
Dampspanning, mbar bij 20 °C	19	
Oplosbaarheid in water	volledig	
Explosiegrenzen, volume% in lucht	2,1-13,5	
Soortelijke geleiding, pS/m	9,2 · 10 ⁵	
Relatieve molecuulmassa	60,1	
Log P octanol/water	0,3	
Brutoformule:	C ₃ H ₈ O	

DIRECTE GEVAREN/ VERSCHIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP
Brand: zeer brandgevaarlijk.	geen open vuur, geen vonken en niet roken.	poeder, alcoholbestendig schuim, zeer veel water, koolzuur, (halonen).
Explosie: damp met lucht explosief.	gesloten apparatuur, ventilatie, explosieveilige elektrische apparatuur en verlichting.	bij brand: tanks/vaten koel houden door spuiten met water.
Inademen: hoesten, kortademigheid, sufheid, bewusteloosheid.	ventilatie, ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, ademhalingsbescherming (filtertype A).	frisse lucht, rust, en zo nodig arts waarschuwen.
Huid: wordt opgenomen, roodheid.	handschoenen.	verontreinigde kleding uittrekken, huid spoelen met veel water of douchen, en zo nodig arts waarschuwen.
Ogen: roodheid, pijn.	veiligheidsbril.	eerst langdurig spoelen met veel water (contactlenzen verwijderen mits makkelijk mogelijk), dan naar arts brengen.
Inslikken: buikpijn, sufheid.		mond laten spoelen, en zo nodig arts waarschuwen.

OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA
lekvloeistof opvangen in afsluitbare vaten, morsvloeistof opnemen in zand of inert absorptiemiddel en naar veilige plaats afvoeren.	brandveilig, gescheiden van oxidatiemiddelen. WCA: D 6 KCA: III	R: 11 S: 7-16 Nota C  Licht ontvlambaar 



OPMERKINGEN

Gebruik van alcoholische dranken versterkt de schadelijke werking.



Transport Emergency Card TEC(R)-543

GEVI: 33; VN-nummer: 1274

n-BUTANOL

FYSISCHE EIGENSCHAPPEN	BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C 118 Smeltpunt, °C -89 Vlampunt, °C 35 Zelfontbrandingstemperatuur, °C 340 Relatieve dichtheid (water = 1) 0,8 Relatieve dampdichtheid (lucht = 1) 2,6 Relatieve dichtheid bij 20 °C van verzadigd damp/luchtmengsel (lucht = 1) 1,01 Dampspanning, mbar bij 20 °C 7 Oplosbaarheid in water, g/100 ml bij 20 °C 8 Explosiegrenzen, volume% in lucht 1,4-11,3 Soortelijke geleiding, pS/m 9,1 x 10 ⁵ Relatieve molecuulmassa 74,1 Log P octanol/water 0,9	KLEURLOZE VLOEISTOF MET TYPERENDE GEUR Reageert heftig met oxidatiemiddelen en met alkalimetalen onder vorming van brandbaar gas (<i>waterstof</i> , zie aldaar). Tast vele kunststoffen aan. MAC-waarde 50 ppm 150 mg/m ³ C H Wijze van opname: De stof kan worden opgenomen in het lichaam door inademing, inslikken en via de huid. Een voor de gezondheid gevaarlijke concentratie in de lucht kan door verdamping van deze stof bij ca. 20 °C vrij snel worden bereikt; bij vernevelen nog sneller. Directe gevolgen: De stof werkt prikkelend op de ogen, de huid en de ademhalingsorganen. De vloeistof ontvet de huid. In aanzienlijke concentraties kan de stof aanleiding geven tot bewustzijnsverlaging. In ernstige gevallen kans op bewusteloosheid.	
Brutoformule: C ₄ H ₁₀ O		
DIRECTE GEVAREN/ VERSCHIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP
Brand: brandgevaarlijk. Explosie: boven 35 °C: damp met lucht explosief. Inademen: keelpijn, hoesten, kortademigheid, sufheid. Huid: <i>wordt opgenomen</i> , roodheid. Ogen: roodheid, pijn, slecht zien. Inslikken: buikpijn, diarree, braken.	geen open vuur, geen vonken en niet roken. boven 35 °C gesloten apparatuur, ventilatie, explosie veilige elektrische apparatuur. ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, ademhalingsbescherming (filtertype A). handschoenen. veiligheidsbril.	poeder, A.F.F.F., schuim, koolzuur, (halonen). bij brand: tanks/vaten koel houden door spuiten met water. frisse lucht, rust, halfzittende houding, en arts waarschuwen. verontreinigde kleding uittrekken, huid spoelen met veel water of douchen. eerst langdurig spoelen met veel water (contactlenzen verwijderen mits makkelijk mogelijk), dan naar arts brengen. mond laten spoelen, en arts waarschuwen of naar ziekenhuis vervoeren.
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA
lekvloeistof opvangen in afsluitbare vaten, morsvloeistof opnemen in zand of inert absorptiemiddel en naar veilige plaats afvoeren, (extra persoonlijke bescherming: persluchtmasker).	brandveilig, gescheiden van oxidatiemiddelen en alkalimetalen. WCA: D 6 KCA: III	R: 10-20 S: 16 Nota C  Schadelijk 
OPMERKINGEN		
Gebruik van alcoholische dranken versterkt de schadelijke werking. De MAC-waarde geldt hier als maximum dat niet mag worden overschreden.		
Transport Emergency Card TEC(R)-583		GEVI: 30 ; VN-nummer: 1120

prim-n-AMYLALCOHOL



FYSISCHE EIGENSCHAPPEN		BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C	138	KLEURLOZE VLOEISTOF MET TYPENDE GEUR	
Smeltpunt, °C	-78	De damp mengt zich goed met lucht. Reageert heftig met oxidatiemiddelen met kans op brand en explosie. Reageert heftig met (aard)alkalimetalen onder vorming van brandbaar gas (<i>waterstof</i> , zie aldaar).	
Vlampunt, °C	33	MAC-waarde	
Zelfontbrandingstemperatuur, °C	300	niet vastgesteld	
Relatieve dichtheid (water = 1)	0,8	Wijze van opname: De stof kan worden opgenomen in het lichaam door inademing en inslikken. Een voor de gezondheid gevaarlijke concentratie in de lucht zal door verdamping van deze stof bij ca. 20 °C niet of slechts zeer langzaam worden bereikt; bij vernevelen echter veel sneller.	
Relatieve dampdichtheid (lucht = 1)	3,0	Directe gevolgen: De stof werkt prikkelend op de ogen, de huid en de ademhalingsorganen. In aanzienlijke concentraties kan de stof aanleiding geven tot bewustzijnsverlaging.	
Relatieve dichtheid bij 20 °C van verzadigd damp/luchtmengsel (lucht = 1)	1,01	Gevolgen bij langdurige, herhaaldelijke blootstelling: Leverbeschadigingen kunnen optreden.	
Dampspanning, mbar bij 20 °C	3,0		
Oplosbaarheid in water, g/100 ml	2,7		
Explosiegrenzen, volume% in lucht	1,3-10,5		
Soortelijke geleiding, pS/m	2,6 x 10 ⁷		
Relatieve molecuulmassa	88,1		
Log P octanol/water (berekend)	1,3		
Brutoformule:	C ₅ H ₁₂ O		
DIRECTE GEVAREN/ VERSCIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP	
Brand: brandgevaarlijk.	geen open vuur, geen vonken en niet roken.	poeder, A.F.F.F., alcoholbestendig schuim, koolzuur, (halonen).	
Explosie: boven 33 °C: damp met lucht explosief.	boven 33 °C gesloten apparatuur, ventilatie, explosie veilige elektrische apparatuur.	bij brand: tanks/vaten koel houden door spuiten met water.	
Inademen: hoesten, hoofdpijn, misselijkheid, sufheid.	ventilatie, ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, ademhalingsbescherming (filtertype A).	frisse lucht, rust, en arts waarschuwen.	
Huid: roodheid.	handschoenen.	verontreinigde kleding uittrekken, huid spoelen met veel water of douchen.	
Ogen: roodheid, pijn.	veiligheidsbril.	eerst langdurig spoelen met veel water (contactlenzen verwijderen mits makkelijk mogelijk), dan naar arts brengen.	
Inslikken: hoesten, hoofdpijn, duizeligheid, braken.		mond laten spoelen, en arts waarschuwen.	
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA	
lekvloeistof opvangen in afsluitbare vaten, restant wegspoelen met veel water.	brandveilig, gescheiden van oxidatiemiddelen. WCA: D 6 KCA: III	R: 10-20 S: 24/25 Nota C  Schadelijk	
			
OPMERKINGEN			
Gebruik van alcoholische dranken versterkt de schadelijke werking. Iemand die overgevoeligheidsverschijnselen heeft gekregen door blootstelling aan prim-n-amyalcohol, dient in de toekomst elke blootstelling aan deze stof te vermijden. In de Bondsrepubliek wordt door de Kommission zur Prüfung Gesundheitsschädlicher Arbeitsstoffen der Deutschen Forschungsgemeinschaft een MAK-Wert van 100 ppm aangehouden.			
Transport Emergency Card TEC(R)-582		GEVI: 30 ; VN-nummer: 1105	

KOOLDIOXIDE

(drukhouder)

FYSISCHE EIGENSCHAPPEN	BELANGRIJKE GEGEVENS													
<table style="width: 100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 30%;">Kookpunt, °C</td> <td style="text-align: right;">- 79</td> </tr> <tr> <td>Relatieve dichtheid (water = 1)</td> <td style="text-align: right;">0,8</td> </tr> <tr> <td>Relatieve dampdichtheid (lucht = 1)</td> <td style="text-align: right;">1,5</td> </tr> <tr> <td>Dampspanning, bar bij 20 °C</td> <td style="text-align: right;">57,6</td> </tr> <tr> <td>Oplosbaarheid in water, g/100 ml bij 25 °C</td> <td style="text-align: right;">0,16</td> </tr> <tr> <td>Relatieve molecuulmassa</td> <td style="text-align: right;">44,0</td> </tr> </table>	Kookpunt, °C	- 79	Relatieve dichtheid (water = 1)	0,8	Relatieve dampdichtheid (lucht = 1)	1,5	Dampspanning, bar bij 20 °C	57,6	Oplosbaarheid in water, g/100 ml bij 25 °C	0,16	Relatieve molecuulmassa	44,0	<p>KLEURLOOS EN REUKLOOS ONDER DRUK TOT VLOEISTOF VERDICHT GAS De damp is zwaarder dan lucht en kan zich op laaggelegen plaatsen ophopen met aldaar kans op zuurstofgebrek (bewusteloosheid). Bij snel uitstromen van kooldioxide uit drukhouder ontstaat statische elektriciteit waardoor een (reeds aanwezig) explosief mengsel kan worden ontstoken. Vrij uitstromende vloeistof verdicht zich tot <i>droogijs</i> (zie aldaar). Reageert bij hogere temperatuur heftig met ammoniak en diverse aminen.</p>	
Kookpunt, °C	- 79													
Relatieve dichtheid (water = 1)	0,8													
Relatieve dampdichtheid (lucht = 1)	1,5													
Dampspanning, bar bij 20 °C	57,6													
Oplosbaarheid in water, g/100 ml bij 25 °C	0,16													
Relatieve molecuulmassa	44,0													
	MAC-waarde	5000 ppm 9000 mg/m ³												
	<p>Wijze van opname: De stof kan worden opgenomen in het lichaam door inademing. Dit gas kan bij vrijkomen door verdringing van de lucht verstikkend werken. Directe gevolgen: Door snel verdampen kan de vloeistof bevriezing veroorzaken. Inademing van de stof kan ademnood veroorzaken. In ernstige gevallen kans op bewusteloosheid.</p>													
Brutoformule:	CO ₂													
DIRECTE GEVAREN/ VERSCIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP												
Brand: niet brandbaar.		bij brand in directe omgeving: alle blusstoffen toegestaan.												
Explosie:		bij brand: drukhouder koel houden door spuiten met water.												
Inademen: diep ademen, transpireren, ademnood, hoofdpijn, duizeligheid.	ventilatie, ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, onder geen beding filtermaskers.	frisse lucht, rust, zonodig beademing, en arts waarschuwen, of naar ziekenhuis vervoeren.												
Huid: bij bevriezing: roodheid, pijn, ernstige brandwonden.	koude-isolerende handschoenen.	bij bevriezing: GEEN kleding uittrekken, huid spoelen met veel water of douchen, en arts waarschuwen.												
Ogen: bij bevriezing: roodheid, pijn, slecht zien.	zoorbril.	eerst langdurig spoelen met veel water (contactlenzen verwijderen mits makkelijk mogelijk), dan naar arts brengen.												
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA (door leverancier aan te geven)												
ventilatie, nooit met water in vloeistof spuiten, (extra persoonlijke bescherming: persluchtmasker).	brandveilig indien binnen een gebouw, koel.													
OPMERKINGEN														
<p>Bij hoge concentraties in de lucht, bijvoorbeeld in een slecht geventileerde ruimte, ontstaat zuurstofgebrek met kans op bewusteloosheid. Boven 10% kooldioxide in de lucht: bewusteloosheid en dodelijke afloop; kooldioxide komt vrij bij vele gistingprocessen (in gistingkelders) en is een belangrijk bestanddeel van rookgas. In PUBLIKATIEBLAD P 134-5 van de Arbeidsinspectie worden uitvoerige instructies gegeven voor het veilig werken met kooldioxide. Zie ook PUBLIKATIEBLAD P 153 van de Arbeidsinspectie: 'Veiligheid in ruimten bewaakt door automatische kooldioxide brandblusinstallaties'.</p>														
<p>Transport Emergency Card TEC(R)-11</p> <p style="text-align: right;">GEVI: 20; VN-nummer: 1013</p>														

CYCLOHEXAAN

FYSISCHE EIGENSCHAPPEN		BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C	81	KLEURLOZE VLOEISTOF MET TYPERENDE GEUR	
Smeltpunt, °C	7	De damp is zwaarder dan lucht en verspreidt zich over de grond met kans op ontsteking op afstand. Ten gevolge van het geringe geleidingsvermogen van de vloeistof kunnen elektrostatische ladingen worden opgewekt bij stroming, beweging enz. Reageert heftig met oxidatiemiddelen met kans op brand en explosie.	
Vlampunt, °C	-18		
Zelfontbrandingstemperatuur, °C	260		
Relatieve dichtheid (water = 1)	0,8		
Relatieve dampdichtheid (lucht = 1)	2,9		
Relatieve dichtheid bij 20 °C van verzadigd damp/luchtmengsel (lucht = 1)	1,2	MAC-waarde	250 ppm 875 mg/m ³
Dampspanning, mbar bij 20 °C	104	Wijze van opname: De stof kan worden opgenomen in het lichaam door inademing van de damp en door inslikken. Een voor de gezondheid gevaarlijke concentratie in de lucht kan door verdamping van deze stof bij ca. 20 °C vrij snel worden bereikt; bij vernevelen nog sneller.	
Oplosbaarheid in water	niet	Directe gevolgen: De vloeistof werkt irriterend op de huid. De stof kan inwerken op het centraal zenuwstelsel. Blootstelling aan hoge concentraties kan verlaging van het bewustzijn veroorzaken.	
Explosiegrenzen, volume% in lucht	1,2-8,3	Gevolgen bij langdurige, herhaaldelijke blootstelling: De vloeistof ontvet de huid. De stof kan op de lever en nier inwerken, met als gevolg orgaanafwijkingen.	
Minimum ontstekingsenergie, mJ	0,2		
Soortelijke geleiding, pS/m	1,9		
Relatieve molecuulmassa	84,2		
Log P octanol/water	3,4		
Brutoformule:	C ₆ H ₁₂		
DIRECTE GEVAREN/ VERSCHIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP	
Brand: zeer brandgevaarlijk.	geen open vuur, geen vonken en niet roken.	poeder, A.F.F.F., schuim, koolzuur, (halonen).	
Explosie: damp met lucht explosief.	gesloten apparatuur, ventilatie, explosieveilige elektrische apparatuur en verlichting, voorkom opbouw van elektrostatische lading o.a. door aarden, bij vullen, aftappen of verwerken geen perslucht toepassen, vonk-arm handgereedschap.	bij brand: tanks/vaten koel houden door spuiten met water.	
Inademen: sufheid, zwaktegevoel, bewusteloosheid.	ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, ademhalingsbescherming (filtertype A).	frisse lucht, rust, en arts waarschuwen.	
Huid: roodheid, droge huid.	handschoenen.	verontreinigde kleding uittrekken, huid spoelen met veel water of douchen.	
Ogen: roodheid en pijn.	veiligheidsbril.	eerst langdurig spoelen met veel water (contactlenzen verwijderen mits makkelijk mogelijk), dan naar arts brengen.	
Inslikken: duizeligheid, sufheid, misselijkheid, bewusteloosheid.		mond laten spoelen, twee glazen water laten drinken, arts raadplegen en zonodig naar ziekenhuis vervoeren.	
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA	
ventilatie, lekvloeistof opvangen in afsluitbare vaten, morsvloeistof opnemen in zand of inert absorptiemiddel, daarna afvoeren naar veilige plaats, (extra persoonlijke bescherming: persluchtmasker).	brandveilig, gescheiden van oxidatiemiddelen. WCA: D 5 KCA: VI	R: 11 S: 9-16-33  Licht ontvlambaar 	
OPMERKINGEN			
Gebruik van alcoholische dranken versterkt de schadelijke (bedwelmende) werking. De geur waarschuwt onvoldoende bij overschrijding van de MAC-waarde.			
Transport Emergency Card TEC(R)-103		GEVI: 33 ; VN-nummer: 1145	

STIKSTOF

(drukhouder)


FYSISCHE EIGENSCHAPPEN		BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C Relatieve dampdichtheid (lucht = 1) Oplosbaarheid in water Relatieve molecuulmassa		- 196 0,97 niet 28.0	KLEURLOOS EN REUKLOOS SAMENGEPERST GAS Het gas mengt zich goed met lucht. MAC-waarde niet vastgesteld
Brutoformule:		N ₂	
DIRECTE GEVAREN/ VERSCHIJNSELEN		PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP
Brand: niet brandbaar.			Bij brand in de omgeving: alle blusstoffen toegestaan.
Explosie:			bij brand: drukhouder koel houden door spuiten met water.
Inademen: ademnood, hoofdpijn, duizeligheid, bewusteloosheid.		ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, onder geen beding filtermaskers.	frisse lucht, rust, zo nodig beademing, en naar ziekenhuis vervoeren.
OPRUIMING		OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA (door leverancier aan te geven)
ventilatie. (extra persoonlijke bescherming: persluchtmasker).		brandveilig indien binnen een gebouw, koel, ventilatie.	

OPMERKINGEN

Bij hoge concentraties in de lucht, bijvoorbeeld in een slecht geventileerde ruimte, ontstaat zuurstofgebrek met kans op bewusteloosheid.

ZUURSTOF

(drukhouder)

FYSISCH EIGENSCHAPPEN	BELANGRIJKE GEGEVENS	
Kookpunt, °C – 183 Smeltpunt, °C – 218 Relatieve dampdichtheid (lucht = 1) 1,1 Oplosbaarheid in water, mg/l bij 20 °C ca. 10 Relatieve molecuulmassa 32,0	KLEURLOOS REUKLOOS SAMENGEPERST GAS Reageert heftig met brandbare en reducerende stoffen. Speciale aandacht voor (smeer)olie en vet, die door zuurstof tot zelfontbranding kunnen komen.	
	MAC-waarde	niet vastgesteld
Brutoformule: O ₂		
DIRECTE GEVAREN/ VERSCHIJNSELEN	PREVENTIE	BLUSSTOFFEN/EERSTE HULP
Brand: niet brandbaar, doch bevordert brand van andere stoffen en kleding.	geen open vuur, geen vonken en niet roken, geen contact met kleding, smeeroliën en vetten.	
Explosie:	APPARATUUR EN LEIDINGEN OLIE- EN VET-VRIJ HOUDEN, nooit tanks, vaten e.d. 'beluchten' met zuurstof.	bij brand: drukhouder koel houden door spuiten met water.
Inademen:	ruimtelijke afzuiging, plaatselijke afzuiging, onder geen beding filtermaskers.	
Huid:		eerst kleding spoelen met veel water, dan de met ZUURSTOF VERONTREINIGDE KLEDING UITREKKEN (BRANDGEVAAR).
OPRUIMING	OPSLAG / AFVALCODES	ETIKETTERING / NFPA
ventilatie.	brandveilig indien binnen een gebouw, gescheiden van brandbare stoffen en reductiemiddelen, koel, ventilatie.	R: 8-34 S: 21  Oxiderend
OPMERKINGEN		
In zuivere zuurstof branden veel stoffen, die in de lucht niet branden (zoals trichloorethyleen, staal enz.). Reeds bij geringe stijging van het zuurstofgehalte in de atmosfeer neemt de brandbaarheid van alle stoffen sterk toe. Na gebruik als lasgas afsluiter dichtdraaien; slangen en leidingen regelmatig controleren; aansluitingen afzepen. Verontreinigde kleding uitspoelen met veel water (brandgevaar). Zie voor opstelling en gebruik van zuurstofflessen ook PUBLIKATIEBLAD P 14 van de Arbeidsinspectie. Drukhouder met speciale appendages toepassen.		

BIJLAGE B3: Rekenmethode voor CO₂-verwijderingssectie

Voor het uitrekenen van de gepakte kolommen voor het verwijderen van koolstofdioxide is gebruik gemaakt van de methode van Cornell [24].

Bij het ontwerpen van de kolommen is uitgegaan van een drukval van 21 mm water per meter pakking. In figuur 11.44 kan bij bekende kolom gas-vloeistof factor (F_{LV}) de waarde voor K_4 worden

$$F_{LV} = \frac{L_w}{V_w} \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}} \quad (\text{B3.1})$$

afgelezen.

Tevens kan de waarde voor K_4 bij flooding worden bepaald. Vervolgens wordt de gas massaflow per oppervlak uitgerekend met behulp van de onderstaande formule:

$$V_w^* = \left[\frac{K_4 \rho_v (\rho_L - \rho_v)}{42.9 F_p \left(\frac{\eta_L}{\rho_L}\right)^{0.1}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B3.2})$$

$$\text{benodigde kolomoppervlak} = \frac{\text{gas massaflow}}{\text{gas massaflow per oppervlak}} \quad (\text{B3.3})$$

$$\text{kolomdiameter} = \sqrt{\frac{4}{\pi} \text{benodigde kolomoppervlak}} \quad (\text{B3.4})$$

$$L_w^* = \frac{\text{vloeistof massaflow}}{\text{kolomoppervlak}} \quad (\text{B3.5})$$

$$(Sc)_v = \frac{\eta_v}{\rho_v D_v} \quad (\text{B3.6})$$

$$(Sc)_L = \frac{\eta_L}{\rho_L D_L} \quad (\text{B3.7})$$

Na aflezen van K_3 uit figuur 11.41, ψ_h uit figuur 11.42 en ϕ_h uit figuur 11.43 kunnen de onderstaande formules uitgerekend worden.

$$H_G = \frac{0.011 \psi_h (Sc)^{0.5} \left(\frac{D_c}{0.305} \right)^{1.11} \left(\frac{Z}{3.05} \right)^{0.33}}{(L_w^* f_1 f_2 f_3)^{0.5}} \quad (\text{B3.8})$$

met $f_1 = (\eta_L/\eta_w)^{0.16}$
 $f_2 = (\rho_w/\rho_L)^{1.25}$
 $f_3 = (\sigma_w/\sigma_L)^{0.8}$

$$H_L = 0.305 \phi_h (Sc)_L^{0.5} K_3 \left(\frac{Z}{3.05} \right)^{0.15} \quad (\text{B3.9})$$

$$H_{OG} = H_L + 0.8 H_G \quad (\text{B3.10})$$

BIJLAGE B4.1: Pascal-programma

```
PROGRAM Stoichiometriebepaling (INPUT, OUTPUT);
```

```
USES  
  CRT;
```

```
VAR
```

```
  r1, r2, r3, r4, r5, r6, r7 : REAL;  
  ph2, pch4, pn2, pco, ph2o, pco2, pmeoh, petoh, pproh, pbuoh, ppeoh, ptotaal : REAL;  
  minh2, mreclh2, muittotaal, h2o, pco0, totaal : REAL;  
  muith2, mutch4, muitn2, muitco, muith2o, muitco2 : REAL;  
  muitmeoh, muitetoh, muitproh, muitbuoh, muitpeoh : REAL;  
  stoechh2, stoechch4, stoechn2, stoechco, stoechh2o, stoechco2 : REAL;  
  stoechmeoh, stoechetoh, stoechproh, stoechbuoh, stoechpeoh : REAL;  
  synh2, synch4, synn2, synco, synh2o, synco2 : REAL;  
  synmeoh, synetoh, synproh, synbuoh, synpeoh : REAL;
```

```
BEGIN
```

```
  ClrScr;  
  WRITE ('Hoeveelheid H2 uit synthesesgasreactor   '); READLN (minh2);  
  WRITE ('Hoeveelheid H2 MAS-reactor in           '); READLN (synh2);  
  WRITE ('Hoeveelheid H2 MAS-reactor uit          '); READLN (muith2);  
  WRITE ('Hoeveelheid CH4 MAS-reactor in          '); READLN (synch4);  
  WRITE ('Hoeveelheid N2 MAS-reactor in           '); READLN (synn2);  
  WRITE ('Hoeveelheid CO MAS-reactor in           '); READLN (synco);  
  WRITE ('Hoeveelheid H2O MAS-reactor in          '); READLN (synh2o);  
  WRITE ('Hoeveelheid CO2 MAS-reactor in          '); READLN (synco2);  
  WRITE ('Hoeveelheid MeOH MAS-reactor in         '); READLN (synmeoh);  
  WRITE ('Hoeveelheid EtOH MAS-reactor in         '); READLN (synetoh);  
  WRITE ('Hoeveelheid PrOH MAS-reactor in         '); READLN (synproh);  
  WRITE ('Hoeveelheid BuOH MAS-reactor in         '); READLN (synbuoh);  
  WRITE ('Hoeveelheid PeOH MAS-reactor in         '); READLN (synpeoh);  
  mreclh2:=0.9*muith2;
```

```
  WHILE NOT (abs(synh2-(mreclh2+minh2))<=0.01) DO
```

```
  BEGIN
```

```
    synh2:=minh2+mreclh2;  
    totaal:=synh2+synch4+synn2+synco+synh2o+synco2+synmeoh+synetoh  
            +synproh+synbuoh+synpeoh;
```

```
    ph2:=synh2/totaal*131*1.013;  
    pch4:=synch4/totaal*131*1.013;  
    pn2:=synn2/totaal*131*1.013;  
    pco:=synco/totaal*131*1.013;  
    ph2o:=synh2o/totaal*131*1.013;  
    pco2:=synco2/totaal*131*1.013;  
    pmeoh:=synmeoh/totaal*131*1.013;  
    petoh:=synetoh/totaal*131*1.013;  
    pproh:=synproh/totaal*131*1.013;  
    pbuoh:=synbuoh/totaal*131*1.013;  
    ppeoh:=synpeoh/totaal*131*1.013;  
    pco0:=synco/totaal*131*1.013;
```

```
    WHILE NOT (pco<=0.86*pco0) DO
```

```
    BEGIN
```

```
      ptotaal:=ph2+pch4+pn2+pco+ph2o+pco2+pmeoh+petoh+pproh+pbuoh+ppeoh;  
      r1:=4.3e-7*(pco*ph2*ph2-pmeoh/1.57e-5);  
      r2:=3e-3*pmeoh/(1+8.84*ph2o);  
      r3:=3e-3*pmeoh/(1+8.84*ph2o);
```

```

r4:=3e-3*pmeoh/(1+8.84*ph2o);
r5:=3e-3*pmeoh/(1+8.84*ph2o);
r6:=1.3e-3*(pco*ph2o-pco2*ph2/14.8);
r7:=1e-5*ph2;
pco:=pco-r1-r2-2*r3-3*r4-4*r5-r6-r7;
ph2:=ph2-2*r1-2*r2-4*r3-6*r4-8*r5+r6-3*r7;
ph2o:=ph2o+r2+2*r3+3*r4+4*r5-r6+r7;
pco2:=pco2+r6;
pmeoh:=pmeoh+r1-r2-r3-r4-r5;
petoh:=petoh+r2;
pproh:=pproh+r3;
pbuoh:=pbuoh+r4;
ppeoh:=ppeoh+r5;
END;
muitco:=0.86*synco;
muittotaal:=muitco/(pco/ptotaal);
muith2:=muittotaal*ph2/ptotaal;
muitch4:=synch4;
muitn2:=synn2;
muitco:=muittotaal*pco/ptotaal;
muith2o:=muittotaal*ph2o/ptotaal;
muitco2:=muittotaal*pco2/ptotaal;
muitmeoh:=muittotaal*pmeoh/ptotaal;
muitetoh:=muittotaal*(petoh+pproh+pbuoh+ppeoh)/ptotaal*2/30;
muitproh:=muittotaal*(petoh+pproh+pbuoh+ppeoh)/ptotaal*3/30;
muitbuoh:=muittotaal*(petoh+pproh+pbuoh+ppeoh)/ptotaal*15/30;
muitpeoh:=muittotaal*(petoh+pproh+pbuoh+ppeoh)/ptotaal*10/30;
stoechh2:=muith2-synh2;
stoechch4:=-synch4+muitch4;
stoechn2:=-synn2+muitn2;
stoechco:=-synco+muitco;
stoechh2o:=-synh2o+muith2o;
stoechco2:=-synco2+muitco2;
stoechmeoh:=-synmeoh+muitmeoh;
stoechetoh:=-synetoh+muitetoh;
stoechproh:=-synproh+muitproh;
stoechbuoh:=-synbuoh+muitbuoh;
stoechpeoh:=-synpeoh+muitpeoh;
mrechh2:=0.9*muith2;
ClrScr;
WRITELN ('Stoichiometrie H2          1 ',stoechh2:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie CH4         2 ',stoechch4:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie N2              3 ',stoechn2:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie O2              4 ');
WRITELN ('Stoichiometrie CO              5 ',stoechco:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie CO2            6 ',stoechco2:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie CYCLOHEX       7 ');
WRITELN ('Stoichiometrie H2O            8 ',stoechh2o:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie MeOH           9 ',stoechmeoh:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie EtOH          10 ',stoechetoh:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie ProH          11 ',stoechproh:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie BuOH          12 ',stoechbuoh:10:4);
WRITELN ('Stoichiometrie PeOH          13 ',stoechpeoh:10:4);
WRITELN; WRITELN;
END;
WRITELN ('De bovenstaande stoichiometrie is de definitieve stoichiometrie !');
READLN;
END.

```

BIJLAGE B4.2: PSI-module

```
co=int(-r1-r2-2*r3-3*r4-4*r5-r6-r7 par:co0);
h2=int(-2*r1-2*r2-4*r3-6*r4-8*r5+r6-3*r7 par:h20);
h2o=int(r2+2*r3+3*r4+4*r5-r6+r7 par:h2o0);
co2=int(r6 par:0);
meoh=int(r1-r2-r3-r4-r5 par:0);
etoh=int(r2 par:0);
proh=int(r3 par:0);
buoh=int(r4 par:0);
peoh=int(r5 par:0);
```

```
r1=4.3e-7*(co*h2^2-meoh/1.57e-5);
r2=3e-3*meoh/(1+gkw*h2o);
r3=3e-3*meoh/(1+gkw*h2o);
r4=3e-3*meoh/(1+gkw*h2o);
r5=3e-3*meoh/(1+gkw*h2o);
r6=1.3e-3*(co*h2o-co2*h2/14.8);
r7=1e-5*h2;
```

```
co0=33.91614;
h20=84.5175;
h2o0=0.04862;
gkw=8.84;
```

Bijlage B5: Rekenmethode voor warmtewisselaars

Voor het uitrekenen van de warmtewisselaars is gebruik gemaakt van de methode van Kern [24], met verwaarlozing van de 'viscosity correction term'.

Er is uitgegaan van 1 shell pass, 2 tube passes en een square pitch.

Schatting van het uitwisselend oppervlak, aantal tubes en bundeldiameter:

$$\Delta T_{lm} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \frac{(T_1 - t_2)}{(T_2 - t_1)}} \quad (\text{B5.1})$$

$$R = \frac{(T_1 - T_2)}{(t_2 - t_1)} \quad (\text{B5.2})$$

$$S = \frac{(t_2 - t_1)}{(T_1 - t_1)} \quad (\text{B5.3})$$

$$F_t = \frac{\sqrt{(R^2 + 1)} \ln \left[\frac{1 - S}{1 - RS} \right]}{(R - 1) \ln \left[\frac{2 - S[R + 1 - \sqrt{(R^2 + 1)}]}{2 - S[R + 1 + \sqrt{(R^2 + 1)}]} \right]} \quad (\text{B5.4})$$

$$\Delta T_m = F_t \Delta T_{lm} \quad (\text{B5.5})$$

$$A = \frac{Q}{\Delta T_m U} \quad (\text{B5.6})$$

$$A_t = L d_o \pi \quad (\text{B5.7})$$

$$N_t = \frac{A}{A_t} \quad (\text{B5.8})$$

$$D_b = d_o \cdot 10^3 \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{\left(\frac{1}{n_1} \right)} \quad (\text{B5.9})$$

Hierin geldt voor een square pitch met 2 tube passes: $K_1 = 0.156$
 $n_1 = 2.291$

Bepaling van de inside coefficient:

$$A_{1 \text{ tube}} = \frac{1}{4} \pi d_i^2 \quad (\text{B5.10})$$

$$A_{\text{tot}} = \frac{N_t}{2} A_{1 \text{ tube}} \quad (\text{B5.11})$$

$$G_t = \frac{W_t}{A_{\text{tot}}} \quad (\text{B5.12})$$

$$u_t = \frac{G_t}{\rho_t} \quad (\text{B5.13})$$

$$Re_t = \frac{G_t d_i}{\eta_t} \quad (\text{B5.14})$$

$$Pr_t = \frac{C_{p_t} \eta_t}{k_{f_t}} \quad (\text{B5.15})$$

$$Nu_t = C Re_t^{0.8} Pr_t^{0.33} \quad (\text{B5.16})$$

waarin: C=0.021	voor gassen
C=0.023	voor niet visceuze vloeistoffen
C=0.027	voor visceuze vloeistoffen

$$h_i = \frac{Nu_t k_{ft}}{d_i} \quad (\text{B5.17})$$

Wanneer water als tube vloeistof wordt gebruikt, geldt een relatie die exactere waarden geeft voor de inside coefficient:

$$h_i = \frac{4200 (1.35 + 0.02 t_{\text{water}}) u_t^{0.8}}{d_i^{0.2}} \quad (\text{B5.18})$$

$$\Delta P_t = 2 \left[8j_{ft} \left(\frac{L}{d_i} \right) + 2.5 \right] \frac{\rho_t u_t^2}{2} \quad (\text{B5.19})$$

Waarin de waarde voor j_{ft} in figuur 12.24 afgelezen wordt.

Bepaling van de sheldiameter en de outside coefficient:

$$D_s = D_b + BC \quad (\text{B5.20})$$

Waarin de waarde voor BC in figuur 12.10 afgelezen wordt.

$$A_s = \frac{(p_t - d_o) D_s l_B \cdot 10^{-6}}{P_t} \quad (\text{B5.21})$$

$$G_s = \frac{W_s}{A_s} \quad (\text{B5.22})$$

$$u_s = \frac{G_s}{\rho_s} \quad (\text{B5.23})$$

$$d_e = \frac{1.27}{d_o \cdot 10^3} \left[(p_t \cdot 10^3)^2 - 0.785 (d_o \cdot 10^3)^2 \right] \quad (\text{B5.24})$$

$$Re_s = \frac{G_s d_e \cdot 10^{-3}}{\eta_s} \quad (\text{B5.25})$$

$$Pr_s = \frac{C_{p_s} \eta_s}{k_{f_s}} \quad (\text{B5.26})$$

$$h_o = \frac{k_{f_s}}{d_e \cdot 10^{-3}} j_h Re_s Pr_s^{1/3} \quad (\text{B5.27})$$

Waarin de waarde voor j_h na keuze van een 'baffle cut' in figuur 12.29 afgelezen wordt.

$$\Delta P_s = 8 j_{fs} \frac{D_s L \rho_s u_s^2}{d_e l_B 2} \quad (\text{B5.28})$$

Waarin de waarde voor j_{fs} bij eenzelfde 'baffle cut' in figuur 12.30 afgelezen wordt.

$$\frac{1}{U_o} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_o \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2k_w} + \frac{d_o}{d_i h_{id}} + \frac{d_o}{d_i h_i} \quad (\text{B5.29})$$

BIJLAGE B6: Rekenmethode voor reboilers

Voor het uitrekenen van de reboilers is gebruik gemaakt van de methode beschreven in Coulsen & Richardson [24].

Er is uitgegaan van U-tubes (1 shell pass en 2 tube passes) met de volgende afmetingen:

$$d_o = 30 \text{ mm}$$

$$\delta = 2.6 \text{ mm}$$

$$L = 4.88 \text{ m}$$

De buizen zijn geordend in een square pitch met $p_t = 1.5 \cdot d_o$.

Schatting van het uitwisselend oppervlak, A:

$$A = \frac{Q}{U \cdot \Delta T} \quad (\text{B6.1})$$

Hierin is :

$$\Delta T = T_b^{\text{stoom}} - T_b \quad (\text{B6.2})$$

Aangezien de bijdrage van het afkoelen van het stoom verwaarloosbaar klein is ten opzichte van de warmte die vrijkomt bij de condensatie, mag deze formule gebruikt worden.

$$N_t = \frac{A}{\pi \cdot d_o \cdot L} \quad (\text{B6.3})$$

$$q = \frac{Q}{A} \quad (\text{B6.4})$$

$$\frac{1}{U_o} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{nb}} + \frac{d_o \cdot \ln \frac{d_o}{d_i}}{2 \cdot k_w} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_{id}} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_i} \quad (\text{B6.5})$$

De maximale dampnelheid, waarbij geen entrainment optreedt, wordt berekend met:

$$u_{v,\max} = 0.2 \cdot \left(\frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_v} \right)^{0.5} \quad (\text{B6.6})$$

De bundeldiameter, sheldiameter en de dampnelheid aan het oppervlak worden als volgt berekend:

$$D_b = d_o \cdot \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{\left(\frac{1}{n_1} \right)} \quad (\text{B6.7})$$

$$D_s = D_b \cdot \text{factor} \quad (\text{B6.8})$$

De *factor* uit de bovenstaande formule (B6.8) is afhankelijk van de warmteflux. Een schatting voor de *factor* is te vinden op pagina 604 van Coulsen & Richardson [24].

$$W_v = \frac{Q}{\Delta H_{vap}} \cdot M_w \quad (\text{B6.9})$$

$$\text{breedte vloeistofopp.} = 2 \cdot (r^2 - h^2)^{0.5} \quad (\text{B6.10})$$

Hierin wordt gebruik gemaakt van de volgende relaties: $r = \frac{1}{2} D_s$

$$h = D_b + z - r$$

met als hoogteverschil tussen het vloeistofniveau en de bovenkant van de bundel, $z=100$ mm

$$s = 0.5 \cdot L \cdot \text{breedte vloeistofopp.} \quad (\text{B6.11})$$

$$u_v = \frac{W_v}{\rho_v \cdot s} \quad (\text{B6.12})$$

De maximale warmteflux en de hoeveelheid stoom worden als volgt berekend:

$$q_{cb} = K_b \frac{P_t}{d_o} \frac{\left(\frac{H_{vap}}{M_w} \right)}{(2 \cdot N_t)^{0.5}} \sigma g \left(\frac{(\rho_l - \rho_v)}{\rho_v^2} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (\text{B6.13})$$

$K_b = 0.44$ voor square pitch

$$q_{\max} = 0.7 \cdot q_{cb} \quad (\text{B6.14})$$

$$M_{stoom} = \frac{Q}{c_{pv} \cdot (t_1 - T_b^{stoom}) + \Delta H_{vap}} \quad (\text{B6.15})$$

$$u_t = \frac{M_{stoom}}{1.52 \cdot N_t \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d_i^2} \quad (\text{B6.16})$$

BIJLAGE 7: Rekenmethode voor condensors

Voor het doorrekenen van de condensor is gebruik gemaakt van de methode beschreven in Coulsen & Richardson [24], deze verloopt vrijwel identiek aan de methode voor de warmtewisselaars (zie bijlage B5). De formules, waar de berekening afwijkt, zijn hieronder weergegeven.

$$N_r = \frac{D_b}{p_t} \quad (\text{B7.1})$$

Bepaling van de gemiddelde shell- en tubetemperatuur:

$$T_s = \frac{1}{2} (T_1 + T_2)$$

$$t_t = \frac{1}{2} (t_1 + t_2)$$

Bepaling van de wandtemperatuur:

$$T_w = T_s - \frac{(T_s - t_t) U}{h_{cb}} \quad (\text{B7.2})$$

Vervolgens worden bij de gemiddelde condensatie temperatuur :

$$T_{\text{mean}} = \frac{1}{2} (T_s + T_w)$$

de volgende grootheden bepaald:

$$\eta_1$$

$$\rho_1$$

$$k_1$$

Met behulp van de dichtheid van de damp, de massastroom per lengte eenheid en het aantal buizen in de verticale rij wordt nu de warmteoverdrachtcoëfficiënt aan de shellzijde bepaald.

$$\rho_v = \frac{M_w}{22.4} \frac{273}{273 + T_s} P \quad (\text{B7.3})$$

$$\Gamma = \frac{W_c}{L \cdot N_t} \quad (\text{B7.4})$$

$$W_c = \frac{Q}{\Delta H_{\text{vap}}} \quad (\text{B7.5})$$

Waarin:

$$N_{av} = \frac{2}{3} N_r \quad (\text{B7.6})$$

$$h_{cb} = 0.95 \cdot k_1 \left[\frac{\rho_l (\rho_l - \rho_v) g}{\eta_1 \cdot \Gamma} \right]^{\frac{1}{3}} \cdot N_r^{-\frac{1}{6}} \quad (\text{B7.7})$$

De warmteoverdrachtscoëfficiënt aan de tubezijde wordt bepaald met de methode, die beschreven

is in bijlage B5, rekenmethode voor warmtewisselaars, met water als tubefluid.

$$\frac{1}{U_o} = \frac{1}{h_{cb}} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_o \ln \frac{d_o}{d_i}}{2k_W} + \frac{d_o}{d_i h_{id}} + \frac{d_o}{d_i h_i} \quad (\text{B7.8})$$

De drukval aan de tubezijde wordt op dezelfde manier bepaald als in bijlage B5. De drukval aan de shellzijde is gedefinieerd als de halve waarde van de shell drukval in de warmtewisselaars (bijlage B5).

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H1		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 3588	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 47	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 67	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 1142	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 1142	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		syngas	zuurstof
Massastroom	[kg/s]	42.02	16.0
Massastroom te			
- verdampen	[kg/s]		
- condenseren	[kg/s]		
Gemiddelde soortelijke warmte	[kJ/kg.°C]	2.7	1.0
Verdampingswarmte	[kJ/kg]		
Temperatuur IN	[°C]	1304	25
Temperatuur UIT	[°C]	1272	260
Druk	[bar]	7	7
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H2		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : <u>4</u>	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 5013	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 325	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 157	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 98	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 98	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		aardgas/CO ₂	alc/syngas
Massastroom [kg/s]		26.01	206.96
Massastroom te - verdampen [kg/s]			
- condenseren [kg/s]			
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]		2.1	2.3
Verdampingswarmte [kJ/kg]			
Temperatuur IN [°C]		35	412
Temperatuur UIT [°C]		400	370
Druk [bar]		7	128.5
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H4		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 119865	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 513	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 863	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 271	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 271	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		water	syngas
Massastroom [kg/s]		43.18	42.01
Massastroom te - verdampen [kg/s]		43.18	
- condenseren [kg/s]			
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]		4.2 (l) 2.2 (g)	2.5
Verdampingswarmte [kJ/kg]		2173	
Temperatuur IN [°C]		20	1304
Temperatuur UIT [°C]		190	150
Druk [bar]		3	7
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H7		Aantal serie : <u> </u> Aantal parallel : <u> 4 </u>	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - econdensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 56578	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 187	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 630	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 483	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 0.99		
Gecorrigeerde LMTD	: 480	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		water	syngas
Massastroom [kg/s]		676.77	51.69
Massastroom te - verdampen [kg/s]			
- condensereren [kg/s]			
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]		4.2	2.5
Verdampingswarmte [kJ/kg]			
Temperatuur IN [°C]		20	731
Temperatuur UIT [°C]		40	342
Druk [bar]		1	131
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H13		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 4315	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 406	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 664	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 16	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 16	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		water	stoom
Massastroom [kg/s]		1.73	1.61
Massastroom te - verdampen [kg/s]		1.73	
- condenseren [kg/s]			1.61
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]		4.3	2.5
Verdampingswarmte [kJ/kg]		2075	-2019
Temperatuur IN [°C]		60	220
Temperatuur UIT [°C]		165	180
Druk [bar]		7	10
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H15		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 10846	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 241	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 1000	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 45	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 0.95		
Gecorrigeerde LMTD	: 43	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		CO ₂ /water	water
Massastroom [kg/s]		10.18	129.74
Massastroom te - verdampen [kg/s]			
- condenseren [kg/s]		5.19	
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]		1.1	4.2
Verdampingswarmte [kJ/kg]		2362	
Temperatuur IN [°C]		91	20
Temperatuur UIT [°C]		60	40
Druk [bar]		1	1
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H20		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condenser - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 35401	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 1221	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 1000	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 29	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 29	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		water	stoom
Massastroom [kg/s]		15.72	16.27
Massastroom te - verdampen [kg/s]		15.72	
- condenseren [kg/s]			16.27
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]		4.2	2.16
Verdampingswarmte [kJ/kg]		2252	-2173
Temperatuur IN [°C]		50	190
Temperatuur UIT [°C]		106	133
Druk [bar]		1.2	3
Materiaal		stainless steel	stainless steel

FABRIEKSVORONTWERP NO. 3115

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H21		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - e condensor - v erdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 6680	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 262	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 243	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 106	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 0.99		
Gecorrigeerde LMTD	: 105	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		syngas (rec)	water
Massastroom [kg/s]		169.75	79.90
Massastroom te - verdampen [kg/s] - condenseren [kg/s]			
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C] Verdampingswarmte [kJ/kg]		2.3	4.2
Temperatuur IN [°C] Temperatuur UIT [°C]		144 127	20 40
Druk [bar] Materiaal		7 stainless steel	1 stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H22		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : <u>2</u>	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 3590	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 520	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 56	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 130	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 0.95		
Gecorrigeerde LMTD	: 123	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		syngas-rec.	produktstroom
Massastroom [kg/s]		37.50	9.28
Massastroom te - verdampen [kg/s] - condenseren [kg/s]			
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C] Verdampingswarmte [kJ/kg]		2.27	3.35
Temperatuur IN [°C]		163	-50
Temperatuur UIT [°C]		121	67
Druk [bar]		7	1.2
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H24		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : <u>4</u>	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condenser - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 4825	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 81	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 163	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 366	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 366	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		water	syngas/alcoholen
Massastroom [kg/s]		57.72	207.07
Massastroom te - verdampen [kg/s] - condenseren [kg/s]			
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C] Verdampingswarmte [kJ/kg]		4.2	2.3
Temperatuur IN [°C] Temperatuur UIT [°C]		20 40	416 377
Druk [bar] Materiaal		1 stainless steel	126 stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H27		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : <u>2</u>	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 24075	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 815	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 955	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 31	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 31	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		CH ₃ F	syngas/alc/water
Massastroom [kg/s]		49.62	94.31
Massastroom te - verdampen [kg/s]		49.62	
- condenseren [kg/s]			9.27
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]			2.1
Verdampingswarmte [kJ/kg]		485	-1373
Temperatuur IN [°C]		-61	8
Temperatuur UIT [°C]		-61	-50
Druk [bar]		2.5	1
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H32		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met-vaste-pijplaten - floating head - haarspeld - dubbele-pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 29560	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 1271	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 755	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisches temperatuursverschil (LMTD)	: 31	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 0.98		
Gecorrigeerde LMTD	: 31	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		MeOH/EtOH	water
Massastroom [kg/s]		26.72	353.64
Massastroom te - verdampen [kg/s] - condenseren [kg/s]		26.72	
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C] Verdampingswarmte [kJ/kg]		1105	4.2
Temperatuur IN [°C] Temperatuur UIT [°C]		64 60	20 40
Druk [bar] Materiaal		1 stainless steel	1 stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H36		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 30000	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 969	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 773	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 40	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 40	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		C ₃ +alc/water	stoom
Massastroom	[kg/s]	24.12	13.76
Massastroom te - verdampen	[kg/s]	24.12	
- condenseren	[kg/s]		13.76
Gemiddelde soortelijke warmte	[kJ/kg.°C]		2.2
Verdampingswarmte	[kJ/kg]	1244	-2173
Temperatuur IN	[°C]	93	190
Temperatuur UIT	[°C]	93	133
Druk	[bar]	1.4	3
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H38		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 597	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 16	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 746	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 52	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 0.97		
Gecorrigeerde LMTD	: 50	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		C ₃ +alc/water	water
Massastroom [kg/s]		7.33	7.14
Massastroom te - verdampen [kg/s]			
- condenseren [kg/s]			
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]		3.5	4.2
Verdampingswarmte [kJ/kg]			
Temperatuur IN [°C]		93	20
Temperatuur UIT [°C]		70	40
Druk [bar]		1.6	1
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H41		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - keeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 6498	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 222	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 622	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 48	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 0.97		
Gecorrigeerde LMTD	: 47	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		C ₃ +alc/cyclohex	water
Massastroom	[kg/s]	9.55	77.73
Massastroom te			
- verdampen	[kg/s]	9.55	
- condenseren	[kg/s]		
Gemiddelde soortelijke warmte	[kJ/kg.°C]	661	4.2
Verdampingswarmte	[kJ/kg]		
Temperatuur IN	[°C]	88	20
Temperatuur UIT	[°C]	68	40
Druk	[bar]	1	1
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H45		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 7013	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 252	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 813	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 34	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 34	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		water	stoom
Massastroom	[kg/s]	3.30	3.22
Massastroom te			
- verdampen	[kg/s]	3.30	
- condenseren	[kg/s]		3.22
Gemiddelde soortelijke warmte	[kJ/kg.°C]	4.2	2.2
Verdampingswarmte	[kJ/kg]	2123	-2173
Temperatuur IN	[°C]	99	190
Temperatuur UIT	[°C]	99	133
Druk	[bar]	1.4	3
Materiaal		stainless steel	stainless steel

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H47		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamper		
Uitvoering	: - met vaste pijplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 6674	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 172	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 1113	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 37	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 0.94		
Gecorrigeerde LMTD	: 34	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		cyclohex/water	water
Massastroom [kg/s]		8.76	79.83
Massastroom te - verdampen [kg/s]			
- condenseren [kg/s]		8.76	
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]			4.2
Verdampingswarmte [kJ/kg]		721	
Temperatuur IN [°C]		80	20
Temperatuur UIT [°C]		55	40
Druk [bar]		1	1
Materiaal		stainless steel	stainless steel

FABRIEKSVoorontwerp NO. 3115

SPECIFICATIEFORMULIER WARMTEWISSELAAR

APPARAATNUMMER: H51		Aantal serie : _____	
		Aantal parallel : _____	
Algemene eigenschappen			
Type	: - warmtewisselaar - koeler - condensor - verdamer		
Uitvoering	: - met vaste pijpplaten - floating head - haarspeld - dubbele pijp - platenwarmtewisselaar		
Positie	: - horizontaal - verticaal		
Capaciteit	: 6902	[kW]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak	: 558	[m ²]	(berekend)
Overall warmteoverdrachts-coëfficiënt	: 535	[W/m ² .K]	(globaal)
Logaritmisch temperatuursverschil (LMTD)	: 23	[°C]	
Aantal passages pijpzijde	: 2		
Aantal passages mantelzijde	: 1		
Correctiefactor LMTD (min. 0.75)	: 1		
Gecorrigeerde LMTD	: 23	[°C]	
Bedrijfscondities			
		Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluïdum		C ₃ +alc	stoom
Massastroom [kg/s]		11.39	3.17
Massastroom te - verdampen [kg/s]		11.39	
- condenseren [kg/s]			3.17
Gemiddelde soortelijke warmte [kJ/kg.°C]			2.2
Verdampingswarmte [kJ/kg]		606	-2173
Temperatuur IN [°C]		110	190
Temperatuur UIT [°C]		110	133
Druk [bar]		1.5	3
Materiaal		stainless steel	stainless steel

BIJLAGE B8.2 : Specificatieformulieren van distillatietorens

Technische Universiteit Delft
Vakgroep Chemische Procestechnologie

Datum: 15/11/94
Ontwerpers:
auteurs

SPECIFICATIEFORMULIER TORENS

APPARAATNUMMER : T31										
Algemene eigenschappen										
Functie		: - destillatie / extractie / absorptie / _____								
Type toren		: - gepakt / schotel / spreeier / _____								
Type schotel		: - klokje / zeefplaat / valve / _____								
Aantal schotels										
- theoretisch		: 35								
- praktisch		: 62								
Schotelafstand (HETS)		: 0.60 [m]		Materiaal schotel		:				
Diameter toren		: 3.962 [m]		Hoogte toren		: 43.2 [m]				
Materiaal toren		:								
Verwarming		: - geen / open-stoom / reboiler / _____								
Bedrijfscondities										
		Voeding		Top		Bodem		Reflux-/ Absorptie-middel		Extrac-tie-middel
Temp. [°C]		67		59.5883		93.4685		59.5883		
Druk [bar]		1.2		1		1.4				
Dichtheid [kg/m ³]		779.5680		752.4838		816.8926				
Massastroom [kg/s]		18.5467		11.2243		7.3224		15.5008		
		mol%	wt%	mol%	wt%	mol%	wt%	mol%	wt%	
Samenstelling										
Methanol		61.3		98.7		0.1		98.7		
Ethanol		0.7		1.3		0.0		1.3		
Water		27.5		0		72.5		0		
Ontwerp										
Aantal klokjes / zeefgaten / _____ ¹ :					Type pakking :					
Actief schoteloppervlak : [m]					Materiaal pakking :					
Lengte overlooprand : [mm]					Afmetingen pakking :					
Diameter valpijp / gat / _____ : [mm]					- inhoud :		[m ³]			
					- lengte :		[m]			
					- breedte :		[m]			
					- hoogte :		[m]			

(verdere gegevens op schets vermelden)

FABRIEKSVORONTWERP NO. 3115

Indien een toren schotels van verschillend ontwerp bevat, moet dit vermeld worden !

SPECIFICATIEFORMULIER TORENS

APPARAATNUMMER : T40										
Algemene eigenschappen										
Functie		: - destillatie / extractieve extractie / absorptie /								
Type toren		: - gepakt / schotel / sproeier / _____								
Type schotel		: - klokje / zeefplaat / valve / _____								
Aantal schotels										
- theoretisch		: 30								
- praktisch		: 43								
Schotelafstand (HETS)		: 0.60 [m]		Materiaal schotel		:				
Diameter toren		: 2.134 [m]		Hoogte toren		: 32.4 [m]				
Materiaal toren		:								
Verwarming		: - geen / open-stoom / reboiler / _____								
Bedrijfscondities										
		Voeding		Top		Bodem		Reflux-/ Absorptie- middel		Extrac- tie- middel
Temp. [°C]		70		68.4230		99.2848				53.4129
Druk [bar]		1.2		1		1.4				1
Dichtheid [kg/m ³]		949.4114		759.6509		932.6254				767.3377
Massastroom [kg/s]		2.9544		2.6097		2.8071				2.4623
		mol%	wt%	mol%	wt%	mol%	wt%	mol%	wt%	
Samenstelling										
Water		96.9		38.1		98.3				
Propanol		1.7		7.7						
Butanol		1.0		3.4						
Pentanol		0.2		0.9						
Cyclohexaan		0		48.1		1.7				
Ontwerp										
Aantal klokjes / zeefgaten / _____ ² :					Type pakking :					
Actief schoteloppervlak :					Materiaal pakking :					
Lengte overlooprand :					Afmetingen pakking :					
Diameter valpijp / gat / _____ :					- inhoud : [m ³]					
					- lengte : [m]					
					- breedte : [m]					
					- hoogte : [m]					

(verdere gegevens op schets vermelden)

FABRIEKSVORONTWERP NO. 3115

SPECIFICATIEFORMULIER TORENS

APPARAATNUMMER : T46										
Algemene eigenschappen										
Functie		: - azeotropisch destillatie / extractie / absorptie / ____								
Type toren		: - gepakt / schotel / sproeier / _____								
Type schotel		: - klokje / zeefplaat / valve / _____								
Aantal schotels										
- theoretisch		: 48								
- praktisch		: 80								
Schotelafstand (HETS)		: 0.60		[m]		Materiaal schotel		:		
Diameter toren		: 2.286		[m]		Hoogte toren		: 54 [m]		
Materiaal toren		:								
Verwarming		: - geen / open-stoom / reboiler / _____								
Bedrijfscondities										
		Voeding		Top		Bodem		Reflux-/ Absorptie-middel		Extrac-tie-middel
Temp. [°C]		69.5042		54.7246		110.4044		54.7246		
Druk [bar]		1.2		1		1.5				
Dichtheid [kg/m ³]		768.8193		776.5936		734.0971				
Massastroom [kg/s]		6.9777		2.4070		4.5706		6.4459		
		mol%	wt%	mol%	wt%	mol%	wt%	mol%	wt%	
Samenstelling										
Water		23.6		46.5		6.2		46.5		
Propanol		6.8		3.4		9.4		3.4		
Butanol		28.9		0		50.7		0		
Pentanol		19.2		0		33.8		0		
Cyclohexaan		20.7		48.2		0		48.2		
Ontwerp										
Aantal klokjes / zeefgaten / _____³ :					Type pakking :					
Actief schoteloppervlak : [m]					Materiaal pakking :					
Lengte overlooprand : [mm]					Afmetingen pakking					
Diameter valpijp / gat / _____ : [mm]					- inhoud : [m ³]					
					- lengte : [m]					
					- breedte : [m]					
					- hoogte : [m]					

(verdere gegevens op schets vermelden)

FABRIEKSVORONTWERP NO. 3115

BIJLAGE B9: Apparaatstromen.

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	1	2	3	4	5
Waterstof					
Methaan			16.04		
Stikstof			4.98		
Zuurstof		16.00			16.00
Koolmonoxide					
Kooldioxide				4.99	
Cyclohexaan	0.78				
Water					
Methanol					
Ethanol					
n-Propanol					
n-Butanol					
n-Pentanol					
Totaal:	0.78	16.00	21.02	4.99	16.00

APPARAATSTROOM	1	2	3	4	5
Q:	-1404	-22	-74960	-43547	3566

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	6	7	8	9	10
Waterstof			3.84	3.84	15.50
Methaan	16.04	16.04	0.01	0.01	0.07
Stikstof	4.98	4.98	4.98	4.98	44.81
Zuurstof					
Koolmonoxide			30.66	30.66	105.03
Kooldioxide	4.99	4.99	0.81	0.81	4.19
Cyclohexaan					
Water			1.72	1.72	0.01
Methanol					0.14
Ethanol					
n-Propanol					
n-Butanol					
n-Pentanol					
Totaal:	26.01	26.01	42.02	42.02	169.75

APPARAATSTROOM	6	7	8	9	10
Q:	-118510	-98459	-18187	-141640	-414580

M: kg/s Q: kW

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	11	12	13	14	15
Waterstof	19.33		19.33	19.33	19.33
Methaan	0.08		0.08	0.08	0.08
Stikstof	49.79		49.79	49.79	49.79
Zuurstof					
Koolmonoxide	135.69		135.69	135.69	135.69
Kooldioxide	4.99	4.99			
Cyclohexaan					
Water	1.73		1.73	1.73	1.73
Methanol	0.14		0.14	0.14	0.14
Ethanol					
n-Propanol					
n-Butanol					
n-Pentanol					
Totaal:	211.75	4.99	206.76	206.76	206.76

APPARAATSTROOM	11	12	13	14	15
Q:	-556220	-44483	-357620	-179240	-405550

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	16	17	18	19	20
Waterstof	19.33	18.33	18.33	19.33	
Methaan	0.08	0.08	0.08	0.08	
Stikstof	49.79	49.79	49.79	49.79	
Zuurstof					
Koolmonoxide	135.69	126.70	126.70	135.69	
Kooldioxide		2.21	2.21		
Cyclohexaan					
Water	1.73	2.23	2.23	1.73	
Methanol	0.14	5.36	5.36	0.14	
Ethanol		0.09	0.09		
n-Propanol		0.18	0.18		
n-Butanol		1.10	1.10		
n-Pentanol		0.87	0.87		
Totaal:	206.76	206.94	206.94	206.76	

APPARAATSTROOM	16	17	18	19	20
Q:	-512030	-405575	-426260	-512030	

M: kg/s Q: kW

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	21	22	23	24	25
Waterstof	19.33				
Methaan	0.08				
Stikstof	49.79				
Zuurstof					
Koolmonoxide	135.69				
Kooldioxide					4.99
Cyclohexaan					
Water		1.73	1.73	1.73	5.19
Methanol	0.14				
Ethanol					
n-Propanol					
n-Butanol					
n-Pentanol					
Totaal:	205.03	1.73	1.73	1.73	10.18

APPARAATSTROOM	21	22	23	24	25
Q:	-489132	-22898	-27213	-27213	-113468

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	26	27	28	29	30
Waterstof					
Methaan					
Stikstof					
Zuurstof					
Koolmonoxide					
Kooldioxide	4.99				
K-carbonaat		67.35			
Water	5.19	157.16	3.46	3.46	1.73
Methanol					
Ethanol					
n-Propanol					
n-Butanol					
n-Pentanol					
Totaal:	10.18	224.51	3.46	3.46	1.73

APPARAATSTROOM	26	27	28	29	30
Q:	-124907	-3139100	-54427	-54427	-27213

M: kg/s Q: kW

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	31	32	33	34	35
Waterstof			15.50	8.65	6.85
Methaan			0.07	0.04	0.03
Stikstof			44.81	25.01	19.80
Zuurstof					
Koolmonoxide			105.03	58.62	46.41
Kooldioxide	4.99	4.99	4.19	2.34	1.85
K-carbonaat	67.35	67.35			
Water	158.89	158.89	0.01	0.01	
Methanol			0.14	0.08	0.06
Ethanol					
n-Propanol					
n-Butanol					
n-Pentanol					
Totaal:	231.23	231.23	169.75	94.75	75.00

APPARAATSTROOM	31	32	33	34	35
Q:	-3191100	-3191100	-407900	-223747	-184159

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	36	37	38	39	40
Waterstof	6.85	15.50	17.69	17.69	17.22
Methaan	0.03	0.07	0.08	0.08	0.08
Stikstof	19.8	44.81	49.79	49.79	49.79
Zuurstof					
Koolmonoxide	46.41	105.03	120.92	120.92	116.70
Kooldioxide	1.85	4.19	3.63	3.63	4.66
Cyclohexaan					
Water		0.01	2.56	2.56	2.79
Methanol	0.06	0.14	8.73	8.73	11.18
Ethanol			0.15	0.15	0.19
n-Propanol			0.29	0.29	0.38
n-Butanol			1.80	1.80	2.32
n-Pentanol			1.43	1.43	1.84
Totaal:	75.00	169.75	207.07	207.07	207.15

APPARAATSTROOM	36	37	38	39	40
Q:	-176985	-400720	-426240	-445540	-445550

M: kg/s Q: kW

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	41	42	43	44	45
Waterstof	17.22	17.22	15.50	1.72	17.22
Methaan	0.08	0.08	0.07	0.01	0.08
Stikstof	49.79	49.79	44.81	4.98	49.79
Zuurstof					
Koolmonoxide	116.70	116.70	105.03	11.67	116.70
Kooldioxide	4.66	4.66	4.19	0.47	4.65
Cyclohexaan					
Water	2.79	2.79	0.01		0.01
Methanol	11.18	11.18	0.14	0.01	0.15
Ethanol	0.19	0.19			
n-Propanol	0.38	0.38			
n-Butanol	2.32	2.32			
n-Pentanol	1.84	1.84			
Totaal:	207.15	207.15	169.75	18.86	188.60

APPARAATSTROOM	41	42	43	44	45
-Q:	-638600	-686750	-480940	-53438	-534380

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	46	47	48	49	50
Waterstof					
Methaan					
Stikstof					
Zuurstof					
Koolmonoxide					
Kooldioxide	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02
Cyclohexaan					
Water	2.78	2.78	2.78		
Methanol	11.03	11.03	11.03	26.25	26.25
Ethanol	0.19	0.19	0.19	0.45	0.45
n-Propanol	0.38	0.38	0.38		
n-Butanol	2.32	2.32	2.32		
n-Pentanol	1.84	1.84	1.84		
Totaal:	18.55	18.55	18.55	26.72	26.72

APPARAATSTROOM	46	47	48	49	50
Q:	-152370	-152370	-145190	-166371	-195935

M: kg/s Q: kW

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	51	52	53	54	55
Waterstof					
Methaan					
Stikstof					
Zuurstof					
Koolmonoxide					
Kooldioxide	0.01	0.01	0.01	0.01	
Cyclohexaan					
Water					2.78
Methanol	15.23	15.23	11.02	11.02	0.01
Ethanol	0.26	0.26	0.19	0.19	
n-Propanol					0.38
n-Butanol					2.32
n-Pentanol					1.84
Totaal:	15.50	15.50	11.22	11.22	7.33

APPARAATSTROOM	51	52	53	54	55
Q:	-113659	-113659	-82308	-82308	-62104

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	56	57	58	59	60
Waterstof					
Methaan					
Stikstof					
Zuurstof					
Koolmonoxide					
Kooldioxide					
Cyclohexaan					6.93
Water	2.78	2.78	0.14	2.64	1.18
Methanol	0.01	0.01		0.01	0.08
Ethanol					0.02
n-Propanol	0.38	0.38	0.23	0.15	0.79
n-Butanol	2.32	2.32	2.20	0.12	0.42
n-Pentanol	1.84	1.84	1.80	0.04	0.13
Totaal:	7.33	7.33	4.37	2.96	9.55

APPARAATSTROOM	56	57	58	59	60
Q:	-62104	-62701	-19831	-42870	-31192

M: kg/s Q: kW

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	61	62	63	64	65
Waterstof					
Methaan					
Stikstof					
Zuurstof					
Koolmonoxide					
Kooldioxide					
Cyclohexaan	6.93	5.04	5.04	1.89	1.89
Water	1.18	0.86	0.86	0.32	0.32
Methanol	0.08	0.06	0.06	0.02	0.02
Ethanol	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01
n-Propanol	0.79	0.58	0.58	0.22	0.22
n-Butanol	0.42	0.31	0.31	0.12	0.12
n-Pentanol	0.13	0.10	0.10	0.04	0.04
Totaal:	9.55	6.97	6.97	2.62	2.62

APPARAATSTROOM	61	62	63	64	65
Q:	-37690	-27553	-27553	-10293	-10293

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	66	67	68	69	70
Waterstof					
Methaan					
Stikstof					
Zuurstof					
Koolmonoxide					
Kooldioxide					
Cyclohexaan	1.89	2.10	0.21	1.32	6.9
Water	0.46	0.27	2.60	0.27	1.42
Methanol	0.02	0.02		0.02	0.07
Ethanol	0.01				0.04
n-Propanol	0.44	0.07		0.07	0.33
n-Butanol	2.32				
n-Pentanol	1.84				
Totaal:	6.98	2.46	2.81	1.68	8.76

APPARAATSTROOM	66	67	68	69	70
Q:	-30124	-8572	-40734	-7168	-30467

M: kg/s Q: kW

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	71	72	73	74	75
Waterstof					
Methaan					
Stikstof					
Zuurstof					
Koolmonoxide					
Kooldioxide					
Cyclohexaan	6.90	5.01	5.01	1.89	1.89
Water	1.42	1.04	1.04	0.39	0.39
Methanol	0.07	0.06	0.06	0.02	0.02
Ethanol	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01
n-Propanol	0.33	0.25	0.25	0.09	0.09
n-Butanol					
n-Pentanol					
Totaal:	8.76	6.38	6.38	2.40	2.40

APPARAATSTROOM	71	72	73	74	75
Q:	-37141	-27174	-27174	-10239	-10239

APPARAATSTROOM MASSASTROOM ↓	76	77	78	8a	27a
Waterstof				3.84	
Methaan				0.01	
Stikstof				4.98	
Zuurstof					
Koolmonoxide				30.66	
Kooldioxide			0.01	0.81	
	Cyclohexaan 0.57				K-carbonaat 67.35
Water	0.12	0.07	0.07	1.72	157.16
Methanol	0.01		11.02		
Ethanol			0.19		
n-Propanol	0.03	0.35	0.35		
n-Butanol		2.32	2.32		
n-Pentanol		1.84	1.84		
Totaal:	0.73	4.58	15.80	42.02	224.51

APPARAATSTROOM	76	77	78	8a	27a
Q:	-3072	-19378	-101686	-21775	-3102100

M: kg/s Q: kW

BIJLAGE B10: Berekening van de costliness factor

	ton/ton MAS	doorzet	reactietijd	temperatuur	druk	materiaal	S totaal	f
handling								
CH4	1.02	0	0	0	0.7	0	0.7	1.20
N2	0.32	-2.2	0	0	0.7	0	-1.5	0.67
O2	1.02	0	0	0	0.7	1	1.7	1.56
CO2 rec	4.99	3	0	0	0	1	4	2.86
MAS rec								
H2	0.99	0	0	0	2.5	1	3.5	2.50
N2	2.85	2	0	0	2.5	1	5.5	4.23
CO	6.70	3.5	0	0	2.5	1	7	6.27
CO2	0.27	-2.5	0	0	2.5	1	1	1.30
COND r+s								
H2	1.10	0	0	0	0	1	1	1.30
N2	3.17	2	0	0	0	1	3	2.20
CO	7.43	3.6	0	0	0	1	4.6	3.34
CO2	0.30	-2.2	0	0	0	1	-1.2	0.73
SCH MAS	1.00	0	0	0	0	1	1	1.30
SCH H2O	0.17	0	0	0	0	1	1	1.30
proces								
SYNG	2.67	1.5	0	2.5	0.7	1	5.7	4.46
CO2	13.48	4.8	0	0	0	1	5.8	4.58
COMP	13.16	4.7	0	0	2.5	1	8.2	8.60
MAS	13.16	4.7	0	0	2.5	1	8.2	8.60
COND	13.19	4.7	0	0	0	1	5.7	4.46
DEST	1.18	0	0	0	0	1	1	1.30
							TOTAAL	62.77

BIJLAGE B11: Berekening van de kosten

Kp		apparaat	doorzet		tarief	opbrengst
			[kg/s]	[ton/jr]	[f/ton]	[Mf/jr]
	aardgas					
			21.02	605376.00	310.00	187.67
	zuurstof					
			16.00	460800.00	306.00	141.00
	cyclohexaan					
			0.78	22464.00	336.00	7.55
	stoom (3 bar)					
		H4	-43.18			
		H20	15.72			
		H36	13.76			
		H45	3.22			
		H51	3.17			
		totaal	-7.31	-210528.00	30	-6.32
	stoom (10 bar)					
		H13	1.61	46368.00	32.50	1.51
	koelwater					
		H7	2707.08			
		H15	129.74			
		H21	79.90			
		H24	230.88			
		H32	353.64			
		H38	7.14			
		H41	77.73			
		H47	79.83	[Mton/jr]		
		totaal	3665.94	105.58	0.10	10.56
	elektriciteit		[kW]			
		C5	935			
		C6	178384			
		C9	154420			
		P19	37000			
		C26	-193050			
		C30	80220	[kWh/jr]	[f/kWh]	
		totaal	257909	2.06E+09	0.13	268.23
	proceswater					
		T40	2.81	80928.00	2.5	0.20
	katalysator					
		R8, R23, R2		180.00	25273.78	4.55
					totaal	614.95
L	loonkosten (Wessel-functie)	functieplaats 2.4			kf/plaats 350.00	0.84
I	investeringskosten					540.00
Kt	$K_t = 1.13 \cdot K_p + 2.6 \cdot L + 0.13 \cdot I$				[Mf/jr]	767.27
Baten			doorzet		tarief	opbrengst
			[kg/s]	[ton/jr]	[f/ton]	[Mf/jr]
	MAS		15.8	455040.00	1800.00	819.07
Winst				Baten-Kosten	[Mf/jr]	51.80

BIJLAGE B12: Rentabiliteit

Berekening van de capital charge en de return on investment (IRR)

De totale investeringen (I) worden rechtlijnig gespreid over een bouwtijd van twee jaar. Er kan nu een jaarlijks noodzakelijke cash-flow (C_f) berekend worden om een gemiddelde jaarlijkse, gediscoteerde winst van 10% op het project te behalen, waarbij rekening gehouden wordt met een belasting van 50% op de winst. De afschrijvingen vinden rechtlijnig plaats in 5 jaar. Er wordt uitgegaan van een economische levensduur van 10 jaar. De restwaarde van de fabriek is na aftrek van de ontmantelingskosten verwaarloosbaar. De volgende tabel kan nu worden opgesteld.

Tabel 1: De cash-flowtabel ter bepaling van de capital charge

jaar	investering	C_f	afschrijving	belastbare C_f	belasting	netto C_f	discountfaktor 10%
1-2	0.5I					-0.5I	1.7235
3-7		C_f	0.2I	$C_f - 0.2I$	$0.5(C_f - 0.2I)$	$0.5C_f + 0.1I$	3.0630
8-12		C_f		C_f	$0.5C_f$	$0.5C_f$	1.8579

De netto cash-flow wordt berekend door de cash-flow te verminderen met de belasting. De discountfactor houdt rekening met het feit, dat geld in waarde verandert in de tijd. De totale cash-flow na discontering bedraagt nu:

$$C_{f_{tot}} = -0.5 \cdot I \cdot 1.7235 + (0.5 \cdot C_f + 0.1 \cdot I) \cdot 3.0630 + 0.5 \cdot C_f \cdot 1.8579 \quad (\text{B12.1})$$

Wanneer de totale cash-flow nu gelijk is aan nul, dan is er juist 10% winst behaald. Er geldt nu:

$$C_f = 0.226 \cdot I \quad (\text{B12.2})$$

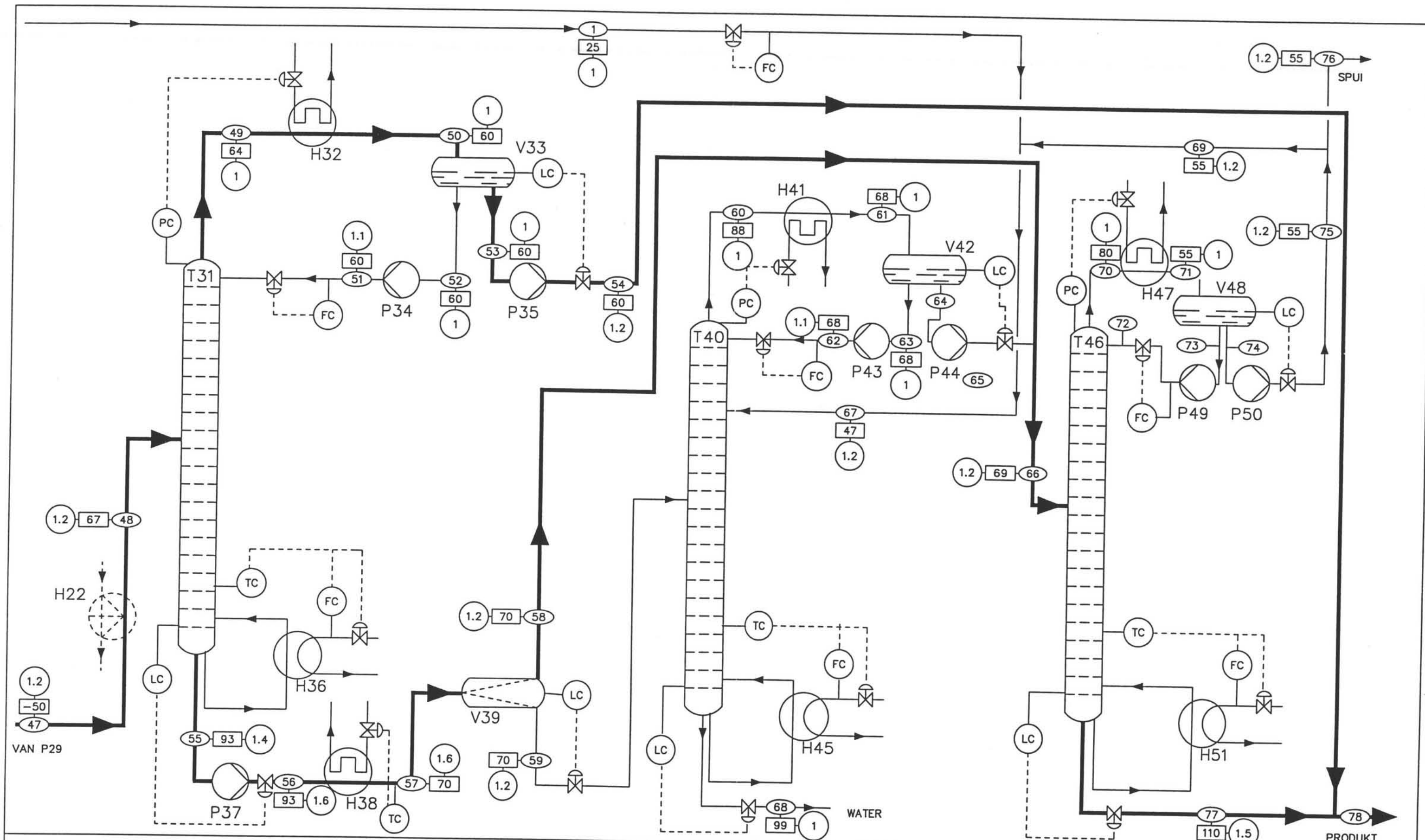
De capital charge bedraagt nu 22.6%. Dit houdt in, dat met deze factor voldoende cash-flow wordt gegenereerd voor een winst van 10%.

De netto cash-flowtabel komt er nu als volgt uit te zien.

Tabel 1: De netto cash-flowtabel ter bepaling van IRR

jaar	netto cash-flow		DCF - 40%		IRR - 10.534%		40%	D_f 10.534%
	Mf uit	Mf in	Mf uit	Mf in	Mf uit	Mf in		
1	270.0		192.9		244.3		0.714	0.905
2	270.0		137.8		221.0		0.510	0.818
3		115.0		41.9		85.2	0.364	0.740
4		115.0		29.9		77.1	0.260	0.670
5		115.0		21.4		69.7	0.186	0.606
6		115.0		15.3		63.1	0.133	0.548
7		115.0		10.9		57.1	0.095	0.496
8		61.0		4.1		27.4	0.068	0.449
9		61.0		3.0		24.8	0.048	0.406
10		61.0		2.1		22.4	0.035	0.367
11		61.0		1.5		20.3	0.025	0.332
12		61.0		1.1		18.3	0.018	0.301
totaal	540.0	880.2	330.6	131.2	465.3	465.3		
in/uit ratio	1.63		0.40		1.00			

Hierin is DSF de discount cash-flow en D_f de continue discountfactor. Er wordt nu er een waarde voor IRR gevonden van 10.534%.



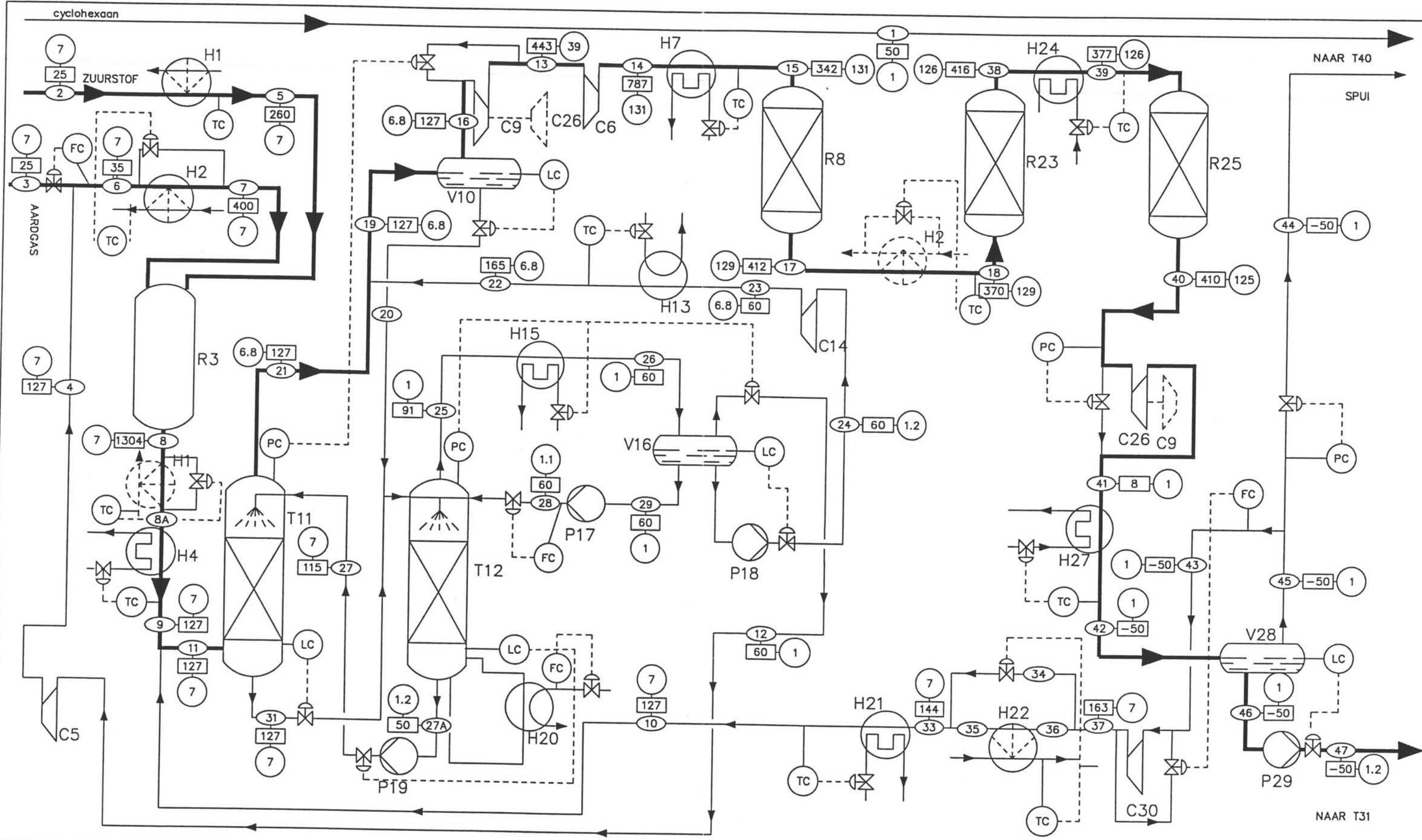
T 31	METHANOLKOLOM	H 41	KOELER	H 51	VERWARMER
H 32	CONDENSOR	V 42	STABILIZER		
V 33	STABILIZER	P 43	POMP		
P 34	POMP	P 44	POMP		
P 35	POMP	H 45	VERWARMER		
H 36	VERWARMER	T 46	KOLOM		
P 37	POMP	H 47	KOELER		
H 38	KOELER	V 48	STABILIZER		
V 39	LL SCHEIDER	P 49	POMP		
T 40	EXTRACTIEVE DEST	P 50	POMP		

Van methaan naar (hogere) alcoholen
via het MAS-proces

B. Hollanders R.J.A. Smits
E.A. Serafini R. van Strien

FVO 3115
december 1994

○ stroomnummer □ temperatuur in C ● abs druk in bar (2)



H 1	WARMTEWISSELAAR	T 11	CO2-ABSORBER	H 21	KOELER
H 2	WARMTEWISSELAAR	T 12	CO2-STRIPPER	H 22	WARMTEWISSELAAR
R 3	REAKTOR	H 13	VERWARMER	R 23	GEPAKT BED REAKTOR
H 4	KOELER	C 14	TURBINE	H 24	KOELER
C 5	TURBINE	H 15	KOELER	R 25	GEPAKT BED REAKTOR
C 6	COMPRESSOR	V 16	VLOEISTOF-GAS SCHEIDER	C 26	EXPANDER
H 7	KOELER	P 17	POMP	C 26	TURBINE
R 8	GEPAKT BED REAKTOR	P 18	POMP	H 27	KOELER
C 9	COMPRESSOR	P 19	POMP	V 28	VLOEISTOF-GAS SCHEIDER
V 10	VLOEISTOF-GAS SCHEIDER	H 20	VERWARMER	P 29	POMP
				C 30	TURBINE

Van methaan naar (hogere) alcoholen
via het MAS-proces

B. Hollanders R.J.A. Smits
E.A. Serafini R. van Strien

FVO 3115
december 1994

○ stroomnummer □ temp in C ● abs. druk in bar

