

16-3-93

F.V.O.Nr.: 2953

Vakgroep Chemische Procestechnologie

Verslag behorende  
bij het fabrieksvoorontwerp  
van

A. E. Dahoe .....  
S. Mahesh .....

onderwerp:

Het Calcor proces, de productie  
van koolmonoxide uit aardgas.

adres: Dahoe : Van Hasseltlaan 456  
2625 JD Delft

Mahesh: Foulkeslaan 22  
2625 PW Delft

opdrachtdatum: december 1991

verslagdatum: februari 1993

7 CF

DFVO

reactor: goed

selectie: goed/nuttig

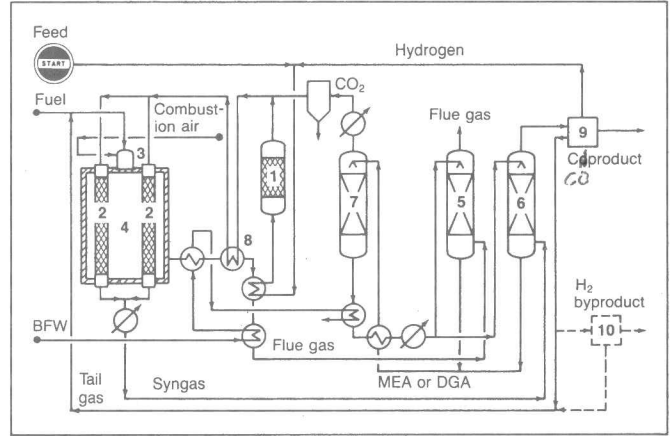
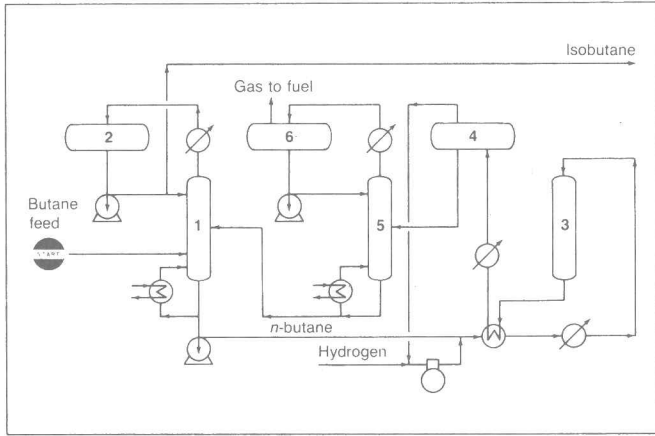
anderb. van keuzes kan sterker

keuze/ercon. aspecten: ter recept nuttig.



2862

2889 → Meriden → FVO  
2953



## Butamer

**Application:** To economically convert normal butane to isobutane catalytically in the presence of hydrogen. Processing conditions are mild.

**Product:** The once-through product approximates equilibrium concentrations of isobutane; in recycle operations, product is high-purity isobutane.

**Description:** The Butamer process is a fixed-bed, vapor phase process promoted by the injection of trace amounts of organic chloride and the addition of a small amount of hydrogen.

The plant consists of a heater, reactor, condenser, separator, recycle gas compressor, stabilizer and means for supplying the small amount of make-up hydrogen to satisfy chemical hydrogen consumption and solution losses.

The overall process flow scheme for the Butamer system will depend on the specific process application. Typically, for feed streams low in normal butane, the reactor feed will be enriched with respect to normal butane by charging the total feed to a deisobutanizer (1,2), as illustrated in the simplified flow diagram. The normal butane concentrate recovered from the deisobutanizer is combined with make-up and recycle hydrogen, heated and charged to the reactor (3). The process utilizes a high activity, selective catalyst that promotes the desired conversion of normal to isobutane at low temperature.

Reactor effluent is cooled and flows to a separator (4) where hydrogen is recovered and recycled. Separator liquid is pressured to a stabilizer (5,6) for removal of the small amount of coproduct light gas. Stabilizer bottoms are returned to the deisobutanizer where isobutane present in the outside feed and that produced in the isomerization reactor are recovered overhead. Unconverted normal butane is recycled to the Butamer system along with fresh normal butane.

The investment and operating requirements of the deisobutanizer represent a substantial portion of the overall requirements of the isomerization facilities. When Butamer is applied to production of isobutane for use in alkylation operations, the unit can be integrated with the alkylation plant, thus eliminating the need for an external deisobutanizer and resulting in a major savings in investment costs.

**Yields:** Weight yields are more than 99%. Volumetric yields typically exceed 100%.

**Installations:** Forty UOP-licensed Butamer units have been commissioned to date and seven others are in design or under construction. Design and feed capacities range from 1,000 to more than 18,000 bpsd. Ten are integrated directly with UOP HF alkylation units.

**Reference:** D. Rosati and J. A. Weiszmann, "UOP Butamer Process," *Handbook of Petroleum Refining Processes*, Robert A. Meyers, Ed., McGraw-Hill Book Co., New York, N.Y., 1986.

**Licensors:** UOP.

## Calcor

↓ CH<sub>4</sub> effluent

**Application:** Production of CO from natural gas or LPG.

**Product:** Carbon monoxide with a purity of up to 99.85 vol%.

**Description:** The Calcor process is a reforming process combined with a CO<sub>2</sub> recovery and a CO purification step.

The feed is mixed with a split stream of H<sub>2</sub>, then preheated prior to passing a catalytic hydration and absorptive sulfur removal (1). The feed is then mixed with CO<sub>2</sub>. While passing the catalyst in the reformer tubes (2), the mixture of CO<sub>2</sub> and feed is converted into a syngas consisting of carbon monoxide together with H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub>. The heat for this endothermic reaction is generated by a high-velocity burner (3) firing into the reformer plenum (4) from which the heat is transferred to the surface of the reformer tubes by radiation and convection. After leaving the reformer, the syngas is cooled to ambient temperature prior to undergoing the CO<sub>2</sub> removal and recovery. In this process step, the CO<sub>2</sub> from the reformer flue gas as well as the CO<sub>2</sub> from the raw gas is absorbed in packed towers (5, 6) at ambient temperature by a caustic solution. In a stripper (7), the CO<sub>2</sub> is separated from the scrubbing liquid and recycled via a preheater (8) to the reforming process.

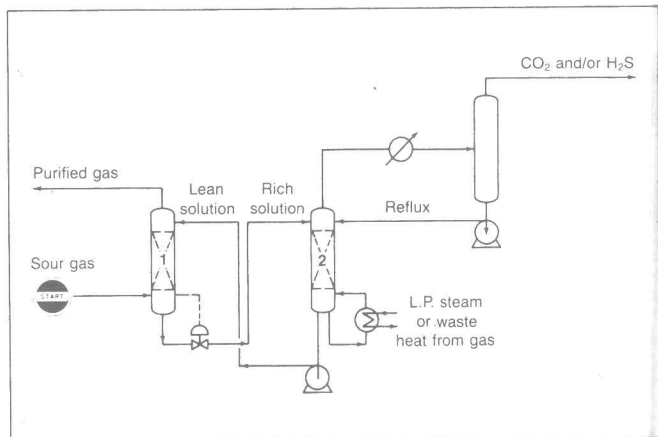
The syngas, which typically consists of 70 vol% CO and 30 vol% H<sub>2</sub> and still carries traces of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub>, enters the CO purification step (9). The tail gas separated in the low-temperature or membrane CO purification step is either returned to the reformer as fuel, or upgraded in a PSA unit (10) and exported as technical grade hydrogen.

**Economics:** With the recovery of the CO<sub>2</sub> from the reformer flue gas as well as from the syngas, the Calcor process generates almost 1 CO molecule out of every C-atom imported into the process as feed or fuel. Thus the carbon yield of 97 to 99% almost reaches the theoretical maximum.

For the production of 1 t CO (100%), the main utility required would be either 816 Nm<sup>3</sup> methane or 531 kg LPG (feed + fuel).

**Installations:** To date, four commercial plants have been installed and another three are currently under construction.

**Licensors:** Caloric GmbH.



## Catacarb

**Application:** Removal of CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S and COS from gas streams. The purified gas contains less than 4 ppm H<sub>2</sub>S and between 50 ppm and 2% CO<sub>2</sub>. The CO<sub>2</sub> in absence of H<sub>2</sub>S is suitable for food or beverage use and for EOR.

**Description:** Raw gas is scrubbed in a packed or trayed absorber (1) with a corrosion inhibited potassium salt solution containing a very active, stable, nontoxic catalyst. Two stages are used when a high purity gas is needed. Rich solution is flashed and fed to the top of the regenerator (2) for steam stripping to remove CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>S. Regenerated solution is recycled to the absorber. The flow diagram and process conditions and solution composition are selected according to the gas composition and pressure, the purified gas specification, the availability of low level waste heat and the cost of heat. The new Catacarb process combines conventional know-how with low energy technology to give significant heat savings.

**Operating conditions:**

Absorption pressure—Usually 50 to 1,500 psig.  
 Gas composition—varies from 3 to 50% acid gas in usual applications. Higher hydrocarbons do not cause dew point problems and are not appreciably picked up.

Gas temperature—Ambient to 450°F. Hot gas can supply all or part of the solution regeneration heat.

Regeneration pressure—Atmospheric to 30 psig.

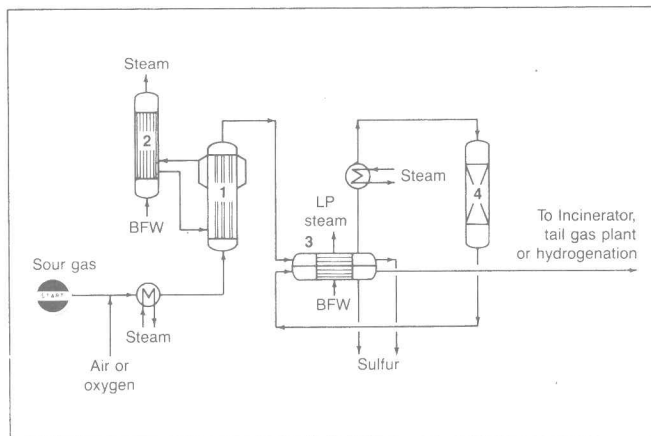
**Economics:** For a 90 MMscfd H<sub>2</sub> plant, removing CO<sub>2</sub> from 20.5 to 0.15%.

	Case 1	Case 2
Capital investment, MM\$	5.8	6.2
Waste heat from gas, MMBtu/h	101	74
Power, kWh	750	1,640
C.W. (25°F rise), Mgal	343	317

**Installations:** More than 100 plants.

**Reference:** McKetta, John J., Encyclopedia of Chemical Processing & Design, Vol. 6, Chapter on CO<sub>2</sub> Removal, pp. 292-310, Marcel Dekker, New York.

**Licensor:** Eickmeyer & Associates.



## Catasulf

**Application:** Desulfurization of sour gases with 5 to 15% vol H<sub>2</sub>S. Typical applications are for sour gases from: partial oxidation of liquid residues, coal gasification or natural gas scrubbing.

**Products:** Purified gas with sulfur recovery between 94 and 99.99%, depending on the purification steps used; Sulfur in a particularly pure form; Medium pressure steam up to 40 bar.

**Description:** The gas containing H<sub>2</sub>S and a stoichiometric amount of air or oxygen is passed through an isothermal tubular reactor (1) containing a novel highly active and selective catalyst. In this stage, up to 94% of all sulfur compounds are converted to sulfur.

The heat of reaction evaporates the cooling agent, which is then condensed (2) to produce medium pressure steam.

The reaction mixture is cooled (3) to condense the sulfur formed. The reaction mixture is then further desulfurized in a second stage by catalytic oxidation of the sulfur compounds to elemental sulfur in an adiabatic reactor (4) followed by sulfur condensation. In the second stage the conversion rate can be raised up to 97.5%. The gas is finally passed to a catalytic incinerator or a tail gas plant.

Enrichment of H<sub>2</sub>S using an energy-intensive selective scrubbing unit for a typical "Claus Gas" is no longer necessary.

**Economics:** Capital investment and utilities consumption vary depending on gas thruput and gas composition. The sulfur recovery of a Catasulf unit with one adiabatic reactor is similar to that of a three-converter Claus plant. The details relate to a Catasulf plant for the desulfurization of 10,000 m<sup>3</sup>/h of sour gas with an H<sub>2</sub>S content of from 5 to 15% by volume from an MDEA scrubbing unit after a partial oxidation process.

Capital investment, 1985, including catalytic incineration or hydrogenation	\$4 million
Power, kWh	20
Steam (consumption), 16 bar, t/h	2.2
Steam (generated for export), t/t of S	2.2

**Installations:** 1 plant (48 t/d sulfur).

**Reference:** U.S. Patent No. 4,507,274

**Licensor:** BASF AG.

bespreking 16 maart '93

## Samenvatting

Dit fabrieksvoorontwerp geschiedde in het kader van de vierdejaars ontwerpopdracht voor Scheikundige Technologie studenten aan de Technische Universiteit Delft.

Het voorontwerp betreft een proces om koolmonoxide te produceren uit aardgas. Er is van uitgegaan dat aardgas uitsluitend uit methaan bestaat. Hoewel men methaan met kooldioxide dient te laten reageren om koolmonoxide te produceren is er gekracht om het proces zodanig in te richten dat methaan de enige benodigde grondstof is voor de fabriek. Dit kwam tot stand door het kooldioxide uit de rookgassen van het fornuis (dat de reactiewarmte moet leveren) af te scheiden en op te mengen met de methaanvoedingsstroom van de reactor. Deze procesvoering brengt met zich mee dat 30% van de totale investeringen gedaan zijn in scheidingsapparatuur voor de terugwinning van kooldioxide.

Om het proces economisch rendabel te maken zijn de bijproducten (stikstof en waterstof) minstens even belangrijk als het hoofdproduct.

Jaarlijks wordt er 7920 ton koolmonoxide, 415 ton waterstof en 44066 ton stikstof geproduceerd waarbij een jaar opgebouwd gedacht is uit 8000 bedrijfsuren. De totale investeringen bedragen ca. 10,3 miljoen gulden en de netto winst bedraagt ca. 1,3 miljoen gulden per jaar. De Pay Out Time bedraagt 7,5 jaar en de Return on Investment 12,6%.

# INHOUDSOPGAVE

	pag.
1. Inleiding	2
2. Uitgangspunten van het ontwerp	4
2.1 Grondstoffen, utilities en produktiecapaciteit	4
2.2 Afvalstromen	4
2.3 Endogene gegevens	5
3. Procesbeschrijving	6
3.1 Processchema	6
3.2 Flexibiliteit	8
3.3 Opstartprocedure	9
3.4 Procesbeveiliging	9
4. Procescondities	10
4.1 De reacties	10
4.2 De katalysator	
4.2.1 Vergelijking van de rhodium en de ruthenium katalysator	12
4.2.2 Katalysator dispersie	14
4.3 De kinetiek	15
4.4 Het mathematisch model van de reactor	19
5. Dimensionering van de apparatuur	28
5.1 De reactor	28
5.2 De warmtewisselaars	30
5.3 De condensoren	41
5.4 De reboiler	42
5.5 De pompen	44
5.6 De compressoren	46
5.7 De expander	51
5.8 De kolommen	52
6. Economische analyse	61
6.1 De investeringen	61
6.2 Proceskosten	63
6.2.1 De fabricage kosten	63
6.2.2 Utilities	64
6.2.3 Loonkosten	65
6.2.4 Onderhoud	65
6.2.5 Verzekeringskosten	66
6.2.6 Plantoverheads	66
6.3 Opbrengst van het proces	66

6.4 De verlies- en winst rekening	67
6.5 Return on Investment	68
6.6 Pay Out Time	68
7. Conclusies en aanbevelingen	69
8. Literatuurlijst	70

Bijlage I

Tabellen

Bijlage II

Figuren

Bijlage III

Massa- en warmtebalans

Bijlage IV

Stroom- en componentenstaat

Bijlage V

Specificatiebladen van de apparatuur

Bijlage VI

*Simulatie resultaten*

X

- essentie van Calcor route
- product maat
- wie brengt de Calcor techn. op de markt?
- waarom moet het concurreren op de markt
- ontwerp aanpak vanwege tijdsbeperkingen?

## 1. Inleiding

Mek een patent van het Calcor-proces [6] als leidraad is er een voorontwerp gemaakt van een fabriek om koolmonoxide te produceren uit aardgas. Gezien het feit dat een aantal units van de fabriek niet kon worden gesimuleerd (o.m. wegens ontbrekende data in en beperkingen van de beschikbare simulatiepakketten) is er uitgegaan van een zeer grof ontwerp dat steeds meer verfijnd werd.

Hoewel er een kant en klaar model beschikbaar was om de reactor te modelleren [5] is er een zelfontworpen model gehanteerd omdat het eerstgenoemd model onoverkomelijke wiskundige problemen opleverde (het bevatte onder meer drie tweede orde partiële differentiaalvergelijkingen die simultaan moesten worden opgelost). Als katalysator wordt er een rhodium-katalysator gebruikt aangezien deze katalysator overeenkomstig die uit het patent geen koolvorming tot gevolg heeft. Door het ontbreken van koolvorming mag er gesteld worden dat er voor elk methaanmolecuul dat wordt geïmporteerd in het proces, men een koolmonoxide molecuul produceert. Hiermee is de theoretisch maximaal haalbare opbrengst vastgelegd. Het blijkt dat dit proces 97,1% van de theoretisch maximaal haalbare koolstofopbrengst haalt.

Voor de terugwinning van kooldioxide is er

monoethanolamine (MEA) als absorptie-middel gebruikt. Deze keuze werd niet vanuit chemisch oogpunt gedaan maar vanwege het feit dat er voldoende gegevens beschikbaar waren van dit middel voor het niet-isotherm ontwerp van de absorptie- en desorptietorens.

Gezien het feit dat aardgas gebruikt wordt voor de synthese van methanol is er aangenomen dat er een methanolstroom uit de omgeving beschikbaar is om als utility te dienen.



## 2. Uitgangspunten van het ontwerp

### 2.1 grondstoffen, utilities en productie capaciteit

Hoewel het artikel uit [7] en het patent van het Caloric Gesellschaft für Apparatebau [6] aangeven dat er zowel aardgas als LPG als grondstof kunnen dienen is er uitsluitend gewerkt met aardgas als grondstof. Er is gedaan alsof aardgas volledig uit methaan bestaat (waterrij, zwavelrij, stikstofrij) waardoor het niet nodig was om de voedingsstroom op te mengen met waterstof. Er is ook aangenomen dat het aardgas beschikbaar is bij een temperatuur van  $20^{\circ}\text{C}$  en een druk van 1 bar.

Het ontwerp was gericht op een jaarproductie van ca. 8000 ton waarbij een jaar gelijk is gesteld aan 8000 uren. De benodigde utilities waren rivierwater, stoom, electriciteit en een methanolstroom van  $-30^{\circ}\text{C}$ .

### 2.2 De afvalstromen

De afvalstromen zijn <sup>alleen</sup> alleen waterstromen (afkomstig van de scheidingsvaten en de warmtewisselaars). Het water uit de scheidingsvaten bevat opgelost  $\text{CO}_2$  waardoor het eerst een tijdje bloot moet staan aan de open lucht (bijvoorbeeld in een bassin) alvorens het geloosd kan worden. Bij de warmtewisselaars stijgt de temperatuur niet boven

de 15 (°C) uit waardoor er geen rekening gehouden dient te worden met thermische vervuiling bij het lozen van het gebruikt rivierwater.

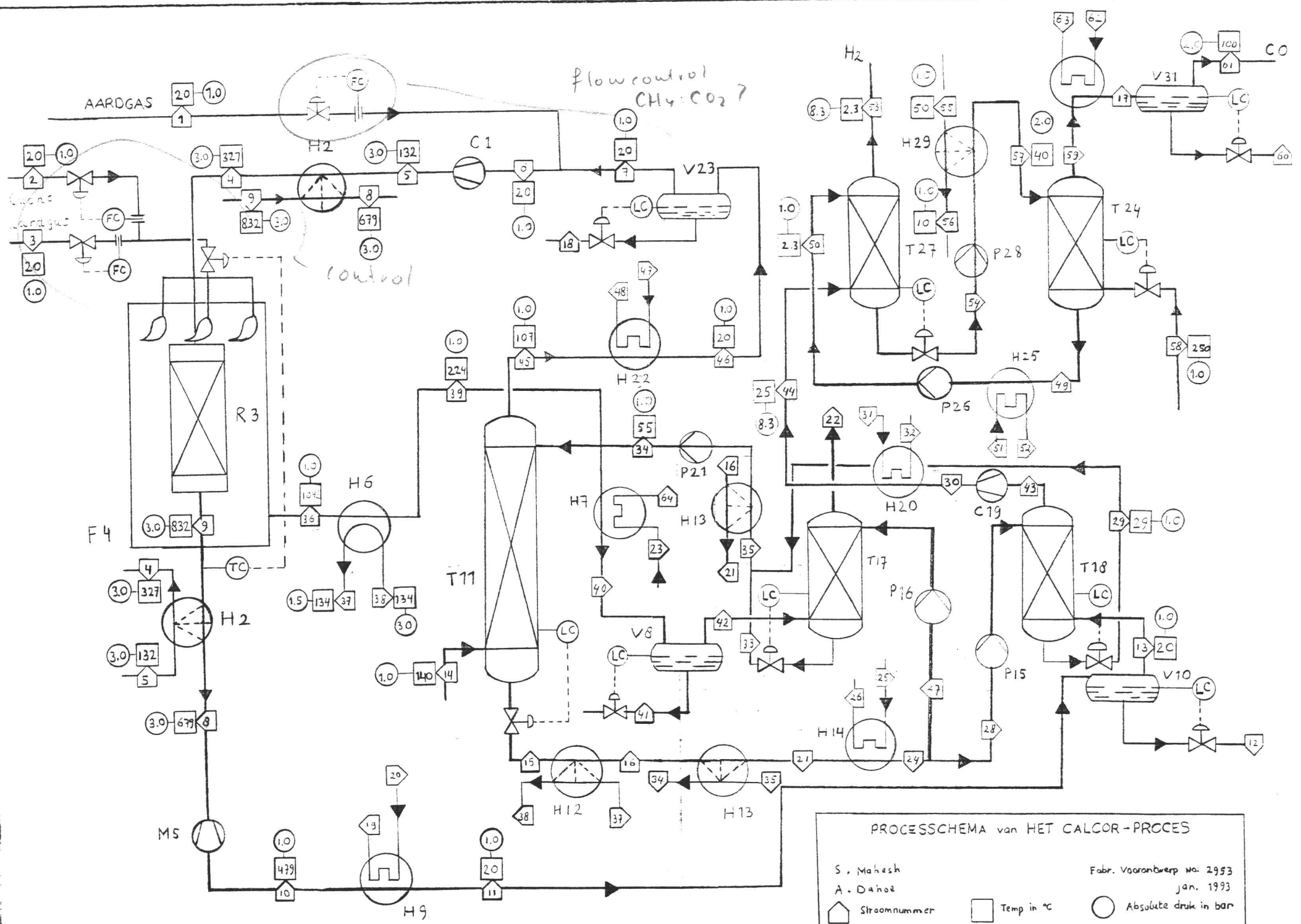
### 2.3 Endogene gegevens

In dit proces ontstaan er twee gevaarlijke gassen te weten koolmonoxide en waterstof. Daar koolmonoxide zwaar giftig is (het gaat competitie met zuurstof aan bij het aangaan van bindingen met de haem-groepen) en waterstof een explosief mengsel vormt met zuurstof dient de installatie lekvrij te zijn. Men dient koolmonoxide detectoren te plaatsen en er alles aan te doen om het gebeuren op de plant onkvrij te houden.

Vanwege de corrosiviteit van MEA dient men een gedeelte van de installatie in AISI 316 L roestvrij staal uit te voeren.

? hemoglobine

- Hoe zit het met de afname  $\frac{1}{h}$  product CO en van de nevenproducten  $H_2$  en  $N_2$
- Is het nodig grote opslag capaciteit te hebben?



### 3. Procesbeschrijving

#### 3.1 Het processchema

Het processchema van het Calcor-proces is weergegeven in figuur 3.1. Aangenomen wordt dat grondstofstroom (1) het proces binnenkomt met een temperatuur van  $20^{\circ}\text{C}$  en een druk van 1 bar. De grondstofstroom wordt opgemengd met de kooldioxide recycle-stroom (7) die dezelfde druk en temperatuur heeft als de grondstofstroom (1). Door middel van een flow control (1) wordt de aardgasstroom zodanig geregeld dat de juiste molverhouding  $\text{CH}_4 : \text{CO}_2$  voor stroom (6) wordt gehandhaafd (1/1,8). De zo verkregen voeding wordt gecomprimeerd met compressor C<sub>1</sub> naar een druk van 3 bar en verder opgewarmd naar  $327^{\circ}\text{C}$  met behulp van warmtewisselaar H<sub>2</sub>.

De reactiewarmte wordt geleverd door aardgas te verbranden met een 20% overmaat aan lucht in fornuis F<sub>4</sub>. De uit de reactor R<sub>3</sub> afkomstige productstroom (9) wordt afgekoeld tot  $679^{\circ}\text{C}$  door warmte over te dragen aan de voedingsstroom van de reactor (5) via warmtewisselaar H<sub>2</sub>.

De afgekoelde productstroom (8) die een druk heeft van 3 bar wordt geëxpandeerd naar een druk van 1 bar m. b. v. M<sub>5</sub> en verder afgekoeld tot  $20^{\circ}\text{C}$  m. b. v. koeler-condensator H<sub>9</sub>. De afscheiding van het gecondenseerd water geschiedt

Is afkoeling nodig?

in scheidingsvat V10.

De afgasstroom (36), afkomstig uit het fornuis wordt afgekoeld tot  $224^{\circ}\text{C}$  om stoom van  $134^{\circ}\text{C}$  en 3 bar in H6 te maken. Verdere afkoeling van de afgasstroom tot  $20^{\circ}\text{C}$  geschiedt in koeler H7, waarna afscheiding van het zo ontstane water in vat V8 plaatsheeft. De rest van de afgasstroom (42) wordt geleid naar de  $\text{CO}_2$ -absorptie-toren T17 waar het afgas ontdaan wordt van  $\text{CO}_2$ . Het van  $\text{CO}_2$ -ontdane afgas komt boven kolom T17 uit met een temperatuur van  $25^{\circ}\text{C}$  en een druk van 1 bar (22).

De 1 N MEA-stroom beladen met  $\text{CO}_2$  (35) wordt opgewarmd tot  $55^{\circ}\text{C}$  in H13 en geleid in de stripper T11. Hier wordt de met  $\text{CO}_2$  beladen MEA-stroom ontdaan van het  $\text{CO}_2$  en teruggevoerd naar de absorptie-torens T17 en T18. Het gestrip-te  $\text{CO}_2$  wordt afgekoeld tot  $20^{\circ}\text{C}$  in H22 en opgemengd met de aardgasstroom (1) om als voeding van de reactor te dienen.

Het van  $\text{CO}_2$  ontdane synthesegas verlaat de  $\text{CO}_2$ -absorptie toren T18 met een temperatuur van  $25^{\circ}\text{C}$  en een druk van 1 bar (43). Vervolgens wordt de stroom (43) gecomprimeerd tot 8,3 bar m. b. v. compressor C19 en afgekoeld tot  $25^{\circ}\text{C}$  m. b. v. H20 alvorens het de  $\text{CO}$ -absorptietoren T27 wordt ingeleid.

Het waterstofgas (53) verlaat de  $\text{CO}$ -absorptie-toren bij een temperatuur van  $2,3^{\circ}\text{C}$  en een druk van 8,3 bar. Het  $\text{CO}$  wordt geabsorbeerd in een koper-ammoniumformiaatoplossing bij een temperatuur van

Waarom?  
exotherm niet?  
Verblijftijd effect  
koppeling van component massa ~~component~~  
en energie balans balans



4,6 (°C) en een druk van 8,3 bar. Deze stroom (54) wordt vervolgens opgewarmd m. B. v. H29 tot 40 (°C) en in desorptietoren T24 geleid. Hier wordt de koperammoniumformiaat-oplossing ontdaan van het ~~X~~ CO<sub>2</sub> en na afluoding tot 2,3 (°C) in H25 teruggevoerd naar de CO-absorptietoren T27. Het gestripte CO wordt afgehoeld en opgeslagen.

### 3.2 Flexibiliteit

Bij het ontwerpen van alle apparatuur is er uitgegaan van een productie-capaciteit van ca. 8000 ton koolmonoxide per jaar. De productie-capaciteit is nauw gecorreleerd met hetgeen zich afspeelt in de reactor. Aangezien dit endotherme processen zijn is de doorzet van de reactor bepalend voor de productie capaciteit. En verandering van de doorzet heeft tot gevolg dat de verblijftijd verandert en dus de conversie.

Verandering van de capaciteit heeft ook invloed op de werking van de warmtewisselaars. En te hoge capaciteit veroorzaakt een te hoge drukval over de warmtewisselaars en een te lage capaciteit doet de warmteoverdracht verslechteren. (de warmteoverdrachtscoefficient verandert met het Reynolds getal). → hoeveel %? Scale-down? <sup>Overdesign</sup> Regeling?

Bij de kolommen heeft men iets meer speelruimte wak de capaciteit betreft omdat men de absorptievloeistof kan bijregelen door bijvoorbeeld extra MEA of koperammoniumformiaat kan introduceren.



vetbrandig levert  $\text{CO}_2$   $\rightarrow$  opstart?

? —

Omkering van vraagstelling: hoe <sup>flexibel?</sup> nauwkeurig nodig.

Gezien het feit dat de gehanteerde ontwerp-recepten 10% nauwkeurig zijn kan er gesteld worden dat de flexibiliteit van het proces ook tussen de 90% en 110% van de target-capaciteit zal liggen.

### 3.3 Opstart procedure

Bij het opstarten van de fabriek moet eerst met stilstof worden nagegaan of de apparatuur lekvrij is. Hierna kan de reactor op temperatuur worden gebracht en kan kooldioxide vanuit een externe bron worden geïntroduceerd in het proces. Dit om de  $CO_2$ - en CO-terugwinningseenheden op optimale condities te brengen. Vervolgens kan men de van de externe  $CO_2$ -bron afkomstige gasstroom doen afnemen naarmate er  $CO_2$  door het fornuis wordt geproduceerd.

### 3.4 Procesbeveiliging

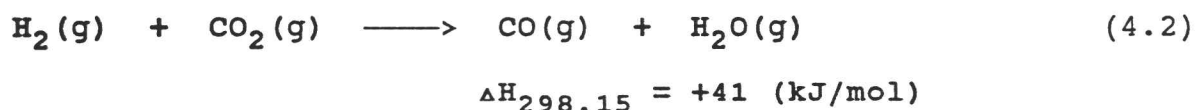
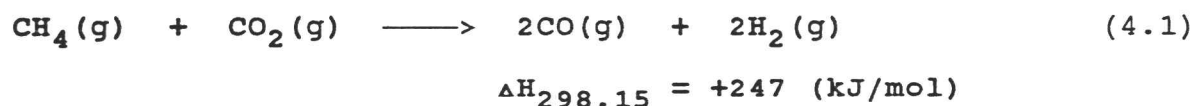
Gezien het feit dat de reacties die in de reactor plaatsvinden een endotherm warmte-effect teweeg brengen is het vrijwel uitgesloten dat de temperatuur uit de hand loopt. Een goede temperatuurregeling en -controle is echter wel nodig omdat de conversie sterk wordt beïnvloed door het op en neer halen van het fornuis.

Om te voorkomen dat de gas/vloeistof scheiders en de kolommen droog komen te staan, worden ze voorzien van niveau-regelaars.

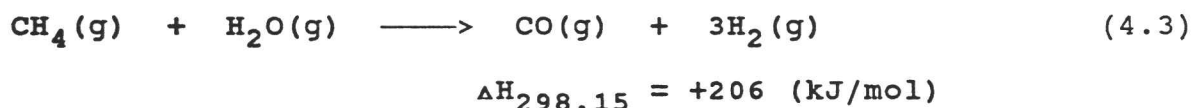
## 4. PROCESCONDITIES

### 4.1 De reacties

Er vinden twee parallelle reacties plaats waarbij één der produkten van de ene reactie reageert met één der reactanten van de andere reactie. De reactievergelijkingen luiden als volgt:



Vergelijking (4.1) wordt "carbon dioxide reforming of methane" genoemd en vergelijking (4.2) is bekend onder de naam "water/gas-shiftreaction". Tot het midden van de jaren tachtig genoot "steam reforming of methane" de voorkeur boven "carbon dioxide reforming of methane" vanwege het feit dat er voor het laatstgenoemde proces geen technologie beschikbaar was om koolstofvorming tegen te gaan tot een acceptabel niveau. De reactievergelijking van het reformen van methaan met stoom luidt:



Bij het reformen met stoom kon men de koolstofvorming tegen gaan door een overmaat aan stoom (één der reactanten) te gebruiken maar de prijs die men ervoor betaalde voelde men in de inefficiencies die optraden ten gevolge van deze excessieve stroom. De boosdoeners die leiden tot koolstof vorming zijn de nevenreacties die bekend zijn onder de namen Boudouard reactie en "reverse methanation reaction".

$$\Delta S < 0$$

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$



$$\Delta H_{298.15} = -172 \text{ (kJ/mol)}$$



$$\Delta H_{298.15} = +75 \text{ (kJ/mol)}$$

Bij de ontwikkeling van het Calcor proces streefde men ernaar om de temperatuur en de reactiesnelheid zodanig te regelen dat koolstof vorming ten gevolge van de Boudouard reactie en de "reverse methanation reaction" vermeden werd. De doorbraak werd geleverd door de ontwikkeling van geschik-katalysatoren [1].

#### 4.2 De katalysator

Bij het ontwikkelen van een katalysator voor reactie (4.1) is men uitgegaan van het activiteitspatroon van reactie (4.2). Dit activiteitspatroon luidt [2]:



Het bleek dat de activiteit van ruthenium en rhodium tien maal hoger was dan die van nikkel, platina en palladium. Ook rapporteerden Rostrup en Nielsen [2] een koolvormingspatroon dat luidt:



De bovengenoemde patronen deden de hypothese ontstaan dat edele metalen minder koolvormingsproblemen zouden opleveren en dat in bijzonder rhodium en ruthenium effectieve katalysatoren konden zijn voor het reformen van methaan met kool-dioxide. Richardson en Paripatyadar [1] hebben getracht deze hypothese te toetsen en hun onderzoek heeft niet alleen aangetoond dat de hypothese klopte maar ook nog geleid tot de ontwikkeling van een uiterst geschikte rhodium katalysator. Het bleek dat rhodium in alle opzichten superieur was ten opzichte van ruthenium. Er was helemaal geen sprake van koolvorming en men verkreeg ook kinetische snelheidsverge-

lijkingen die de uitkomst van de kinetische experimenten uiterst accuraat voorspelden. Ook werden deze kinetische vergelijkingen geïncorporeerd in mathematische modellen en geverifieerd middels experimenten in pilot opstellingen.

#### 4.2.1 Vergelijking van de rhodium en ruthenium katalysatoren

Een voorgaand onderzoek bevestigde dat rhodium en ruthenium geschikt zijn als katalysator voor de reforming van methaan met kooldioxide. De katalysatoren waren commerciële 0.5 wt. % Rh/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> en 0.5 wt. % Ru/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, beiden geleverd door Engelhard in de vorm van 3.2 mm pellets met egg-shell belading. Met uitzondering van het metaal waren de katalysatoren identiek (tabel 4.1).

Tabel 4.1 Eigenschappen van de rhodium en de ruthenium katalysatoren [1]

Metaal	Rh, Ru
Dragermateriaal	γ-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
oppervlak (m <sup>2</sup> g <sup>-1</sup> )	90
Pellet dichtheid (g cm <sup>-3</sup> )	1.75
Bed dichtheid (g cm <sup>-3</sup> )	1.05
Meso poriestraal (nm)	3
Macro poriestraal (nm)	300
Metaalgehalte (wt %)	0.5
Pellet diameter (cm)	0.32
"Egg shell" dikte (cm)	0.01

Beide commerciële katalysatoren werden vergeleken bij identieke temperaturen en space velocities in een buisreactor. De tabellen 4.2 en 4.3 tonen de resultaten van deze experimenten. De hier gebruikte space velocity is de gas hourly space velocity (GHSV). De GHSV is de reciproke van de space time maar de volumetrische gasstroom waardoor men deelt is bij de standaard temperatuur en druk gemeten.

Tabel 4.2 Vergelijking van de activiteit van de rhodium en de ruthenium katalysatoren  
 $\text{CO}_2/\text{CH}_4 = 1.0$

Temperatuur (°C)	Space velocity GHSV ( $10^{-3} \cdot \text{h}^{-1}$ )	Procenten conversie	
		0.5 % Rh	0.5 % Ru
600	51.1	31.0	33.2
650	103	41.1	34.2
700	103	62.6	52.5
750	103	73.2	70.6
800	103	85.5	82.8

Tabel 4.3 Vergelijking van de deactivering van rhodium en ruthenium katalysatoren

Temperatuur (°C)	Procenten gedeactiveerd in 8 h	
	0.5 % Rh	0.5 % Ru
600	1.32	12.0
700	0.69	3.6
800	verwaarloosbaar	verwaarloosbaar

De data uit de tabellen 4.2 en 4.3 tonen aan dat rhodium en ruthenium vergelijkbare activiteiten hebben en dat rhodium veel stabiel is. Deactivering neemt af met toenemende temperatuur hetgeen aangeeft dat sintering niet het overheersend deactiveringsmechanisme is. Het is onwaarschijnlijk dat koolvorming plaatsheeft via reactie (4.5) daar deze reactie endotherm is en de evenwichtsconstante toeneemt met de temperatuur. Waarschijnlijker is het dat de exotherme reactie (4.4) verantwoordelijk is voor de koolvorming aangezien de evenwichtsconstante afneemt met toenemende temperatuur. Dit is consistent met hetgeen bevonden is bij onderzoeken op het gebied van methanisering. Het bleek dat rhodium inactief was voor reactie (4.4) terwijl ruthenium snel deactiveerde.

De zwakke deactivering die rhodium vertoont werd niet veroorzaakt door koolvorming aangezien de katalysator niet

regeneerebaar was. Mogelijkerwijs is de deactivering veroorzaakt door een irreversibel vergif dat in de voeding zat of door de inerte pakking van de reactor is geëmitteerd. Dit type deactivering wordt vaak in kleine katalysator bedden waargenomen daar het effect van kleine vervuilingen in zulke gevallen het meest voelbaar is. Grote bedden vertonen dit effect nooit en de katalysator kan zeer lange tijd worden gebruikt zonder merkbare deactivering. Omdat rhodium in tegenstelling tot ruthenium geen koolvorming vertoont is er voor de rhodiumkatalysator gekozen.

#### 4.2.2 Katalysator dispersies

De dispersie van de katalysator is de fractie van de aan-gebrachte metaal atomen die zich aan het oppervlak van de drager bevinden. Onderzoek naar sintersnelheden toonde aan dat de sintering een grote snelheid heeft gedurende de eerste 2 tot 3 uur en dat er een stationaire toestand werd bereikt na 10 uur en het verlies van actief oppervlak zeer klein werd. Sintering is het verlies van katalytische activiteit ten gevolge van het verlies aan actief oppervlak. Het actief oppervlak neemt in dit geval af doordat het dragermateriaal  $\gamma$ -alumina via een faseovergang overgaat in  $\alpha$ -alumina waarbij er active sites verloren gaan. De sintering kan met behulp van de volgende vergelijking worden weer-gegeven:

$$A = \frac{A_0}{1 + k_d t}$$



met

$$k_d = k_d(T_0) \exp \left[ \frac{E_d}{R} \left( \frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (4.9)$$

De "sintering decay constant",  $k_d$ , is analoog met de Arrhenius vergelijking en  $E_d$  wordt de "decay activation energy" genoemd. Uit de vergelijkingen (4.8) en (4.9) volgt dat het actief oppervlak  $A$  na lange tijd een constante waarde bereikt. In tabel 4.4 worden de steady state waarden voor de 0.5 wt. % rhodiumkatalysator weergegeven tesamen met de equivalenten metaaloppervakken.



$$r = k A^* B^*$$

$$x_0 = * + A^* + B^* + C^*$$

$$A^* * = K_A A$$

$$B^* * = K_B B$$

$$C^* * = K_C C$$

$$x_0 = * [1 + K_A \cdot A + K_B \cdot B + K_C \cdot C]$$

$$r = k \cdot K_A A \cdot K_B \cdot B \cdot *^2$$

$$= \frac{k K_A K_B A \cdot B \cdot x_0^2}{[1 + K_A \cdot A + K_B \cdot B + K_C \cdot C]^2}$$



Tabel 4.4 Metaal dispersies voor de 0.5 wt. % rhodium katalysator

Temperatuur (°C)	Metaal dispersie (%)	Metaal oppervlak (m <sup>2</sup> g <sup>-1</sup> )
300	48.8	214
400	48.1	211
500	44.3	194
600	38.7	170
700	31.6	139
800	25.3	111
900	21.6	94.8
1000	12.6	55.3

#### 4.3 De kinetiek

##### 4.3.1 De kinetiek van de reform reactie

Uit kinetische experimenten [1] heeft men getracht om een snelheidsvergelijking te vinden voor de reformreactie. Deze experimenten werden uitgevoerd bij een druk van 1 (atm) en 600, 650 en 700 (°C) met "45-60 mesh" katalysator deeljes (om diffusie limitering te voorkomen). De kooldioxide partiaal-druk werd gevarieerd van 0.250 tot 0.550 (atm) en de methaan partiaal-druk werd gevarieerd van 0.085 tot 0.451 (atm). Een CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>-verhouding van 1 tot 5 werden op deze manier bewerkstelligd. De data werden getoetst met behulp van lineaire regressie, redox mechanismen [3] en snelheidsvergelijkingen die gesuggereerd werden door Langmuir en Hinselwood [1]. De enige snelheidsvergelijking die temperatuurafhankelijkheid van de modelparameters goed beschrijft is:

$$r_R^* = \frac{k_R K_{CO_2} K_{CH_4} P_{CO_2} P_{CH_4}}{(1 + K_{CO_2} P_{CO_2} + K_{CH_4} P_{CH_4})^2} \quad (4.10)$$

waarin  $k_R$  de snelheidsconstante van reactie (4.1) en de  $K$ 's en de  $p$ 's de absorptie evenwichtsconstanten en de partiaal-

drukken (atm) voorstellen. De temperatuurafhankelijkheid van deze constanten luidt:

$$k_R = 1290e^{-102065/RT} \quad (\text{mol g}_{\text{cat}}^{-1}\text{s}^{-1}) \quad (4.10a)$$

$$K_{\text{CO}_2} = 2.61 \cdot 10^{-2} e^{37641/RT} \quad (\text{atm}^{-1}) \quad (4.10b)$$

$$K_{\text{CH}_4} = 2.60 \cdot 10^{-2} e^{40684/RT} \quad (\text{atm}^{-1}) \quad (4.10c)$$

met  $R = 8.3144 \text{ (J mol}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$

Berekende en gemeten snelheden waren gecorreleerd met een regressiecoëfficiënt van 0.988.

#### 4.3.2 De kinetiek van de shift reactie

De evenwichtsconstanten ~~van~~ van de shift reactie (4.2) is tien keer hoger dan die berekend uit de produktsamenstelling uit de kinetische experimenten. Dit leidde tot de conclusie dat de shift reactie niet in evenwicht was [4] en een snelheidsvergelijking voor deze reactie was derhalve noodzakelijk. Uit de data van de kinetische experimenten met de reform reactie voldeed de volgende vergelijking:

$$r_S = k_S P_{\text{CO}_2} \quad (4.11)$$

met

$$k_S = 1.857e^{(-73105/RT)} \quad (\text{mol g}_{\text{cat}}^{-1}\text{atm}^{-1}\text{s}^{-1}) \quad (4.11a)$$

en een regressiecoëfficiënt van 0.953.

Er werden echter ook aparte kinetische metingen gedaan voor reactie (4.2). De voeding was een mengsel van kooldioxide, waterstof en helium met een  $\text{CO}_2/\text{H}_2$  verhouding die gevarieerd werd van 1.0 tot 2.0. De beste fit aan de data van

$$r = r_f - r_b = r_f \left( 1 - \frac{r_b}{r_f} \right)$$

ook competitie om de  
 "sites" tussen  
 $H_2$  en  $CH_4$ ,  $CO_2$

hoeveel moet zijn

$$\left[ 1 + K_{CO_2} P_{CO_2} + K_{CH_4} P_{CH_4} + K_{H_2} P_{H_2} \right]^{-2}$$

$$r_f - r_b = r_f \left[ 1 - \frac{r_b}{r_f} \right]$$

$$r_b = \frac{K \dots}{[ \dots ]}$$

in totaal zestig experimenten die werden uitgevoerd bij 550, 600 en 650 (°C) had dezelfde vorm als de snelheidsvergelijking van de reform reactie en luidt:

$$r_S^* = \frac{k_S K_{CO_2} K_{H_2} P_{CO_2} P_{H_2}}{(1 + K_{CO_2} P_{CO_2} + K_{H_2} P_{H_2})^2} \quad (4.12)$$

met

$$k_S = 350e^{-81030/RT} \quad (\text{mol } g_{\text{cat}}^{-1} \text{s}^{-1}) \quad (4.12a)$$

$$K_{CO_2} = 0.5571e^{9262/RT} \quad (\text{atm}^{-1}) \quad (4.12b)$$

$$K_{H_2} = 1.494e^{6025/RT} \quad (\text{atm}^{-1}) \quad (4.12c)$$

en een regressiecoëfficiënt van 0.988.

X / De vergelijkingen (4.11) en (4.12) zijn totaal verschillend van vorm. Dit komt vanwege het feit dat (4.12) bepaald is in afwezigheid van methaan en methaan dissocieert op het oppervlak van de katalysator en op die manier het mechanisme beïnvloedt.

Bij hoge conversies krijgt men te maken met het probleem dat de snelheidsvergelijkingen van de teruggaande reacties tesamen met geschikte parameters voor interne en externe diffusie moeten worden geïncorporeerd in het mathematisch model. Omdat uitdrukkingen voor de snelheid van de teruggaande reacties moeilijk te bepalen zijn telt men een term op bij de snelheidsvergelijking van de heengaande reactie. Men zorgt ervoor dat deze extra term nul wordt als het evenwicht wordt bereikt. Om te controleren of de extra term voldoet vergelijkt men de uitkomst van het mathematisch model met de uitkomst van een experiment. Door de extra term worden de snelheidsvergelijkingen van de reform en de shift reactie:

$$r_R = r_R^* [1 - (P_{CO} P_{H_2})^2 / K_R P_{CH_4} P_{CO_2}] \quad (4.13)$$

$$r_S = r_S^* [1 - P_{CO} P_{H_2} / K_S P_{CO_2} P_{H_2}] \quad (4.14)$$

Aanname:  $r_b = \frac{k_b \cdot K_{CH_4} \cdot K_{CO_2} \cdot P_{CO}^2 \cdot P_{H_2}^2}{[ \quad ]^2}$

$$K_R = \frac{k_R}{k_b}$$

waarin  $r_R^*$  en  $r_S^*$  de snelheidsvergelijkingen (4.10), (4.11) en (4.13) van de heengaande reactie zijn en  $K_R$  en  $K_S$  de evenwichtsconstanten van de betreffende reacties voorstellen.

De Thiele modulus voor de "egg shell" katalysator kan met de volgende vergelijking worden weergegeven:

$$TM = [R_p d_p t_R T r_R / 2 D_{eff} P_{CH_4}]^{0.5} \quad (4.15)$$

met  $R_p$  : pellet straal (0.16 cm)  
 $d_p$  : pellet dichtheid (1.75 g cm<sup>-3</sup>)  
 $t^p$  : dikte van de rhodium belading (0.01 cm)  
 $D_{eff}$  : effectieve diffusiviteit (cm<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>)

De effectiviteitsfactor is  $EF = \tanh(TM) / TM$ . (4.16)

Hierdoor worden de pellet omzettingssnelheden:

$$r_{PR} = r_R \times EF \quad (4.17)$$

$$r_{PS} = r_S \times EF \quad (4.18)$$

Tabel 4.5 Vergelijking van de modellen (4.11) en (4.12)  
 Temperatuur: 700 (°C); CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>: 3.69  
 GHSV · 10<sup>-5</sup>: 1.52

	Experimenteel	model (4.11)	model (4.12)
Conversie(%)	45.9	44.6	44.6
mol fractie			
CH <sub>4</sub>	0.136	0.139	0.140
CO <sub>2</sub>	0.392	0.398	0.370
CO	0.241	0.236	0.264
H <sub>2</sub>	0.221	0.216	0.186
H <sub>2</sub> O	0.010	0.010	0.040

} 0 balans deugt niet

Uit tabel 4.5 blijkt dat model (4.12) een veel te hoog water gehalte voorspelt. Hieruit kan geconcludeerd worden dat model (4.11) geschikter is om de shift reactie in aanwezigheid van methaan te beschrijven.

Tabel 4.6 Vergelijking van de experimentele resultaten met de door model (4.11) voorspelde resultaten.

Temp. (°C)	600		650		700	
CO <sub>2</sub> /CH <sub>4</sub>	4.07		4.19		2.06	
GHSV (h <sup>-1</sup> · 10 <sup>-5</sup> )	4.63		4.37		1.52	
	ber.	exp.	ber.	exp.	ber.	exp.
conv. (%)	14.0	14.5	20.4	21.2	44.6	45.9
mol fractie						
	0.161	0.159	0.143	0.140	0.140	0.136
	0.731	0.730	0.707	0.705	0.399	0.392
	0.058	0.057	0.078	0.080	0.236	0.241
	0.048	0.051	0.067	0.072	0.216	0.221
	0.004	0.003	0.005	0.004	0.010	0.011

Uit tabel 4.6 blijkt dat er een goede overeenkomst is tussen de voorspelde en de experimentele resultaten.

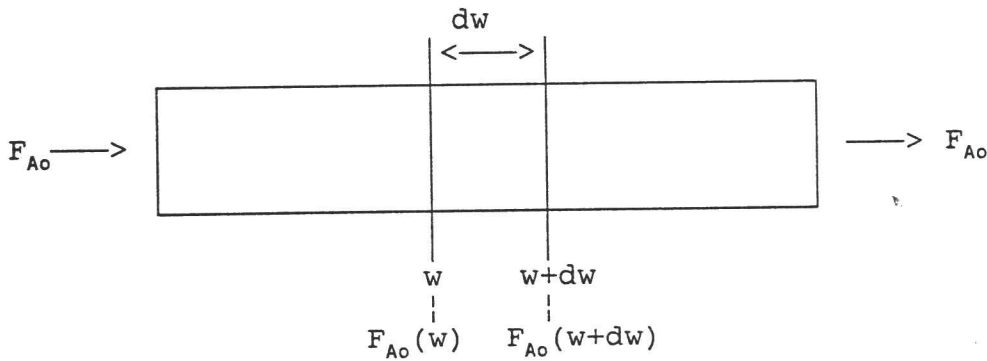
#### 4.4 Het mathematisch model van de reactor

In deze paragraaf zal de afleiding van het mathematisch model tot in alle details worden weergegeven om misverstanden te voorkomen.

De reactievergelijkingen voor de reform reactie en de shift reactie luiden respectievelijk:



De subscripts 1 en 2 die in het vervolg zullen worden gebruikt hebben respectievelijk betrekking op vergelijking (4.1) en vergelijking (4.2).



Een massabalans voor component A ( $CO_2$ ) over een plakje  $dw$  van het katalysatorbed luidt:

ophoping = in - uit + produktie

$$0 = F_{A(w)} - F_{A(w+dw)} + r_A dw$$

$$\Leftrightarrow \frac{F_{A(w+dw)} - F_{A(w)}}{dw} = r_A$$

$$\Leftrightarrow \frac{dF_A}{dw} = r_A \quad (4.19)$$

Voor de  $CO_2$  molenstroom aan de uitgang van de reactor geldt:

$$F_A = F_{A0}(1 - \xi_1 - \xi_2)$$

waarin  $\xi_1$  en  $\xi_2$  de omgezette hoeveelheid  $CO_2$  via de respectievelijke reacties (4.1) en (4.2) voorstellen. De totale

$$\left. \begin{aligned} F_{A0} \frac{d\xi_1}{dw} &= r_{PR} \\ F_{A0} \frac{d\xi_2}{dw} &= r_{PS} \end{aligned} \right\} \text{definitie } \xi_1, \xi_2$$

differentiaal van van de bovenstaande vergelijking luidt:

$$dF_A = \left( \frac{\partial F_A}{\partial \xi_1} \right) d\xi_1 + \left( \frac{\partial F_A}{\partial \xi_2} \right) d\xi_2$$

$$dF_A = -F_{A0} d\xi_1 - F_{A0} d\xi_2$$

Deling door dw levert vervolgens op:

$$\frac{dF_A}{dw} = -F_{A0} \frac{d\xi_1}{dw} - F_{A0} \frac{d\xi_2}{dw} \quad (4.20)$$

Door de rechterleden van (4.19) en (4.20) aan elkaar gelijk te stellen krijgt men:

$$F_{A0} \frac{d\xi_1}{dw} + F_{A0} \frac{d\xi_2}{dw} = -r_A = -r_{PR} - r_{PS} \quad (4.21)$$

waarin  $r_{PR}$  en  $r_{PS}$  gedefiniëerd zijn volgens de vergelijkingen (4.17) en (4.18).

Een massabalans voor component B ( $CH_4$ ) over een plakje dw leidt op analoge wijze tot:

$$\frac{dF_B}{dw} = r_B \quad (4.22)$$

Voor de  $CH_4$  molenstroom aan de uitgang van de reactor geldt:

$$F_B = F_{A0} (\theta_B - \xi_1)$$

waarin  $\theta_B$  het quotient is van de initiële  $CH_4$  en de  $CO_2$



$$H(T) = H_F(T) + H_c(T_0)$$

$$H_F(T) = \int_{T_0}^T c_p(T') dT' \cdot N(w) \quad H_c(T) = h_c(T_0) \cdot N$$

$$\frac{dH_F(T)}{d\omega} = c_p(T) \frac{dT}{d\omega} \cdot N(w) + h_F(T) \frac{dN}{d\omega} + h_c(T_0) \frac{dN}{d\omega}$$

$$= \dot{\phi}_{in} - \dot{\phi}_{out} - \dot{\phi}_{out}$$

$$\frac{dN}{d\omega} = \phi_{in} - \phi_{out} + R$$

$$N c_p(T) \frac{dT}{d\omega} + h_F(T) \phi_{in} - h_F(T) \phi_{out} + h_F(T) \cdot R + h_c(T_0) R$$

$$= \phi_{in} \frac{h_F(T)}{h_c(T_0)} - \phi_{out} \frac{h_F(T)}{h_c(T_0)} + R \left( \frac{h_F(T)}{h_c(T_0)} + h_c(T_0) \right)$$

$$N c_p(T) \frac{dT}{d\omega} = \phi_{in} (h_F(T, \omega) - h_F(T)) - R (h_F(T) - h_c(T_0))$$

molenstroom. De totale differentiaal van de bovenstaande vergelijking luidt:

$$dF_B = \left( \frac{\partial F_B}{\partial \xi_1} \right) d\xi_1$$

$$\Leftrightarrow dF_B = -F_{A_0} d\xi_1$$

Deling door  $dw$  levert op:

$$\frac{dF_B}{dw} = -F_{A_0} \frac{d\xi_1}{dw} \quad (4.23)$$

Uit de rechterleden van de vergelijkingen (4.22) en (4.23) volgt er dan:

$$F_{A_0} \frac{d\xi_1}{dw} = -r_B = -r_{PR} \quad (4.24)$$

Substitutie van vergelijking (4.24) in vergelijking (4.21) levert op:

$$F_{A_0} \frac{d\xi_2}{dw} = -r_{PS} \quad (4.25)$$

De vergelijkingen (4.24) en (4.25) zijn dus twee differentiaalvergelijkingen die de conversie van  $CO_2$  ten gevolge van de respectievelijke reacties (4.1) en (4.2) beschrijven.

De energie balans over de reactor luidt:

$$\frac{dT}{dw} = \frac{(4U/\rho_c D)(T_a - T) + (-r_{PR})[-\Delta H_R(T)_1] + (-r_{PS})[-\Delta H_R(T)_2]}{F_{A_0}(\sum \theta_i c_{p_i} + \xi_1 \Delta c_{p_1} + \xi_2 \Delta c_{p_2})} \quad (4.26)$$

waarin

$$G = \frac{\sum F_{i0} M_i}{A_c} = \frac{F_{A0} M_A + F_{B0} M_B}{A_c} \quad (4.27a)$$

en

$$\epsilon_1 = (Y_{A0} p_{A0} / p_0) \quad (4.27b)$$

met

- $A_c$  : doorsnede van de pijp ( $m^2$ ).
- $F_{A0}$  :  $CO_2$  molenstroom (mol/s).
- $F_{B0}$  :  $CH_4$  molenstroom (mol/s).
- $M_A$  : molmassa van  $CO_2$  (kg/mol).
- $M_B$  : molmassa van  $CH_4$  (kg/mol).
- $p_0$  : druk aan het begin van de reactor (atm).
- $p$  : druk op een willekeurige plaats in de reactor (atm).
- $T_0$  : temperatuur aan het begin van de reactor (K).
- $T$  : temperatuur op een willekeurige plaats in de reactor (K).
- $D_p$  : diameter katalysatordeeltje (m).
- $\eta$  : viscositeit (Pa·s).
- $g$  : gravitatie versnelling ( $m^2/s$ ).
- $\rho_c$  : dichtheid katalysatorbed ( $kg/m^3$ ).
- $\rho_0$  : dichtheid gasmengsel aan het begin van de reactor ( $kg/m^3$ ).
- $\phi$  : porositeit katalysatorbed.

De vergelijkingen (4.24), (4.25), (4.26) en (4.27) vormen te- samen het mathematisch model van de reactor.

$$F_{A0} \frac{d\xi_1}{dw} = - r_{PR} \quad (4.24)$$

$$F_{A0} \frac{d\xi_2}{dw} = - r_{PS} \quad (4.25)$$

waarin

$$\Delta C_{p_1} = 12.67 - 16.624 \cdot 10^{-3}T + 4.3 \cdot 10^{-6}T^2 + 10^3/T^2 \quad (4.26a)$$

$$\Delta C_{p_2} = -3.27 + 0.56 \cdot 10^{-3}T + 2.39 \cdot 10^5/T^2 \quad (4.26b)$$

$$\Delta H_R(T)_1 = \Delta H^\circ_{298.15} + \int_{298.15}^T \Delta C_{p_1} dT \quad (4.26c)$$

$$= 75121 + 12.67T - 8.312 \cdot 10^{-3}T^2 - 7.2 \cdot 10^{-7}T^3 - 10^3/T \quad (4.26d)$$

$$\Delta H_R(T)_2 = \Delta H^\circ_{298.15} + \int_{298.15}^T \Delta C_{p_2} dT \quad (4.26e)$$

$$= 13314 - 3.27T - 0.28 \cdot 10^{-3}T^2 - 2.39 \cdot 10^5/T \quad (4.26f)$$

met

- U : totale warmteoverdrachtscoëfficiënt.
- $\rho_c$  : dichtheid van het katalysatorbed.
- D : diameter reactor.
- $T^a$  : wandtemperatuur.
- T : temperatuur van het katalysatorbed.
- $r_{PR}$  : zie vergelijking (4.17).
- $r_{PS}$  : zie vergelijking (4.18).
- $\Delta H_R(T)_1$  : reactiewarmte van de reform reactie (4.1).
- $\Delta H_R(T)_2$  : reactiewarmte van de reform reactie (4.2).
- $\theta_i$  :  $N_{i0}/N_{A0}$

De drukbalans over de reactor luidt:

$$\frac{dp}{dw} = - \frac{GT\rho_o(1-\phi)(1+\epsilon_1\xi_1)}{\rho_c A_c \rho_o T_o p D_p g_c \phi^3} \left[ \frac{150(1-\phi)^n}{D_p} + 1.75G \right] \quad (4.27)$$

$$\frac{dT}{dw} = \frac{(4U/\rho_c D)(T_a - T) + (-r_{PR})[-\Delta H_R(T)_1] + (-r_{PS})[-\Delta H_R(T)_2]}{F_{A_0}(\sum \theta_i C_{p_i} + \xi_{1\Delta} C_{p_1} + \xi_{2\Delta} C_{p_2})} \quad (4.26)$$

$$\frac{dp}{dw} = - \frac{GT\rho_o(1-\phi)(1+\epsilon_1\xi_1)}{\rho_c A_c \rho_o T_o p D_p g_c \phi^3} \left[ \frac{150(1-\phi)^n}{D_p} + 1.75G \right] \quad (4.27)$$

Door dit stelsel van differentiaalvergelijkingen numeriek op te lossen werd de benodigde hoeveelheid katalysator bepaald om de gewenste produktie van CO te verkrijgen. De afhankelijke variabelen in dit model zijn  $\xi_1, \xi_2, T$  en  $P$  waardoor men verbanden tussen deze afhankelijke variabelen en de molenstromen van de produktgassen moet leggen. Deze verbanden worden in de onderstaande tabel gegeven.

Tabel 4.7 Verbanden tussen de molenstromen aan produktgassen en de initiële CO<sub>2</sub> molenstroom.

compo- nent	begin reactor	verband	eind reactor	
CO <sub>2</sub>	N <sub>Ao</sub>	-N <sub>Ao</sub> ( $\xi_1 + \xi_2$ )	N <sub>Ao</sub> (1 - $\xi_1 - \xi_2$ )	(4.28a)
CH <sub>4</sub>	N <sub>Bo</sub>	-N <sub>Ao</sub> $\xi_1$	N <sub>Ao</sub> ( $\theta_B - \xi_1$ )	(4.28b)
H <sub>2</sub>	N <sub>Co</sub>	N <sub>Ao</sub> (2 $\xi_1 - \xi_2$ )	N <sub>Ao</sub> ( $\theta_C + 2\xi_1 - \xi_2$ )	(4.28c)
CO	N <sub>Do</sub>	N <sub>Ao</sub> (2 $\xi_1 + \xi_2$ )	N <sub>Ao</sub> ( $\theta_D + 2\xi_1 + \xi_2$ )	(4.28d)
H <sub>2</sub> O	N <sub>Eo</sub>	N <sub>Ao</sub> $\xi_2$	N <sub>Ao</sub> ( $\theta_E + \xi_2$ )	(4.28e)
	N <sub>to</sub> (+)		N <sub>t</sub> = N <sub>to</sub> + 2N <sub>Ao</sub> $\xi_1$ (+)	

$$\theta_B = \frac{N_{Bo}}{N_{Ao}} \neq 0 \quad \theta_C = \frac{N_{Co}}{N_{Ao}} = 0 \quad \theta_D = \frac{N_{Do}}{N_{Ao}} = 0 \quad \theta_E = \frac{N_{Eo}}{N_{Ao}} = 0$$

Ook voor de partiaaldrukken van de produktgassen op een willekeurige plaats in de reactor zijn er betrekkingen nodig die het verband met de afhankelijke variabelen van het mathematisch model van de reactor weergeven. Deze betrekkingen worden in de onderstaande tabel gepresenteerd.

Tabel 4.8 Betrekkingen tussen de partiaaldrukken van de produktgassen en de afhankelijke variabelen van het mathematisch model.

compo- nent	betrekking	
CO <sub>2</sub>	$P_A = P_{A_0} \left( \frac{1 - \xi_1 - \xi_2}{1 + \epsilon_1 \xi_1} \right) \frac{p}{p_0}$	(4.29a)
CH <sub>4</sub>	$P_B = P_{A_0} \left( \frac{\theta_B - \xi_2}{1 + \epsilon_1 \xi_1} \right) \frac{p}{p_0}$	(4.29b)
H <sub>2</sub>	$P_C = P_{A_0} \left( \frac{\theta_c + 2\xi_1 - \xi_2}{1 + \epsilon_1 \xi_1} \right) \frac{p}{p_0}$	(4.29c)
CO	$P_D = P_{A_0} \left( \frac{v_c + 2\xi_1 + \xi_2}{1 + \epsilon_1 \xi_1} \right) \frac{p}{p_0}$	(4.29d)
H <sub>2</sub> O	$P_E = P_{A_0} \left( \frac{\theta_E + \xi_2}{1 + \epsilon_1 \xi_1} \right) \frac{p}{p_0}$	(4.29e)

Ter verduidelijking zal de afleiding van vergelijking (4.29a) worden gegeven.

$$\xi_1 = \frac{\text{aantal molen CO}_2 \text{ verbruikt in reactie (4.1)}}{\text{aantal molen CO}_2 \text{ aan het begin}}$$

$$\xi_2 = \frac{\text{aantal molen CO}_2 \text{ verbruikt in reactie (4.2)}}{\text{aantal molen CO}_2 \text{ aan het begin}}$$

aantal molen CO<sub>2</sub> = aantal molen CO<sub>2</sub> - verbruikt aantal molen CO<sub>2</sub>

$$N_{A_0} = N_{A_0} - N_{A_0} \xi_1 - N_{A_0} \xi_2 \quad (\text{dit is vergelijking (4.28a)}).$$

De som der stoechiometrische coëfficiënten van de betreffende reacties is:

$$\delta_1 = \sum v_i = -1-1+2+2 = 2 \quad \text{en} \quad \delta_2 = \sum v_i = -1-1+1+1 = 0$$

Voor het totaal aantal molen op een willekeurig tijdstip geldt:

$$N_t = N_{to}(1 + \epsilon_1 \xi_1 + \epsilon_2 \xi_2) \quad (4.30)$$

$$\text{waarin} \quad \epsilon_1 = Y_{Ao} \delta_1 = 2Y_{Ao} \quad \text{en} \quad \epsilon_2 = Y_{Ao} \delta_2 = 0$$

$$p V = N R T \quad (4.31)$$

$$\Leftrightarrow V = N R T / p \quad (4.31a)$$

$$\rightarrow \frac{V}{V_o} = \begin{pmatrix} N_t \\ - \\ N_{to} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ - \\ T_o \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_o \\ - \\ p \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

Substitutie van vergelijking (4.30) in vergelijking (4.32) leidt tot:

$$V = V_o(1 + \epsilon_1 \xi_1 - \epsilon_2 \xi_2) \begin{pmatrix} T \\ - \\ T_o \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_o \\ - \\ p \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow V = V_o(1 + \epsilon_1 \xi_1) \begin{pmatrix} T \\ - \\ T_o \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_o \\ - \\ p \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

$$c_A \frac{N_A}{V} \quad (4.34)$$

Substitutie van de vergelijking (4.28a) en (4.33) in vergelijking (4.34) levert op:

$$c_A = \begin{pmatrix} \frac{N_{Ao}(1-\xi_1-\xi_2)}{V_o(1+\epsilon_1\xi_1)} \\ - \\ - \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_o \\ - \\ T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ - \\ p_o \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

$$c_A = c_{Ao} \begin{pmatrix} \frac{1-\xi_1-\xi_2}{1+\epsilon_1\xi_1} \\ - \\ - \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_o \\ - \\ T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ - \\ p_o \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

$$\rightarrow P_A = P_{Ao} \begin{pmatrix} \frac{1-\xi_1-\xi_2}{1+\epsilon_1\xi_1} \\ - \\ - \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ - \\ p_o \end{pmatrix} \quad (4.29a)$$

## 5. Dimensionering van de apparaten

### 5.1. De reactor

Voor het reactorontwerp werd er uitgegaan van een productie-capaciteit van 8000 (ton/jaar) aan koolmonoxide. Om aan deze eis te voldoen werd de reactor met het model uit het vorig hoofdstuk doorgerekend. Door de ingangsdruk, de ingangstemperatuur, de pijpdiameter en de mengverhouding van  $\text{CO}_2$  en  $\text{CH}_4$  te variëren was het mogelijk om de conversie van  $\text{CO}_2$  via de reacties (4.1) en (4.2) te bepalen bij een bepaalde hoeveelheid katalysator en een bepaalde pijpdiameter. Op basis hiervan werd bepaald welke hoeveelheden  $\text{CO}_2$  en  $\text{CH}_4$  opgemengd dienden te worden en wat de lengte en de diameter van een met katalysator gepakte pijp dienden te zijn.

Dit leidde tot de volgende resultaten:

aantal pijpen : 3796

lengte pijp : 1,36 (m)

diameter pijp :  $4 \cdot 10^{-2}$  (m)

verblijftijd in de pijp : 10,4 (s)

ingående  $\text{CO}_2$ -stroom van de pijp :  $2,05 \cdot 10^{-3}$  (mol/s)

ingående  $\text{CH}_4$ -stroom van de pijp :  $1,13 \cdot 10^{-3}$  (mol/s)

temperatuur ingaand gas : 600 (K)

druk ingaand gas : 3 (bar)

wandtemperatuur : 1200 (K)



Op basis van de lengte en de diameter van de  
pijpen werd berekend:

totaal warmteuitwisselingsoppervlak:  $650 \text{ (m}^2\text{)}$

totale hoeveelheid katalysator:  $6,8 \cdot 10^3 \text{ (kg)}$

Er wordt  $99,78\%$  van het ingaand  $\text{CH}_4$  en  
 $72,49\%$  van de ingaande  $\text{CO}_2$  omgezet.

In bijlage VI worden enkele resultaten van de  
berekeningen grafisch gepresenteerd.

VI - 1/2

onderste grafiek?

Commentaar?

## 5.2 De warmtewisselaars

Het ontwerpen van de warmtewisselaars geschiedde volgens het recept van Kern en Ludwig [8]. Deze procedure maakt het mogelijk om de invloed van de stroming op het warmteoverdrachtsproces in te calculeren. In het kort luidt deze procedure als volgt: (ontwerp recept voor de mantelzijde)

1. Berekening van de cross-flow area voor een bepaalde rangschikking van de pijpen.

$$A_s = \frac{(P_t - d_o) D_s l_B}{P_t} \quad (5.1)$$

$A_s$  = cross-flow area ( $m^2$ )

$P_t$  = tube pitch (m); figuur 14.

$d_o$  = uitwendige diameter pijpen (m)

$D_s$  = inwendige diameter mantel (m)

$l_B$  = baffle spacing (m); figuur 2 en 4.

De term  $\frac{(P_t - d_o)}{P_t}$  is de verhouding van de afstand tussen het uitwendig oppervlak van de pijpen en de afstand tussen de symmetrie-assen van de pijpen.

Baffles dienen om het fluïdum aan de mantelzijde dwars op de lengterichting van de pijpen te laten stromen om de warmteoverdracht te bevorderen en om de pijpen mechanisch te ondersteunen. Het effect van de baffles op de stroming wordt aan de hand van figuur 11 geïllustreerd.

2. Berekening van de fluidumsnelheid aan de mantelzijde.

$$u_s = \frac{W_s}{\rho_s A_s} \quad (5.2)$$

$W_s$  = massadebiet aan de mantelzijde ( $\text{kg/s}$ )

$\rho_s$  = dichtheid fluidum aan de mantelzijde ( $\text{kg/m}^3$ )

$A_s$  = cross-flow area ( $\text{m}^2$ )

3. Berekening van de equivalente hydraulische diameter van de mantelzijde.

vierkante pitch rangschikking:

$$d_e = \frac{4(P_t^2 - \frac{1}{4}\pi d_o^2)}{\pi d_o} \quad (5.3a)$$

driehoekige pitch rangschikking:

$$d_e = \frac{4\left(0,87 \cdot \frac{P_t^2}{2} - \frac{1}{8}\pi d_o^2\right)}{\frac{1}{2}\pi d_o} \quad (5.3b)$$

$d_e$  = equivalente hydraulische diameter (m)

$P_t$  = tube pitch (m)

$d_o$  = uitwendige diameter van de pijpen (m)

4. Berekening van het Reynoldsgetal aan de mantelzijde.

$$Re_s = \frac{u_s d_e \rho_s}{\mu_s} \quad (5.4)$$

$\mu_s$  = dynamische viscositeit fluidum mantelzijde (Pas)

5. Uit figuur 112 kan men  $j_h$  aflezen bij het Reynolds-  
getal dat berekend is bij stap 4. Met behulp van de  
relatie

$$Nu_s = \frac{h_s d_e}{\lambda_s} = j_h Re_s Pr_s^{1/3} \left( \frac{\mu_s}{\mu_{ws}} \right)^{0,14} \quad (5.5)$$

kan men  $h_s$  uitrekenen.

$Nu_s$  = lengte van Nusselt voor de mantelzijde

$Re_s$  = lengte van Reynolds voor de mantelzijde

$Pr_s$  = lengte van Prandtl voor de mantelzijde

$h_s$  = warmteoverdrachtscoëfficiënt mantelzijde ( $W/m^2K$ )

$\lambda_s$  = warmtegeleidingscoëfficiënt mantelzijde ( $W/mK$ )

6. Uit figuur 13 kan men  $j_f$  aflezen bij het Reynolds-  
getal dat berekend is bij stap 4. De relatie

$$\Delta P_s = 8 j_f \left( \frac{D_s}{d_e} \right) \left( \frac{L}{l_B} \right) \frac{\rho_s u_s^2}{2} \left( \frac{\mu_s}{\mu_{ws}} \right)^{-0,14} \quad (5.6)$$

kan dan gebruikt worden om de drukval over  
de mantelzijde uit te rekenen.

$\Delta P_s$  = drukval over de mantelzijde ( $N/m^2$ )

$L$  = pijplengte ( $m$ )

$\mu_s$  = viscositeit fluïdum aan de mantelzijde ( $Pa \cdot s$ )

$\mu_{ws}$  = wandviscositeit aan de mantelzijde ( $Pa \cdot s$ )

Schatting van de warmteoverdrachtscoëfficiënt aan en de drukval over de pijpzijde geschiedt als volgt. Uit figuur 8 kan men de warmte overdrachtsfactor  $j_h$  aflezen bij het Reynoldsgetal  $Re_t$ . Vervolgens kan men de relatie:

$$\frac{h_i d_i}{\lambda_t} = j_h Re_t Pr_t^{0,33} \left( \frac{\mu_t}{\mu_{wt}} \right)^{0,14} \quad (5.7)$$

gebruiken om de warmteoverdrachtscoëfficiënt aan de pijpzijde uit te rekenen.

$h_i$  = warmteoverdrachtscoëfficiënt pijpzijde ( $W/m^2K$ )

$d_i$  = inwendige diameter pijp (m)

$\lambda_t$  = warmtegeleidingscoëfficiënt pijpzijde ( $W/mK$ )

$Re_t$  = lengtetal van Reynolds aan de pijpzijde

$Pr_t$  = lengtetal van Prandtl aan de pijpzijde

$\mu_t$  = dynamische viscositeit aan de pijpzijde (Pa.s)

$\mu_{wt}$  = wandviscositeit aan de pijpzijde (Pa.s)

Om de drukval over de pijpzijde uit te rekenen dient men eerst de dimensieloze wryvingsfactor  $j_f$  tegen het Reynoldsgetal  $Re_t$  af te lezen uit figuur 9. Met de relatie

$$\Delta P_t = N_p \left[ 8 j_f \left( L/d_i \right) \left( \frac{\mu_t}{\mu_{wt}} \right)^{-m} + 2,5 \right] \frac{\rho_t U_t^2}{2} \quad (5.8)$$

$m = 0,25$  als  $Re < 2100$  (laminaire stroming)

$= 0,14$  als  $Re > 2100$  (turbulente stroming)

$\Delta p_t$  = drukval aan de pijpzijde ( $N/m^2$ )  
 $N_p$  = aantal passages aan de pijpzijde  
 $L$  = pijplengte (m)  
 $d_i$  = inwendige diameter pijp (m)  
 $\rho_t$  = dichtheid fluidum aan de pijpzijde ( $kg/m^3$ )  
 $u_t$  = snelheid fluidum pijpzijde (m/s)  
 $\mu_t$  = dynamische viscositeit fluidum pijpzijde (Pa s)  
 $\mu_{wt}$  = wandviscositeit fluidum pijpzijde (Pa s)

### Rekenvoorbeeld warmtewisselaar

In dit rekenvoorbeeld zal het ontwerp van warmtewisselaar H25 worden gepresenteerd. Deze warmtewisselaar dient de bodemstroom van T24 af te koelen en wel van  $41,6^\circ C$  naar  $2,3^\circ C$ . Voor dit herwei is er een methanolstroom van  $-55^\circ C$  beschikbaar.

-berekening van de benodigde hoeveelheid methanol. De bodemstroom van T24 heeft een massa debiet  $\phi_{m_B}$  van  $57,6$  ( $kg/s$ ), een dichtheid  $\rho_B$  van  $1000$  ( $kg/m^3$ ) en een soortelijke warmte  $C_{p_B}$  van  $2,4$  ( $kJ/kgK$ ). Met deze gegevens is de over te dragen warmte uit te rekenen:

$$\begin{aligned}
 Q_w &= \phi_{m_B} \cdot C_{p_B} \cdot (T_{uit} - T_{in}) \\
 &= -5461 \text{ kW}
 \end{aligned}$$

De methanolstroom heeft een dichtheid  $\rho_m$  van  $750$  ( $kg/m^3$ ) en een soortelijke warmte  $C_{p_m}$  van  $2,84$  ( $kJ/kgK$ ). De metha-

$$T_{in} = -5$$

$$T_{out} = +25$$

$$\Delta T = 30$$

$$c_p = 4.$$

4800  
600

$$\phi = \frac{5461}{120} = 45.5 \text{ kg/s}$$

$$\frac{(-5 - 2.3) - (25 - 41.6)}{R_n \left( \frac{-7.3}{-16} \right)} = \frac{-7.3 + 16.6}{R_n \left( 0.456 \right)} = \frac{8.5}{R_n}$$



$$T_1 = -5$$

$$t_2 = 2.3$$

$$t_1 = 41.6$$

$$T_2 = T_1 + \frac{\phi_{hot}}{\phi_{col}} \frac{c_{p,hot}}{c_{p,col}} (T_1 - t_2)$$



bolstroom dient een temperatuur van  $-5\text{ }^{\circ}\text{C}$  te hebben bij het verlaten van de warmtewisselaar. Het benodigd methanol massadebiet  $\dot{m}_m$  bedraagt dan:

$$\dot{m}_m = \frac{-Q_w}{c_p(T_{uit} - T_{in})} = \frac{-5461}{2,84(30 - (-20))} = 38,5 \text{ (kg/s)}$$

Vanwege de corrosiviteit van de bodemstroom van Tz7 wordt deze stroom door de pijpzijde geleid en de methanolstroom door de mantelzijde (pijpen zijn goedkoper te vervangen dan een mantel).

- Berekening van het benodigd warmtewisselingsoppervlak, aantal buizen  $N_t$  en mantel diameter  $D_s$ .

$$\Delta T_{em} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1}}$$

$\Delta T_{em}$  = logaritmisches gemiddeld temperatuursverschil

$$= \frac{(-55 - 2,3) - (-5 - 41,6)}{\ln \frac{-55 - 2,3}{-5 - 41,6}}$$

$T_1$  = ingangstemperatuur mantelzijde  
 $T_2$  = uitgangstemperatuur mantelzijde  
 $t_1$  = ingangstemperatuur pijpzijde  
 $t_2$  = uitgangstemperatuur pijpzijde

$$= 51,9\text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$R = \frac{T_1 - T_2}{t_2 - t_1} = 1,27$$

$$S = \frac{t_2 - t_1}{T_1 - t_1} = 0,41$$

Voor een warmtewisselaar met twee passages aan de pijpzijde en één passage aan de mantelzijde geldt:

$$F_t = 0,86 \quad (\text{figuur 6})$$



Het gecorrigeerd logaritmisch temperatuurverschil bedraagt:

$$\begin{aligned}\Delta T_m &= F_t \cdot \Delta T_{em} \\ &= 44,6 \text{ (}^\circ\text{C)}\end{aligned}$$

Uit figuur 1 of tabel 1 kan men een schatting maken van de overall warmteoverdrachtscoëfficiënt

$$U_o = 600 \text{ (W/m}^2\text{K)}$$

Benodigd warmtewisselings oppervlak:

$$A = \frac{|Q_w|}{U_o \cdot \Delta T_m} = \frac{5461 \cdot 10^3}{600 \cdot 44,6} = 204 \text{ (m}^2\text{)}$$

Benodigd aantal buizen:

er worden pijpen gebruikt met de volgende afmetingen

$$d_o = 20 \cdot 10^{-3} \text{ (m)}$$

$$L = 4,88 \text{ (m)}$$

$$d_i = 16 \cdot 10^{-3} \text{ (m)}$$

$$\Rightarrow \text{oppervlakte één pijp} = \pi d_o \cdot L$$

$$= \pi \cdot 20 \cdot 10^{-3} \cdot 4,88$$

$$= 0,307 \text{ (m}^2\text{)}$$

$$\text{aantal pijpen } N_t = \frac{\text{warmtewisselingsoppervlak}}{\text{oppervlakte één pijp}} = \frac{204}{0,307} = 665$$

Met behulp van de relatie

$$D_B = d_o \left( \frac{N_E}{K_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} \quad (5.9)$$

kan men de bundle diameter uitrekenen

$N_E$  = aantal pijpen

$d_o$  = uitwendige pijpdiameter (m)

$D_B$  = bundle diameter (m)

$K_1, n_1$  = constanten die gehaald dienen te worden

uit tabel 2 ;  $D_B$  hangt af van het aantal  
pijpen en het aantal passages aan de pijpzijde.

Als  $D_B$  bekend is kan men uit figuur 12.10 het verschil  
tussen de inwendige manteldiameter  $D_s$  en  $D_B$  aflezen.  
Dit verschil wordt de bundle diametrical clearance ge-  
noemd.

$$D_s = D_B + \text{bundle diametrical clearance}$$

Er wordt gekozen voor een split-ring floating head.

$$D_B = 20 \cdot 10^{-3} \left( \frac{665}{0,249} \right)^{\frac{1}{2,207}} = 0,714 \text{ (m)}$$

Uit figuur 12.10 kan men aflezen:

$$\text{bundle diametrical clearance} = 65 \cdot 10^{-3} \text{ (m)}$$

$$\Rightarrow D_s = 0,714 \text{ (m)} + 0,065 \text{ (m)} = 0,779 \text{ (m)}$$

- Berekening van de warmteoverdrachtscoëfficiënt en de drukval aan de mantelzijde.

$$\text{Baffle spacing } l_B = D_s/5 \text{ (aangenomen)} \\ = 0,779/5 = 0,156 \text{ (m)}$$

$$\text{tube pitch } P_t = 1,25 \cdot d_o \\ = 1,25 \cdot 20 \cdot 10^{-3} \\ = 25 \cdot 10^{-3} \text{ (m)}$$

Vergelijking (5.1) :

$$\text{cross flow area } A_s = \frac{(25-20)}{25} \cdot 0,779 \cdot 0,156 \\ = 0,0243 \text{ (m}^2\text{)}$$

Vergelijking (5.3) : (driehoelige pitch rangschikking)

$$\text{hydraulische diameter } d_e = \frac{4(0,87 \cdot \frac{P_t^2}{2} - \frac{1}{8} \pi d_o^2)}{\frac{1}{2} \pi d_o} \\ = 0,0146 \text{ (m)}$$

$$Re_s = \frac{\rho_m u_m d_e}{\mu_m} = \frac{750 \cdot 2,11 \cdot 0,0146}{0,34 \cdot 10^{-3}} = 6,8 \cdot 10^4$$

$$Pr_s = \frac{C_{p,m} \mu_m}{\lambda_m} = \frac{2,84 \cdot 10^3 \cdot 0,34 \cdot 10^{-3}}{0,19} = 5,1$$

Er wordt geloozen voor een baffle cut van 25%

uit figuur 12 volgt er  $j_h = 2,5 \cdot 10^{-3}$

Vergelijking (5.5) :

$$h_s = \frac{\lambda_s}{d_e} j_h Re_s Pr_s^{1/3} = \left( \frac{0,19}{0,0146} \right) 2,5 \cdot 10^{-3} \cdot 6,8 \cdot 10^4 \cdot 5,1^{1/3} \\ = 3808 \text{ (W/m}^2\text{K)}$$

Vergelijking (5.6) :

$$\begin{aligned}\Delta P_s &= 8 j_f \left( \frac{D_s}{d_e} \right) \left( \frac{L}{l_B} \right) \frac{\rho m u_m^2}{2} \\ &= 8 \cdot 3,5 \cdot 10^{-2} \left( \frac{0,779}{0,0146} \right) \left( \frac{4,88}{0,156} \right) \frac{750 \cdot 2,11^2}{2} \\ &= 7,8 \cdot 10^5 \text{ Pa (niet acceptabel)}\end{aligned}$$

$$j_f = 3,5 \cdot 10^{-2} \text{ uit figuur 13.}$$

Om deze drukval af te laten nemen kan men een grotere baffle spacing  $l_B$  gebruiken.

$$\text{aanname: } l_B = \frac{D_s}{1,2}$$

$$\Rightarrow u_m = 0,506 \text{ (m/s)}$$

$$Re_s = 1,6 \cdot 10^4 ; j_f = 4,0 \cdot 10^{-2}$$

$$h_s = 914 \text{ (W/m}^2\text{K)}$$

$$\Delta P_s = 1,2 \cdot 10^4 \text{ (Pa) (acceptabel)}$$

- Berekening van de warmteoverdrachtscoëfficiënt en de drukval aan de pijpenzijde.

$$Re_t = \frac{\rho_B u_B d_i}{\mu_B} = \frac{1000 \cdot 0,29 \cdot 16 \cdot 10^{-3}}{1,19 \cdot 10^{-3}} = 3,9 \cdot 10^3$$

$$Pr_t = \frac{c_{pB} \mu_B}{\lambda_B} = \frac{2,4 \cdot 10^3 \cdot 1,19 \cdot 10^{-3}}{0,55} = 5,2$$

Vergelijking (5.7) :

$$h_i = j_h \frac{\lambda_t}{d_i} Re_t Pr_t^{0,33} \left( \frac{\mu_t}{\mu_w} \right)^{0,14}$$
$$= 3,6 \cdot 10^{-3} \frac{0,55}{16 \cdot 10^{-3}} \cdot 3,9 \cdot 10^3 \cdot (5,2)^{0,33}$$
$$= 836 \text{ (W/m}^2\text{K)}$$

$$j_h = 3,6 \cdot 10^{-3} \text{ (uit figuur 8 bij } L/d_i = 305)$$

Vergelijking (5.8) :

$$\Delta P_t = N_f \left[ 8 j_f \left( \frac{L}{d_i} \right) \left( \frac{\mu_t}{\mu_w} \right)^{-0,14} + 2,5 \right] \frac{\rho_t u_t^2}{2}$$

$$= 2 \left[ 8 \cdot 5,6 \cdot 10^{-3} \cdot 305 + 2,5 \right] \frac{1000 \cdot 0,29^2}{2}$$

$$= 1359 \text{ (Pa)} = 1,359 \cdot 10^3 \text{ (Pa) (acceptabel)}$$

$$j_f = 5,6 \cdot 10^{-3} \text{ (uit figuur 9)}$$

- Berekening van de overall warmteoverdrachtscoëfficiënt

$$\frac{1}{U_o} = \frac{1}{h_s} + \frac{1}{h_{sd}} + \frac{d_o \ln(d_o/d_i)}{2 \lambda_w} + \frac{d_o}{d_i} \times \frac{1}{h_{id}} + \frac{d_o}{d_i} \times \frac{1}{h_i} \quad (5.10)$$

$U_o$  = overall warmteoverdrachtscoëfficiënt

$h_s$  = vloeistoffilm warmteoverdrachtscoëfficiënt mantelzijde

$h_i$  = vloeistoffilm warmteoverdrachtscoëfficiënt buiszijde

$h_{sd}$  = vuilfactor mantelzijde (tabel 3...)

$h_{id}$  = vuilfactor buiszijde (tabel 3...)

$\lambda_w$  = warmtegeleidingscoëfficiënt pijpmateriaal (tabel 12.6);  
roestvrij staal 16 (W/mK)

$$\Rightarrow U_0 = 426 \text{ (W/m}^2\text{K)}$$

Dit ligt 29% onder de geschatte warmteoverdrachtscoëfficiënt. Als de berekende coëfficiënt meer dan 10% verschilt van de geschatte coëfficiënt, dan dient men de hele procedure te herhalen met een andere beginschatting van  $U_0$ .

### 5.3 De condensoren

Het dimensioneren van de condensoren is analoog met dat van warmtewisselaars. De verschillen voor een condensor zijn:

- Er is geen sprake van een correctiefactor  $F_p$  op het logaritmisch temperatuursverschil en het werkelijk temperatuursverschil wordt berekend met:

$$\Delta T_m = \frac{t_2 - t_1}{\ln \frac{T_{\text{sat}} - t_1}{T_{\text{sat}} - t_2}} \quad (5.11)$$

$T_{\text{sat}}$  = verzadigingstemperatuur van de damp (K)

$t_1$  = inlaattemperatuur van het koelmiddel (K)

$t_2$  = uitlaattemperatuur van het koelmiddel (K)

- De baffle-spacing  $l_B$  is gelijk aan de inwendige manteldiameter  $D_S$ .
- De verdampingswarmte van het condensaat speelt een rol.

- De warmteoverdrachtscoëfficiënt aan de mantelzijde,  $h_u$ , wordt berekend met:

$$h_u = 0,95 \lambda_c \left[ \frac{\rho_c (\rho_c - \rho_v) g}{\rho_c \Gamma_R} \right] N_r^{-1/6} \quad (5.12)$$

$$\Gamma_R = \frac{\phi_c}{L \cdot N}$$

$\phi_c$  = condensaat massadebiet (kg/s)

$\lambda_c$  = warmtegeleidingscoëfficiënt damp (W/mK)

$\rho_c$  = dichtheid condensaat (kg/m<sup>3</sup>)

$\rho_v$  = dichtheid damp (kg/m<sup>3</sup>)

$L$  = lengte van de pijpen (m)

$N$  = aantal pijpen

$N_r$  = gemiddeld aantal pijpen in een verticale rij

$g$  = gravitatie versnelling (m/s<sup>2</sup>)

#### 5.4 De reboiler

Het ontwerp van een reboiler gaat ook analog met dat van een warmtewisselaar. De verschillen zijn:

- Er is geen sprake van een correctiefactor  $F_p$ .
- De verdampingswarmte en de oppervlakte spanning van het condensaat spelen een rol.
- Er is sprake van een maximale warmteflux,  $q_{max}$ , die niet overschreden kan worden.

$$q_{max} = 0,054 \cdot \sqrt{\rho_v} \cdot \Delta H_{vc} \cdot [\rho_c \cdot (\rho_c - \rho_v) \cdot g]^{0,25} \quad (5.13)$$

$\Delta H_{v,c}$  = verdampingswarmte van het condensaat ( J/kg )  
 $\sigma_c$  = oppervlaktespanning condensaat ( N/m )  
 $\rho_v$  = dichtheid damp ( kg/m<sup>3</sup> )  
 $\rho_c$  = dichtheid condensaat ( kg/m<sup>3</sup> )  
 $g$  = gravitatieversnelling ( m/s<sup>2</sup> )

- de warmteoverdrachtscoëfficiënt aan de mantelzijde,  $h_u$ , moet worden berekend met:

$$h_u = 0,036 \cdot 10^{-3} P_c^{0,69} \cdot q^{0,7} \cdot [1,8 P_r^{0,7} + 4 P_r^{1,2} + 10 P_r^{10}] \quad (5.14)$$

$P_c$  = kritische druk van de damp

$P_r$  = gereduceerde druk van de damp



## 5.5 De pompen [9]

In dit fabrieksvoorontwerp worden er zowel centrifugaalpompen (P15, P16 en P26) als verdringerpompen (P21 en P28) gebruikt. Voor het verpompen van vloeistof waarin er gas (CO of CO<sub>2</sub>) is geabsorbeerd is er gekozen voor verdringerpompen. Bij cavitatie (als door verdamping kleine belletjes ontstaan in de aanzuigopening van de pomp en deze belletjes verderop imploderen waande druk weer is toegenomen door de pompwerking) kunnen er momentaan op kleine plekjes van het materiaaloppervlak drukpieken tot 10<sup>5</sup> bar ontstaan, hetgeen tot vermoeingsverschijnselen en beschadiging leidt. Ook opgeloste gassen kunnen bij drukverlaging vrijkomen maar bij heroplossen als de druk weer toeneemt, is de implosie niet zo hevig als bij de implosies door de condensatie van dampbellen. Toch wordt er voor alle zekerheid gekozen voor verdringerpompen. Een andere reden om voor de laatstgenoemde pompen te kiezen is het feit dat bij veel vrijkomend gas de werking van een centrifugaalpomp verstoord wordt omdat de vloeistof niet voldoende vloeistof meer bevat om tot drukopbouw te komen.

Het theoretisch vermogen van de pompen is berekend met de volgende relatie

$$W_{\text{theor}} = \phi_v (P_u - P_i) \quad (5.15)$$

$W_{\text{theor}}$  = theoretisch geleverd vermogen (W)

$\Phi_v$  = volumedebiet van het te verpompen fluidum

$P_u$  = druk aan de perszijde (Pa)

$P_i$  = druk aan de aanzuigzijde (Pa)

Het praktisch vermogen van de pompen hangt als volgt samen met het theoretisch vermogen:

$$\eta_p = \frac{W_{\text{theor}}}{W_{\text{pr}}} \quad (5.16)$$

$\eta_p$  = rendement van de pomp

$W_{\text{pr}}$  = praktisch vermogen; dit is de energieconsumptie per tijdseenheid om het theoretisch vermogen te leveren.

In dit voorontwerp hebben alle pompen een rendement van 80%.

## 5.6. De compressoren [9]

De compressoren in dit proces ( $C_1$  en  $C_{1g}$ ) zijn beiden centrifugaal compressoren. Dergelijke compressoren worden gebruikt om drukverhogingen van enkele bar teweeg te brengen bij grote volumina aan gas. De druk van het te verwerken gas ligt tussen 0,0345 en 10 bar. De selectie criteria voor een compressor vloeien voort uit de vergelijkingen die het vermogen en de temperatuurstijging beschrijven. Voor het theoretisch vermogen van een compressor geldt er:

$$W_{\text{theor}} = - \frac{\kappa R T_1}{\kappa - 1} \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\kappa - 1}{\kappa}} - 1 \right] \phi_m ; \quad \kappa = \frac{C_p}{C_v} \quad (5.19)$$

$W_{\text{theor}}$  = theoretisch vermogen (W)

$R$  = gasconstante ; ( $\text{J/kgK}$ )

$T_1$  = temperatuur ingaande gasstroom (K)

$\kappa$  = isentropen exponent

$C_p$  = soortelijke warmte bij constante druk ( $\text{J/kgK}$ )

$C_v$  = soortelijke warmte bij constant volume ( $\text{J/kgK}$ )

$P_2$  = druk uitgaande gasstroom (Pa)

$P_1$  = druk ingaande gasstroom (Pa)

$\phi_m$  = massadebiet ( $\text{kg/s}$ )

De samenhang tussen het theoretisch en het praktisch vermogen luidt:

$$\eta_c = \frac{W_{\text{theor}}}{W_{\text{pr}}} \quad (5.20)$$

$\eta_c$  = rendement compressor ; 75%.

$W_{\text{pr}}$  = praktisch vermogen.

De temperatuurstijging ten gevolge van de compressie kan als volgt worden berekend:

$$T_2 = T_1 \left[ 1 + \frac{(P_2/P_1)^{\frac{k-1}{k}} - 1}{\eta_s} \right] \quad (5.21)$$

Het benodigd aantal waaiers  $x$  kan met behulp van de volgende relatie worden berekend:

$$(k)^x = \left( \frac{P_2}{P_1} \right) \quad (5.22)$$

De selectie criteria die voortvloeien uit de bovengenoemde vergelijkingen zijn:

1. De barometrische druk. De voornaamste bijdragen aan de opvoerhoogte worden geleverd door de barometrische druk en de compressor zelf.
2. De laagste waarde die de druk van de ingaande gasstroom kan aannemen;  $(P_1)$ .
3. De maximale temperatuur die de ingaande gasstroom kan aannemen;  $(T_1)$ .
4. De hoogste waarde die de isentropen exponent  $k$  kan aannemen.
5. Het maximaal gasdebiet dat verwerkt kan worden.
6. De maximale waarde die de druk van de uitgaande gasstroom kan aannemen;  $P_2$ .

### Rekenvoorbeeld compressoren

In dit rekenvoorbeeld zal het ontwerp van compressor Cig gepresenteerd worden. Deze compressor heeft tot taak een  $\text{CO}_2/\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}$ -gasmengsel van 1 bar te comprimeren tot 8,3 bar. De ingaande gasstroom heeft een temperatuur van  $25^\circ\text{C}$ .

		gehalte (gew%)	R ( $\frac{J}{kgK}$ )	C <sub>p</sub> ( $\frac{J}{kgK}$ )	k	C <sub>v</sub> ( $\frac{J}{kgK}$ )
25°C	CO	91,75	297	1043	1,402	744
	H <sub>2</sub>	4,62	4157	14363	1,405	10223
	H <sub>2</sub> O	3,47	462	2038	1,2949	1574
100°C	CO	91,75	297	1047	1,398	749
	H <sub>2</sub>	4,62	4157	14470	1,400	10336
	H <sub>2</sub> O	3,47	462	2038	1,2922	1577
200°C	CO	91,75	297	1060	1,390	763
	H <sub>2</sub>	4,62	4157	14500	1,396	10387
	H <sub>2</sub> O	3,47	462	1970	1,2895	1527
300°C	CO	91,75	297	1082	1,380	784
	H <sub>2</sub>	4,62	4157	14500	1,392	10417
	H <sub>2</sub> O	3,47	462	2010	1,2868	1562

Bovenstaande tabel dient ter illustratie van het effect van de temperatuur op de betrokken fysische grootheden. Voor verdere berekeningen zal er gewerkt worden met fysische grootheden bij 100°C.

$$C_{p\text{gas}} = (91,75 \cdot 1047 + 4,62 \cdot 14470 + 3,47 \cdot 2038) / 99,84 = 1702,6 \left(\frac{J}{kgK}\right)$$

$$C_{v\text{gas}} = (91,75 \cdot 749 + 4,62 \cdot 10336 + 3,47 \cdot 1527) / 99,84 = 1219,7 \left(\frac{J}{kgK}\right)$$

$$k_{\text{gas}} = 1,396 \approx 1,4$$

$$\text{molecuulmassa}_{\text{gas}} = (91,75 \cdot 28 + 4,62 \cdot 2 + 3,47 \cdot 18) / 99,84 = 26,4$$

$$R_{\text{gas}} = 314,3 \left(\frac{J}{kgK}\right)$$

Voor het theoretisch vermogen volgt uit vergelijking (5.19):

$$W_{\text{theor}} = -82543,4 \text{ W} = -82,5 \text{ kW}$$

$$\Rightarrow W_{\text{pr}} = -110 \text{ kW}$$

De temperatuur van de uitgaande gasstroom kan geschat worden met vergelijking (5.21):

$$T_2 = 298,15 \left[ 1 + \frac{(8,3/1)^{0,4/1,4} - 1}{0,75} \right] = 488,15 \text{ K}$$

$$= 215 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Het benodigd aantal waaiers bedraagt:

$$(1,4)^x = \left( \frac{8,3}{1} \right)$$

$$x \log 1,4 = \log 8,3$$

$$x = \frac{\log 8,3}{\log 1,4} = 6,3$$

$\Rightarrow$  6 waaiers.

De temperatuur van de uitgaande gasstroom ligt boven  $180^\circ$  en dit levert een complicatie op. Boven  $180^\circ$  worden smeermiddelen instabiel (uitvloeiing van de asfalkenen) en dat betekent dat er tussenkoeling moet plaatsvinden. Daar een ontwerpconcept voor compressoren met tussenkoeling niet beschikbaar was, is er hooguit bepaald tussen welke waaiers de koeling diende plaats te vinden.

ideaal gas:  $p V^k = \text{constant}$ ;  $k = 1,4$

$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} \frac{T_{n+1}}{T_n} &= \left( \frac{P_{n+1}}{P_n} \right)^{\frac{k-1}{k}} \\ \frac{T_{n+1}}{T_n} &= (1,422)^{\frac{0,4}{1,4}} = 1,105 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\prod_1^6 \left( \frac{P_{n+1}}{P_n} \right) = \frac{8,3}{1} \Leftrightarrow \frac{P_{n+1}}{P_n} = 1,422$$

trap n :	0	1	2	3	4	5	6
P (bar)	1	1,422	2,022	2,875	4,089	5,814	8,268
T (K)	298	324	358	396	438	485	536
t (°C)	25	51	85	123	165	212	263

Er moet tussen de vierde en de vijfde waaijer gelooeld worden.



## 5.7 De expander [10]

In het proces is er een expander (M5) opgenomen om de produktstroom van de reactor in druk te doen afnemen van 3,0 bar naar 1,0 bar. Het theoretisch vermogen van een expander kan berekend worden met:

$$W_{\text{theor}} = \frac{\kappa R T_1}{\kappa - 1} \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} - 1 \right] \phi_m ; \quad \kappa = \frac{c_p}{c_v} \quad (5.23)$$

(het tegengestelde van vergelijking (5.19))

Voor de temperatuur van de uitgaande gasstroom geldt:

$$T_2 = T_1 \left[ 1 + \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} - 1 \right] \eta_e \right] \quad (5.24)$$

met  $\eta_e = 0,75$ .

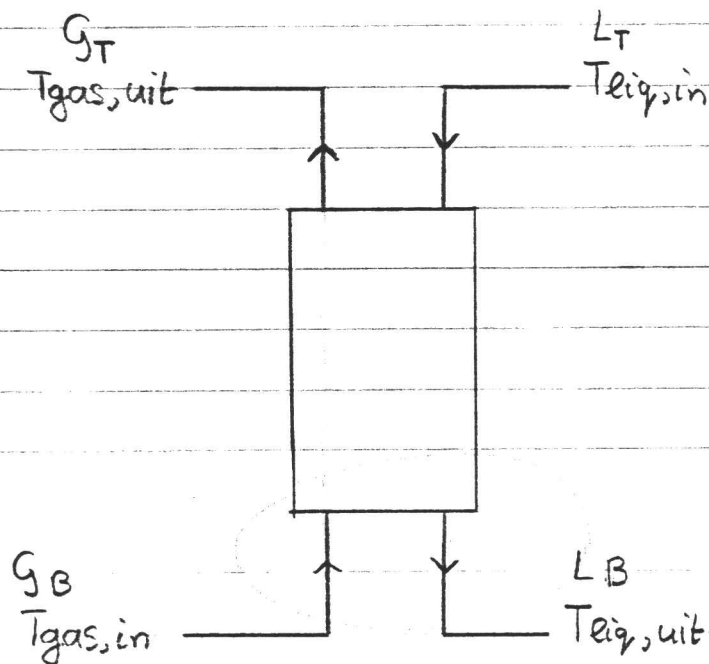
De efficiëntie  $\eta_e$  is voor een expander gedefinieerd als

$$\eta_e = \frac{W_{\text{pr}}}{W_{\text{theor}}} \quad (5.25)$$



## 5.8 De kolommen

De kolommen in dit voorontwerp fungeren als stripper (T11 en T24) en als absorptietoren (T17, T18 en T27). De componenten die geabsorbeerd en gedesorbeerd worden zijn  $\text{CO}_2$  en  $\text{CO}$  en dit gebeurt met waterige oplossingen van respectievelijk MEA [16] en koperammoniumformiaat [15]. Bij al deze kolommen diende er rekening te worden gehouden met temperatuurs effecten, hetgeen resulteerde in niet-isotherme ontwerpen (De massabalans en de warmtebalans over de kolommen dienden simultaan in beschouwing te worden genomen). De gevolgde werkwijze om de kolommen te ontwerpen luidt:



1. Van de voedingsstroom (gas) zijn de grootte en de temperatuur aan de ingang en de uitgang bekend. De ingangstemperatuur van het gas is gelijk aan de uitgangstemperatuur van de vloeistof. Door de warmtebalans en de massabalans over de kolom simultaan op te lossen is het mogelijk om de

grootte en de ingangstemperatuur van de vloeistof uit te rekenen. De warmte balans luidt:

$$Q_{a/d} = Q_{sy} + Q_v + Q_{sx} \quad (5.26)$$

$Q_{a/d}$  = heat of absorption or desorption

$Q_{sy}$  = sensible heat change in the vapour

$Q_v$  = heat of vaporization

$Q_{sx}$  = sensible heat change in the liquid

Men stelt de ingangstemperatuur van de vloeistof op een bepaalde waarde. Uit de evenwichtslijn wordt de maximale hoeveelheid te absorberen of te desorbere component afgelezen. Bij elke temperatuur hoort er een andere evenwichtslijnen dus een andere evenwichtssamenstelling. Het gevolg is dat in de warmtebalans (5.26) de term  $Q_{a/d}$  verandert bij het kiezen van een andere ingangstemperatuur. Doordat bekend is hoeveel men van een bepaalde component moet absorberen of desorbere en welke belading er bij een bepaalde temperatuur hoort kan men met behulp van

$$|T_{eig,uit} - T_{eig,in}| = \frac{Q_{sx}}{L_B \cdot C_{p,eig}} \quad (5.27)$$

iteratief bepalen wat de grootte  $L_B$  en de temperatuur  $T_B$  van de uitgaande vloeistofstroom is.

2. Voor de hoogte van de kolom geldt er:

$$Z = H_{og} N_{og} \quad (5.28)$$

$N_{og}$  = theoretisch aantal overdrachtsstappen betrokken op de gasfase.

$H_{og}$  = hoogte van een overdrachtstrap betrokken op de gasfase.

$N_{og}$  volgt uit een McCabe-Thiele diagram of uit de vergelijking:

$$N_{og} = \frac{1}{1 - (m G_m / L_m)} \ln \left[ \left( 1 - \frac{m G_m}{L_m} \right) \frac{y_1}{y_2} + \frac{m G_m}{L_m} \right] \quad (5.29)$$

$m$  = helling evenwichtslijn

$G_m$  = molenstroom gasfase ( $\text{mol/s}$ )

$L_m$  = molenstroom vloeistoffase ( $\text{mol/s}$ )

$y_1$  = molfractie van de te absorberen of te desorberen component in de gasfase aan de bodem van de kolom.

$y_2$  = molfractie van de te absorberen of te desorberen component in de gasfase aan de top van de kolom.

$G_m/L_m$  volgt uit de helling van de werklijn.

Bovenstaande vergelijking is grafisch weergegeven in figuur 15.

3. De hoogte van een overdrachtstrap  $H_{og}$  kan met de volgende vergelijkingen worden berekend [8]:

$$H_{og} = H_G + m \frac{G_m}{L_m} H_L \quad (5.30)$$

$$H_G = \frac{0,011 \psi_R (Sc)_v^{0,5} \left( \frac{D_c}{0,305} \right)^{1,11} \left( \frac{z}{3,05} \right)^{0,33}}{(L_w^* f_1 f_2 f_3)^{0,5}} \quad (5.31)$$

$$H_L = 0,305 \phi_R (Sc)_L^{0,5} K_3 \left( \frac{Z}{3,05} \right)^{0,15} \quad (5.32)$$

$(Sc)_v$  = lengte van Schmidt betrekken op de gasfase.

$(Sc)_L$  = lengte van Schmidt betrekken op de vloeistoffase.

$D_c$  = kolom diameter (m)

$Z$  = kolomhoogte (m)

$K_3$  = flooding percentage correctie factor uit figuur 16.

$\psi_R$  =  $H_g$  factor uit figuur 17.

$\phi_R$  =  $H_L$  factor uit figuur 18.

$L_w^*$  = vloeistofmassadebiet per oppervlakte-eenheid van de kolomdoorsnede ( $\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$ ).

$f_1$  = vloeistofviscositeitscorrectiefactor  $(\mu_L/\mu_w)^{0,16}$

$f_2$  = vloeistof dichtheidscorrectiefactor  $(\rho_w/\rho_L)^{1,25}$

$f_3$  = oppervlaktespanningscorrectiefactor  $(\sigma_w/\sigma_L)^{0,8}$

Berekening van de kolomdiameter. De keuze van de kolomdiameter heeft invloed op de drukval over de kolom. Deze invloed kan met behulp van de vergelijking

$$K_4 = \frac{42,9 (V_w^*)^2 F_p (\mu_L/\rho_L)^{0,1}}{\rho_v (\rho_L - \rho_v)} \quad (5.33)$$

bepalen.

$V_w^*$  = massadebiet aan gas per oppervlakte-eenheid van de kolomdoorsnede ( $\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$ ).

$F_p$  = packing factor (uit tabel 6)

$\mu_L$  = vloeistofviscositeit (Pas)

$\rho_L$  = vloeistofdichtheid ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )  
 $\rho_V$  = gasdichtheid ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )

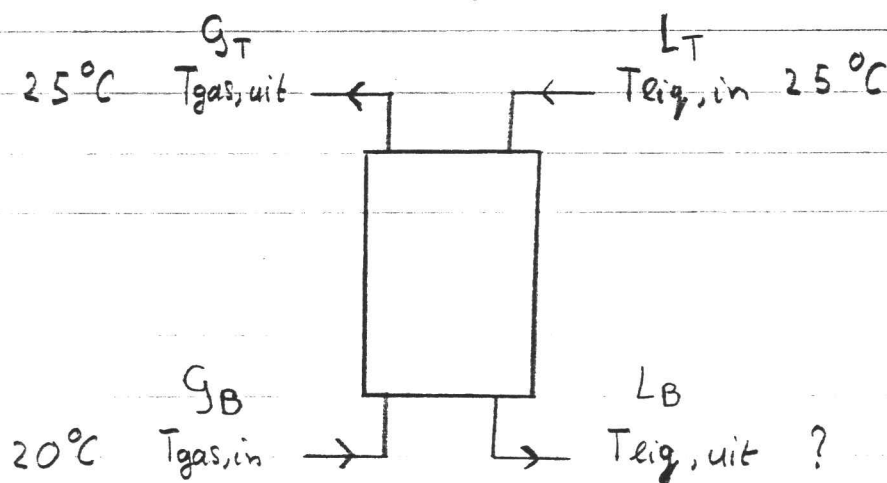
Nadat men  $K_4$  met behulp van vergelijking (5.33) heeft uitgerekend en de flowfactor

$$F_{LV} = \frac{L_w^*}{V_w^*} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} \quad (5.34)$$

kent, dan kan men uit figuur 19 de drukval over de kolom aflezen. Als deze drukval boven de flooding line komt te liggen dan dient men een andere kolomdiameter te kiezen en stap 3 te herhalen.

### rekenvoorbeeld kolommen

In dit rekenvoorbeeld zal het ontwerp van kolom (T17) worden gepresenteerd.



! Berekening van de grootte en de uitgangstemperatuur van de vloeistofstroom.

Het is de bedoeling om 99% van de in de voedingsstroom aanwezige  $\text{CO}_2$  te verwijderen m.b.v. een 1 N MEA-oplossing

Samenstelling van de voedingsstroom:

	mol/s	molfractie	kg/s
CO <sub>2</sub>	5,830	0,09589	0,256
O <sub>2</sub>	2,332	0,03835	0,075
N <sub>2</sub>	52,645	0,86577	1,470
totaal	60,807		1,81

Er dient dus 5,80085 mol CO<sub>2</sub> geabsorbeerd te worden door de MEA-oplossing. De absorptiewarmte van CO<sub>2</sub> door de MEA-oplossing bedraagt 48070 J/mol CO<sub>2</sub> [ ].

Warmtebalans:

$$Q_a = Q_{sy} + Q_v + Q_{sx}$$

$$Q_a = 5,80085 \left( \frac{\text{mol}}{\text{s}} \right) \cdot 48070 \left( \frac{\text{J}}{\text{mol}} \right)$$

$$= 278,847 \text{ kW}$$

$$C_{pO_2} = 29,93 \left( \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot ^\circ\text{C}} \right)$$

$$C_{pN_2} = 28,55 \left( \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot ^\circ\text{C}} \right)$$

$$C_{pH_2O} = 33,44 \left( \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot ^\circ\text{C}} \right)$$

gasstroom ingang kolom:

	mol/s
CO <sub>2</sub>	5,830
N <sub>2</sub>	52,6449
O <sub>2</sub>	2,332
H <sub>2</sub> O	1,4332

$$Q_{sy} = [52,6449 \cdot 28,55 + 1,4332 \cdot 33,44 + 2,332 \cdot 29,93]$$

$$= 8,104 \text{ kW}$$

Als  $t = 25^\circ\text{C}$  :  $P_{\text{H}_2\text{O}} = 23,7 \text{ mm Hg}$   
hoeveelheid water aan de uitgang van de kolom:

$$[60,806\text{g} - 0,995 \cdot 5,83] [23,7 / 736,3] = 1,771 \text{ (mol/s)}$$

Er verdampt dus  $1,771 - 1,4332 = 0,3378 \text{ (mol/s)}$   
aan water.

$$\Delta H_{v, \text{water}} = 43,865 \text{ (kJ/mol)}$$

$$Q_v = 43,865 \cdot 0,3378 = 14,8 \text{ (kW)}$$

$$\Rightarrow Q_{sx} = 255,9 \text{ kW}$$

Vergelijking (5.27) :

$$|25^\circ\text{C} - T_{\text{eq, in}}| = \frac{255,9 \cdot 10^3 \text{ (J/s)}}{L_B \cdot 75,2 \text{ (J/molK)}}$$

Na itereren volgt er :

$$L_m = 920,138 \text{ (mol/s)}$$

$$T_{\text{eq, in}} = 29 \text{ (}^\circ\text{C)}$$

≡ Uit het McCabe-Thiele diagram volgt er :

$$N_{\text{og}} = 14$$



### 3 Berekening van **Hog.**

Met behulp van vergelijking (5.34) kan men de flowfactor uitrekenen:

$$F_{LV} = \frac{L_w^*}{V_w^*} \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}} = \frac{16,56}{1,805} \sqrt{\frac{1,214}{10^3}} = 0,320$$

De doorsnede van de kolom wordt weggedeeld door  $L_w^* / V_w^*$ .

$$\frac{L_w^*}{V_w^*} = \frac{L_m \cdot \bar{m}_e}{V_m \cdot \bar{m}_v} = \frac{920,138 \text{ (mol/s)} \cdot 18 \text{ (g/mol)}}{60,81 \text{ (mol/s)} \cdot 29,6 \text{ (g/mol)}}$$

Er worden  $1\frac{1}{2}$  inch (38 mm) Berl saddles gebruikt als pakking. Uit [14, tabel.18-5] volgt  $F_p = 215$ .

De kolom wordt ontworpen op een drukval van 30 mm  $H_2O$  per meter pakking. Uit figuur 19 volgt er dan:

$$K_4 = 0,75 \quad (K_4 = 1,7 \text{ bij flooding})$$

$$\% \text{ flooding} = \left( \frac{0,75}{1,7} \right)^{1/2} \cdot 100\% = 66,4\%$$

$$\text{Uit vergelijking (5.33) : } V_w^* = 0,237 \text{ (kg/m}^2\text{s)}$$

$$\Rightarrow \text{diameter kolom } D_c = 2,56 \text{ (m)} \\ \approx 2,6 \text{ (m)}$$



$$H_g = \frac{0,011 \psi_R (Sc)_v^{0,5} \left(\frac{D_c}{0,305}\right)^{1,11} \left(\frac{Z}{3,05}\right)^{0,33}}{(L_w^* f_1 f_2 f_3)^{0,5}} \quad \text{eerste schatting:}$$

$$= \frac{0,011 \cdot 80 \cdot (0,921)^{0,5} \left(\frac{2,6}{0,305}\right)^{1,11} \left(\frac{14}{3,05}\right)^{0,33}}{(3,119 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1)^{0,5}} = 0,930 \text{ (m)}$$

$$H_L = 0,305 \phi_R (Sc)_L^{0,5} K_3 \left(\frac{Z}{3,05}\right)^{0,15}$$

$$= 0,305 \cdot 0,063 \cdot (549,45)^{0,5} \left(\frac{14}{3,05}\right)^{0,15} = 0,453 \text{ (m)}$$

$$H_{og} = H_g + m \frac{G_m}{L_m} H_L$$

$$= 0,930 + 16,47 \cdot 0,0661 \cdot 0,453$$

$$= 1,42$$

$$Z = H_{og} N_{og} = 1,42 \cdot 14 = 19,88 \text{ (m)}$$

Deze waarde van Z verschilt te veel van de beginschatting. Een beginschatting van  $Z = 8$  levert op:

$$H_g = 0,830 \quad ; \quad H_L = 0,417$$

$$H_{og} = 0,830 + 16,47 \cdot 0,0661 \cdot 0,417 = 1,28$$

$$Z = H_{og} \cdot N_{og} = 17,8 \text{ (m)}$$

De drukval over de kolom bedraagt: 5233 (Pa)

## 6. Economische analyse

Middels een economische analyse worden er schattingen gemaakt van de Pay out Time (de verhouding tussen de totale investering en de netto opbrengst per jaar) en de Return On Investment (de verhouding van de netto opbrengst per jaar en de totale investering, in procenten). Met de netto opbrengst per jaar wordt bedoeld de totale opbrengst per jaar minus de totale kosten per jaar. Met behulp van de twee getallen kan men investeringen beoordelen.

### 6.1 De investeringen

Investeringen in een gemiddelde chemische fabriek in Nederland kunnen in vier groepen worden onderverdeeld (figuur 20). Deze onderverdeling luidt:

$$I_T = I_B + I_H + I_L + I_W \quad (6.1)$$

$I_T$  = totale investering

$I_B$  = investering in de proceseenheden (inclusief indirecte bouwkosten op de site)

$I_H$  = investering in hulpapparatuur en off-site investeringen

$I_L$  = niet tastbare investeringen (know-how, licenties, pre-operationele kosten en opstartkosten)

$I_W$  = werkkapitaal (voorraden, cash, terreinen)

De termen  $I_B$  en  $I_H$  vormen samen de vaste investeringen,  $I_F$ , en dit maakt 80% uit van de investeringen. De vaste

investeringen kunnen worden afgeschat met de methode van Lang [11], hetgeen als volgt gaat:

- De kosten van de geleverde apparatuur die nog niet geplaatst is worden gesteld op A.

- Door de kosten van fundamenteën, ondersteuning en montage lopen de kosten op tot  $B = 1,43 \cdot A$ .

- De kosten lopen voor een gas/vloeistofproces verder op tot  $C = 1,60 \cdot B$ .

- De kosten voor elektrische installaties, hulpdiensten en voorzieningen kan men incalculeren door met een factor 1,5 te vermenigvuldigen:  $D = 1,5 \cdot C$ .

- De indirecte kosten (engineering, overhead) leiden bij een gas/vloeistofproces tot een verhoging met een factor 1,38.

Hierdoor kunnen de vaste investeringen berekend worden met:

$$I_F = 4,74 \cdot A \quad (6.2)$$

Uit figuur blijkt dat de vaste investeringen voor 80% deel uitmaken van de totale investeringen. Door  $I_F$  met 1,25 ( $= \frac{100\%}{80\%}$ ) te vermenigvuldigen komt men tot een schatting van de totale investeringen. De berekening van A is weergegeven in tabel 7. De prijzen van de apparaten zijn bepaald volgens [12].

De totale investering bedraagt:

$$I_F = 4,74 \cdot 2182,7 = \text{€} 10346$$

## 6.2 Proceskosten

Proceskosten kunnen worden onderverdeeld in de volgende posten [ 11 ] :

$$K_T = K_A + K_F = K_A + K_O + K_P + K_I + K_L \quad (6.3)$$

$K_A$  = algemene kosten

$K_F$  = fabricagekosten

$K_O$  = indirecte fabricagekosten

$K_P$  = kosten die afhankelijk zijn van het productievolume

$K_I$  = kosten die van de investering afhangen

$K_L$  = semi-variabele kosten zoals loon

De bovengenoemde kostenposten worden in figuur 21 schematisch en gedetailleerd weergegeven.

### 6.2.1 De fabricagekosten

#### Grondstoffen

Per jaar wordt er 4663 ton aardgas gebruikt (voor de reformreactie en de energieopwekking in het fornuis). Dit komt overeen met  $5551191 \text{ Nm}^3$  en gezien het feit dat aardgas f 0,19 per  $\text{Nm}^3$  kost [ 13 ] komen de kosten van het benodigd aardgas neer op f 1055 .

## Katalysator kosten

Gezien het feit dat er geen prijs te vinden was van de gebruikte katalysator is deze prijs gelijkgesteld aan de gemiddelde katalysatorkosten op de raffinaderij te Pernis (f 50 per kg). In dit proces is er 6,8 ton katalysator nodig die om de drie jaar vervangen wordt tijdens de jaarlijkse plant shut-down in verband met controle door de veiligheidsdienst en de overheid. Deze overwegingen brengen de jaarlijkse katalysatorkosten op 113 f/jaar.

## Afschrijving van de apparatuur

alternatief?  
sinking fund?

Er vindt een rechtlijnige afschrijving plaats over een periode van 10 jaar waarbij de restwaarde van de apparatuur nul gulden bedraagt. De afschrijving wordt berekend met een restwaarde van nul gulden en over het verschil van de totale investeringskosten en het werkkapitaal:

$$\frac{(100\% - 6\%) \cdot 10346}{10} = 972,5 \text{ f/jaar}$$

## 6.2.2 Utilities

### electriciteit

De hoeveelheid electriciteit die gebruikt wordt door de pompen en compressoren bedraagt per jaar 1655520 kWh. Daar electriciteit f 0,12 per kWh kost komen de elec-

triviteitskosten te liggen op  $1655520 \text{ kWh} \cdot \frac{0,12}{\text{kWh}} = 199 \text{ kf}$ .

### stoom

Op twee plaatsen in de fabriek (stroom 14 en stroom 58) wordt er externe stoom gebruikt. In totaal wordt er 61490 ton stoom per jaar gebruikt. De prijs van stoom bedraagt f 24 [13] per ton waardoor de jaarlijkse kosten aan stoom neerkomen op kf 1476.

### 6.2.3. loonkosten

De loonkosten worden op basis van kf 350 per functieplaats berekend met de Wessel-relatie:

$$L = 32 \cdot N \cdot C^{0,24} \quad (6.4)$$

L = loonkosten per jaar (kf)

N = aantal secties in de fabriek

C = capaciteit van de fabriek (kton/jaar)

De fabriek heeft drie secties te weten een reactorsectie, een CO<sub>2</sub>-terugwinningsssectie en een CO-zuiveringsssectie. De capaciteit van de fabriek bedraagt 11,8 (kton/jaar). Hierdoor komen de loonkosten neer op 174 kf per jaar. <sup>1/2 man?</sup>

### 6.2.4. onderhoud

De jaarlijkse onderhoudskosten bedragen ongeveer 4% van de vaste investeringen, hetgeen neerkomt op  $0,04 \cdot 10346 = \text{kf } 414$

### 6.2.5. Verzekeringskosten

De verzekeringspremie bedraagt 0,25% van de omzet van de fabriek. Daar de omzet jaarlijks  $\text{€} 7277$  bedraagt wordt de verzekeringspremie  $\text{€} 18$  per jaar.

### 6.2.6 Plant overheads

De plant overhead-kosten worden opgebouwd uit de indirecte kosten  $K_0$  en de algemene kosten  $K_0$ . De indirecte kosten bedragen 4% van de totale investeringen en 45% van de loonkosten. Voor de algemene kosten kan men 5% van de omzet rekenen.

plant overhead-kosten per jaar

$$0,04 \cdot 10346 + 0,45 \cdot 174 + 0,05 \cdot 7277 = \text{€} 856$$

### 6.3 Opbrengst van het proces

Zowel het hoofdproduct CO als de bijproducten  $N_2$  (met 5%  $O_2$ ) en  $H_2$  worden gebruikt bij de berekening van de opbrengst van het proces (tabel 8). Hierdoor wordt de opbrengst  $\text{€} 7277$



6.4 De verlies- en winstrekening *methanol kosten?*

Kosten	ƛf	Baten	ƛf
aardgas	1055	CO	1584
katalysator	113	H <sub>2</sub>	1286,5
electriciteit	199	N <sub>2</sub>	440636
stoom	1476		
afschrijving	972,5		
onderhoud	414		
verzekering	18		
loonkosten	174		
plant overh.	856		
bruto winst	1999,6		
omzet	7277,1	omzet	7277,1

Doordat er nog 45% aan vennootschapsbelasting betaald moet worden komt de netto winst te liggen op ƛf 1299,7.



## 6.5 Return on Investment

Hieronder wordt de netto jaarlijkse winst per hoeveelheid totale investering verstaan (in procenten).

$$ROI = \frac{1299,7}{10346} \cdot 100\% = 12,6\%$$

$$\frac{2300}{10346} \cdot 100\% = 23\%$$

## 6.6 Pay Out Time

Dit is de tijd waarin het proces zichzelf terugverdient en wordt berekend door het verschil van de totale investering en het werkkapitaal te delen door de netto winst per jaar: - restwaarde

$$\frac{(100\% - 6\%) \cdot 10346}{1299,7} = 7,5 \text{ jaar}$$

2300                      4,0 jaar

IRR ? als dynamische methode?

## 7. Conclusies en Aanbevelingen

De Pay Out Time van de fabriek is volgens dit ontwerp 7,5 jaar en de Return of Investment bedraagt 12,6%. Op basis van deze getallen zou geen enkele onderneming geïnteresseerd zijn in dit ontwerp.

Een blik op de verlies- en winstrekening maakt duidelijk dat de grootste kostenpost in de procesvoering de stoomkosten zijn. Als deze fabriek stoom kan betrekken van een andere fabriek waarbij er stoom wordt geproduceerd met anders verloren gegane warmte dan kan dit ontwerp aantrekkelijker worden.

Geen stoomkosten : POT = 4 jaar!  
te laag

## 8. Literatuurlijst

1. Richardson, J. T., Paripatyadar, S. A., Applied Catalysis 61 (1990) 293-309.
2. Rostrup-Nielsen, J. R., J. Catal., 33 (1974) 184
3. Paripatyadar, S. A., Cyclic Operation of Sodium Heat Pipe Solar Reformers, Ph. D. Dissertation, Department of Chemical Engineering, University of Houston, Houston, TX, may 1987.
4. Richardson, J. T., Paripatyadar, S. A., Shen, J. C., AIChE J., 34 (1988) 743
5. Duduković, M. P., Mills, P. L., Chemical and catalytic reactor modeling, American Chemical Society, Washington, D. C. (1984) p 252-254.
6. Caloric Gesellschaft für Apparatebau mbH, patent DT 2711991 (1977).
7. Hydrocarbon processing, april 1990, p. 73
8. Coulson, J. M., Richardson, J. F., Chemical Engineering, 1<sup>st</sup>, vol. 6 (1983)
9. Touber, S., Pompen en compressoren, Onderdeel van het college st 42, Valgroep proces en energie, cursus 1990/91, TU-Delft.
10. Smith, J. M., Van Ness, H. C., Introduction to chemical engineering thermodynamics, 4<sup>th</sup>, McGraw-Hill, New York (1987).
11. Montfoort, A. G., De chemische fabriek deel 2, college-dictaat TU Delft, Delft (1989).
12. Dutch Association of Cost Engineers, WEBCI/WUBO-prüzenboekje, 14<sup>e</sup>, Leidschendam (1989).

13. Montfoort, A. G., Meijer, F. A., Ham, A. van den, Handleiding voor het maken van een fabrieksvoorstel, TUD, Delft (1989).
14. Perry, R. H., Green, D., Perry's Chemical Engineers' Handbook, 50<sup>th</sup>, McGraw-Hill, New York (1984).
15. Hainsworth, R., Titus, E. Y., J. Am. Chem. Soc., 43, (1920) p1-11.
16. Lawson, J. D., Garst, A. W., Journal of Chemical and Engineering Data, Vol. 21, No. 1 (1976), p20-30.

**BIJLAGE I**

**TABELLEN**

Table 1. Typical overall coefficients

Shell and tube exchangers		
Hot fluid	Cold fluid	$U$ ( $W/m^2 \cdot ^\circ C$ )
<i>Heat exchangers</i>		
Water	Water	800-1500
Organic solvents	Organic solvents	100-300
Light oils	Light oils	100-400
Heavy oils	Heavy oils	50-300
Gases	Gases	10-50
<i>Coolers</i>		
Organic solvents	Water	250-750
Light oils	Water	350-900
Heavy oils	Water	60-300
Gases	Water	20-300
Organic solvents	Brine	150-500
Water	Brine	600-1200
Gases	Brine	15-250
<i>Heaters</i>		
Steam	Water	1500-4000
Steam	Organic solvents	500-1000
Steam	Light oils	300-900
Steam	Heavy oils	60-450
Steam	Gases	30-300
Dowtherm	Heavy oils	50-300
Dowtherm	Gases	20-200
Flue gases	Steam	30-100
Flue	Hydrocarbon vapours	30-100
<i>Condensers</i>		
Aqueous vapours	Water	1000-1500
Organic vapours	Water	700-1000
Organics (some non-condensibles)	Water	500-700
Vacuum condensers	Water	200-500
<i>Vaporisers</i>		
Steam	Aqueous solutions	1000-1500
Steam	Light organics	900-1200
Steam	Heavy organics	600-900

TABLE 2 Constants for use in equation 12.3

Triangular pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
$K_1$	0.319	0.249	0.175	0.0743	0.0365
$n_1$	2.142	2.207	2.285	2.499	2.675
Square pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
$K_1$	0.215	0.156	0.158	0.0402	0.0331
$n_1$	2.207	2.291	2.263	2.617	2.643

TABLE 3 *Fouling factors (coefficients), typical values*

Fluid	Coefficient ( $W/m^2 \text{ } ^\circ C$ )
River water	3000-12,000
Sea water	1000-3000
Cooling water (towers)	3000-6000
Towns water (soft)	3000-5000
Towns water (hard)	1000-2000
Steam condensate	1500-5000
Steam (oil free)	4000-10,000
Steam (oil traces)	2000-5000
Refrigerated brine	3000-5000
Air and industrial gases	5000-10,000
Flue gases	2000-5000
Organic vapours	5000
Organic liquids	5000
Light hydrocarbons	5000
Heavy hydrocarbons	2000
Boiling organics	2500
Condensing organics	5000
Heat transfer fluids	5000
Aqueous salt solutions	3000-5000

TABLE 4 *Conductivity of metals*

Metal	Temperature ( $^\circ C$ )	$k_w$ ( $W/m \text{ } ^\circ C$ )
Aluminium	0	202
	100	206
Brass (70Cu, 30Zn)	0	97
	100	104
	400	116
Copper	0	388
	100	378
Nickel	0	62
	212	59
Cupro-nickel (10 per cent Ni)	0-100	45
Monel	0-100	30
Stainless steel (18/8)	0-100	16
Steel	0	45
	100	45
	600	36
Titanium	0-100	16

TABLE 5 Typical baffle clearances and tolerances

Shell diameter, $D_s$	Baffle diameter	Tolerance
Pipe shells 6 to 25 in. (152 to 635 mm)	$D_s - \frac{1}{16}$ in. (1.6 mm)	$+ \frac{1}{32}$ in. (0.8 mm)
Plate shells 6 to 25 in. (152 to 635 mm)	$D_s - \frac{1}{8}$ in. (3.2 mm)	$+ 0, - \frac{1}{32}$ in. (0.8 mm)
27 to 42 in. (686 to 1067 mm)	$D_s - \frac{1}{16}$ in. (4.8 mm)	$+ 0, - \frac{1}{16}$ in. (1.6 mm)

TABLE 6 Design data for various packings

	Size		Bulk density ( $\text{kg/m}^3$ )	Surface area $a$ ( $\text{m}^2/\text{m}^3$ )	Packing factor $F_p$
	in.	mm			
Raschig rings	0.50	13	881	368	640
Ceramic	1.0	25	673	190	160
	1.5	38	689	128	95
	2.0	51	651	95	65
	3.0	76	561	69	36
Metal (density for carbon steel)	0.5	13	1201	417	300
	1.0	25	625	207	115
	1.5	38	785	141	83
	2.0	51	593	102	57
	3.0	76	400	72	32
Pall rings	0.625	16	593	341	70
Metal (density for carbon steel)	1.0	25	481	210	48
	1.25	32	385	128	28
	2.0	51	353	102	20
	3.5	76	273	66	16
Plastics (density for polypropylene)	0.625	16	112	341	97
	1.0	25	88	207	52
	1.5	38	76	128	40
	2.0	51	68	102	25
	3.5	89	64	85	16
Intalox saddles	0.5	13	737	480	200
Ceramic	1.0	25	673	253	92
	1.5	38	625	194	52
	2.0	51	609	108	40
	3.0	76	577		22



Tabel 7. De kosten van nog niet geplaatst  
apparatuur.

[ Webci ]

apparaat	prijs in kf
warmtewisselaars	
H7	194
H2	36
H13	176
H9	47
torens	
T27	142
T24	92
T17	290
T11	318
T18	84
pompen	
P15	9.2
P16	12.8
P28	17.1
P26	17.1
P21	16.5
compressoren	
C1	44
C19	74
expander	
M5	21
vaten	
V23	23
V10	23
V8	23
V31	23
reactor + fornuis	
R3 + F4	500
totaal	2182.7

Tabel 8. Opbrengst van het proces.

	prijs f/ton	produktie ton/jaar	opbrengst kf/jaar
stikstof	100	44066	4406.600
waterstof	3100	415	1286.500
koolmonoxide	200	7290	1584.000
		totaal	7277.100

**BIJLAGE II**

**FIGUREN**

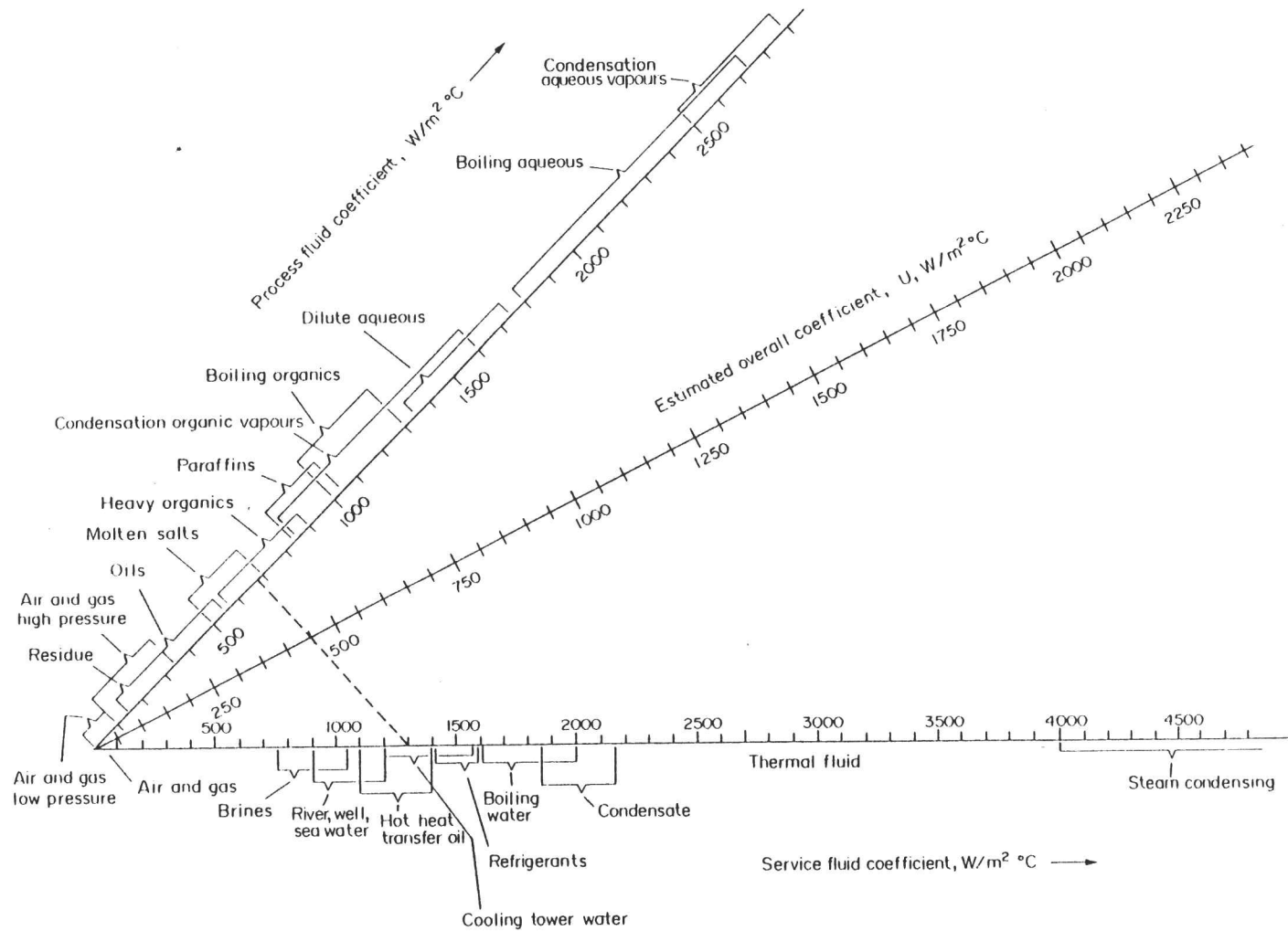


FIG. 1 Overall coefficients (join process side duty to service side and read  $U$  from centre scale)

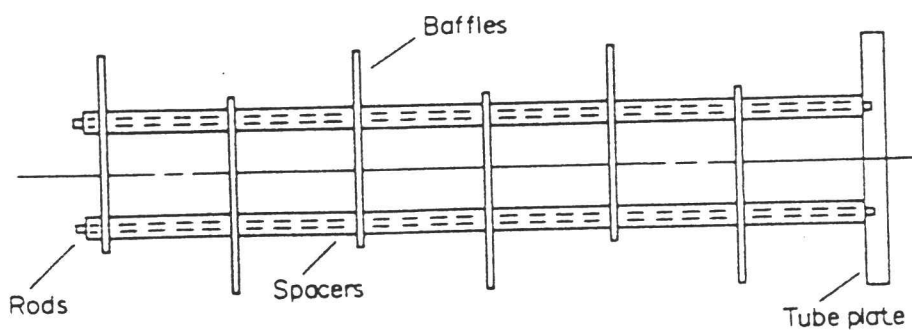
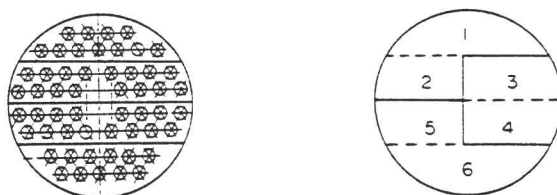


FIG. 2 Baffle spacers and tie rods



Six tube passes

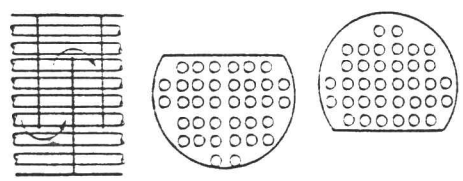


Four passes

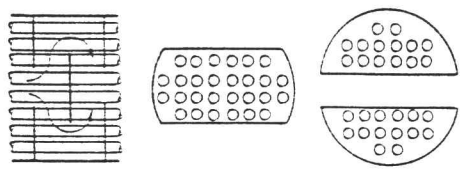


Two passes

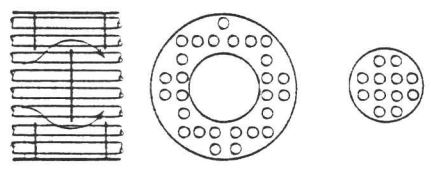
FIG. 3 Tube arrangements, showing pass-partitions in headers



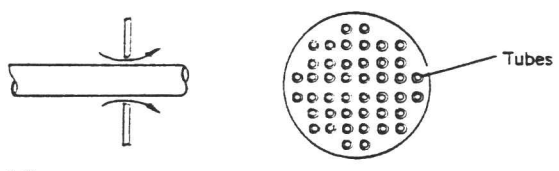
(a) Segmental



(b) Segmental and strip



(c) Disc and doughnut



(d) Orifice

FIG. 4 Types of baffle used in shell and tube heat exchangers

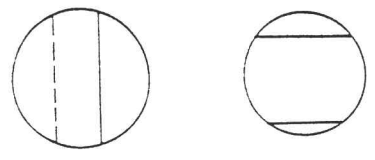


FIG. 5 Baffles for condensers

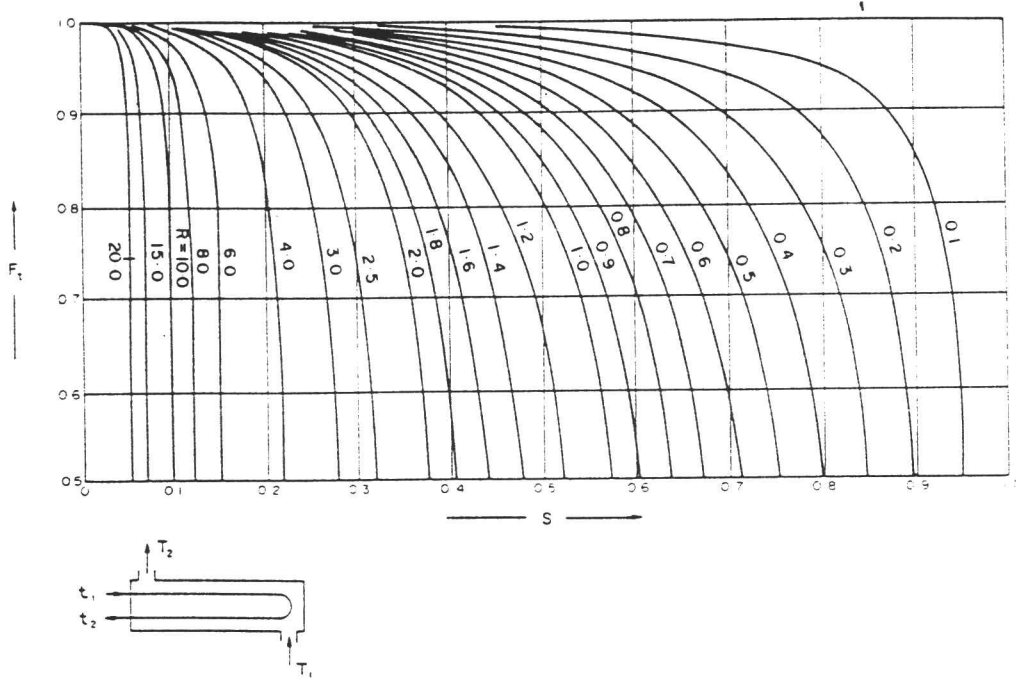


FIG. 6 Temperature correction factor: one shell pass; two or more even tube passes

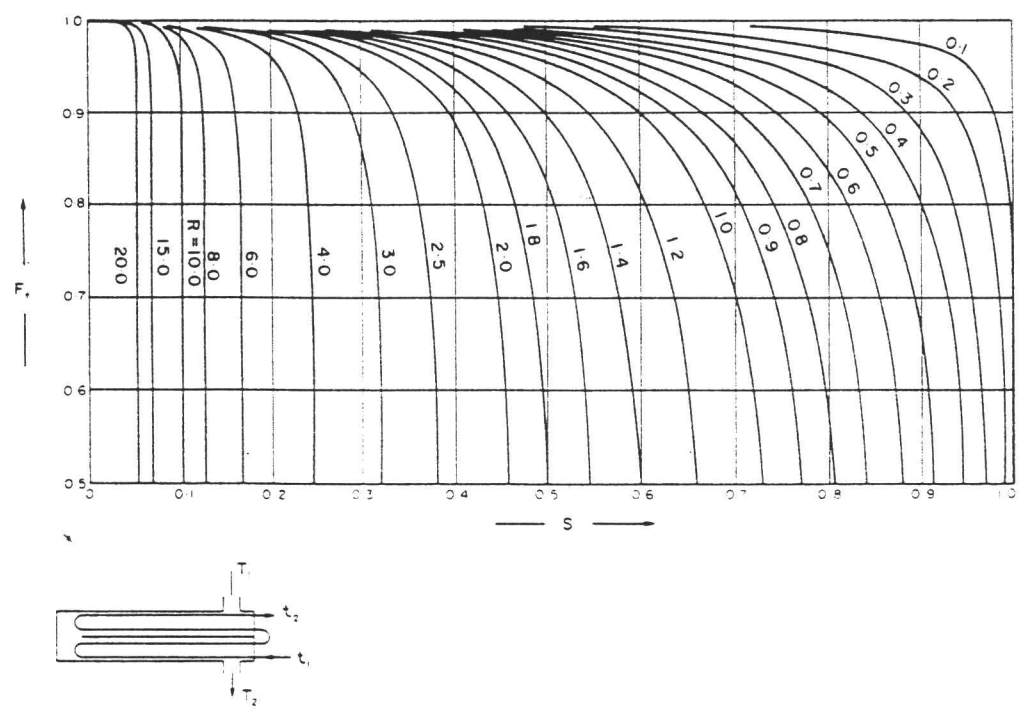


FIG. 7 Temperature correction factor: two shell passes; four or multiples of four tube passes

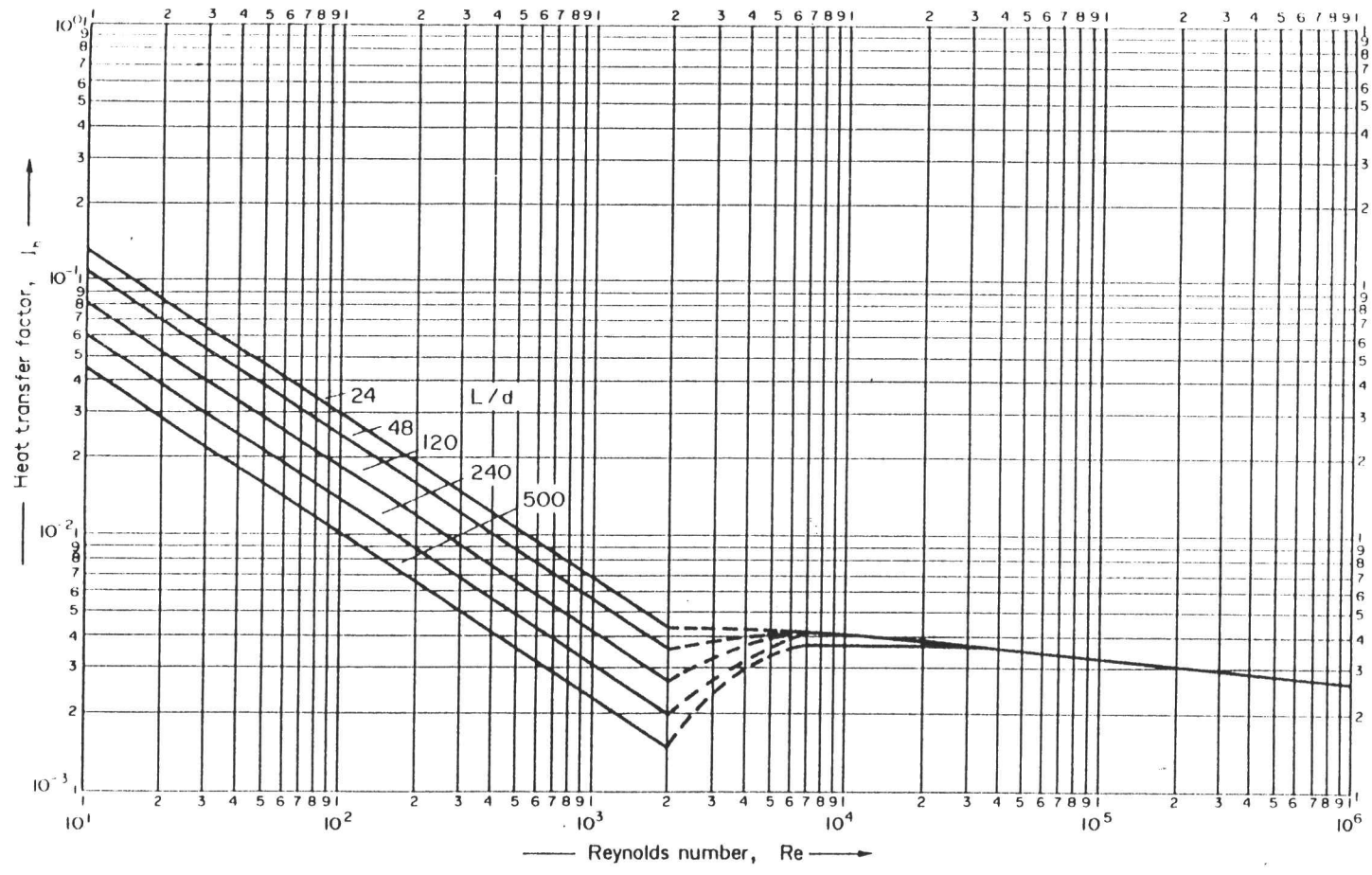


FIG. 8 Tube-side heat-transfer factor



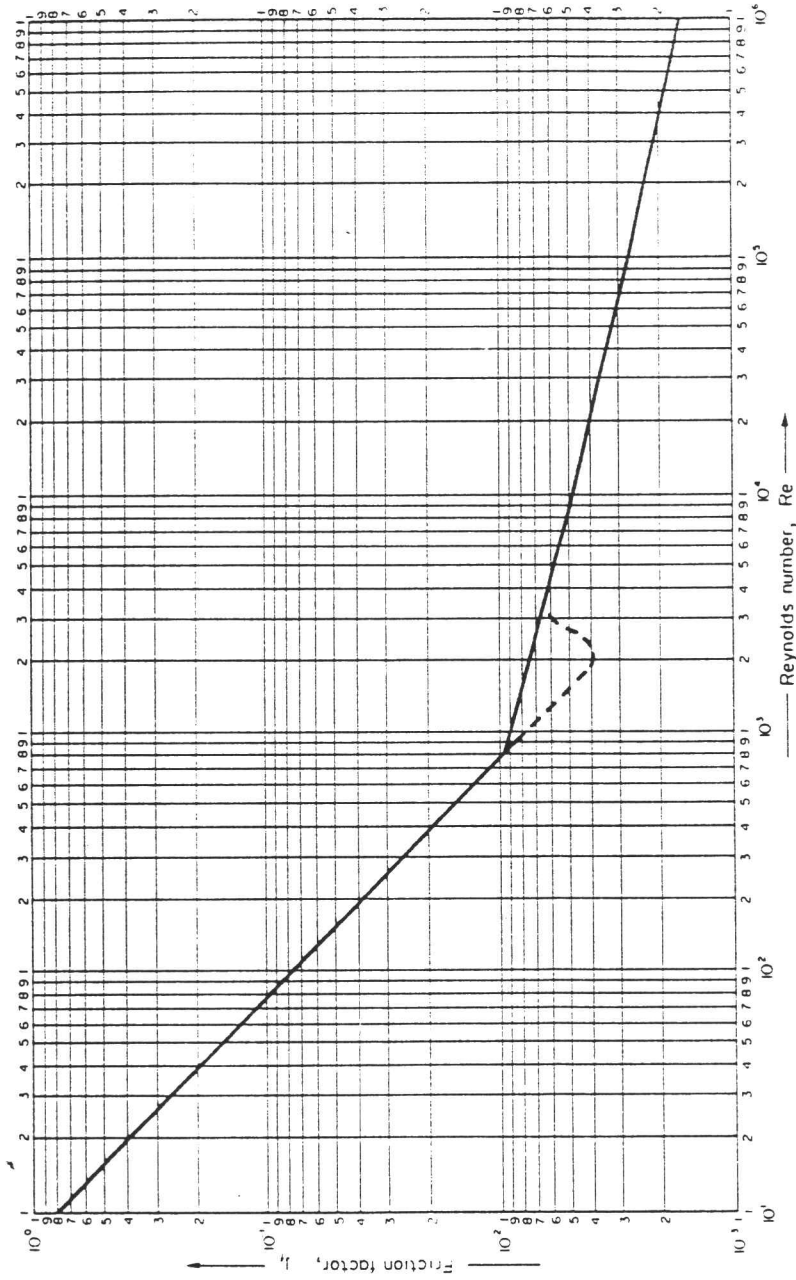


Fig. 3 Tube-side friction factors

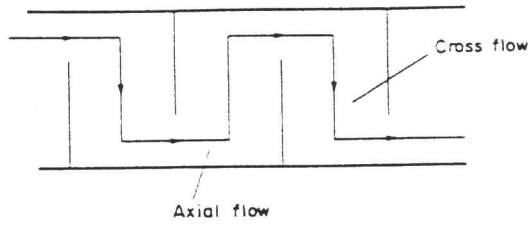


FIG. 10 Idealised main stream flow

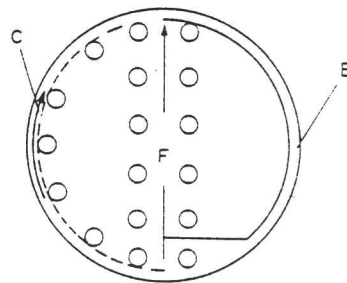
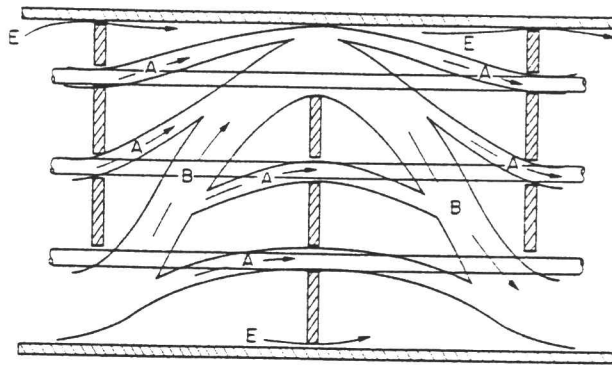


FIG. 11 Shell-side leakage and by-pass paths

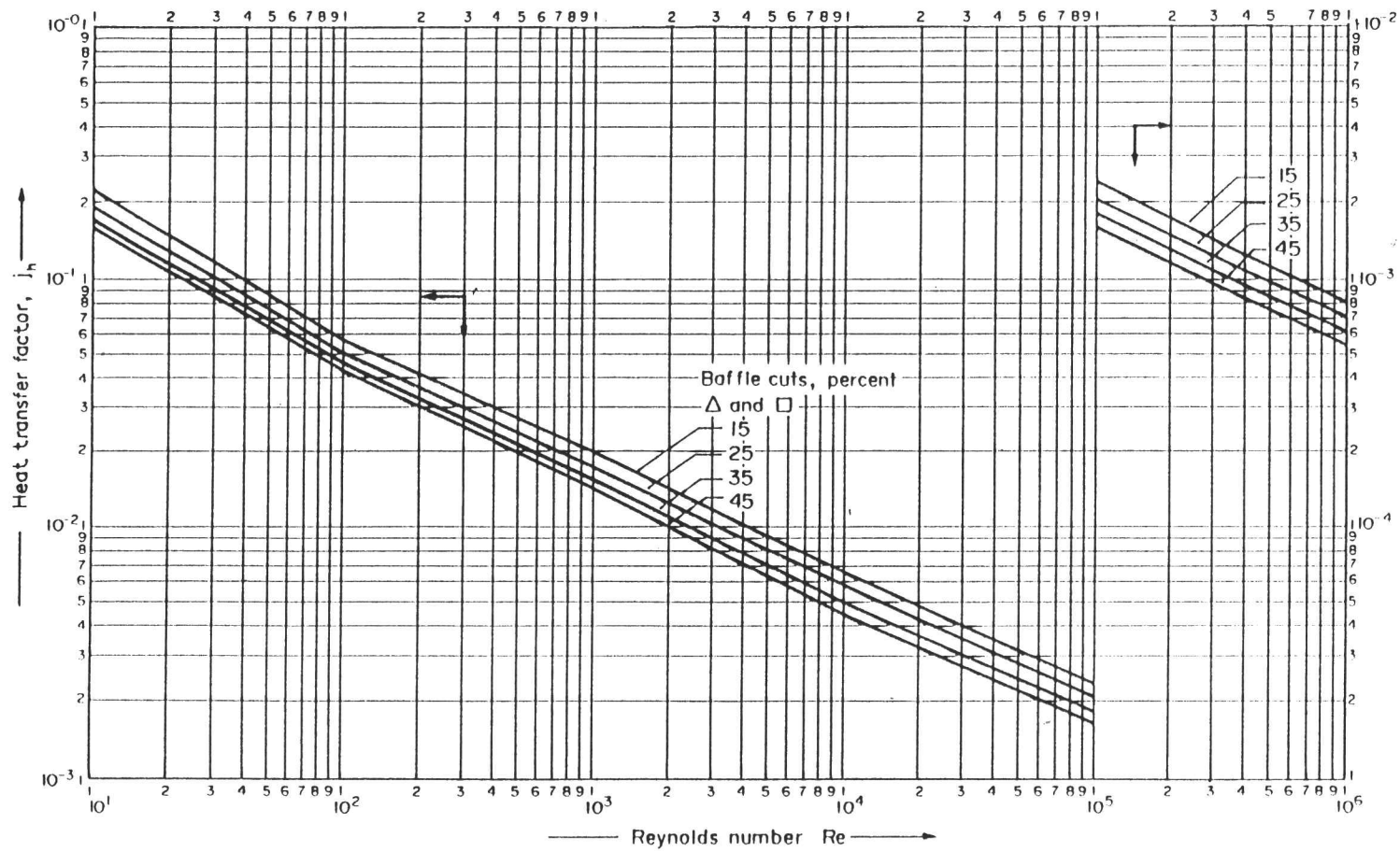


FIG. 12 Shell-side heat-transfer factors, segmental baffles

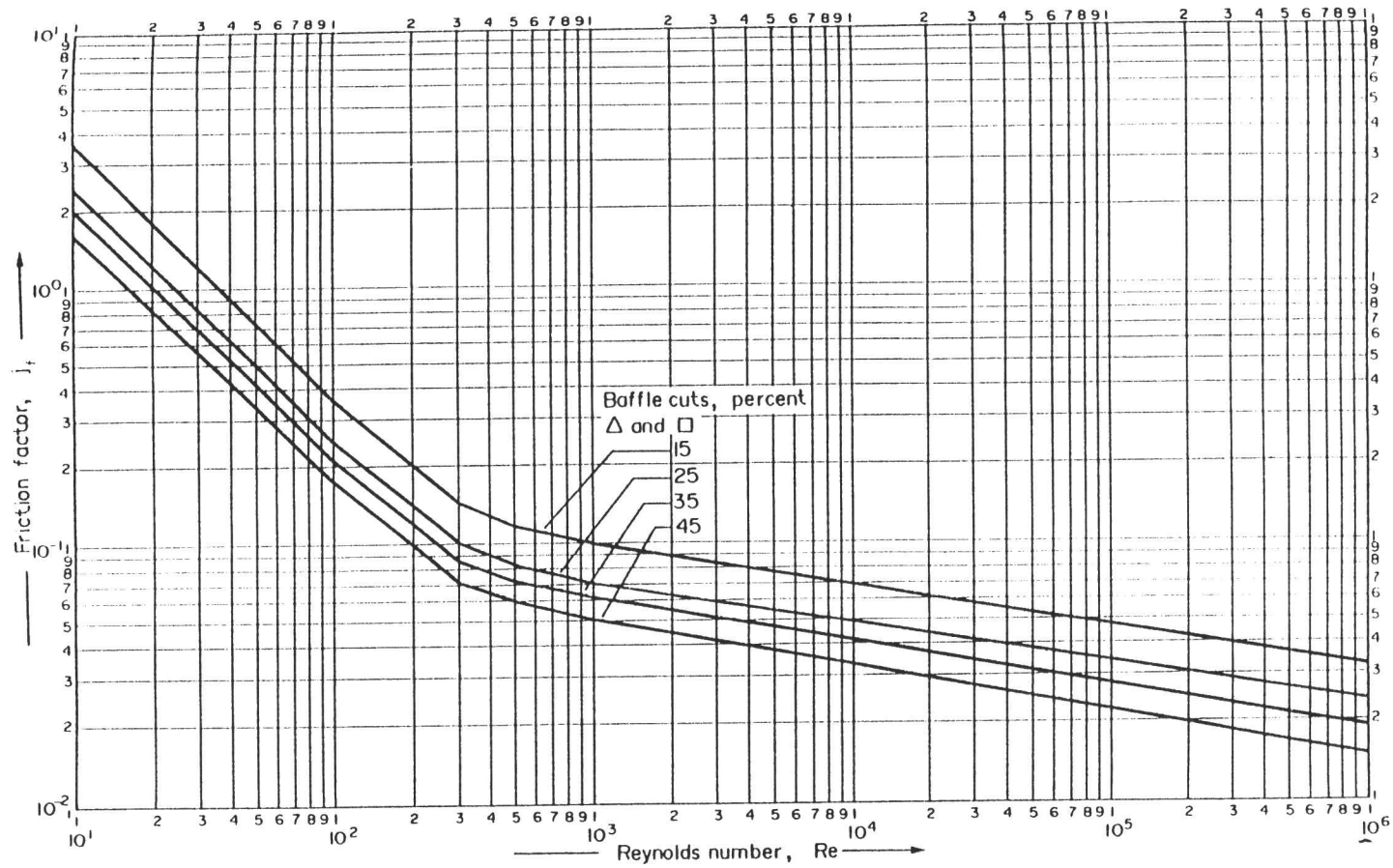


FIG. 13 Shell-side friction factors, segmental baffles

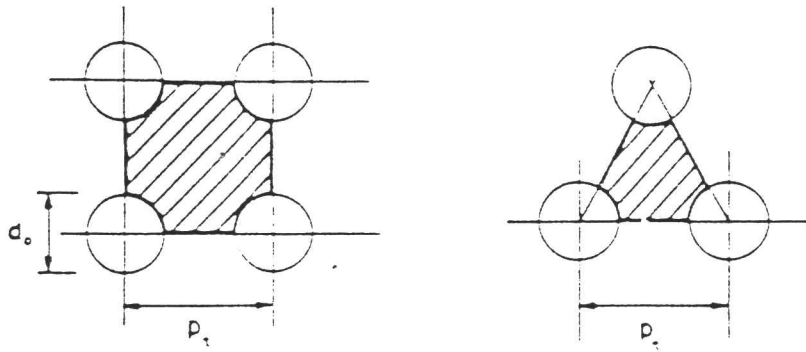


FIG. 14. Equivalent diameter, cross-sectional areas and wetted perimeters

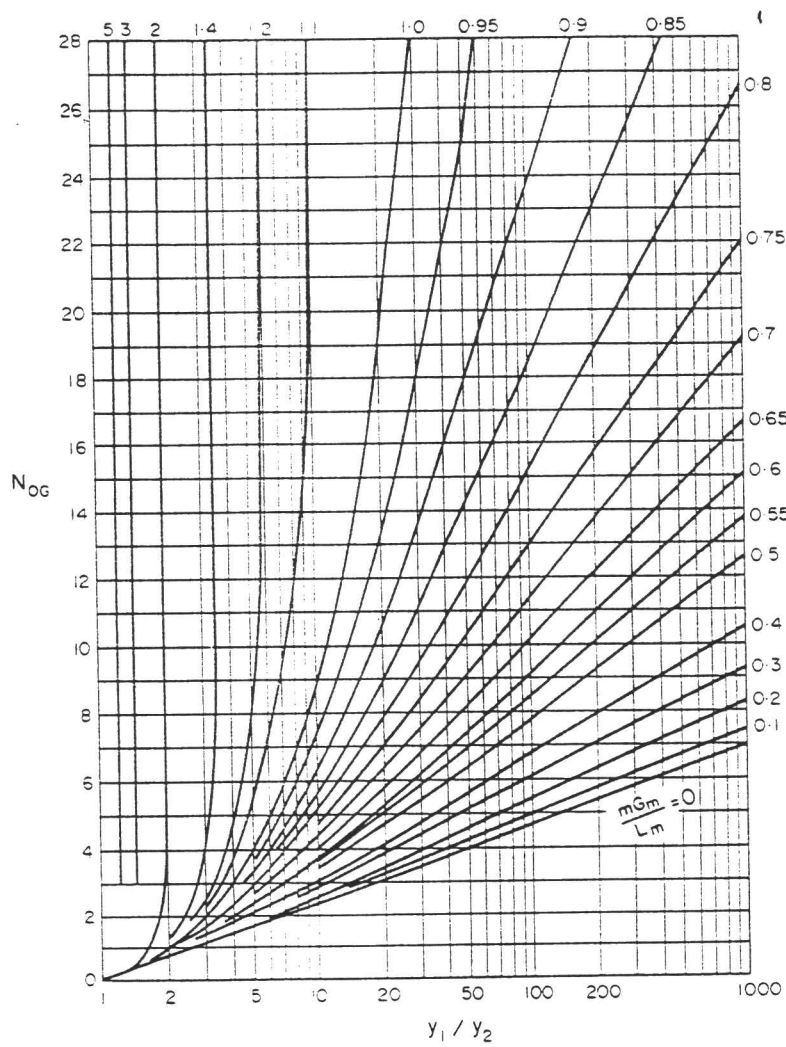


FIG. 15. Number of transfer units  $N_{OG}$  as a function of  $y_1, y_2$  with  $mG_m/L_m$  as parameter

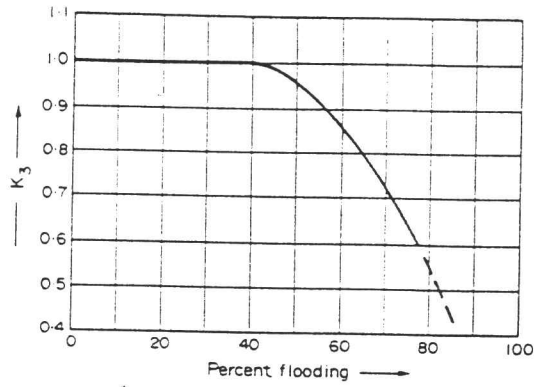


FIG. 16 Percentage flooding correction factor

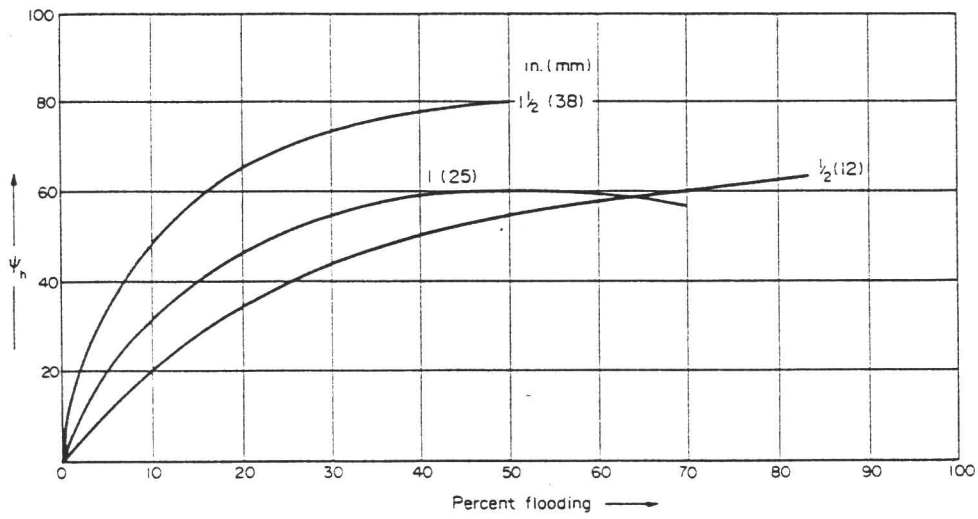


FIG. 17 Factor for  $H_c$  for Berl saddles

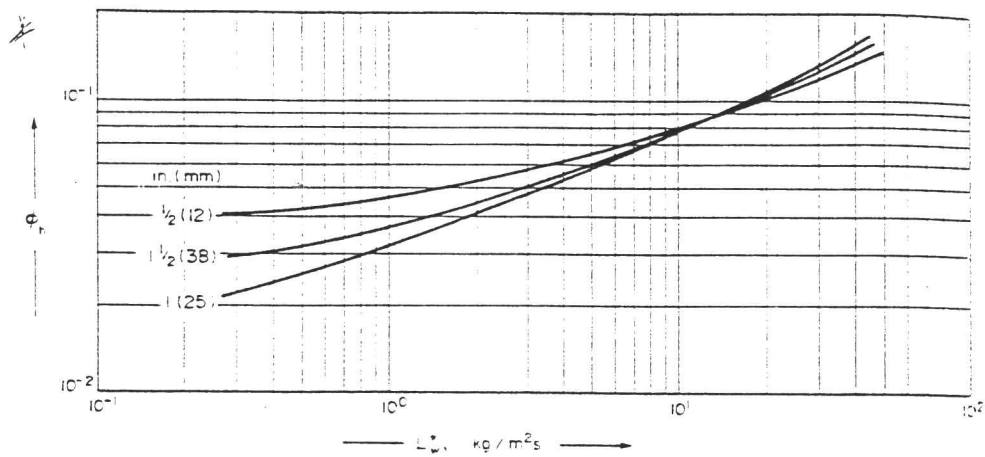


FIG. 18 Factor for  $H_L$  for Berl saddles

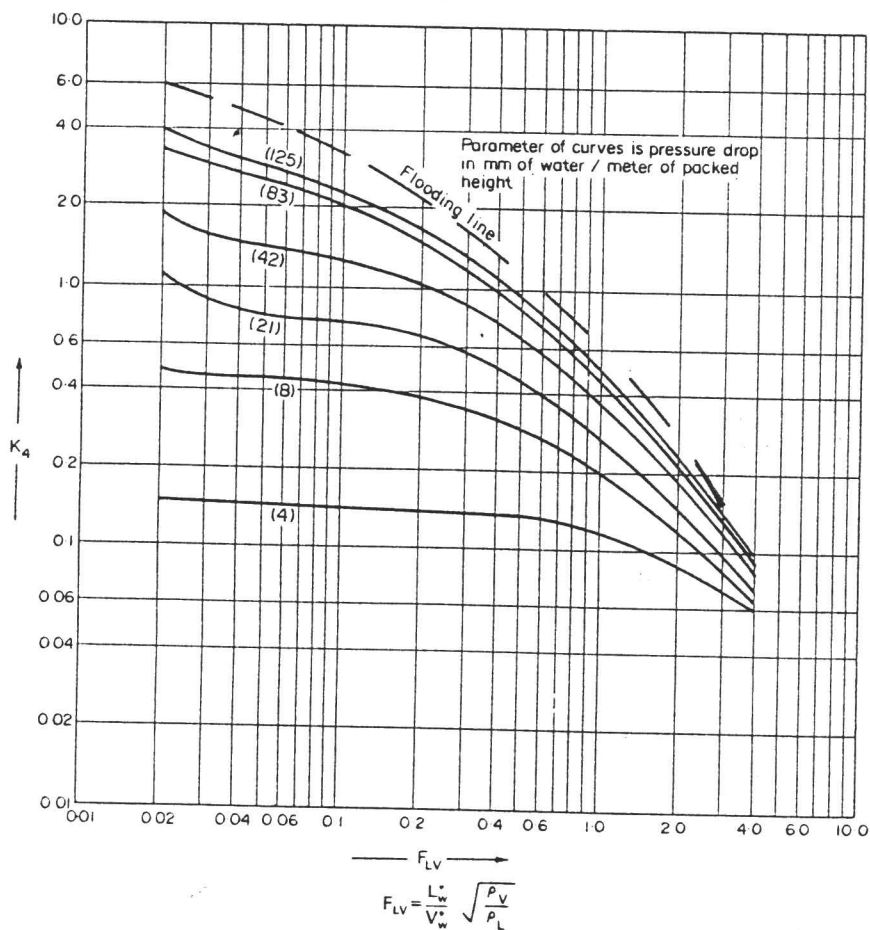
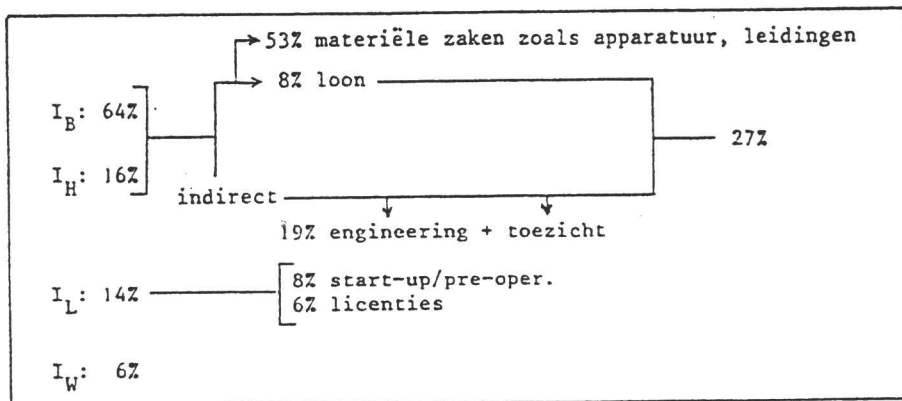
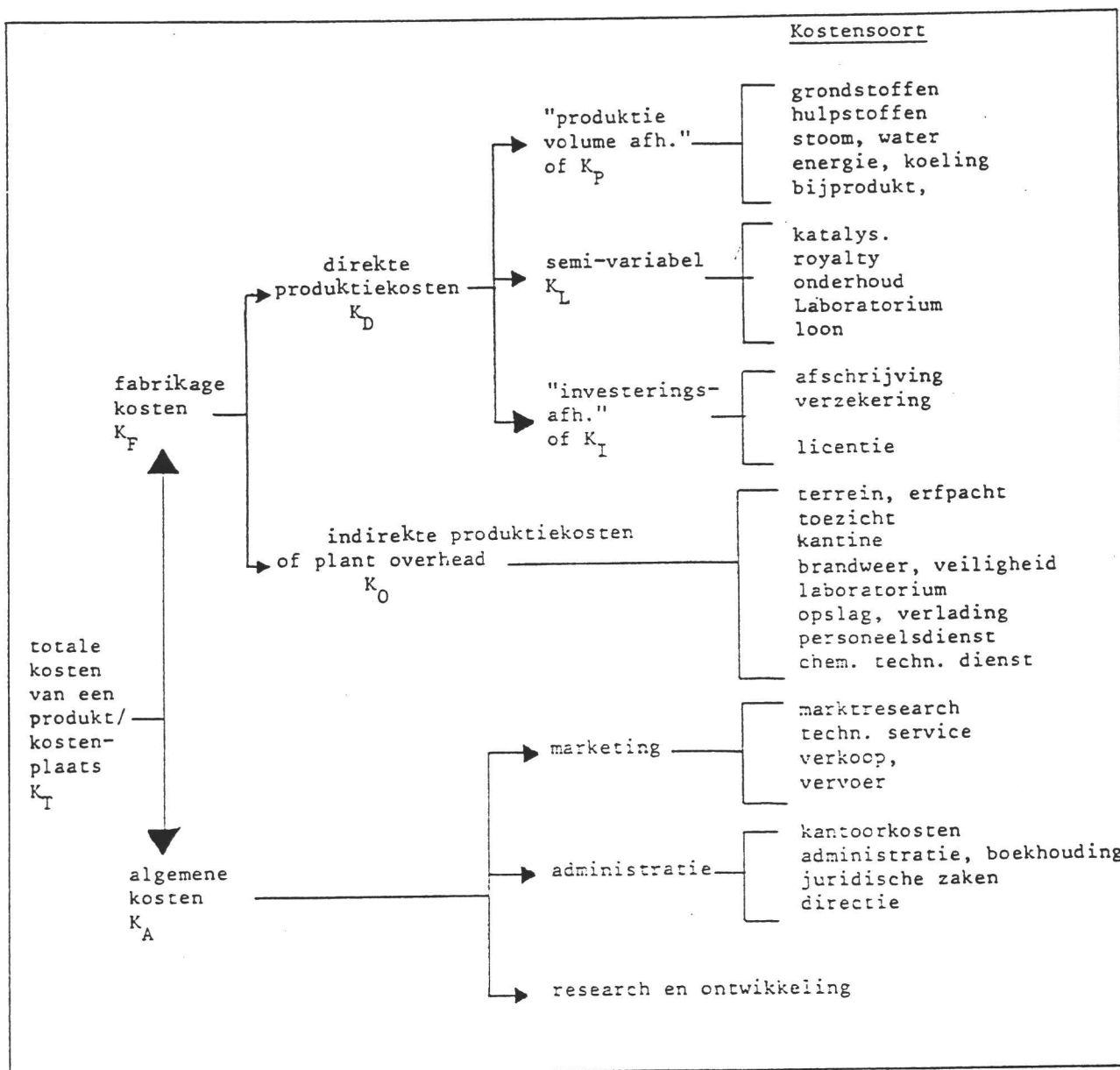


FIG. 19 Generalised pressure drop correlation, adapted from a figure by the Norton Co. with permission



figuur 20. Investeringsopbouw van "een" Nederlandse chemische fabriek



figuur 21. Een kostenopbouw van een chemisch produkt

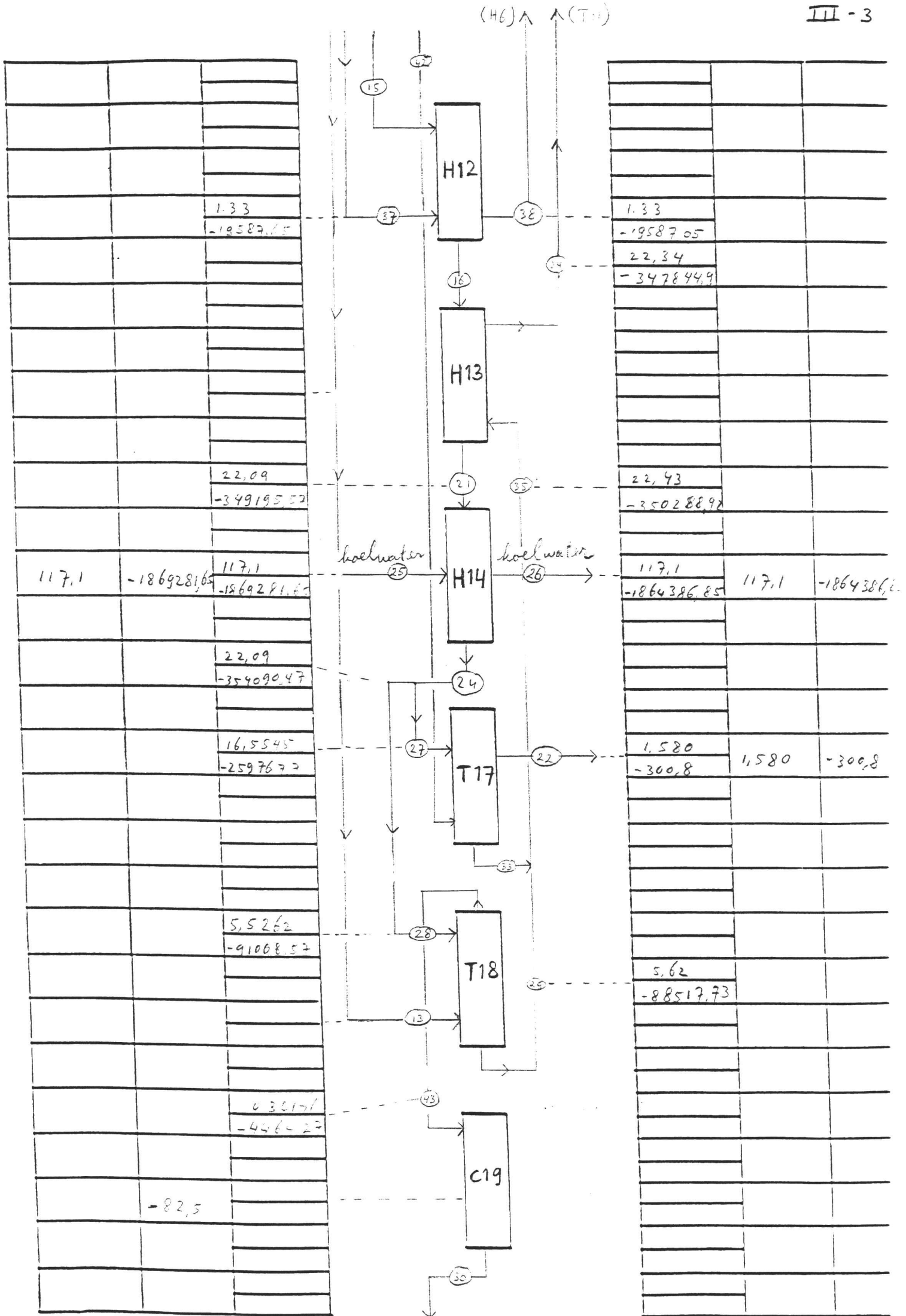


**BIJLAGE III**

**MASSA- EN WARMTEBALANS**







1.33  
-19587.65

22.09  
-349195.52

117.1    -1869281.65    117.1  
-1869281.65

22.09  
-354090.47

16.5545  
-259767.7

5.5262  
-91068.57

0.3517  
-446.27

-82.5

1.33  
-19587.05  
22.34  
-347844.9

22.93  
-350288.92

117.1    -1864386.85    117.1    -1864386.85

1.580  
-300.8    1.580    -300.8

5.62  
-88517.73





**BIJLAGE IV**

**STROOM- EN COMPONENTENSTAAT**

Apparaatsroom ↓ Componenten	1		2		3		4		5	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan	0,06864				0,09328		0,06864		0,06864	
Kooldioxide							0,34232		0,34232	
Koolmonoxide										
Zuurstof			0,44774							
Stikstof			1,53006							
Waterstof										
Water										
MEA										
Koper										
Ammonium										
Formaat										
<b>Totaal:</b>	0,06864	-320,44	1,9778	-516,28	0,09328	-435,47	0,41096	-3308,83	0,41096	-3417,83

Apparaatsroom ↓ Componenten	6		7		8		9		10	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan	0,06864									
Kooldioxide	0,34232		0,34232		0,09416		0,09416		0,09416	
Koolmonoxide					0,27780		0,2778		0,2778	
Zuurstof										
Stikstof										
Waterstof					0,014396		0,014396		0,014396	
Water					0,02460		0,02460		0,02460	
MEA										
Koper										
Ammonium										
Formaat										
<b>Totaal:</b>	0,41096	-3384,23	0,34232	-3063,79	0,41096	-1931,84	0,41096	-1822,83	0,41096	-2095,81

M in kg/s  
Q in kW

Stroom/Componenten staat



Apparaatsroom	71		72		73		74		75	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Kooldioxide	0,09416				0,09416				0,006627	
Koolmonoxide	0,2778				0,2778					
Zuurstof										
Stikstof										
Waterstof	0,014396				0,014396					
Water	0,02460		0,0159		0,0087		1,35712		20,73807	
MEA									1,3453	
Koper										
Ammonium										
Formiaat										
Totaal:	0,41096	-2363,23	0,0159	-389,81	0,39506	-1973,42	1,35712	-22030,42	22,09	-349621,57

Apparaatsroom	76		77		78		79		20	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Kooldioxide	0,006627				?					
Koolmonoxide			0,2750							
Zuurstof										
Stikstof										
Waterstof										
Water	20,73807		2,30447		1,3548		0,41		0,41	
MEA	1,3453									
Koper										
Ammonium										
Formiaat										
Totaal:	22,09	-346755,57	2,57947	-37449,68	1,3548	-17189,93	0,41	-101417,99	0,41	-101685,35

M in kg/s  
Q in kW

Stroom/Componenten staat

Apparaatsroom	21		22		23		24		25	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Kool dioxide	0,006627		0,001264				0,006627			
Koolmonoxide			0,07505							
Zuurstof			1,47							
Stikstof										
Waterstof										
Water	20,73807		0,03365		32,66		20,73807		117,1	
MEA	1,3453						1,3453			
Koper										
Ammonium										
Formaat										
<b>Totaal:</b>	22,09	-349195,57	1,580	-300,8	32,66	-521353,95	22,09	-354090,47	117,1	-1867281,65

Apparaatsroom	26		27		28		29		30	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Kool dioxide							0,093854		4,810 <sup>-4</sup>	
Koolmonoxide									0,2778	
Zuurstof										
Stikstof										
Waterstof									0,014376	
Water	117,1		15,54421		5,189		5,189		0,005584	
MEA			1,01028		0,33715		0,33715			
Koper										
Ammonium										
Formaat										
<b>Totaal:</b>	117,1	-1864386,85	16,5545	-259767,7	5,5262	-91008,57	5,62	-88517,73	0,30126	-4384,76

M in kg/s

Q in kW

Stroom/Componenten staat

Apparaatsroom	31		32		33		34		35	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Kool dioxide					0,255512		0,34991		0,34937	
Koolmonoxide										
Wuurstof										
Stikstof										
Waterstof										
Water	3,08		3,08		15,54421		20,7343		20,7332	
MEA					1,01028		1,34579		1,34743	
Koper										
Ammonium										
Formaat										
<b>Totaal:</b>	3,08	-49166,02	3,08	-49037,06	16,81	-261771,19	22,43	-347844,7	22,43	-350288,92

Apparaatsroom	36		37		38		39		40	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Kool dioxide	0,25652						0,25625		0,25625	
Koolmonoxide										
Wuurstof	0,07498						0,07498		0,07498	
Stikstof	1,53006						1,53006		1,53006	
Waterstof										
Water	0,20952		1,33		1,33		0,20952		0,20952	
MEA										
Koper										
Ammonium										
Formaat										
<b>Totaal:</b>	2,07108	-2437,75	1,33	-19587,05	1,33	-19587,05	2,07108	-5195,75	2,07108	-3824,05

M in kg/s  
Q in kW

Stroom/Componenten staat

Apparaatstroom ↓ Componenten	41		42		43		44		45	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Kool dioxide			0.25625		4,810 <sup>-4</sup>		4,810 <sup>-4</sup>		0.34232	
Koolmonoxide			0.07498		0.2778		0.2778			
zuurstof			1.33006							
Stikstof					0.014396		0.014396			
Waterstof			0.02562		0.008584		0.008584		1.3548	
Water	0.18417									
MEA										
Koper										
Ammonium										
Formaat										
<b>Totaal:</b>	0.18417	-1519.79	1.88691	-2304.26	0.30126	-4464.27	0.30126	-4510.56	1.69712	-20253.76

Apparaatstroom ↓ Componenten	46		47		48		49		50	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Kool dioxide										
Koolmonoxide	0.34232									
zuurstof										
Stikstof										
Waterstof										
Water	1.3578		67,6		67,6		37,1214		37,1214	
MEA										
Koper									3.456	
Ammonium									6.278	
Formaat									8.761	
<b>Totaal:</b>	1.69712	-23079.46	67,6	-107910.762	67,6	-107628,90	57.6164	-910913,83	57.6164	-916374,80

M in kg/s  
Q in kwh

Stroom/Componenten staat

Apparatuur ↓ Componenten	51		52		53		54		55	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Koolstofdioxide					4.810,4					
Koolmonoxide					0,002778		0,2750			
Stikstof										
Waterstof					0,014396					
Water							38,5082		37,0	
Methanol	38,5		38,5				3,445			
Koper							6,8959			
Ammonium							8,7759			
Formaat										
Totaal:	38,5	-291243,97	38,5	-285782,95	0,017654	-7,9	57,9	-920877,49	37,0	-599108,88

Apparatuur ↓ Componenten	56		57		58		59		60	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan										
Koolstofdioxide										
Koolmonoxide							0,2750			
Stikstof										
Waterstof										
Water	37,0				2,235		2,30447		2,30447	
MEA										
Koper										
Ammonium										
Formaat										
Totaal:	37,0	-605327,84	57,9	-914658,49	2,235	-18511,02	2,57997	-28313,63	2,30447	-36386,10

Stroom/Componenten staat

Min kg/s  
Q in kW



Apparaatstroom ↓ Componenten	61		62		63		64	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan								
Koolcooxide								
Koolmonoxide	0,2750							
Stuifstof								
Waterstof								
Water			37,9		37,9		32,66	
MEA								
Koper								
Ammonium								
Formaat								
Totaal:	0,2750	-1063,58	37,9	-60500321	37,9	-59864171	32,66	-519982,25

Apparaatstroom ↓ Componenten								
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Methaan								
Koolcooxide								
Koolmonoxide								
Stuifstof								
Waterstof								
Water								
MEA								
Koper								
Ammonium								
Formaat								
Totaal:								

Stroom / Componenten staat

M in kg/s  
Q in kW

**BIJLAGE V**

**SPECIFICATIEBLADEN VAN DE  
APPARATUUR**





Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2953  
 Datum : jan '93  
 Ontworpen door : meisch / Dahol

TORENSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : 117		Fabrieksnummer :			
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :					
Functie.....	: destillatie / extractie / absorptie / .....*				
Type toren.....	: gepakt / schotel / sproeier / .....*				
Type schotel.....	: klokje / zeefplaat / valve / .....*				
Aantal schotels.....	: theoretisch : 14				
Aantal schotels.....	: praktisch :				
Schotelafstand / HETS :	1,28 m	Materiaal schotel :			
Diameter toren.....	2,60 m	Hoogte toren .... :		17,8 m	
Materiaal toren .....	: RVS				
Verwarming.....	: geen / open stoom / reboiler / .....*				
BEDRIJFSKONDITIONES :					
	Voeding	Top	Bodem	Reflux/absorp- tie middel	Extraktie middel/...
Temperatuur..... °C	20	25	29	1 N MEA- in water	
Druk..... bar	1,0	1,0	1,0		
Dichtheid..... kg/m <sup>3</sup>	1,25	1,22	995		
Massastroom..... kg/s	1,83	1,58	16,81		
Samenstelling in mol % resp. gew. %	gew %	gew %	gew %		
CO <sub>2</sub>	14,0	0,08	1,52		
O <sub>2</sub>	4,1	4,75	—		
N <sub>2</sub>	80,5	93,04	—		
H <sub>2</sub> O	1,4	2,10	92,47		
MEA	—	—	6,01		
ONTWERP :					
Aantal klokjes / zeefgaten / .....	**:		Type pakking..... : Berl. saaltes		
Aktief schoteloppervlak.....	m <sup>2</sup>		Materiaal pakking : Fluorureel		
Lengte overlooprand.....	mm		Afmetingen pakking : 17-1		
Diameter valpijp / gat / .....	mm				
Verdere gegevens op schets vermelden					

\*doorstrepen wat niet van toepassing is.

\*\* indien een toren schotels van verschillend ontwerp bevat, dit vermelden!

TORENSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : T.18	Fabrieksnummer :				
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :					
Functie..... : destillatie / extractie / absorptie / .....* Type toren..... : gepakt / schotel / sproeier / .....** Type schotel..... : klokje / zeefplaat / valve / .....** Aantal schotels..... : theoretisch : 10 Aantal schotels..... : praktisch : Schotelafstand / HETS : 0.6 m                      Materiaal schotel : Diameter toren..... : 0,85 m                      Hoogte toren .... : 6,0 Materiaal toren ..... : RVS Verwarming..... : <del>geen</del> / open stoom / <del>reboiler</del> / .....*					
BEDRIJFSKONDITIONES :					
	Voeding	Top	Bodem	Reflux/absorp- tie middel	Extraktie middel/...
Temperatuur..... °C	20	25	29	1N MEA- in water	
Druk..... bar	1,0	1,0	1,0		
Dichtheid..... kg/m <sup>3</sup>	1,28	1,20	995		
Massastroom..... kg/s	0,39	0,30	5,62		
Samenstelling in mol % resp. gew.%	gew%	gew%	gew%		
CO <sub>2</sub>	23,85	0,16	1,67		
CO	70,38	91,75	—		
H <sub>2</sub>	3,54	4,62	—		
H <sub>2</sub> O	2,23	3,47	92,33		
MEt	—	—	6,00		
ONTWERP :					
Aantal klokjes / zeefgaten / .....**:				Type pakking..... : Berl saddles	
Aktief schoteloppervlak..... :			m <sup>2</sup>	Materiaal pakking : keramisch	
Lengte overlooprand..... :			mm	Afmetingen pakking : 1 1/2"	
Diameter valpijp / gat / ..... :			mm		
Verdere gegevens op schets vermelden					

\*doorstrepen wat niet van toepassing is.

\*\* indien een toren schotels van verschillend ontwerp bevat, dit vermelden!



Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2953  
 Datum: Jun 93  
 Ontworpen door: Makub/Dahoe

TORENSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : 727	Fabrieksnummer :				
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>					
Functie..... : destillatie / extractie / absorptie / .....* Type toren..... : gepakt / schotel / sproeier / .....** Type schotel..... : klokje / zeefplaat / valve / .....* Aantal schotels..... : theoretisch : 24 Aantal schotels..... : praktisch : Schotelafstand / HETS : 0,42 m                      Materiaal schotel : Diameter toren..... : 1,0 m                      Hoogte toren .... : 10,15 m Materiaal toren ..... : RVS Verwarming..... : geen / open stoom / reboiler / .....*					
<b>BEDRIJFSKONDITIONS :</b>					
	Voeding	Top	Bodem	Reflux/absorp- tie middel	Extraktie middel/...
Temperatuur..... °C	25	2.3	4.6	Koper - ammonium formaat oplossing	
Druk..... bar	8.3	8.3	7.3		
Dichtheid..... kg/m <sup>3</sup>	9,20	2,82	7005		
Massastroom..... kg/s	0.303	0.02	57.9		
Samenstelling in mol % resp. gew. %	gew %	gew %	gew %		
CO.....	92,41	15,02	0,48		
CO <sub>2</sub> .....	0,16	2,54	—		
CH <sub>4</sub> .....	—	—	—		
H <sub>2</sub> .....	4,75	78,84	—		
H <sub>2</sub> O.....	2,68	3,60	66,96		
Cu.....	—	—	5,95		
NH <sub>3</sub> .....	—	—	11,91		
CH <sub>2</sub> O <sub>2</sub> .....	—	—	14,70		
<b>ONTWERP :</b>					
Aantal klokjes / zeefgaten / .....**:				Type pakking..... : Berl saddles	
Aktief schoteloppervlak..... :			m <sup>2</sup>	Materiaal pakking : Keramiek	
Lengte overlooprand..... :			mm	Afmetingen pakking : 1/2 "	
Diameter valpijp / gat / ..... :			mm		
Verdere gegevens op schets vermelden					

\*doorstrepen wat niet van toepassing is.

\*\* indien een toren schotels van verschillend ontwerp bevat, dit vermelden!



Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechnologie

Fabrieksvoorontwerp No: 29.53 . .  
 Datum : . . . . .  
 Ontworpen door : . . . . .

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 6 .	Aantal : . . serie/parallel*	
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :		
Functie . . . . . : Om stoom te produceren met behulp van de warmte van de rookgassen van het fornuis		
Type . . . . . : <del>Warmtewisselaar*</del> <del>Koeler</del> <del>Kondensor</del> Verdamer		
Uitvoering . . . . . : <del>met vaste pijpplaten*</del> kettle type <del>floating head</del> <del>haarspeld</del> <del>dubbele pijp</del> platenwarmtewisselaar		
Positie . . . . . : horizontaal/ <del>vertikaal*</del>		
Kapaciteit . . . . . : 28.70 . . . kW (berekend)		
Warmtewisselend oppervlak . . . . . : 155,4 . . . m <sup>2</sup> (berekend)		
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . : 64 . . . W/m <sup>2</sup> K (globaal)		
<del>Logaritmisch</del> temperatuurverschil ( <del>min.</del> ) . . . . . : 355 . . . °C		
Aantal passages pijpzijde . . . . . : 2 .		
Aantal passages mantelzijde . . . . . : 1 .		
<del>Korrektiefactor LMTD (min. 0,75)</del> . . . . . : . . .		
<del>Gekorrigeerde LMTD</del> . . . . . : . . . °C		
BEDRIJFSKONDITIONS :		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . .	Water/stoom	rookgassen
Massastroom . . . . . kg/s	1,33	1,83
Massastroom te verdampen/ <del>kondenseren*</del> . . . . . kg/s	1,33	. . . . .
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . kJ/kg °C	1,90	1,86
Verdampingswarmte . . . . . kJ/kg	2161,9	. . . . .
Temperatuur IN . . . . . °C	133,5	104,2
Temperatuur UIT . . . . . °C	133,5	224,4
Druk . . . . . bar	3	1
Materiaal . . . . .	. . . . .	. . . . .

\* Doorstrepen wat niet van toepassing is

Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechnologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2953 . .  
 Datum : febr. 1983  
 Ontworpen door : Michiel / Dalhui

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H.7 .	Aantal : 1. serie/parallel*	
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :		
Functie . . . . . : Om de rookgassen partiël te condenseren met rivierwater		
Type . . . . . : <del>Warmtewisselaar*</del> Koeler - Kondensator <del>Kondensator</del> Verdamp(er)		
Uitvoering . . . . . : <del>met vaste pijpplaten*</del> floating head haarspeld dubbele pijp platenwarmtewisselaar		
Positie . . . . . : horizontaal/ <del>vertikaal*</del>		
Kapaciteit . . . . . : 1371,7 . . . kW (berekend)		
Warmtewisselend oppervlak . . . . . : 149,2 . . . m <sup>2</sup> (berekend)		
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . : 130 . . . W/m <sup>2</sup> K (globaal)		
Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) . . . . . : 73,6 . . . °C		
Aantal passages pijpzijde . . . . . : 2 .		
Aantal passages mantelzijde . . . . . : 1 .		
Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) . . . . . : 0,96		
Gekorrigeerde LMTD . . . . . : 70,7 . . . °C		
BEDRIJFSKONDITIONS :		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . .	rookgassen	rivierwater
Massastroom . . . . . kg/s	2,07	32,66
Massastroom te <del>verdampen</del> /kondenseren* . . . . . kg/s	0,21	. . . . .
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . kJ/kg °C	1,36 / 4,20	4,20
Verdampingswarmte . . . . . kJ/kg	2161,9	. . . . .
Temperatuur IN . . . . . °C	224	5
Temperatuur UIT . . . . . °C	20	15
Druk . . . . . bar	1	1
Materiaal . . . . .	. . . . .	. . . . .

\* Doorstrepen wat niet van toepassing is

Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2953 . .  
 Datum : feb. '82  
 Ontworpen door : Mahisk/Dahoe

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 9.	Aantal : 1. serie/parallel*	
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :		
Functie . . . . . : Om de waterdamp in de productgassen te condenseren met behulp van rivierwater		
Type . . . . . : <del>Warmtewisselaar*</del> Koeler-KONDENSOR Kondensor <del>Verdamper</del>		
Uitvoering . . . . . : <del>met vaste pijplaten*</del> floating head <del>haarpeld</del> <del>dubbele pijp</del> <del>platenwarmtewisselaar</del>		
Positie . . . . . : horizontaal/vertikaal*		
Kapaciteit . . . . . : 267,4 . kW (berekend)		
Warmtewisselend oppervlak . . . . . : 22,4 . m <sup>2</sup> (berekend)		
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . : 110 . W/m <sup>2</sup> K (globaal)		
Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) . . . . . : 11,6 . °C		
Aantal passages pijpzijde . . . . . : 2 .		
Aantal passages mantelzijde . . . . . : 1 .		
Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) . . . . . : 0,97		
Gekorrigeerde LMTD . . . . . : 108,3 . °C		
BEDRIJFSKONDITIONS :		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . .	Productgassen	rivierwater
Massastroom . . . . . kg/s	0,41	6,37
Massastroom te <del>verdampen</del> /kondenseren* . . . . . kg/s	0,025	. . . . .
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . kJ/kg.°C	1,74 / 4,2	4,2
Verdampingswarmte . . . . . kJ/kg	2161,9	. . . . .
Temperatuur IN . . . . . °C	47,9	5
Temperatuur UIT . . . . . °C	20	15
Druk . . . . . bar	1	1
Materiaal . . . . .	. . . . .	. . . . .

\* Doorstrepen wat niet van toepassing is



Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2953 . .  
 Datum : . feb '22 . .  
 Ontworpen door : . Mahlich / Dabbe .

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H.12 . . . . . Aantal : .1. serie/parallel\*

ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :

Functie . . . . . : Om de downcomer stroom van Tg op te warmen met stoom.

Type . . . . . : ~~Warmtewisselaar\*~~  
~~Koeler~~  
 Kondensor  
~~Verdamper~~

Uitvoering . . . . . : ~~met vaste pijpplaten\*~~  
 floating head  
~~haarspeld~~  
~~dubbele pijp~~  
~~platenwarmtewisselaar~~

Positie . . . . . : horizontaal/vertikaal\*

Kapaciteit . . . . . : . 28,70 . . kW (berekend)  
 Warmtewisselend oppervlak . . . . . : . 63,1 . . m<sup>2</sup> (berekend)  
 Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . : . 117,5 . . W/m<sup>2</sup>K (globaal)  
 Logaritmisches temperatuurverschil (LMTD) . . . . . : . 47,9 . . °C  
 Aantal passages pijpzijde . . . . . : . 2 .  
 Aantal passages mantelzijde . . . . . : . 1 .  
 Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) . . . . . : . 0,95  
 Gekorrigeerde LMTD . . . . . : . 45,5 . . °C

BEDRIJFSKONDITIONES :

	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . .	.Stoom. . .	water/MEA
Massastroom . . . . . kg/s	.1,23. . .	. 22,10 . .
Massastroom te verdampen/kondenseren* . . . . . kg/s	.1,33. . .	. . . . .
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . kJ/kg °C	. 1,90 . .	. 4,2 . .
Verdampingswarmte . . . . . kJ/kg	. 2161,9 . .	. . . . .
Temperatuur IN . . . . . °C	. 134 . .	. 59 . .
Temperatuur UIT . . . . . °C	. 134 . .	. 90 . .
Druk . . . . . bar	. 3 . .	. 1 . .
Materiaal . . . . .	. . . . .	. . . . .

\* Doorstrepen wat niet van toepassing is



Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2953 . .  
 Datum : febr 1983  
 Ontworpen door : M. A. H. J. / D. A. H. J.

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 14.	Aantal : 1. serie/parallel*	
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :		
Functie . . . . . : Om de bodemstroom van Tg af te koelen met rivierwater.		
Type . . . . . : Warmtewisselaar* Koeler Kondenser Verdamer		
Uitvoering . . . . . : <del>met vaste pijpplaten*</del> floating head haarspeld dubbele pijp <del>platenwarmtewisselaar</del>		
Positie . . . . . : horizontaal/vertikaal*		
Kapaciteit . . . . . : 4894,8 .kW (berekend)		
Warmtewisselend oppervlak . . . . . : 113,8 .m <sup>2</sup> (berekend)		
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . : 1350 .W/m <sup>2</sup> K (globaal)		
Logaritmisches temperatuurverschil (LMTD) . . . . . : 31,8 .°C		
Aantal passages pijpzijde . . . . . : 2		
Aantal passages mantelzijde . . . . . : 1		
Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) . . . . . : 0,96		
Gekorrigeerde LMTD . . . . . : 30,5 .°C		
BEDRIJFSKONDITIONES :		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . .	rivierwater	MEA-ope
Massastroom . . . . . .kg/s	117,1	22,1
Massastroom te verdampen/kondenseren* . . . . . .kg/s		
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . .kJ/kg.°C	4,18	4,18
Verdampingswarmte . . . . . .kJ/kg		
Temperatuur IN . . . . . .°C	5	73
Temperatuur UIT . . . . . .°C	15	20
Druk . . . . . .bar	1	1
Materiaal . . . . .		

\* Doorstrepen wat niet van toepassing is

Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2953.  
 Datum: feb '93.  
 Ontworpen door: Mathijs J. Dialwa

WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer : H.20.	Aantal : .1. serie/parallel*	
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie . . . . . :	Om het gecomprimeerd CO/H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub> af te koelen met rivierwater.	
Type . . . . . :	Warmtewisselaar* <del>Koeler</del> <del>Kondensor</del> <del>Verdamper</del>	
Uitvoering . . . . . :	<del>met vaste pijpplaten*</del> floating head <del>haarspeld</del> <del>dubbele pijp</del> platenwarmtewisselaar	
Positie . . . . . :	horizontaal/ <del>vertikaal*</del>	
Kapaciteit . . . . . :	.120,8 . . kW (berekend)	
Warmtewisselend oppervlak . . . . . :	.20,6 . . m <sup>2</sup> (berekend)	
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . :	.90 . . W/m <sup>2</sup> K (globaal)	
Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) . . . . . :	.78,2 . . . . °C	
Aantal passages pijpzijde . . . . . :	.2 . .	
Aantal passages mantelzijde . . . . . :	.1 . .	
Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) . . . . . :	.0,89	
Gekorrigeerde LMTD . . . . . :	.69,6 . . . . °C	
<b>BEDRIJFSKONDITIONES :</b>		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . . :	CO/H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub>	rivierwater.
Massastroom . . . . . : .kg/s	.0,30 . .	.3,08 . .
Massastroom te verdampen/kondenseren* . . . . . : .kg/s	. . . . .	. . . . .
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . : .kJ/kg.°C	.2,26 . .	.4,18 . .
Verdampingswarmte . . . . . : kJ/kg	. . . . .	. . . . .
Temperatuur IN . . . . . : °C	.21,5 . .	.5 . .
Temperatuur UIT . . . . . : °C	.2,5 . .	.15 . .
Druk . . . . . : bar	.0,3 . .	.1 . .
Materiaal . . . . . :	. . . . .	. . . . .

\*Doorstrepen wat niet van toepassing is

Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechnologie

Fabrieksvoorontwerp No: 29.5.3. .  
 Datum : febr '92  
 Ontworpen door : Mahish/Dehve

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H.22.	Aantal : 1. serie/parallel*	
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :		
Functie . . . . . :	Om waterdamp uit stroom te condenseren met rivierwater	
Type . . . . . :	<del>Warmtewisselaar*</del> Koeler-Kondensor Kondensor Verdamer	
Uitvoering . . . . . :	<del>met vaste pijpplaten*</del> floating head haarspeld dubbele pijp <del>platenwarmtewisselaar</del>	
Positie . . . . . :	horizontaal/ <del>vertikaal*</del>	
Kapaciteit . . . . . :	28.25,7 . kW (berekend)	
Warmtewisselend oppervlak . . . . . :	502,3 . m <sup>2</sup> (berekend)	
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . :	12,5 . W/m <sup>2</sup> K (globaal)	
Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) . . . . . :	42,5 . °C	
Aantal passages pijpzijde . . . . . :	2 .	
Aantal passages mantelzijde . . . . . :	1 .	
Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) . . . . . :	0,95	
Gekorrigeerde LMTD . . . . . :	40,4 . °C	
BEDRIJFSKONDITIONES :		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . .	H <sub>2</sub> O/CO <sub>2</sub> . . . . .	rivierwater . . . . .
Massastroom . . . . . kg/s	1,63 . . . . .	67,6 . . . . .
Massastroom te <del>verdampen</del> /kondenseren* . . . . . kg/s	1,29 . . . . .	. . . . .
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . kJ/kg °C	1,80/4,20 . . . . .	4,18 . . . . .
Verdampingswarmte . . . . . kJ/kg	2161,9 . . . . .	. . . . .
Temperatuur IN . . . . . °C	107 . . . . .	5 . . . . .
Temperatuur UIT . . . . . °C	20 . . . . .	15 . . . . .
Druk . . . . . bar	! . . . . .	! . . . . .
Materiaal . . . . .	. . . . .	. . . . .

\*Doorstrepen wat niet van toepassing is

Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechnologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2953.  
 Datum : . 12/1/83.  
 Ontworpen door : . M. H. H. / D. A. H. ?

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H.25. Aantal : . . serie/parallel\*

ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :

Functie . . . . . : Om de bodemstroom van T24 af te koelen met behulp van methanol

Type . . . . . : Warmtewisselaar\*  
~~Koeler~~  
~~Kondensor~~  
 Verdamer

Uitvoering . . . . . : ~~met vaste pijpplaten\*~~  
 floating head  
~~haarspeld~~  
~~dubbele pijp~~  
~~platenwarmtewisselaar~~

Positie . . . . . : horizontaal/~~vertikaal\*~~

Kapaciteit . . . . . : . 54,61 . . kW (berekend)  
 Warmtewisselend oppervlak . . . . . : . 569,3 . . m<sup>2</sup> (berekend)  
 Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . : . 220 . . W/m<sup>2</sup>K (globaal)  
 Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) . . . . . : . 51,9 . . °C  
 Aantal passages pijpzijde . . . . . : 2 .  
 Aantal passages mantelzijde . . . . . : 1 .  
 Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) . . . . . : 0,88  
 Gekorrigeerde LMTD . . . . . : 44,6 . . °C

BEDRIJFSKONDITIONS :

	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . .	. methanol .	. koper ammonium formiaat / water .
Massastroom . . . . . kg/s	. 38,5 . .	. 57,6 . .
Massastroom te verdampen/kondenseren* . . . . . kg/s	. . . . .	. . . . .
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . kJ/kg·°C	. 2,84 . .	. 2,24 . .
Verdampingswarmte . . . . . kJ/kg	. . . . .	. . . . .
Temperatuur IN . . . . . °C	. -55 . .	. 41,6 . .
Temperatuur UIT . . . . . °C	. -5 . .	. 2,3 . .
Druk . . . . . bar	. 1 . .	. 2 . .
Materiaal . . . . .	. . . . .	. . . . .

\*Doorstrepen wat niet van toepassing is

Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2353.  
 Datum : . feb. '93.  
 Ontworpen door : . Malicki / Dahi

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H.29.	Aantal : .1. serie/parallel*	
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie . . . . . : Om de downcomer stroom van Tagop te warmen met het rivierwater afkomstig uit H32		
Type . . . . . : Warmtewisselaar* <del>Koeler</del> <del>Kondensor</del> <del>Verdamper</del>		
Uitvoering . . . . . : <del>met vaste pijpplaten*</del> floating head <del>haarspeld</del> <del>dubbele pijp</del> <del>platenwarmtewisselaar</del>		
Positie . . . . . : horizontaal/ <del>vertikaal*</del>		
Kapaciteit . . . . . : . 6219 . . . kW (berekend)		
Warmtewisselend oppervlak . . . . . : . 386 . . . m <sup>2</sup> (berekend)		
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . : . 1320 . . . W/m <sup>2</sup> K (globaal)		
Logaritmisches temperatuurverschil (LMTD) . . . . . : . 13,4 . . . °C		
Aantal passages pijpzijde . . . . . : . 2 . . .		
Aantal passages mantelzijde . . . . . : . 1 . . .		
Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) . . . . . : . 0,88		
Gekorrigeerde LMTD . . . . . : . 11,8 . . . °C		
<b>BEDRIJFSKONDITIONES :</b>		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . .	waterig . . .	water . . .
Massastroom . . . . . kg/s	57,6 . . .	37,0 . . .
Massastroom te verdampen/kondenseren* . . . . . kg/s		
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . kJ/kg·°C	3,05 . . .	4,20 . . .
Verdampingswarmte . . . . . kJ/kg		
Temperatuur IN . . . . . °C	4,6 . . .	50 . . .
Temperatuur UIT . . . . . °C	40 . . .	10 . . .
Druk . . . . . bar	1 . . .	1 . . .
Materiaal . . . . .		

\* Doorstrepen wat niet van toepassing is

Technische Universiteit Delft  
 Vakgroep Chemische Procestechologie

Fabrieksvoorontwerp No: 2953.  
 Datum: . febr. 93  
 Ontworpen door: . Malsch/Dalje

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 30.	Aantal : 1. serie/parallel*	
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :		
Functie . . . . . : Om de gestripte stroom van T27 (stoom + CO <sub>2</sub> ) met rivierwater te koelen.		
Type . . . . . : <del>Warmtewisselaar*</del> Koeler-kondensator <del>Kondensator</del> <del>Verdamper</del>		
Uitvoering . . . . . : <del>met vaste pijpplaten*</del> floating head <del>haarspeld</del> <del>dubbele pijp</del> <del>platenwarmtewisselaar</del>		
Positie . . . . . : horizontaal/vertikaal*		
Kapaciteit . . . . . : 6361,5 . . . kW (berekend)		
Warmtewisselend oppervlak . . . . . : 66,8 . . . m <sup>2</sup> (berekend)		
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt . . . . . : 1050 . . . W/m <sup>2</sup> K (globaal)		
Logaritmisches temperatuurverschil (LMTD) . . . . . : 90,7 . . . °C		
Aantal passages pijpzijde . . . . . : 2		
Aantal passages mantelzijde . . . . . : 1		
Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) . . . . . : 0,97		
Gekorrigeerde LMTD . . . . . : 88,0 . . . °C		
BEDRIJFSKONDITIONES :		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum . . . . .	Stoom + CO <sub>2</sub>	water
Massastroom . . . . . kg/s	2,7	37,9
Massastroom te <del>verdampen</del> /kondenseren* . . . . . kg/s	2,2	
Gemiddelde soortelijke warmte . . . . . kJ/kg·°C	1,07	4,2
Verdampingswarmte . . . . . kJ/kg	2256,9	
Temperatuur IN . . . . . °C	141,4	5
Temperatuur UIT . . . . . °C	100	50
Druk . . . . . bar	2,0	1,0
Materiaal . . . . .		

\* Doorstrepen wat niet van toepassing is



Apparatenlijst voor pompen, blowers, kompressoren

Apparaat No:	C 1	M 5	C 19		
Benaming, type	Centrifugaal compressor meertraps	expander	Centrifugaal compressor meertraps		
te verpompen medium	$\text{CH}_4/\text{CO}_2$	$\text{CO}/\text{CO}_2/\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}$	$\text{CO}/\text{H}_2$		
Capaciteit in t/d of $\text{kg/s}^*$	$\text{kg/s}$ 0,411	$\text{kg/s}$ 0,411	$\text{kg/s}$ 0,303		
Dichtheid in $\text{kg/m}^3$	2,34	0,98	35,55		
Zuig-/persdruk in bar (abs. of eff. $^*$ )	Paabs 1,0/3,0	Paabs 3,0/1,0	Paabs 1,0/8,3		
temp. in $^{\circ}\text{C}$ in / uit	20/119	679/479	25/215		
Vermogen in kW theor. / prakt.	33,6/44,8	164/123	82,5/110		
Speciaal te gebruiken mat.	RVS	RVS	RVS		
aantal serie/parallel			1		

\* aangeven wat bedoeld wordt

Apparatenlijst voor reaktoren, kolommen, vaten

Apparaat No:	V 23	V 70	V 8	V 31	R 3
Benaming, type	Horizontale LG-vloeistof-gasscheider	Horizontale LG-vloeistof-gasscheider	Horizontale LG-vloeistof-gasscheider	Horizontale LG-vloeistof-gasscheider	Buizen-reektoren met vaste bed in <sup>400 mm</sup>
Abs. of eff.* druk in bar	Pabs 1,0	Pabs 1,0	Pabs 1,0	Pabs 2,0	Pabs 3,0
temp. in °C	20	20	20	100	832
Inhoud in m <sup>3</sup>	1,0	0,3	1,5	1,6	7,1
Diam. in m	0,53	0,7	1,15	0,5	2,58
l of h in m	3,5	0,75	1,30	8,0	1,36
Vulling:* schotels-aant. vaste pakking katalysator- type - , , - vorm ..... ..... .....					vaste pakking Rh-Pal <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Speciaal te gebruiken mat.	RVS	RVS	RVS	RVS	iconel
aantal serie/parallel	1	1	1	1	1

\* aangeven wat bedoeld wordt

Apparatenlijst voor pompen, blowers, kompressoren

Apparaat No:	P 15	P 16	P 28	P 26	P 27
Benaming, type	centrifugale pomp voor MEA-circulatie stroom	centrifugale pomp voor MEA-circulatie stroom	Verdringer pomp voor Cu/NH <sub>3</sub> -formiaatcirculatie stroom	centrifugale pomp voor Cu/NH <sub>3</sub> -formiaat circ. stroom	Verdringer pomp voor MEA/CO <sub>2</sub> -circulatie stroom
te verpompen medium	MEA-opl	MEA-opl	Cu/NH <sub>3</sub> +CO formiaat opl	Cu/NH <sub>3</sub> -formiaat opl	MEA/CO <sub>2</sub> opl
Capaciteit in t/d of kg/s*	kg/s 5,62	kg/s 16,81	kg/s 57,9	kg/s 57,6	kg/s 22,09
Dichtheid in kg/m <sup>3</sup>	998	998	1005	1000	995
Zuig-/persdruk in bar(abs.of eff. *)	Pa <sub>abs</sub> 1,0/1,54	Pa <sub>abs</sub> 1,0/2,06	Pa <sub>abs</sub> 1,0/1,71	Pa <sub>abs</sub> 1,0/1,47	Pa <sub>abs</sub> 1,0/2,6
temp. in °C in / uit	20/20	20/20	2,3/4,6	4,6/41,6	55/55
Vermogen in kW theor./ prakt.	0,71/0,89	4,92/6,15	10,5/13,13	15,1/18,9	10,3/12,9
Speciaal te gebruiken mat.	AISI316	AISI316	RVS	RVS	AISI316
aantal serie/parallel	1	1	1	1	1

\* aangeven wat bedoeld wordt

Apparatenlijst voor warmtewisselaars, fornuizen

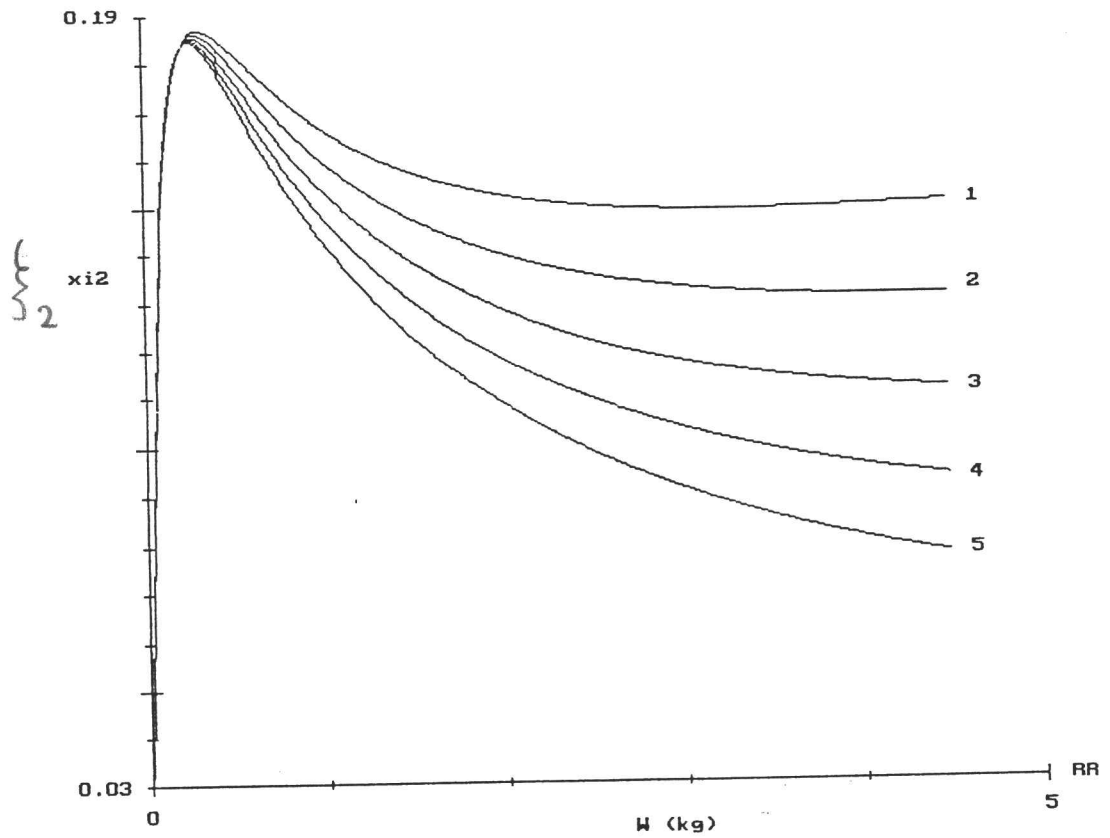
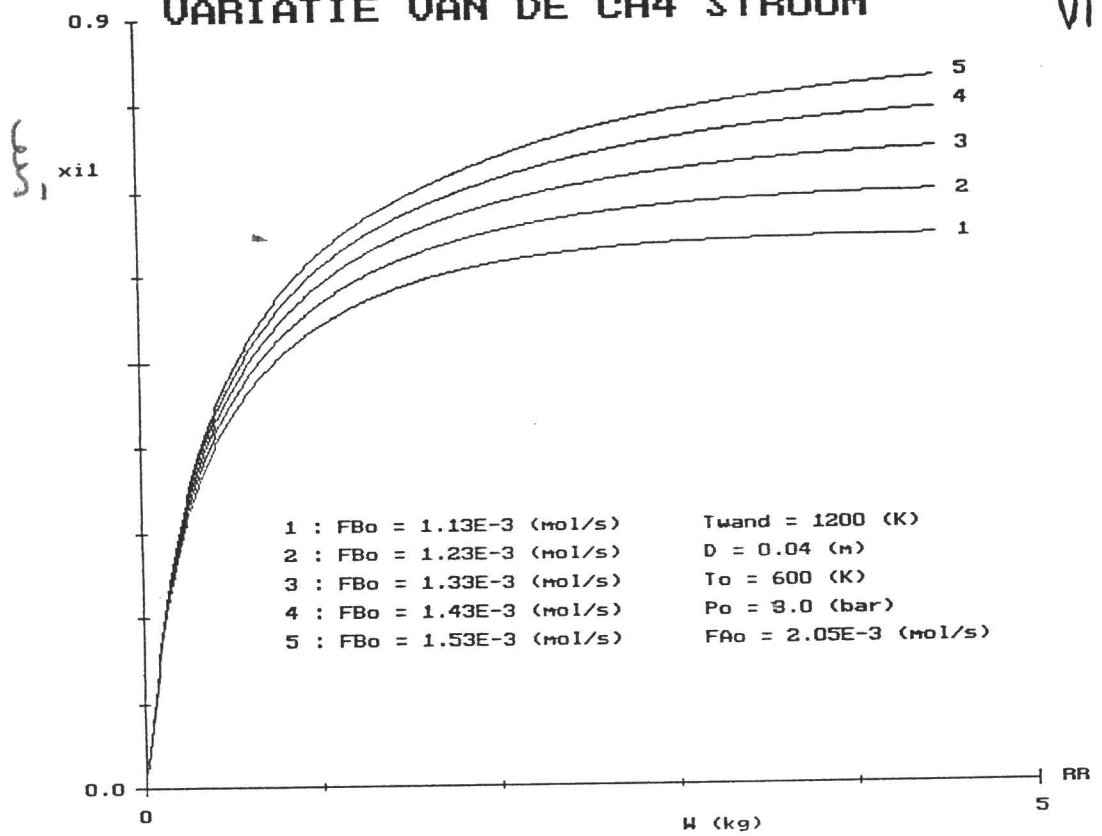
Apparaat No:	F4				
Benaming, type	Fornuis				
Medium pijpen-/ mantelzijde	Voedingstroom Verbrandings- gasen				
Capaciteit, uitgewisselde warmte in kW.	1486				
Warmtewisselend oppevl. in m <sup>2</sup>	649				
Aantal <sup>serie/</sup> paralel	1				
Abs. of eff.* druk in bar pijpen- / mantelzijde	Pabs 3,0 / 1,0				
temp. in / uit in °C <u>pijpszijde</u> mantelzijde	<u>327/832</u> 20/1042				
Speciaal te ge- bruiken mat.	AISI 316				

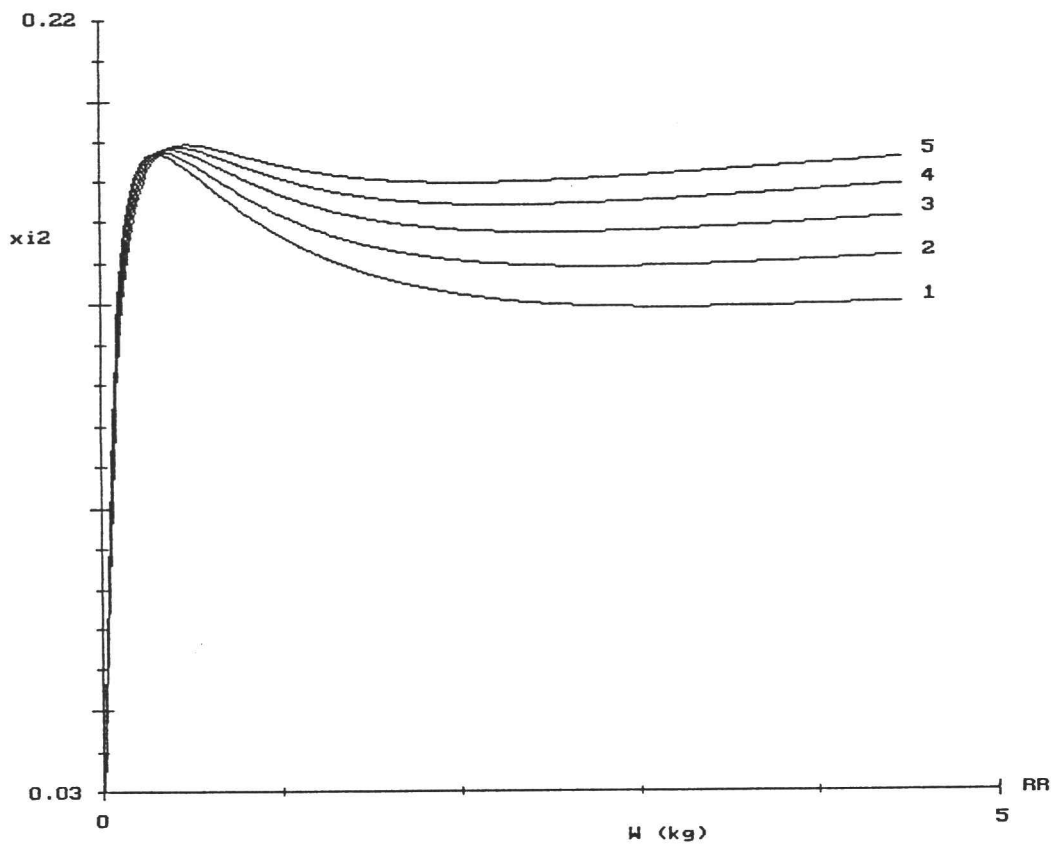
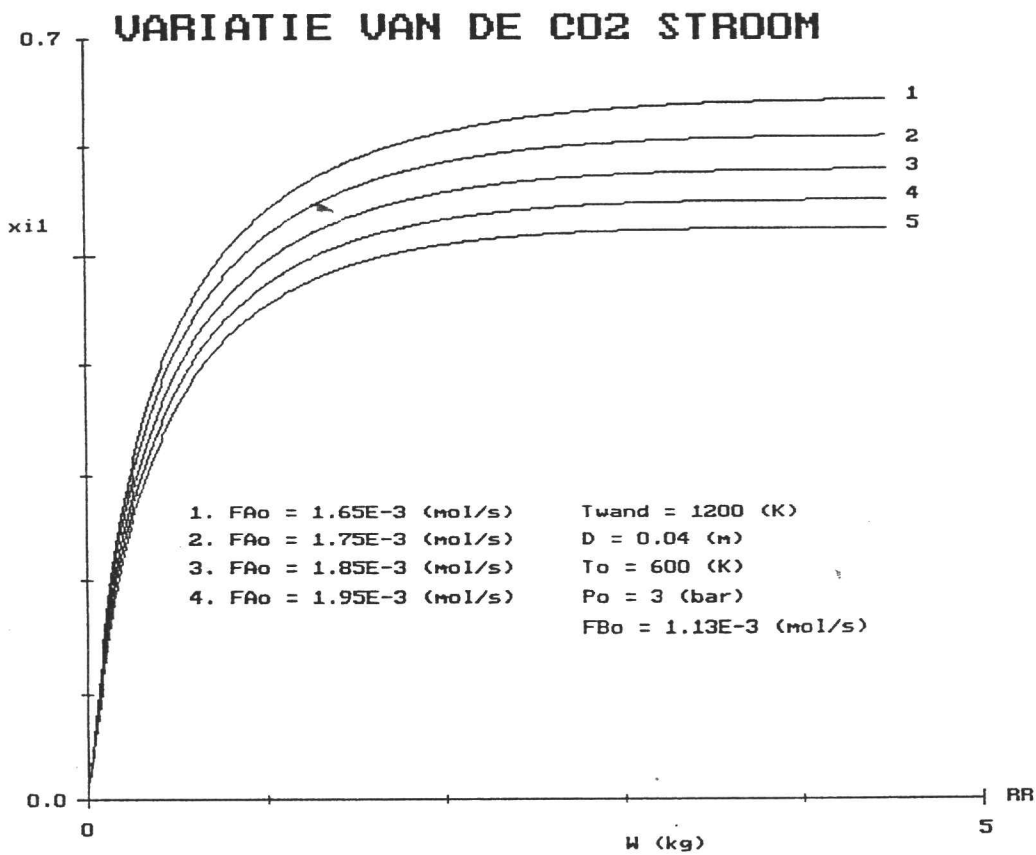
\* aangeven wat bedoeld wordt

**BIJLAGE VI**

# VARIATIE VAN DE CH4 STROOM

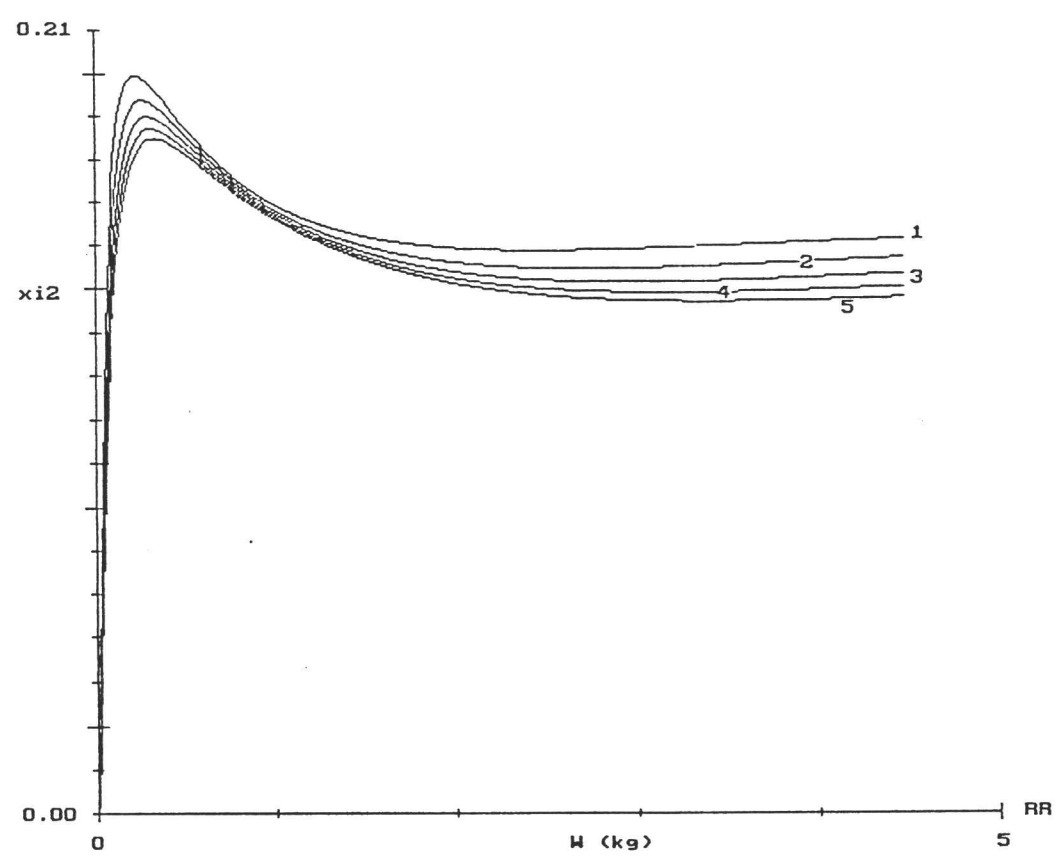
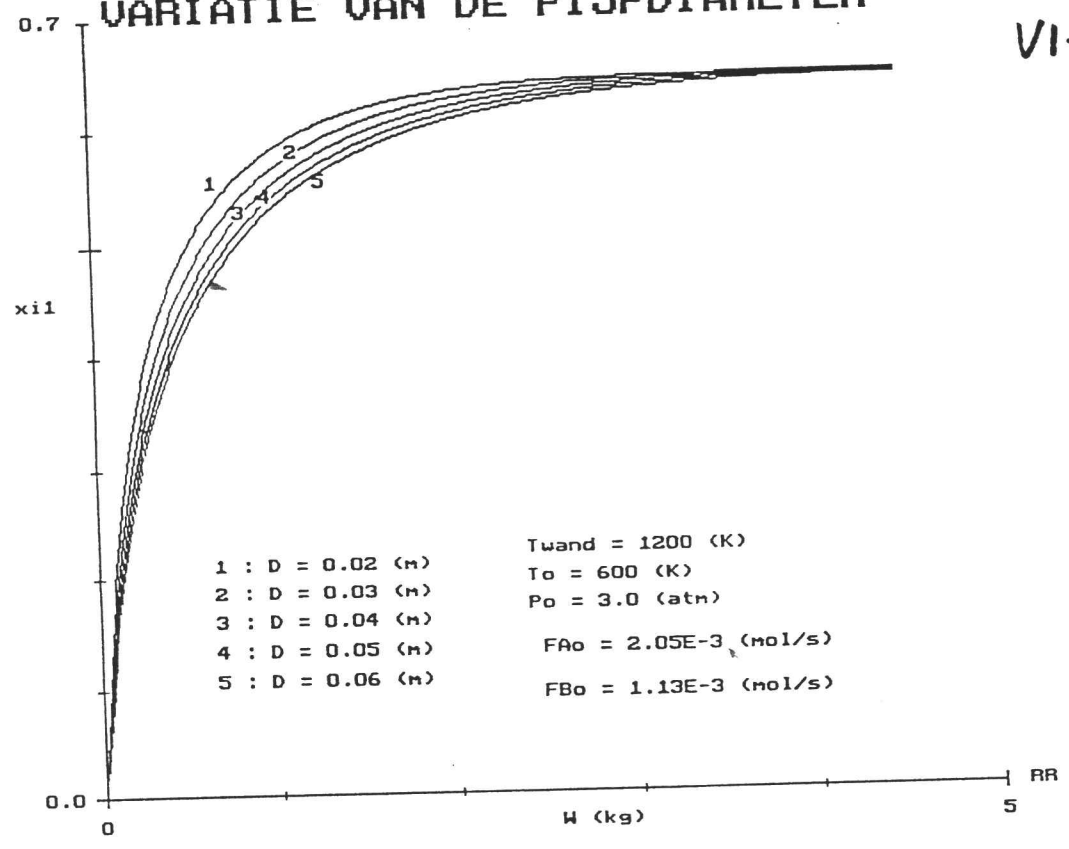
VI-1





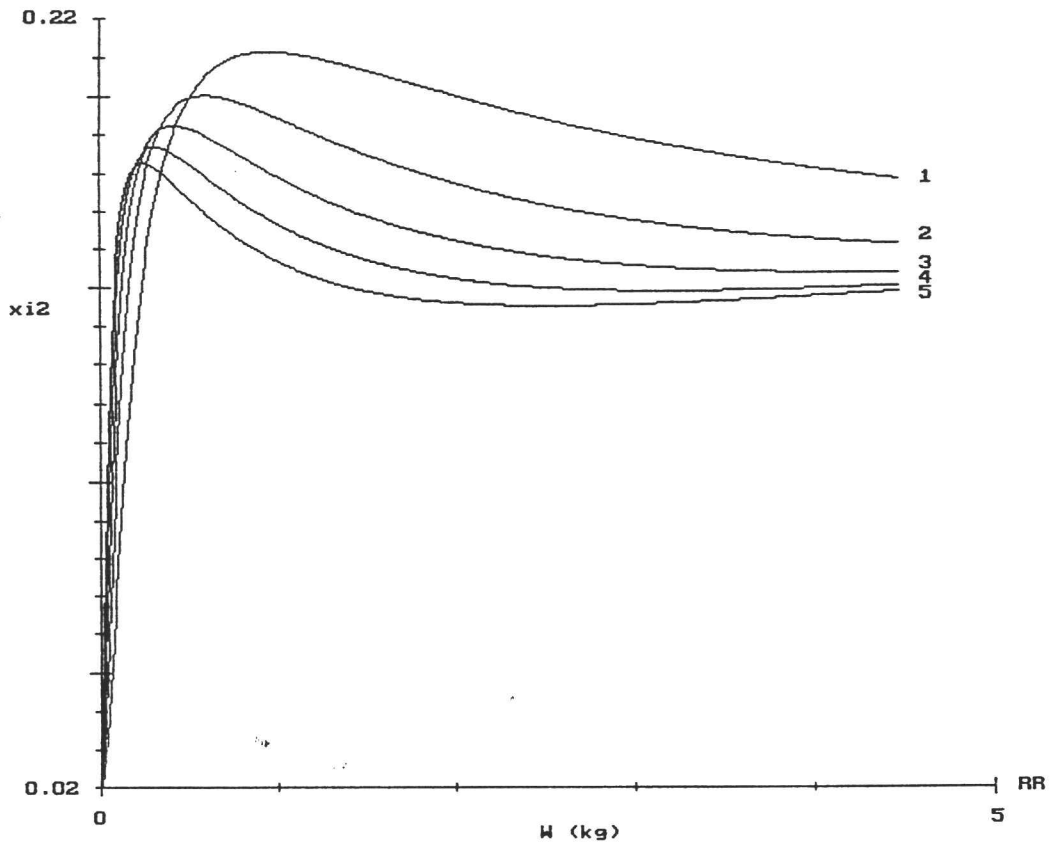
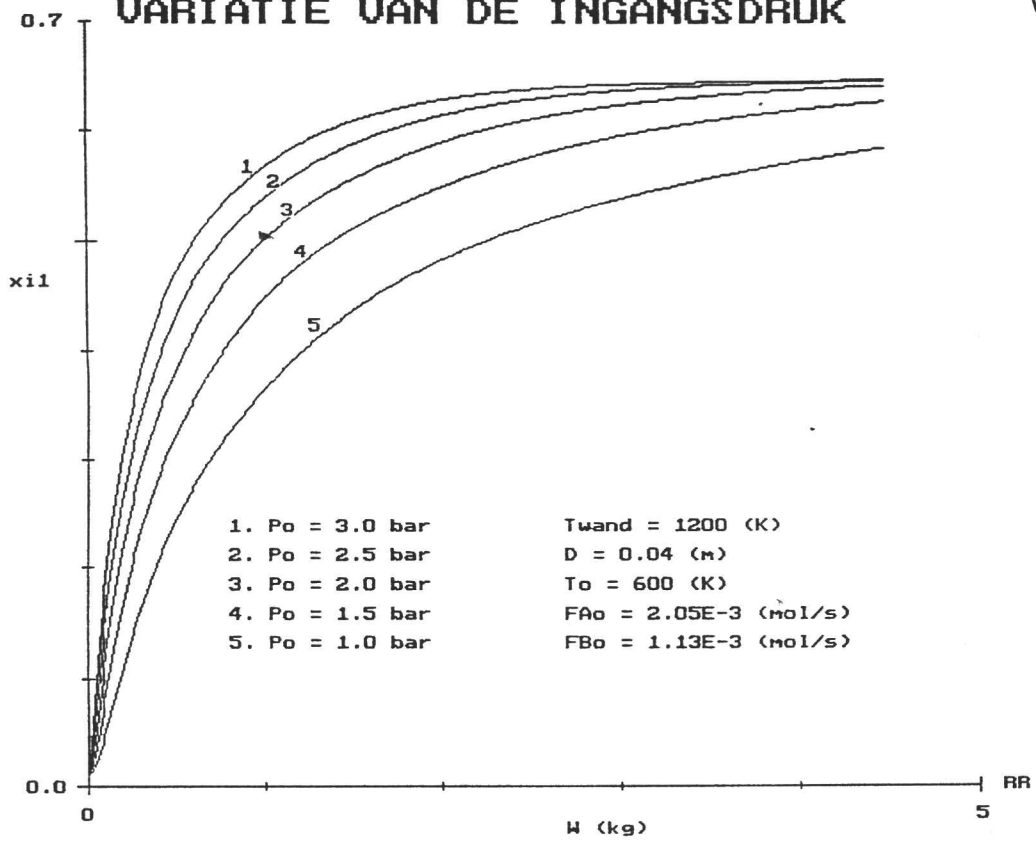
# VARIATIE VAN DE PIJPDIAMETER

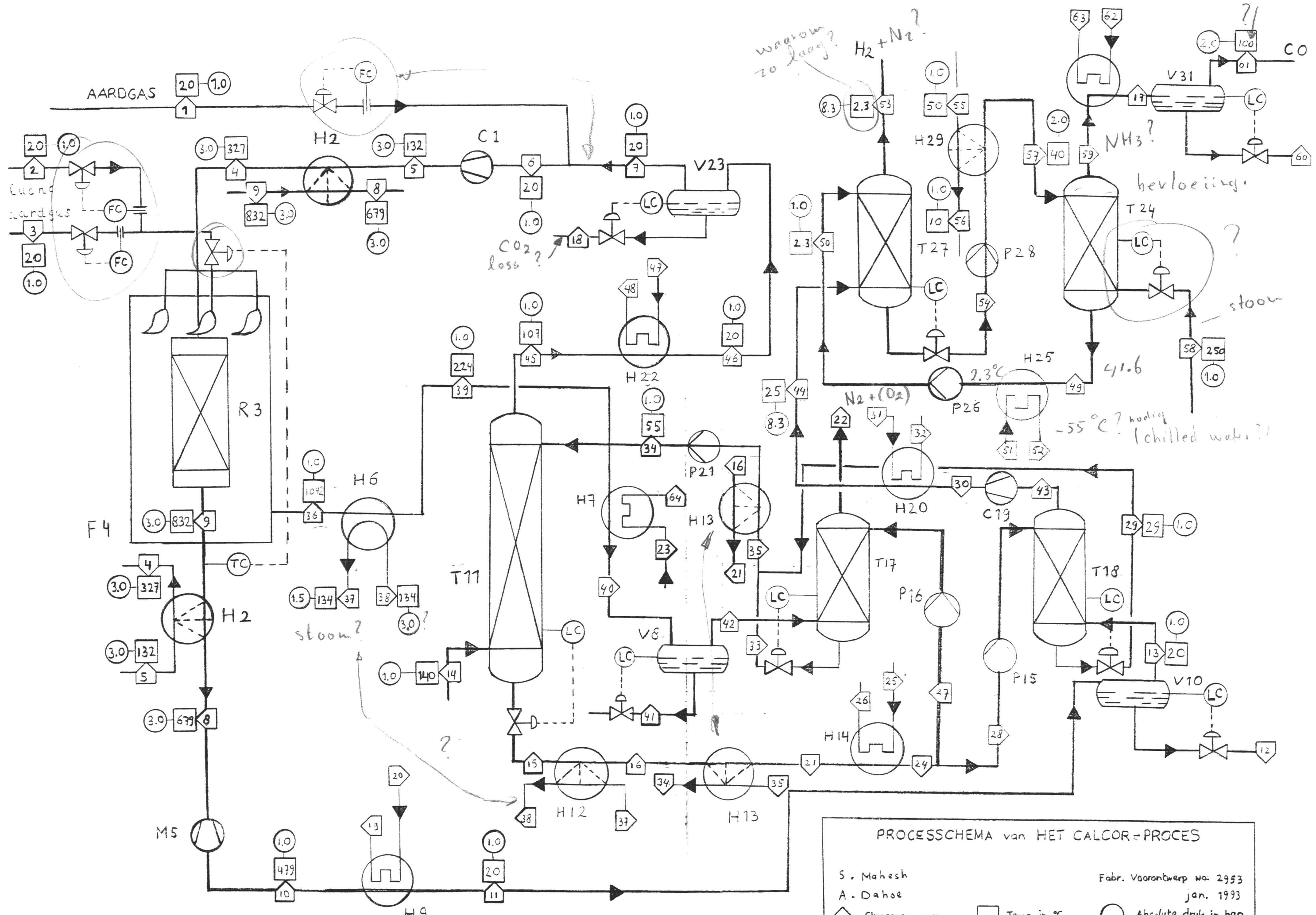
VI-3





VARIATIE VAN DE INGANGSDRUK





**PROCESSSCHEMA van HET CALCOR-PROCES**

S. Mahesh  
A. Dahoe

Fabr. Voorontwerp No: 2953  
jan. 1993

Stroomnummer    
 Temp in °C    
 Absolute druk in bar